Письма в ЖЭТФ, том 110, вып. 11, с. 741 – 747

Топология электронного спектра и гигантские особенности плотности состояний в кубических решетках[1)]

П. А. Игошев[2)], *В. Ю. Ирхин*

Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения РАН, 620108 Екатеринбург, Россия

Уральский федеральный университет, 620002 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 8 октября 2019 г.
После переработки 22 октября 2019 г.
Принята к публикации 22 октября 2019 г.

Детально исследована топология изоэнергетических поверхностей в обратном пространстве для простой (ПК), объемноцентрированной (ОЦК) и гранецентрированной (ГЦК) кубических решеток в приближении сильной связи с учетом интегралов переноса между ближайшими и следующими соседями t и t'. Показано, что при значениях $\tau = t'/t = \tau_*$, соответствующих изменению топологии поверхностей, могут формироваться линии и поверхности $\mathbf{k}$-точек ван Хова. При малом отклонении τ от этих особых значений спектр в окрестности линии (поверхности) ван Хова заменяется на слабую зависимость от $\mathbf{k}$ в окрестности нескольких точек ван Хова, имеющих гигантскую массу, пропорциональную $|\tau - \tau_*|^{-1}$. Рассматриваются сингулярные вклады в плотность состояний вблизи особых значений τ; получены аналитические выражения для плотности состояний в терминах эллиптических интегралов. Показано, что в ряде случаев максимальное значение плотности состояний достигается при энергиях, соответствующих не $\mathbf{k}$-точкам на грани зоны Бриллюэна, а ее *внутренним* $\mathbf{k}$-точкам на высокосимметричных направлениях. Обсуждаются соответствующие вклады в электронные и магнитные свойства, в том числе в применении к слабым зонным магнетикам.

DOI: 10.1134/S0370274X1923005X

1. Введение. Как известно, ван-хововские особенности электронного спектра и, в частности, плотности состояний (*density of states*, DOS) $\rho(\epsilon)$ как функции энергии ϵ приводят к особенностям ряда электронных и магнитных свойств; соответствующие сингулярные вклады в термодинамические величины способствуют возникновению структурных и магнитных фазовых переходов [1]. Геометрическое происхождение электронных пиков DOS было детально исследовано в [1, 2]. Простыми примерами являются ОЦК-фаза Ca и ГЦК-фаза Sr, где слабодисперсионные одномерные многообразия (линии ван Хова) на гранях зоны Бриллюэна расположены вблизи уровня Ферми. В ОЦК Ca им приближенно соответствуют части линий P–N и N–H, а в ГЦК Sr – X–U, U–L, L–K, K–U, K–W. Анализ [1] показывает, что линия D ОЦК-решетки обычно выглядит как линия ван Хова в Li, V, Cr, Fe, Ba [3, 4].

Точка L на грани зоны Бриллюэна, которой соответствует большая эффективная масса (для спектра, вычисленного в парамагнитной фазе), определяет сильные магнитные свойства никеля (“магнетика ван Хова”) и поведение его восприимчивости выше температуры Кюри [5].

Сильные особенности DOS как функции энергии возникают от окрестности близко расположенных $\mathbf{k}$-точек ван Хова (структур ван Хова). Влияние таких структур на электронные и решеточные свойства, включая многоэлектронные аномалии экранирования, рассмотрено в работах [1, 6, 7]. Формирование узких ван-хововских пиков DOS приводит к локализации электронных состояний и увеличению роли корреляционных эффектов.

Целью данной работы является детальный топологический анализ изоэнергетических поверхностей для кубических решеток при учете линий и поверхностей ван Хова с дальнейшим применением к обсуждению физических свойств.

2. Анализ особенностей ван Хова. Существует общая связь особенностей плотности состояний (DOS) и топологических свойств спектра возбуждений $t(\mathbf{k})$ [8]. $\mathbf{k}$ называется точкой ван Хова, если скорость возбуждений $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \partial t(\mathbf{k})/\partial \mathbf{k} = 0$. Уровни энергии $\epsilon = t(\mathbf{k})$, соответствующие точкам ван Хова, и только они соответствуют особенностям $\rho(\epsilon)$ как функции ϵ. Тип этой особенности, соответствующей

[1)]См. дополнительные материалы к данной статье на сайте нашего журнала.

[2)]e-mail: igoshev_pa@imp.uran.ru

изолированной точке ван Хова $\mathbf{k}$, задается сигнатурой квадратичной формы с матрицей $\partial^2 t(\mathbf{k})/\partial k_i \partial k_j$ (индекс в косых скобках), определяющей поведение спектра в окрестности этой точки (см. дополнительный материал).

Таким образом, особенно важный вклад в DOS происходит от точек ван Хова с гигантской массой или от слияния $\mathbf{k}$-точек ван Хова, которое, как будет видно из дальнейшего анализа, тесно связано с увеличением одной или нескольких масс.

Если спектр, полученный в рамках первопринципных расчетов, является слабодисперсионным на некотором участке в каком-то направлении $\mathbf{k}$-пространства, то в окрестности этого участка имеется или точка с большой массой, или пара таких точек.

