

К экспериментальному обоснованию аномалий электронной плотности состояний в полупроводниковых сплавах железо–ванадий–алюминий

В.И. Окулов¹, В.Е. Архипов¹, Т.Е. Говоркова¹, А.В. Королев¹,
В.В. Марченков^{1,2}, К.А. Окулова¹, Е.И. Шредер¹, Х.В. Вебер³

¹ *Институт физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, 620041, Россия*
E-mail: okulov@imp.uran.ru

² *Международная лаборатория сильных магнитных полей и низких температур, г. Вроцлав, 53-5296, Польша*

³ *Атоминститут австрийских университетов, г. Вена, А-1020, Австрия*

Статья поступила в редакцию 9 октября 2006 г.

Исследованы температурные зависимости электросопротивления, коэффициента Холла и магнитной восприимчивости сплавов железо–ванадий–алюминий и установлено, что сплав $\text{Fe}_{1,9}\text{V}_{1,1}\text{Al}$ обладает полупроводниковыми зависимостями при использованном способе получения однородных сплавов. Показано, что в интервале температур ниже 30 К полупроводниковый сплав обладает характерным низкотемпературным масштабом наблюдавшихся зависимостей, который может отвечать проявлению узкой псевдощели в электронной плотности состояний. Предложено простое теоретическое описание эффектов псевдощели. В результате согласованной подгонки теоретических зависимостей к экспериментальным определена эффективная ширина псевдощели (~ 1 мэВ) и ее относительная глубина ($\sim 10^2$).

Досліджено температурні залежності електроопору коефіцієнта Холла та магнітної сприйнятливості сплавів залізо–ванадій–алюміній і встановлено, що сплав $\text{Fe}_{1,9}\text{V}_{1,1}\text{Al}$ має напівпровідникові залежності при використаному способі отримання однорідних сплавів. Показано, що в інтервалі температур нижче 30 К напівпровідниковий сплав має характерний низькотемпературний масштаб залежностей, які спостерігалися, що може відповідати прояву вузької псевдощілини в електронній щільності станів. Запропоновано простий теоретичний опис ефектів псевдощілини. Внаслідок погодженого припасування теоретичних залежностей до експериментальних визначено ефективну ширину псевдощілини (~ 1 меВ) та її відносну глибину ($\sim 10^2$).

PACS: 71.20.Be Переходные металлы и сплавы;
72.15.Eb Электропроводность и теплопроводность металлов и сплавов;
75.20.En Металлы и сплавы.

Ключевые слова: сплавы железо–ванадий–алюминий, электросопротивление, коэффициент Холла, магнитная восприимчивость, плотность электронных состояний.

1. Введение

Систематическое изучение электронных свойств тройных сплавов железа, ванадия и алюминия привело к обнаружению ряда аномалий, среди которых особый интерес представляют температурные зависимости электросопротивления, характерные для полупроводников [1]. Существование объектов, подобных полупроводникам, в системах типа сплавов

Гейслера имеет принципиальное значение, поскольку может свидетельствовать о новых особенностях электронных связей в таких системах. В работе [1] и в ряде последующих экспериментальных работ [2–5] полупроводниковое поведение было выявлено в сплаве стехиометрического состава Fe_2VAl , однако точное определение интервала составов с таким поведением из-за его узости оказалось непростым. Важное значе-

ние при этом имеют результаты работ [6,7], показавшие чувствительность полупроводниковых свойств к способу приготовления исследуемых сплавов. Оказалось, что сплав стехиометрического состава обладает полупроводниковыми свойствами, скорее всего, лишь в закаленном состоянии, не достигшем полного структурного равновесия. Если же исследуемые сплавы приготовлены с применением достаточно медленного охлаждения до конечного состояния, то полупроводниковые свойства возникают при большем содержании ванадия (с сохранением общего содержания железа и ванадия). В работах [1–3] приведены данные об эволюции температурной зависимости электросопротивления рассматриваемых сплавов с ростом содержания ванадия при замене атомов железа атомами ванадия, начиная с ферромагнитного соединения Fe_3Al вплоть до концентраций, несколько больших тех, которые отвечают кристаллам Fe_2VAl . В характере такой эволюции отражается понижение температуры магнитного упорядочения, которая приближается к нулю в окрестности стехиометрического состава Fe_2VAl . В точке магнитного фазового перехода электросопротивление имеет хорошо выраженный максимум, после которого наблюдается уменьшение с температурой в интервале, возрастающем вместе с максимальной величиной сопротивления по мере увеличения концентрации ванадия. Такая картина при определенных способах обработки усложняется появлением дополнительного минимума, так что при температурах ниже 300 К электросопротивление имеет два максимума, связанных с существованием магнитного упорядочения. При достижении немагнитного состояния максимум сопротивления, отвечающий тогда предельному низкотемпературному значению, сильно возрастает для определенных составов, близких к Fe_2VAl , что и интерпретируется как полупроводниковое поведение.

