

$= 0.692$ ); 2 — wide symmetric distribution ( $\Delta y = 1.0$ ,  $\alpha = 0$ ,  $k = 2.548$ ), the strongest deviation from MWHN curve ( $h(0) = 0.860$ ); 3 — asymmetric distribution shifted to higher values of diffusion coefficient ( $\Delta y = 1.0$ ,  $\alpha = 0.8$ ,  $k = 2.199$ ),  $h(0)$  decreases due to stronger deflection at low temperatures ( $h(0) = 0.819$ ); 4 — asymmetric distribution shifted to lower  $D$  values ( $\Delta y = 1.0$ ,  $\alpha = -0.8$ ,  $k = 2.199$ ), temperature dependence of the upper critical magnetic field essentially tends to linear one ( $h(0) = 0.843$ ).

Fig. 2. The first and the second-order derivatives of the temperature dependences of the upper critical magnetic field for the same distribution functions as in Fig. 1. It is seen that on the curve 4 of  $h(t)$  there is a region of positive curvature.

1. *Сверхпроводимость в тройных соединениях* / Под ред. Э. Фишера, М. Мейпла. — М.: Мир, 1985.
2. Пан В. М., Прохоров В. Г., Шпигель А. С. *Металлофизика сверхпроводников*. — Киев: Наук. думка, 1984. — 189 с.
3. *Металлические стекла* / Под ред. Г. Гюнтеродта, Г. Бека. — М.: Мир, 1983. — 376 с.
4. Сан-Жам Д., Сарма Г., Томас Е. *Сверхпроводимость второго рода*. — М.: Мир, 1970. — 364 с.
5. Ларкин А. И., Овчинников Ю. Н. Влияние неоднородностей на свойства сверхпроводников // ЖЭТФ. — 1971. — 61, № 3. — С. 1221—1230.
6. Ларкин А. И., Овчинников Ю. Н. Электродинамика неоднородных сверхпроводников второго рода // ЖЭТФ. — 1973. — 65, № 4. — С. 1704—1714.
7. Иоффе Л. Б., Ларкин А. И. Свойства сверхпроводников с размытой температурой перехода // ЖЭТФ. — 1981. — 81, № 2. — С. 707—718.
8. Werthamer N. R. Theory of the superconducting transition temperature and energy gap function of superimposed metal films // Phys. Rev. — 1963. — 132, N 6. — P. 2440—2445.
9. Efetov K. B. Effect of random distortions on the critical field in layered superconductors // J. Low Temp. Phys. — 1980. — 38, N 5/6. — P. 719—735.
10. Лифшиц И. М., Гредескул С. А., Пастур Л. А. Введение в теорию неупорядоченных систем. — М.: Наука, 1982. — 360 с.
11. Enhanced critical field curves of metastable superconductors / W. L. Carter, S. J. Poon, G. W. Hull, Jr., T. H. Geballe // Solid State Commun. — 1981. — 39, N 1. — P. 41—45.

Ин-т металлофизики АН УССР,  
г. Киев

Получено 06.03.87

УДК 537.622 : 3; 538.915

Г. Е. ГРЕЧНЕВ, Н. В. САВЧЕНКО, И. В. СВЕЧКАРЕВ, В. Н. АНТОНОВ\*,  
А. В. ЖАЛКО-ТИТАРЕНКО\* М. Дж. Г. ЛИ\*\*, Дж. М. ПЕРЦ\*\*,

## АНИЗОТРОПИЯ ЗЕЕМАНОВСКОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ В ПАЛЛАДИИ И ЗОЛОТЕ

Проведено теоретическое исследование  $g$ -факторов электронов проводимости в палладии и золоте. Установлено, что для ряда листов поверхности Ферми этих металлов величина  $g$ -фактора существенно отличается от свободно-электронного значения и обладает сильной угловой зависимостью для экстремальных орбит в палладии на листе  $\Gamma_6$  и  $X$ -эллипсоидах. Полученные результаты согласуются с данными эффекта де Гааза — ван Альфена и электронного парамагнитного резонанса.

