

PACS numbers: 01.65.+g, 71.18.+y, 72.20.-g
 DOI: 10.3367/UFN.0178.200810l.1111

Квантовый транспорт при высоких давлениях

Е.М. Дижур, В.А. Вентцель, А.Н. Вороновский

В отличие от других областей физики конденсированного состояния, которые можно классифицировать либо по объектам исследования (например, физика полупроводников), либо по природе изучаемых явлений (магнетизм), физика высоких давлений характеризуется общим методом исследования — использованием давления для изучения физических свойств различных объектов.

Использование измерений зависимости транспортных свойств электронов от давления в исследованиях физических моделей конденсированного состояния началось в Лаборатории электрических и гальваниомагнитных явлений под руководством А.И. Лихтера, образованной в составе Института физики высоких давлений РАН с самого его основания в 1958 г.

Основание Института по времени совпало с бурным развитием исследований энергетического спектра электронов в металлах. Именно в эти годы заявила о своих достижениях в теории твердого тела школа И.М. Либшица, именно тогда началось повсеместное экспериментальное изучение поверхности Ферми нормальных металлов. Пionерская работа сотрудников ИФВД, связанная с приложением высоких давлений к таким исследованиям, была опубликована уже в 1963 г. [1]. В этой работе были получены экспериментальные данные по удельному сопротивлению, постоянной Холла и магнетосопротивлению графита под давлением до 1 ГПа при температурах от комнатной до 450 К. Сравнение экспериментальных данных с аналитическими выражениями, описывающими гальваниомагнитные свойства графита, позволили разделить эффекты, связанные с решеткой (время релаксации) и с электронами проводимости, и уточнить параметры энергетического спектра, положенные в основу теоретической модели.

Следующий важный шаг был сделан, когда в Группе осцилляционных явлений (впоследствии Лаборатория энергетических спектров квазичастич), руководимой Е.С. Ицкевичем, удалось наблюдать изменение характера зависимости магнетосопротивления в кадмии, которое свидетельствовало о теоретически предсказанном ранее топологическом превращении поверхности Ферми (ПФ) [2]. Позднее возникновение нового сечения ПФ в кадмии наблюдалось непосредственно при измерении эффекта де Гааза – ван Альфена под давлением до 2 ГПа [3].

Цинк и кадмий очень близки с точки зрения электронных свойств, фактически они отличаются только отношением осей c/a . Под давлением это отношение у кадмия стремится к отношению c/a цинка. Поэтому имело смысл исследовать свойства обоих этих металлов. Модель поверхности Ферми цинка и кадмия в приближении почти свободных электронов очень близка к реально существующей. Из-за наличия узких энергетических щелей происходит магнитный пробой этих щелей в магнитном поле, и в результате возникает очень сложная картина сечений поверхности Ферми в зависимости от ориентации и величины приложенного магнитного

поля. Вычисления зонной структуры показывают, что при использовании нелокального приближения с учетом влияния d-зоны в третьей и четвертой зонах исчезают очень большие электронные части поверхности Ферми, расположенные вблизи точки L зоны Бриллюэна. Для получения правильной картины зонной структуры проводились систематические исследования при нормальных и высоких давлениях. Принципиальный вопрос о существовании или отсутствии электронных частей ПФ вблизи точки L был решен в пользу их отсутствия (что подтвердило нелокальную модель) только из анализа величины и знака барических коэффициентов для сечений ПФ, которые могли бы быть отождествлены с наблюдавшимися частотами осцилляций.

Прямая информация о виде поверхности Ферми, а также о ее деформации под давлением, может быть получена из осцилляционных явлений. Аппаратура, разработанная для измерения эффекта де Гааза – ван Альфена в импульсных и стационарных магнитных полях при воздействии гидростатического давления [4], позволила в условиях истинной гидростатики измерять сдвиг фазы осцилляций, непосредственно связанный с барическим коэффициентом площади сечения ПФ $d \ln S/dP$. С помощью методики прецизионного измерения эффективной массы m^* было обнаружено, что эффективная масса нового сечения поверхности Ферми Cd, возникающего под давлением, существенно отличается от величины m^* , полученной методом циклотронного резонанса [5]. Предполагалось, что это новое сечение аналогично сечению σ "монстра" в цинке (рис. 1). Подробное исследование эффективных масс для сечения σ в цинке показало, что при измерении с помощью разных методик эффективные массы для всех других сечений совпадают, в то время как для масс, связанных с сечением σ , наблюдается отличие.

Анализ всех связанных с этим расхождением явлений привел к выводу, что сечение "монстра" σ является особым сечением поверхности Ферми. Была предложена теория эффекта де Гааза – ван Альфена для особых сечений [6], из которой следует, что такое сечение не экстремально при значении квазимпульса $p_z = p_z^0$ (первая производная площади сечения S не равна нулю), но обращается в нуль вторая производная от S . Для такого особого сечения выражение Либшица – Косевича для осциллирующего магнитного момента претерпевает существенные изменения. В частности, появляется осциллирующий член в виде функции Эйри

$$\text{Ai}\left[\left(\frac{nc}{e\hbar H}\right)^{2/3} \left(\frac{2}{S'''}\right)^{1/3} S'\right]$$

(здесь n , e — электронные плотность и заряд, \hbar — постоянная Планка, c — скорость света, H — магнитное поле, S' и S''' — 1-я и 3-я производные площади сечения). При положительном аргументе функция Эйри экспоненциально затухает, а при отрицательном осциллирует, т.е. ее поведение определяется знаком произведения $S'''S'$. В цинке знак этого произведения отрицательный, сечение σ хорошо наблюдается и демонстрирует немонотонную зависимость амплитуды осцилляций от магнитного поля. В кадмии при нормальных условиях $S'''S' > 0$, под давлением "монстр" деформируется и произведение $S'''S'$ становится отрицательным. Расчеты показывают, что эффективная масса экстремальна не при тех значениях квазимпульса, при которых реализуется особое сечение. В эффекте де Гааза – ван Альфена измеряется