Излагавшаяся в ряде работ [1–5,8,9] трактовка полупроводниковых температурных зависимостей электросопротивления сплавов железо–ванадий–алюминий основана на предположении о существовании псевдощели (резкого провала) в энергетической зависимости плотности электронных состояний вблизи поверхности Ферми исследуемых сплавов. Пользуясь этим предположением, объясняют всю спадающую температурную зависимость сопротивления, наблюдавшуюся в интервале протяженностью до тысячи градусов К. При этом оказывается, что ширина предполагаемой псевдощели по порядку величины составляет десятую долю эВ. Однако при детальном анализе такого подхода нельзя не обратить внимание на то, что спадающие температурные зависимости сопротивления наблюдаются не только в полупроводниковых составах, но также, согласно изложенному выше, в це-

лой совокупности магнитоупорядоченных сплавов с более низкими концентрациями ванадия. Такие зависимости подобны друг другу в широких интервалах температур, особенно достаточно высоких. Их аномальный, спадающий характер обусловлен, возможно, эффективным изменением концентрации носителей тока и подавлением их рассеяния на структурных и спиновых неоднородностях из-за перераспределения атомов в кристаллической решетке с ростом температуры. Эти факторы действуют во всей совокупности сплавов, включая полупроводниковые. В связи с этим вряд ли разумно объяснять температурную зависимость сопротивления полупроводникового сплава существованием фиксированной для всех температур широкой псевдощели. Больше оснований предполагать, что при малом изменении концентрации ванадия около стехиометрического состава возникает псевдощель соответственно малой ширины, которая определяет низкотемпературное поведение проводимости. С возрастанием температуры включаются упомянутые выше механизмы, определяющие высокотемпературное падение сопротивления. Экспериментальные данные, которые в работах [1–5,8,9] трактуются как подтверждение существования широкой псевдощели, на самом деле не подгонялись к достаточно полному количественному описанию и свидетельствуют лишь о температурном спадании кинетических величин, которое при оценках на качественном уровне сопоставляется с наличием соответствующей псевдощели. То же относится и к имеющимся данным оптических измерений [9]. Результаты численных расчетов электронной структуры соединения Fe_2VAl [10,11] трудно применить к описанию полупроводникового поведения электросопротивления в силу того, что оно появляется, очевидно, при отклонении состава от стехиометрического. Поэтому нет оснований того, что получаемые в расчетах псевдощели в электронной плотности состояний имеют отношение к температурной зависимости электросопротивления. В то же время такие расчеты не имеют достаточной точности в предсказаниях ширины узких псевдощелей.

Для проверки правильности изложенных соображений нужно было экспериментально подтвердить существование нового низкотемпературного масштаба изменения электронных свойств полупроводниковых сплавов с температурой и выполнить количественную подгонку наблюдаемых зависимостей в рамках теории, учитывающей наличие узкой псевдощели в плотности состояний. Это стало целью настоящей работы. Исследованы сплавы железо–ванадий–алюминий, приготовленные по известной методике, обеспечивающей однородность структуры, с составами, близкими к стехиометрическому Fe_2VAl . Установ-

лено, что при использовании принятой методики приготовления сплавов полупроводниковыми свойствами обладает сплав $Fe_{1,9}V_{1,1}Al$. При анализе полученных нами температурных зависимостей коэффициента Холла (холловской концентрации электронов) в полупроводниковом сплаве обнаружен низкотемпературный участок резкого изменения, смыкающийся выше 30 К с намного более плавной высокотемпературной зависимостью. Подобно этому у проводимости и магнитной восприимчивости того же сплава имеются характерные низкотемпературные участки с новым масштабом изменения. На основе простого теоретического описания нам удалось связать упомянутые низкотемпературные аномалии с существованием псевдощели шириной порядка 1 мэВ в электронной плотности состояний. Согласованная подгонка полученных теоретических зависимостей к наблюдаемым позволила определить ширину и относительную глубину псевдощели.

2. Эксперимент

Основываясь на имеющихся данных, мы полагаем, что полупроводниковое состояние сплавов $Fe_{2-x}V_{1+x}Al$ с какой-либо структурой существует в интервале значений x от $-0,2$ до $0,2$. В соответствии с этим были выбраны три сплава из данного интервала для анализа низкотемпературного поведения их электросопротивлений, коэффициентов Холла и магнитных восприимчивостей. Сплавы с $x = -0,2; 0; 0,1$ были трехкратно переплавлены в индукционной печи и охлаждены вместе с печью в течение часа в атмосфере очищенного аргона. Чистота исходных компонентов составляла 99,97% Fe, 99,71% V, 99,99% Al. Рентгенографические исследования на дифрактометре ДРОН-3М показали, что в данных сплавах формируется известная структура $L2_1$. Однородность структуры и состава образцов были также подтверждены рентгеновским методом.

Образцы для электрических и магнитных измерений вырезали электроискровым способом из одного слитка. Для получения чистой поверхности образцы обрабатывали электрополировкой в смеси хлорной и уксусной кислот. Электрические измерения проводили четырехзондовым методом. Коэффициент Холла измеряли в магнитном поле напряженностью 10 Тл. Зависимость электросопротивления от напряженности магнитного поля у сплава выбранного состава была слабой и в дальнейшем не обсуждается. Магнитную восприимчивость измеряли в магнитном поле напряженностью 0,8 Тл с помощью SQUID магнитометра. Измерения проведены в интервале температур 4–300 К.

