

М.П. Семенько, А.В. Носенко, М.І. Захаренко

Зв'язок магнетоопору аморфних сплавів на основі Fe-B з параметрами їх електронної структури

Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
01601, Київ, вул.Володимирська, 64, zakharenko@univ.kiev.ua

Досліджено магнетоопір та визначено феромагнітну анізотропію опору (ФАО) аморфних металевих сплавів (АМС) $Fe_{80}PM_5B_{15}$ та $Fe_{75}PM_5B_{20}$, $PM = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Ni, Co$. Запропоновано схему розрахунку ФАО з використанням енергетичних залежностей густини електронних станів $N(E)$. Показано, що поведінку ФАО АМС при зміні типу ПМ можна пояснити лише з урахуванням зміни обмінного розщеплення зон. Разом з тим, узгодження з експериментом можна досягти, використавши параметри, які вказують на значний внесок в електроопір sd -розсіювання, що протирічить характеру температурних залежностей електричного опору. Показано, що це протиріччя усувається при врахуванні неоднорідності атомної структури АМС.

Ключові слова: аморфні металеві сплави, магнетоопір, густина електронних станів, феромагнітна анізотропія опору.

Стаття постуила до редакції 22.01.2009; прийнята до друку 15.03.2010.

Дослідження поведінки електроопору в магнітному полі, або магнетоопору (МО) – один з важливих методів одержання інформації про механізми розсіювання електронів провідності. В цьому відношенні, найбільш інформативною величиною, яку можна одержати із залежностей МО β від напруженості магнітного поля H , є так звана феромагнітна анізотропія електроопору (ФАО), яка визначається як [1]:

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho_0} \right)_S = \frac{\rho_{\parallel} - \rho_{\perp}}{\bar{\rho}_0}, \quad (1)$$

де ρ_{\parallel} та ρ_{\perp} – електричний опір в паралельному та перпендикулярному до напрямку струму магнітних полях, а $\bar{\rho}_0 = (1/3) \rho_{\parallel} + (2/3) \rho_{\perp}$.

Двострумова модель провідності, розглянута Кемпбелом, Фертом та Джеолом (КФД) [1], дозволила успішно описати ФАО шляхом врахування додаткового розсіювання носіїв між станами зі спінами „вгору” та „вниз”, яке виникає завдяки наявності спин-орбітального зв'язку. Більш загальний підхід в рамках тієї ж моделі [2] дав можливість отримати рівняння для ФАО у вигляді:

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho_0} \right)_S = \frac{\gamma (\rho_{sd\downarrow} - \rho_{sd\uparrow})^2}{(\rho_{sd\downarrow} + \rho_{ss})(\rho_{sd\uparrow} + \rho_{ss})}. \quad (2)$$

Тут ρ_{ss} та ρ_{sd} – внески в електроопір, які виникають за рахунок розсіювання s -електронів у вільні s -стани (s - s -розсіювання) та d -стани (s - d -розсіювання) з різною орієнтацією спіна (\downarrow або \uparrow), відповідно. В цьому рівнянні прийнято, що

$\rho_{ss\downarrow} = \rho_{sd\uparrow} = \rho_{ss}$. За допомогою цього рівняння вдалося успішно пояснити зміни $(\Delta\rho/\rho_0)_S$ при зміні складу не тільки для кристалічних сплавів, але й ряду АМС [2]. Згідно з [2], відмінності у значеннях $(\Delta\rho/\rho_0)_S$ для кристалічних сплавів та для АМС зумовлені, в першу чергу, високим значенням ρ_{ss} для останніх. Однак, високі значення ρ_{ss} , притаманні аморфному стану дають кількісне узгодження значень $(\Delta\rho/\rho_0)_S$ лише тоді, коли ρ_{sd} досить близьке до ρ_{ss} [2, 3]. Останнє означає досить значну роль в електроопорі Моттвського sd -розсіювання та зменшення ролі розсіювання Фабера-Займана, якщо воно визначає ρ_{ss} .

Оскільки, в рівнянні (2) передбачається залежність ρ від густини електронних станів (ГЕС), то, як правило, пояснення результатів по дослідженню ФАО вимагає використання даних про електронну структуру (ЕС). Проте, таке пояснення проводиться з використанням схематичних залежностей ГЕС [2], які не можуть дати повного уявлення про реальне співвідношення між ρ_{ss} та ρ_{sd} . Власне, така точка зору відстоюється і в [3].

Тому, метою цієї роботи є дослідження впливу легуючих компонентів на ФАО АМС системи Fe-B та інтерпретація цих результатів із залученням результатів розрахунку їх ЕС.

Магнетоопір АМС $Fe_{85}B_{15}$ та $Fe_{80}B_{20}$, легуваних перехідними металами в кількості 5 ат.% досліджували при кімнатній температурі за стандартною чотирьохточковою методикою в полі до 200 кА/м, що достатньо для насичення МО при обох орієнтаціях магнітного поля. Зразки для досліджень

вирізали із стрічок шириною біля 1 мм та товщиною 20-30 мкм, виготовлених методом спінінгування з розплаву. Оскільки, значення МО виявилися малими, то величину ФАО визначали за допомогою наближеного рівняння:

$$(\Delta\rho/\rho_0)_s = \beta_{s\parallel} - \beta_{s\perp}, \quad (3)$$

де $\beta_s = (\rho_{Hs} - \rho_0)/\rho_0$ – МО при насиченні в паралельному(\parallel) та перпендикулярному(\perp) до напрямку струму магнітних полях, ρ_H та ρ_0 – електроопір у магнітному полі H та за його відсутності, відповідно.

