

**ТЕРМОЭДС И ЭЛЕКТРОННЫЙ ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ПЕРЕХОД
В СИСТЕМЕ $\text{Mo}_{1-x}\text{Re}_x$**

*A.H. Великодный, Н.В. Заварницкий, Т.А. Игнатьева,
A.A. Юргенс*

В системе $\text{Mo}_{1-x}\text{Re}_x$ обнаружена гигантская локальная аномалия термоэдс при $x = 0,11$, свидетельствующая о наличии топологического электронного перехода в этой системе. Определена зависимость амплитуды аномалии от температуры.

В последнее время установлено, что происходящая при изменении концентрации примеси под давлением перестройка поверхности Ферми металла, — топологический электронный переход, — сопровождается гигантской аномалией термоэдс $1 - 3$, там же литература). Тем самым, возникла новая возможность исследовать особенности электронной структуры металла вблизи поверхности Ферми.

Объектом исследования нами был выбран молибден, металл с объемно-центрированной кубической решеткой, электронная структура которого подробно изучена (см. обзор ⁴). В качестве примеси использовался рений, который до атомной концентрации $x \approx 0,3$ образует в Mo твердый раствор замещения. Постоянная решетки при внесении рения незначительно уменьшается ($\sim 0,5\%$ при $x = 0,25$).

Каждый атом Re вносит лишний электрон проводимости, что, очевидно, сопровождается увеличением энергии Ферми ϵ_F

$$\Delta\epsilon_F = x\nu^{-1} \quad (1)$$

где $\nu = 0,8 \div 1,0 \left(\frac{\text{число состояний}}{\text{атом. эВ}} \right)$, — ⁴ плотность электронных состояний на уровне Ферми. Атомные веса Mo и Re различаются вдвое и температура Дебая уменьшается от 470 К для чистого Mo до 350 К в сплаве $\text{Mo}_{0,7}\text{Re}_{0,3}$. Температура перехода в сверхпроводящее состояние T_c в системе $\text{Mo}_{1-x}\text{Re}_x$ изменяется от 0,92 до 11 К при увеличении x от 0 до 0,3, что позволяет по величине T_c контролировать концентрацию рения в образце.

Исследованные в работе образцы были вырезаны из монокристаллов, полученные путем зонной вакуумной плавки заготовок смеси сверхчистого молибдена и рения. Состав образцов определялся по удельному весу, активационному анализу и корректировался по ранее полученной ⁵ зависимости T_c и RRR образцов от концентрации Re. Анализ результатов определения x различными способами показывал, что возможная систематическая ошибка в определении во всем интервале измерений не превосходит $\sim 0,1x$. Ширина сверхпроводящего перехода у подавляющего большинства образцов составляла $0,04 \div 0,2$ К, что свидетельствует об однородности их состава.

В опыте, в интервале от T_c до 11 К компенсационно определялись удельное сопротивление, теплопроводность, термоэдс α с использованием СКВИД'ов в качестве нуль приборов, (как, например, в ⁶).

У молибдена ($RRR = 2 \cdot 10^3$) удельное сопротивление $\rho = \rho_0 + 1,39 \cdot 10^{-12} T^2$, где второй член, видимо, обязан электрон-электронному рассеянию. Термоэдс всех образцов определяется диффузной частью. Величина αT^{-1} лишь незначительно изменяется с температурой. У чистого молибдена уменьшение αT^{-1} составляет $\sim 15\%$, у $\text{Mo}_{0,9}\text{Re}_{0,1} \sim 3\%$. Отчетливый локальный максимум в зависимости $\alpha T^{-1}(x)$ при $x = 0,11$ ($T_c = 3,65 \text{ K}$), где происходит возрастание (αT^{-1}) почти в 10 раз (рис. 1), очевидно, свидетельствует о наличии электронного топологического перехода в системе $\text{Mo}_{1-x}\text{Re}_x$. Воспользовавшись (1) по величине $x = 0,11$ и $\nu = 0,9$ получаем, что переход происходит в результате увеличения ϵ_F молибдена на $\simeq 0,12 \text{ эВ}$.