На рис. 1–3 приведены полученные температурные зависимости. Сравнение кривых для разных кон-

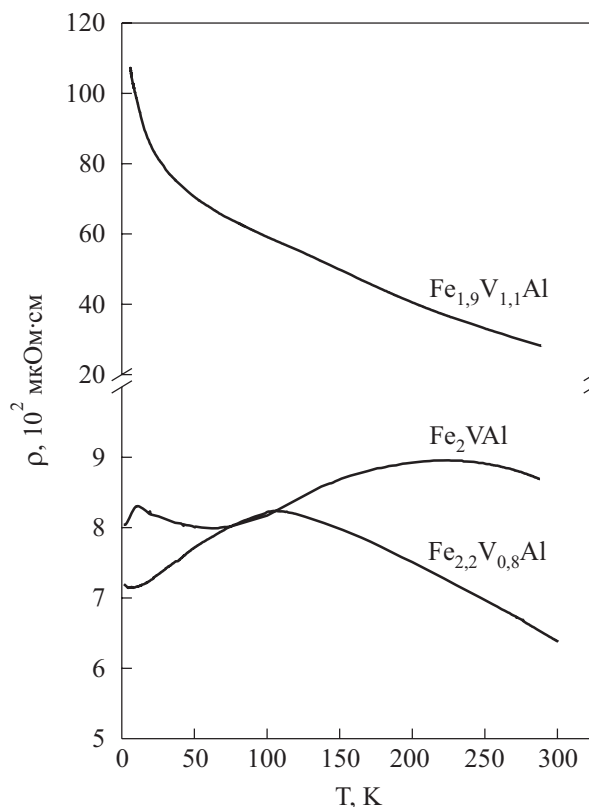


Рис. 1. Температурные зависимости удельного электросопротивления сплавов железо–ванадий–алюминий.

центраций позволяет однозначно связать полупроводниковое поведение со сплавом с $x = 0,1$. Наиболее наглядными являются температурные зависимости холловской концентрации (обратного коэффициента Холла, отвечающего по знаку электронной проводимости) и холловской подвижности (рис. 2). В отличие от очень слабых изменений в других образцах, хол-

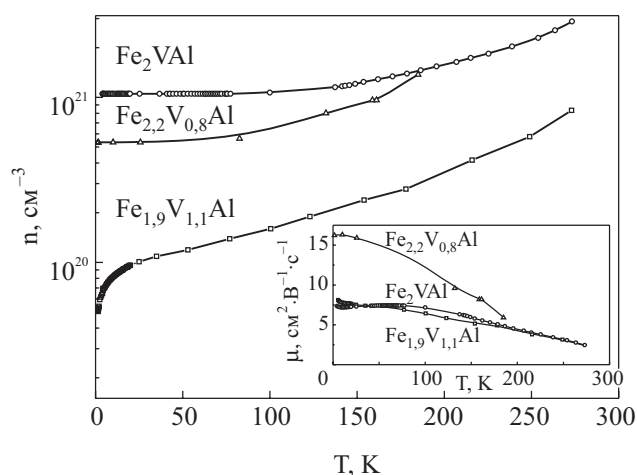


Рис. 2. Температурные зависимости холловской концентрации $n = 1/ceR$, где R — коэффициент Холла. На вставке — температурные зависимости холловской подвижности $\mu = R\sigma$.

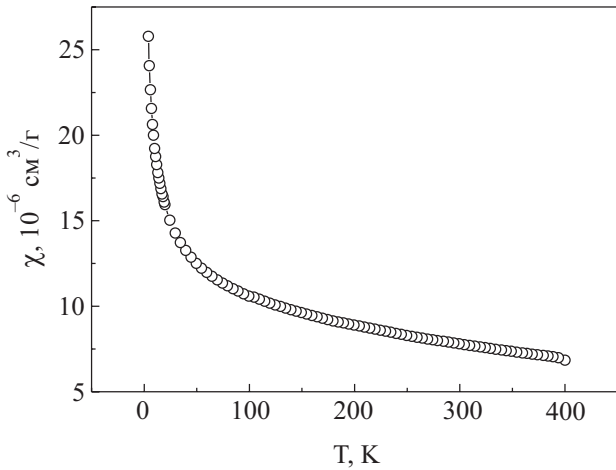


Рис. 3. Температурная зависимость магнитной восприимчивости сплава Fe_{1,9}V_{1,1}Al.

ловская концентрация в полупроводниковом образце существенно изменяется с температурой, причем обнаружены два масштаба изменения — низкотемпературный (примерно до 30 К) и намного больший, отвечающий плавному высокотемпературному поведению. Холловская подвижность в низкотемпературном интервале остается практически постоянной. Можно убедиться, что участки с низкотемпературным масштабом существуют и в температурных зависимостях электропроводности и магнитной восприимчивости. Зависимости логарифмов измеряемых величин от обратной температуры с определенностью демонстрируют наличие двух масштабов (рис. 4).

Кривые температурных зависимостей электросопротивления в отношении масштабов изменения аналогичны уже известным [1–5]. Приведенные в статьях [1,5] данные показывают основную тенденцию появ-

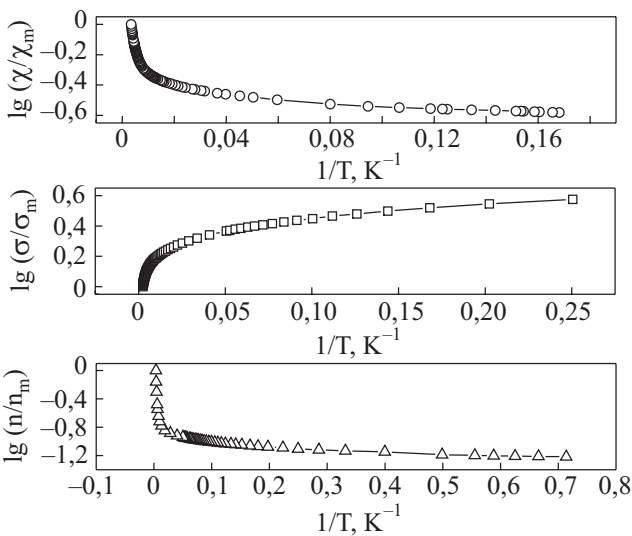


Рис. 4. Зависимости логарифмов измеренных величин от обратной температуры.

