

©1995

## РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННЫХ ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ $Ni_x Au_{1-x}$ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

*Н.В.Мельникова, В.Е.Егорушкин, А.В.Бутенко*

Институт физики прочности и материаловедения  
Сибирского отделения Российской академии наук,  
634048, Томск, Россия  
(Поступила в Редакцию 20 сентября 1994 г.)

В рамках модели динамических концентрационных возбуждений рассчитаны электросопротивление, термоэдс и электронная теплопроводность аморфных сплавов  $Ni_x Au_{1-x}$  для  $x = 0.30, 0.35$  и  $0.40$ . Расчет проведен с учетом интерференции неупругого электрон-электронного взаимодействия и многократного упругого перерассеяния электронов на низкочастотных динамических концентрационных возбуждениях. Показано, что в исследованной области концентраций никеля низкотемпературные аномалии электросопротивления, термоэдс и теплопроводности обусловлены чисто структурными особенностями аморфного сплава  $Ni_x Au_{1-x}$ .

Проблема описания низкотемпературных свойств аморфных металлических сплавов (АМС) до сих пор привлекает внимание исследователей, поскольку с помощью общепризнанных теоретических подходов так и не удалось объяснить весь комплекс аномальных свойств АМС [1,2]. Говоря об особенностях электронных транспортных свойств, прежде всего следует выделить низкотемпературное поведение теплопроводности (плато в  $k(T)$  в области  $T_1 < T < T_2$ ), электросопротивления (минимум в  $\rho(T)$  при  $T < T_2$ ) и термоэдс (отклонение  $S(T)$  от линейной зависимости при  $T < T_2$ ). Для АМС  $T_1 = 1-10$  К,  $T_2 = 10-100$  К.

В настоящее время считается доказанным, что аномальный низкотемпературный электронный перенос в немагнитных АМС определяется особенностями структурного состояния этих материалов, которые характеризуются не свойственной кристаллическим сплавам низкоэнергетической атомной динамикой [1,2]. С учетом этого обстоятельства в работах [3-5] была развита теория кинетических явлений в АМС, связывающая природу низкотемпературных аномалий в  $\rho(T)$ ,  $S(T)$  и  $k(T)$  с особенностями рассеяния электронов в аморфной структуре. Показано, что кроме неупругого электрон-электронного рассеяния электроны в АМС многократно квазиупруго перерассеиваются на структурных образованиях ближнего порядка, испытывающих структурную релаксацию [3-5]. Такое перерассеяние электронов на динамическом ближнем порядке описывается в рамках концепции динамических концентрационных возбуждений (ДКВ), ответственных за низкоэнергетическую атомную динамику в исследуемых материалах [3-6].

Теория [3-5] впервые позволила непротиворечиво описать низкотемпературные аномалии сразу трех основных кинетических характеристик: электросопротивления, термоэдс и теплопроводности. В [7,8] были продемонстрированы возможности данной теории при расчете термоэдс двух типов аморфных сплавов:  $\text{Ca}_x\text{Al}_{1-x}$  и  $\text{Ni}_x\text{Au}_{1-x}$ . Для сплава  $\text{Ca}_x\text{Al}_{1-x}$  с различными концентрациями его компонентов было получено хорошее как качественное, так и количественное согласие наших результатов с экспериментом [9].

В [7,8] показано, что зависимость положения точки изгиба в  $S(T)$  от концентрации компонентов сплава связана с концентрационной зависимостью характерной температуры  $T_0$ , разделяющей область рассеяния электронов на ДКВ на более интенсивную (область аномального электронного рассеяния) и менее интенсивную [7].

