

53(048)

**НАУЧНАЯ СЕССИЯ ОТДЕЛЕНИЯ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ
И АСТРОНОМИИ И ОТДЕЛЕНИЯ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ
АКАДЕМИИ НАУК СССР
(28—29 апреля 1982 г.)**

28 и 29 апреля 1982 г. в физическом институте им. П. Н. Лебедева АН СССР состоялась совместная научная сессия Отделения общей физики и астрономии и Отделения ядерной физики АН СССР. На сессии были заслушаны доклады:

29 апреля

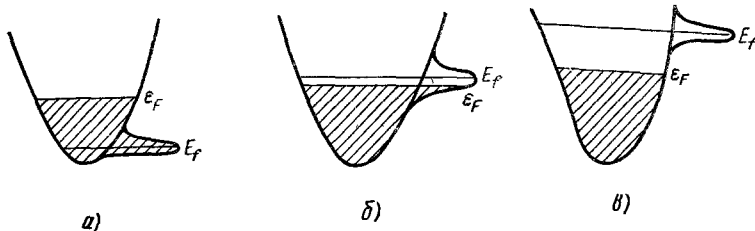
1. Д. И. Хомский. Электронные фазовые переходы и проблема промежуточной валентности.
2. Б. И. Ивлев, Н. Б. Копнин. Теория резистивных состояний в узких сверхпроводящих каналах.
3. К. Б. Ефетов. Теоретико-полевое описание Андерсоновской локализации и проводимость двумерных неупорядоченных металлов.

29 апреля

4. Н. Ф. Шultzга. О развитии в пространстве и времени электродинамических процессов при высокой энергии.
 5. Ю. Л. Соколов, В. П. Яковлев. Измерение лембовского сдвига в атоме водорода.
- Краткое содержание докладов публикуется ниже.

537.311.33(048)

Д. И. Хомский. Электронные фазовые переходы и проблема промежуточной валентности. В последнее время большое внимание привлекает специфический класс редкоземельных соединений, в которых f -уровень лежит вблизи уровня Ферми металла или у дна зоны проводимости полупроводника. В таких системах наблюдается целый ряд своеобразных явлений. Прежде всего относительное положение f -уровня и зоны проводимости можно менять внешним давлением,



Схематический вид зонной структуры в фазе с целой валентностью (а), промежуточной валентностью (б) и целой валентностью, отличающейся на единицу от исходной (в).

легированием, температурой и т. д. Если при этом f -уровень пересечет уровень Ферми или дно зоны проводимости, в системе произойдет электронный фазовый переход: часть электронов перейдет с него в зону проводимости. Симметрия решетки при этом обычно не меняется, но меняется удельный объем, исчезает локализованный магнитный момент f -электрона, меняется проводимость (в частности, возможен переход диэлектрик — металл), испытывают аномалии и другие свойства.

Самое интересное — это то, что обычно после перехода f -уровень остается вблизи уровня Ферми (см. рисунок), так что среднее заполнение этого уровня оказывается нецелым. Такое состояние называют состоянием с промежуточной валентностью (ПВ). Состояния с ПВ характеризуются наличием непосредственно на уровне Ферми ϵ_F узкого резонанса (размытого f -уровня $E_f \approx \epsilon_k$) или пика в плотности состояний с шириной $\Gamma \approx 10^{-2} - 10^{-3}$ эВ, причем концентрация таких резонансных уровней велика,

10^{22} см⁻³. Это и приводит к чрезвычайно сильным аномалиям практически во всех свойствах соединений с ПВ (подробнее см. обзоры 1-3).

При теоретическом анализе этих явлений возникают две проблемы. Первая — описание фазового перехода с изменением валентности: его характера (непрерывный, скачкообразный), механизмов и т. д.; особенно интересен вопрос, почему при переходе, даже I рода, всегда реализуется фаза с ПВ. Другой круг проблем — рассмотрение самой фазы с ПВ, типа основного состояния, элементарных возбуждений, термодинамических и кинетических свойств.

При описании обычно исходят из модели Андерсона для магнитных примесей в металле ⁴, обобщенной на концентрированный случай (так называемая андерсоновская решетка):

$$H = \sum \epsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + E_f \sum f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + \frac{U}{2} \sum f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} f_{i-\sigma}^+ f_{i-\sigma} + \sum (V_{ik} a_{k\sigma}^+ f_{i\sigma} + \text{в. с.}), \quad (1)$$

где $a_{k\sigma}^+$ и $f_{i\sigma}^+$ — соответственно операторы электронов проводимости и f-электронов; при необходимости добавляют кулоновское взаимодействие Gf^+fa+a (модель Фаликова — Кимбалла ⁵) и электрон-решеточное взаимодействие $g_1: f^+f(b^+ + b) + g_2a^+f(b^+ + b)$; b — оператор фонона.

За счет f — s-взаимодействия или взаимодействия с решеткой валентный переход при изменении E_f может стать переходом I рода. Вопрос о характере перехода анализировался во многих работах. В частности, в ⁶ показана важная роль экситонных корреляций (аномальные средние вида $\langle a^+f \rangle$): при их учете переход сглаживается, что стабилизирует состояния с ПВ.