Различие значений  $g$ -фактора для свободных электронов ( $g_0 = 2,0023$ ) и электронов в металлах связано со спин-орбитальным и ферми-жидкостным взаимодействиями. Относительная роль и особенности проявления этих взаимодействий для различных электронных состояний можно выделить путем сопоставления экспериментальных данных с расчетными. Основными источниками сведений о  $g$ -факторе электронов проводимости являются электронный парамагнитный резонанс (ЭПР) и квантовые осцилляции намагниченности — эффект де Гааза — ван Альфена (ДГВА). Локальное значение  $g$ -фактора  $g_n^{\alpha}(\mathbf{k})$ , которое определяет расщепление в магнитном

\* Институт металлофизики АН УССР, г. Киев.

\*\* Торонтский университет, г. Торонто, Канада.

поле  $\mathbf{H}$  (направленном по орту  $\hat{\alpha}$ ) вырожденного по Крамерсу состояния  $n$ -й зоны  $E_n(\mathbf{k})$ :

$$g_n^{\hat{\alpha}}(\mathbf{k}) \mu_B H = E_n^+(\mathbf{k}) - E_n^-(\mathbf{k}), \quad (1)$$

проявляется в упомянутых эффектах по-разному. В эффекте ДГВА оно усредняется по экстремальной орбите на поверхности Ферми (ПФ):

$$g_c = \oint g_n^{\hat{\alpha}}(\mathbf{k}) v^{-1}(\mathbf{k}) d\mathbf{k} / \oint v^{-1}(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad (2)$$

и извлекается из экспериментальных данных в виде множителя  $\cos[(\pi/2)(m_c/m_0)g_c]$  с соответствующей неоднозначностью аргумента (здесь  $v(\mathbf{k})$  — фермиевская скорость,  $(m_c/m_0)$  — отношение циклотронной эффективной массы к массе свободного электрона). Измеряемая в ЭПР величина  $g$ -фактора  $\langle g \rangle$  является результатом усреднения (1) по всей ПФ, но не содержит ферми-жидкостного взаимодействия. Таким образом, эффект ДГВА дает детальные сведения о  $g$ -факторе, но нуждается в теории даже для однозначного выбора этой величины. В последние годы этим методом исследована анизотропия  $g_c$  для ряда переходных металлов, в которых сильны многочастичные эффекты [1,3]. Однако априорные расчеты касались в основном величины  $\langle g \rangle$  [4,5].

В настоящей работе приведены предварительные результаты теоретического исследования анизотропии  $g_c$  в Pd и Au без обменного усиления. Значения  $g_n^{\hat{\alpha}}(\mathbf{k})$  в (2) определялись согласно (1) путем расчета электронной структуры модифицированным релятивистским методом ЛМТО в приближении атомных сфер (ПАС) с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{SR-LMTO} + \mathcal{H}_{SO} + \mathcal{H}_Z. \quad (3)$$

Релятивистские эффекты учитывались в рамках формализма Паули [6] в скалярно-релятивистском ЛМТО гамильтониане  $\mathcal{H}_{SR-LMTO}$  [7] и в операторе спин-орбитального взаимодействия  $\mathcal{H}_{SO}$ . Внешнее магнитное поле учитывалось путем прямого включения в матрицу гамильтониана зеемановского члена  $\mathcal{H}_Z = \mu_B \mathbf{H}(\hat{\mathbf{L}} + \hat{\boldsymbol{\sigma}})$  в базисе ЛМТО (здесь  $\hat{\mathbf{L}}$  — оператор орбитального момента,  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_i$  — матрицы Паули). Для вычисления  $g_n^{\hat{\alpha}}(\mathbf{k})$  в Pd и Au путем самосогласованного расчета зонной структуры методом ЛМТО [7] предварительно были получены потенциальные параметры, входящие в  $\mathcal{H}_{SR-LMTO}$  и  $\mathcal{H}_{SO}$ . Обменно-корреляционные эффекты учитывались в локальном приближении теории функционала электронной плотности [8].

