

от  $H$ : ян-теллеровские корреляции приводят к отталкиванию уровней вблизи точки их возможного (при  $\bar{S}_x=0$ ) пересечения.

3. Таким образом, в системах антиферритового типа с конкурирующими взаимодействиями может существовать в поле фаза, где реализованы оба упорядочения. Удобным объектом, где можно было бы наблюдать магнитодисторсионную фазу, представляется изинговские антиферромагнетики типа  $\text{HoPO}_4$ ,  $\text{HoAsO}_4$ . Совместное исследование их магнитных и упругих свойств, аналогичное проведенному недавно для  $\text{CePb}_3$  [7] и позволившее обнаружить в нем неизвестную ранее фазу, представляется поэтому весьма интересным.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] *Vekhter B. G., Kaplan M. D.* Phys. Lett., 1973, vol. 43A, N 3, p. 389—390.
- [2] *Cook U., Swithenby S. J., Wells M. R.* Sol. St. Commun., 1972, vol. 10, N 2, p. 265—267.
- [3] *Laugsch J., Kahle H. C., Schwab M., Wuchner W.* Physica B, 1975, vol. 80, N 2, p. 269—286.
- [4] *Булаевский Л. И., Векхтер Б. Г.* ЖЭТФ, 1986, т. 91, № 4 (10), с. 1444—1453.
- [5] *Вонсовский С. В.* Магнетизм. М.: Наука, 1971. 1032 с.
- [6] *Gehring G. A., Gehring K. A.* Rep. Prog. Phys., 1975, vol. 38, N 1, p. 1—89.
- [7] *Nikl D., Kouroudis I., Assmus W., Luthi B., Bruls G., Welp U.* Phys. Rev., 1987, vol. B35, N 13, p. 6864—6867.

Институт химии АН МССР  
Кишинев

Поступило в Редакцию  
9 ноября 1987 г.

УДК 537.311

Физика твердого тела, том 30, в. 4, 1988  
Solid State Physics, vol. 30, № 4, 1988

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ГИБРИДИЗОВАННЫХ $f$ -ЭЛЕКТРОНОВ С УЧЕТОМ РЕАЛЬНОГО ВЫРОЖДЕНИЯ $f$ -ОБОЛОЧЕК

Ю. П. Ирхин

Гибридизация  $f$ -электронов с электронами проводимости является одним из основных эффектов в редкоземельных (РЗ) и урановых соединениях с промежуточной валентностью и с тяжелыми фермионами. При этом важную роль играет величина параметра гибридизации  $V$ , который вместе с параметрами  $\epsilon_f$  (энергия  $f$ -электрона) и  $\epsilon_F$  (энергия Ферми) определяет области существования различных возможных режимов (промежуточная валентность, резонанс Абрикосова—Сула, магнитное упорядочение).

В теоретических моделях  $V$  обычно рассматривается как феноменологический параметр, однако этого недостаточно, например, для исследования зависимости эффекта гибридизации от номера редкоземельного элемента и для перехода к количественным расчетам. Существенную роль при этом играет вырождение соответствующих конфигураций  $f^n$  и  $f^{n-1}$ , сильно меняющееся в РЗ ряде. Так, степень вырождения  $\nu$  весьма важна для определения положения  $\epsilon_F$  относительно вершины пика  $f$ -полосы (или резонанса Абрикосова—Сула)  $\epsilon_0$ . Практически большие наблюдаемые значения электронной теплоемкости (или эффективной массы для тяжелых фермионов) могут быть получены в теории только при  $\epsilon_f = \epsilon_0$  (см. обсуждение этой проблемы для  $\text{UBe}_{13}$  в обзоре [1]), что осуществляется при величине  $\nu=2$ , которое, как правило, не соответствует реально имеющемуся вырождению. Вторым примером существенного влияния степени вырождения является число Вильсона  $R = (\chi T/c) (\pi k_B / \mu_B^2) / 3$  ( $\chi$  — парамагнитная восприимчивость,  $c$  — электронная теплоемкость).

$R$  меняется от 2 до 1 ( $R=(1-1/\nu)^{-1}$ ) при изменении числа  $\nu$  от 2 до  $\infty$ . Отсюда видна актуальность рассмотрения модели  $sf$ -гибридизации с учетом реальной структуры  $f$ -оболочки.

