

УДК 537.1

© 1990

О ХАРАКТЕРЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ И ИХ ВЛИЯНИИ НА МОДУЛИ УПРУГОСТИ В ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛАХ

М. И. Кацнельсон, Г. В. Песчанских, А. В. Трефилов

Проведены расчеты зонной структуры и групповой скорости в ГЦК и ОЦК Са, Sr и Ba. Определены положения особенностей ван Хофа (ОВХ) в зоне Бриллюэна и исследовано их изменение с давлением. Показано, что, несмотря на отсутствие «двумерных» мотивов в кристаллической структуре, часть ОВХ в Са и Sr происходит от линий почти постоянной энергии, лежащих на границе зоны Бриллюэна, и является двумерной по своему характеру. На основе выполненных псевдопотенциальных расчетов решеточных свойств показано, что эффекты близости ОВХ к поверхности Ферми имеют решающее значение для стабилизации кристаллической структуры Са. Обсуждается взаимосвязь стабильности ГЦК-фазы Са и Sr и ОЦК-фазы Ba с особенностями их электронной структуры. Исследовано проявление ОВХ в зонных вкладах в модули упругости щелочноземельных металлов.

Особенности плотности электронных состояний $N(E)$ вблизи уровня Ферми E_F определяют аномалии электронных и решеточных свойств многих металлов и сплавов [1-7] (под особенностями здесь понимаются как сингулярности $N(E)$ в строгом смысле, т. е. особенности ван Хофа (ОВХ), так и резкие немонотонности $N(E)$, например узкие пики). Поэтому понимание характера особенностей $N(E)$, а также степени их изменения при изменении внешних параметров (температура, давление, концентрация примесей и т. д.) важно как при интерпретации уже имеющихся экспериментальных данных, так и для целенаправленного изменения свойств металлов и сплавов. Строгая теория зонной структуры в трехмерной кристаллической решетке дает ОВХ вида $\delta N(E) \simeq (\pm \eta)^{1/2} \Theta(\pm \eta)$, $\eta = E - E_c$, где $\Theta(X) = 1$ при $X > 0$ и $\Theta(X) = 0$ при $x < 0$, E_c — точка ОВХ. Выход таких ОВХ на E_F ($\eta \rightarrow 0$) соответствует электронному топологическому переходу (ЭТП) $2^{1/2}$ рода [1-5]. Однако, как правило, даже для чистых металлов типичной особенностью $N(E)$ является не столько ОВХ, сколько пик $N(E)$ [6, 8, 9]; следовательно, реальный характер особенностей физических свойств при ЭТП может быть гораздо более резким, чем это следует из анализа в модели почти свободных электронов [2, 3]. Наличие узких пиков $N(E)$ сравнительно легко понять для систем с сильной локализацией электронов в реальном пространстве (например, f -систем) или для систем с квазиодномерными или квазидвумерными структурными мотивами (например, соединения со структурой А-15, слоистые соединения). В последних естественно появление «одномерных» или «двумерных» ОВХ ($\delta N(E) \simeq |\eta|^{-1/2}$, $\ln |\eta|$ соответственно). В настоящей работе показано на примере Са и Sr, что усиление характера ОВХ может иметь место (и реально имеет) даже для кубических металлов с достаточно широкой зоной проводимости.

Как показывают зонные расчеты (см., например, [8-11]), в ГЦК-фазе этих металлов E_F лежит вблизи узких пиков $N(E)$. Рассмотрим вопрос о происхождении этих пиков и их взаимосвязи с ОВХ.

Для определения положений ОВХ в зоне Бриллюэна (ЗБ) ГЦК-структур Са и Sr был выполнен расчет электронного энергетического спектра $E(\mathbf{k})$, групповой скорости $\mathbf{V}_n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$ (ОВХ соответствуют точкам $|\mathbf{V}(\mathbf{k})| = 0$) и $N(E)$ этих металлов методом линейаризованных muffin-tin орбиталей (LMTO) в приближении атомных сфер (ASA) [12-14]. Использовались следующие значения объемов на атом Ω_0 : $\Omega_0^{\text{Ca}} = 293.12$, $\Omega_0^{\text{Sr}} = 379.18$ а. е. Обменно-корреляционный потенциал брался в форме Барта—Хедина [15], а волновые функции электронов рассчитывались полурелятивистски [13] (без учета спин-орбитального взаимодействия). Для оценки роли спин-орбитальных эффектов был проведен полный релятивистский расчет $N(E)$. Оказалось, что даже в Ва, где спин-орбитальные эффекты максимальны, отличие в $N(E)$, рассчитанных полурелятивистским и полностью релятивистским методом, составляет не более 3%. Использовалось двухцентровое приближение метода LMTO ASA [14]. Процесс самосогла-сования велся по 110 точкам неприводимой части ЗБ ОЦК- и ГЦК-решетки. Согласование считалось достигнутым при относительном отличии исходного потенциала от полученного не более чем на 10^{-5} Рид, что позволяет нам говорить о вычислении спектра с точностью до 10^{-3} Рид, а $N(E)$ (при 110 точках в неприводимой части ЗБ) — с точностью порядка 10^{-2} 1/Рид. Групповые скорости $\mathbf{V}(\mathbf{k})$ находились численным дифференцированием по трехточечной схеме. Эмпирически наилучшим для этого оказался шаг $|\Delta \mathbf{k}| = 0.01 \cdot 2\pi/a$; это обеспечило точность вычисления групповой скорости 10^{-2} Рид $\cdot a/2\pi$. Поэтому точка считалась особой, если $|\mathbf{V}(\mathbf{k})| \leq 10^{-2}$.