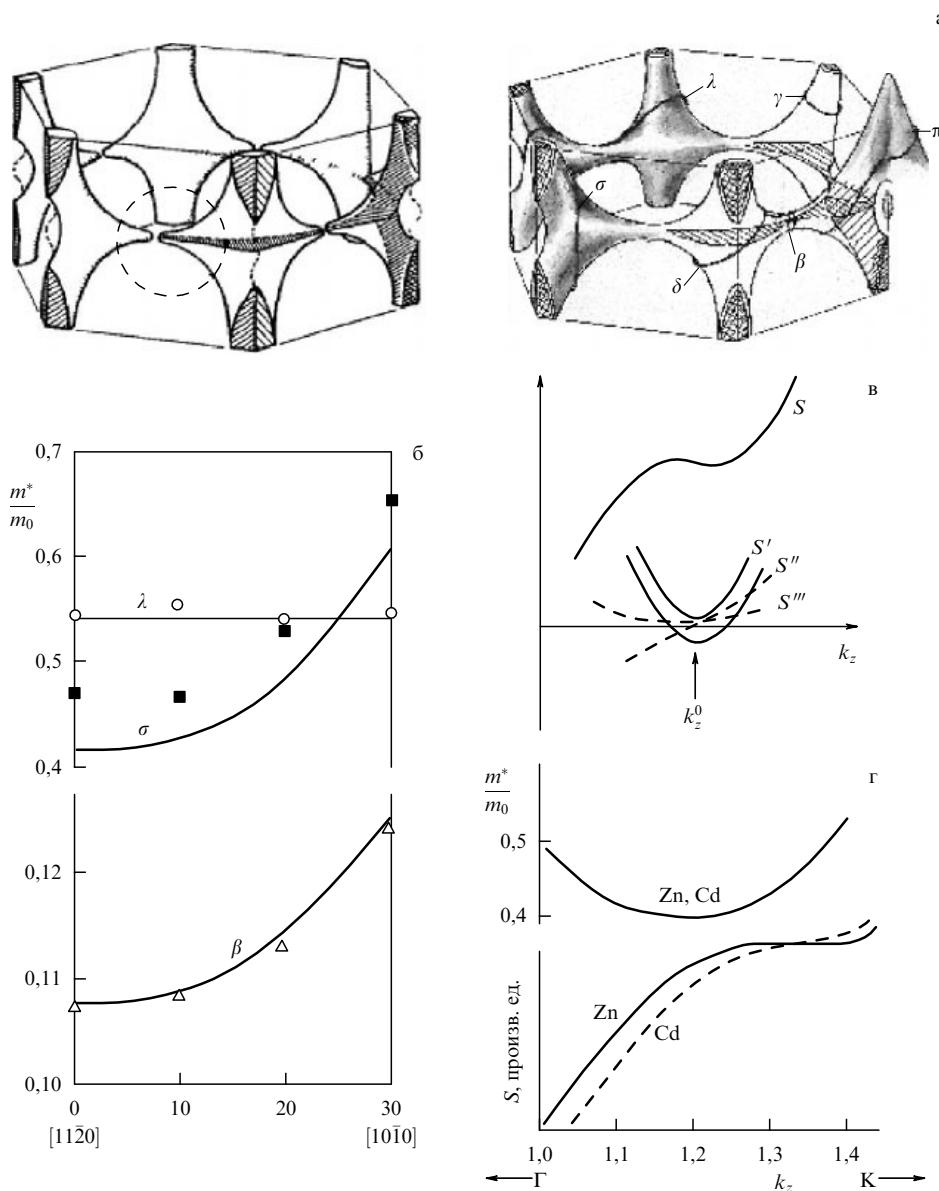


Рис. 1. (а) Поверхность Ферми кадмия (слева) и цинка (справа) при нормальном давлении. Под давлением у ПФ кадмия появляется перемычка (в области, отмеченной кружком). (б) Сравнение эффективных масс, измеренных по эффекту де Гааза – ван Альфена (символы) и по циклотронному резонансу (сплошные линии) для разных участков ПФ. (в) Особое сечение $S(k_z)$ и его производные. (г) Особые сечения и их эффективные массы.

масса, связанная с наблюдаемым особым сечением, а в циклотронном резонансе наблюдается экстремальная эффективная масса. Отсюда и различие этих масс (см. рис. 1).

Переход, связанный с изменением топологии поверхности Ферми, можно назвать электронным фазовым переходом 2,5 рода, и появление новой ветви в электронной плотности состояний при таком переходе приводит к тому, что особенности наблюдаются в поведении всех кинетических явлений. Одним из наиболее чувствительных и сравнительно простых методов исследования этих явлений оказалось измерение термо-ЭДС под давлением, позволяющее различить типы переходов. Как показали измерения температурных зависимостей продольной и поперечной термо-ЭДС кадмия в температурном интервале 4–300 К под давлением до 3 ГПа [7], при

$P < 1,2$ ГПа две кривые более или менее подобны друг другу, а при $P > 2$ ГПа кривая поперечной термо-ЭДС имеет положительную аномалию знака. Наблюдался положительный всплеск величины термо-ЭДС, обусловленный переходом 2,5 рода — возникновением дырочной перемычки.

Работы по фазовым переходам 2,5 рода не только доказали их наличие, но и послужили стимулом к расширению арсенала измерительных методик, адаптированных к условиям высоких давлений, а это, в свою очередь, привело к расширению спектра объектов исследования и способствовало внедрению техники высоких давлений как инструментального метода изучения наиболее актуальных проблем физики твердого тела. Эти методические разработки, помимо уже упоминавшихся резистивных, гальваномагнитных и термоэлект-

рических измерений, включали туннельные, электронно-оптические и нейтронографические измерения под давлением.

Исследования туннельных контактов Pb/Al, Sn/Al, In/Al, проведенные при низких температурах под давлением, позволили установить, какая из существовавших в то время моделей наиболее адекватно описывает связь между критической температурой и непосредственно измеряемой шириной сверхпроводящей щели [8].

С методической точки зрения можно разделить диапазон давлений, в котором проводятся низкотемпературные исследования электронного транспорта, на две области: до 3 ГПа — гидростатическое давление, и область более высоких давлений — "квазигидростатика" (до P порядка мегабар). В наших исследованиях используются, соответственно, два типа камер: камера фиксированного давления типа цилиндр–поршень и камера типа "тороид", нагружаемая (при комнатной температуре) с помощью мини-пресса, помещенного непосредственно в криостат. Для камер первого типа адаптация наиболее современных измерительных мето-

дов к условиям высоких давлений относительно проста, но в диапазоне до 3 ГПа круг задач по необходимости ограничен выбором объектов, в которых влияние давления достаточно заметно. В первую очередь к таким объектам относятся полупроводниковые и полуметаллические системы, где изменение энергетических зон под давлением сопоставимо по масштабу с энергией Ферми носителей.