Рассчитанные по (1) значения  $g_n^{\hat{\alpha}}$  практически не зависят от величины  $\mu_B H$  в интервале 0,0001 — 1,0 мРидб и при «выключении» спин-орбитального взаимодействия дают  $g = g_0$  при произвольном направлении  $\mathbf{H}$ . Была установлена слабая чувствительность ( $\sim 1\%$ ) вычисляемых значений  $g_n^{\hat{\alpha}}(\mathbf{k})$  к расширению базиса за счет  $f$ -парциальных волн. Хотя самосогласованные ЛМТО расчеты качественно описывают ПФ Pd и Au, экстремальные орбиты ПФ и  $v(\mathbf{k})$  для вычисления  $g_c$  по (2) были получены с использованием более точных релятивистских версий ППВ [9] и ККР методов.

**Палладий.** Основная часть плотности состояний в Pd на уровне Ферми обусловлена многосвязной трубчатой дырочной ПФ пятой зоны. Величины  $g_c$  рассчитывались на девяти  $\alpha$ -орбитах, охватывающих «трубы» в окрестности точки симметрии  $W$ . Полученные значения  $g_c(\alpha)$  совпадают в пределах  $\sim 1\%$ , и причиной наблюдавшейся в [1] угловой зависимости  $m_c g_c$  является анизотропия циклотронных масс. Среднее значение  $g_c(\alpha)$ , приведенное в таблице, действительно хорошо согласуется с данными ЭПР. Дырочные «карманы» четвертой зоны, центрированные в точке  $X$ , имеют сильную анизотропию  $g_4^{\hat{\alpha}}(\mathbf{k})$ , проявляющуюся в заметной угловой зависимости  $g_c(X)$  (рисунок). Этот результат согласуется с экспериментальным наблюдением значительной анизотропии  $g_c(X)$  [3]. На рисунке представлена расчетная угловая зависимость  $g_c(\Gamma_6)$  для экстремальных орбит на электронном  $\Gamma_6$ -

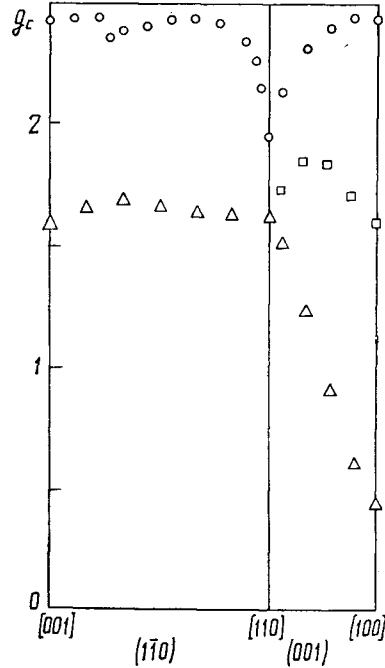
листе ПФ. Она дает представление о степени детальности, с которой необходимо проводить угловые измерения  $g_c$ . С учетом большого значения Stoner-параметра обменного усиления в Pd ( $S \simeq 10$ ) эта зависимость качественно согласуется с данными [1].

**Золото.** Экстремальные сечения открытой многосвязной ПФ Au соответствуют ряду характерных орбит: «пузо» ( $B_{111}$ ) и «шейки» ( $N$ ) для направления  $\mathbf{H}$  вблизи  $\langle 111 \rangle$ , «пузо» ( $B_{100}$ ) и «розетки» ( $R$ ) — ( $\mathbf{H} \parallel \langle 100 \rangle$ ), «собачья кость» ( $D$ ) — ( $\mathbf{H} \parallel \langle 110 \rangle$ ) [10, 11]. Рассчитанные для этих орбит  $g_c$  представлены в таблице. Значения  $g$  на «пузе», составляющем основную часть ПФ зо-