Результаты зонных расчетов представлены на рис. 1, 2. Наиболее существенным обстоятельством является наличие целых линий с малыми $|\mathbf{V}(\mathbf{k})|$ вблизи E_F на гранях ЗБ в направлениях $X-U$, $U-L$, $L-K$, $X-W$, $K-W$. Наличие таких линий, приводящее к гигантскому усилению ОВХ в $N(E)$ (рис. 1, 2), обусловлено двумя обстоятельствами: 1) близостью $E_n(\mathbf{k})$ в крайних точках линий и 2) малостью поперечной скорости $\mathbf{V}_\perp \equiv \mathbf{V}_{a1}(\mathbf{k}) = (\mathbf{n} \times \mathbf{V})$ (\mathbf{n} — вектор касательной к линии) вдоль линии. Для линий, являющихся пересечением двух плоскостей симметрии, $|\mathbf{V}_\perp| = 0$; такова ситуация, например, для линии $P-N$ в ОЦК-структуре, с которой связаны гигантские ОВХ в Li ($E_c \gg E_F$), V ($E_c > E_F$), немагнитном Fe ($E_c \simeq E_F$) и т. п. [5]. Однако в ГЦК Са и Sr, как видно из рис. 1, 2, ни в одном из указанных выше направлений \mathbf{V}_\perp не обращается в нуль тождественно в силу симметрии (как для $P-N$ в ОЦК). Такое обилие линий с $\mathbf{V}_\perp \simeq 0$ на границе ЗБ связано с тем, что ЗБ ГЦК кристалла, как известно, относительно хорошо аппроксимируется сферой, которая для двухвалентных металлов в приближении свободных электронов почти совпадает со сферой Ферми, т. е. энергия в нулевом приближении постоянна на всей границе ЗБ.

Для понимания причин качественного изменения характера особенностей рассмотрим модель $E(\mathbf{k})$ вида

$$E(\mathbf{k}) = E_1(k_1) + \frac{k_2^2}{2m_2(k_1)} + \frac{k_3^2}{2m_3(k_1)},$$

$$E_1(k_1) = E_a + \gamma \xi(k_1), \quad (1)$$

$k_a \leq k_1 \leq k_B$, $\gamma = E_B - E_a$, $|\gamma| \ll W$ (W — ширина зоны). Эта модель описывает линию $k_2 = k_3 = 0$ с $\mathbf{V}_\perp(\mathbf{k}) = 0$ и близкими по энергии ОВХ с $E_c = E_a$, $E_c = E_B$. Тогда сингулярный вклад в $N(E)$ в такой модели будет иметь вид

$$\delta N(E) \simeq \begin{cases} \frac{\pi \Omega_0}{(2\pi)^3} \int_{k_a}^{k_B} dk_1 \bar{m}(k_1) \theta[(E - E_1(k_1)) \text{sign } m_2(k_1)], & m_2 m_3 > 0, \\ -\frac{\pi \Omega_0}{(2\pi)^3} \int_{k_a}^{k_B} dk_1 \bar{m}(k_1) \ln |E - E_1(k_1)|, & m_2 m_3 < 0, \end{cases} \quad (2)$$

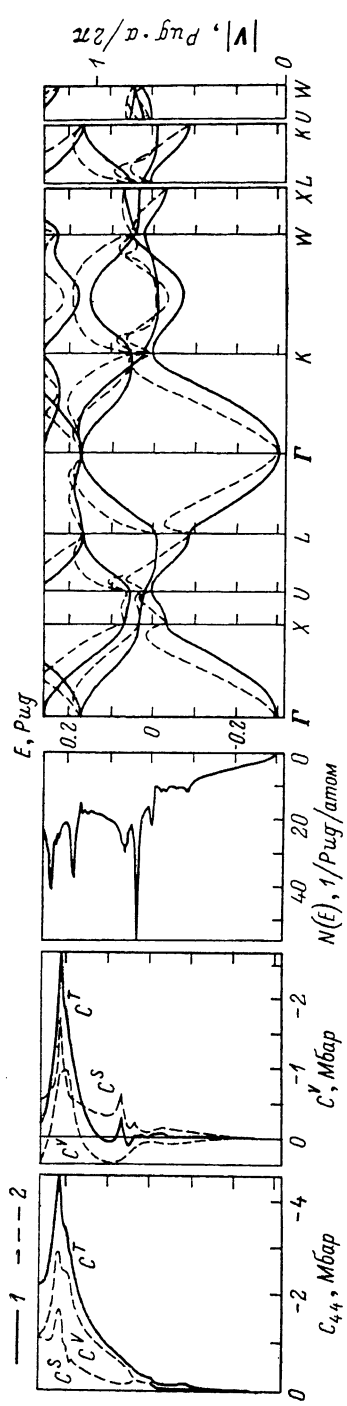


Рис. 1. Результаты расчетов для ГЦК Са при равновесном объеме.