Запишем гамильтониан  $f$ -металла в представлении многоэлектронных квантовых чисел конфигурации  $f^n$   $\Gamma_n \equiv (SLJ\mu)_n$ . Используя операторы перехода  $X(\Gamma\Gamma')$ , в стандартных обозначениях имеем

$$\mathcal{H} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma} + \sum_{i n \Gamma_n} E(\Gamma_n) X_i(\Gamma_n) + \sum_{i n \Gamma_n \Gamma_{n-1} k\sigma} [V_i(\Gamma_n, \Gamma_{n-1} k\sigma) \times X_i(\Gamma_n \Gamma_{n-1}) a_{k\sigma} + \text{с. с.}] \quad (1)$$

Выражение (1) является обобщением обычной невырожденной  $sf$ -модели [2] на случай реальных  $f$ -оболочек.

На основе техники Рака [3] можно вычислить зависимость  $V_i$  от чисел  $\Gamma_n, \Gamma_{n-1}$  в явном виде через  $9j$ -символ

$$V_i(\Gamma_n, \Gamma_{n-1} k\sigma) = \Phi(\Gamma_n \Gamma_{n-1}) v_i(\gamma, k\sigma), \quad \Phi = (n[\Gamma_n][J_{n-1}])^{1/2} \left\{ \begin{matrix} S_n & L_n & J_n \\ S_{n-1} & L_{n-1} & J_{n-1} \\ 1/2 & l & j \end{matrix} \right\} G_{\Gamma_n \Gamma_{n-1}}^{\Gamma_n} \quad (2)$$

где  $\nu$  — одноэлектронный параметр гибридизации,  $\gamma = (lm\sigma)$  — одноэлектронные квантовые числа,  $[a] = 2a + 1$ ,  $G_{\Gamma_n \Gamma_{n-1}}^{\Gamma_n}$  — генеалогический коэффициент Рака,  $j = l \pm 1/2$ .

Если считать, что  $\nu(\gamma, k\sigma)$  примерно одинаково для всех РЗ элементов (на этом же предположении основывается формула Дежана для обменного взаимодействия), то функция  $\Phi$  дает зависимость  $V$  от номера РЗ элемента. Для основных термов  $SL$  ( $J=L-S$  при  $1 \leq n \leq 7$  и  $J=L+S$  при  $8 \leq n \leq 14$ ) имеем, вычисляя  $9j$ -символ с помощью формул [4] для  $l=3$ , значения  $\Phi$ , представленные в таблице.

Значения функции  $(\Phi_j)^2$  для редкоземельного ряда

| $n$              | 1 | 2    | 3   | 4   | 5    | 6    | 7   | 8   | 9   | 10  | 11  | 12  | 13  | 14 |
|------------------|---|------|-----|-----|------|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|----|
| $(\Phi_{5/2})^2$ | 1 | 2.25 | 2.3 | 1.8 | 0.9  | 0.15 | 0   | 1.6 | 2.3 | 4.1 | 1.7 | 0.9 | 0.3 | 0  |
| $(\Phi_{7/2})^2$ | 0 | 0.25 | 0.6 | 0.8 | 0.63 | 0    | 0.9 | 0.5 | 1.3 | 4.1 | 3.0 | 3.3 | 2.8 | 1  |

Видно, что гибридизация идет по двум каналам —  $j=5/2, 7/2$  и сильно зависит от конфигурации  $f^n$  с обращением в нуль для  $n=1, 6, 7, 14$  одного из каналов. Последнее отражает существование правил отбора по полным квантовым числам  $f$ -оболочки при гибридизации.

