

05,01

Роль особенностей электронной структуры в электросопротивлении зонных ферромагнетиков Co_2FeZ ($Z = \text{Al, Si, Ga, Ge, In, Sn, Sb}$)

© Н.И. Коуров¹, В.В. Марченков¹⁻³, Ю.А. Перевозчикова¹, Н.В. Weber⁴

¹ Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

² Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

³ International Laboratory of High Magnetic Fields and Low Temperatures, Wroclaw, Poland

⁴ Atominstitut, Vienna University of Technology, Vienna, Austria

E-mail: kourov@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 20 октября 2016 г.)

В интервале температур $4.2 < T < 1100$ К исследовано электросопротивление $\rho(T)$ зонных ферромагнетиков Co_2FeZ (где $Z = \text{Al, Si, Ga, Ge, In, Sn, Sb}$ — s -, p -элементы Периодической таблицы Менделеева). Показано, что зависимости $\rho(T)$ этих сплавов в магнитоупорядоченном состоянии (при $T < T_C$) в основном определяются особенностями электронного спектра вблизи уровня Ферми. Процессы рассеяния носителей тока влияют на поведение $\rho(T)$ только вблизи T_C и выше, а также в области низких температур (при $T \ll T_C$).

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (тема „Спин“, № 01201463330) при частичной поддержке РФФИ (грант № 15-02-06686), программы фундаментальных научных исследований УрО РАН (проект № 15-17-2-12) и правительства РФ (контракт № 02.A03.21.0006).

DOI: 10.21883/FTT.2017.05.44374.389

1. Введение

В последние годы большое внимание уделяется исследованию сплавов Гейслера X_2YZ (где X и Y — переходные $3d$ -элементы, а Z — s -, p -элементы Периодической таблицы Менделеева), так как они считаются перспективными материалами для практического использования. Большинство из этих сплавов — зонные ферромагнетики. Основная особенность зонных ферромагнетиков заключается в том, что практически все их физические свойства во многом определяются параметрами электронного спектра вблизи уровня Ферми E_F . Среди этих сплавов наибольший интерес для практического применения в области спинтроники, например, в качестве спиновых инжекторов, представляют так называемые полуметаллические ферромагнетики (ПМФ) [1]. К ним можно отнести и сплавы Co_2FeZ , имеющие высокие значения таких важных параметров, как намагниченность и температура Кюри (см., например, [2–7] и данные, приведенные в таблице).

Поэтому несомненный интерес представляют исследования особенностей электросопротивления $\rho(T)$ сплавов Co_2FeZ . Обычно электросопротивление зависит от времени релаксации τ или длины свободного пробега $l = 1/\tau$ электронов проводимости, а также определяется электронной зонной структурой сплавов, а именно числом носителей тока n . В простейшем приближении для проводимости $\sigma = 1/\rho$ можно записать хорошо

известное выражение (см., например, [8])

$$\sigma = ne^2\tau/m^*,$$

где e — абсолютное значение заряда электрона, а m^* — эффективная масса носителей тока.

В металлах поведение $\rho(T)$ в основном обусловлено процессами рассеяния носителей тока на разного рода неоднородностях кристаллической решетки, т.е. $\rho(T)$ во многом зависит от изменения длины свободного пробега l электронов проводимости. В то же время параметры электронного спектра на уровне Ферми E_F , в первую очередь число носителей тока n , в обычных металлах слабо изменяются с температурой и химическим составом и, следовательно, не оказывают существенного влияния на температурные зависимости их электрических свойств. Однако результаты исследований, имеющиеся в настоящее время [1–3,5,6,9], указывают на то, что все физические свойства ПМФ в значительной мере определяются именно изменением электронных параметров на уровне Ферми E_F . Необходимо отметить, что большинство таких работ посвящено изучению сплавов Гейслера X_2YZ , в которых состав варьируется путем изменения переходных $3d$ -элементов X и Y (см., например, [9–15]). В то же время публикации, в которых исследуются электронные транспортные свойства ПМФ-сплавов X_2YZ при систематическом изменении Z -компонента (где Z — s -, p -элементы Периодической таблицы Менделеева), практически отсутствуют. Одной