1 — энергетический спектр $E(\mathbf{k})$ (в Рид), 2 — $E(\mathbf{k}) + V(\mathbf{k})$, где $V(\mathbf{k})$ — групповая скорость в Рид·а/2π. Особенности ваян Хова $V(\mathbf{k})=0$ соответствует сливающие этих линий. Плотность состояний дана в 1/Рид/атом, электронные вклады в модули C_{ik} — в МБар (CT — полный, CS — поверхностный, CV — объемный).

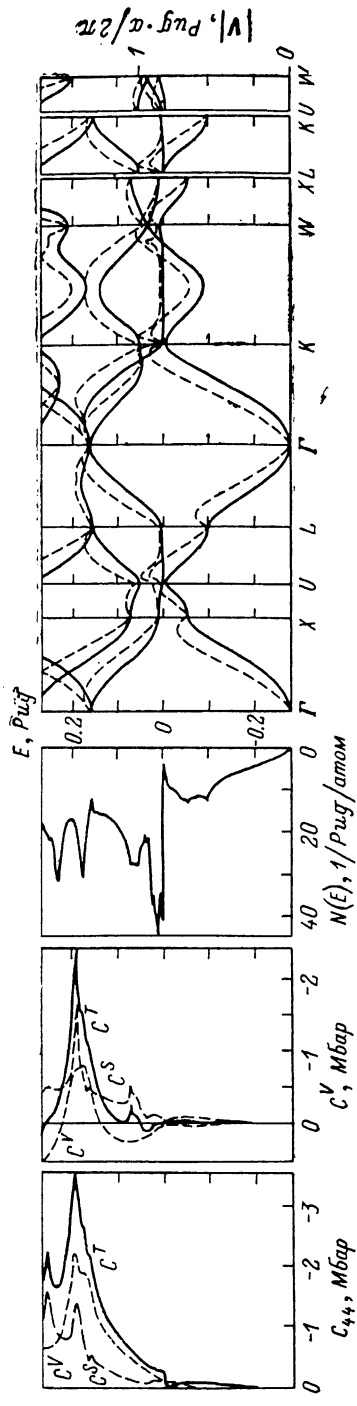


Рис. 2. Результаты расчетов для ГЦК Sr при равновесном объеме.

где $\bar{m}(k) = \sqrt{|m_2(k_1)m_3(k_1)|}$, Ω_0 — объем элементарной ячейки. Как следует из (2), при $\gamma \rightarrow 0$ ОВХ в трехмерной решетке приобретает характер, типичный для двумерного. При наличии большого количества линий равной энергии (как для ГЦК Sr) характер особенностей может быть даже квазидвумерным. Так, если

$$E(\mathbf{k}) = E_1(k_1, k_2) + \frac{k_3^2}{2m_3(k_1, k_2)}, \quad E_1(k_1, k_2) = E_c + \tilde{\gamma}^2(k_1, k_2) \quad (3)$$

на части некоторой плоскости S , то при $E \rightarrow E_c$ ($|\tilde{\gamma}| \ll W$) имеем

$$N_s(E) \approx \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int_S dk_1 dk_2 \sqrt{\frac{m_3(k_1, k_2)}{2}} [E - E_1(k_1, k_2)]^{-1/2} \theta[E - E_1(k_1, k_2)], \quad (4)$$

где для определенности $m_3 > 0$.

В обычной теории ЭТИ предполагается, что под влиянием изменения внешних параметров (температура, давление, легирование и т. д.) меняется $\eta_F = E_F - E_c$ [1-4]. В рассматриваемой нами ситуации «гигантских» ОВХ существенно также изменение γ или $\tilde{\gamma}$, т. е. степени «раздвижки» или «сближения» трехмерных ОВХ. При этом изменяется сам вид пика $N(E)$ и характер изменений наблюдаемых величин будет существенно иным, чем в модели почти свободных электронов [1-3, 5]. Такое изменение $N(E)$ продемонстрировано на рис. 1, 2. Изменение расстояний от E_F до ОВХ при изменении объема приведено в табл. 1. Из табл. 1, в частности, следует, что, согласно выполненным расчетам для ГЦК Са, имеются дырочные состояния вблизи точки K ($E_K - E_F = 5$ мРид) в соответствии с экспериментом [6] и расчетами [10, 11]. Отметим, однако, что в отличие от расчета [10], выполненного в рамках ЛМТО-метода, в наших расчетах в рамках аналогичной методики подгонка потенциала для правильного описания состояний вблизи точки K не потребовалась.