Теоретические и экспериментальные значения  $g$ -факторов в палладии и золоте

Металл	Орбита	$g_c^{\text{теор}}$	$g^{\text{эксп}}$
Pd	$\alpha$	2,24	ЭПР [(4,5)] 2,22
			ДГВА*
Au	$B_{111}$	2,48	$\begin{matrix} \{11\} & \{10\} \\ 2,42 & 2,21 \end{matrix}$
	$B_{100}$	2,43	$\begin{matrix} 2,29 & 2,05 \end{matrix}$
	$D$	2,23	$\begin{matrix} 2,34 & 2,03 \end{matrix}$
	$N$	2,20	$\begin{matrix} 1,2 & — \end{matrix}$
	$R$	2,14	$\begin{matrix} 2,26 & — \end{matrix}$
			ЭПР [(4)] 2,1 ± 0,1

\* При сравнении расчетных и экспериментальных значений  $g_c$  необходимо учитывать эффекты электрон-фононного взаимодействия ввиду стандартной практики использования экспериментальных  $m_c$  при извлечении  $g_c$  из данных ДГВА. Поправки наиболее существенны для «шеек», где усиление  $m_c$  превышает 20 % [12].



Зависимость орбитальных  $g$ -факторов  $g_c$  в Pd на  $\Gamma_6$ -листе (O) (центральные сечения) и X-эллипсоидах, центрированных в  $\pi/a$  [2, 0, 0] ( $\Delta$ ) и  $\alpha/a$  [0, 2, 0] ( $\square$ ), от направления магнитного поля.

лота, согласуются с данными ЭПР ( $\langle g \rangle \simeq 2,1$ , см [5, 10]). Поскольку параметр обменного усиления в Au мал ( $S \simeq 1$  [10]), возможно прямое сравнение полученных значений  $g_c$  с данными эффекта ДГВА [10, 11]. Вследствие неоднозначности анализа амплитудных измерений возможны два разумных альтернативных набора  $g_c$  для  $B$ ,  $D$  и  $R$  — в окрестностях  $g_1 = 1,4$  и  $g_2 = 2,3$ . Наши результаты определенно свидетельствуют в пользу второго набора. Исключение составляет расчетное значение  $g_c$  на «шейке», существенно превосходящее экспериментальное.

Результаты настоящей работы позволяют сделать вывод, что отклонения значений  $g$ -факторов от  $g_0 = 2$  определяются степенью  $sp$  —  $d$ -гибридизации и достигают примерно 50 % на листах ПФ четвертой и шестой зон в Pd. Отсутствие анизотропии  $g_c$  в пятой зоне Pd, по-видимому, является следствием однородного  $d$ -характера соответствующих электронных состояний. Для «уединенных» зон («трубы» в окрестности точки  $W$  в Pd и основные орбиты на ПФ в Au) расчет дает значения  $g(\mathbf{k})$ , близкие к  $g_0 = 2$ , несмотря на сильное спин-орбитальное взаимодействие. Причина расхождения с экспериментом для  $g_c$  на «шейках» до конца не ясна. В остальном формализм РЛМТО — ПАС объясняет основную совокупность имеющихся экспериментальных данных о поведении  $g_c$  и  $\langle g \rangle$  в Pd и Au и представляется конструктивным для более детального анализа  $g$ -факторов в переходных металлах.

G. E. GRECHNEV, N. V. SAVCHENKO, I. V. SVECHKAREV, V. N. ANTONOV,  
A. V. ZHALKO-TITARENKO, M. J. G. LEE, and J. M. PERZ

## ANISOTROPY OF CONDUCTION ELECTRONS ZEEMAN SPLITTING IN PALLADIUM AND GOLD

The theoretical investigation of conduction electron  $g$ -factors in palladium and gold is carried out. It is established that  $g$ -factors deviate considerably from the free-electron value for some Fermi surface sheets of these metals. A pronounced anisotropy is found for the extremal orbits on the  $\Gamma_8$  sheet and  $X$ -pockets in palladium. The results are in general agreement with data from DHVA and CESR experiments.

LIST OF SYMBOLS.  $g_c$ , orbit-averaged gyromagnetic factor;  $\langle g \rangle$ , Fermi surface-averaged  $g$ -factor;  $E_n(\mathbf{k})$ , energy of the  $n$ -th band in the  $\mathbf{k}$ -point of the Brillouin zone;  $v(\mathbf{k})$ , Fermi velocity;  $m_c$ , cyclotron mass;  $H$ , magnetic field strength value;  $\alpha$ , direction of the magnetic field.

