

Поверхность Ферми лития с примесями

© В.А. Попов

Алтайский государственный технический университет,
656099 Барнаул, Россия

(Поступила в Редакцию 1 октября 1997 г.)

Методом ККР с функцией Грина, усредненной по атомным конфигурациям в сложной решетке Изинга, при использовании потенциала в muffin-tin-форме рассчитана зонная структура электронов в литии с вакансиями и *s*-, *p*-, *d*-примесями. Показано, что сильные изменения формы поверхности Ферми приводят не к образованию шейки, как предполагалось ранее, а к расщеплению электронных состояний на грани зоны Бриллюэна. Оно вызвано понижением симметрии кристаллической решетки с примесным возбуждением электронной подсистемы.

Литий является, пожалуй, самым популярным материалом при исследованиях в области металлофизики. Действительно, обилие экспериментальных и теоретических данных по литию открывает большие возможности в использовании этого вещества для проверки на нем вновь созданных методов исследования. С другой стороны, интенсивные испытания новых методов на литии приводят порою к открытию неожиданных свойств этого материала [1–5]. Однако некоторые из них, в частности свойства поверхности Ферми [3–7], являются предметом активного обсуждения в течение десятков лет.

Вопрос о форме поверхности Ферми лития, поставленный еще в 1970 г. [5], до сих пор, на наш взгляд, является нерешенным, несмотря на, казалось бы, однозначный вывод фундаментальной работы [7] о том, что эта поверхность близка к сферической с максимальным отклонением $4.6 \pm 1.0\%$. На это же указывают все известные нам теоретические работы, результатом которых явились расчеты формы поверхности Ферми. Поэтому мы предприняли попытку выяснить хотя бы в принципе, какие причины могут привести к существенной несферичности, а затем и оценить ее.

Первым было предположение о том, что форма поверхности Ферми в литии может испытывать значительные изменения в результате теплового возбуждения. Это предположение основывалось на том, что электрон-фононное взаимодействие в таком материале достаточно велико, а сам образец в ходе эксперимента интенсивно нагревается [4]. Однако тщательное исследование температурной зависимости зонной структуры лития [8] показало, что тепловое воздействие не может быть причиной столь сильных изменений формы поверхности Ферми, приводящих к образованию на ней шейки или хотя бы к касанию грани зоны Бриллюэна.

Следующий шаг состоял в исследовании формы поверхности Ферми в зависимости от вакансий и примесей лития. Для этого мы воспользовались методом Корринги–Кона–Ростокера [9,10] с функцией Грина [11], усредненной по атомным конфигурациям в сложной решетке Изинга. Muffin-tin-потенциал строился согласно работе [12]. Постоянная $a = 6.597$ а.е. объемноцентрированной кубической решетки [3] не менялась во всех наших расчетах. Энергия Ферми E_F определялась

численно на основе выражения

$$N(E_F) = \int \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctg \left(2 \frac{E_F - E}{\Gamma} \right) \right\} d^3k \quad (1)$$

для числа состояний, занятых электронами. Здесь $E = E(\mathbf{k})$ — энергия одноэлектронного состояния, $\Gamma = \Gamma(\mathbf{k})$ — ширина размытия этого состояния, полученные в результате поиска самосогласованного решения. Интегрирование в (1) ведется по зоне Бриллюэна, неприводимая часть которой изображена на рис. 1. Сечения поверхности Ферми гранями неприводимой части зоны Бриллюэна для металлического лития высокой чистоты

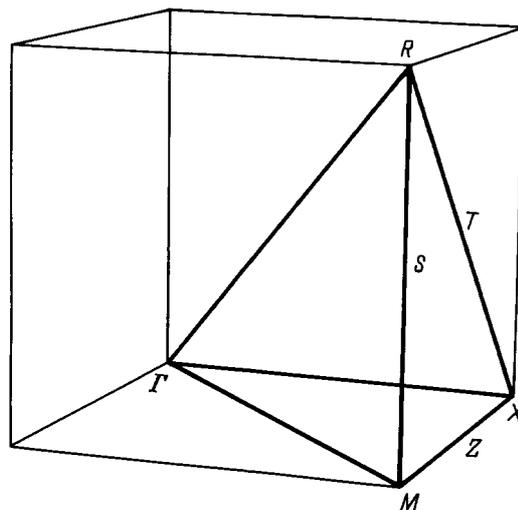


Рис. 1. Неприводимая часть зоны Бриллюэна простой кубической решетки.

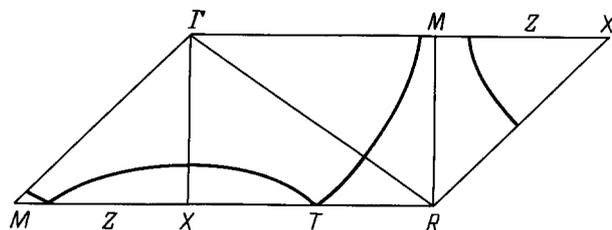


Рис. 2. Сечения поверхности Ферми гранями неприводимой части зоны Бриллюэна в литии высокой чистоты.