Таблица 1
Изменение ОВХ в Са ГЦК со сжатием

$E_c - E_F$, Рид	$(V_0 - V)/V_0$					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
Г1	-0.301	-0.321	-0.340	-0.360	-0.363	-0.370
Г2	0.171	0.156	0.184	0.201	0.216	0.241
X1	-0.035	-0.055	-0.060	-0.075	-0.087	-0.112
X2	0.032	0.009	0.009	-0.003	-0.016	-0.040
X3	0.068	0.078	0.097	0.126	0.187	0.271
U1, K1	0.005	-0.009	-0.008	-0.012	-0.011	-0.021
U2, K2	0.024	0.007	0.010	0.004	0.005	0.006
U3, K3	0.055	0.054	0.068	0.084	0.119	0.168
L1	-0.086	-0.101	-0.105	-0.116	-0.118	-0.130
L2	-0.010	-0.007	0.003	0.021	0.071	0.140
W1	0.024	0.008	0.010	0.005	-0.011	0.003
W2	0.043	0.033	0.042	0.047	0.005	0.086
Г-K2	0.053	0.046	0.057	0.064	0.081	0.099
Г-K3	0.184	0.170	0.201	0.222	0.242	0.276
Г-K4	0.223	0.211	0.251	0.281	0.309	0.368
Г-X1	—	—	—	—	—	-0.110
Г-X3	—	—	—	—	0.177	0.233
X-U2	—	—	0.012	—	—	—
K-W2	-0.010	-0.009	—	—	—	—

Мы видим, что при переходе от Са к Sr ОВХ в $N(E)$ усиливаются и приближаются к E_F . Чтобы проследить эти тенденции дальше, был выполнен аналогичный расчет для гипотетического ГЦК Ва (с постоянной решетки, соответствующей экспериментальному объему ОЦК Ва на атом, $\Omega_0^{\text{Ba}} = 426.85$ а. е.). Из расчетов (рис. 3) видно, что в ГЦК Ва нет таких за-

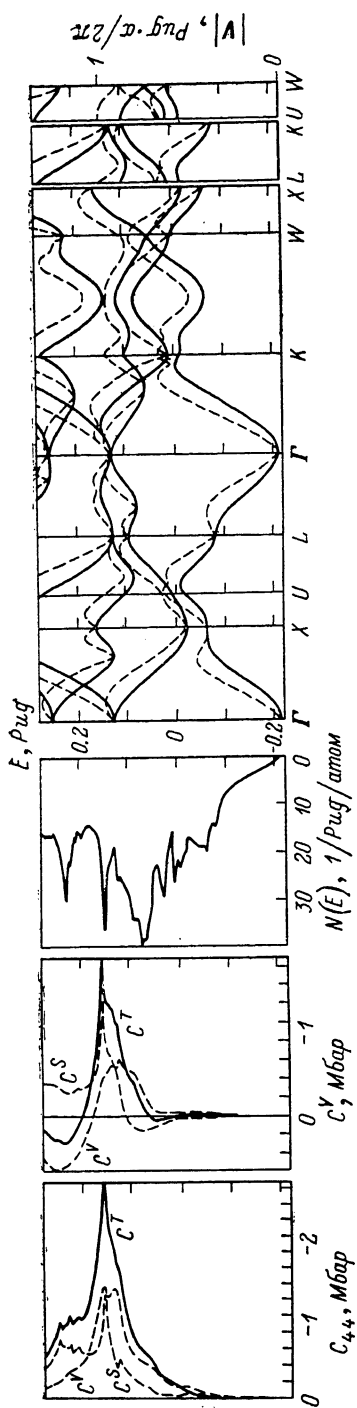


Рис. 3. Результаты расчетов для ГЦК Ва при равновесном объеме.

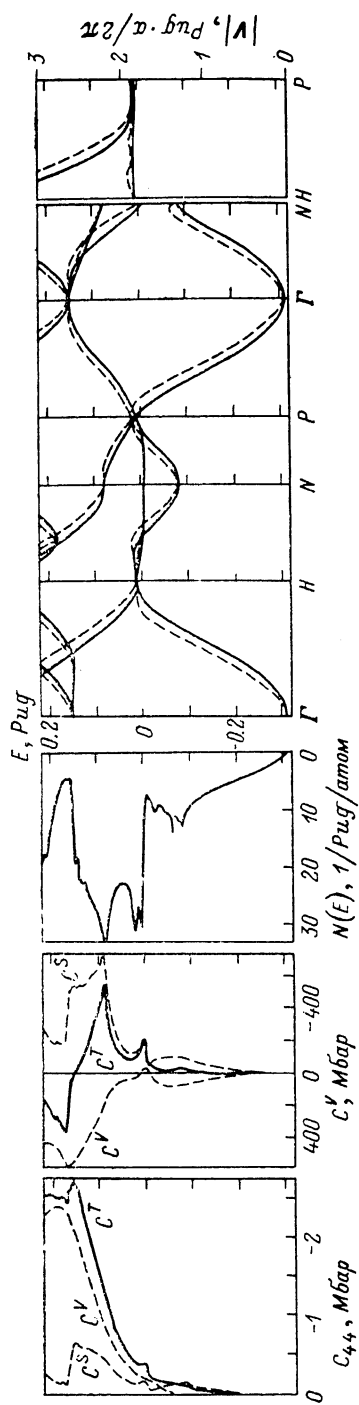


Рис. 4. Результаты расчетов для ОЦК Са при равновесном объеме.