Для сплава  $\text{Ni}_x\text{Au}_{1-x}$  экспериментальными данными по  $S(T)$  мы, к сожалению, не располагаем, поэтому сравнение результатов нашего расчета термоэдс [8] с экспериментом на сегодняшний день не представляется возможным. Однако для этого аморфного сплава экспериментально хорошо изучено низкотемпературное электросопротивление, демонстрирующее классический «стеклоподобный» минимум в  $\rho(T)$ , положение которого, как и точка изгиба в  $S(T)$ , сильно зависит от состава сплава (рис. 1) [10]. Поэтому, с нашей точки зрения, было бы интересно рассчитать в рамках теории [3-8]  $\rho(T)$  для сплава  $\text{Ni}_x\text{Au}_{1-x}$  для различных концентраций его компонентов, проследить тенденцию смещения точки минимума с изменением состава и, естественно, провести сравнение полученных результатов с экспериментальными данными [10].

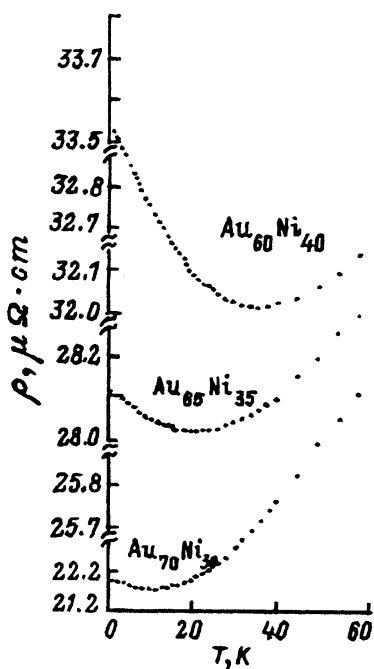


Рис. 1. Температурная зависимость электросопротивления аморфных сплавов  $\text{Ni}_x\text{Au}_{1-x}$  ( $x = 0.30, 0.35, 0.40$ ) [10].

Проблема низкотемпературного сопротивления в аморфном сплаве  $Ni_xAu_{1-x}$  интересна еще и с точки зрения возможности выяснения физической природы минимума в  $\rho(T)$ : является ли она магнитной или чисто структурной. Дело в том, что аморфные сплавы  $Ni_xAu_{1-x}$  в области концентраций никеля  $0.2 < x < 0.4$  [10] (а по данным [11]  $x < 0.6$ ) находятся в промежуточном состоянии между немагнитными и ферромагнитными сплавами, когда магнитной природой сплавов уже нельзя пренебрегать при изучении процессов электронного переноса. Поэтому если мы получим хорошее количественное согласие наших данных с [10], то можно говорить о чисто структурной природе низкотемпературного минимума в электросопротивлении.

Таким образом, в настоящей работе предлагаются результаты расчета низкотемпературного сопротивления в аморфных сплавах  $Ni_xAu_{1-x}$  в области концентраций  $Ni$ , при которых не происходит перехода в ферромагнитное состояние (раздел 1). Кроме того, для этих сплавов рассчитаны термоэдс (раздел 2) и электронная теплопроводность (раздел 3) для тех же концентраций никеля.

## 1. Электросопротивление аморфных сплавов $Ni_xAu_{1-x}$

Расчет электросопротивления проводился в рамках метода [11] с использованием температурной диаграммной техники [12]. Рассеяние на динамическом ближнем порядке считалось слабым, так что выполнялось условие  $k_F l \gg 1$ , где  $l$  — длина свободного пробега электрона по импульсу. При этом  $l$  и время релаксации электрона по импульсу  $\tau$  считались не очень большими, такими чтобы за характерное время межэлектронного взаимодействия электроны многократно перерассеивались на ДКВ. Для этого должны выполняться еще два условия:  $ql \ll 1$  и  $\omega_m \tau \ll 1$ , где  $q$  и  $\omega_m$  — переданные импульс и энергия электрон-электронного рассеяния.