Рассмотрим теперь спектр квазичастиц на основе гамильтониана (1). Уравнение для функции Грина  $G$  при расщеплении во втором порядке по  $V$  имеет вид  $(\bar{\varphi} = \bar{\varphi}(\Gamma_n \Gamma_{n-1}) = \bar{X}(\Gamma_n) + \bar{X}(\Gamma_{n-1}))$

$$\left[ E - \varepsilon_f(\Gamma_n \Gamma_{n-1}) - \bar{\varphi} \sum_{\sigma} |V|^2 (E - \varepsilon_{k\sigma})^{-1} \right] G_{E, k}(\Gamma_n \Gamma_{n-1} | \Gamma_n' \Gamma_{n-1}') = \frac{\delta_{\Gamma_n \Gamma_{n-1}'}}{2\pi} \bar{\varphi} \quad (3)$$

(3) отличается от обычной формой множителями  $\bar{\varphi}$ , появившимися из-за особых (нефермиевских) коммутационных соотношений для  $X$ -операторов, образующих алгебру Ли. Это приводит к важным изменениям в результатах, следующих из (3). Спектр и плотность состояний зависят теперь от средних чисел заполнения  $\bar{X}(\Gamma_n)$  («мягкая» полоса). Последние находятся самосогласованным образом

$$\bar{X}(\Gamma_n) = i \lim_{s \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E) [G_{E+i s}(\bar{\varphi}) - G_{E-i s}(\bar{\varphi})] \quad (4)$$

с добавочными условиями ( $\bar{n}$  — среднее число электронов на атом)

$$\sum_{n\Gamma_n} \overline{X(\Gamma_n)} = 1, \quad (5)$$

$$\sum_{n\Gamma_n} n \overline{X(\Gamma_n)} = \bar{n}, \quad (6)$$

так что уравнения (4)—(6) образуют полную систему для определения  $\overline{X(\Gamma_n)}$  и химпотенциала.

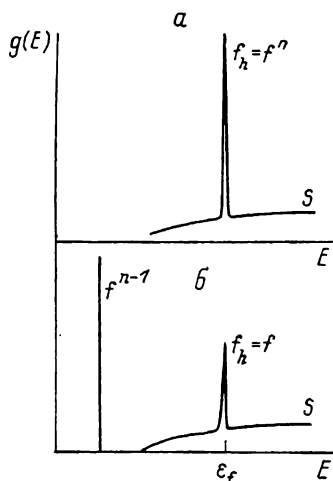
Условие (5) получается путем усреднения по  $N$  узлам  $i$  соотношения

$$\sum_{n\Gamma_n} X_i(\Gamma_n) = 1,$$

соответствующего тому, что данный узел может находиться одновременно только в одном из возможных состояний  $\Gamma_n$ .

Аналогичное (5) условие должно иметь место и в  $k$ -пространстве, поскольку

$$N^{-1} \sum_k X_k(\Gamma_n) = \overline{X(\Gamma_n)}. \quad (7)$$



Плотность состояний  $g(E)$  в одноэлектронной (а) и многоэлектронной (б) схемах.

Емкость пика  $f^n$  в а равна 14; в б емкость гибридной части  $f$ -состояний  $f_h$  только 1, остальные состояния лежат в конфигурациях  $f^{n\pm 1}$ ,  $f^{n\pm 2}$  и т. д.

Рассмотрим теперь вырожденный по проекциям  $\mu_n$  состояния  $\Gamma_n$  случай, когда  $\overline{X(\Gamma_n)}$  не зависит от  $\mu_n$ . Тогда вместо (5) имеем

$$\sum_n \overline{X(\Gamma_n)} = \nu^{-1}, \quad (8)$$

и из (7) получаем

$$N^{-1} \sum_{nk} X_k(\Gamma_n) = \nu^{-1}. \quad (9)$$

Из (9) следует, что число состояний в подполосе  $\mu_n(\Gamma_n)$  есть  $\nu^{-1}$  на атом (при  $X_k(\Gamma_n) = 1$ ,  $X_k(n' \neq n) = 0$  для всех  $k$ ), а число состояний во всей вырожденной полосе  $\Gamma_n$  (со всеми  $\mu_n$ ) есть 1.

Этот результат противоположен имеющему место в зонной теории, где в каждой подполосе может поместиться 1 электрон, а во всей полосе  $\nu$  электронов. Различие связано с тем, что в зонной схеме (без учета корреляции) допускается заполнение всех вырожденных состояний на одном узле (т. е. для  $f$ -электронов всех 14 состояний), соответствующих всем конфигурациям  $f^n$ . В многоэлектронной схеме вырождение по  $n$  снято, а из всех  $\nu$  вырожденных состояний  $\Gamma_n$  осуществляется только одно на каждом узле. Учет возможности заполнения других вырожденных состояний  $\mu'_n$  с  $\mu'_n \neq \mu_n$  на одном узле фактически означает учет состояний, принадлежащих другим конфигурациям  $n'$  и лежащих в других энергетических интервалах. В этом отношении картина аналогична модели Хаббарда.

