

УДК 669.225:537.312.6

**ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИХ  
ФЕРРОМАГНИТНЫХ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА  $CO_2YZ$  ( $Y = CR, TI, V$ ;  $Z = AL, GA$ )**

**<sup>1</sup>Перевозчикова Ю.А., <sup>1</sup>Коуров Н.И., <sup>1</sup>Емельянова С.М., <sup>1</sup>Белозерова К.А.,  
<sup>1</sup>Дякина В.П., <sup>1</sup>Марченкова Е.Б., <sup>1</sup>Чистяков В.В., <sup>2</sup>Вишняков А.А., <sup>1,2</sup>Марченков В.В.**

*<sup>1</sup>Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург;*

*<sup>2</sup>Уральский федеральный университет, Екатеринбург, e-mail: yu.perevozchikova@imp.uran.ru*

Полуметаллические ферромагнитные сплавы являются перспективными материалами для спиновой электроники, поэтому интересно изучать их электрические свойства. В данной работе исследовано электросопротивление  $\rho$  (проводимость  $\sigma$ ) полуметаллических ферромагнитных сплавов Гейслера на основе кобальта ( $Co_2CrAl$ ,  $Co_2TiAl$ ,  $Co_2VAl$ ,  $Co_2CrGa$ ) в широком температурном диапазоне от 4.2 К до 800 К. Обнаружены аномалии в температурных зависимостях электрического сопротивления исследованных полуметаллических ферромагнитных сплавов Гейслера, а именно, большая величина остаточного электрического сопротивления, экстремумы (максимумы и минимумы) сопротивления вблизи температуры Кюри, отрицательный температурный коэффициент сопротивления. Данное поведение можно объяснить в рамках двухтоковой модели проводимости, которая учитывает существование энергетической щели для одного из направлений спина в электронном спектре вблизи уровня Ферми  $E_F$ .

**Ключевые слова:** полуметаллический ферромагнетик, сопротивление, проводимость, сплавы Гейслера

**ELECTRONIC PROPERTIES OF HALF-METALLIC FERROMAGNETIC  
HEUSLER ALLOYS  $CO_2YZ$  ( $Y = CR, TI, V$ ;  $Z = AL, GA$ )**

**<sup>1</sup>Perevozchikova Y.A., <sup>1</sup>Kourov N.I., <sup>1</sup>Emelyanova S.M., <sup>1</sup>Belozerova K.A., <sup>1</sup>Dyakina V.P.,  
<sup>1</sup>Marchenkova E.B., <sup>1</sup>Chistyakov V.V., <sup>2</sup>Vishnyakov A.A., <sup>1,2</sup>Marchenkov V.V.**

*<sup>1</sup>M.N. Miheev Institute of Metal Physics of UB RAS, Ekaterinburg;*

*<sup>2</sup>Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Ekaterinburg,  
e-mail: yu.perevozchikova@imp.uran.ru*

The half-metallic ferromagnetic compounds are perspective candidates for spin electronics, therefore it is interesting to study their electrical properties. In this work the electrical resistivity  $\rho$  (conductivity  $\sigma$ ) of half-metallic ferromagnetic Heusler alloys based on cobalt ( $Co_2CrAl$ ,  $Co_2TiAl$ ,  $Co_2VAl$ ,  $Co_2CrGa$ ) was measured in wide temperature range from 4.2 K to 800 K. Specific temperature peculiarities in their electrical resistivity, i.e. the high residual resistivity, extremes (maximum and minimum) near Curie temperature, negative temperature resistance coefficient, were observed. It can be interpreted in terms of the two-current conductivity model, taking into account the existence of an energy gap in the electron spectrum near the Fermi level  $E_F$ .

