

Аномалия магнитной восприимчивости в виде ступеньки в кристаллах с вырожденными электронными энергетическими зонами

Г.П. Микитик

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина*

E-mail: mikitik@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 7 февраля 2007 г.

Показано, что зависимость магнитной восприимчивости электронов в кристалле от их химического потенциала может иметь вид резкой ступеньки. Эта необычная аномалия магнитной восприимчивости возможна только при определенном типе вырождения двух электронных энергетических зон в точке зоны Бриллюэна кристалла, и если химический потенциал находится в окрестности энергии вырождения. В частности, такое вырождение зон имеет место в кристаллах со структурой $A-15$ (например, в V_3Si). Полученные результаты могут быть использованы для объяснения сильных температурных зависимостей магнитной восприимчивости, наблюдаемых в сверхпроводящих материалах с этой структурой в нормальном состоянии.

Показано, що залежність магнітної сприйнятливості електронів у кристалі від їхнього хімічного потенціалу може мати вигляд різкої сходинок. Ця незвичайна аномалія магнітної сприйнятливості можлива тільки при певному типі виродження двох електронних енергетичних зон у точці зони Бріллюэна кристала, і якщо хімічний потенціал знаходиться поблизу енергії виродження. Зокрема, таке виродження зон має місце в кристалах зі структурою $A-15$ (наприклад, в V_3Si). Отримані результати можуть бути використані для пояснення сильних температурних залежностей магнітної сприйнятливості, які спостерігаються у надпровідних матеріалах з цією структурою у нормальному стані.

PACS: 71.18.+y Поверхность Ферми; расчеты и измерения, эффективная масса, g -фактор;
74.70.Ad Металлы; сплавы и бинарные соединения (включая $A-15$ и т.п.).

Ключевые слова: магнитная восприимчивость, вырождение зон, соединения со структурой $A-15$.

Как известно [1,2], в металлах в случае электронного топологического перехода $2\frac{1}{2}$ рода, при котором появляется новая полость или рвется перемычка электронной изоэнергетической поверхности, зависимость магнитной восприимчивости χ от химического потенциала ζ при низкой температуре T испытывает излом. Этот излом обусловлен особым вкладом в магнитную восприимчивость, $\delta\chi$, порожденным электронными состояниями из окрестности точки топологического перехода, $\delta\chi \propto \zeta^{1/2}$ (здесь и ниже отсчитываем ζ от его критического значения, отвечающего этому переходу). В работе [1] была проанализирована только спиновая часть $\delta\chi$, которая пропорциональна собой части плотности состояний $\delta\nu$ в окрестности перехода. Позднее Недорезов [3] исследовал не только

спиновую, но и орбитальную составляющую $\delta\chi$. Хотя орбитальная часть магнитной восприимчивости, вообще говоря, не пропорциональна плотности электронных состояний и зависит от состояний, лежащих достаточно глубоко под уровнем Ферми, тем не менее оказалось, что орбитальная составляющая $\delta\chi$ также имеет корневую особенность в окрестности перехода, как и ее спиновая часть.

Еще один тип аномалий магнитной восприимчивости, проявляющихся в зависимости χ от химического потенциала ζ , связан с точками вырождения зон определенного типа [4]. В этом случае в пределе $T \rightarrow 0$ орбитальная часть магнитной восприимчивости в слабом магнитном поле H неограниченно возрастает по абсолютной величине по мере приближения ζ к энер-

гии вырождения ε_d . В работе [4] выяснено для каких типов вырождения зон возможны подобные гигантские аномалии магнитной восприимчивости и для каждого из этих случаев определен характер особенности в χ . Оказалось, что особенность может быть степенного ($\delta\chi \propto \zeta^{-1/2}$) и логарифмического ($\delta\chi \propto \ln \zeta$) типов. Аномалия степенного типа, $\delta\chi \propto \zeta^{-1/2}$, осуществляется, когда вырождение зон приводит к появлению самопересекающихся изоэнергетических поверхностей при изменении уровня Ферми. Отметим, при таком электронном топологическом переходе особенность в плотности состояний достаточно слабая и пропорциональна $\zeta^{3/2}$ [2] (т.е. это топологический переход 31/2 рода по классификации Лифшица). Логарифмическая особенность, $\delta\chi \propto \ln \zeta$, имеет место, когда при изменении ζ исчезает полость одной зоны и одновременно появляется полость другой, при этом плотность этих состояний пропорциональна ζ^2 . Интересно, что для указанных случаев вырождения зон задача о спектре блоховских электронов в магнитном поле может быть решена точно в окрестности энергии вырождения ε_d , и на основе этого решения намагнитченность металла была рассчитана не только в пределе $H \rightarrow 0$, но и при произвольной его величине [5].