Результати аналізу польових залежностей МО були опубліковані нами в [4]. Залежність ФАО $(\Delta\rho/\rho_0)_s$ від різниці ΔZ між порядковими номерами Fe та легуючим $3d$ -компонентом в АМС $Fe_{85}B_{15}$ та $Fe_{80}B_{20}$ зображена на рис. 1.

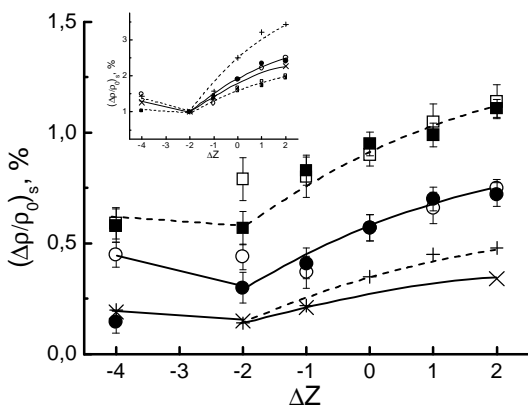


Рис. 1. Залежності $(\Delta\rho/\rho_0)_s$ від ΔZ при $T = 293$ К для АМС $Fe_{80}PM_5B_{15}$ (+) та $Fe_{75}PM_5B_{20}$ (×) та результат розрахунку для АМС $Fe_{80}PM_5B_{15}$ (□, ●) та $Fe_{75}PM_5B_{20}$ (○, ●) (світлі значки – схема I, темні – II). На вставці – нормовані залежності (на значення $(\Delta\rho/\rho_0)_s$ АМС з $PM=Cr$).

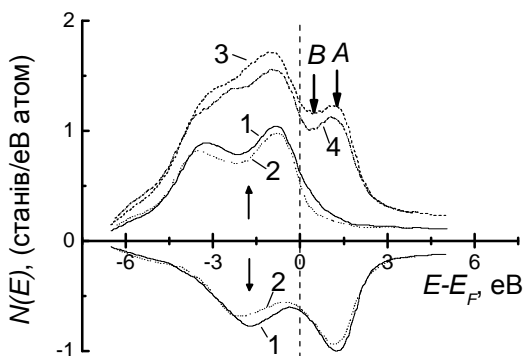


Рис. 2. Енергетична залежність $N_{d\uparrow}(E)$, $N_{d\downarrow}(E)$ (1,2) та сумарної ГЕС $N(E)$ (3,4) АМС $Fe_{86}B_{14}$ (1,3) та $Fe_{80}B_{20}$ (2,4), відповідно [5].

На рис. 2 зображені результати розрахунку ЕС для АМС $Fe_{86}B_{14}$ та $Fe_{80}B_{20}$, виконані в [5] комбінацією моделювання структури методом

молекулярної динаміки та лінійного наближення «muffin-tin» орбіталей. Коректність такого розрахунку для АМС $Fe_{80}B_{20}$ підтверджена фотоемісійними дослідженнями [6]. Видно, що як $N(E)$, так і $N_{d\uparrow}(E)$ для АМС $Fe_{86}B_{14}$ та $Fe_{80}B_{20}$ досить близькі. Відмітимо, що подібний спектр отримано в [5] і для АМС $Fe_{75}B_{25}$. Особливістю цих спектрів є розташування рівня Фермі на спадній області ГЕС вище максимуму підзони зі спінами «вгору» (підзони з більшою спіноюваселеністю), але точне його положення є неоднозначним. Оскільки, як вважається в [7], для АМС Fe-B величина обмінного розщеплення зон незмінна, то, в першу чергу, це зумовлено неточностями теоретичних розрахунків, що призводить до деяких відмінностей у поведінці ГЕС на краях зони. Крім того, положення рівня Фермі буде визначатися роллю атомів В у формуванні ЕС цих сплавів, чи є ці атоми донорами [5, 7], чи акцепторами електронів [8].

Що стосується змін ЕС АМС при легуванні ПМ, то існуючі труднощі врахування крім топологічного, ще й хімічного ближнього порядку [7, 9, 10] не дають однозначної відповіді про особливості впливу легуючого компоненту на ЕС. Існує дві домінуючі точки зору, відповідно з якими ЕС АМС з двома металами можна розглядати в моделі жорсткої зони або моделі розщепленої зони [10]. Часто вважають, що остання модель більш адекватно описує електронні властивості АМС з $\Delta Z \geq 2$ [7, 10]. Однак, багато експериментальних фактів знаходять пояснення і в моделі жорсткої зони, відповідно з якою спектри ГЕС не змінюються при легуванні, а змінюється лише положення рівня Фермі завдяки зміні середньої кількості електронів на атом. Зокрема, результати рентгенівських емісійних досліджень для АМС з малим вмістом легуючої домішки (до 5-10 ат.%) дають вагомі аргументи про застосовність моделі жорсткої зони [9, 11]. Оскільки така модель більш проста і потребує даних про ЕС лише базового АМС, а вміст легуючих компонентів у досліджених АМС малий, то саме вона і була прийнята за основу.