**Keywords:** half-metallic ferromagnet, resistivity, conductivity, Heusler alloys

В настоящее время развиваются новые направления науки, в том числе спинтроника. Для устройств спинтроники необходимы новые магнитные материалы с высокой степенью спиновой поляризации носителей заряда. Одними из таких перспективных материалов являются полуметаллические ферромагнетики (ПМФ) [1]. Было предсказано, что некоторые из сплавов Гейслера – интерметаллических соединений типа  $X_2YZ$  со структурой  $L2_1$  ( $X, Y$  – переходные металлы,  $Z$  – элементы III-V групп), проявляют черты полуметаллического ферромагнетизма. Главная особенность таких материалов – существование щели в зонной структуре для носителей тока с одним направлением спина и её отсутствие для носителей с противоположным спином, что характерно для зонной структуры металла. Это может привести к 100% поляризации носителей заряда, что, в свою очередь, можно использовать в спинтронике. Обычно

эта особенность электронного спектра является в результате «первопринципных» зонных расчетов и экспериментально обнаруживается при измерении оптических характеристик (например, [2]). В частности, такие особенности наблюдали и в сплавах Гейслера на основе  $Co_2YZ$ . Значительные изменения спектральных параметров в зависимости от температуры и, особенно, при переходе из ферромагнитного в парамагнитное состояние, могут также повлиять на поведение других свойств данных материалов, в том числе и на удельное электросопротивление  $\rho(T)$ .

В связи с этим, поставленная цель данной работы – изучение роли «щелевых» особенностей в электросопротивлении ПМФ сплавов на основе  $Co_2YZ$ . Поэтому были измерены температурные зависимости электросопротивления  $\rho(T)$  сплавов  $Co_2YZ$  ( $Y = Cr, Ti, V$ ;  $Z = Al, Ga$ ) в широком интервале температур  $4 \leq T \leq 800$  К.

### Материалы и методы исследования

Сплавы  $\text{Co}_2\text{CrAl}$ ,  $\text{Co}_2\text{TiAl}$ ,  $\text{Co}_2\text{VAl}$ ,  $\text{Co}_2\text{CrGa}$  были изготовлены методом дуговой плавки в атмосфере аргона. Плавление проводилось в течение 24 часов при  $T = 1123 \text{ K}$  с последующим охлаждением до комнатной температуры. 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, и в сплавах сформирована структура  $L2_1$ . Расчеты зонной структуры продемонстрировали (см., например, [3, 4]), что рассматриваемые сплавы являются полуметаллическими ферромагнетиками. Электросопротивление определялось с помощью стандартной четырехконтактной методики.

### Результаты исследования и их обсуждение

Температурные зависимости сопротивления представлены на рис. 1, а в таблице –

значения температуры Кюри и остаточного электросопротивления исследуемых сплавов  $\text{Co}_2\text{MeAl}$  ( $\text{Me} = \text{Cr}, \text{Ti}, \text{V}$ ). Видно, что величины остаточного электросопротивления  $\rho_0$  и вид зависимостей  $\rho(T)$  сплавов значительно отличаются друг от друга. Так для сплава  $\text{Co}_2\text{TiAl}$   $\rho_0 = 0.4 \mu\Omega\cdot\text{m}$ , а для для  $\text{Co}_2\text{TiAl}$   $\rho_0 = 2.34 \mu\Omega\cdot\text{m}$ . Сопротивление одних сплавов возрастает с ростом температуры, а на  $\rho(T)$  других имеются участки с отрицательным температурным коэффициентом сопротивления (ТКС). При температуре вблизи температуры Кюри, на зависимостях электросопротивления наблюдаются изломы и/или экстремумы. С чем связано такое существенное различие в поведении электросопротивления этих сплавов? Поскольку эти соединения относятся к ПМФ, то можно предположить, что это и связано с особенностями их электронного спектра, а именно, с энергетической щелью на уровне Ферми.