Мы предполагаем, что имеется перенос только между первыми (интеграл t) и вторыми ($t' = \tau t$) координационными сферами: $t(\mathbf{k};\tau)$. Учитывая, что для бипартитных решеток $\rho(-\epsilon;-\tau) = \rho(\epsilon;\tau)$, ниже мы полагаем $t = 1$, $\tau \geq 0$.

Аналитические выражения для DOS и решеточных функций Грина были получены для ряда трехмерных решеток в приближении ближайших соседей, что дает симметричную функцию энергии $\rho(\epsilon, 0)$ для бипартитных решеток (ПК, ОЦК) [9, 10]. Однако для ряда проблем современной физики конденсированного состояния решающее значение имеет влияние асимметрии и переноса между следующими за ближайшими соседями (например, электронный спектр сверхпроводящих купратов, переход металл-изолятор в антиферромагнитной фазе [11]); соответствующие результаты для DOS приведены в дополнительном материале.

Для ПК решетки топология электронного спектра существенно меняется при увеличении τ выше значения $\tau_*^{\mathrm{sc}} = 1/4$ (при этом значении $\mathbf{k}$ точки формируют целую линию ван Хова Δ; точка Γ меняет свой тип с минимума на максимум, а точка X – с седловой точки на локальный минимум), см. рис. S1a и табл. 1 в дополнительном материале. При $\tau < \tau_*^{\mathrm{sc}}$ имеется 4 точки ван Хова: точка минимума Γ, точка максимума R и две седловые точки с противоположными сигнатурами X$/+1/$ и M$/-1/$ соответственно. Между ними график $\rho_{\mathrm{sc}}(\epsilon,\tau)$ как функции ϵ образует широкое плато. При $\tau > \tau_*^{\mathrm{sc}}$ от точки Γ отщепляются две дополнительные $\mathbf{k}$-точки ван Хова, лежащие на линиях Σ и Λ (см. табл. 1 в дополнительном материале); обозначим эти точки как Σ^*, Λ^*. При дальнейшем увеличении τ эти точки удаляются от точки Γ. Для каждой из этих точек все три массы расходятся как $|\tau - \tau_*^{\mathrm{sc}}|^{-1}$ при $\tau \to \tau_*^{\mathrm{sc}}$. Таким образом, при $\tau = \tau_*^{\mathrm{sc}}$ линия ван Хова Δ распадается на три близколежащих точки ван Хова Γ, $\Sigma^*/+1/$, $\Lambda^*/-1/$. Кривая $\rho(\epsilon,\tau)$ при $\tau > \tau_*^{\mathrm{sc}}$ образует квазисимметричное плато между энергиями $w_{\Sigma^*}^{\mathrm{sc}}, w_{\Lambda^*}^{\mathrm{sc}}$ с высотой порядка $(\tau - \tau_*^{\mathrm{sc}})^{-1/2}$, шириной вершины $4(\tau - \tau_*^{\mathrm{sc}})^2/\tau$ и с универсальной зависимостью от относительного положения уровня энергии на этом плато (см. рис. S2a, S3a в дополнительном материале). Изменение DOS на вершине плато довольно слабо – это связано с тем, что для обеих $\mathbf{k}$-точек Σ^* и Λ^* все три массы расходятся одинаково быстро. Справа от плато имеется резкое падение $\rho(\epsilon,\tau)$ между уровнями $w_{\Lambda^*}^{\mathrm{sc}}$ и w_{Γ}^{sc}. Впрочем, разница между последними уровнями существенно больше, чем ширина плато. При $\tau > \tau_*^{\mathrm{sc}}$ максимальное значение DOS достигается при $\epsilon = w_{\Sigma^*}^{\mathrm{sc}}$ или $w_{\Lambda^*}^{\mathrm{sc}}$ (см. рис. S3a в дополнительном материале), соответствующих внутренним $\mathbf{k}$-точкам ван Хова зоны Бриллюэна.

При $\tau = \tau_*^{\mathrm{sc}}$ плато полностью исчезает и формируется гигантская сингулярность ван Хова, происходящая от долин глобального минимума, образованных линией Δ,

$$\rho_{\mathrm{sc}}(-3 + \delta\epsilon, \tau_*^{\mathrm{sc}}) = A_{\mathrm{sc}}/\sqrt[4]{\delta\epsilon} + o(1), \qquad (1)$$

где $A_{\mathrm{sc}} = \frac{\sqrt{2}}{\pi}\Gamma(5/4)/\Gamma^3(3/4) = 0.222$.