Температуры Кюри T_C и значения коэффициентов ρ_0 , A_1 , B_2 , полученные при математической обработке результатов измерений зависимостей $\rho(T)$ при $T \leq 30$ К (в скобках приведены литературные данные)

Параметр	Co ₂ FeAl	Co ₂ FeSi	Co ₂ FeGa	Co ₂ FeGe	Co ₂ FeIn	Co ₂ FeSn	Co ₂ FeSb
T_C , К	≥ 1100 (1100 [2]) (1170 [6])	1030 (1120 [6])	1056 (1100 [3])	1060	890	968	≥ 1100
ρ_0 , $\mu\Omega \cdot \text{cm}$	42.7	10	9.27	14.4	1.59	19.7	9.16
$A_1 \cdot 10^3$, $\mu\Omega \cdot \text{cm/K}$	-3.2	1.3	-3.5	0.024	-0.0415	1.5	-0.6
$B_2 \cdot 10^4$, $\mu\Omega \cdot \text{cm/K}^2$	1.52	1.05	1.77	0.47	0.89	-1.04	3.11

их таких систем, в частности, являются сплавы Co₂FeZ ($Z = \text{Al, Si, Ga, Ge, In, Sn, Sb}$).

Поэтому была поставлена цель — изучить роль особенностей электронного энергетического спектра ПМФ-сплавов Co₂FeZ ($Z = \text{Al, Si, Ga, Ge, In, Sn, Sb}$) вблизи E_F на их электрические свойства.

В работе приведены результаты подробных экспериментальных исследований электросопротивления в широком интервале температур ($4.2 < T < 1100$ К) большого класса сплавов Co₂FeZ, включающего элементы третьего, четвертого и пятого периодов таблицы Менделеева ($Z = \text{Al, Si, Ga, Ge, In, Sn, Sb}$), для выяснения роли основных факторов, влияющих на поведение $\rho(T)$.

2. Образцы и методика измерений

Сплавы Co₂FeZ ($Z = \text{Al, Si, Ga, Ge, In, Sn, Sb}$) были выплавлены по общепринятой методике в индукционной печи в атмосфере очищенного аргона. Слитки переплавлялись несколько раз, чтобы обеспечить равномерное перемешивание компонентов. Затем сплавы отжигались в течение 48 h при 800 К в атмосфере аргона с последующим охлаждением до комнатной температуры со скоростью около 100 К/h.

Атомное содержание элементов в сплавах контролировалось с помощью сканирующего электронного микроскопа FEI Company Quanta 200, оснащенного приставкой рентгеновского микроанализа EDAX. Исследования показали, что для всех изученных сплавов отклонения от стехиометрического состава являются незначительными. Рентгеноструктурные исследования показали, что все сплавы имели упорядоченную структуру $L2_1$. Структурная аттестация исследованных сплавов проводилась в центре коллективного пользования ИФМ УрО РАН и НОЦ „Нанотех“ УрФУ.

Измерения температурных зависимостей $\rho(T)$ проводились общепринятым четырехконтактным способом на постоянном токе. Подготовка образцов и обработка их поверхности описаны в [16,17]. Контакты из медной проволоки приваривались к образцу точечной сваркой. Исследованные образцы имели размеры $\sim (0.5, 1.5, 10)$ mm. Погрешность измерений абсолютных значений электросопротивления составляла $\sim 10\%$, а относительная погрешность была менее 0.1%.