В настоящей работе (ее предварительные результаты опубликованы в [6]) показана возможность существования аномалии магнитной восприимчивости нового типа в окрестностях точек вырождения зон. Эта аномалия характеризуется тем, что в слабом магнитном поле зависимость χ от ζ имеет вид фермиевской ступеньки:

$$\chi = \chi_0 + \Delta\chi \left[1 + \exp[(\varepsilon_d - \zeta)/T] \right]^{-1}. \quad (1)$$

Здесь коэффициент $\Delta\chi$ выражается через параметры спектра в окрестности точки вырождения зон, а χ_0 — постоянный, не зависящий от ζ фон, определяющийся состояниями, удаленными от этой точки. Величины χ_0 и $\Delta\chi$, вообще говоря, одного порядка. Подчеркнем, что в отличие от аномалий магнитной восприимчивости, изученных ранее, ступенька в χ сохраняется и при высоких температурах T , изменяется лишь ее крутизна.

Подобная ступенеобразная аномалия возникает, если спектр в окрестности точки вырождения имеет вид

$$\varepsilon_{c,v}(\mathbf{k}) = \varepsilon_d + ak_3 + B_1k_1^2 + B_2k_2^2 \pm E, \quad (2)$$

$$E^2 = (a'k_3 + B'_1k_1^2 + B'_2k_2^2)^2 + t^2, \quad (3)$$

где $t = \beta k_1k_2$ или $t = \beta(k_1^2 - k_2^2)$. Здесь $\beta, a, a', B_1, B_2, B'_1, B'_2$ — постоянные параметры спектра, а волновой вектор \mathbf{k} отсчитан от точки вырождения зон. Такой

спектр может осуществляться как при случайном вырождении двух зон в точке на осях симметрии кристалла второго или четвертого порядка, так и при их закономерном вырождении. (Термин «случайное вырождение» означает, что оно не вызвано симметрией кристалла [7].) В частности, согласно работе [8], посвященной сверхпроводимости соединений со структурой *A-15*, химический потенциал в этих кристаллах находится вблизи точки закономерного вырождения двух зон, спектр в окрестности которой имеет вид (2), (3) с $a = 0, B_1 = B_2, B'_1 = B'_2 = 0$.

Эффективный гамильтониан электронов двух зон, который приводит к спектру (2), (3), имеет вид

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} a_c k_3 + \beta_1^c k_1^2 + \beta_2^c k_2^2 & t \\ t^* & a_v k_3 + \beta_1^v k_1^2 + \beta_2^v k_2^2 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где $a_c, a_v, \beta_i^c, \beta_i^v$ — постоянные параметры спектра, и $a = (a_c + a_v)/2, a' = (a_c - a_v)/2, B_i = (\beta_i^c + \beta_i^v)/2, B'_i = (\beta_i^c - \beta_i^v)/2$. Для определенности мы далее полагаем $t = \beta k_1k_2$. Такой гамильтониан может быть получен из гамильтониана Латтинжера–Кона [9] для всех зон после его частичной диагонализации, при которой в главном порядке по \mathbf{k} обращаются в нуль его матричные элементы между двумя рассматриваемыми зонами c и v и всеми остальными зонами [10].