ления полупроводникового состояния в сплавах Fe_{2-x}V_{1+x}Al при уменьшении доли железа соответственно увеличению доли ванадия. При этом значения x , отвечающие полупроводниковым сплавам, различаются при разных способах их приготовления. Согласно известным результатам [6,7], этот факт объясняется зависимостью электронных свойств от особенностей структурных дефектов, которые появляются в процессе приготовления сплавов. В силу такой зависимости различие свойств сплавов с составами, отличающимися в пределах десятых долей x , вряд ли следует связывать только с различием составов и делать выводы принципиального характера, как это сделано в работе [5]. В частности, точное указание состава вблизи стехиометрического не является достаточным для того, чтобы судить о реализации в сплаве полупроводникового состояния. В то же время имеющиеся данные дают основания считать, что при заданном способе приготовления сплава полупроводниковое состояние появляется с ростом концентрации ванадия при каком-то определенном значении x вблизи стехиометрического состава. При используемом нами способе приготовления сплавов таким значением оказалось $x = 0,1$. Далее будет показано, что обнаруженный в полупроводниковом сплаве новый масштаб температурных зависимостей может отвечать существованию узкой псевдощели в энергетической зависимости электронной плотности состояний.

3. Теоретическое описание температурных зависимостей, обусловленных псевдощелью в энергетической зависимости плотности состояний

Рассмотрение роли псевдощели начнем с выражения для концентрации электронов n — уравнения для химического потенциала ζ :

$$\int_0^{\infty} d\epsilon g(\epsilon) f(\epsilon) = n, \quad (1)$$

в котором $g(\epsilon)$ — плотность состояний электронов с энергией ϵ , а $f(\epsilon)$ — функция Ферми. Будем описывать псевдощель глубоким минимумом функции $g(\epsilon)$ в интервале $\epsilon_m < \epsilon < \epsilon_m + \Delta_m$ шириной Δ_m , много меньшей энергии Ферми ϵ_F , которая определяется уравнением (1) в пределе равной нулю температуры T . Считаем, что энергия Ферми расположена внутри псевдощели, масштаб изменения функции $g(\epsilon)$ вне псевдощели значительно больше Δ_m , а тепловая энергия электронов мала по сравнению с этим масштабом. Таким образом, рассматриваются только температурные зависимости, масштаб которых не превышает Δ_m . Тогда в уравнении (1) при интегрировании по энергиям вне псевдощели с функцией $f(\epsilon) - 1$ при $\epsilon < \epsilon_m$ и с функцией $f(\epsilon)$

при $\varepsilon > \varepsilon_m + \Delta_m$ можно положить плотность состояний равной константе $g_m = [g(\varepsilon_m) + g(\varepsilon_m + \Delta_m)]/2$. После этого уравнение (1) принимает вид

$$g_m T \ln \{f(\varepsilon_m) / [1 - f(\varepsilon_m + \Delta_m)]\} + \int_{\varepsilon_m}^{\varepsilon_F} d\varepsilon g(\varepsilon)[f(\varepsilon) - 1] + \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_m + \Delta_m} d\varepsilon g(\varepsilon)f(\varepsilon) = 0. \quad (2)$$

Слагаемое с разностью $g(\varepsilon_m + \Delta_m) - g(\varepsilon_m)$ здесь не учитывается в силу предполагаемой малости Δ_m по сравнению с характерным масштабом изменения плотности состояний вне псевдощели $g(\varepsilon_m)$ как функции ε_m . Такое приближение связано также с ограничением, накладываемым на температуру при $T < \Delta_m$. Оценка, сделанная с использованием полученной ниже величины химического потенциала, приводит к требованию выполнения неравенства $T > \Delta_m / \ln(\varepsilon_m / \Delta_m)$.

При решении уравнения (2) считаем, что плотность состояний на дне псевдощели мала по сравнению с g_m . Это основное свойство, выделяющее псевдощель среди различных минимумов плотности состояний и обеспечивающее возможность появления эффектов, аналогичных тем, к которым приводят щели в энергетическом спектре электронов. Приближенное значение корня уравнения (2) найдем сначала, аппроксимируя функцию $g(\varepsilon)$ в интегралах константой g_0 и вводя малый параметр $\alpha = g_0 / g_m$. С использованием такой аппроксимации получается следующее уравнение для величины $x = \exp[(\zeta - \varepsilon_m - \Delta_m / 2) / T]$:

$$x^{1+\alpha} \frac{x+a}{ax+1} = 1+b, \quad (3)$$

где $a = \exp(\Delta_m / 2T)$, $b = \exp[\alpha(\varepsilon_F - \varepsilon_m - \Delta_m / 2) / T] - 1$, энергию и температуру измеряем в одних и тех же единицах. Корень этого уравнения равен единице, если $b = 0$, т.е. при расположении энергии Ферми в центре щели ($\varepsilon_F = \varepsilon_m + \Delta_m / 2$), или при $\alpha = 0$ (псевдощель сводится к щели). Если же $b \neq 0$, то в силу малости α величина x остается близкой к единице при определенном ограничении на температуру. Получив корень уравнения (3) с учетом линейной по α добавки, запишем соответствующее выражение для химического потенциала в следующем виде:

$$\zeta = \varepsilon_m + \Delta_m / 2 + \alpha(\varepsilon_F - \varepsilon_m - \Delta_m / 2) [1 + \exp(\Delta_m / 2T)] / 2. \quad (4)$$