С этой точки зрения характерным является поведение полупроводников с тетраэдрическими связями, к которым относятся Ge, Si, соединения $A^{III}B^V$, почти все $A^{II}B^{VI}$ и некоторые $A^{I}B^{VII}$. Зона проводимости этих полупроводников является многодолинной и состоит из сфероида с центром в точке Γ зоны Бриллюэна, шести эллипсоидов с центрами в точках X и восьми полуэллипсоидов в точках L. У всех этих листов ПФ соответствующие долины под давлением смещаются по энергии почти одинаково с коэффициентами соответственно 10, -1 и 5 мэВ кбар⁻¹, но при нормальном давлении их относительное расположение по энергии варьируется (рис. 2). Так, например, у GaAs щель прямая (минимум в точке Γ),

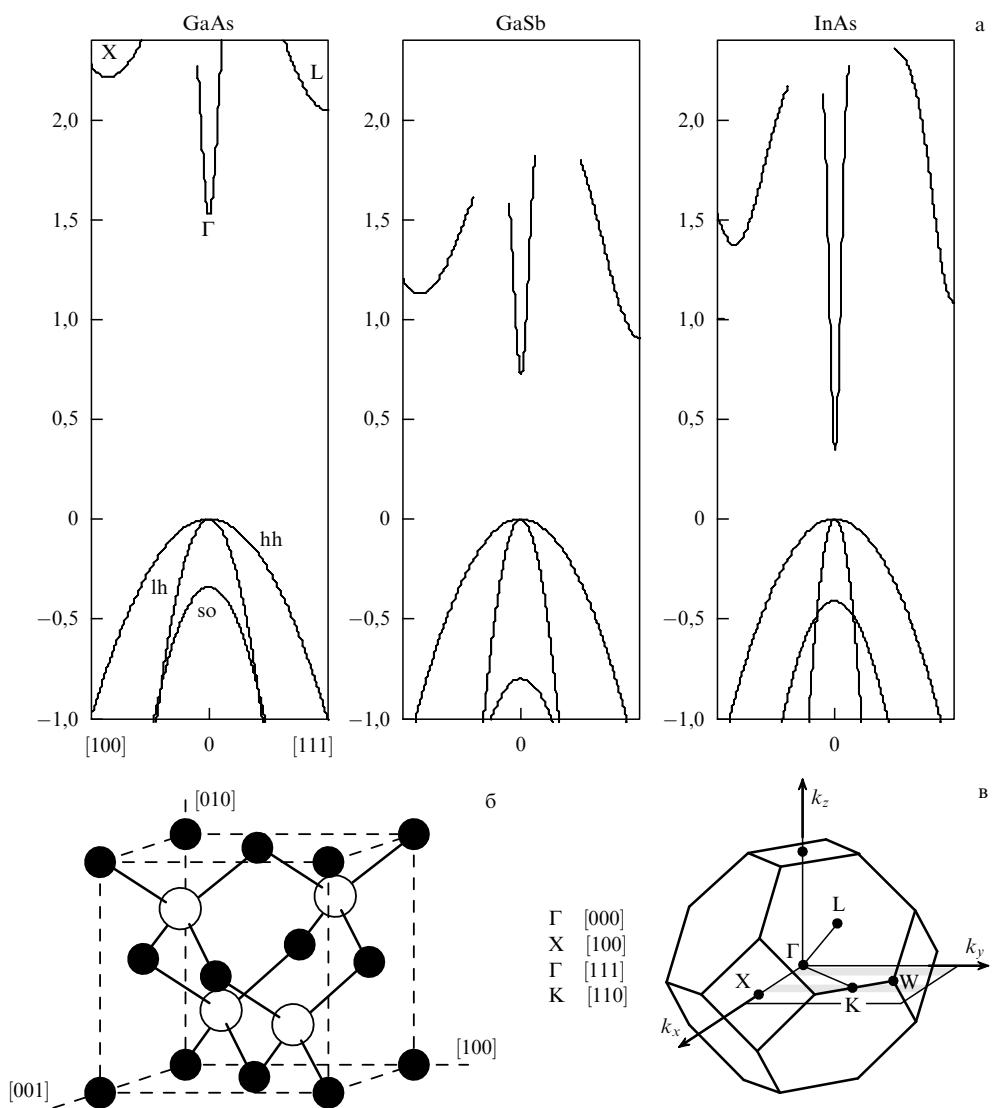


Рис. 2. (а) Влияние давления на зонную структуру некоторых соединений $A^{III}B^V$; lh и hh — соответственно зоны легких и тяжелых дырок, so — зона, отщепившаяся в результате спин-орбитального взаимодействия. (б) Элементарная ячейка GaAs; ● — Ga, ○ — As. (в) Точки высокой симметрии в первой зоне Бриллюэна.