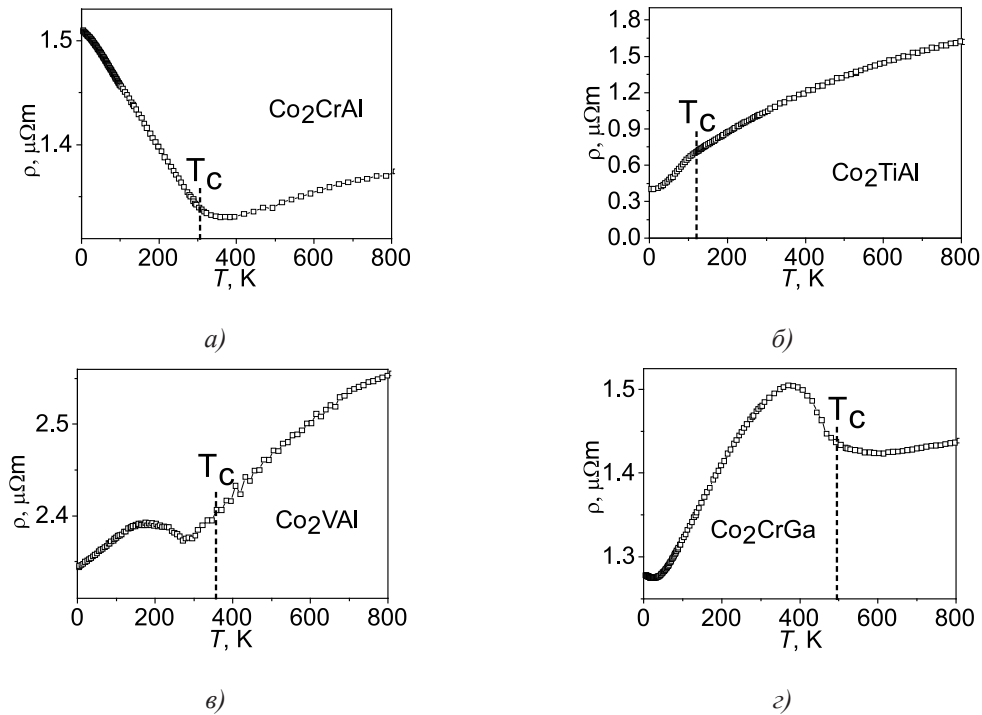


Рис. 1. Температурные зависимости электросопротивления а) –  $\text{Co}_2\text{CrAl}$ , б) –  $\text{Co}_2\text{TiAl}$ , в) –  $\text{Co}_2\text{VAl}$ , г) –  $\text{Co}_2\text{CrGa}$

Значения температур Кюри  $T_C$  и остаточного сопротивления  $\rho_0$

Сплав	$\text{Co}_2\text{CrAl}$	$\text{Co}_2\text{TiAl}$	$\text{Co}_2\text{VAl}$	$\text{Co}_2\text{CrGa}$
$T_C, \text{K}$	305[5]	120[6]	357[7]	495 [8]
$\rho_0, \mu\Omega\cdot\text{m}$	1.5	0.4	2.34	1.28

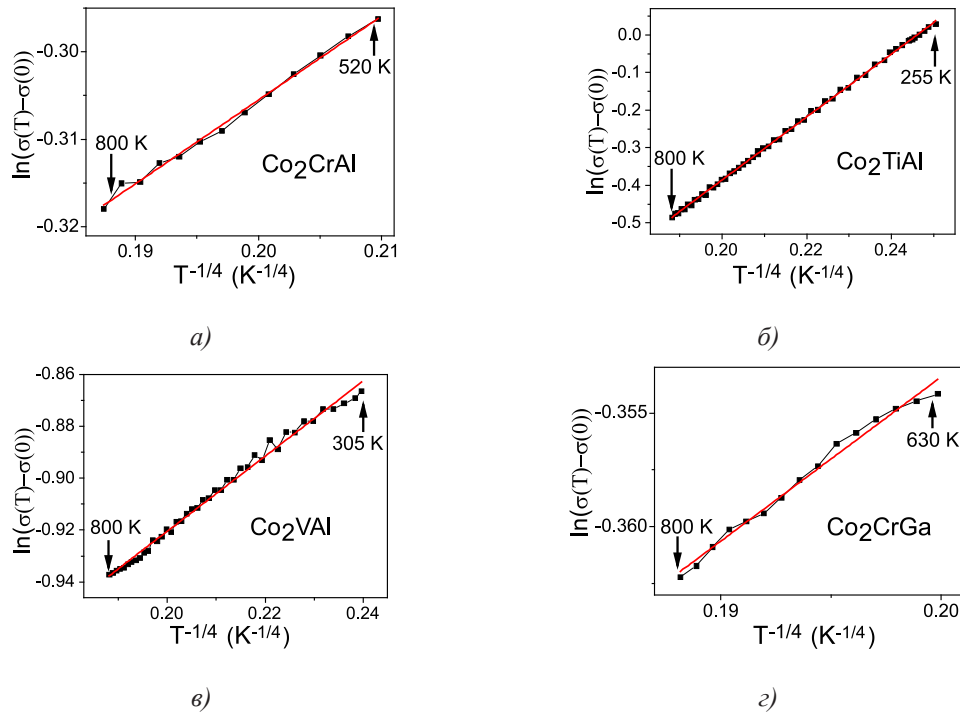


Рис. 2. Зависимость  $\ln[\sigma(T)-\sigma(0)]$  от  $T^{-1/4}$  а) –  $\text{Co}_2\text{CrAl}$ , б) –  $\text{Co}_2\text{TiAl}$ , в) –  $\text{Co}_2\text{VAl}$ , з) –  $\text{Co}_2\text{CrGa}$