Аномалия магнитной восприимчивости типа (1) возникает, только когда магнитное поле \mathbf{H} перпендикулярно оси k_3 . Для определенности далее будем рассматривать компоненту тензора магнитной восприимчивости χ_{11} , которая описывает магнитный момент M_1 вдоль оси k_1 в слабом магнитном поле H , направленном по той же оси, $M_1 = \chi_{11}H$. Для расчета χ_{11} может быть использована формула Фукуямы [11], которая в рассматриваемом случае принимает вид

$$\chi_{11} = \frac{T}{2} \left(\frac{e\hbar}{m^2c} \right)^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \text{Sp}[(\gamma_2 G \gamma_3 G)^2], \quad (5)$$

где m, e — масса и заряд электрона; матрица температурных функций Грина G имеет вид, $G_{ll'} = ([i\omega_n + \zeta - \hat{H}(\mathbf{k})]^{-1})_{ll'}$; зонные индексы l и l' пробегают два значения c и v , отвечающие рассматриваемым зонам; $\omega_n = \pi T(2n + 1)$; $\hat{H}(\mathbf{k})$ задается формулой (4); шпур берется по индексам c и v , а интегрирование идет по окрестности точки вырождения, которая здесь совпадает с $\mathbf{k} = 0$. Матрицы γ_i в (5) равны: $(\gamma_i)_{ll'} = \hbar k_i \delta_{ll'} + (\pi_i)_{ll'}$, где $\pi_{ll'}(\mathbf{k})$ матричные элементы оператора импульса, записанные в том же представлении, что и гамильтониан (4). Можно показать, что в рассматриваемом случае вырождения зон матрицы γ_i могут быть найдены из формулы

$$\gamma_i = \frac{m}{\hbar} \frac{\partial \hat{H}(\mathbf{k})}{\partial k_i}. \quad (6)$$

Выполняя матричные операции и суммируя по n в (5), в итоге приходим к интегралу по окрестности точки $\mathbf{k} = 0$, в котором функция под интегралом зависит от k_3 и комбинаций ε и E , определяемых формулами (2), (3). Делая замену переменных в этом интеграле,

$$\tilde{k}_1 = U_1 k_1, \quad \tilde{k}_2 = U_2 k_2, \quad \tilde{k}_3 = U_3 k_3 + V_1 k_1^2 + V_2 k_2^2,$$

можно подобрать постоянные U_1, U_2, U_3, V_1, V_2 так, что формулы (2), (3) преобразуются к виду

$$\varepsilon_{c,v}(\tilde{\mathbf{k}}) = \tilde{a} \tilde{k}_3 + \sigma_1 \tilde{k}_1^2 + \sigma_2 \tilde{k}_2^2 \pm E, \quad (7)$$

$$E^2 = \tilde{k}_3^2 + (4/\lambda) \tilde{k}_1^2 \tilde{k}_2^2,$$

где $\tilde{a} = (a_c + a_v)/|a_c - a_v|$, $\lambda = 4\tilde{B}_1\tilde{B}_2/\beta^2$, $\tilde{B}_i = (a_c\beta_i^v - a_v\beta_i^c)/(a_c - a_v)$ и $\sigma_i = \pm 1$ в зависимости от знака \tilde{B}_i ; $i = 1, 2$. Таким образом, при заданных σ_i существенными параметрами, от которых в данной модели спектра зависит магнитная восприимчивость, являются \tilde{a} и λ . Описанная выше аномалия χ имеет место только при определенном соотношении между ними. В дальнейшем ограничимся рассмотрением случая $\tilde{a} = 0$. Случай произвольного \tilde{a} будет проанализирован в другой работе.

При $\tilde{B}_1 > 0, \tilde{B}_2 > 0$, переходя в интеграле, определяющем χ_{11} , от переменных k_1, k_2 к интегрированию по E и ε и изменяя последовательность интегрирований, приходим к выражению, состоящему из суммы интегралов вида

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \Phi(\varepsilon), \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \varphi(\varepsilon), \quad (8)$$

где $f(\varepsilon) = [1 + \exp[(\varepsilon - \zeta)/T]]^{-1}$ — фермиевская функция, а $\Phi(\varepsilon)$ и $\varphi(\varepsilon)$ определяются выражениями

$$\Phi(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{k}_3 \int dE \frac{\text{sign } E}{(E^2 - \tilde{k}_3^2)^{1/2}} \left(\frac{\varepsilon - E}{EY(\varepsilon, E, \tilde{k}_3)} + \frac{Y(\varepsilon, E, \tilde{k}_3)}{E^2} \right), \quad (9)$$

$$\varphi(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{k}_3 \int \frac{dE \text{ sign } E}{(E^2 - \tilde{k}_3^2)^{1/2} Y(\varepsilon, E, \tilde{k}_3)}. \quad (10)$$