3. Результаты измерений и их обсуждение

Температурные зависимости электросопротивления зонных ферромагнетиков Co₂FeZ ($Z = \text{Al, Si, Ga, Ge, In, Sn, Sb}$) приведены на рис. 1. Видно, что зависимости $\rho(T)$ всех исследованных образцов имеют примерно одинаковый вид. При увеличении температуры электросопротивление плавно возрастает вплоть до температуры Кюри T_C . В точке T_C на кривых $\rho(T)$ в сплавах с компонентами Z из третьего и четвертого периодов таблицы Менделеева (Al, Si и Ga, Ge) наблюдается излом, характерный для фазовых переходов второго рода. Наоборот, в сплавах с компонентами Z из пятого периода (In, Sn) в точке Кюри величина $\rho(T)$ изменяется скачком. Это может свидетельствовать о том, что в данных сплавах магнитный фазовый переход сопровождается перестройкой кристаллической структуры. Значения температур Кюри, определенные по особенностям на кривых $\rho(T)$ в исследованных зонных ферромагнетиках, приведены в таблице. Там же в скобках даются значения T_C , полученные ранее для некоторых из рассматриваемых сплавов в [2,3,6].

Современные расчеты электронной зонной структуры методом функционала спиновой плотности показывают [1–7], что при атомном упорядочении в кристаллической структуре $L2_1$ электронный спектр сплавов Co₂FeZ на уровне Ферми E_F имеет широкую (~ 1 eV) энергетическую щель в одной из подполос, различающихся направлением спинов электронов. Следовательно, эти ПМФ можно рассматривать как „сильные“ зонные ферромагнетики, для которых справедлива теория Стонера [18]. Поэтому в данных сплавах при $T < T_C$ поведение $\rho(T)$ должно определяться прежде всего изменением параметров электронного спектра вблизи E_F в зависимости от температуры. Из-за раздвижки подзон электронов со спинами вверх и вниз для их электросопротивления должно быть справедливо соотношение следующего вида (см., например, [8]):

$$\rho = \rho(0) + c M_S^2. \quad (1)$$

В формуле (1) член $\rho(0)$ обусловлен механизмами рассеяния носителей тока на неоднородностях в ферромагнетике и характеризуется длиной свободного пробега l .

Он включает в себя не зависящее от температуры остаточное сопротивление ρ_0 , а также температурно-зависимые электрон-электронную ρ_{ee} и электрон-фононную ρ_{ph} составляющие, при этом считается, что $\rho_0 \gg \rho_{ee}$