Рассмотрим, с какой перестройкой поверхности Ферми может быть связан этот переход. Возрастание ϵ_F должно сопровождаться, очевидно, уменьшением дырочных элементов поверхности Ферми. Увеличение ϵ_F на $0,12 \text{ эВ}$, согласно данным⁷ приводит к уменьшению сечения дырочных эллипсоидов, — наименьших дырочных частей поверхности Ферми, — всего лишь на $\sim 12\%$. Ясно, что переход связан с иной перестройкой поверхности Ферми. Увеличение ϵ_F может вызывать появление новых электронных частей поверхности Ферми, если минимум какой-либо незаполненной электронной зоны расположен близко к ϵ_F . Именно такая ситуация имеет место в молибдене, где согласно зонной структуре полученной расчетом, ближайший минимум электронной не заполненной зоны расположен на $\Delta\epsilon \sim 0,2 \text{ эВ}$ над поверхностью Ферми (см.⁴). Это значение $\Delta\epsilon$ близко к полученному в опыте, и, видимо, наблюденный переход в системе $\text{Mo}_{1-x}\text{Re}_x$ при $x = 0,11$ действительно связан с рождением новой электронной части поверхности Ферми в точке G на оси NH (обозначения см.⁴). Отметим, что возможность такого топологического перехода при $x \sim 0,1$ дискутировалась ранее⁵ на основании данных по изменению T_c в системе $\text{Mo}_{1-x}\text{Re}_x$.

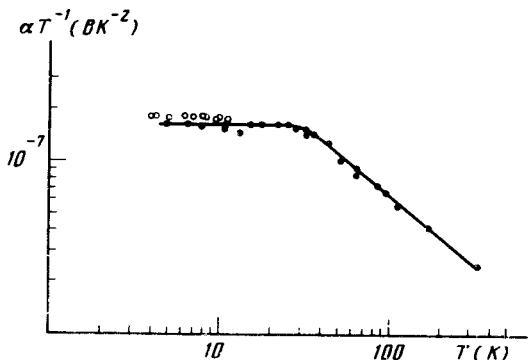
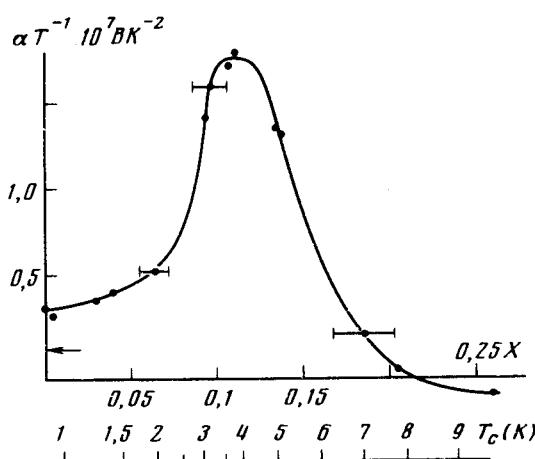


Рис. 2. Зависимость аномалии термоэдс от температуры: ● — термоэдс образца с $x = 0,11$ относительно образца с $x = 0,2$, αT^{-1} для которого составляет $0,038 \cdot 10^{-7} \text{ В} \cdot \text{К}^{-2}$; ○ — абсолютная дифференциальная термоэдс образца с $x = 0,11$

Рис. 1. Термоэдс системы $\text{Mo}_{1-x}\text{Re}_x$ от концентрации $x \text{ Re}$ (в порядке возрастания T_c образцов). Стрелочкой указано значение $\alpha_0 T^{-1}$ для чистого Mo при комнатной температуре⁸

Как известно, асимметрия локального максимума термоэдс отражает тип топологического перехода. Однако, провести надежный анализ вида аномалии в нашем случае затруднительно, поскольку неясно, как изменилась бы термоэдс в отсутствие перехода вблизи $x = 0,11$ (какая величина "подставки" α_0 под аномалией). Связано это с тем, что в электронной структуре молибдена, согласно рассчитанному спектру можно ожидать несколько топологических переходов вблизи ϵ_F , а именно при $\Delta\epsilon = - (0,1 \div 0,2 \text{ эВ})$ — появление электронных линз, при $\Delta\epsilon \sim 0,8 \text{ эВ}$ — исчезновение дырочных эллипсоидов и одновременно появление

новых электронных поверхностей. Эти переходы расположены вблизи от исследованного на-
ми интервала энергий $\Delta E = 0 \div 0,3$ эВ и плечи соответствующих аномалий термоэдс могут су-
щественно изменить вид подставки. При оценке относительной величины аномалии $\alpha_{x=0,11} \alpha_0^{-1}$
было использовано значение $\alpha_0 T^{-1} = 1,7 \cdot 10^{-8}$ В·К⁻², полученное в измерениях термоэдс
молибдена при $T \geq 200$ К⁸, где аномалии становятся пренебрежимыми.

