

Письма в ЖЭТФ, том 20, вып. 8, стр. 571 – 574

20 октября 1974 г.

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА СОЕДИНЕНИЙ СО СТРУКТУРОЙ β -W

Л.П.Горьков

Показано, что перекрытие между нитями переходных элементов приводит к особенностям электронной плотности состояний, способным объяснить аномальные свойства этих соединений.

В общепринятой теории [1] свойств соединений типа Nb_3Sn и V_3Si уровень Ферми предполагается близким к дну одной из пустых d -зон с большой (одномерной) плотностью состояний. Такой выбор случаен.

Автором было отмечено [2], что если электронные зоны не пересекаются, то с точки зрения чисел заполнения уровень Ферми обязан проходить через точку X . Особенности пространственной симметрии обеспечивают при этом большую поверхность Ферми; отсутствие в температурной зависимости сопротивления привычных зависимостей T^5 (см. в [3] и [4]) является сильным доводом, что в проводимости этих соединений не участвуют s -электроны.

Теория [1] приводит к температурным добавкам в упругие модули вида [3]:

$$C_{ij} = A + B \ln T. \quad (1)$$

Удивительным, однако, кажется то, что экспериментально медленные зависимости от температуры наблюдаются до $T \sim T_m \lesssim 100\text{K}$, где вряд ли применимо приближение невзаимодействующих нитей. Кроме того, хотя экспериментальные данные по восприимчивости [5] $V_3\text{Si}$ откладываются в виде (1), из-за правил отбора [1] трудно понять большую величину изменения восприимчивости.

Общее выражение для энергетического спектра электронов в окрестности точки X имеет вид [1]

$$\epsilon_{1,2} = c(p_x^2 + p_y^2) \pm \{v^2 p_x^2 + c^{12}(p_x^2 - p_y^2)^2\}^{1/2}. \quad (2)$$

Здесь c и c' малы в меру малости взаимодействия между нитями. Порядок величины $c/a^2 = T^*$ (a — постоянная решетки) характеризует температуры, до которых справедливы формулы [1]. Видно, однако, что из (2) следует тонкая структура плотности состояний с масштабом T^* (от ϵ зависят $dp_x/d\epsilon$ и площади поверхности Ферми около грани зоны Бриллюэна). Ограничиваясь переходами между ближайшими нитями, получим энергетический спектр на грани зоны:

$$\tilde{\epsilon}_{1,2} = \sin^2 \phi + \sin^2 \psi \pm \{ \pi_x^2 + (\sin^2 \phi - \sin^2 \psi)^2 \}^{1/2}. \quad (2')$$

где введены безразмерные переменные

$$\epsilon = 2(v/a)\lambda\tilde{\epsilon}; \quad (2\phi, 2\psi) = (p_x a, p_y a); \quad \pi_x = 2p_x \lambda a, \quad (3)$$

а величина

$$\lambda = 2(Ba/v)^2 \quad (3')$$

содержит квадрат отношения "обменного интеграла" B к ширине зоны. Таким образом, масштаб $T^* \sim 10^2\text{K}$ (см. ниже). Из закона дисперсии (2') нетрудно найти выражение для плотности состояний через эллиптические интегралы. Так, при $\tilde{\epsilon} < 0$

$$\nu(\epsilon) / \nu(0) = (4/\pi^2) E(k)K(k); \quad k^2 = 2/2 - \tilde{\epsilon}. \quad (4)$$

Здесь $\nu(0)$ – объемная плотность состояний для плоского спектра. Из расчета на одну грань куба и один спин

$$\nu(0) = 1/2 \pi \nu a^2. \quad (5)$$

При $x = \tilde{\epsilon} \rightarrow 0$ и $x = \tilde{\epsilon} - 2 \rightarrow 0$ (4) имеет логарифмическую особенность

$$\nu(\epsilon) = \nu(0) \frac{2}{\pi^2} \ln \frac{32}{|x|}. \quad (4')$$

Можно показать, что $\nu(\epsilon)$ симметрично относительно замены $\tilde{\epsilon} \rightarrow 2 - \tilde{\epsilon}$. Поэтому строго стехиометрическому составу отвечает выбор химического потенциала в точке $\tilde{\mu} = 1$. Поскольку $T^* \sim 10^{-2}$ эВ, допирование на процент или доли процента существенно сдвигает уровень Ферми. Мы считаем, что образцы, претерпевающие структурный переход, отвечают уровню Ферми $\tilde{\mu}$ вблизи особенности (4') ($\tilde{\mu} \rightarrow 0$, при $\tilde{\mu} \rightarrow 2$).