Для подальшого аналізу, рівняння (2) запишемо у вигляді:

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho_0}\right)_s = \frac{\gamma(\alpha_{\downarrow} - \alpha_{\uparrow})^2}{(\alpha_{\downarrow} + 1)(\alpha_{\uparrow} + 1)}, \quad (4)$$

де $\alpha_{\downarrow} = \rho_{sd\downarrow}/\rho_{ss}$, а $\alpha_{\uparrow} = \rho_{sd\uparrow}/\rho_{ss}$.

Відомо, що електроопір при sd -розіюванні пропорційний матричним елементам переходу та ГЕС d -електронів відповідної спінової орієнтації. Приймавши, що спін-залежною є лише ГЕС на рівні Фермі [2], можна вважати, що $\rho_{sd\downarrow} = A \cdot N_{d\downarrow}(E_F)$ та $\rho_{sd\uparrow} = A \cdot N_{d\uparrow}(E_F)$, де A – деяка постійна для даної системи, залежна від матричних елементів переходу. Це дозволяє записати α_{\downarrow} та α_{\uparrow} у вигляді:

$$\alpha_{\downarrow} = \rho_{sd\downarrow}/\rho_{ss} = \eta N_{d\downarrow}(E_F) \quad (5)$$

$$\alpha_{\uparrow} = \rho_{sd\uparrow}/\rho_{ss} = \eta N_{d\uparrow}(E_F)$$

де, $\eta=(A/\rho_{ss})$ – деякий коефіцієнт.

З рівнянь (4) та (5) отримаємо:

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho_0}\right)_s = \frac{\gamma^2 (N_{d\downarrow}(E_F) - N_{d\uparrow}(E_F))^2}{(1 + \eta N_{d\downarrow}(E_F))(1 + \eta N_{d\uparrow}(E_F))}. \quad (6)$$

З рівняння (6) видно, що ФАО визначається в першу чергу різницею густини станів d -електронів на рівні Фермі для підзон з різною спіновою орієнтацією.

Для того, щоб інтерпретувати залежність $(\Delta\rho/\rho_0)_s$ від типу легуючої домішки необхідно вирішити наступне: 1) визначити положення рівня Фермі в базовому АМС; 2) оцінити величину η ; 3) врахувати зміни E_F при легуванні.

Для того, щоб розв'язати першу проблему проаналізуємо експериментальні величини, пропорційні ГЕС на рівні Фермі, зокрема електронну теплоємність, коефіцієнт температурної залежності якої визначається переважно величиною $N(E_F)$ [10], або $N_d(E_F)$, зважаючи, що саме d -електрони дають основний внесок в ГЕС поблизу рівня Фермі. Згідно з [2,12], цей коефіцієнт складає 9,0, 6,6 та 5,8 мДж/(моль·К²) для АМС Fe₈₅B₁₅, Fe₈₀B₂₀ та Fe₇₅B₂₅, відповідно. Тому, на рис. 2 рівень Фермі для АМС Fe₈₄B₁₄ доцільно вибрати поблизу максимуму, а для АМС Fe₇₅B₂₅ – в мінімумі кривої $N_d(E)$ (ці точки на рис. 2 позначені A та B , відповідно), що, до речі, корелює з концентраційними межами стійкості АМС Fe-B за Нагелем-Тауком [11]. При такому виборі відношення густини станів в точках A та B складає приблизно 1,25, що узгоджується з відношенням коефіцієнтів електронної теплоємності для цих АМС (~1,55). Цілком логічно, що рівень Фермі для АМС з проміжним вмістом бору будуть лежати між цими точками. Такий вибір протирічить зарядовому стану атомів бору, як донорів електронів, проте досить добре узгоджується з їх акцепторною природою. Доречно відмітити, що площа під кривою $N_d(E)$ між точками A та B на рис. 2 складає 0,7 станів/атом, що досить добре узгоджується з різницею d -станів в АМС Fe₈₆B₁₄ та Fe₇₅B₂₅ з урахуванням зарядового стану бору 3,2 ел/атом, отриману, наприклад, у [8]. Крім цього, такий вибір положення рівня Фермі буде найкращим чином задовольняти результатам низькотемпературних вимірювань ФАО, яка для АМС Fe₈₅B₁₅ та Fe₇₅B₂₅ становить 0,90 та 0,35 %, відповідно [2], а для АМС Fe₈₀B₂₀ лежить в межах 0,55 до 0,62 % [13]. Оскільки, згідно з (6), ця величина залежить в першу чергу від $(N_{d\downarrow}(E_F) - N_{d\uparrow}(E_F))$, то при незмінному обмінному розщепленні, наведений вибір положення рівнів Фермі є цілком обґрунтований.

Для проведення відповідних модельних розрахунків необхідно оцінити величину $\eta=A/\rho_{ss}$. Як і в [2], будемо вважати, що A майже не залежить від концентрації та типу домішки, якщо знехтувати резонансним розсіюванням на так звані віртуальні зв'язані стани, які в кристалічних феромагнетиках виникають завдяки впливу певних атомів домішки. Це припущення є цілком логічним, оскільки внаслідок флуктуацій ближнього порядку (БП),

характерних для АМС, резонансний характер цих станів мало ймовірний. Якщо точно не задатися механізмами розсіювання, то врахувати зміни ρ_{ss} при легуванні досить складно. Зокрема, значна зміна ρ_{ss} може бути спричинена ефектами гібридизації між sp - та d -станами, Однак, оскільки гібридизовані стани існують переважно на краях d -зони [6], а рівень Фермі АМС Fe-B розміщений далеко від них, то вплив таких станів буде порівняно малим. Хоча сталість величин A та ρ_{ss} строго не доведена, в подальшому будемо вважати, що для близьких за складом АМС параметр η залишається сталим.