Расчет вклада в электросопротивление от интерференции неупругого электрон-электронного рассеяния электронов на ДКВ показал [3], что

$$\frac{\delta\rho(T)}{\rho} \approx -\frac{2.5 \cdot 2^{1/2} T^{1/2}}{6\pi\nu_0 D^{3/2}} \left[1 + (T/T_0)^2\right]^{-1/4}, \quad (1)$$

где  $D = \frac{1}{3} v_F^2 \tau$  — коэффициент диффузии электронов,  $\nu_0$  — затравочная плотность состояний на уровне Ферми, а  $T_0$  — характерная температура.

$$T_0 \approx \frac{\hbar^3 \mu_0^{1/2} \rho_0^2 \omega_0}{C^2 (1-C)^2 (\Delta E)^2 (2m)^{3/2} \chi^3}, \quad (2)$$

где  $\omega_0$  — граничная частота низкоэнергетических ДКВ [3-5], оцениваемая из соотношения  $\omega_0 \approx V_s k$ , где  $V_s$  — скорость звука в АМС ( $\sim 2 \cdot 10^5$  см/с),  $k$  — вектор «сверхструктуры» ( $\sim 10^9$  см<sup>-1</sup>), так что  $\omega_0 \sim 100$  К.

Характерную температуру аморфных сплавов  $T_0$ , как видно из (2), определяем как электронные характеристики (химический потенциал электронов  $\mu_0 \approx 10^{-12}$  эрг, параметр экранирования Томаса-Ферми  $\chi \approx 10^8$  см<sup>-1</sup>, время релаксации и масса электрона  $\tau \approx 10^{-14}$  с и  $m \approx 9.1 \cdot 10^{-28}$  г), так и характеристики материала (концентрация компонентов аморфного сплава  $C$ , атомная плотность  $\rho_0$  и энергия образования «сверхструктуры»  $\Delta E$ ).

Расчет  $\rho(T)$  для аморфных сплавов  $Ni_xAu_{1-x}$  ( $x = 0.30, 0.35$  и  $0.40$ ) проводился следующим образом. Сначала для соответствующих  $x$  по формуле (2) рассчитывалась характерная температура  $T_0$ . Результаты расчета приведены в таблице.

Характерная температура $T_0$ для аморфных сплавов $Ni_xAu_{1-x}$			
$x, \%$	30	35	40
$T_0, K$	2.01	2.50	3.45

При расчете  $T_0$  учитывалась зависимость атомной плотности  $\rho_0$  и энергии образования  $\Delta E$  от концентрации. Затем по формуле (1) рассчитывалось собственно электросопротивление (значение остаточного сопротивления было взято из эксперимента [10]). Результаты расчета приведены на рис. 2.

Поскольку в нашем расчете электрон-фононное взаимодействие не учитывается, то точку минимума в  $\rho(T)$  указать трудно. Однако, как видно из рис. 1, 2, в температурной области  $T < 10T_0$  результаты нашего расчета хорошо согласуются с экспериментальными данными; при этом разность между  $\rho_{rem}$  и  $\rho_{satur}$  (глубина минимума  $\rho(T)$ ) растет с повышением концентрации никеля, как и температура, при которой  $\rho(T)$  выходит на насыщение. Это говорит о том, что в этом температурном режиме рассеяние электронов на ДКВ существенно. Последующее повышение температуры ( $T > 10T_0$ ) приводит, видимо, к включению в электронный перенос процессов рассеяния на фононах, и в результате конкуренции интерференционных процессов рассеяния электронов друг на друге и на ДКВ с процессами рассеяния электронов на фононах на кривой  $\rho(T)$  формируется минимум. Таким образом, мы можем утверждать, что природа минимума в температурной зависимости электросопротивления аморфных сплавов  $Ni_xAu_{1-x}$  является чисто структурной в исследованной области концентраций никеля.