Это выражение справедливо, если

$$T \exp(-\Delta_m / 2T) \gg \alpha |\varepsilon_F - \varepsilon_m - \Delta_m / 2|.$$

Такое ограничение имеет существенное значение при $T / \Delta_m < 1$ лишь в специальном случае близости энергии Ферми к границам псевдощели. Оно сводится к требованию выполнения неравенства

$$T > \Delta_m / 2 \ln(\Delta_m / \alpha |\varepsilon_F - \varepsilon_m - \Delta_m / 2|).$$

Полагая, что энергия Ферми достаточно близка к середине интервала и принимая условия применимости выражения (4), в последующем рассмотрении будем считать химический потенциал ζ , равным предельному значению $\varepsilon_m + \Delta_m / 2$. Нетрудно понять, что данное приближение позволяет в максимальной степени отразить такие же проявления псевдощели, как от щели, сохраняя в то же время специфику, происходящую от не обращающейся в нуль плотности состояний. Линейная по α поправка к предельному значению ζ в выражении (4) может быть найдена без предположения о постоянстве плотности состояний внутри псевдощели, которое использовано для получения приведенных выше оценок. Обратившись к общему уравнению (2), учтем, что предельное значение ζ получается с учетом лишь первого слагаемого в этом уравнении, и поэтому для определения поправки следует подставить именно такое значение химического потенциала в интегралы по интервалу псевдощели. Тогда упомянутые интегралы можно преобразовать следующим образом:

$$\int_{\varepsilon_m}^{\varepsilon_F} d\varepsilon g(\varepsilon)[f(\varepsilon) - 1] + \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_m + \Delta_m} d\varepsilon g(\varepsilon)f(\varepsilon) = - \int_0^{\varepsilon_F - \varepsilon_m - \Delta_m / 2} dE g(E) + (1/2) \int_0^{\Delta_m / 2} dE [g(E) - g(-E)][1 - \text{th}(E / 2T)]. \quad (5)$$

Здесь введена энергия $E = \varepsilon - \varepsilon_m - \Delta_m / 2$, отсчитываемая от химического потенциала, и $g(E + \varepsilon_m + \Delta_m / 2)$ обозначается $g(E)$. Из этого равенства следует, что при симметричной форме псевдощели $g(E) = g(-E)$ в формуле (4) имеем:

$$\alpha(\varepsilon_F - \varepsilon_m - \Delta_m / 2) = \int_0^{\varepsilon_F - \varepsilon_m - \Delta_m / 2} dE g(E) / g_m. \quad (6)$$

Учет возможной несимметричности псевдощели приводит к поправкам в формуле (6), не изменяющим порядка величины всего выражения.

Рассмотрим теперь вклад от псевдощели в электропроводность σ . В качестве исходной используем известную формулу для усредненной по направлениям диагональной компоненты тензора электропроводности:

$$\sigma = - \int_0^{\infty} d\varepsilon \sigma(\varepsilon) f'(\varepsilon) = \int_0^{\infty} d\varepsilon \sigma'(\varepsilon) f(\varepsilon), \quad (7)$$

в которой $\sigma(\varepsilon)$ – электропроводность в пределе $T = 0$ при энергии Ферми, равной ε , а штрихом обозначается производная по энергии. Формула (7) описывает

низкотемпературную проводимость при рассеянии электронов на статических дефектах кристаллической решетки. Существование псевдощели в энергетической зависимости плотности состояний электронов отражается в характерной зависимости функции $\sigma(\varepsilon)$ в соответствующем интервале энергий. Принимая приближения, сформулированные выше при вычислении химического потенциала, и полагая $\zeta = \varepsilon_m + \Delta_m/2$, приведем выражение (7) к следующему виду:

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma(\varepsilon_m) + \int_{\varepsilon_m}^{\varepsilon_m + \Delta_m} d\varepsilon \sigma'(\varepsilon) f(\varepsilon) = \\ &= \sigma_m - \frac{1}{2} \int_{-\Delta_m/2}^{\Delta_m/2} dE \sigma'_g(E) \operatorname{th}(E/2T), \end{aligned} \quad (8)$$

где $\sigma_g(E) = \sigma(E + \varepsilon_m + \Delta_m/2)$ — функция, определяющая поведение псевдощелевой проводимости, $\sigma_m = [\sigma_g(\Delta_m/2) + \sigma_g(-\Delta_m/2)]/2$. Полученная формула описывает температурную зависимость электропроводности, связанную с существованием псевдощели. Ограничения применимости формулы (8) определены выше при вычислении химического потенциала. С ростом температуры электропроводность изменяется от низкотемпературного значения $\sigma_0 = \sigma_g(0)$ до предельной высокотемпературной величины σ_m . Вид плавной кривой, описывающей переход между предельными значениями, зависит от функции $\sigma'_g(E)$. Существенное значение для этого имеют экстремумы производной $\sigma'_g(E)$ вблизи границ псевдощелевого интервала. Упрощенное описание всей кривой можно получить, если считать изменение функции $\sigma'_g(E)$ на границах сравнительно резким. Резкому спаду и резкому подъему в приграничных интервалах будут отвечать минимум и максимум функции $\sigma'_g(E)$, имеющие ширину, значительно меньшую, чем Δ_m , и расположенные в некоторых точках $\pm\Delta/2$ упомянутых интервалов. В этом предположении преобразуем формулу (8) следующим образом:

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma_m - \frac{1}{2} \operatorname{th}(\Delta/4T) \left[\int_0^{\Delta_m/2} dE \sigma'_g(E) - \int_{-\Delta_m/2}^0 dE \sigma'_g(E) \right] = \\ &= \sigma_m - (\sigma_m - \sigma_0) \operatorname{th}(\Delta/4T). \end{aligned} \quad (9)$$

Этой простой формулой аппроксимируется температурная зависимость электропроводности с помощью введения трех параметров, характеризующих роль псевдощели — предельных значений и эффективной ширины Δ . Она строго обоснована, если температуру можно считать большей, чем ширина приграничных пиков производной $\sigma'_g(E)$, и меньшей, чем масштаб изменения электропроводности внутри псевдощели. В любом случае данная аппроксимация может дать по-

лезную основу для интерпретации эффектов псевдощели.

Для дальнейшего описания существенно также то, что формула (9) имеет, в определенном смысле, универсальный характер, поскольку с соответствующей заменой предельных значений применима для целой совокупности электронных величин, описываемых общими формулами вида (7). Прежде всего это относится к компонентам тензора электропроводности в магнитном поле. Рассмотрим холловскую компоненту тензора сопротивления ρ_H , которая выражается через холловскую σ_H и поперечную σ_t компоненты электропроводности. Температурная зависимость каждой из компонент электропроводности, связанная с влиянием псевдощели в плотности электронных состояний, аппроксимируется формулой вида (9). Можно учесть при этом, что функция $\sigma_g(E)$ (соответственно $\sigma_{Hg}(E)$ и $\sigma_{tg}(E)$ для холловской и поперечной компонент) пропорциональна плотности состояний и содержит, кроме того, множители, зависящие от времени релаксации электронов, которые сравнительно слабо изменяются в интервале протяженностью Δ , поскольку лишь их производные пропорциональны плотности состояний. В связи с этим в принятых приближениях справедливо соотношение $\sigma'_{tg}(E) \approx \gamma \sigma'_{Hg}(E)$, в котором γ — постоянная величина, обратно пропорциональная произведению циклотронной частоты на время релаксации. Благодаря такому соотношению обратное холловское сопротивление оказывается равным $\rho_H^{-1} = (1 + \gamma^2) \sigma_H$, и, определив холловскую концентрацию n_H соотношением $n_H = H(e c \rho_H)^{-1}$, получим следующую формулу, описывающую ее температурную зависимость:

$$n_H = n_m - (n_m - n_0) \operatorname{th}(\Delta/4T). \quad (10)$$

Концентрации n_m и n_0 зависят от напряженности магнитного поля. В пределе сильного поля каждая из них стремится к заданной величине n , входящей в уравнение (1), так что формула (10) при $\gamma \ll 1$ описывает температурную зависимость поправки к этому предельному значению холловской концентрации. В слабом магнитном поле ($\gamma \gg 1$) величины n_m и n_0 не зависят от напряженности поля и пропорциональны квадрату времени релаксации.

Для спиновой магнитной восприимчивости электронов χ без учета межэлектронного взаимодействия также справедливо выражение вида (7) с заменой функции $\sigma(\varepsilon)$ на произведение плотности состояний на квадрат магнетона Бора. Поэтому, согласно изложенным выше результатам, не учитывая в первом приближении влияние межэлектронного взаимодействия, можно считать, что температурная зависимость восприимчивости, связанная с существованием псевдощели, описывается формулой

$$\chi = \chi_m + (\chi_0 - \chi_m) \text{th}(\Delta/4T), \quad (11)$$

где χ_0 и χ_m — предельные значения величины χ при температурах низких и высоких по сравнению с Δ . Существенное отличие в описании восприимчивости касается соотношения величин χ_0 и χ_m . Довольно очевидно, что низкотемпературные величины σ_0 и n_0 значительно меньше, чем соответственно σ_m и n_m , поскольку они отвечают меньшей плотности состояний. Если же сравнивать χ_0 и χ_m , то для реальных систем с переходными элементами соотношение может оказаться обратным. Это связано с возможным проявлением вкладов в восприимчивость χ_0 от локализованных электронных состояний, возникающих при резонансном рассеянии электронов на примесях переходных элементов. Такие вклады, изученные в работе [12], обратно пропорциональны ширинам резонансных уровней и могут значительно превышать восприимчивость, обусловленную проводящими электронами и пропорциональную их плотности состояний. В полосе проводимости вне псевдощели вклады в плотность состояний от резонансных (гибридизированных) примесных энергетических уровней сильно размыты и проявляются незначительно. С другой стороны, на дне псевдощели все состояния могут отвечать как раз резонансно рассеивающимся электронам и содержать как долю, относящуюся к электронам проводимости, так и уже упомянутые вклады локализации электронов, которые в данном энергетическом интервале могут проявляться значительно сильнее. С ростом температуры роль локализационных вкладов уменьшается, и в восприимчивости χ_m они не содержатся. В силу этого величина χ_0 может превышать χ_m .