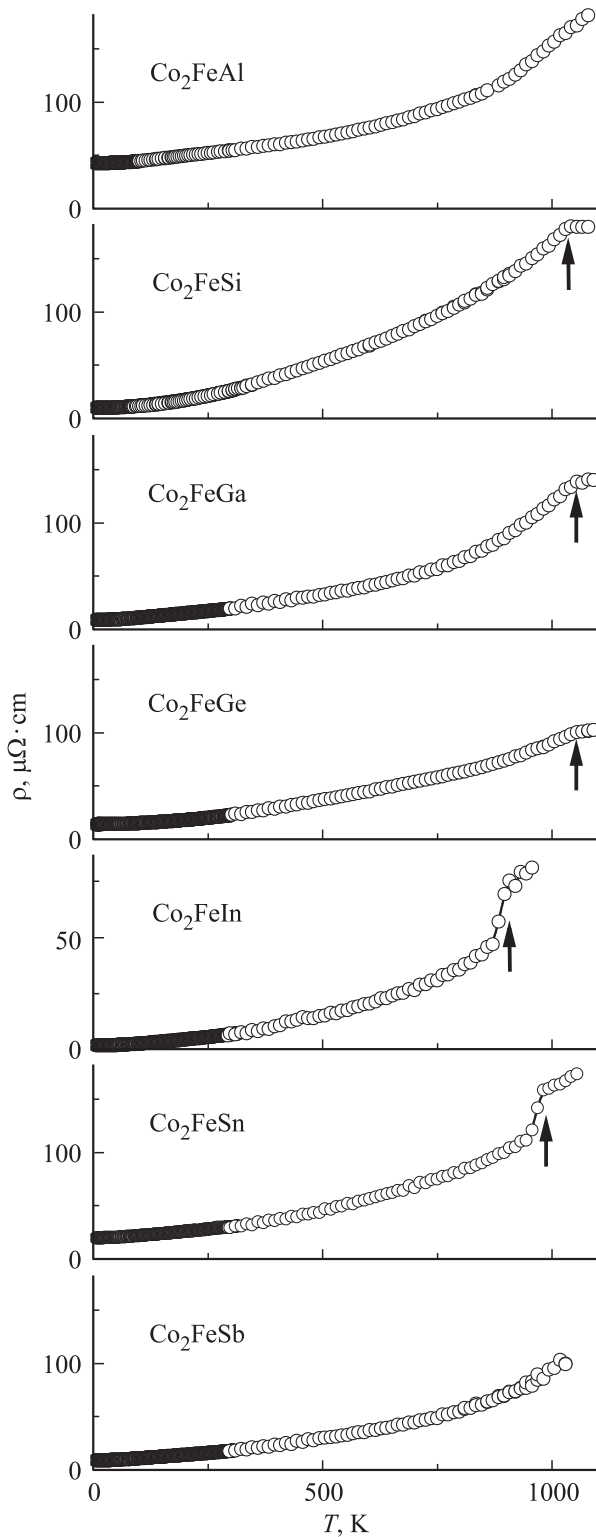


Рис. 1. Температурные зависимости электросопротивления сплавов Гейслера Co_2FeZ ($Z = \text{Al}, \text{Si}, \text{Ga}, \text{Ge}, \text{In}, \text{Sn}, \text{Sb}$). Стрелками обозначены температуры Кюри.

и ρ_{ph} . Второй член отражает процесс перестройки электронного спектра при изменении температуры, т.е. учитывает изменение числа носителей n . Здесь величина M_S — спонтанная намагниченность, c — константа, которая может иметь любой знак [8].

Известно, что, согласно зонной теории магнетизма [19], которая должна быть справедлива для ПМФ, спонтанную намагниченность можно определить как

$$M_S^2 = (M_{T=0, H=0})^2 [1 - (T/T_C)^2]. \quad (2)$$

Следовательно, для сопротивления имеем выражение

$$\rho = a + b(T/T_C)^2, \quad (3)$$

где a и b в первом приближении можно считать константами. Из рис. 2 видно, что для всех исследованных сплавов соотношение (3) действительно выполняется в достаточно широком интервале температур при $T < T_C$.

Отклонение от закономерности (3) становится существенным только вблизи T_C и в области низких температур ($T \ll T_C$). Выше T_C электросопротивление слабо зависит от температуры. Здесь число носителей тока n с температурой почти не изменяется, так как зонные параметры на уровне Ферми E_F имеют практически постоянную величину. При $T > T_C$ зависимость $\rho(T)$ определяется только процессами рассеяния электронов проводимости, т.е. величиной l . Процессы рассеяния вносят также существенный вклад в величину $\rho(T)$ при $T \leq T_C$ из-за резкого возрастания рассеяния электронов проводимости на тепловых возбуждениях намагниченности (магнитных флуктуациях).

В области низких температур процессы рассеяния оказывают существенное влияние на поведение $\rho(T)$ из-за того, что здесь спонтанная намагниченность, а следовательно, число носителей n слабо изменяются с температурой. Из рис. 3 видно, что при $T < 30$ К зависимости $\rho(T)$ можно описать полиномом второй степени

$$\rho(T) = \rho_0 + A_1 T + B_2 T^2, \quad (4)$$

где ρ_0 , A_1 и B_2 — константы. Такой вид низкотемпературной зависимости электросопротивления характерен для ферромагнитных сплавов из-за того, что в области низких температур становятся существенными процессы рассеяния электронов проводимости на магнитных неоднородностях. Взаимодействие носителей тока со спиновой магнитной подсистемой за счет $s-d$ -обменной связи или благодаря спин-орбитальному взаимодействию приводит к добавочному линейному и квадратичному вкладу [20].

