

СОВЕЩАНИЯ И КОНФЕРЕНЦИИ

538.9(048)

**НАУЧНАЯ СЕССИЯ ОТДЕЛЕНИЯ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ  
И АСТРОНОМИИ И ОТДЕЛЕНИЯ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ  
АКАДЕМИИ НАУК СССР**

**(30 сентября—1 октября 1987 г.)**

30 сентября и 1 октября 1987 г. в Институте физических проблем им. С. И. Вавилова АН СССР состоялась совместная научная сессия Отделения общей физики и астрономии и Отделения ядерной физики АН СССР. На сессии были заслушаны доклады:

*30 сентября*

1. Л. П. Г о р ь к о в. Современное состояние исследований высокотемпературной сверхпроводимости.
2. Дискуссия.

*1 октября*

3. М. И. Кацнельсон, А. В. Трефилов. Плотность электронных состояний и аномалии электронных и решеточных свойств металлов и сплавов.

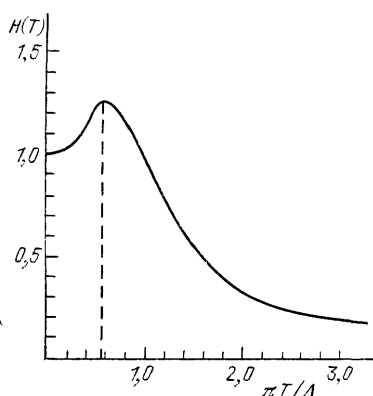
4. В. П. Антропов, В. Г. Вакс, М. И. Кацнельсон, В. Г. Корешков, А. И. Лихтенштейн, А. В. Трефилов. О влиянии близости уровня Ферми к особым точкам зонной структуры на кинетические и решеточные свойства металлов и сплавов.

Краткое содержание двух докладов приводится ниже.

538.915(048)

**М. И. Кацнельсон. А. В. Трефилов.** Плотность электронных состояний и аномалии электронных и решеточных свойств металлов и сплавов. В течение последних двадцати лет было обнаружено аномальное поведение многих физических свойств целых классов материалов: соединения со структурой Al<sub>5</sub>, фазы Шевреля и Лавеса, цериевые и урановые соединения, карбиды и нитриды переходных металлов, многие разупорядоченные сплавы и т.д. Под аномалиями понимаются резкие изменения свойств в узком интервале изменения внешних параметров (концентрация, деформации и др.). Общей чертой электронной структуры этих веществ является наличие узких пиков плотности электронных состояний  $N(E)$  (УП) вблизи уровня Ферми  $E_F$  — одноэлектронной или многоэлектронной природы. В большинстве работ, объясняющих аномалии только электронных свойств, предполагалось, что УП находится на  $E_F$  с точностью до теплового размытия, т. е. несколько сотых эВ. Такое сильное предположение в действительности не является необходимым, а в

некоторых случаях противоречит эксперименту или зонным расчетам. УП, как и вообще особенности  $N(E)$ , могут «действовать на расстоянии», по крайней мере, вплоть до десятых долей эВ до  $E_F$ . В решеточных свойствах (например, модули упругости  $C_{ih}$ ) этот эффект иногда объясняется уже в одноэлектронном приближении, что следует из зонных и псевдопотенциальных расчетов для чистых металлов (см. резюме доклада В. П. Антропова и др. в настоящем номере УФН). Кроме того, существует универсальный многоэлектронный механизм, обеспечивающий «действие УП на расстоянии» в



Температурная зависимость особых вкладов в модули упругости  $\delta C_{ih}(T)/\delta C_{ih}(0) = -H(T)$  и магнитную восприимчивость  $\delta \chi(T)/\delta \chi(0) = H(T)$  в случае сближения заполненного и пустого пиков  $N(E)$ .