Для ОЦК решетки топология электронного спектра меняется при $\tau_*^{\mathrm{bcc}} = 1$, см. рис. S1b и табл. 2 в дополнительном материале. При $0 < \tau < \tau_*^{\mathrm{bcc}}$ имеются две $\mathbf{k}$-точки локального минимума Γ и P, точка максимума H и две седловых точки $\Lambda^*/+1/$ и N$/-1/$. При $\tau = 0$ точка Λ^* совпадает с P, а уровни $w_{\mathrm{N}}^{\mathrm{bcc}}, w_{\mathrm{P}}^{\mathrm{bcc}}$ сливаются – образуется линия $\mathbf{k}$-точек ван Хова $D = \{(\pi/2, \pi/2, k_z), -\pi/2 < k_z < \pi/2\}$, производящая особенность DOS в центре зоны $\rho_{\mathrm{bcc}}(\epsilon, \tau = 0) = (4/\pi^3)[\ln^2(64/|\epsilon|) - \pi^2/16] + o(\epsilon)$ [10]. Причина такой зависимости в том, что обратные поперечные массы $m_D^{-1}(k_z) = \pm 8\cos k_z$ на линии D линейно обращаются в нуль в точке P. При отклонении τ от нуля линия ван Хова D распадается на структуру ван Хова, образованную тремя точками: P(минимум), $\Lambda^*/+1/$ и N$/-1/$, причем $w_{\Lambda^*}^{\mathrm{sc}} - w_{\mathrm{P}}^{\mathrm{sc}} \ll w_{\mathrm{N}}^{\mathrm{sc}} - w_{\Lambda^*}^{\mathrm{sc}}$, причем в пределе $\tau \to 0$ для точек Λ^* и P расходятся три массы, а для N – только одна. На узком интервале ($w_{\mathrm{P}}^{\mathrm{sc}}$, $w_{\Lambda^*}^{\mathrm{sc}}$) DOS резко спадает, а на интервале ($w_{\Lambda^*}^{\mathrm{sc}}, w_{\mathrm{N}}^{\mathrm{sc}}$) DOS образует асимметричное плато с существенно бóльшим значением DOS при $\epsilon = w_{\Lambda^*}^{\mathrm{sc}}$.

При увеличении τ $\mathbf{k}$-точка ван Хова Λ^* смещается от точки P к точке Γ вдоль линии Λ. При $\tau > 2/3$ точки P и Γ меняются ролями. Когда τ достигает $\tau = \tau_*^{\mathrm{bcc}}$, уровни $w_{\mathrm{N}}^{\mathrm{bcc}}$ и $w_{\Gamma}^{\mathrm{bcc}}$ сливаются – образуется линия $\mathbf{k}$-точек ван Хова Σ. При $\tau \lesssim \tau_*^{\mathrm{bcc}}$ формируется трехточечная структура, полностью аналогичная

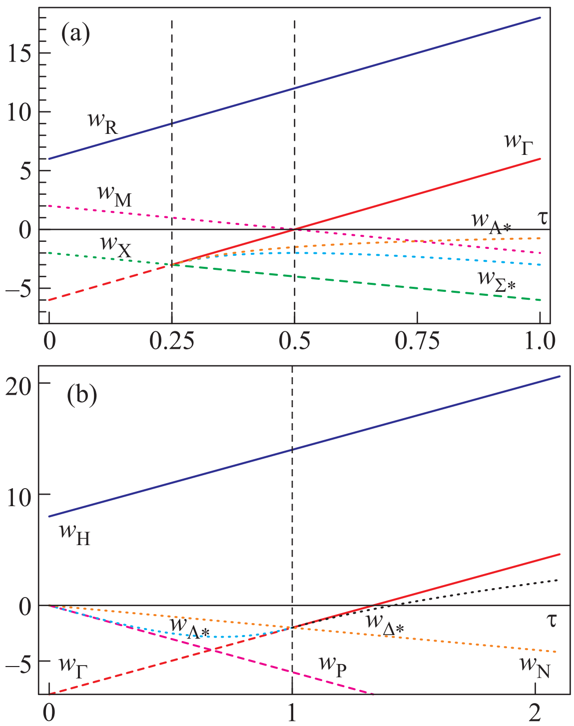

Рис. 1. (Цветной онлайн) τ-зависимость уровней ван Хова w. (a) – ПК решетка. (b) – ОЦК решетка. Сплошная линия соответствует локальному максимуму, пунктирная – локальному минимуму, короткий пунктир – седловой точке