Согласно литературным данным [см., например, 8], в ПМФ сплавах существует два канала проводимости: один для электронов со спином вверх, а другой – для электронов со спином вниз. Первый канал проводимости  $\sigma_{\uparrow}$  имеет обычную зависимость от температуры, как для ферромагнитного металла, то есть:

$$\sigma_{\uparrow} = \frac{1}{\rho_{\uparrow}} = \frac{1}{\rho_0 + \rho_{ee} + \rho_{ph} + \rho_m}, \quad (1)$$

где  $\rho_0$  – остаточное сопротивление,  $\rho_{ee}$ ,  $\rho_{ph}$ ,  $\rho_m$  – вклады в общее электросопротивление от электрон-электронного, электрон-фононного и электрон-магнитного рассеяний, соответственно.

Второй канал проводимости  $\sigma_{\downarrow}$  для электронов со спином вниз должен зависеть от параметров энергетической щели в электронном спектре вблизи уровня Ферми. Проводимость  $\sigma_{\downarrow}$  должна иметь либо экспоненциальную зависимость, т.е.  $\sigma_{\downarrow} \sim \exp(-T/T_0)$ , где  $T_0$  – температура щели, либо степенную зависимость  $\sigma_{\downarrow} \sim T^n$ , где  $n$  – показатель степени. Так как оба канала проводимости  $\sigma_{\uparrow}$  и  $\sigma_{\downarrow}$  имеют полностью отличающиеся температурные зависимости, т.е.  $\sigma_{\uparrow}$  уменьшается, а  $\sigma_{\downarrow}$  – увеличивается с возрастанием температуры, то могут легко проявиться некоторые особенности электросопротивления  $\rho(T)$  (проводимости  $\sigma(T)$ ) – отрицательный температурный коэффициент сопротивления, экстремумы

вблизи  $T_c$  и высокие значения остаточного сопротивления, что и наблюдаются в эксперименте (рис. 1). Представляет интерес и поиск экспоненциальной зависимости сопротивления (проводимости) от  $T$ . Отметим, что температурная зависимость проводимости (сопротивления), пропорциональная  $\exp(-B/T^{1/4})$ , где  $B$  – коэффициент, действительно наблюдалась в высокорезистивных сплавах ([9]). Данная зависимость подобна закону Мотта « $T^{1/4}$ » [10] с механизмом прыжковой проводимости при переменной длине прыжка. Было высказано предположение, что проводимость исследованных сплавов тоже может быть пропорциональна  $\exp(-B/T^{1/4})$ . Чтобы подтвердить это предположение, было изучено сопротивление (проводимость) сплавов  $\text{Co}_2\text{MeAl}$  ( $\text{Me} = \text{Cr, Ti, V}$ ).

Для анализа экспериментальных данных была использована концепция сосуществования упругого и неупругого рассеяний электронов [9]. Согласно [9], температурная зависимость проводимости высокорезистивных сплавов может быть записана как

$$\sigma = \sigma(0) + \sigma_{in} = \sigma(0) + A \cdot \exp(-B/T^{1/4}), \quad (2)$$

где  $A$ ,  $B$  – коэффициенты,  $\sigma(0)$  – обычная проводимость металлов, обусловленная процессами упругих рассеяний носителей тока и  $\sigma_{in}$  – проводимость, связанная с неупругим рассеянием носителей заряда. Проводимость  $\sigma(0)$  включает оста-

точную проводимость, проводимость электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействий. Предполагается, что  $\sigma_{in} \gg \sigma(0)$ .

На рис. 2 изображены температурные зависимости проводимости в координатах  $\ln[\sigma(T)-\sigma(0)]$  от  $T^{-1/4}$  для сплавов  $Co_2YZ$  ( $Y = Cr, Ti, V$ ;  $Z = Al, Ga$ ). Видно, что проводимость  $\sigma \sim A \cdot \exp(-B/T^{1/4})$  в широком интервале температур, что также может быть проявлением особенностей электронной зонной структуры вблизи уровня Ферми  $E_F$  этих сплавов [9].