Из данных таблицы следует, что для большинства исследованных сплавов коэффициент $A_1 < 0$, что может быть обусловлено видом их закона дисперсии электронов проводимости [20]. Квадратичный по температуре член в (4), как правило, связывают с механизмом электрон-электронного рассеяния, усиленного в сплавах переходных металлов за счет переходов носителей тока

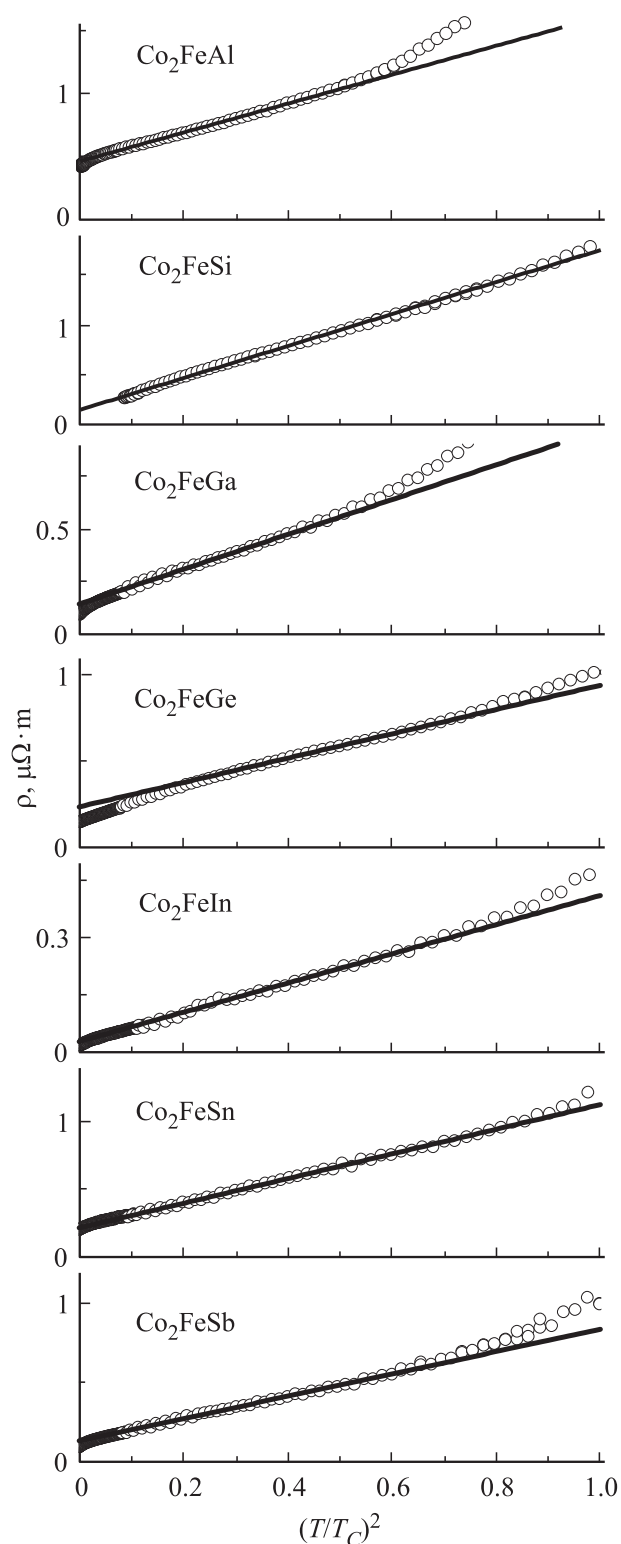


Рис. 2. Зависимости ρ от $(T/T_C)^2$ для сплавов Гейслера Co_2FeZ ($Z = \text{Al}, \text{Si}, \text{Ga}, \text{Ge}, \text{In}, \text{Sn}, \text{Sb}$). Сплошные линии показывают результаты обработки экспериментальных данных согласно формуле (3).