описанной выше с заменой P→ Γ (см. рис. 1b). В случае $\tau > \tau_*^{\rm bcc}$ сигнатуры всех трех точек меняют знак, а роль точки Λ^* играет точка Δ^*, отщепляющаяся от Γ при $\tau = \tau_*^{\rm bcc}$, которая при увеличении τ мигрирует вдоль направления Δ, удаляясь от точки Γ. При этом энергетические уровни ведут себя аналогично случаям $0 < \tau \ll \tau_*^{\rm bcc}$ и $\tau \lesssim \tau_*^{\rm bcc}$, рассмотренным выше. Как и для точки Λ^* при $\tau < \tau_*^{\rm bcc}$, для точки Δ^* все три массы расходятся при $\tau \to \tau_*^{\rm bcc}$. Это означает, что при $\tau > \tau_*^{\rm bcc}$ между энергиями $w_{\rm N}^{\rm bcc}$ и $w_{\Delta^*}^{\rm bcc}$ на графике $\rho_{\rm bcc}(\epsilon, \tau)$ формируется асимметричное плато, причем $\rho_{\rm bcc}(w_{\Delta^*}^{\rm bcc}, \tau)$ много больше $\rho_{\rm bcc}(w_{\rm N}^{\rm bcc}, \tau)$, а между уровнями энергии $w_{\Delta^*}^{\rm bcc}$ и $w_\Gamma^{\rm bcc}$ DOS резко спадает. Максимальное значение DOS при $\tau < \tau_*^{\rm bcc}$ достигается для $\epsilon = w_{\Lambda^*}^{\rm bcc}$ и при $\tau > \tau_*^{\rm bcc}$ для $\epsilon = w_{\Delta^*}^{\rm bcc}$, соответствующих внутренним **k**-точкам ван Хова зоны Бриллюэна, см. рис. S3b в дополнительном материале. Таким образом, для ОЦК решетки линии ван Хова D и Σ всегда распадаются на трехточечную структуру ван Хова: широкое асимметричное плато и примыкающий к нему участок резкого спада DOS. Примеры расчета электронного спектра для различных τ в симметричных направлениях зоны Бриллюэна для ПК и ОЦК решеток приведены на рис. S1 в дополнительном материале.

При $\tau = \tau_*^{\rm bcc}$ DOS имеет асимптотику

$$\rho_{\rm bcc}(-2+\delta\epsilon, 1) = \\ = -\frac{5}{2\pi^2} + \begin{cases} B_{\rm bcc}/\sqrt[4]{-\delta\epsilon}, & \delta\epsilon < 0 \\ A_{\rm bcc}/\sqrt[4]{\delta\epsilon}, & \delta\epsilon > 0 \end{cases} + o(1), \qquad (2)$$

где $A_{\rm bcc} = \frac{3}{2\pi^3}\int\limits_{+1}^{+\infty} dt\mathbb{K}(1-t^2)/\sqrt{t} = 0.333$, $B_{\rm bcc} = \frac{1}{\pi^3}\int\limits_{0}^{+\infty} dt\mathbb{K}(-t^2)/\sqrt{t} = 0.314$, $\mathbb{K}$ – полный эллиптический интеграл первого рода, см. дополнительный материал.

Прямое исследование **k**-точек ван Хова для ГЦК представлено в табл. 3 в дополнительном материале. Из рисунка 2 видно, что при выделенных значениях $\tau = -1, -1/2, 0, 1/2, 1$ изоэнергетические поверхности спектра испытывают топологические переходы (смена типа точек ван Хова). При этом для $\tau = -1/2$ формируется целая поверхность ван Хова, задаваемая уравнением $\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z = 0$. Уровень энергии для этой поверхности соответствует слиянию уровней точек W и L. При $\tau = 0$ формируется линия ван Хова V, соответствующая слиянию уровней энергии точек W и X (и соединяющая их).

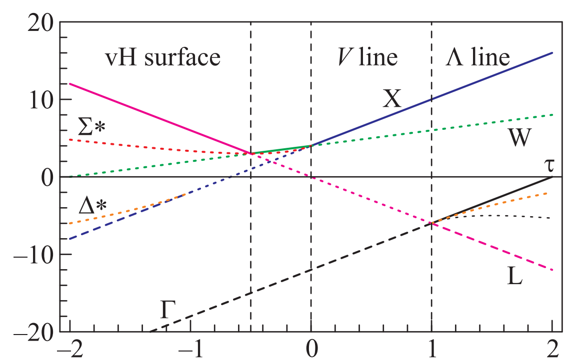

Рис. 2. (Цветной онлайн) τ-зависимость уровней ван Хова w для ГЦК решетки. Обозначения такие же, как и на рис. 1. Нижняя панель: зона Бриллюэна ГЦК решетки с указанием стандартных обозначений высокосимметричных **k**-точек и линий

При $\tau = 1$ формулируется линия ван Хова Λ, соответствующая слиянию уровней точек Γ и L (и соединяющая эти точки). Переход τ через каждую особую точку $\tau = -1/2, 0, 1$ сопровождается расходимостью одной или нескольких масс. Это означает, что при отклонении τ от “критического” значения линия или поверхность ван Хова распадается на несколько точек ван Хова с большой массой. Так,