метных уплощений кривых $E_n(\mathbf{k})$, как в Sr, но зато ОВХ в точке (0.4, 0.4, 0.0) попадает прямо на E_F .

При давлении $P=0$ Ва, как известно, имеет ОЦК-структуру, а Ca и Sr испытывают переходы в ОЦК-фазу при повышении температуры (переход в ГПУ-фазу, о котором сообщается в некоторых работах, по-видимому, связан с примесями водорода [16]). Поэтому были выполнены расчеты $E_n(\mathbf{k})$, $V_n(\mathbf{k})$ и $N(E)$ для щелочноземельных металлов в ОЦК-фазе (при условии равенства объемов в ОЦК- и ГЦК-фазах). Результаты расчетов представлены на рис. 4—6. Видно, что в ОЦК Ca почти на E_F имеется гигантская ОВХ, образованная частями линий $P-N$ и $N-H$, которые удовлетворяют условию $V_{n\perp}(\mathbf{k})=0$. Таким образом, приведенные примеры подтверждают наличие «квазидвумерных» ОВХ вблизи E_F как в ГЦК (Sr), так и в ОЦК (Ca) металлах.

Такие ОВХ (E_c) в $N(E)$ в непосредственной окрестности E_F должны приводить к аномальным по η вкладам, например, в модули упругости C_{ik} и тепловое расширение [3].

Как следует из расчетов [10, 11], а также из представленных в настоящей работе, поведение $E_n(\mathbf{k})$ при $E < E_F$ в ГЦК Ca и Sr в общем мало отличается от модели свободных электронов, а энергетические щели на границах ЗБ малы. Поэтому можно ожидать, что решеточные свойства ГЦК Ca и Sr должны неплохо описываться приближением почти свободных электронов с использованием теории возмущений (ТВ) по псевдопотенциалу $V(\mathbf{g})/E_F$ (\mathbf{g} — векторы обратной решетки) [3]. Расчет C_{ik} был проведен с использованием псевдопотенциала типа Анималу—Хейне

$$V(\mathbf{g}) = -\frac{4\pi Z}{g^2 \Omega_0} \left[(1+U) \cos(g r_0) - U \frac{\sin(g r_0)}{(g r_0)} \right] \exp \left[-0.03 \frac{g}{k_{F_0}} \right]^+ \quad (5)$$

($Z=2$ — валентность, k_{F_0} — импульс Ферми при $P=T=0$, использованы атомные единицы $|e| = \hbar = m = 1$) и экранировки Гельдарта—Тейлора [17]. Такая модель в рамках ТВ прецизионно описывает решеточные свойства щелочных металлов [18]. В отличие от [18] в расчете учитывались сингулярные вклады в энергию от эффекта близости поверхности Ферми и грани ЗБ в точках X и L [3], т. е. исходное выражение для энергии металла имеет вид

$$E = E_1 + E_0 + E_1 + E_2 + E_s, \quad (6)$$

где E_1 — энергия Маделунга для точечных зарядов, E_0 — энергия электронного газа в приближении [19].

$$E_1 = \frac{bZ}{\Omega_0}, \quad b = \frac{2\pi r_0^3}{3} [3 + 2U], \quad (7)$$

$$E_2 = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{g}} |V(\mathbf{g})|^2 \frac{\Pi(\mathbf{g})}{\varepsilon(\mathbf{g})}, \quad \varepsilon(\mathbf{g}) = 1 + \frac{4\pi}{g^2} \Pi(\mathbf{g}). \quad (8)$$

$$E_s = E_s(\mathbf{g}_X) + E_s(\mathbf{g}_L) \quad (9)$$

— вклады первого и второго порядка ТВ, $\Pi(\mathbf{g})$ — поляризационный оператор электронного газа в приближении [17] с учетом корреляционных вкладов согласно [19],

$$E_s(\mathbf{g}) = b F_c \left(\frac{\alpha_g}{v_g} \right) g^2 v_g^3,$$

$$F_c(X) = \left\{ X \ln [(X^2 - 1)^{1/2} + |X|] - \frac{1}{3} (2 + X^2) (X^2 - 1)^{1/2} \operatorname{sign}(X) \right\} \theta(X^2 - 1) +$$

$$+ \frac{1}{2} X + \frac{1}{3} X^3 - X \ln(2|X|),$$

$$\alpha_g = \frac{g^2 - 4k_F^2}{g^2}, \quad v_g = \frac{8|V_g|}{g^2}, \quad (10)$$