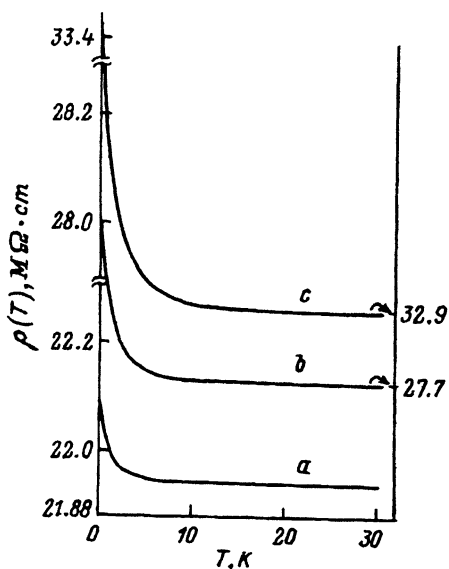


Рис. 2. Расчитанная температурная зависимость электросопротивления аморфных сплавов  $Ni_xAu_{1-x}$  для  $x = 0.30$  (a),  $0.35$  (b),  $0.40$  (c).

## 2. Термоэдс аморфных сплавов $Ni_xAu_{1-x}$

Термоэдс аморфных сплавов  $Ni_xAu_{1-x}$  рассчитана с помощью формулы Мотта в приближении времени релаксации [4,7] с учетом тех же интерференционных процессов рассеяния электронов, что и при расчете  $\rho(T)$ . Для численного расчета использовалось следующее выражение [7]:

$$S(T) = \frac{k_B \pi}{6|e|} \Psi_{1/2}^{-1}(T_0/4\tau T) \Psi_{3/2}(T_0/4\tau T), \quad (3)$$

где

$$\Psi_\alpha(x) = \int \frac{dy}{y^{1/2}} \frac{1}{\text{ch}^2(y+x)} \frac{1}{(y+x)^\alpha}. \quad (4)$$

Здесь  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $e$  — заряд электрона,  $\tau \approx 10^{-14}$  s — время релаксации электронов по энергии.

Результаты численного расчета термоэдс аморфных сплавов  $Ni_xAu_{1-x}$ , проведенного с помощью формулы (3), приведены на рис. 3. Хорошо видна его корреляция с рис. 2: при температуре  $T > 10T_0$  аномальный эффект исчезает и термоэдс выходит на классическую линейную зависимость от температуры. При температурах  $T < 10T_0$  наблюдается аномальное отклонение  $S(T)$  от линейной зависимости, при этом положение точки изгиба в  $S(T)$  при  $T \approx 10T_0$ , как и положение температуры минимума в  $\rho(T)$ , сильно зависит от состава сплава, что обусловлено концентрационной зависимостью характерной температуры  $T_0$  (см. (2)).

Как было отмечено выше, экспериментальные данные по термоэдс в  $Ni_xAu_{1-x}$  нам не известны. Полученные в данной работе результаты согласуются с данными по термоэдс для немагнитных АМС [1,2]. Для магнитных аморфных сплавов, как известно, характерны более сложные знакопеременные температурные зависимости термоэдс. Поэтому проведение экспериментального исследования низкотемпературной

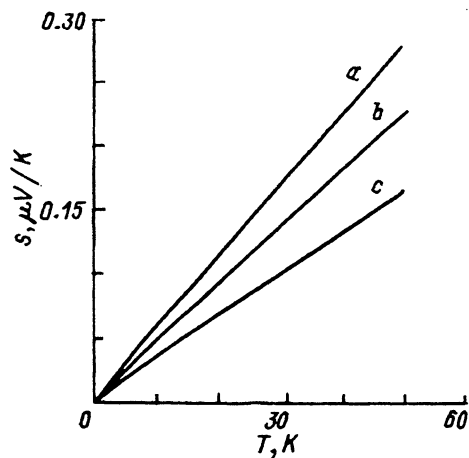


Рис. 3. Расчет температурной зависимости термоэдс аморфных сплавов  $Ni_xAu_{1-x}$  для  $x = 0.30$  (a),  $0.35$  (b),  $0.40$  (c).