### Заключение

В данной работе показано, что температурные зависимости электросопротивления полуметаллических ферромагнитных сплавов Гейслера на основе  $Co$ , преимущественно определяются особенностями их зонной структуры. Присутствие энергетической щели на уровне Ферми  $E_F$  в одной из подзон носителей тока со спином вниз может привести к аномалиям в сопротивлении, т.е. к высокому остаточному сопротивлению, экстремумам вблизи температуры Кюри и к отрицательному температурному коэффициенту сопротивления. Обнаружено, что в этих высокорезистивных сплавах при высоких температурах проводимость пропорциональна  $\exp(-B/T^{1/4})$ .

*Работа выполнена по плану государственному заданию (тема «Спин» № 01201463330) при частичной поддержке Комплексной программы УрО РАН (проект № 15-17-2-12), проекта РФФИ (грант*

*№ 15-02-06686) и молодежного проекта РФФИ (грант № 16-32-00072).*

### Список литературы

1. Katsnelson M.I. Half-metallic ferromagnets: From band structure to many-body effects / M.I. Katsnelson, V.Yu. Irkhin, L. Chioncel, A.I. Lichtenstein, R.A. de Groot // *Rev. Mod. Phys.* – 2008. – V. 80. – P. 315.
2. Shreder E. Evolution of the electronic structure and physical properties of  $Fe_2MeAl$  ( $Me = Ti, V, Cr$ ) Heusler alloys / E. Shreder, S.V. Streltsov, A. Svyazhin, A. Makhnev, V.V. Marchenkov, A. Lukoyanov, H.W. Weber // *J.Phys: Condens. Matter.* – 2008. – V. 20. – P. 45212.
3. Коуров Н.И. Магнитные и электрические свойства полуметаллического ферромагнетика  $Co_2CrAl$  / Н.И. Коуров, А.В. Королёв, В.В. Марченков, А.В. Лукоянов, К.А. Белоzerова // *ФТТ.* – 2013. – № 55. – С. 899.
4. Kandpal H.C., Fecher G.H., Felser C. Calculated electronic and magnetic properties of the half-metallic, transition metal based Heusler compounds // *J.Phys.D: Appl.Phys.* – 2007. – V. 40. – P. 1507.
5. Kourov N.I. Magnetic and electrical properties of the half-metallic ferromagnets  $Co_2CrAl$  / N.I. Kourov, A.V. Korolev, V.V. Marchenkov, A.V. Lukoyanov, K.A. Belozerova // *Phys.Solid State.* – 2013. – V. 55. – P. 977.
6. Graf T. Electronic structure and transport properties of the Heusler compound  $Co_2TiAl$  / T. Graf, G.H. Fecher, J. Barth, J. Winterlik, C. Felser // *J.Phys.D: Appl.Phys.* – 2009. – V. 42. – P. 084003.
7. Kanomata T. Magnetic properties of the half-metallic Heusler alloys  $Co_2VAl$  and  $Co_2VGa$  under pressure / T. Kanomata, Y. Chieda, K. Endo, H. Okada, M. Nagasako, K. Kobayashi, R. Kainuma, R.Y. Umetsu, H. Takahashi, Y. Furutani, H. Nishihara, K. Abe, Y. Miura, M. Shirai // *Phys. Rev. B.* – 2010. – V. 82. – P. 144415.
8. Kourov N.I. Peculiarities of the electronic transport in  $Co_2CrAl$  and  $Co_2CrGa$  half-metallic ferromagnets / N.I. Kourov, V.V. Marchenkov, A.V. Korolev, K.A. Belozerova, H.W. Weber // *Curr. Appl. Phys.* – 2015. – V. 15. – P. 839.
9. Shcherbakov A.S., Prekul A.F., Pomortsev R.V. Activation conductivity of alloys with a negative temperature coefficient of resistance (TCR) // *JETF Letters.* – 1980. – V. 32. – P. 401.
10. Mott N.F. Conduction in Non-crystalline Materials III. Localized States in a Pseudogap and Near Extremities of Conduction and Valence Bands // *Philos. Mag.* – 1969. – V. 19. – P. 835.