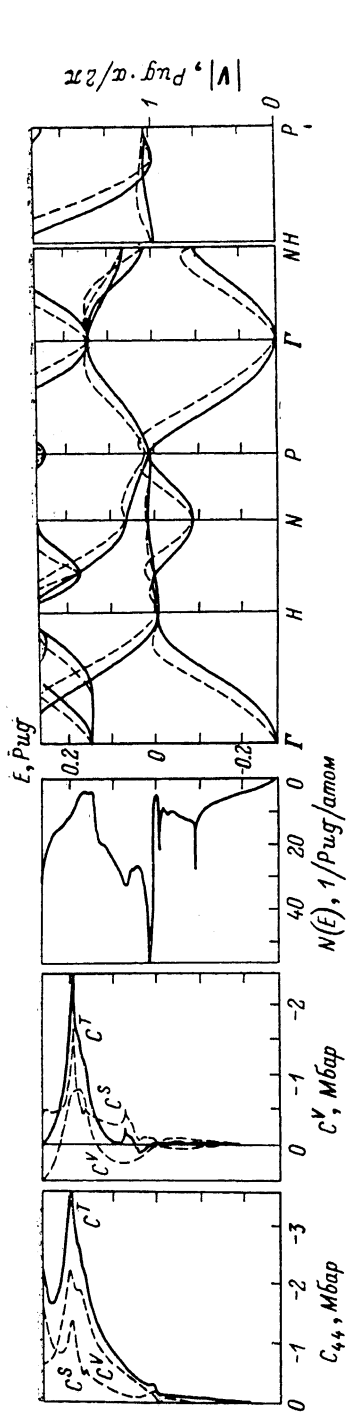


Рис. 5. Результаты расчетов для ОЦК Sr при равновесном объеме.

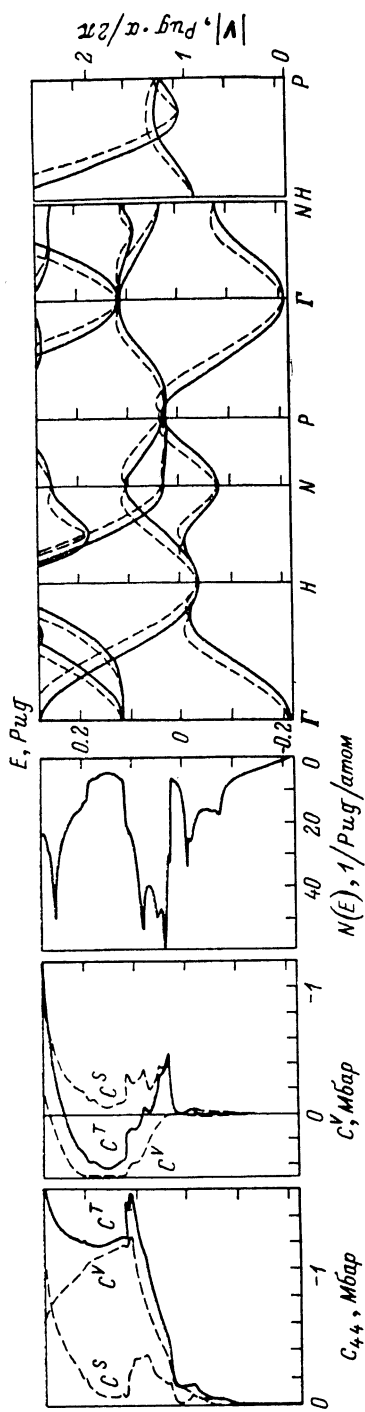


Рис. 6. Результаты расчетов для ОЦК Ва при равновесном объеме.

Таблица 2

Решеточные свойства Са в псевдопотенциальной теории

E, Рид	P	B ₃₃	B ₄₄	$\frac{B_{ст}}{B_{лпц}}$	кБар			к	
					$\frac{\partial B_{33}}{\partial \Omega}$	$\frac{\partial B_{44}}{\partial \Omega}$	$\frac{\partial B_{ст}}{\partial \Omega}$	$\frac{\partial B_{лпц}}{\partial \Omega}$	$\frac{\theta_{ст}}{\theta D}$
E ₀	-0.2856	0.0	0.0	95.33	0.0	0.0	-209.28	—	—
E ₁	0.5915	0.0	0.0	602.47	0.0	0.0	-213.00	—	—
E ₂	-0.0291	-38.22	-7.99	602.47	196.24	-273.63	-1204.94	—	—
E ₃	-1.7477	-296.66	184.08	-109.19	-27.37	-245.44	48.29	—	—
E ₄	-1.4709	-17.52	176.09	-77.99	170.87	-519.07	-21.08	—	—
$\sum_j E_j$	8.369 · 10 ⁻⁶	6.493 · 10 ⁻¹	6.908 · 10 ⁻¹	-395.56	—	—	527.41	—	—
E _{g₁}	-1.824 · 10 ⁻⁴	55.38	6.8961	193.04	-199.89	-27.61	-838.50	—	—
E _{g₂}	-1.741 · 10 ⁻⁴	56.02	7.5870	227.02	-29.02	-546.68	-911.61	—	—
$\sum_{g_n} E_{g_n}$	-1.4711	0.19	183.68	3.268 · 10 ⁻¹	—	—	-3.18	—	—
Теор.	-1.457	—	167	—	—	—	—	—	—
Эксп.	—	48	—	—	—	—	—	—	—
					g	α _g	v _g	α _g v _g	
					1 1 1	0.29800	0.077210	3.7943	
					2 0 0	-0.03028	0.088248	-0.3431	
							228.90	0.8902	
							230.51	0.8787	
							250 ± 4	0.67	

E_{эксп} взято из [23], B_{эксп} — из [23], γ₀^{эксп} — из [23].