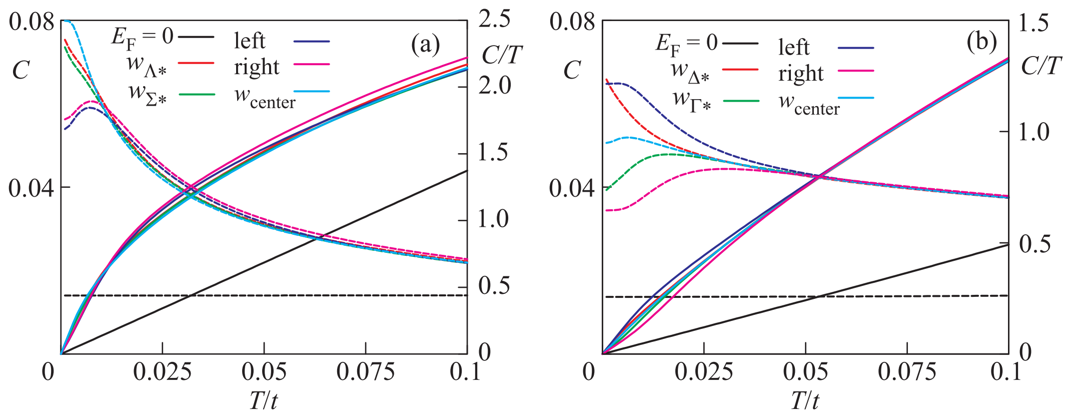

Рис. 3. (Цветной онлайн) Температурная зависимость теплоемкости C (левая ось, сплошные линии) и коэффициента $\gamma = C/T$ (правая ось, пунктир) при различных положениях уровня Ферми. (a) – ПК решетка ($\tau = 0.3$): $w^{\mathrm{sc}}_{\Sigma^*} = -2.533$, $w^{\mathrm{sc}}_{\Lambda^*} = -2.500$, $w^{\mathrm{sc}}_{\mathrm{center}} = (1/2)(w^{\mathrm{sc}}_{\Sigma^*} + w^{\mathrm{sc}}_{\Lambda^*}) = -2.517$, $w^{\mathrm{sc}}_{\mathrm{left}} = -2.550$, $w^{\mathrm{sc}}_{\mathrm{right}} = -2.480$. (b) – ОЦК решетка ($\tau = 1.1$): $w^{\mathrm{bcc}}_{\Delta^*} = -1.436$, $w^{\mathrm{bcc}}_{\Gamma} = -1.400$, $w^{\mathrm{bcc}}_{\mathrm{center}} = -1.418$, $w^{\mathrm{bcc}}_{\mathrm{left}} = -1.470$, $w^{\mathrm{bcc}}_{\mathrm{right}} = -1.370$

при $\tau \lesssim -1/2$ формируются две точки ван Хова $\mathrm{W}/+1/$ и $\Sigma^*/-1/$, уровни энергии которых близки ($w^{\mathrm{fcc}}_{\Sigma^*}(\tau) - w^{\mathrm{fcc}}_{\mathrm{W}}(\tau) \sim \tau + 1/2$), так что между этими уровнями формируется узкое плато DOS.

При $-1/2 < \tau < 0$ $\mathbf{k}$-точками формируется структура ван Хова, соответствующая энергии в узком интервале $(w^{\mathrm{fcc}}_{\Sigma^*}, w^{\mathrm{fcc}}_{\mathrm{W}})$ (его ширина не превышает 0.35). Пара этих уровней дает сильный перепад DOS с уровня максимума до уровня седловой точки с большими массами. Заметим, что согласно табл. 3 в дополнительном материале, внутренняя точка ван Хова Δ^* существует при $|\tau| > 1$, а Σ^* – при $|\tau - 1/2| > 1/2$. Наименее интересный случай $0 < \tau < 1$ был детально проанализирован в работе [12]. В этом случае отсутствуют какие-либо внутренние точки ван Хова, а также линии и поверхности ван Хова. При $\tau \gtrsim +1$ линия ван Хова Λ, имеющаяся при $\tau = +1$, распадается на три точки ван Хова: $\Delta^*, \Sigma^*, \Gamma$. При этом уровни энергий первых двух точек образуют типичное узкое плато ($w^{\mathrm{fcc}}_{\Sigma^*}(\tau) - w^{\mathrm{fcc}}_{\Delta^*}(\tau) \sim (\tau - 1)^2$) между уровнями седловых точек с противоположными сигнатурами. Эти ситуация полностью аналогична распаду Σ-линии ван Хова для ПК решетки, который производит узкое квазисимметричное плато и участок резкого спада. Таким образом, мы можем сделать априорное заключение о существовании узкого устойчивого плато на графике DOS при $\tau \gtrsim +1$.

Исследуем характер сингулярностей DOS для найденных поверхности и линий ван Хова. Поскольку при $\tau = -1/2$ $t^{\mathrm{fcc}}_{\mathbf{k}}(\tau = -1/2) = 3 - (1/2)\,(t^{\mathrm{sc}}_{\mathbf{k}}(\tau = 0))^2$ [13], мы получим

$$\rho_{\mathrm{fcc}}(\epsilon; \tau = -1/2) = \frac{1}{\sqrt{2(3-\epsilon)}}\rho_{\mathrm{sc}}(\sqrt{2(3-\epsilon)}; \tau = 0). \tag{3}$$

Таким образом, поверхность ван Хова производит на потолке зоны гигантскую “одномерную” сингулярность $\rho_{\mathrm{fcc}}(\epsilon) \sim (3-\epsilon)^{-1/2}$.