4. Результаты подгонки теоретических зависимостей к экспериментальным данным

На основе формул (9)–(11), используемых для количественной интерпретации эффектов узкой псевдощели в температурных зависимостях электропроводности, эффекта Холла и магнитной восприимчивости, проведена подгонка теоретических зависимостей к экспериментальным данным, относящимся к низкотемпературному интервалу, который выделяется, согласно изложенному выше, обнаруженным характерным интервалом изменения измеренных величин. Результаты подгонки показаны на рис. 5–7. Основная наша цель состояла в том, чтобы показать возможность согласованного описания температурных зависимостей трех измеренных величин теоретическими кривыми, относящимися к одним и тем же значениям эффективной ширины Δ и относительной глубины щели — параметру α , характеризующему отношения σ_0 / σ_m , n_{H0} / n_{Hm} , и χ_0 / χ_m . Эту цель можно считать

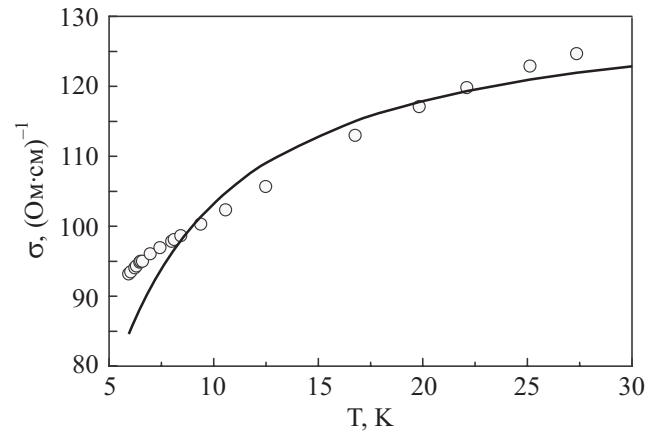


Рис. 5. Температурная зависимость электропроводности: экспериментальные значения (O), подгоночная кривая (9) (—).

достигнутой, все приведенные на рисунках теоретические кривые отвечают ширине Δ , равной 9,6 К, и указанным отношениям, заключенным в пределах от одной до трех сотых. Таким образом, принимая интерпретацию характерных низкотемпературных зависимостей как эффектов псевдощели, по нашим данным следует полагать, что псевдощель имеет ширину около одного мэВ и относительную глубину порядка 10^2 . Подчеркнем здесь, что это результат именно согласованной подгонки трех кривых по двум параметрам, поскольку каждую из кривых отдельно можно подогнать заметно лучше со своими значениями параметров. Только такой подход в данном случае позволяет обоснованно судить о степени достоверности согласия экспериментальных данных с предложенным теоретическим описанием. Некоторые отклонения экспериментальных зависимостей от подгоночных кривых имеют качественный характер, хотя

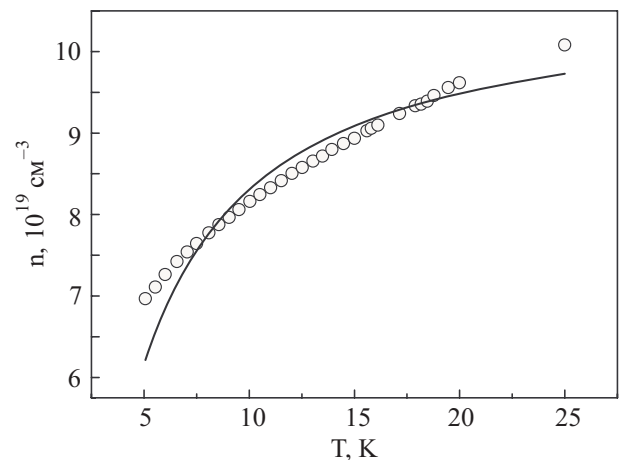


Рис. 6. Температурная зависимость холловской концентрации: экспериментальные значения (O), подгоночная кривая (10) (—).

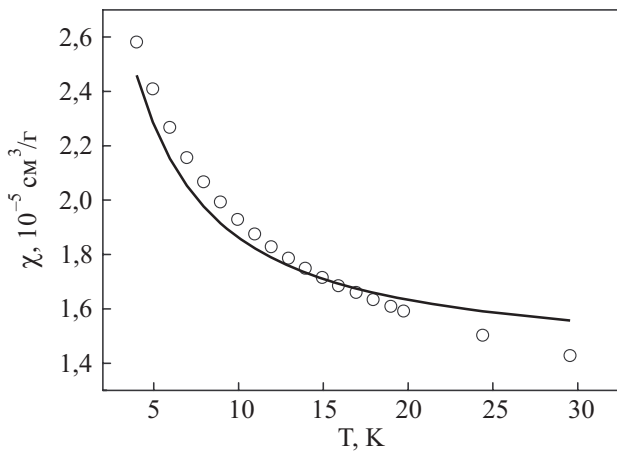


Рис. 7. Температурная зависимость магнитной восприимчивости: экспериментальные значения (O), подгоночная кривая (11) (—).

и заключены в пределах разумных погрешностей. К ним относятся небольшие отличия кривизны (в смысле близости к прямым) у электропроводности и холловской концентрации и несовпадение высокотемпературных предельных значений у восприимчивости. В рамках предлагаемой интерпретации такие отклонения объясняются влиянием имеющихся крупномасштабных температурных зависимостей, связанных с теми же факторами, которые играют основную роль при температурах рассмотренного выше интервала. Для учета такого влияния нужно специальное теоретическое исследование, хотя простая эмпирическая корректировка для восприимчивости при подгонке нами была сделана.