При гибридизации двух конфигураций  $f^n$  и  $f^{n-1}$  множители  $\bar{\varphi}(\Gamma_n \Gamma_{n-1})$  регулируют распределение состояний по этим конфигурациям.

Различие одно- и многоэлектронного подходов проиллюстрировано на рисунке. Рисунок, а соответствует обычным зонным расчетам [5, 6]. Видно (см. рисунок, б), как сильное внутриаомное взаимодействие снимает вырождение между конфигурациями  $f^n$  и  $f^{n-1}$  с соответствующим

распределением полного числа состояний между ними. По-видимому, и в зонной теории можно получить спектр типа  $\beta$  при последовательной реализации двухконфигурационного приближения.

### Л и т е р а т у р а

- [1] Мошалков В. В., Брандт Н. Б. УФН, 1986, т. 149, № 4, с. 585—634.  
 [2] Ирхин Ю. П. Письма в ЖЭТФ, 1980, т. 33, № 3, с. 205—209.  
 [3] Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Физматгиз, 1963. 640 с.  
 [4] Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975. 440 с.  
 [5] Farberovich O. V., Nizhnikova G. P., Vlasov S. V., Domashevskaya E. P. Phys. St. Sol. (b), 1984, vol. 121, N 1, p. 241—247.  
 [6] Jansen H. J. F., Freeman A. J., Monnier R. Phys. Rev., 1985, vol. B 31, N 6, p. 4092—4095.

Институт физики металлов  
 УрО АН СССР  
 Свердловск

Поступило в Редакцию  
 9 ноября 1987 г.

УДК 536.311.33

Физика твердого тела, том 30, в. 4, 1988  
 Solid State Physics, vol. 30, № 4, 1988

## АНОМАЛИИ ТЕПЛОВЫХ СВОЙСТВ КРЕМНИЯ С ПРИМЕСЬЮ НИКЕЛЯ

Х. Т. Игамбердыев, А. Т. Мамадалимов, К. Махмудов,  
 Ш. О. Турсунов, П. К. Хабибуллаев

Исследования физических свойств кристаллов кремния, легированного примесными атомами с глубокими энергетическими уровнями, актуальны в связи с широким применением этих кристаллов в практике. В ряде работ сообщаются противоречивые сведения о температурном поведении физических характеристик таких кристаллов, в частности

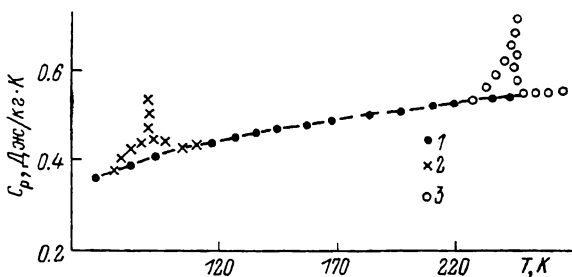


Рис. 1. Теплоемкость кремния с примесью никеля.

1 — Si, 2 — p-Si (Ni), 3 — n-Si (Ni).

в интервале температур 60—300 К обнаружены ряд аномалий физических свойств, наличие которых связывается с возможным фазовым переходом, индуцированным вводимой примесью [1].

В настоящей работе сообщаются первые результаты исследований температурной зависимости теплоемкости  $C_p(T)$  кремния, легированного никелем. Использованы исходные монокристаллические образцы кремния  $n$ - и  $p$ -типа. Технология диффузионного легирования кремния никелем, контроль параметров легированных образцов подробно приведены в [2], отметим лишь, что с целью исследования концентрационной зависимости теплоемкости диффузия никеля в кремний проводилась в интервале температур 1300—1550 К. Исследования  $C_p(T)$  проводились как с использованием вакуумно-адиабатического калориметра, так и методом сканирующего дифференциального калориметра.