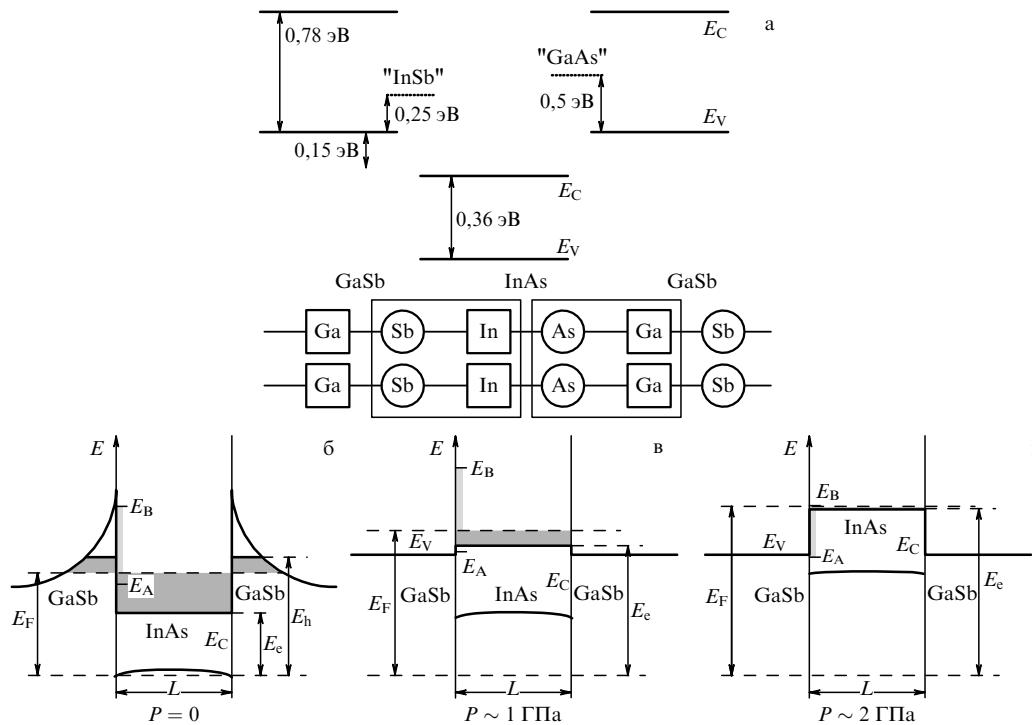


Рис. 3. (а) Расположение краев зон в системе GaSb/InAs/GaSb с квантовой ямой и формирование двух типов интерфейса. (б–г) Схема влияния давления и поверхностных донорных состояний на концентрацию носителей. E_V и E_C — валентная зона и зона проводимости; E_B и E_A — зоны связывающих и антисвязывающих состояний; E_e и E_h — 1-я зона размерного квантования электронов и дырок, соответственно; E_F — уровень Ферми.

а Ge и Si соответственно "L-долинный" и "X-долинный" полупроводники с непрямой щелью. В результате, прикладывая давление порядка 2 ГПа, можно, например, привести зонную структуру Ge к виду, соответствующему Si.

Это обстоятельство было использовано в туннельных исследованиях Ge под давлением, в которых были определены микроскопические константы Гроенайзена для фононных ветвей в направлениях [111] и [100] [9].

Широкие перспективы открыло применение высоких давлений к исследованию двумерного электронного газа в квантовых ямах на основе гетеропереходов GaSb/InAs/GaSb. В такой квантовой яме без давления край зоны проводимости InAs располагается ниже края валентной зоны GaSb, поэтому в этой системе возникают пространственно разделенные электронно-дырочные слои, причем концентрация электронов в яме больше концентрации дырок в барьерах благодаря ионизации поверхностных состояний на интерфейсе. Приложение давления приводит к тому, что дно ямы поднимается и сначала исчезают дырки, а по мере приближения дна ямы к уровню поверхностных состояний, электронная концентрация уменьшается до нуля (рис. 3). Такой переход от "полуметаллического" состояния с двумя типами носителей к "полупроводниковому" с одним типом носителей и далее к состоянию изолятора проявлялся под давлением в осцилляциях магнитосопротивления. Кроме того, поскольку, в зависимости от порядка нанесения слоев в методе молекуларно-лучевой эпитаксии можно было формировать два различных типа интерфейса — "GaAs" и "InSb" — из измерений под давлением удалось определить спектры поверхностных состояний для обоих типов интерфейса [10].

Описанная возможность изменять концентрацию носителей с помощью приложения высокого давления без изменения степени легирования была использована далее при исследованиях двумерной электронной системы в GaAs с приповерхностным слоем б-легирования кремнием [11]. Это оказалось возможным благодаря тому, что примеси замещения — Si, Sn, Te — формируют так называемые DX-центры, положение которых привязано к X-долине зоны проводимости. Электроны в квантовой яме в результате сближения Г-долины с уровнем DX-центров локализуются на последних, и их концентрация уменьшается, что приводит к возрастанию роли взаимодействия и к увеличению корреляционных эффектов (рис. 4). Такой кроссовер от металлического к диффузионному режиму проводимости сопровождается появлением щели в плотности состояний на уровне Ферми, как было показано одновременными измерениями сопротивления б-слоя и спектров нормального туннелирования в б-слой. Следует отметить, что, в отличие от магнитотранспортных измерений, туннелирование позволяет не только регистрировать положение заполненных уровней размерного квантования, но и определять зависимость от давления положения незаполненных вышележащих уровней размерного квантования.

Интересную возможность предоставляет давление в качестве инструмента для изменения эффективной размерности при исследованиях одномерных систем семейства MX_3 ($M = \text{Ta}, \text{Nb}; X = \text{S}, \text{Se}$). Вещества данной группы представляют собой сильно анизотропные трехмерные (3D) проводники, состоящие из проводящих цепочек, слабо связанных ван-дер-ваальсовским взаимодействием. В отличие от 3D металлов, электронные