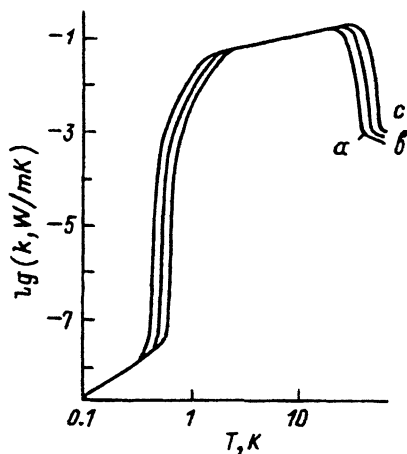


Рис. 4. Расчет электронной теплопроводности аморфного сплава  $Ni_xAu_{1-x}$  в зависимости от температуры для  $x = 0.30$  (a),  $0.35$  (b),  $0.40$  (c).

зависимости  $S(T)$  в аморфных сплавах  $Ni_xAu_{1-x}$  в комплексе с исследованиями электросопротивления [10] могло бы однозначно ответить на вопрос о природе низкотемпературных кинетических свойств этих сплавов в области концентраций никеля до  $x = 0.40$ .

### 3. Электронная теплопроводность аморфных сплавов $Ni_xAu_{1-x}$

Расчет электронной теплопроводности АМС проводился в [5] в рамках метода квантового кинетического уравнения [13] с использованием температурной диаграммной техники [12]. Как и в случаях электросопротивления и термоэдс, при расчете теплопроводности учитывались неупругое рассеяние электронов друг на друге и многократное упругое рассеяние электронов на ДКВ.

Конечные выражения, используемые в численном расчете электронной теплопроводности аморфных сплавов  $Ni_xAu_{1-x}$  для различных температурных режимов, выглядят следующим образом [5]:

$$\delta k(T) \approx \frac{5.2^{1/2} T^{3/2}}{36\pi^2 D^{1/2}} \left\{ 1 + (T/T_0)^2 \right\}^{-1/4} \Gamma(2.5)\zeta(2.5), \quad T < T_0, \quad (5)$$

$$\delta k(T) \approx \frac{1.83 \cdot 2^{5/2} \pi \chi^2 D^{1/2}}{24} \Gamma(0.5) T^{1/2}, \quad T_0 < T < 10T_0, \quad (6)$$

$$\delta k(T) \approx \frac{1.83\pi\chi^2 D^{1/2}}{12} \Gamma(0.5) \frac{T_0^3}{T}, \quad T > 10T_0. \quad (7)$$

Здесь  $\Gamma(x)$  — гамма-функция,  $\zeta(x)$  — дзета-функция Римана; остальные величины определены выше.

Результаты расчета теплопроводности, проведенного для тех же концентраций никеля, что и в первых двух разделах, представлены на рис. 4. Экспериментальными данными по теплопроводности сплавов  $Ni_xAu_{1-x}$  мы не располагаем, однако из рис. 4 можно видеть, что низкотемпературная теплопроводность аморфных сплавов  $Ni_xAu_{1-x}$  характеризуется классическим «стеклоподобным» поведением — резким, почти квадратичным ростом в области очень низких температур ( $T < T_0$ ) с последующим выходом на плато ( $T_0 < T < 10T_0$ ). При этом положение плато, так же как и положение минимума в электросопротивлении или «колена» в термоэдс, сильно зависит от состава сплава, смещаясь в сторону больших температур с увеличением концентрации никеля.

Следует отметить, что нами рассчитан только электронный вклад в теплопроводность, который при относительно высоких температурах  $T > 10T_0$  обратно пропорционален температуре. Такая температурная зависимость теплопроводности является обычной, если учитывается электрон-электронное взаимодействие [14,15]. Очевидно, что в этой области температур существенным становится фононный механизм переноса тепла, и в температурной зависимости теплопроводности при  $T > 10T_0$  его вклад будет доминировать над электронным, так что на кривой  $k(T)$  вместо участка, где теплопроводность с ростом температуры уменьшается как  $T^{-1}$ , появится участок с обычной растущей с температурой фононной зависимостью  $k(T)$ .