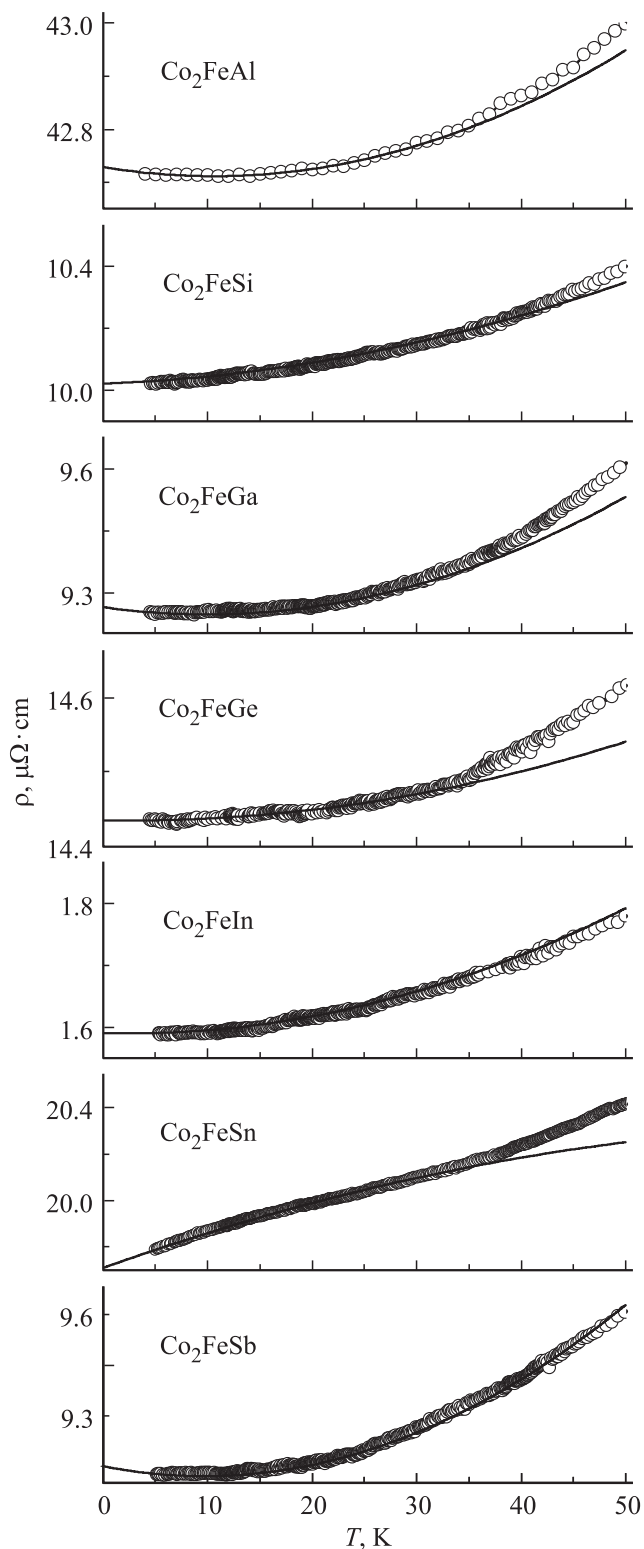


Рис. 3. Низкотемпературное электросопротивление сплавов Гейслера Co_2FeZ ($Z = \text{Al}, \text{Si}, \text{Ga}, \text{Ge}, \text{In}, \text{Sn}, \text{Sb}$). Сплошные линии показывают результаты обработки экспериментальных данных согласно выражению (4).

из s - в d -зону. Следует отметить, что в случае зонных ферромагнетиков квадратичный по температуре вклад в низкотемпературное электросопротивление может быть увеличен также вследствие слабого изменения с температурой параметров электронного спектра на уровне Ферми E_F , причем зонная составляющая в $\rho(T)$ может быть любого знака [8]. Как видно из данных, приведенных в таблице, этот вклад для всех сплавов, за исключением образца Co_2FeSn , имеет положительный знак. При этом коэффициент B_2 имеет необычно высокую величину.