Приведем результаты. Для температурнозависимой добавки к парамагнитной восприимчивости найдем ($T \ll T^*$):

$$\chi(T) = \chi_0 \frac{2}{\pi^2} \ln \frac{64 \gamma T^*}{T} \quad (6)$$

Для электронной части теплоемкости c_e :

$$c_e(T) = c_{e0}(T) \frac{2}{\pi^2} \ln \frac{16 T^*}{T} \quad (7)$$

c_{e0} и χ_0 – электронная теплоемкость и парамагнитная восприимчивость при плоском законе дисперсии (в (2) c и $c' = 0$).

Аналогичные логарифмические зависимости возникают от электронного вклада в упругие модули. Для нити вдоль оси z спектр электронов зависит от деформаций

$$\tilde{\epsilon}_{1,2} = \sin^2 \phi + \sin^2 \psi + d_2 \epsilon_{zz} \pm \left\{ \pi^2 + (\sin^2 \phi - \sin^2 \psi + d_1 (\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}))^2 \right\}^{1/2},$$

где d_1, d_2 – компоненты деформационного потенциала. Мы приведем выражение для вклада в упругую энергию от одной нити, нормированное так, чтобы выделить логарифмический член $\ln \tilde{\omega} / T^*$ от области энергий $\tilde{\omega} \gg \epsilon \gg T^*$ (ср. с [1])

$$\left(\ln \frac{\tilde{\omega}}{T^*} + \text{const} + \frac{2}{\pi^2} \ln \frac{32 T^*}{T} \right) (\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy})^2 + \frac{2 d_2^2}{\pi^2 d_1^2} \ln \frac{32 T^*}{T} \epsilon_{zz}^2 \quad (8)$$

Значения: $q^* \nu = 2 \pi T^*$ определяют характерный масштаб закона дисперсии фононов $\omega(q)$. Выражая из (5) $a/\nu = 2 \pi N(0)/3$, получим для $\zeta^* = a q^* / \pi$ в $\text{Nb}_3\text{Sn} \sim 0,1 + 0,2$ в соответствии с результатами [6].

Наконец, особенность в куперовском канале приобретает дважды логарифмический характер

$$g_1 \ln \frac{\tilde{\omega}}{T} \Rightarrow g_1 \left\{ \ln \frac{\tilde{\omega}}{T^*} + \frac{1}{\pi^2} \ln^2 \frac{T^*}{T} \right\}. \quad (9)$$

Члены, возникающие от далеких областей в (8), (9) играют роль перенормировок, увеличивающих эффективные константы связи, однако, связь этих последних с "затравочными" константами выражается системой паркетных уравнений [7]. Сами затравочные взаимодействия, вообще говоря, порядка единицы и более, поскольку поверхность Ферми проходит по граням зоны Бриллюэна. Тот факт, что электроны относятся к d -зоне, также существенно увеличивает безразмерный деформационный потенциал. В расчетах [8] для V_3Ga зона, рассмотренной выше структуры, получена численно (σ -зона); точность расчета ($2mR\gamma$ в структуре зоны и ~ 1 эв в относительном положении зон) не противоречит нашей картине. Из величины расщепления термов на ребре куба ($\Delta E_M \approx \sqrt{\lambda/2} \Delta E_\Gamma$) находим; $\lambda = 1/80$ и $T^* \approx 300K$

Плотность состояний в σ -зоне [8] в 5 + 8 раз меньше полученной из калориметрических измерений. Эффективная масса однако сильно увеличивается при учете взаимодействий, этот эффект видимо должен уменьшать и величину T^* . Соответствующие расчеты пока отсутствуют.

В заключение отметим, что логарифмические зависимости в (6)–(9) чувствительны к положению μ (т. е. допированию и деформациям) и эффектам рассеяния, что соответствует экспериментальной ситуации.

Институт теоретической физики
им. Л.Д. Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
16 сентября 1974 г.

Литература

- [1] J.Labbe, S.Barisic. J.Friedel. Phys. Rev. Lett., 19, 1039, 1967.
- [2] Л.П.Горьков. ЖЭТФ, 65, 1659, 1973.
- [3] L.R.Testardi. Physical Acoustics ed. W.P.Mason, R.N.Thurston, 10, №4, 1973.
- [4] H.Taub, S.J.Williamson. Solid. St. Comm., в печати 1974 г.
- [5] J.P.Maita, E.Bucher. Phys. Rev. Lett., 29, 931, 1972.
- [6] J.D.Axe, G.Shurane. Phys. Rev., B8, 1965. 1973.
- [7] Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский (см. обсуждение и ссылки), ЖЭТФ, 67, 397, 1974.
- [8] W.Weger, I.B.Goldberg. Solid St. Phys., ed H.Ehrenreich, F.Seitz, D.Turnball, 28, №4, 1973.