Здесь

$$Y^2(\varepsilon, E, \tilde{k}_3) = (\varepsilon - E)^2 - \lambda(E^2 - \tilde{k}_3^2), \quad (11)$$

а область интегрирования по E в (9) и (10) определяется условиями

$$E^2 - \tilde{k}_3^2 > 0, \quad \varepsilon - E > [\lambda(E^2 - \tilde{k}_3^2)]^{1/2}. \quad (12)$$

Переходя в интегралах (9) и (10) и условиях (12), определяющих область интегрирования, к переменным $E/|\varepsilon|, \tilde{k}_3/|\varepsilon|$, нетрудно убедиться, что $\Phi(\varepsilon)$ и $\varphi(\varepsilon)$ на самом деле от ε не зависят. Точнее говоря, функции $\Phi(\varepsilon)$ и $\varphi(\varepsilon)$ кусочно постоянны:

$$\Phi(\varepsilon) = \Phi_+, \quad \varphi(\varepsilon) = \varphi_+ \quad \text{при } \varepsilon > 0, \quad (13)$$

$$\Phi(\varepsilon) = \Phi_-, \quad \varphi(\varepsilon) = \varphi_- \quad \text{при } \varepsilon < 0,$$

где $\Phi_+, \Phi_-, \varphi_+, \varphi_-$ — некоторые постоянные. Необходимо также отметить, что интеграл (9) является несобственным. Анализ магнитной восприимчивости, выполненный при учете слабого спин-орбитального взаимодействия, которое приводит к появлению малой щели в спектре, показывает, что несобственный интеграл должен вычисляться в смысле главного значения Коши. Из этого результата также следует, что перенормировки электронного энергетического спектра, связанные с ферми-жидкостным или электрон-фононным взаимодействиями, могут заметно повлиять на магнитную восприимчивость, если эти перенормировки существенно превышают эффект спин-орбитального взаимодействия. Однако этот вопрос выходит за рамки настоящей работы, в которой все вычисления проводятся в одноэлектронном приближении.

С учетом формул (13) интегралы (8), с точностью до несущественных постоянных, не зависящих от ζ , сводятся к выражениям $-\Delta\Phi f(0), -\Delta\varphi f(0)$, где $\Delta\Phi \equiv \Phi_+ - \Phi_-, \Delta\varphi \equiv \varphi_+ - \varphi_-$. Величины $\Delta\Phi$ и $\Delta\varphi$ задаются интегралами, совпадающими с (9) и (10) при $\varepsilon > 0$, но в которых интегрирование по E идет по области, определяемой условиями

$$E^2 - \tilde{k}_3^2 \geq 0, \quad Y^2(\varepsilon > 0, E, \tilde{k}_3) \geq 0. \quad (14)$$

Окончательно, при $\tilde{a} = 0$ и $\tilde{B}_1 > 0, \tilde{B}_2 > 0$ для χ_{11} получаем формулу (1), в которой

$$\Delta\chi = \frac{1}{12\pi^3} \left(\frac{e}{\hbar c} \right)^2 \frac{a'\beta}{\tilde{B}_1} \left[(1-\lambda)\Delta\Phi - \frac{\lambda}{2}\Delta\varphi \right], \quad (15)$$

и $a' = |a_c| = |a_v|$, $\tilde{B}_i = (\beta_i^v + \beta_i^c)/2$, $\lambda = 4\tilde{B}_1\tilde{B}_2/\beta^2$. Интересно, что формула (15) на самом деле справедлива при любых знаках \tilde{B}_1 и \tilde{B}_2 , но при $\lambda < 0$ область интегрирования по E в $\Delta\Phi$ и $\Delta\varphi$ определяется единственным условием $E^2 - \tilde{k}_3^2 \geq 0$ (неравенство $Y^2(\varepsilon > 0, E, \tilde{k}_3) \geq 0$ выполнено автоматически при $\lambda < 0$).