Для оцінок η використаємо значення ФАО, одержані для АМС Fe₈₅B₁₅ та Fe₈₀B₂₀ [2,13]. При розрахунках рівень Фермі E_F АМС Fe₈₅B₁₅ на рис.2 був вибраний дещо лівіше точки B , так щоб врахувати незначну різницю кількості заповнених d -станів у АМС Fe₈₅B₁₅ і Fe₈₆B₁₄. В такому випадку розрахунок за рівнянням (6) при $\gamma=0,01$ узгоджувався з експериментальною величиною $(\Delta\rho/\rho_0)_s \approx 0,90\%$ [2], якщо покласти $\eta \approx 2,2$ еВ атом/стан. Рівень E_F АМС Fe₈₀B₂₀ був визначений зворотним шляхом: його положення вибирали таким, щоб при обраних значеннях η і γ розрахована величина $(\Delta\rho/\rho_0)_s$ відповідала експериментальному значенню 0,55%, яке отримано при дослідженні ФАО АМС Fe₈₀B₂₀ [13]. Відмітимо, що розрахована з $N_d(E)$ кількість станів між рівнями Фермі АМС Fe₈₅B₁₅ та Fe₈₀B₂₀ наближено складає 0,33 станів на атом, а ця ж різниця з урахуванням складів дорівнює 0,3 станів на атом.

Зміну E_F при легуванні можна знайти, знаючи як змінилась кількість зайнятих станів при легуванні. Дійсно, кількість зайнятих d -станів у розрахунку на один атом в АМС Fe_{100-x}B_x становить $Q_d^{(0)} = Z_{dFe}(100-x)/100$, де Z_{dFe} – кількість d -електронів в атомі заліза. У АМС Fe_{100-x-y}PM_yB_x ця ж величина становитиме $Q_d^{(1)} = [Z_{dFe}(100-x-y) + Z_{dPM}y]/100$, де Z_{dPM} – кількість d -електронів в атомі ПМ. Різниця в кількості електронів на атом дорівнюватиме $\Delta Q_d = Q_d^{(0)} - Q_d^{(1)} = (Z_{dFe} - Z_{dPM})y/100$.

З іншого боку, кількість d -станів, що припадає на один атом на енергетичному інтервалі від E до E_F , дорівнює площі під графіком $N_d(E)$ між цими точками. Тому, знайшовши значення $(E - E_F)$ при якому площа під кривою $N_d(E)$ дорівнює ΔQ_d , можна знайти і зсув положення рівня Фермі для легованого АМС. Фактично в цьому випадку має місце зсув обох віток ГЕС відносно точки $(E - E_F) = 0$ до тих пір, поки „вивільнена” площа під кривою не стане рівною ΔQ_d , що схематично зображено на рис. 3, б.

Однак, оцінки показують, що при такому способі врахування зсуву E_F розрахована залежність $(\Delta\rho/\rho_0)_s$ від ΔZ не співпадає з експериментальною. Зокрема, має місце сильна відмінність в положеннях мінімумів для АМС Fe₈₅B₁₅ та Fe₈₀B₂₀ (на експерименті для цих АМС мінімуми співпадають (рис. 1)), а сам мінімум спостерігається при значно більших ΔZ , ніж на експерименті.

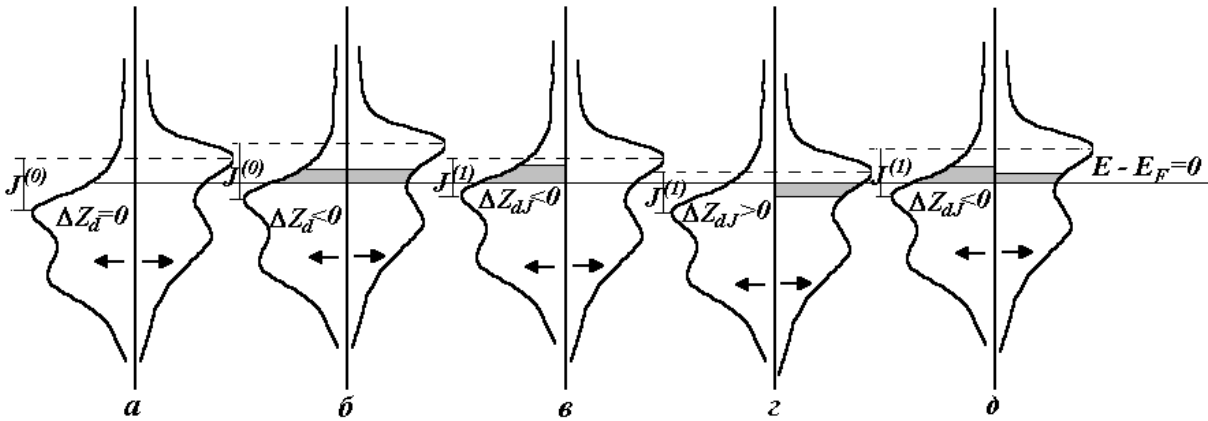


Рис. 3. Схема визначення положення рівня Фермі при легуванні: а) рівень Фермі вихідного АМС; б) рівень Фермі без врахування обмінного розщеплення; в) обмінний зсув зони з більшою спіноюю заселеністю; г) обмінний зсув зони з меншою спіноюю заселеністю; д) обмінний зсув обох підзон. J – обмінне розщеплення, ΔZ_d та ΔZ_{dJ} – кількість d -станів вивільнених за рахунок перерозподілу зарядів та обмінного розщеплення зон, відповідно.

