

## ЭЛЕКТРОННЫЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В СИСТЕМЕ Mo-Re

*Н.В.Скородумова, С.И.Симак, Я.М.Блантер, Ю.Х.Векилов*

*Московский институт стали и сплавов*

*117936 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 9 сентября 1994 г.

В приближении когерентного потенциала исследованы электронный спектр и термодинамические свойства неупорядоченных твердых растворов  $Mo_{1-x}Re_x$ . Обнаружены два электронных топологических перехода при  $x \sim 0,02$  (образование новой электронной полости поверхности Ферми) и при  $x \approx 0,08$  (образование перемычки).

Экспериментальное изучение неупорядоченных сплавов системы Mo-Re [1, 2] выявило особенности на концентрационных зависимостях физических свойств. Так, в [1] наблюдалась нелинейная зависимость температуры сверхпроводящего перехода под давлением, а в [2] была обнаружена гигантская аномалия термоэдс сплава  $Mo_{1-x}Re_x$  при  $x \sim 0,11$ . Авторы работ [1, 2] связывали появление этих особенностей с электронным топологическим переходом (ЭТП) — рождением при  $x \sim 0,11$  новой электронной полости поверхности Ферми на оси NH зоны Бриллюэна. Такое объяснение базировалось на данных об электронном спектре чистого молибдена [3] и простых оценках в модели жесткой зоны. Тем не менее окончательный вывод о наличии ЭТП в неупорядоченном сплаве не может быть сделан без исследования его электронной структуры. Для системы Mo-Re проводились попытки такого исследования. Так, в работе [4] сообщалось о наблюдении особенности Ван-Хова при  $x \sim 0,1$  в рентгеновских фотоэмиссионных измерениях, однако проделанный там же расчет плотности состояний в модели сильной связи никаких особенностей в электронной структуре не выявил. Таким образом, надежная информация об электронной структуре сплавов Mo-Re в данное время отсутствует.

В настоящей работе мы провели теоретический анализ электронного спектра и возможности ЭТП в сплавах системы Mo-Re. Сплавы  $Mo_{1-x}Re_x$  образуют непрерывный ряд неупорядоченных твердых растворов вплоть до  $x \sim 0,3$ . Электронный спектр и термодинамические свойства неупорядоченных твердых растворов замещения рения в молибдене рассчитывались "из первых принципов" в приближении когерентного потенциала. В приближении когерентного потенциала [5] неупорядоченный сплав заменяется решеткой эффективных рассеивателей; параметры эффективной среды выбираются так, чтобы случайное распределение различных сортов атомов на решетке в среднем не давало вклада в рассеяние. В принятом методе одночастичная электронная функция Грина и ее спектральная плотность (необходимая для построения ферми-поверхности) определялись самосогласованно методом функционала плотности в базисе линейных МТ-орбиталей (подробнее о методе см. [6, 7]). Спектральная плотность рассчитывалась с  $x = 0,02$  и выше, а термодинамические свойства — для  $x \geq 0,04$ .

Прежде всего оказалось, что новая электронная полость (ее появление следует ожидать, поскольку в чистом молибдене имеется минимум незаполненной

В, ГПа

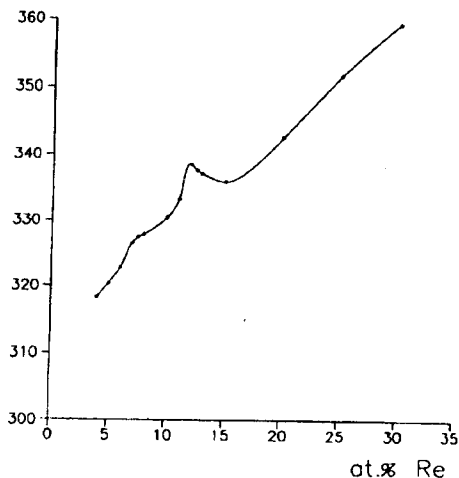
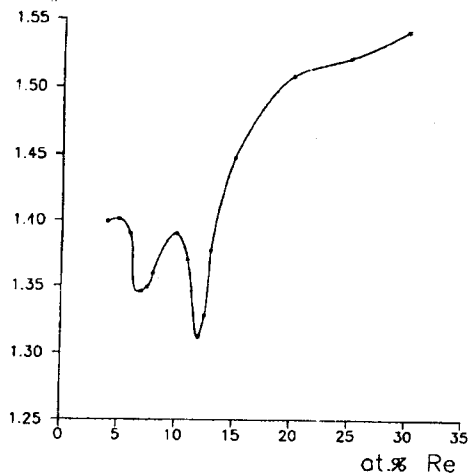
 $\gamma$ 

Рис.1 Концентрационные зависимости объемного модуля (а) и постоянной Грюнайзена (b) неупорядоченного сплава Mo-Re

электронной зоны, расположенный на 0,02 эВ выше уровня Ферми (вблизи оси NH) формируется при  $x < 0,02$  (а не при  $x \sim 0,1$ , как предполагалось ранее [1, 2]). При  $x \sim 0,02$  уже существуют два четких пика в спектральной плотности при  $\epsilon = E_F$  на линии NH. Эту особенность поведения термодинамических свойств наблюдать не удастся ввиду недостаточной точности их расчета при  $x \leq 0,04$ .