При $\tau = 0$ для линии ван Хова $V = \{(0, \pi, k_z), -\pi/2 < k_z < \pi/2\}$ мы имеем для обратных поперечных масс $m_V^{-1}(k_z) = -4(1 \pm \cos k_z)$. Лишь одна из этих обратных масс обращается в нуль квадратично, так что среднее геометрическое масс обращается в нуль линейно. Это означает, что сингулярность ван Хова, происходящая от окрестности линии V, имеет вид

$$\rho_{\mathrm{fcc}}(\epsilon; \tau = 0) \simeq (3/8\pi^2)\ln[8/(4-\epsilon)]. \tag{4}$$

При $\tau = 1$ для линии $\Lambda = \{k_x = k_y = k_z = k_\lambda, -\pi/2 < k_\lambda < \pi/2\}$ мы имеем совпадающие обратные поперечные массы $m_\Lambda^{-1}(k_\Lambda) = 12\sin^2 k_\Lambda$, обращающиеся в нуль квадратично при $k_\Lambda = 0$. Таким образом, среднее геометрическое этих масс обращается в нуль уже квадратично, что приводит к тому, что $\rho_{\mathrm{fcc}}(\epsilon; \tau = +1) \sim [\theta(\epsilon - 6)(\epsilon - 6)]^{-1/4}$ и дает новую гигантскую сингулярность ван Хова ($\theta(x)$ – функция Хевисайда).

3. Электронные свойства. На рисунке 3 показаны результаты для электронной теплоемкости $C(T; E_{\mathrm{F}}) = -\frac{1}{T}\int d\epsilon \rho(\epsilon)(\epsilon - E_{\mathrm{F}})^2 f'(\epsilon)$, для ПК и ОЦК решеток при низких температурах в приближении свободных электронов с точной плотностью состояний, приведенной в дополнительном материале; $f(E) = (\exp[(E - E_{\mathrm{F}})/T] + 1)^{-1}$ – функция Ферми. Были выбраны значения τ, близкие к соответствующим топологическим переходам, и уровнем Ферми E_{F}, находящимся внутри или вблизи уровней структуры ван Хова, которая остается от распада линии ван Хова Δ для ПК решетки и Σ для ОЦК решет-

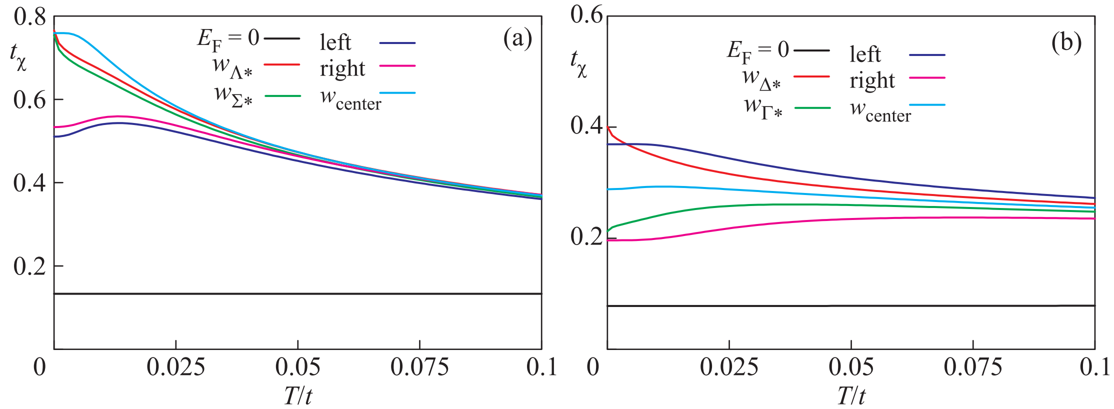

Рис. 4. (Цветной онлайн) Температурная зависимость магнитной восприимчивости χ при различных положениях уровня Ферми. (a) – ПК решетка ($\tau = 0.3$). (b) – ОЦК решетка ($\tau = 1.1$)

ки, см. обсуждение выше. Для наглядности показан также расчет для $E_\mathrm{F} = 0$, когда уровень Ферми удален от всех особенностей. В этом же приближении были вычислены магнитная восприимчивость (в единицах μ_B^2) $\chi(T;E_\mathrm{F}) = -\int d\epsilon\rho(\epsilon)f'(\epsilon)$ и термоэлектродвижущая сила (термоЭДС) $S(T;E_\mathrm{F}) = -[1/T\sigma(T;E_\mathrm{F})]\int d\epsilon(\epsilon - E_\mathrm{F})\sigma_\mathrm{c}(\epsilon)f'(\epsilon)$, где проводимость определена как $\sigma(T;E_\mathrm{F}) = -\int d\epsilon\sigma_\mathrm{c}(\epsilon)f'(\epsilon)$, $\sigma_\mathrm{c}(\epsilon)$ – функция проводимости, пропорциональная плотности состояний [1].