У зв'язку з цим, розглянемо зв'язок між температурою Кюрі T_C та обмінним інтегралом J в наближенні молекулярного поля [14]:

$$J = T_C \frac{3k_B}{zS(S+1)}, \quad (7)$$

де k_B та m_B – постійна Больцмана та магнетон Бора, s – спіновий момент, z – координаційне число. Як вважається [7], в АМС $Fe_{100-x}B_x$ зміни T_C компенсуються змінами параметра z , внаслідок чого обмінний інтеграл залишається сталим, що й використовується в теоретичних розрахунках. З іншого боку відомо, що легуючі елементи суттєво впливають на T_C [7,11,14]. Очевидно, при малому вмісті легуючого компоненту характер БП в легуваному АМС досить близький до нелегованого (відмінність спостерігатиметься лише в околі атому домішки). Тому розумно припустити, що z залишається незмінним при малому вмісті легуючого компоненту, а T_C змінюється лише за рахунок змін J . В цьому випадку обмінний інтеграл легуваного АМС $J^{(1)}$ можна знайти з рівняння:

$$J^{(1)}/J^{(0)} = T^{(1)}/T^{(0)}, \quad (8)$$

де величини з індексами 0 та 1 відносяться до нелегованого та легуваного АМС, відповідно.

При незмінному положенні рівня Фермі, зміна обмінного розщеплення призведе до появи індукованого заряду в кожній із зон. З урахуванням цього, очевидним є факт, що зсув рівня Фермі при легуванні у випадку незмінної форми кривих $N_{d\downarrow}(E)$ та $N_{d\uparrow}(E)$ відбуватиметься не тільки за рахунок різниці зарядів, а і внаслідок зміни обмінного розщеплення. Знайти положення рівня Фермі при цьому можна лише в двох граничних випадках, яким відповідають схеми на рис.3, в та г (в подальшому схеми I та II, відповідно). В схемі I, зміна обмінного розщеплення враховується за рахунок зсуву d -зони зі спінами „вгору” відносно точки $(E-E_F)=0$ на величину $\Delta J = J^{(0)} - J^{(1)}$. В результаті такого зсуву кількість зайнятих d -станів змінюється на величину $\Delta Q_{dJ} \neq \Delta Q_d$. Наступним кроком буде одночасний зсув

обох підзон до тих пір, поки кількість зайнятих d -станів не зміниться на ΔQ_d (подібно зсуву, зображеного на рис.3,б). Ця схема загалом подібна до першої, але зміна обмінного розщеплення враховується за рахунок зсуву d -зони зі спінами „вниз”. Таке врахування J – це два граничні випадки, а більш реалістичною картиною є одночасне зміщення обох підзон (рис.3,д). Результат розрахунку з використанням обох схем та значень T_C досліджених АМС [7,11,14] представлений на рис. 1. Як видно, результат розрахунку залежить від обраної схеми та типу ПМ. При $\Delta Z \geq -1$ для обох схем отримані близькі значення, але при $\Delta Z \leq -2$ результати розрахунку для двох схем суттєво відмінні. Зважаючи, що схеми I і II були введені як граничні випадки, то цілком розумно припустити, що експериментальні значення ФАО знаходитимуться між цими граничними лініями. Якщо прийняти, що при ПМ = Cr працює схема II, а при ПМ = Ti – схема I, то характер розрахункових залежностей (зображено лініями) дуже близький до експериментальних, що особливо добре видно на нормованих значеннях ФАО (вставка на рис. 1). Застосовність альтернативних схем врахування обмінного розщеплення для цих двох ПМ зумовлена, імовірно, їх різною магнітною природою [7].

З огляду на те, що оцінка параметра η одержана з використанням низькотемпературного значення $(\Delta\rho/\rho_0)_S$, а експеримент проводили при кімнатній T , кількісні відмінності між експериментальними та обчисленими значеннями $(\Delta\rho/\rho_0)_S$ можна пояснити температурним фактором. Дійсно, розрахункові значення $(\Delta\rho/\rho_0)_S$ від x АМС $Fe_{80-x}Cr_xB_{20}$ (див. рис.4), виконані за схемою II з використанням тих же наближень та значень T_C для різних x із [15], добре узгоджуються з експериментальними величинами при $T = 4,2$ К із [15].