4. Заключение

Таким образом, проведенные исследования показывают, что температурная зависимость электросопротивления в сплавах Гейслера Co_2FeZ ($Z = \text{Al}, \text{Si}, \text{Ga}, \text{Ge}, \text{In}, \text{Sn}, \text{Sb}$) имеет вид, характерный для полуметаллических ферромагнетиков. При $T < T_C$ зависимость $\rho(T)$ в основном определяется особенностями электронного энергетического спектра этих сплавов вблизи E_F , а именно изменением числа носителей тока n с температурой. Влияние процессов рассеяния электронов проводимости на поведение $\rho(T)$ в магнитоупорядоченном состоянии становится существенным только при приближении к температуре Кюри, а также в области температур значительно ниже T_C . В парамагнитном состоянии (при $T > T_C$), где параметры электронного спектра на уровне Ферми E_F практически не изменяются с температурой, зависимость $\rho(T)$ определяется процессами рассеяния электронов проводимости на различных неоднородностях в металле, т.е. величиной длины свободного пробега l .

Список литературы

- [1] M.I. Katsnelson, V.Yu. Irkhin, L. Chioncel, A.I. Lichtenstein, R.A. de Groot. *Rev. Mod. Phys.* **80**, 315 (2008).
- [2] H.C. Kandpal, G.H. Fecher, C. Felser. *J. Phys. D:* **40**, 1507 (2007).
- [3] D.A. Kukusta, V.N. Antonova, A.N. Yaresko. *Low Temp. Phys.* **37**, 684 (2011).
- [4] R. Farshchi, M. Ramsteiner. *J. Appl. Phys.* **113**, 191101 (2013).
- [5] M.ElAmine Monir, R. Khenata, H. Baltache, G. Murtaza, M.S. Abu-Jafar, A. Bouhemadou, S.B. Omranf, D. Rachedg. *J. Magn. Magn. Mater.* **394**, 404 (2015).
- [6] B. Balke, S. Wurmehl, G.H. Fecher, C. Felser, J. Kubler. *Sci. Technol. Adv. Mater.* **9**, 014102 (2008).
- [7] N.V. Uvarov, Y.V. Kudryavtsev, A.F. Kravets, A.Ya. Vovk, R.P. Borges, M. Godinho, V. Korenivski. *J. Appl. Phys.* **112**, 063909 (2012).
- [8] В.Ю. Ирхин, Ю.П. Ирхин. *Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты в d - и f -металлах и их соединениях.* УрО РАН, Екатеринбург (2004). 472 с.
- [9] Н.И. Коуров, В.В. Марченков, Ю.А. Перевозчикова, Н.В. Weber. *ФТТ* **59**, 63 (2017).
- [10] E. Shreder, S.V. Streltsov, A. Svyazhin, A. Makhnev, V.V. Marchenkov, A. Lukoyanov, H.W. Weber. *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 045212 (2008).
- [11] К.А. Фомина, В.В. Марченков, Е.И. Шредер, Н.В. Вебер. *Solid State Phenom.* 168–169, 545 (2011).
- [12] Н.И. Коуров, В.В. Марченков, К.А. Белозерова, Х.В. Вебер. *ЖЭТФ* **145**, 491 (2014).
- [13] Н.И. Коуров, В.В. Марченков, А.В. Корольев, К.А. Белозерова, Н.В. Вебер. *ФТТ* **57**, 1964 (2015).
- [14] Н.И. Коуров, В.В. Марченков, К.А. Белозерова, Х.В. Вебер. *ЖЭТФ* **148**, 966 (2015).
- [15] Н.И. Коуров, В.В. Марченков, Ю.А. Перевозчикова, Н.В. Вебер. *ФТТ* **58**, 1311 (2016).
- [16] V.V. Marchenkov, A.N. Cherepanov, V.E. Startsev, C. Czurda, H.W. Weber. *J. Low. Temp. Phys.* **98**, 425 (1995).
- [17] V.V. Marchenkov, H.W. Weber, A.N. Cherepanov, V.E. Startsev. *J. Low. Temp. Phys.* **102**, 133 (1996).
- [18] E.S. Stoner. *Proc. Roy. Soc. A* **165**, 372 (1938); **A 169**, 339 (1939).
- [19] E.P. Wohlfart. *J. Appl. Phys.* **39**, 1061 (1968).
- [20] С.В. Вонсовский. *Магнетизм.* Наука, М. (1971). 1032 с.