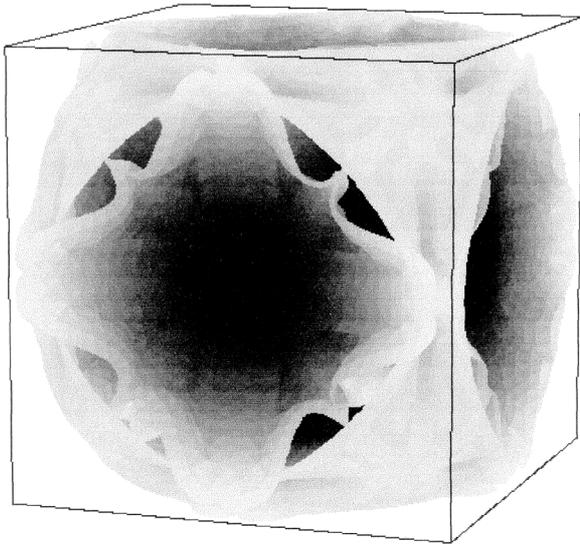


Рис. 3. Поверхность Ферми лития с примесями натрия в количестве 0.1% атомного состава.

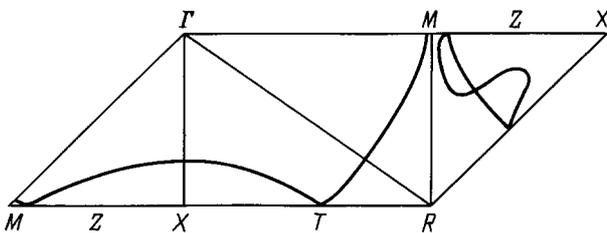


Рис. 4. Сечения поверхности Ферми лития с примесями натрия в количестве 0.1% атомного состава.

приведены на рис. 2. Сама поверхность Ферми в этом случае состоит из кусков формы, близкой к сферической. Отклонения от сферической формы в наших расчетах почти в полтора раза больше по сравнению с данными других теоретических работ, хотя и не превосходят 6%. Эти отклонения практически не меняются после введения в литий вакансий и примесей в малых количествах. И лишь начиная с некоторых критических значений концентраций, происходит резкое искривление формы поверхности Ферми (рис. 3), вызванное расщеплением состояний, выходящих на грань XMR зоны Бриллюэна. Сечения поверхности Ферми, изображенной на рис. 3, гранями неприводимой части зоны Бриллюэна показаны на рис. 4. Форма поверхности Ферми при этом почти не зависит от того, что мы вводим в исследуемый материал: вакансии либо s -, p -, d -примеси. Она резко меняется с ростом концентрации, начиная с некоторых критических значений. Для вакансий таким критическим значением является величина, равная 0.1%. Однако литий в обычных условиях содержит существенно меньшее число вакансий. Поэтому нет никаких оснований считать, что вакансии, и только они, могут повлиять на форму поверхности Ферми в литии.

При введении в литий примесей натрия или калия с концентрациями 0.1% происходит расщепление состояний на поверхности, изображенное на рис. 3. Такого же расщепления можно достичь при введении всего лишь 0.04% железа по атомному составу. Однако в таких количествах даже столь распространенный металл, как железо, в образцах лития, предназначенных для исследования, встречается крайне редко. Натрий и калий — наиболее часто встречающиеся примеси, причем нередко с концентрациями, превосходящими 0.1%. К сожалению, в экспериментальных работах, указывающих на существенную несферичность поверхности Ферми лития, не приводится количественный состав примесей. Обращает на себя внимание лишь тот факт, что в образцах (в том числе монокристаллических), содержащих примеси натрия и калия в количествах, меньших критических, не обнаружено не только шейки на поверхности Ферми, но и касания грани зоны Бриллюэна.

Таким образом, сильное изменение формы поверхности Ферми приводит не к образованию шейки, как предполагалось в ряде работ, а к расщеплению электронных состояний на грани зоны Бриллюэна. Оно вызвано понижением симметрии кристаллической решетки с примесным возбуждением электронной подсистемы.

Список литературы

- [1] О.В. Стальгорова, Е.Л. Громицкая. ФТТ **37**, 6, 1671 (1995).
- [2] Е.Л. Громицкая, О.В. Стальгорова. ЖЭТФ **106**, 5, 1453 (1994).
- [3] J. Gallaway, X. Zou, D. Bagayoko. Phys. Rev. **B27**, 2, 631 (1983).
- [4] А.А. Лысых, И.К. Янсон. ФТТ **21**, 1, 117 (1979).
- [5] H. Stachowiak. Phys. Stat. Sol. **41**, 2, 599 (1970).
- [6] R. Ahuja, S. Aulick, J.M. Wills, O. Eriksson, P. Soderlind, B. Johanson. Phys. Rev. **B50**, 24, 18 003 (1994).
- [7] V. Sakura, V. Tanaka, A. Bansil, S. Kapizuk, A.T. Shwart, V. Hagahima, T. Hyodo, S. Nanao, H. Kawata, N. Shighani. Phys. Rev. Lett. **74**, 12, 2252 (1995).
- [8] В.А. Попов. ЖЭТФ **110**, 4, 1474 (1996).
- [9] J. Korringa. Physica **13**, 392 (1947).
- [10] W. Kohn, N. Rostoker. Phys. Rev. **94**, 5, 1111 (1954).
- [11] А.И. Нажалов, В.Ф. Нявро, Н.И. Федяинова, В.Е. Егорушкин, В.П. Фадин. Изв. вузов. Физика **6**, 114 (1978).
- [12] А.И. Нажалов, В.Ф. Нявро, Н.И. Федяинова, В.Е. Егорушкин, В.П. Фадин. Изв. вузов. Физика **7**, 12 (1978).