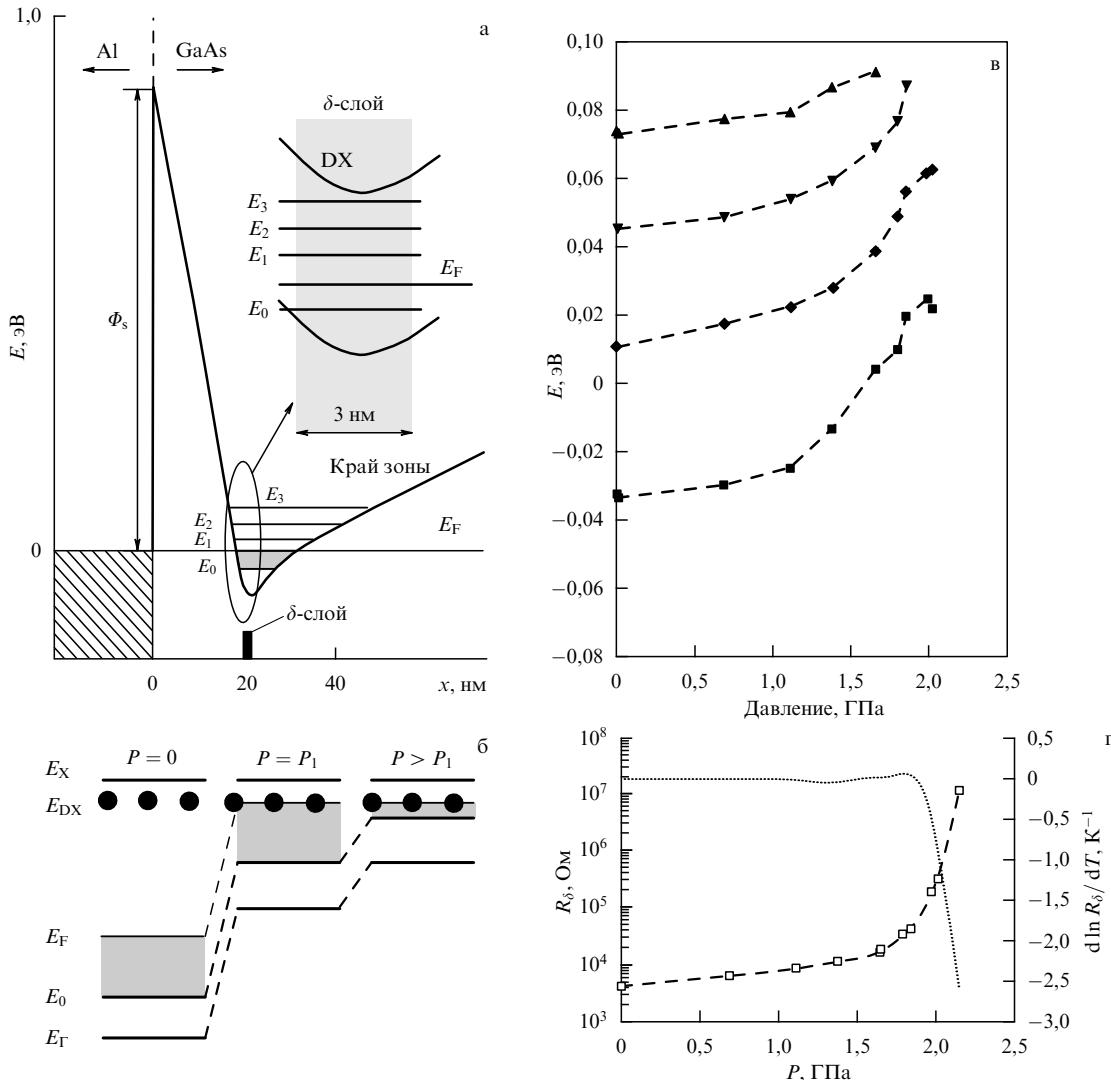


Рис. 4. (а) Профиль потенциала вблизи интерфейса и система уровней размерного квантования. (б) Изменение относительного расположения характерных энергетических уровней под давлением; E_X — край X-долины, E_{DX} — уровень DX-центров, E_F — уровень Ферми, P_1 — давление, при котором уровень Ферми выходит на уровень DX-центров, E_0 — край нижней подзоны размерного квантования, $E_{1,2,3}$ — последующие зоны размерного квантования, Φ_s — высота потенциального барьера, E_Γ — край зоны проводимости (Γ -долина). (в) Барическая зависимость положения подзон размерного квантования, полученная из туннельных спектров. (г) Зависимость сопротивления R_δ (—□—) и температурного коэффициента сопротивления δ -слоя (пунктир) от давления.

свойства которых хорошо описываются теорией фермий-жидкости Ландау, в одномерной (1D) системе одноэлектронные возбуждения отсутствуют, и элементарными возбуждениями являются коллективные зарядовые и спиновые моды. Такое состояние называется жидкостью Латтингджа. С другой стороны, в квазиодномерных проводниках обычно электрон-фононное взаимодействие приводит к пайерлсовскому фазовому переходу, в результате которого возникает состояние с волной зарядовой плотности (ВЗП). Было известно, что соединения семейства MX_3 обладают существенно различными электронными свойствами. Так, $TaSe_3$ является металлом; в $NbSe_3$ происходят переходы с образованием ВЗП, однако этот материал сохраняет металлическую проводимость в области низких температур; в TaS_3 образование ВЗП при температуре 220 К приводит к полной диэлектризации электронного спектра; NbS_3 и при низкой, и при комнатной температуре проявляет диэлектрические свойства. Таким образом, "усиление" металличес-

кого характера проводимости происходит в последовательности: $NbS_3 \rightarrow TaS_3 \rightarrow NbSe_3 \rightarrow TaSe_3$.

Проведенные в Институте радиоэлектроники РАН измерения температурной и полевой зависимости проводимости квазиодномерных проводников TaS_3 и $NbSe_3$ с поперечным сечением размером в десятки-сотни нм обнаружили переход от металлического поведения при комнатной температуре (3D поведение) к неметаллическому поведению ниже 50 – 100 К (1D поведение) как с исчезновением состояния с ВЗП, так и с его сохранением, причем уменьшение сечения нитевидных кристаллов способствовало ослаблению металлического характера проводимости. Поэтому для нас представляло интерес исследовать влияние давления на проводимость квазиодномерного "изолятора" NbS_3 с тем, чтобы уменьшить расстояние между цепочками и проверить существующие представления о физических механизмах проводимости. Согласно этим представлениям, примеси в одномерных цепочках образуют туннельные барьеры, которые разби-