Зробити розрахунки концентраційної залежності ФАО для АМС Fe-Ni-B та Fe-Co-B в широкому концентраційному інтервалі легуючого ПМ досить

складно, оскільки вже при вмісті ПМ понад 5 ат.% T_C цих АМС перевищує їх температуру кристалізації. Оцінки ж показують, що у АМС $Fe_{80-x}Ni_xB_{20}$ та $Fe_{85-x}Ni_xB_{15}$ при вмісті Ni до ~5 ат.% $(\Delta\rho/\rho_0)_S$ повинно дещо зростати, або залишатись сталим, а вже потім

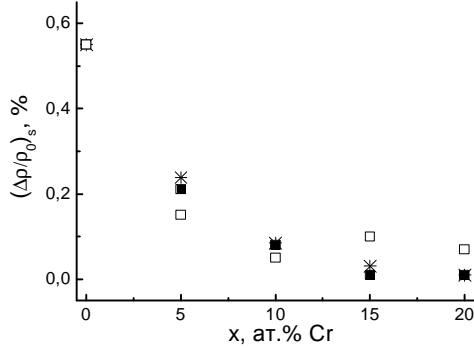


Рис. 4. Залежності $(\Delta\rho/\rho_0)_S$ від x при $T = 4,2$ К (*) для АМС $Fe_{75-x}Cr_xB_{20}$ [15] та результати розрахунку за схемами I (□) та II (■).

зменшуватися з ростом x .

Ці оцінки підтверджуються результатами експерименту, представленого у цій роботі, які показують, що значення $(\Delta\rho/\rho_0)_S$ для АМС $Fe_{80}Ni_5B_{15}$ дещо більше, ніж для $Fe_{85}B_{15}$.

Отже, використання теоретичних спектрів $N(E)$ дозволяє пояснити поведінку $(\Delta\rho/\rho_0)_S$ АМС Fe-B при легуванні лише з урахуванням зміни обмінного розщеплення енергетичних зон. На жаль, важко говорити про повне кількісне узгодження між результатами розрахунку та експерименту, хоча для АМС Fe-Cr-B таке узгодження надзвичайно хороше.

Як уже зазначалось, найкраще узгодження між розрахунком та експериментом досягнуто при значенні параметра $\eta \approx 2,2$ (еВ·атом)/стан. Оскільки, ГЕС в межах можливого положення E_F може змінюватися від 0,5 до 1,0 (станів/(еВ атом)) (рис.2), то це означає, що відношення ρ_{sd}/ρ_{ss} буде знаходитись в межах від 1,1 до 2,2, що навіть більше, ніж значення, яке можна отримати із величин ρ_{sd} та ρ_{ss} , використаних в [2] та [3] (максимальне значення ρ_{sd}/ρ_{ss} складало значення 0,94 [3]). Тому, у цьому випадку залишається в силі умова $\rho_{sd} \sim \rho_{ss}$, що передбачає значний внесок в ρ Моттівського sd -розсіювання, наявність якого не в змозі пояснити залежності $\rho(T)$. Однак, слід врахувати, що у викладеній схемі розрахунків η це модельний параметр, підібраний для узгодження з експериментом. Оскільки, знаменник у виразі (6) слабо впливає на результат і допускає зміну η в досить широких межах, то таке узгодження було досягнуто шляхом підгонки параметру η^2 в чисельнику, що при $\gamma = 0,01$ [1] і привело до $\eta = 2,2$ (еВ·атом)/стан. Якщо вибрати іншу величину γ , то відповідне узгодження буде досягнуто і при іншому значенні η . Хоча значення γ залежить від константи спин-орбітального зв'язку λ та обмінного поля $H_{обм}$

[1], обґрунтувати його значення, яке б привело б до умови $\rho_{sd} < \rho_{ss}$ при розумних значеннях величин λ та $H_{обм}$ неможливо (загальноприйнятою величиною для феромагнетиків на основі Fe, Co та Ni є $\gamma = 0,01$ [1]). Тому, компроміс можна досягти, ввівши деякий параметр w , записавши вираз для ФАО у вигляді:

$$(\Delta\rho/\rho_0)_S = w (\Delta\rho/\rho_0)_{SKФД}, \quad (9)$$

де $(\Delta\rho/\rho_0)_{SKФД}$ – величина ФАО, яка описується виразом (6). При такій формі запису та $\gamma = 0,01$, значення η набуде нового значення $\eta' = (A/\rho_{ss})$. Зв'язок між η та η' , очевидно, можна подати як: $\eta^2 = w(\eta')^2$. Для обґрунтування введення коефіцієнту w , слід врахувати, що рівняння (4), а, відповідно, розрахунки за рівнянням (6), справедливі для однорідної структури, для якої імовірність розсіювання електронів дорівнює сумі ймовірностей розсіювання в s -стані (ρ_{ss}) та в d -стані (ρ_{sd}). Проте добре відомо, що атомна структура АМС є суттєво неоднорідною і містить області з різними типами хімічного та топологічного БП [9,11]. Якщо розміри таких областей (неоднорідностей) є суттєвими, правило адитивності для імовірностей розсіювання електрона порушується. З певним наближенням, електроопір такої структури можна розглядати за „правилом суміші” з урахуванням структури.

В рамках моделі паралельного провідників легко отримати вираз для визначення поперечного та поздовжнього МО.

$$b_{\perp(\parallel)} = b_i + \frac{R_{2a0}}{R_0} b_{A\perp(\parallel)}, \quad (10)$$

де $\beta_i = (R_{1i} - R_{i1})/R_0$ – ізотропна складова МО, $\beta_{A\perp(\parallel)} = (R_{2a\perp(\parallel)} - R_{2a0})/R_{2a0}$ – анізотропна складова поперечного (поздовжнього) МО, R_0 – електроопір за відсутності магнітного поля. Порівнявши цей результат з рівнянням (9) можна бачити, що $w = R_{2a0}/R_0$, а $(\Delta\rho/\rho_0)_{SKФД} = \beta_{A\perp} - \beta_{A\parallel}$ являє собою ФАО провідника з електроопором R_2 . Отже, навіть такий простий приклад показує, що для неоднорідної структури рівняння, що визначають ФАО модифікуються, що обґрунтовує введення коефіцієнта w в рівнянні (9).