Видно, что теплоемкость для ПК и ОЦК решеток увеличена и сильно отклоняется от стандартной линейной температурной зависимости (при $E_\mathrm{F} = 0$), причем это поведение сохраняется далеко за пределами температурного масштаба порядка ширины пика $T_* \approx 0.03$. Если выбрать $t \sim 0.5$ эВ, то $T_* \sim 200$ К. Имеется также существенная зависимость от положения уровня Ферми в пределах структуры ван Хова при $T \ll T_*$. Если E_F находится на плато DOS ПК решетки (см. рис. S2a дополнительного материала), теплоемкость будет линейной (с гигантским коэффициентом γ) лишь в узком интервале низких температур; при отклонении E_F влево или вправо от границ плато $\gamma(T)$ приобретает максимум. Для ОЦК решетки на поведение γ влияет наличие асимметричного пика в энергетическом интервале ($w_{\Lambda*}^\mathrm{bcc}$, w_Γ^bcc) – в случае, когда $E_\mathrm{F} = w_{\Lambda*}^\mathrm{bcc}$ или левее, имеет место монотонное убывание γ с ростом температуры; когда $E_\mathrm{F} > w_{\Lambda*}^\mathrm{bcc}$, $\gamma(T)$ приобретает пик при низких температурах. При $T \gtrsim T_*$ нелинейное поведение теплоемкости сохраняется, хотя зависимость от положения уровня Ферми практически исчезает.

Магнитная восприимчивость χ (рис. 4) имеет непаулиевское поведение: возникает сильная температурная зависимость. Для ПК решетки наличие узкого плато в DOS приводит к локализации электронов в смысле поведения магнитной восприимчивости, близкого к кюри-вейссовскому. Если уровень Ферми находится на вершине плато, а τ достаточно близко к τ_*^sc, величина DOS велика и практически не чувствительна к изменению уровня Ферми в пределах вершины плато. Это означает, что ферромагнетизм будет достаточно стабилен, в том числе по отношению к корреляционным эффектам (более высокая температура Кюри), в отличие от ферромагнетизма, происходящего от точки ван Хова с высокой массой (см. обсуждение во Введении). Выход уровня Ферми за пределы плато приводит к максимуму $\chi(T)$, а следовательно возможному формированию температурно-индуцированного ферромагнетизма [14]. Для ОЦК решетки температурная зависимость χ более слабая, хотя ее низкотемпературное значение существенно зависит от E_F.

Асимметрия плотности состояний относительно E_F приводит к большой величине термоЭДС. Для обеих решеток она немонотонно зависит от температуры, причем характер этой зависимости существенно зависит от положения E_F (рис. 5). Для ПК решетки получается температурная зависимость, симметричная по величине и антисимметричная по знаку по отношению к положению уровня Ферми, отсчитанного от центра плато.

4. Заключение. Мы показали, что в приближении ближайших и следующих за ближайшими соседями изоэнергетические поверхности, находящиеся в окрестности **k**-точки ван Хова, могут испытывать топологические переходы при изменении параметров электронного спектра. При таком переходе уровни энергии точек ван Хова сливаются, формируя линии (или поверхности) ван Хова, производящие гигантские (логарифмическую или степенную)

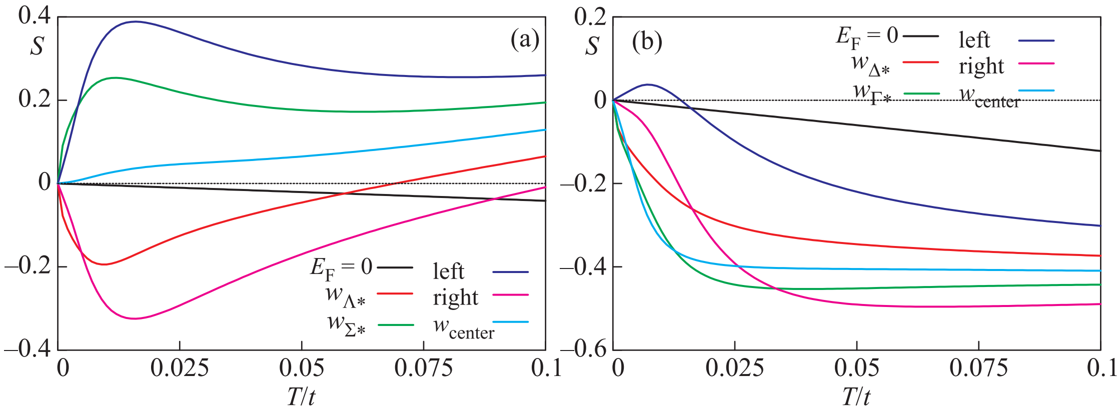

Рис. 5. (Цветной онлайн) Температурная зависимость термоЭДС S при различных положениях уровня Ферми. (a) – ПК решетка ($\tau = 0.3$). (b) – ОЦК решетка ($\tau = 1.1$)

сингулярности в плотности состояний. Наличие этих сингулярностей может привести к новым неустойчивостям (магнитным, сверхпроводящей) и необычным температурным зависимостям наблюдаемых физических величин. Вблизи топологического перехода линии и поверхности ван Хова распадаются на трехточечные структуры ван Хова: либо узкое плато, приводящее к локализации части электронных состояний (тогда термодинамические величины являются суммой двух вкладов – от локализованных и делокализованных электронных состояний), с примыкающим к нему более широкому участку резкого спада DOS, либо участок резкого спада DOS и примыкающему к нему участку асимметричного плато (что приводит к промежуточному "полулокализованному" поведению соответствующего термодинамического вклада).