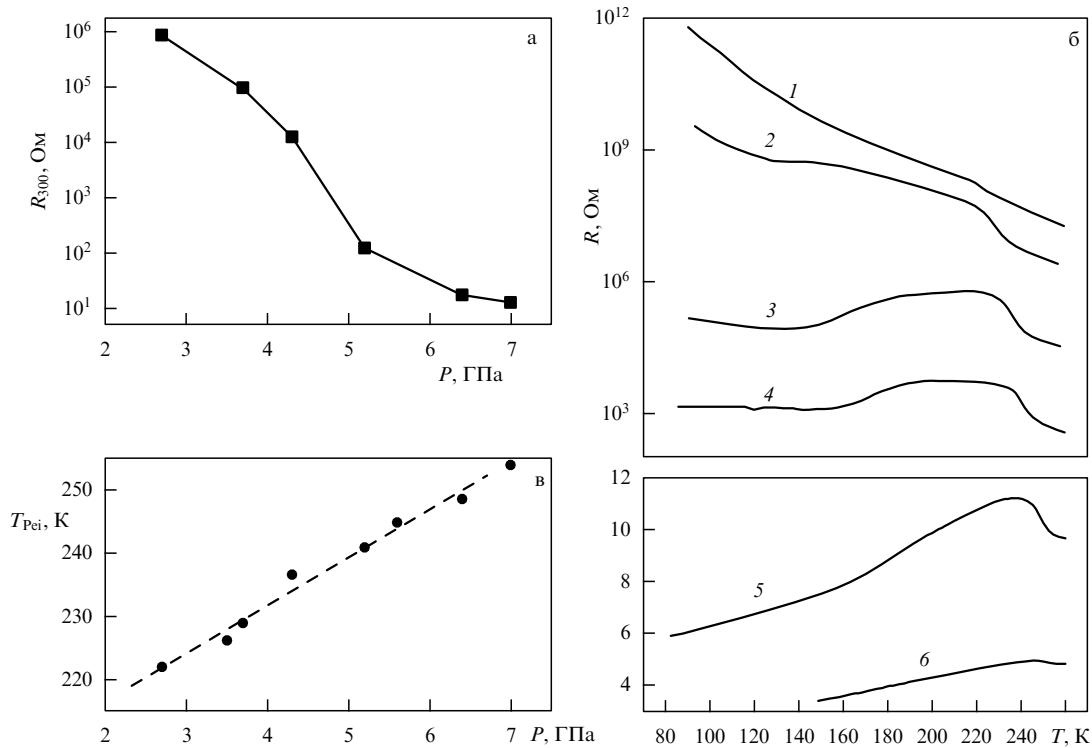


Рис. 5. (а) Зависимость сопротивления NbS_3 при комнатной температуре от давления. (б) Температурная зависимость сопротивления NbS_3 при давлениях 2,7 ГПа (1), 3,7 ГПа (2), 4,3 ГПа (3), 5,2 ГПа (4), 6,4 ГПа (5) и 7,0 ГПа (6). (в) Барическая зависимость температуры пайерлсовского перехода. Пунктирная кривая соответствует $T^* \approx 7,5P + 202$.

вают цепочки на сегменты, а состояние с жидкостью Латтингдера может существовать, если интеграл перескока электронов между цепочками меньше, чем энергия размерного квантования в сегментах цепочек между примесями. Так как с увеличением давления интеграл перескока должен возрастать, разумно было ожидать, что с ростом давления должно происходить исчезновение ВЗП и переход к 3D поведению. Такое поведение, действительно, было впервые экспериментально обнаружено в нитевидных кристаллах соединения NbS_3 [12], проводимость которого при комнатной температуре возрастает более чем на 5 порядков при приложении квазигидростатического давления 6 ГПа, а температурный коэффициент сопротивления меняет знак. Кроме того, на температурной зависимости сопротивления наблюдается скачок, напоминающий пайерлсовский переход, положение которого линейно зависит от температуры (рис. 5).

В области квазигидростатических давлений возникновение структурных фазовых переходов позволяет расширить класс экспериментально исследуемых объектов за пределы реально существующих в нормальных условиях материалов. Основное содержание работы в этом направлении [13] связано с обнаружением и исследованием сверхпроводящих фаз высокого давления "природных" сверхпроводников: таллия, свинца, диселенида ниобия, а также ряда веществ, не проявляющих сверхпроводящих свойств при нормальном давлении: висмута, сурьмы, системы сплавов висмут–сурьма, бария, некоторых полупроводников и полупроводниковых соединений (теллур, теллурид висмута, кремний и германий, антимониды галлия и индия). Критическая температура сверхпроводящего перехода для фаз высокого

давления перечисленных веществ зависит от типа и исходной концентрации носителей тока. Как показали исследования под давлением [14], магнетосопротивление является чувствительным индикатором при регистрации фазовых переходов, даже в тех случаях, когда скачок удельного электросопротивления мал или вообще отсутствует. Это, в свою очередь, позволяет из гальваномагнитных измерений определять зависимость концентрации носителей тока в каждой из фаз высокого давления.

К этому же направлению можно отнести изучение свойств метастабильных фаз высокого давления при нормальном давлении. Применение высоких давлений при синтезе позволяет реализовать участки фазовой диаграммы, недоступные при атмосферном давлении. Иногда только таким образом удается получать определенные соединения. В частности, благодаря высокому парциальному давлению кислорода или другого металлоида, удается добиться стабилизации катионов в сильно окисленном состоянии. Если переход между фазами высокого и низкого давления сопровождается существенной структурной перестройкой (например, возникновением или разрывом связей), то можно получить метастабильную фазу в "закаленном" состоянии, перед снятием давления предварительно охладив соединение, устойчивое при высоком давлении. К таким веществам, в частности, относятся соединения с перовскитной структурой с большими координационными числами для катионов, соединения с высоким содержанием кислородных связей, а также соединения, фаза высокого давления которых обладает более высокой симметрией. Это, например, сверхпроводник Nb_3Ge с рекордной для 1970-х гг. критической температурой T_c и высоко-