В выполненных ранее работах [1–5,8,9] для описания аномалий температурных зависимостей электросопротивления в широком интервале температур привлекались представления о псевдощели шириной порядка сотен мэВ. Однако соответствующие теоретические разработки в достаточной степени не были развиты. Поскольку действующие при высоких температурах механизмы падения электросопротивления, о которых упоминалось во Введении, могут иметь активационный характер, то грубого качественного описания экспериментальных данных недостаточно для того, чтобы обосновать существование широкой псевдощели в рассматриваемом объекте. Мы показали, что низкотемпературные зависимости в данном объекте имеют свой масштаб, который можно интерпретировать как проявление узкой псевдощели и, тем самым, как существование псевдощелевого полупроводника, принадлежащего по своей электронной структуре к переходным ступеням между металлом и диэлектриком.

4. Результаты и выводы

Получены экспериментальные данные по температурным зависимостям электросопротивления, коэффициента Холла и магнитной восприимчивости сплавов железо–ванадий–алюминий с составами вблизи стехиометрического состава Fe_2VAl . Установлено, что при использованном способе приготовления сплавов полупроводниковым поведением электросопротивления обладает сплав $\text{Fe}_{1,9}\text{V}_{1,1}\text{Al}$. Показано, что характерный масштаб температурных зависимостей в полупроводниковом сплаве при температурах ниже 30 К значительно отличается от высокотемпературного масштаба.

Предложено простое теоретическое описание проявлений псевдощели в плотности состояний электронов проводимости в низкотемпературном поведении электропроводности, коэффициента Холла и электронной спиновой восприимчивости. Полученные формулы для каждой из величин содержат три параметра, характеризующие эффективную ширину псевдощели и предельные значения при температурах высоких и низких по сравнению с этой шириной.

В итоге выполнения согласованной подгонки теоретических зависимостей к экспериментальным показана возможность описания низкотемпературных эффектов на основе представления о существовании псевдощели и определена ширина псевдощели (величина $\sim 1\text{ мэВ}$) и относительная ее глубина (10^2).

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 05–02–16930 и № 06–02–16919) и Программы Президиума РАН «Влияние атомно-кристаллической и электронной структуры на свойства конденсированных сред». Один из авторов (В.В.М.) благодарит Австрийскую академию наук за финансовую поддержку.

1. Y. Nishino, M. Kato, S. Asano, K. Soda, M. Hayasaki, and U. Mizutani, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1909 (1997).
2. W. Zarek, E. Talik, J. Heimann, M. Kulpa, A. Winiarska, and M. Neumann, *J. Alloys Comp.* **297**, 53 (2000).
3. M. Kato, Y. Nishino, U. Mizutani, and S. Asano, *J. Phys.: Condens. Matter* **12**, 1769 (2000).
4. T. Kanomata, T. Sasaki, T. Hoshi, T. Narita, T. Harada, H. Nishihara, T. Yoshida, R. Note, K. Koyama, H. Nojiri, T. Kaneko, and M. Motokawa, *J. Alloys Comp.* **317–318**, 390 (2001).
5. Y. Nishino, H. Sumi, and U. Mizutani, *Phys. Rev.* **B71**, 094425–1 (2005).
6. A. Matsushita and Y. Yamada, *J. Magn. Magn. Mater.* **196–197**, 669 (1999).
7. Ye Feng, J.Y. Rhee, T.A. Wiener, D.W. Lynch, et al., *Phys. Rev.* **B63**, 165109 (2001).
8. Chin-Shan Lue and Joseph H. Ross, Jr., *Phys. Rev.* **B58**, 9763 (1998).

9. H. Okamura, J. Kawahara, T. Nanba, S. Kimura, K. Soda, U. Mizutani, Y. Nishino, M. Kato, I. Shimoyama, H. Miura, K. Fukui, K. Nakagawa, H. Nakagawa, and T. Kinoshita, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3674 (2000).
10. D.J. Singh and I.I. Mazin, *Phys. Rev.* **B57**, 14352 (1998).
11. Ruben Weht and W.E. Pickett, *Phys. Rev.* **B58**, 6855 (1998).
12. В.И. Окулов, Е.А. Памятных, А.В. Гергерт, *ФММ* **101**, 11 (2006).

On the experimental justification of the anomalies of the electron density of states in semiconductor iron–vanadium–aluminum alloys

V.I. Okulov, V.E. Arkhipov, T.E. Govorkova, A.V. Korolyov, V.V. Marchenkov, K.A. Okulova, E.I. Shreder, and H.W. Weber

We have analyzed the temperature dependences of electrical resistivity, magnetic susceptibility and Hall concentration in the $\text{Fe}_{1.9}\text{V}_{1.1}\text{Al}$ alloy having the semiconductor-like properties. It has been es-

tablished that the semiconductor alloy exhibits a low-temperature scale of changing the quantities measured which can be attributed the pseudogap on the density of states. On the basis of the simple theoretical description taking into account the influence of a pseudogap on the density of states, we fitted the experimental temperature dependences using the predicted theoretical curves in the low-temperature range. As a result, the consistent value of the effective width of the pseudogap (~ 1 meV) and its relative depth ($\sim 10^2$) have been found.

PACS: 71.20.Be Transition metals and alloys;
72.15.Eb Electrical and thermal conduction in crystalline metals and alloys;
75.20.En Metals and alloys.

Keywords: iron–vanadium–aluminum alloys, electrical resistivity, Hall coefficient, magnetic susceptibility, electron density of states.