$b=3/16$ [3]. Параметры псевдопотенциала определялись из условия $\Theta_D = \Theta_D^{\text{экс}}$, где Θ_D — температура Дебая, $\Theta_D^{\text{экс}}$ — ее экспериментальное значение. Такая процедура подгонки для щелочных металлов использовалась в [20].

Оказалось, что такая модель дает достаточно хорошее описание свойств ГЦК Са (табл. 2); при этом величины энергетических щелей $\Delta_L = 2 |V(g_L)|$ и $\Delta_x = 2 |V(g_x)|$ из (5) находятся в хорошем согласии с результатами зонных расчетов. Без учета вкладов $E_n(g)$ в (6) модуль сдвига B_{33} (при подгонке по B_{44}) оказывается отрицательным, что свидетельствует о неустойчивости системы, стабилизирующейся, как следует из табл. 2, зонными вкладами.

Таким образом, Са является примером металла, кристаллическая структура которого стабилизируется близостью к ЭТП, т. е. с учетом эффектов близости E_F к грани ЗБ с $g=g_L$ и $g=g_x$. В противоположность Са описать Sr в рамках подобной схемы не удастся; подгонка по условию $B_{44} = B_{44}^{\text{экс}}$ неизбежно приводит к $B_{33} < 0$. Для ОЦК Sr можно подобрать параметры псевдопотенциала, удовлетворительно описывающие его свойства в рамках ТВ (без учета E_n) [24]. Из результатов наших расчетов для ГЦК Sr видно, что в противоположность Са описать его свойства в рамках модели (6) не удастся, причем сами по себе сингулярные вклады больше, чем в Са. Причина этого состоит в том, что, как следует из наших результатов, в Sr имеет место «слияние» ОВХ и тем самым усиление характера особенностей; при этом сингулярные вклады в $N(E)$, а следовательно, и в решеточные свойства не описываются моделью (3). В Са ОВХ «разнесены» по энергии, в силу чего их вклады могут быть учтены аддитивно.

Зонные вклады в модули упругости C_{ik} могут быть вычислены непосредственно из $E_n(k)$. Хотя трудно ожидать от такого расчета в рамках метода LMTO ASA высокой количественной точности, качественное обсуждение характера особенностей в C_{ik} представляется достаточно поучительным.

Аналогично [26] мы разложили зонные вклады в модули сдвига $C_{ik}(E)$ на объемный $C_{ik}^v(E)$, поверхностный $C_{ik}^s(E)$ и «фермиевский» $C_{ik}^f(E)$ члены

$$C_{ik}(E_F) = \frac{\partial^2}{\partial \gamma_{ik}^2} \frac{3}{4} \sum_n \int E_n(k) \theta[E_n(k) - E_F] dk = \frac{3}{4} \sum_n \int \frac{\partial^2 E_n}{\partial \gamma_{ik}^2} \theta[E_n(k) - E_F] dk - \frac{3}{4} \sum_n \int \left(\frac{\partial E_n}{\partial \gamma_{ik}} \right)^2 \delta[E_n(k) - E_F] dk + \frac{3}{4} \left[\sum_n \int \frac{\partial E_n}{\partial \gamma_{ik}} \delta[E_n(k) - E_F] dk \right]^2 = C_{ik}^v(E_F) + C_{ik}^s(E_F) + C_{ik}^f(E_F), \quad (11)$$

где при выводе C_{ik}^f использовано сохранение числа электронов $n = \sum \int \theta[E_n(k) - E_F] dk$. Член, учитывающий сдвиг уровня Ферми при искажении, $C_{ik}^f(E)$ в кубических кристаллах равен нулю и в прежних работах [26] им пренебрегали. Мы его сохранили для оценки точности численных вычислений.

На основе самосогласованного потенциала вычислялся спектр в 244 точках неприводимой части ЗБ ОЦТ-решетки и в 288 точках тригональной решетки при пяти значениях c/a (матрицы искажения взяты из [26, 27]) и численно находились значения производных $\partial E_n(k)/\partial \gamma_{ik}$ и $\partial^2 E_n(k)/\partial \gamma_{ik}^2$ (γ_{ik} — отклонение c/a от значений, соответствующих ОЦК- и ГЦК-структурам). Чтобы не возникло ошибок при вычислении производных из-за снятия вырождения E_n при искажении, мы выбирали k -точки вне высокосимметричных направлений и плоскостей. Если же вырождение или «перепутывание» зон при искажениях все-таки возникали, то в качестве критерия выбора ветвей спектра мы использовали критерий непрерывности волновых функций при малых искажениях решетки. Эмпирически наилучший шаг для численного дифференцирования 0.01 c/a . Для контроля точности мы вычисляли плотность состояний $N(E)$ для ОЦТ и тригональной струк

туры; с точностью до 1 % она совпала с $N(E)$ для ОЦК- и ГЦК-решеток. По нашим оценкам, точность вычисления зонного вклада в модули упругости C_{ik} равна 1 кБар.