Детальный анализ зависимости $\Delta\chi$ от λ будет проведен в другой работе. Здесь же только отметим, что при $\lambda > 1$ интегралы, определяющие постоянные $\Delta\Phi$ и $\Delta\varphi$, могут быть вычислены аналитически, если рассматривать E как комплексную переменную и воспользоваться теорией вычетов. В итоге, оказывается, что эти постоянные, а вместе с ними и $\Delta\chi$, равны нулю для $\lambda > 1$. При $\lambda < 1$ область интегрирования по E ,

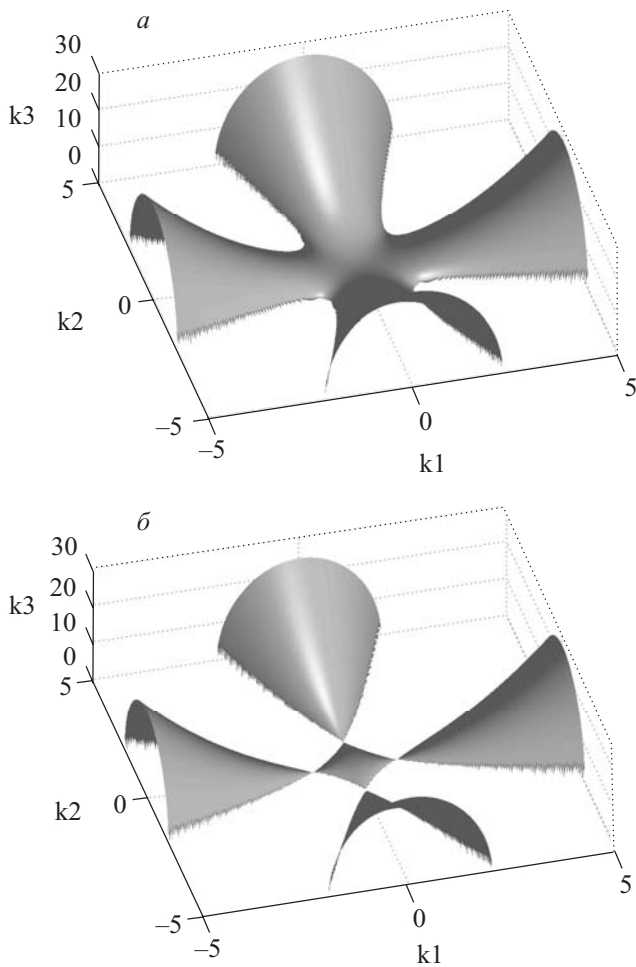


Рис. 1. Изоэнергетические поверхности для спектра (7) с $\tilde{a} = 0$, $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$ и $\lambda = 0,5$ при отрицательных (а) и положительных (б) значениях ϵ . Рисунки построены в координатах $k_i = \tilde{k}_i/|\epsilon|$. В случае отрицательных ϵ изоэнергетическая поверхность имеет вид четырех дырочных лепестков зоны v , соединенных перемычкой в окрестности начала координат (а). Для положительных ϵ перемычки дырочной поверхности нет, но в окрестности начала координат имеется электронная полость зоны c (б).

определяемая формулами (14), изменяется по сравнению со случаем $\lambda > 1$ и подобное вычисление интегралов становится невозможным. При этом $\Delta\Phi$, $\Delta\phi$ и $\Delta\chi$, вообще говоря, отличны от нуля в этой области значений λ . Это следует из того, что в пределе $\lambda \rightarrow 0$ непосредственное вычисление дает

$$\Delta\Phi = -2\pi, \quad \lambda \Delta\phi = 0.$$

Используя формулы (7), нетрудно установить, что случаи $\lambda > 1$ и $\lambda < 1$ отличаются характером электронного топологического перехода, который имеет место при прохождении ζ через критическое значение $\zeta = 0$. Например, при $\tilde{B}_1 > 0$, $\tilde{B}_2 > 0$ и $\lambda < 1$ для отрицательных ζ изоэнергетическая поверхность имеет вид четырех дырочных лепестков зоны v , охватывающих ко-