FIGURE CAPTION. Angular dependence on the magnetic field direction of orbital  $g$ -factors  $g$  in palladium for  $\Gamma_8$  sheet ( $\bigcirc$ ) (central cross-sections) and  $X$ -pockets centered at  $\pi/a$  [2, 0, 0] ( $\triangle$ ) and  $\pi/a$  [0, 2, 0] ( $\square$ ).

1. Measurements of the conduction-electron  $g$ -factor in palladium / H. Ohlsen, P. Gustafsson, L. Nordborg, S. P. Hörnfeldt // Phys. Rev. B.— 1984.— 29, N 6.— P. 3022—3027.
2. Conduction electron  $g$ -factors in ruthenium and osmium from de Haas — van Alphen measurements / V. E. Startsev, P. T. Coleridge, I. M. Templeton et al. // J. Low Temp. Phys.— 1984.— 55, N 1/2.— P. 175—187.
3. Nordborg L., Ohlsen H., Gustafsson P. Experimental study of itinerant Zeeman splitting in platinum group metals // J. Magn. and Magn. Mater.— 1986.— 54—57, pt. 2.— P. 1015—1016.
4. Mac Donald A. H. Transition-metal  $g$ -factor trends // J. Phys. F.— 1982.— 12, N 12.— P. 2579—2589.
5. The gyromagnetic factor of conduction electrons in silver, gold, palladium and platinum / C. Schober, G. Kurz, H. Wonn et al. // Phys. status solidi (b).— 1986.— 136, N 1.— P. 233—239.
6. Andersen O. K. Linear methods in band theory // Phys. Rev. B.— 1975.— 12, N 8.— P. 3060—3083.
7. Skriver H. L. The LMTO method.— Berlin : Springer Verlag, 1984.— 284 p.
8. Barth U. von, Hedin L. A local exchange-correlation potential for the spin-polarized case. I // J. Phys. C.— 1972.— 5, N 13.— P. 1629—1642.
9. Antonov V. N. Anisotropy of cyclotron masses, many-body effects and X-ray emission spectra in Pd // Solid State Commun.— 1984.— 51, N 9.— P. 723—725.
10. Bibby W. M., Shoenberg D. Spin properties of conduction electrons in the noble metals // J. Low Temp. Phys.— 1979.— 34, N 5/6.— P. 659—680.
11. Crabtree G. W., Windmiller L. R., Ketterson J. B. The conduction electron  $g$ -factor in Au // J. Low Temp. Phys.— 1977.— 26, N 5/6.— P. 755—762.
12. Precision measurements of cyclotron masses and Fermi velocities in the noble metals by the de Haas—van Alphen effects / B. Lengeler, W. R. Wampler, R. R. Bourassa et al. // Phys. Rev. B.— 1977.— 15, N 12.— P. 5493—5509.

Физико-технический ин-т  
низких температур АН УССР,  
г. Харьков

Получено 06.05.87

УДК 537.312.62

А. С. ДАВЫДОВ, Л. С. БРИЖИК

## СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ КВАЗИОДНОМЕРНЫХ СИСТЕМ

Предложен солитонный механизм сверхпроводимости квазиодномерных систем с деформационным взаимодействием. Исследованы процесс спаривания и динамика движения многих электросолитонов, образованных в результате связи избыточных квазичастиц (электронов или дырок) с локальной деформацией решетки.

В последнее время много внимания уделяется исследованию сверхпроводимости квазиодномерных систем, образованных стопками плоских органических молекул ((TMTSF)<sub>2</sub>X, X = PF<sub>6</sub>, ClO<sub>4</sub>, AsF<sub>6</sub>, SbF<sub>6</sub>, TaF<sub>6</sub>, ReO<sub>4</sub>; (BEDT — TTF)<sub>2</sub>J<sub>3</sub> и др.) [1—3].