При учете, наряду с f — s-взаимодействием также взаимодействия с однородной деформацией, критерий перехода I рода имеет вид ⁷

$$2G + \left(\frac{\partial E_f}{\partial v} \right)^2 B^{-1} > \rho^{-1} + \pi \tilde{\Gamma}, \quad \tilde{\Gamma} = \pi \rho (V + G \langle a^+f \rangle)^2, \quad (2)$$

где B — модуль упругости, v — удельный объем, ρ — плотность состояний. Оказывается, что здесь скачкообразный переход возможен только за счет решетки ($\partial E_f / \partial v \neq 0$).

К размытию перехода и стабилизации ПВ приводит также учет локальных (поляронных) корреляций в электрон-фононном взаимодействии⁸. Кроме того, взаимодействие с коротковолновыми фононами, приводя к эффективному отталкиванию f-электронов, также стабилизирует фазу с ПВ с пространственными корреляциями (типа вигнеровского кристалла) ²; к тому же приводит и кулоновское отталкивание электронов на разных центрах. В этой ситуации имелись бы два последовательных перехода: из фазы с $n_f \approx 1$ в фазу ПВ с $n_f \approx 1/2$ со сверхструктурой и затем фазу с $n_f \approx 0$. В промежуточной фазе, однако, истинный дальний порядок маловероятен. Оценки показывают, что при реальных значениях параметров нулевые колебания велики, и система скорее похожа на жидкость с ближним порядком. Только при $\Gamma/U_{вз} \sim 10^{-4}$ могла бы реализоваться «кристаллическая» фаза.

Наиболее интересные и нерешенные вопросы связаны со структурой и свойствами самого состояния с ПВ. Простейшая картина типа рис. 1 (виртуальный уровень или пик в плотности состояний $\rho(\epsilon)$ вблизи ϵ_f) качественно описывает ряд экспериментальных результатов: аномально большую сжимаемость в фазе с ПВ, огромную линейную электронную теплоемкость $c = \gamma T$ (γ достигает 10^3 мДж/моль · К²), выход восприимчивости $\chi(T)$ на константу при $T \rightarrow 0$ и т. д. Однако многие детали эксперимента эта картина объяснить не может. В особенности это касается кинетических свойств (проводимость, эффект Холла, термо-э. д. с. и т. д.) Из данных по проводимости, по-видимому, следует, что все вещества с ПВ разбиваются на два класса: соединения, в которых основное состояние является истинно металлическим и описывается ферми-жидкостной картиной, и вещества полупроводникового типа. К первой группе относятся интерметаллические соединения (CePd₃, YbAl₃ и т. д.), а ко второй — видимо, те вещества (SmS, SmB₆, TmSe), которые в фазе с целой валентностью были бы полупроводниками и в которых все электроны проводимости — это электроны, перешедшие туда с f-уровней. Природа щели в этих веществах пока точно не установлена. Возможно, что она имеет просто гибридационный характер; однако гораздо более вероятно, что щель имеет коллективную природу. В частности, она может быть также связана с экситонными эффектами (состояние типа экситонного изолятора ⁹).

В заключение отметим, что системы с ПВ в определенном смысле моделируют общее конденсированное вещество из электронов и ионов: роль тяжелых положительно заряженных ионов здесь играют f-дырки. Как и в обычных системах, здесь в принципе возможны газовая или плазменная фаза (целая валентность, $n_f \text{ hole} \rightarrow 0$), и конденсированная фаза с равновесной плотностью $n_f \text{ hole} \neq 0$; эта фаза в принципе

может быть «жидкой» (ближний порядок) и «кристаллической», с точки зрения электронных свойств она может быть «металлом» либо «диэлектриком». Есть, правда, и существенное отличие: здесь f -электроны или f -дырки и s -электроны — это тождественные частицы, могущие переходить друг в друга. Это может привести к ряду важных следствий и существенно усложняет теоретическое описание этих систем.

ЛИТЕРАТУРА

1. Varma С. М.— Rev. Mod. Phys., 1976, v. 78, p. 219.
2. Хомский Д. И.— УФН, 1979, т. 129, с. 443.
3. Lawrence J. M., Riseborough P. S., Parks R. D.— Rept. Progr. Phys. 1981, v. 44, p. 1.
4. Anderson P. W.— Phys. Rev., 1961, v. 124, p. 41.
5. Falicov L. M., Kimball J. C.— Phys. Rev. Lett., 1969, v. 22, p. 997.
6. Кочарян А. Н., Хомский Д. И.— ЖЭТФ, 1976, т. 71, с. 767; Khomskii D. I., Kocharyan A. N.— Sol. State. Comm., 1976, v. 18, p. 985.
7. Khomskii D. I., Kocharyan A. N., Ovchinnikov P. S. Препринт ФИАН СССР № 190.— Москва, 1980.
8. Хомский Д. И.— Письма ЖЭТФ, 1978, т. 27, с. 352; Sol. State Comm., 1978, v. 27, p. 705.
9. Келдыш Л. В., Копеев Ю. В.— ФТТ, 1964, т. 6, с. 2791.