Соответствующие эффекты должны усиливаться при учете корреляций [1]. Таким образом, полученные результаты (в применении к спектру как фермиевских, так и бозевских возбуждений) могут быть использованы при исследовании магнитных и электронных свойств в различных микроскопических многоэлектронных моделях, например моделях Гейзенберга, Кондо и Хаббарда.

Взаимосвязь точек ван Хова высокой массы и появления ферромагнетизма может быть проиллюстрирована на ряде примеров. $ZnZn_2$ близок к переходу И. М. Лифшица, проявляющемуся в изменении топологии поверхности Ферми при смещении E_F [15]. Причиной слабого ферромагнетизма $ZrZn_2$, вероятно, является вклад в плотность состояний, происходящий от точек ван Хова вблизи граней зоны Бриллюэна (X, L и K). Большие, но конечные значения соответствующих эффективных масс, вычисленные из первых принципов [15], приводят к обрезанию сингулярности плотности состояний вблизи E_F.

Большая масса в **k**-точке ван Хова R обеспечивает слабый ферромагнетизм (температура Кюри 41 K) Ni_3Al [16]. Слабый коллективизированный ферромагнетик Y_2Ni_7 демонстрирует низкую температуру Кюри 58 K и малый момент насыщения $0.44\,\mu_B$ [17, 18]. Расчеты зонной структуры показывают спектр типа плоских зон в окрестности точки ван Хова Γ и бездисперсионный спектр в P–Z-направлении ромбоэдрической зоны Бриллюэна (возможная линия ван Хова или пара точек ван Хова с большой массой) [19].

Проведенный нами анализ может быть полезен как дополнение вычислительных методов, используемых для расчета электронного спектра и свойств реальных материалов. В частности, влияние точек ван Хова на величину плотности электронных состояний не может быть удовлетворительно исследовано в рамках метода тетраэдров [20]. В качестве альтернативы может быть предложена аналитическая аппроксимация спектра в окрестности высокосимметричных точек, где спектр почти плоский (слабодисперсионный) [21].

Авторы благодарят М. И. Кацнельсона, А. О. Анохина, А. А. Катанина за ценные обсуждения. Исследование проводилось в рамках госзадания Минобрнауки (тема "Квант" # АААА-А18-118020190095-4) и при поддержке Программы 211 Правительства РФ, соглашение 02.A03.21.0006.

1. С. В. Вонсовский, М. И. Кацнельсон, А. В. Трефилов, ФММ **76**(3), 3 (1993).
2. М. И. Кацнельсон, Г. В. Песчанских, А. В. Трефилов, ФТТ **32**, 470 (1990).
3. V. L. Moruzzy, J. P. Janak, and A. R. Williams, *Calculated Electronic Properties of Metals*, Plenum Press, N.Y. (1978).

4. D. A. Papacostantopoulos, *Handbook of Band Structure of Elemental Solids*, Plenum Press, N.Y. (1986).
5. A. Hausoel, M. Karolak, E. Sasioglu, A. Lichtenstein, K. Held, A. Katanin, A. Toschi, and G. Sangiovann, Nature Comm. **8**, 16062 (2017).
6. М. И. Кацнельсон, А. В. Трефилов, Письма в ЖЭТФ **40**, 303 (1984).
7. М. И. Кацнельсон, А. В. Трефилов, Письма в ЖЭТФ **42**, 393 (1985).
8. L. van Hove, Phys. Rev. **89**, 1189 (1953).
9. R. J. Jelitto, J. Phys. Chem. Solids **30**, 609 (1969).
10. S. Katsura and T. Horiguchi, J. Math. Phys. **12**, 230 (1971).
11. П. А. Игошев, В. Ю. Ирхин, ЖЭТФ **155**, 1072 (2019).
12. R. H. Swendsen and H. Callen, Phys. Rev. B **6**, 2860 (1972).
13. M. Ulmke, Eur. Phys. J. B **1**, 301 (1998).
14. S. V. Vonsovsky, Yu. P. Irkhin, V. Yu. Irkhin, and M. I. Katsnelson, J. de Physique Colloques **49**(C8), 253 (1988).
15. G. Santi, S. B. Dugdale, and T. Jarlborg, Phys. Rev. Lett. **87**, 247004 (2001).
16. A. S. Hamid, A. Uedono, Zs. Major, T. D. Haynes, J. Laverock, M. A. Alam, S. B. Dugdale, and D. Fort, Phys. Rev. B **84**, 235107 (2011).
17. J. Inoue, Physica B **149**, 376 (1988).
18. Y. Nishihara and S. Ogawa, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 300 (1991).
19. D. J. Singh, Phys. Rev. B **92**, 174403 (2015).
20. P. E. Blöchl, O. Jepsen, and O. K. Andersen, Phys. Rev. B **49**, 16223 (1994).
21. А. А. Степаненко, Д. О. Волкова, П. А. Игошев, А. А. Катанин, ЖЭТФ **152**, 1034 (2017).