Как было показано выше, температура  $10T_0$  разделяет низкотемпературную ( $T < 10T_0$ ) и высокотемпературную ( $T > 10T_0$ ) области поведения всех трех рассмотренных в данной работе кинетических характеристик: электросопротивления, термоэдс и теплопроводности аморфных сплавов  $Ni_xAu_{1-x}$ . Это связано с тем, что в режиме  $T < 10T_0$  эффективное время релаксации электронов уменьшается с ростом температуры в пределах нескольких порядков, а при  $T > 10T_0$  выходит на плато [4], что означает, что между двумя актами электрон-электронного рассеяния при  $T < 10T_0$  происходит многократное перерассеяние электронов на динамическом ближнем порядке. С ростом температуры (при переходе через  $10T_0$ ) этот эффект значительно ослабляется, и на кривой  $\rho(T)$  появляется «высокотемпературный» участок с насыщением, в температурной зависимости термоэдс — выход на линейную зависимость и в  $k(T)$  — резкое ослабление электронного вклада. Поскольку характерная температура  $T_0$  зависит от концентрации компонентов сплава, то изменение его состава, как показано в настоящей работе, приводит к смещению точки минимума на кривой  $\rho(T)$ , так называемого «колена» на кривой  $S(T)$  и плато в температурной зависимости теплопроводности.

Сравнение результатов расчета электросопротивления аморфного сплава  $Ni_xAu_{1-x}$  с экспериментальными данными [10] говорит о том, что рассмотренные нами механизмы электронного рассеяния в данных сплавах в исследованной области концентраций никеля, видимо, имеют место, и природа низкотемпературных аномалий кинетических свойств этих сплавов носит чисто структурный характер. Однако окончательный вывод об этом можно было бы сделать, имея экспериментальные данные не только по электросопротивлению, но и по термоэдс и теплопроводности при низких температурах.

Работа частично финансировалась Российским фондом фундаментальных исследований.

### Список литературы

- [1] Металлические стекла. I. Ионная структура, электронный перенос и кристаллизация / Под ред. Г. Гюнтеродта и Г. Бека; Пер. с англ. М. (1983). 376 с.
- [2] Металлические стекла. II. Атомная структура и динамика, электронная структура, магнитные свойства / Под ред. Г. Гюнтеродта и Г. Бека. М. (1986). 454 с.
- [3] Egorushkin V.E., Melnikova N.V. J. Phys. F: Met. Phys. **17**, 1379 (1987).
- [4] Egorushkin V.E., Melnikova N.V. J. Phys. F: Met. Phys. **17**, 2389 (1987).
- [5] Егорушкин В.Е., Мельникова Н.В. ЖЭТФ **103**, 1, 189 (1993).
- [6] Егорушкин В.Е., Мельникова Н.В. ЖЭТФ **103**, 2, 555 (1993).
- [7] Melnikova N.V., Egorushkin V.E., Butenko A.V. J. Phys.: Cond. Matter. **6**, 2373 (1994).
- [8] Мельникова Н.В., Егорушкин В.Е., Бутенко А.В. Изв. вузов. Физика, **8**, 43 (1994).
- [9] Erwin J., Armbruster H., Delgado R., Naugle D.C. Phys. Lett. A **100**, 94 (1984).
- [10] Mei Yu, Tyler E.H., Luo H.L. Phys. Rev. **B26**, 8, 4299 (1982).
- [11] Вол А.Е., Каган И.Н. Строение и свойства двойных металлических систем. Справочник. М. (1987). Т. 2. 520 с.
- [12] Альтшулер Б.Л., Аронов А.Г. ЖЭТФ **77**, 5(11), 2028 (1979).
- [13] Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М. (1962). 444 с.
- [14] Рейзер М.Ю., Сергеев А.В. ЖЭТФ **92**, 2291 (1991).
- [15] Абрикосов А.А. Основы теории металлов. М. (1987). 520 с.