

1988 г. Март

Том 154, вып. 3

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

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 рь к о в. Современное состояние исследований высокотемпературной сверхпроводимости.
2. Дискуссия.

1 октября

3. М. И. Кацнельсон, А. В. Т ре ф и л о в. Плотность электронных состояний и аномалии электронных и решеточных свойств металлов и сплавов.

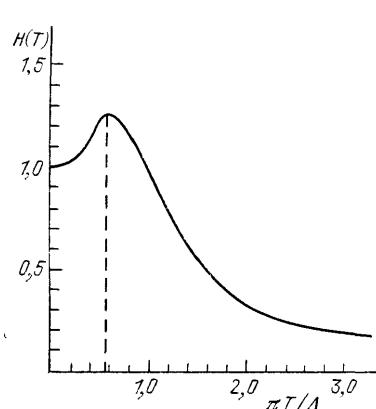
4. В. П. Антропов, В. Г. Вакс, М. И. Кацнельсон, В. Г. Корешков, А. И. Лихтенштейн, А. В. Трефилов. О влиянии близости уровня Ферми к особым точкам зонной структуры на кинетические и решеточные свойства металлов и сплавов.

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 A15, 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_{ik}) 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 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.



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

Δ — расстояние между пиками

$\approx 0.3\Delta$ (см. также рисунок). Аномалии испытывает модуль сжатия B (например, в $Zr_{1-x}Hf_xV_2$, $CeBe_{13}$ и других цериевых соединениях), если к одной из сдвиговых деформаций, —соответствующий сдвиговый модуль C_{ik} (например, C_{44} в сплавах $Zr-Nb$). К такому же (качественно) поведению приводят одиночные эффекты, связанные с УП; АДЭ приводят к расширению области аномалий, усилиению 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/Δ 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 α , например, в цериевых и урановых соединениях. Возможно, что инвариантные аномалии связаны не непосредственно с магнитным вкладом χ , 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 жидкых 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 увеличению тенденции к структурной неустойчивости. Влияние примесей на температуру мартенситного перехода в $NiTi$

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 $\omega \gg \Delta$ 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 Гейликмана); 2) повышают T_c за счет смягчения фононных спектров; 3) при больших S могут понижать T_c из-за роста парамагнитного 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 ϵ_F лежит вблизи особых точек плотности состояний, например вблизи точек ϵ_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-Э.Д.С., модули сдвига, коэффициенты теплового расширения и др. величины¹⁻³.

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 α_{\perp} . Если обозначить через u_1 и u_2 деформации, соответствующие изменению объема Ω 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 α_{\perp} имеют вид

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

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

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