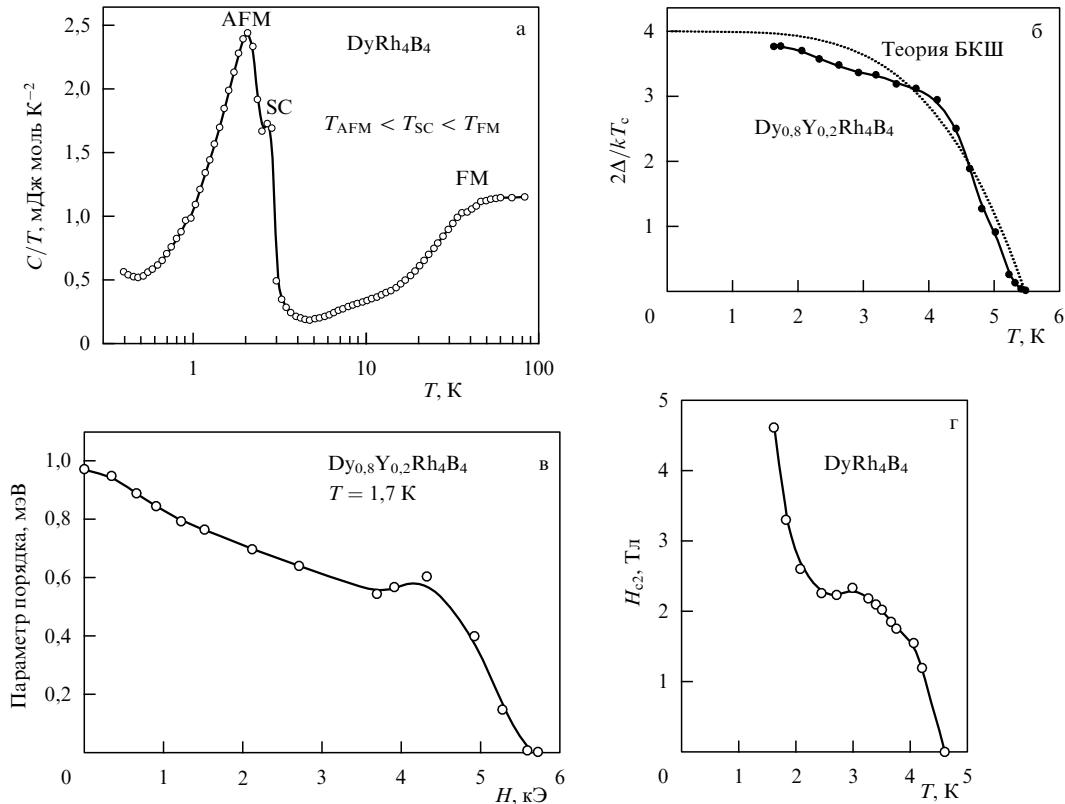


Рис. 6. (а) Температурная зависимость теплоемкости DyRh_4B_4 . FM, AFM и SC обозначают точки ферромагнитного, антиферромагнитного и сверхпроводящего переходов. (б) Сравнение измеренной температурной зависимости энергетической щели с теорией БКШ. (в) Полевая зависимость параметра порядка в $\text{Dy}_{0.8}\text{Y}_{0.2}\text{Rh}_4\text{B}_4$. (г) Температурная зависимость второго критического поля для DyRh_4B_4 .

температурные сверхпроводники на основе ртути, обладающие на сегодня наиболее высокими T_c . Применение высоких давлений при синтезе композитных материалов позволяет также значительно повысить такую важную характеристику сверхпроводящих материалов, как плотность критического тока.

Одной из наиболее интересных и важных задач в физике конденсированного состояния является изучение существования сверхпроводимости и магнетизма — двух коллективных макроскопических квантовых явлений. Температурная зависимость теплоемкости синтезированных в ИФВД РАН метастабильных фаз высокого давления магнитных сверхпроводников $(\text{Dy}, \text{Y})\text{Rh}_4\text{B}_4$ указывает на наличие трех фазовых переходов: антиферромагнитного, сверхпроводящего и ферромагнитного, причем $T_{\text{AFM}} < T_{\text{SC}} < T_{\text{FM}}$ [15].

Температурная зависимость энергетической щели как по форме, так и по величине заметно отличается от предсказанной теорией БКШ. Обнаружено также, что полевая зависимость энергетической щели, как и характеристика зависимости второго критического поля, также существенно нетипичны: в определенном интервале внешнее магнитное поле не подавляет, а, напротив, увеличивает число сверхпроводящих носителей. Все это позволяет высказать предположение об ином механизме сверхпроводимости, возможно, с участием триплетного спаривания (рис. 6).

В настоящем докладе перечислена лишь часть реализованных возможностей, которые предоставляет применение высоких давлений в качестве инструмента для изучения электронного транспорта в системах, где про-

являются эффекты взаимодействия между квазичастицами электронной, фононной и спиновой подсистем (свойства которых, в свою очередь, могут существенно зависеть от наличия дефектов кристаллической решетки), а также применение высоких давлений для синтеза таких материалов. Арсенал измерительных методик включает резистивные, тунNELьные, гальваномагнитные, термоэлектрические, электронно-оптические и нейтронографические измерения под давлением. Эти работы составляют основное направление исследований Лаборатории низких температур, генетически связанный с упомянутыми выше подразделениями ИФВД, они проводятся в тесном контакте с Институтом радиоэлектроники РАН и Лабораторией сильных магнитных полей Польской академии наук при поддержке РФФИ и Программы Президиума РАН.

Список литературы

- Архипов Р Г и др. *ЖЭТФ* **44** 1964 (1963) [Arkhipov R G et al. Sov. Phys. JETP **17** 1321 (1963)]
- Ицкевич Е С, Вороновский А Н *Письма в ЖЭТФ* **4** 226 (1966) [Itskovich E S, Voronovskii A N JETP Lett. **4** 154 (1966)]
- Ицкевич Е С, Гапотченко А Г, Вороновский А Н, Буд'ко С Л *ЖЭТФ* **86** 778 (1984) [Itskovich E S, Gapotchenko A G, Voronovskii A N, Bud'ko S L Sov. Phys. JETP **59** 454 (1984)]
- Вентцель В А и др. *ЖЭТФ* **65** 2445 (1973) [Venttsel' V A et al. Sov. Phys. JETP **38** 1220 (1974)]; Бударин А Г, Вентцель В А, Руднев А В *ЖЭТФ* **75** 1706 (1978) [Budarin A G, Venttsel' V A, Rudnev A V Sov. Phys. JETP **48** 858 (1978)]
- Бударин А Г, Вентцель В А, Руднев А В *ФНТ* **12** 312 (1986) [Budarin A G, Venttsel' V A, Rudnev A V Sov. J. Low Temp. Phys. **12** 177 (1986)]

