

**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-э.д.с., модули сдвига, коэффициенты теплового расширения и др. величины<sup>1-3</sup>.

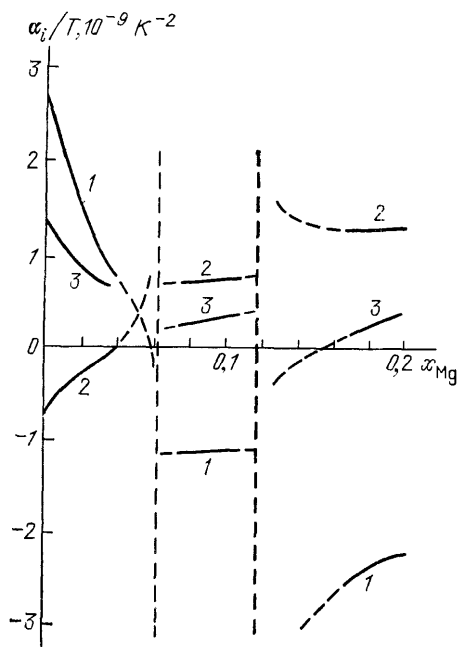
При этом в анизотропных металлах, например ГПУ, должны возникать большие и противоположные по знаку аномалии в низкотемпературных продольном и поперечном коэффициентах теплового расширения  $\alpha_{||}$  и  $\alpha_{\perp}$ . Если обозначить через  $u_1$  и  $u_2$  деформации, соответствующие изменению 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  $E_{\text{упр}}$ , то термодинамические выражения для  $\alpha_{||}$  и  $\alpha_{\perp}$  имеют вид

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

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

здесь  $S$  — энтропия, складывающаяся из электронного вклада  $S_e = \pi^2 N(E_F) T/3$  и фононного  $S_{\text{ph}} = 4\pi^4 T^3/5T_D^3$ , 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  $V(\mathbf{g})$ , где  $\mathbf{g}$  — вектор обратной решетки, т. е. при  $v = |V(\mathbf{g})/\epsilon_F| \ll 1$  имеем

быть отрицательным. Такие аномалии ( $\alpha_{||} > 0$ ,  $\alpha_{\perp} < 0$ ) наблюдались при низких  $T$  в Zn и Cd, для которых зонные расчеты<sup>5,6</sup> указывают на малые значения  $\epsilon_F - \epsilon_c$ .


$$1 - \alpha_{||}^e/T, 2 - \alpha_{\perp}^e/T, 3 - \beta_e/T = (\alpha_e + 2\alpha_{||}^e)/T$$

Для зонных расчетов модулей сдвига  $C_{ij}$  мы пользовались соотношением

$$C_{ij} = \frac{\partial^2 E}{\partial u_i \partial u_j} = \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j} (E_{\text{es}} + E_{\text{h}}) = C_{ij}^{\text{es}} + C_{ij}^{\text{h}}; \quad (2)$$

Результаты зонного расчета зависимости модуля сдвига (в кб)  $C' = (C_{11} - C_{12})/2$  от сжатия  $u = (\Omega_0 - \Omega)/\Omega_0$  в ОЦК металлах

	$u = 0$	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5
Na	7,9 (7,7)	9,1	10,6			19,3
Li	9,2 (11)	9,15	6,3			-27
Ba	20 (23±4)	24	25	1,15 15	-6,2 -299	

В скобках — экспериментальное значение

учтенных в  $E_b$  членов электрон-электронного взаимодействия:  $u = 5/3$ . В рассматривавшихся металлах эта оценка дает хорошее согласие рассчитанных и измеренных (значения в скобках в таблице) модулей  $C'$ . Вычисленные зависимости  $C'$  от сжатия  $u$  в таблице демонстрируют эффекты смягчения модуля сдвига при «наполнении»  $\epsilon_F$  на пик в плотности состояний<sup>2</sup>,