$\Delta$  — расстояние между пиками

$\approx 0,3\Delta$  (см. также рисунок). Если  $\Delta$  чувствительно к изменению объема, аномалии испытывает модуль сжатия  $B$  (например, в  $Zr_{1-x}Hf_xV_2$ ,  $SeBe_{13}$  и других цериевых соединениях), если к одной из сдвиговых деформаций, — соответствующий сдвиговый модуль  $C_{ih}$  (например,  $C_{44}$  в сплавах  $Zr-Nb$ ). К такому же (качественно) поведению приводят одночастичные эффекты, связанные с УП; АДЭ приводят к расширению области аномалий, усилению их и сдвигу  $T_m$  в область более низких температур. В случае сближения заполненного и пустого УП («двухпиковая ситуация») обсуждаемые эффекты усиливаются почти в  $E_F/\Delta$  раз. Примером, иллюстрирующим рост  $S$  вследствие АДЭ, служит система  $Pd_{1-x}Fe_x$  (двухпиковая ситуация), где ферромагнетизм возникает при гораздо меньших  $x$ , чем в  $Pd_{1-x}Ni_x$  (однопиковая ситуация).

АДЭ приводит к аномалиям температурных и концентрационных зависимостей коэффициента теплового расширения  $\alpha$ , например, в цериевых и урановых соединениях. Возможно, что инвариантные аномалии связаны не непосредственно с магнитным вкладом  $\chi$ , а с влиянием магнитного упорядочения на положение УП.

Обсуждаемые аномалии не подавляются рассеянием на статическом беспорядке (если не считать его влияния на  $N(E)$ ) и потому могут наблюдаться, в меру размытия УП, в разупорядоченных сплавах, аморфных и жидких металлах. Другой особенностью рассматриваемых аномалий по сравнению с электронными топологическими переходами является их двусторонний характер в меру симметричности УП.

Приближение УП к  $E_F$  приводит к смягчению фононных спектров, росту ангармонических вкладов и усилению тенденции к структурной неустойчивости. Влияние примесей на температуру мартенситного перехода в  $NiTi$

электронных и решеточных свойствах, — аномалии динамического экранирования (АДЭ). При приближении УП к  $E_F$  возрастает вклад соответствующих виртуальных переходов в диэлектрическую проницаемость, определяющую эффективное взаимодействие между квазичастицами на поверхности Ферми, которое непосредственно определяет термодинамические и кинетические свойства.

АДЭ приводит к уменьшению скачка функции распределения на  $E_F$ ,  $Z$  и соответственно к росту эффективной массы  $m^* \sim Z^{-1}$  и электронной теплоемкости при уменьшении расстояния от УП до  $E_F$ ,  $\Delta$ . Хотя  $Z$  непосредственно не входит в  $C_{ih}$  и магнитную восприимчивость  $\chi$ , последние также могут испытывать аномалии:  $C_{ih}$  уменьшается с уменьшением  $\Delta$ , если  $\partial \Delta / \partial \gamma_i \neq 0$  ( $\gamma_i$  — соответствующая деформация), а  $\chi$  растет за счет роста стонеровского обменного усиления  $S$ , если УП связан с локальным магнитным моментом. В этих случаях  $C_{ih}(T)$  имеет минимум, а  $\chi(T)$  — максимум при  $T_m \approx$

может быть объяснено на основе зонных расчетов, демонстрирующих изменение УП при легировании. Близость УП к  $E_F$  может приводить к отрицательному ангармоническому вкладу в решеточную теплоемкость, наблюдаемому экспериментально, например, в  $V_3Si$  и  $V_3Ga$ . Возбуждения (включая фононы) с частотой  $\omega \gtrsim \Delta$  могут испытывать сильное затухание из-за АДЭ. Это может объяснить и гигантское уширение локальных возбуждений  $f$  ионов в  $CeAl_3$ .