Температурная зависимость аномалии определялась в дополнительных опытах в интервале
 $4 \div 350$ К, где измерялась термоэдс образца с $x = 0,11$ относительно образца с $x = 0,2$;

$$\Delta\left(\frac{\alpha}{T}\right) = \left(\frac{\alpha}{T}\right)_{x=0,11} - \left(\frac{\alpha}{T}\right)_{x=0,2} \quad (2)$$

Градиент температуры измерялся в диапазоне $5 \div 60$ К с помощью угольных термометров,
а выше 77 К – термопарой медь-константан и составлял $\sim 0,05$ К при 4,8 К и $3 \div 6$ К при
 $T > 60$ К. Эти измерения позволяют выделить область температур, где $\Delta(\alpha T^{-1})$ остается
неизменной ($0 \div 30$ К) и область, где $\Delta(\alpha T^{-1})$ монотонно уменьшается с повышением тем-
пературы $T \geq 30$ К. Величину аномалии в первой области определяет конечное время жизни
носителей τ (или $\Gamma = \hbar\tau^{-1}$), во второй – температурное размытие (здесь $T > \Gamma$). Из кри-
вой зависимости $\Delta(\alpha/T)/T$ (рис. 2) получаем $\Gamma \approx 30$ К.

Согласно теоретическим оценкам^{9, 10} в области $T < \Gamma$ величина аномалии

$$\Delta\alpha \sim \alpha_0 \cdot 0,25(\epsilon_F \Gamma^{-1})^{1/2}. \quad (3)$$

После подстановки численных величин $\epsilon_F = 6,5$ эВ⁴, $\Gamma = 30$ К получаем $\Delta\alpha = 12\alpha_0$, что
совпадает с величиной, полученной в опыте (см. рис. 1)¹¹. В области температур $T \geq \Gamma$ при
увеличении T максимум кривой на рис. 1 должен смещаться по оси концентраций¹⁰, умень-
шаясь по амплитуде как $T^{-0,5}$. В эксперименте $\Delta(\alpha T^{-1}) \sim T^{-(0,8)}$ ($T > 30$ К). Это, ве-
роятно, связано с тем, что точка $x = 0,11$ при смещении максимума может оказаться на кру-
том плече аномалии.

Авторы благодарны за техническое содействие Н.А.Никитину, за изготовление монокрис-
таллов – В.А.Еланскому, за содействие в проведении активационного анализа В.Н.Самосюку.

Литература

1. Егоров В.С., Федоров А.Н. ЖЭТФ, 1983, 85, 1684.
2. Заварицкий Н.В., Макаров В.И., Юргенс А.А. Письма в ЖЭТФ, 1985, 42, 148.
3. Брандт Н.Б., Егоров В.С. и др. ЖЭТФ, 1985, 89, 2227.
4. Каганов М.И., Кугель К.И., Лисовская Т.Ю. ФНТ, 1985, 11, 227.
5. Игнатьева Т.А., Черевань Ю.А. Письма в ЖЭТФ, 1980, 31, 389.
6. Заварицкий Н.В., Омельяновский О.Е. ЖЭТФ, 1982, 83, 1182.
7. Bakker H.L.M., Griessen R., Venema W. J. Phys. F., 1980, 10, 833.
8. Cusak N., Kendall P. Proc. Phys. Soc., 1958, 72, 898.
9. Баръяхтар В.Г., Гани В.В., Макаров В.И. ФТТ, 1972, 14, 1715.
10. Варламов А.А., Панциула А.В. ЖЭТФ, 1985, 89, 2188.

Институт физических проблем

Академии наук СССР

Харьковский физико-технический институт
Академии наук Украинской ССР

Поступила в редакцию
7 мая 1986 г.

⁸ Ширина особенности на уровне $0,5 \Delta\alpha_0$ составляет 700 ± 200 К. Согласно оценкам^{2,9} полуширина осо-
бенности не должна превосходить ≈ 7 Г, т. е. ≈ 200 К. Расхождение между двумя полученными значе-
ниями, вероятно, свидетельствует о том, что соотношение (1) является приближенным.