Характерная черта рассчитанных в интервале  $0,04 \leq x \leq 0,3$  термодинамических свойств — наличие двух особенностей: при  $x \sim 0,08$  и  $x \sim 0,12$  (рис.1). Первая из них с уверенностью может быть связана с ЭТП, обусловленным образованием перемычки в плоскости ГNH. Во-первых, как и должно быть при ЭТП этого типа [8], модуль всестороннего сжатия со стороны большей связности поверхности Ферми имеет характерную корневую особенность, а константа Грюнайзена стремится к бесконечности (но не обращается в нее из-за размытия перехода вследствие разупорядочения). Во-вторых, на факт ЭТП однозначно указывает и изменение профиля спектральной плотности (снятого вдоль линии, параллельной NH и проходящей от нее на расстоянии  $0,57(2\pi/a)$ , то есть проходящей через точку образования перемычки) с концентрацией. В неупорядоченном сплаве конечность времени жизни электронного состояния с определенной энергией приводит к "размытию" энергетических уровней электрона. Характерная величина размытия каждого уровня есть  $\Gamma \sim \hbar/\tau(\epsilon)$ , где  $\tau(\epsilon)$  играет роль среднего времени жизни электрона с энергией  $\epsilon$ . В частности, размывается и поверхность Ферми, что приводит к распространению ЭТП на интервал концентраций [9] (см. обзор результатов в [10]). Действительно, как видно на рис. 2, поведение спектральной плотности идеально отвечает концепции размытой поверхности Ферми. Для простоты рассуждений удобно заменить гауссово размытие уровня Ферми на профиль с резкими границами: от  $E_F - \Gamma/2$  до  $E_F + \Gamma/2$ . Тогда, например, "начало" ЭТП соответствует