УП влияют на температуру сверхпроводящего перехода  $T_c$ : 1) повышают  $T_c$  за счет прямого эффекта виртуальных переходов (механизм Гейли-мана); 2) повышают  $T_c$  за счет смягчения фононных спектров; 3) при больших  $S$  могут понижать  $T_c$  из-за роста парамагнетонного подавления. Известная корреляция высоких  $T_c$  со структурной неустойчивостью может быть связана с тем, что оба эти явления вызваны одной причиной — близостью УП к  $E_F$ .

Таким образом, расчет  $N(E)$  при изменении внешних параметров является эффективным инструментом изучения аномалий свойств материалов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Кацнельсон М. И., Трефилов А. В. // Письма ЖЭТФ. 1984. Т. 40. С. 303; 1985. Т. 42. С. 393; Phys. Lett. Ser. A. 1985. V. 109. P. 109.  
 Vonsovskii S. V., Katsnel'son M. I., Trefilov A. V. // J. Magn. and Magn. Mater. 1986. V. 61. P. 83.  
 Анисимов В. И., Кацнельсон М. И., Лихтенштейн А. И., Трефилов А. В. // Письма ЖЭТФ. 1987. Т. 45. С. 285.

538.915(048)

**В. П. Антропов, В. Г. Вакс, М. И. Кацнельсон, В. Г. Корешков, А. И. Лихтенштейн, А. В. Трефилов.** О влиянии близости уровня Ферми к особым точкам зонной структуры на кинетические и решеточные свойства металлов и сплавов. Системы, в которых уровень Ферми  $\epsilon_F$  лежит вблизи особых точек плотности состояний, например вблизи точек  $\epsilon_c$  электронных топологических переходов (ЭТП), интересны в связи с особенностями и лабильностью их свойств, поскольку уже небольшое изменение внешних параметров — концентрации в сплаве, давления  $p$  и т.п. в них может приводить к резким изменениям. Так, при этом могут резко меняться термо-эд.с., модули сдвига, коэффициенты теплового расширения и др. величины<sup>1-3</sup>.

При этом в анизотропных металлах, например ГПУ, должны возникать большие и противоположные по знаку аномалии в низкотемпературных продольном и поперечном коэффициентах теплового расширения  $\alpha_{||}$  и  $\alpha_{\perp}$ . Если обозначить через  $u_1$  и  $u_2$  деформации, соответствующие изменению объема  $\Omega$  и тетрагональности  $c/a$ :  $du_1 = d \ln \Omega$ ,  $du_2 = d \ln (c/a)$ , а через  $B_{ik}$  — соответствующие им модули в упругой энергии  $E_{упр}$ , то термодинамические выражения для  $\alpha_{||}$  и  $\alpha_{\perp}$  имеют вид

$$\alpha_{||} = \frac{1}{3}(B_{11}B_{22} - B_{12}^2)^{-1} \left[ (B_{22} - 2B_{12}) \frac{\partial S}{\partial u_1} + (2B_{11} - B_{12}) \frac{\partial S}{\partial u_2} \right], \quad (1a)$$

$$\alpha_{\perp} = \frac{1}{3}(B_{11}B_{22} - B_{12}^2)^{-1} \left[ (B_{22} + B_{12}) \frac{\partial S}{\partial u_1} - (B_{11} + B_{12}) \frac{\partial S}{\partial u_2} \right]; \quad (16)$$

здесь  $S$  — энтропия, складывающаяся из электронного вклада  $S_e = \pi^2 N(E_F) T/3$  и фононного  $S_{ph} = 4\pi^4 T^3/5T_D^3$ , где  $T_D$  — температура Дебая. Вблизи ЭТП, т. е. при малых значениях  $\eta = (\epsilon_F - \epsilon_c)/\epsilon_c$ , производные по  $u_i$  от  $N(E_F)$  и  $T_D$  пропорциональны  $\eta^{-1/2}$ , и при обычных, небольших значениях псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия  $V(g)$ , где  $g$  — вектор обратной решетки, т. е. при  $v = |V(g)/\epsilon_F| \ll 1$  имеем