6. Вентцель В А, Кочкин А П, Руднев А В *ФНТ* **13** 484 (1987) [Venttsel' V A, Kochkin A P, Rudnev A V *Sov. J. Low Temp. Phys.* **13** 273 (1987)]
7. Крайденов В Ф, Ицкевич Е С *ФТТ* **37** 405 (1995)
8. Заваринский Н В, Ицкевич Е С, Вороновский А Н *ЖЭТФ* **60** 1408 (1971) [Zavaritskii N V, Itskevich E S, Voronovskii A N *Sov. Phys. JETP* **33** 762 (1971)]
9. Вороновский А Н, Дижур Е М, Ицкевич Е С *ЖЭТФ* **77** 1119 (1979) [Voronovskii A N, Dizhur E M, Itskevich E S *Sov. Phys. JETP* **50** 564 (1979)]
10. Вороновский А Н, Дижур Е М, Ицкевич Е С, Каширская Л М, Стредлинг Р А *ФТТ* **39** 723 (1997) [Voronovskii A N, Dizhur E M, Itskevich E S, Kashirskaya L M, Stradling R A *Phys. Solid State* **39** 637 (1997)]
11. Дижур Е М, Вороновский А Н, Федоров А В, Котельников И Н, Дижур С Е *Письма в ЖЭТФ* **80** 489 (2004) [Dizhur E M, Voronovskii A N, Fedorov A V, Kote'nikov I N, Dizhur S E *JETP Lett.* **80** 433 (2004)]
12. Дижур Е М, Ильина М А, Зайцев-Зотов С В *Письма в ЖЭТФ* **86** 141 (2007) [Dizhur E M, Il'ina M A, Zaitsev-Zotov S V *JETP Lett.* **86** 132 (2007)]
13. Ильина М А, Ицкевич Е С *ФТТ* **17** 154 (1975)
14. Вентцель В А и др. *ФТТ* **20** 3178 (1978)
15. Бурханов Г С и др. *Неорганические материалы* **41** 676 (2005) [Burkhanov G S et al. *Inorganic Mater.* **41** 585 (2005)]

PACS numbers: 71.15.-m, 74.20.-z, 75.10.-b
 DOI: 10.3367/UFNr.0178.200810m.1118

Теоретические исследования конденсированных сред

В.Н. Рыжов, А.Ф. Барабанов,
 М.В. Магницкая, Е.Е. Тареева

Доклад посвящен краткому описанию основных направлений исследования конденсированных систем, проводившихся в Теоретическом отделе Института физики высоких давлений РАН за 50 лет существования института.

В 1960-е годы сотрудники Теоретического отдела ИФВД РАН одними из первых в нашей стране начали применять первоосновные (независимые от эксперимента, т.е. без использования подгоночных параметров) методы компьютерных расчетов для изучения физических свойств и фазовых превращений в твердых телах, в том числе при высоких давлениях. Эти исследования проводятся, как правило, в тесном сотрудничестве с экспериментаторами, причем сравнение теории и эксперимента используется для выяснения физических причин наблюдаемых явлений. Наряду с известными материалами исследуются новые фазы высокого давления, впервые полученные в ИФВД РАН. Начиная с 1960–1970 гг. теоретиками ИФВД РАН развивались и совершенствовались соответствующие расчетные методы на основе теории функционала плотности, такие как методы присоединенных плоских волн, Корринги–Кона–Ростокера и их различные модификации и обобщения.

В работах Р.Г. Архипова, Е.С. Алексеева и А.П. Кочкина [1] изучалась взаимосвязь электронной структуры и фазовых превращений в простых металлах под давлением при $T = 0$. В этих ранних расчетах использовался приближенный метод сферических ячеек Вигнера–Зейтца, в котором элементарная ячейка заменяется равновеликой сферой. Был получен фазовый переход с изменением объема в K, Rb и Cs, который объяснялся в

терминах электронного s–d-перехода, т.е. изменения взаимного расположения s- и d-зон при сжатии. Недавно это направление вновь стало актуальным в связи с исследованиями новых низкосимметричных фаз высокого давления в простых металлах, открытых благодаря совершенствованию экспериментальной техники. В настоящее время в ИФВД РАН с помощью современных теоретических методов (в частности, метода первоосновного псевдопотенциала) не только проводятся точные расчеты структурных последовательностей в простых металлах под давлением при $T = 0$, но и исследуются P – T фазовые диаграммы при конечных температурах $T \neq 0$ на основе вычисления фононных спектров методом линейного отклика [2].

М.В. Магницкой совместно с группой зарубежных исследователей [3] выполнены расчеты электронных и фононных спектров, а также электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) для недавно открытой металлической фазы высокого давления серы S-IV, в которой наблюдается несоизмеримая модуляция положений атомов в направлении [010] (волна зарядовой плотности, ВЗП). Первопринципный расчет позволил получить правильное решение кристаллической структуры модулированной фазы S-IV. Переход в ВЗП-состояние можно рассматривать как искажение более плотной фазы S-V (кристаллическая структура типа β -Ро). Расчет показал, что при понижении давления в структуре β -Ро происходит смягчение одной из поперечных фононных мод на векторе \mathbf{q}_{CDW} . При дальнейшем снижении давления до 135 ГПа частота данной моды зануляется, $\omega(\mathbf{q}_{CDW}) = 0$, что отвечает неустойчивости фазы S-V относительно перехода в фазу S-IV, где этот нестабильный фонон "заморожен" в виде ВЗП. Положение минимума фононной моды очень хорошо согласуется с экспериментальным вектором модуляции \mathbf{q}_{CDW} . Чтобы проанализировать роль взаимодействия электронов с мягкой модой, были вычислены вклады различных фононных мод в матричные элементы ЭФВ. Установлено, что вклад мягкой моды имеет максимальное значение на векторе \mathbf{q}_{CDW} . Это означает, что наблюдаемый экспериментально при $p \approx 150$ ГПа скачок температуры сверхпроводящего перехода T_c от 14 до 17 К, по-видимому, обусловлен возрастанием при $p > p_{CDW}$ плотности электронных состояний на уровне Ферми и появлением большого вклада в T_c от взаимодействия электронов с мягкой модой. Этот скачок, а также последующее возрастание T_c в интервале до $P \approx 200$ ГПа, объясняются конкуренцией между частотой мягкой моды $\omega(\mathbf{q}_{CDW})$ и константой электрон-фононного взаимодействия [3].

В 1970-е годы, благодаря усовершенствованию методов расчета, в ИФВД РАН начались широкие теоретические исследования переходных и редкоземельных металлов, интерметаллических соединений и сплавов. Подробно изучались магнитные фазовые переходы под давлением, а также такие вопросы, как сплавообразование и устойчивость фаз, гальваномагнитные эффекты, оптические и фотэмиссионные спектры и др. Следует отметить исследования магнитных свойств в двойных и тройных соединениях со структурой фаз Лавеса AB_2 , включая новые магнитные соединения 3d-металлов Fe, Co и Ni с кальцием, впервые синтезированные при высоком давлении в ИФВД РАН [4]. Широкую известность получили работы Н.И. Куликова и др., в которых изучалось влияние давления на свойства магнитоупорядо-