Дифракційний механізм ФЗ розглядає лише процеси пружного розсіювання електронів провідності, а електроопір, зумовлений цим механізмом завжди буде ізотропним, тобто не залежатиме від напрямку H . Власне цей механізм можна прийняти за основний механізм розсіювання електронів в областях, з ізотропним характером розсіювання (області „типу I”). З областями іншого типу (області „типу II”) слід зв'язати анізотропний внесок. Оскільки, як вважається, для АМС внесок непружного розсіювання в електроопір незначний, а sd -розсіювання є непружним [16], то, очевидно, об'ємна частка областей „типу II” досить мала. Для такої гетерогенної системи можна використати модель матричної суміші, для якої питомий електроопір описується формулою Максвелла [17]:

$$\rho = \frac{1 + 2r - \nu(1-r)}{1 + 2r + 2\nu(1-r)} \rho_M, \quad (11)$$

де $r = \rho_B/\rho_M$, ρ_M та ρ_B – питомий електроопір матеріалу

матриці (областей „типу Г’), – та матеріалу включень (областей „типу П’), відповідно, v – об’ємна частка включень.

Рівняння (11) може бути записано у вигляді суми ізотропної та анізотропної складових лише в граничному випадку, коли $v \ll 1$, $r \ll 1$. В такому наближенні розклад з урахуванням лише перших степенів малих величин міститиме лише ізотропний внесок ($\rho \approx \rho_M [1-3v]$), а анізотропна складова з’являється лише при врахуванні другого ступеня малих величин:

$$\rho = (1 - 3v + 6v^2)\rho_M + 9v\rho_B. \quad (12)$$

Тоді рівняння (10), можна записати:

$$\beta_{\perp(\parallel)} = \beta_I + 9v \frac{\rho_B}{\rho} \beta_{A\perp(\parallel)}, \quad (13)$$

де $\beta_I = [1-3v+6v^2](\rho_{MH}-\rho_{M0})/\rho_0$, а $\beta_{A\perp(\parallel)} = (\rho_{BH\perp(\parallel)}-\rho_{B0})/\rho_{B0}$. У цьому разі:

$$w = 9v \frac{\rho_B}{\rho}. \quad (14)$$

Розглянемо, чи можна модель матричної структури в наближенні $v \ll 1$, $r \ll 1$ використати для аналізу результатів по ФАО АМС. Якщо прийняти $(\Delta\rho/\rho_0)_S \sim 0,5\%$ (значення ФАО для АМС [2]), а $(\Delta\rho/\rho_0)_{SKFD} \sim 10\%$ (порядок ФАО кристалічних сплавів на основі Fe та Ni [2]), то при $\rho_B \sim 10$ мкОм·см (питомий електроопір кристалічних сплавів Fe-Ni [2]) та при $\rho \sim 100$ мкОм·см (типова величина ρ АМС на основі заліза [7]), то з рівнянь (9) та (14) одержимо, що вміст кристалоподібних включень v не перевищуватиме 5%. Така оцінка задовольняє умові малості v та узгоджується з оцінкою частки таких включень ($\sim 1\%$), зробленій у [18]. На користь важливої ролі кристалоподібних включень в аморфній структурі свідчать і зміни ФАО при збільшенні вмісту нанофази в АМС типу FINEMENT [19].

Розміщення рівня Фермі вдалині від країв зони, близькість електронних спектрів в околі рівня Фермі за результатами розрахунків для АМС з різним вмістом бору, аморфного та кристалічного заліза,

кристалічних боридів [7], очевидно, є причиною узгодження результатів модельного розрахунку впливу легуючих компонентів на ФАО з експериментом.

Хотілося б відмітити ще один факт, який практично не вивчений в плані впливу на транспортні властивості – це стохастичний характер структури АМС [14]. Зокрема, відомо, що флуктуації атомних параметрів в мікрооб’ємах впливають на магнітні властивості АМС [18]. Існування випадкової магнітної анізотропії призводить до утворення блоків, складених з кластерів розміром порядку декількох нанометрів з випадковою орієнтацією магнітної анізотропії, а відповідно і векторів намагніченості [14]. Випадкова орієнтація векторів намагніченості в блоках при їх малому розмірі цілком може стати причиною зникнення анізотропного характеру розсіювання електронів провідності. Але, в областях з високою ступінню БП, близькою до кристалічної, стохастичний характер відсутній, а, відповідно, з’являється і анізотропний характер розсіювання електронів провідності в них.

Отже, проведені модельні розрахунки дозволили пояснити залежність ФАО АМС Fe-ПМ-В від їх складу та типу ПМ. Значення параметрів, використані для цих розрахунків, реально враховують особливості ЕС АМС. Вони дають можливість чітко обґрунтувати малий мотівський sd -вклад в електроопір. Крім того, викладені уявлення пов’язують малі значення ФАО, притаманні АМС, не з великими значення ρ_{ss} , як це вважалося в [2], а як результат малого непружного внеску у розсіювання при збереженні механізму Фабера-Займана, як основного механізму розсіювання.

Семенко М.П. – кандидат фізико-математичних наук, доцент;

Носенко А. В. – аспірант;

Захаренко М. І. – доктор фізико-математичних наук, доцент.