ординатные оси \tilde{k}_1, \tilde{k}_2 и соединенных перемычкой в окрестности точки $\tilde{k} = 0$, рис. 1,а. При $\zeta > 0$ перемычка исчезает и появляется электронная полость зоны c , которая на осях \tilde{k}_1 и \tilde{k}_2 имеет по одной точке контакта с каждым из дырочных лепестков зоны v , рис. 1,б. Следовательно, при $\zeta > 0$ не только появляется самопересекающаяся изоэнергетическая поверхность, но и связность дырочной части поверхности изменяется. В то же время, при $\lambda > 1$ и $\zeta > 0$ четырех отдельных дырочных лепестков нет (они слиты в единую поверхность), и дырочная часть изоэнергетической поверхности остается связной и при $\zeta > 0$. Таким образом, исследуемая аномалия магнитной восприимчивости весьма «чувствительна» к деталям электронного топологического перехода.

Как уже отмечалось выше, модель (2), (3) с $a = 0$, $B_1 = B_2$, $B'_1 = B'_2 = 0$ описывает спектр соединений со структурой $A-15$, например V_3Si . В этих соединениях выше температуры сверхпроводящего перехода часто наблюдаются сильные температурные зависимости магнитной восприимчивости [12]. Эти зависимости рассчитывались в работе [8]. Было получено, что магнитная восприимчивость должна логарифмически зависеть от ζ при низкой температуре. Однако этот результат связан с тем, что в [8] при расчете магнитной восприимчивости в эффективном гамильтониане электрона в магнитном поле H учитывались лишь линейные по H члены. В то время как для правильного расчета магнитной восприимчивости, которая в слабом магнитном поле определяются квадратичными по H членами Ω потенциала, необходимо принимать во внимание и квадратичные по H члены в эффективном гамильтониане. Формула Фукуямы (5) получена с учетом таких членов, и ее использование, как показано выше, приводит к зависимости (1). Возможно, полученные здесь формулы (1), (15) позволят не только качественно, но и количественно описать экспериментальные температурные зависимости магнитной восприимчивости соединений со структурой $A-15$ (отметим, использование для этой цели результатов работы [8] наталкивается на трудности [12]). Это предполагается выполнить в отдельной работе.

1. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **38**, 1569 (1960).
2. И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, ГРФМЛ, Москва (1971).
3. С.С. Недорезов, *ФНТ* **2**, 1047 (1976); *там же* **4**, 198 (1978); *там же* **6**, 80 (1980).
4. Г.П. Микитик, И.В. Свечкарев, *ФНТ* **15**, 295 (1989).
5. Г.П. Микитик, Ю.В. Шарлай, *ФНТ* **22**, 762 (1996).
6. Г.П. Микитик, *26 Всес. совещ. по физ. низк. тем-р. Тез. док.*, Донецк (1990), т. 3, с. 132.
7. С. Herring, *Phys. Rev.* **52**, 365 (1937).
8. Л.П. Горьков, *ЖЭТФ* **65**, 1658 (1973).

9. J.M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
10. Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, Наука, ГРФМЛ, Москва (1972).
11. Н. Фукуяма, *Progr. Theor. Phys.* **45**, 704 (1971).
12. С.В. Вонсовский, Ю.А. Изюмов, Э.З. Курмаев, *Сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений*, Наука, ГРФМЛ, Москва (1977).

Step-like anomaly of magnetic susceptibility in crystals with degenerate electron-energy bands

G.P. Mikitik

It is shown that the dependence of magnetic susceptibility of electrons in a crystal on their chemical potential is of a sharp step shape. This unusual anomaly of the magnetic susceptibility may

occur only under a certain type of degeneracy of two electron-energy bands at a point of the Brillouin zone and if the chemical potential is in the vicinity of the degenerate energy. In particular, this type of degeneracy occurs in compounds with the crystal structure *A-15* (e.g., in V_3Si). The results obtained can be used to explain the known strong temperature dependences of magnetic susceptibility of *A-15* superconductors when they are in the normal state.

PACS: :71.18.+y Fermi surface: calculations and measurements; effective mass, *g*-factor; 74.70.Ad Metals; alloys and binary compounds (including *A-15*, MgB_2 , etc.).

Keywords: magnetic susceptibility, degeneracy of bands, compounds with structure *A-15*.