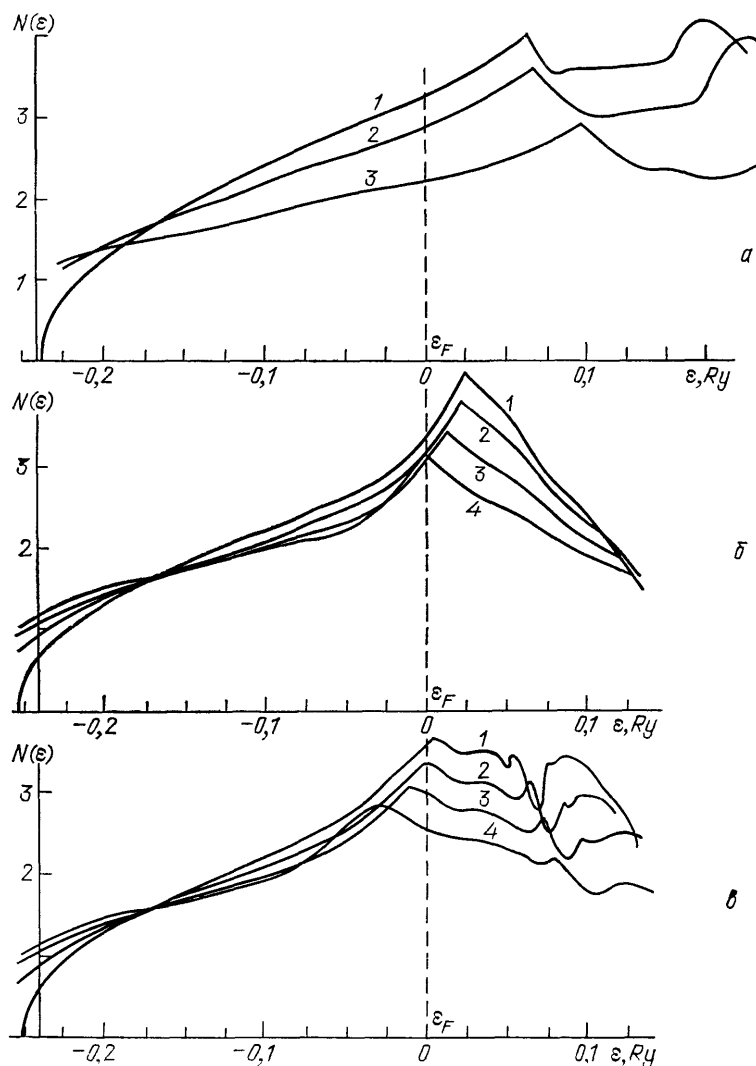


Рис. 2. Плотность состояний  $N(\epsilon)$  при различных сжатиях  $u$ .  
 а — ОЦК Na; 1 —  $u = 0$ , 2 —  $u = 0,2$ , 3 —  $u = 0,5$ . б, в — Li, фазы ОЦК и R9, 1 —  $u = 0$ , 2 —  
 —  $u = 0,2$ , 3 —  $u = 0,4$ , 4 —  $u = 0,6$ .  $N(\epsilon)$  в ед.  $1/Ry \cdot \text{атом} \cdot \text{спин}$

которое, как показывают расчеты, происходит с ростом  $u$  в ОЦК Li (рис. 2, б, в) и в Ba. Смягчение  $C'$  под давлением в Li и Ba качественно согласуется с экспериментами<sup>11</sup> и отражает уменьшение стабильности ОЦК фазы, приводящее к мартенситным переходам в плотноупакованные структуры. R9 или ГЦК в Li и ГПУ в Ba<sup>11</sup>. Наличие этих зонных эффектов, не учитывавшихся в псевдопотенциальном расчете фазовых диаграмм Li и Na<sup>12</sup>, объясняет расхождение этого расчета с экспериментом для Li<sup>12</sup>, в то время как в Na, где подобные эффекты отсутствуют (рис. 2, а), предсказанная в<sup>12</sup> фазовая диаграмма совпала с наблюдаемой<sup>13</sup>. Наши первопринципные расче-

ты энергий ОЦК. ГЦК и ГПУ фаз подтверждают рост стабильности ОЦК фазы в Na с ростом  $p$ , в то время как в Li при этом, согласно расчету, происходят последовательные переходы ОЦК — R9-ГЦК фаза.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вакс В. Г., Трефилов А. В., Фомичев С. В. // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. С. 1613
2. Вакс В. Г., Трефилов А. В. // Письма ЖЭТФ. 1983. Т. 38. С. 373.
3. Кацнельсон М. П., Трефилов А. В. // Ibidem. 1984. Т. 40. С. 303; 1985. Т. 42. С. 393.
4. McSammon R. D., White G. K. // Phil. Mag. 1965. V. 11. P. 1125.
5. Stark R. W., Falicov L. M. // Phys. Rev. Lett. 1967. V. 19. P. 795
6. Гречнев Г. Е. // ФНТ. 1983. Т. 9. С. 1060.
7. Skriver H. L. The LMTO Methods. — Berlin; Heidelberg; New York; Tokyo: Springer-Verlag, 1984.
8. Свечкарев И. В., Солнышкин Д. Д. // Физика низких температур. — Харьков. ФТИНТ АН УССР. 1972. — С. 119.
9. Варюхин С. В., Егоров В. С. // Письма ЖЭТФ. 1984. Т. 39. С. 510.
10. Christensen N. E. // Sol State Commun, 1984. V. 49. P. 701.
11. Воронов Ф. Ф., Стальгорова О. В. // ФТТ. 1978. Т. 20. С. 452  
Воронов Ф. Ф., Громницкая Е. Л., Стальгорова О. В. // ФММ. 1987. Т. 54. С. 1369.
12. Вакс В. Г., Кравчук С. П., Трефилов А. В. // ФТТ. 1977. Т. 19. С. 1271.
13. Чернышев А. А., Сухопаров В. А., Садыков Р. А. // Письма ЖЭТФ. 1983. Т. 37. С. 345.