Результаты расчетов представлены на рис. 1–6. Видно, что энергетическая зависимость $C_{ik}(E)$ грубо повторяет $N(E)$. Тогда, если ОВХ усиливаются по сравнению со «стандартным» случаем $\delta N(E) \approx (E - E_c)^{1/2}$, то и в $C_{ik}(E)$ можно ожидать более сильных аномалий, чем это предсказывает модель почти свободных электронов [3]. Аналогично усиление особенностей должно иметь место и в коэффициентах теплового расширения, α_T . Экспериментально аномалии α_T в Ca, Sr и Ba были обнаружены в [25].

Таким образом, на примере щелочноземельных металлов в настоящей работе показано, что даже в кубических металлах характер ОВХ в $N(E)$ может быть квазидвумерным или даже квазиодномерным, то же усиление ОВХ может проявляться в наблюдаемых свойствах, например в модулях упругости.

Авторы благодарят А. И. Лихтенштейна за полезное обсуждение.

Список литературы

- [1] Каганов М. И., Лифшиц И. М. // УФН. 1979. Т. 129. № 3. С. 487–529.
- [2] Вакс В. Г., Трефилов А. В., Фомичев С. В. // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. № 4. С. 1613–1621.
- [3] Vaks V. G., Trefilov A. V. // J. Phys. F. 1988. V. 18. N 2. P. 213–235.
- [4] Антропов В. П., Вакс В. Г., Кацнельсон М. И., Корешков В. Г., Лихтенштейн А. И., Трефилов А. В. // УФН. 1988. Т. 154. № 3. С. 525–528.
- [5] Katsnelson M. I., Trefilov A. V. // Z. Phys. B. 1989. V. 74. N 5. P. 2111–2123.
- [6] Кацнельсон М. И., Трефилов А. В. // Письма в ЖЭТФ. 1985. Т. 42. № 10. С. 393–395; УФН. 1988. Т. 154. № 3. С. 523–525.
- [7] Анисимов В. И., Кацнельсон М. И., Лихтенштейн А. И., Трефилов А. В. // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 45. № 6. С. 285–288.
- [8] Moruzzi V. L., Janak J. F., Williams A. R. Calculated electronic properties of metals. N. Y., 1978. 188 p.
- [9] Papaconstantopoulos D. A. Handbook of bandstructure of elemental solids. N. Y., 1986. 169 p.
- [10] Jan J. P., Skriver H. L. // J. Phys. F. 1981. V. 11. N 4. P. 805–820.
- [11] Blaha P., Calloway J. // Phys. Rev. B. 1985. V. 32. N 12. P. 7664–7671.
- [12] Skriver H. L. The LMTO method. N. Y., 1984. 281 p.
- [13] Anderson O. K. // Phys. Rev. B. 1975. V. 12. N 8. P. 3060–3083.
- [14] Gunnarsson O., Jensen C., Andersen O. K. // Phys. Rev. B. 1983 V. 27. N 12. P. 7144–7168.
- [15] Barth V., Hedin L. // J. Phys. C. 1972. V. 5. N 13. P. 1629–1642.
- [16] Cook J. G. // J. Less-Comm. Metals. 1978. V. 57. N 1. P. 53–62.
- [17] Geldart P. J. W., Taylor R. // Can. J. Phys. 1970. V. 48. N 2. P. 155–167.
- [18] Вакс В. Г., Трефилов А. В. // ФТТ. 1977. Т. 19. N 1. С. 244–258.
- [19] Perdew J. P., Zunger A. // Phys. Rev. B. V. 23. N 10. P. 5048–5079.
- [20] Кацнельсон М. И., Трефилов А. В. // ФТТ. 1988. Т. 30. N 11. С. 3299–3310.
- [21] Agarwal K. L., Betterton J. O. // J. Low Temp. Phys. 1974. V. 17. N 5/6. P. 509–513.
- [22] Stassis C., Zaretsky J., Misemer D. K., Skriver H. L., Harmen B. N., Niclow R. H. // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. N 6. P. 3303–3307.
- [23] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М., 1963. 696 с.
- [24] Vaks V. G., Somolyuk G. D., Trefilov A. V. // Phys. Lett. A. 1988. V. 127. N 1. P. 37–42.
- [25] White G. K. // J. Phys. F. 1972. V. 2. N 5. P. 865–872.
- [26] Ohta Y., Shimizu H. // J. Phys. F. 1983. V. 13. N 4. P. 761–777.
- [27] Christensen N. E. // Sol. St. Comm. 1984. V. 49. N 7. P. 701–705.

Институт физики металлов УрО АН СССР
Свердловск
Институт атомной энергии им. И. В. Курчатова
Москва

Поступило в Редакцию
11 августа 1989 г.