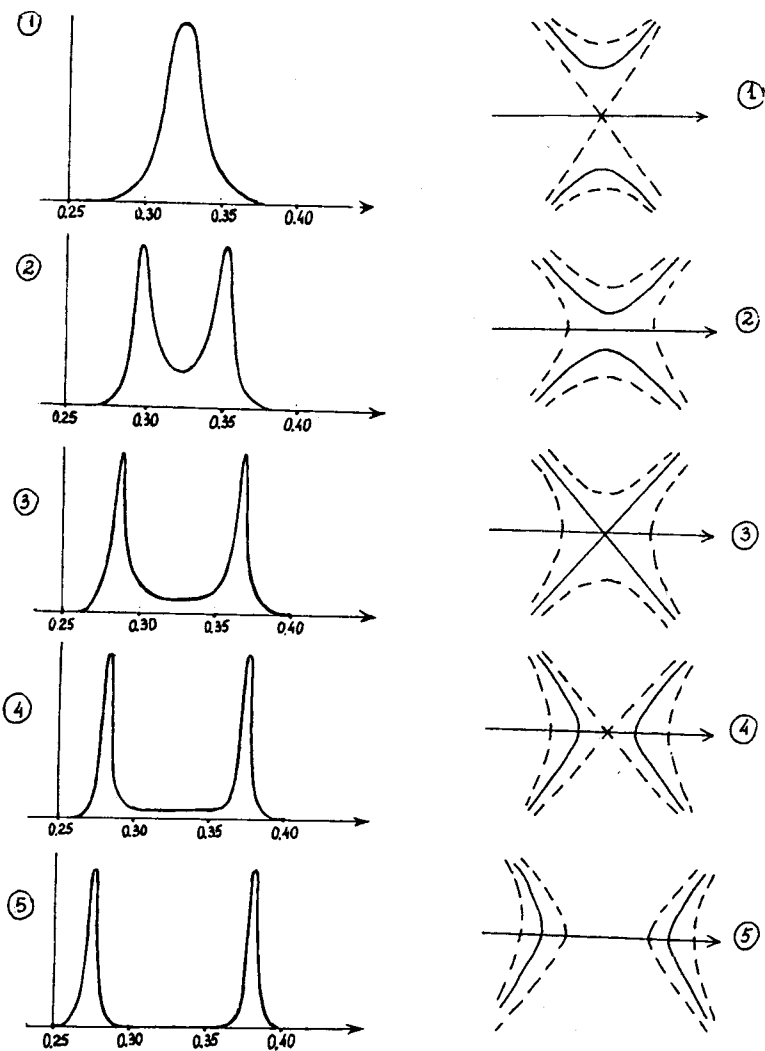


Рис.2 а) Профили спектральной плотности на поверхности Ферми, снятые вдоль прямой, параллельной  $NH$ , и проходящей через точку образования перемычки. По горизонтальной оси отложено расстояние от линии ГН. Цифры соответствуют концентрациям (ат.% Re): 1 - 3 ат.% Re, 2 - 5%, 3 - 8%, 4 - 11%, 5 - 15%. б) Соответствующие этим концентрациям поверхности Ферми вблизи точки образования перемычки. Горизонтальная прямая отвечает прямой, вдоль которой рассчитаны профили спектральной плотности. Сплошная линия соответствует "истинной" (неразмытой) поверхности Ферми, а штриховыми линиями условно обозначено примесное размытие. "Середина" перехода соответствует концентрации 8 ат.% Re

ситуации, когда такие размытые поверхности Ферми впервые касаются, что на зависимости спектральной плотности означает появление пика. Затем пик растет и начинает раздваиваться. Последнее происходит при такой концентрации  $x_c = 0,08$ , которая соответствует образованию перемишки на собственно поверхности Ферми (не размытой). "Конец" перехода отвечает окончательному разделению профиля спектральной плотности на два отдельных пика.

Такое поведение спектральной плотности уже само по себе свидетельствует о факте ЭТП типа "образование перемишки". Однако эта картина также очень хорошо согласуется с рассчитанными концентрационными зависимостями физических свойств: "середины" перехода, то есть, например, положение максимума константы Грюнайзена, отвечает концентрации  $x_c$ , а размытие, определенное по полуширине пика, соответствует картине изменения спектральной плотности с концентрацией.

Наконец, особенность при  $x \sim 0,12$ , очевидно, не имеет отношения к ЭТП, так как поведение спектральной плотности не указывает на какое-либо изменение топологии ферми-поверхности вплоть до границ стабильности твердого раствора. Вероятно, она связана с пиковой структурой плотности состояний, что, естественно, должно сказаться на интегральных по спектру характеристиках.

Таким образом, в сплавах молибдена с рением в области  $x \leq 0,3$  происходят два ЭТП — образование электронной полости при  $x \sim 0,02$  и образование перемишки при  $x \sim 0,08$ . Этот вывод не противоречит результатам измерений [2]: пик термоэдс с характерной для ЭТП асимметрией, несмотря на локальный характер, довольно широк, и его крыло при  $x \approx 0$  лежит значительно выше значения термоэдс для чистого молибдена. Он охватывает два близких перехода, которые в данном эксперименте трудно разделить, поскольку ферми-поверхность размыта как из-за неупорядоченности сплава, так и вследствие температуры. Что касается нелинейной зависимости  $T_c$  от давления (если она в действительности связана с ЭТП), то согласно [1], она наблюдается уже с  $x \sim 0,06$ .

В заключение авторы благодарят И.А.Абрикосова, А.В.Рубана и М.Б.Самсонову за постоянный интерес и помощь в работе. Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант 94-02-03208-а.

1. Т.А.Игнатъева, Ю.А.Черевань, Письма в ЖЭТФ **31**, 389 (1980).
2. А.Н.Великодный, Н.В.Заварицкий, Т.А.Игнатъева, А.А.Юргенс, Письма в ЖЭТФ **43**, 597 (1986).
3. R.Iverson and L.Hodges, Phys.Rev. B **8**, 1429 (1973); М.И.Каганов, К.И.Кугель, Т.Ю.Лисовская, ФНТ **11**, 227 (1985).
4. Ю.М.Ярмошенко, Г.В.Ганин и др., ФММ **62**, 932 (1986).
5. И.М.Лифшиц, С.А.Гредескул, Л.А.Пастур, Введение в теорию неупорядоченных систем, М.: Наука (1982).
6. I.A.Abrikosov, Yu.Kh.Vekilov, and A.V.Ruban, Phys.Lett. A **154**, 407 (1991).
7. P.A.Kozhavyi, A.V.Ruban, S.I.Simak, and Yu.Kh.Vekilov, Phys. Rev. B **49**, 14229 (1994).
8. И.М.Лифшиц, ЖЭТФ **38**, 1569 (1960).
9. М.А.Кривоглаз, Тю Хао, ФММ **21**, 817 (1966).
10. Ya.M.Blanter, M.I.Kaganov, A.V.Pantsulaya, and A.A.Varlamov, Phys. Repts. **242**, 59 (1994).