- [1] I.A. Campbell, A. Fert, O. Jaol. The spontaneous resistivity anisotropy in Ni-based alloys // *J. Phys. C (Metal Phys. Suppl.)*, **3**(1), pp. S95-S101 (1970).
- [2] A.P. Malozemoff. Anisotropic magnetoresistance of amorphous and concentrated polycrystalline iron alloys // *Phys. Rev. B.*, **32**(9), pp. 6080-6082 (1985).
- [3] N. Sharma, S. Prasad, A.K. Nigam et al. A study of anisotropic magnetoresistance in a-FeNiMnBSi alloys // *J. Phys.: Condens. Matter.*, **6**(28), pp. 5493-5506 (1994).
- [4] Электроопір та магнетоопір аморфних металевих сплавів на основі заліза та кобальту / М.П. Семенко, М.І. Захаренко, Ю.А. Куницький, В.А. Макара, А.П. Шпак // *Успехи физ. мет.*, **10**(2), сс. 133-210 (2009).
- [5] J. Hafner, M. Tegze, Ch. Becker. Amorphous magnetism in Fe-B alloys: First-principles spin-polarized electronic-structure calculations // *Phys. Rev. B.*, **49**(1), pp. 285-298 (1994).
- [6] Y. B. Xu, D.Greig, A.L.Mitchell et al. The spin-dependent electronic structure of amorphous magnetic alloys // *J. Appl. Phys.*, **81**(8), pp. 4419-4421 (1997).
- [7] *Аморфные металлические сплавы*. Под ред. Ф. Е. Люборского. Металлургия, М. 584 с. (1987).
- [8] В. А. Макара, М. І. Захаренко, І. В. Плющай. Про роль атомів бору в формуванні електронної структури аморфних сплавів на основі заліза // *Доп. НАНУ*. 1, сс. 100–104 (2007).
- [9] А.П. Шпак, Ю.А. Куницький, В.И. Лысов. *Кластерные и наноструктурные материалы*. Академперіодика, К. 540 с. (2002).
- [10] R.C.O’Handley. Physics of ferromagnetic amorphous alloys // *J. Appl. Phys.*, **62**(10), pp. R15-R49 (1987).

- [11] Electronic structure and stability of transition metal-based metallic glasses / O. I. Nakonechna, I. V. Plyushchay, M. I. Zakharenko, R. Hasegawa // *Phys. Met. Metallogr.*, **96**(1), pp. 1-4 (2003).
- [12] M. Matsuura, U. Mizutani, Y. Yazawa. Low-temperature specific heat study of amorphous $Fe_{1-x}B_x$ alloys // *J. Phys. F: Met. Phys.*, **11**(7), pp. 1393-1401 (1981).
- [13] S.N. Kaul, M. Rosenberg. Evidence for a transition from weak to strong ferromagnetism from spontaneous resistivity anisotropy and high-field magnetic susceptibility data in amorphous $(Fe-Ni)_{80}(P-B)_{20}$ alloys // *Phys. Rev. B.*, **27**(9), pp. 5698-5705 (1983).
- [14] А.П. Шпак, Ю.А. Куницкий, М.И. Захаренко, А.С. Волощенко. *Магнетизм аморфных и нанокристаллических систем*. Академперіодика, К. 208 с. (2003).
- [15] M. Olievier, J. O. Strom-Olsen, Z. Altounian. Disorder and magnetic effects on the electron-transport properties of iron-chromium-boron metallic glasses // *Phys.Rev.B.*, **35**(1), pp. 333-341 (1987).
- [16] Ф. Дж. Блатт. *Теория подвижности электронов в твердых телах*. Физматгиз, М.-Л. 224 с. (1963).
- [17] Б. Г. Лившиц, В.С.Крапошин, Я.Л. Линецкий. *Физические свойства металлов и сплавов*. Металлургия, М. 320 с. (1980).
- [18] В.П. Набережных, А.И. Лимановский, В.И. Ткач, и др. Влияние скорости нагрева на размер зерна и кинетику кристаллизации аморфного сплава $Fe_{40}Ni_{40}P_{14}B_6$ // *ФММ*, **66**(1), сс. 169-177 (1988).
- [19] N. Mitrovic. Magnetoresistance of the $Fe_{72}Cu_1V_3Si_{16}B_8$ amorphous alloy annealed by direct current Joule heating // *J. Magn. Magn. Mater.* **262**(2), pp. 302-307 (2003).

М.Р. Semen'ko, A.V. Nosenko, M.I. Zakharenko

Relation of Magnetoresistance of Fe-B Based Amorphous Alloys with Parameters of its Electronic Structure

Magnetoresistance of $Fe_{80}TM_5B_{15}$ and $Fe_{75}TM_5B_{20}$ amorphous metallic alloys (AMAs) (TM = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Ni, Co) has been investigated. Ferromagnetic anisotropy of the resistivity (FAR) has been determined. The procedure of FAR calculation that involves the energy dependences of the density of electronic states $N(E)$ has been proposed. The dependence of FAR on the type of TM was shown to be described with accounting of the exchange splitting of energy bands. Therewith, the agreement with the experimental data could be achieved using parameters indicating an essential contribution of sd -scattering, that contradicts the character of temperature dependences of resistivity. This contradiction was shown to be eliminated through the accounting of the inhomogeneities of AMAs atomic structure.