

УДК 538.22

Г. Е. ГРЕЧНЕВ, И. В. СВЕЧКАРЕВ

ВЛИЯНИЕ ИЗОВАЛЕНТНЫХ ПРИМЕСЕЙ И ДАВЛЕНИЯ НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И ПАРАМЕТРЫ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА КАДМИЯ

Проведен анализ поведения магнитной восприимчивости монокристаллического кадмия при введении изовалентных примесей и под давлением в области низких температур ($T \approx 20$ К) с использованием построенной ранее теории магнетизма нормальных ГПУ металлов. Влияние примесного рассеяния на особенности магнитной восприимчивости учтено в терминах эффективной температуры, определяемой из экспериментальных данных. Путем сопоставления результатов расчета магнитной восприимчивости с экспериментальными данными установлен ряд параметров энергетического спектра чистого кадмия, а также зависимости расщеплений зон и положения уровня химического потенциала от содержания примесей магния и ртути и от величины приложенного давления. В рамках приближения «на фермиевской сфере» получены количественные характеристики псевдопотенциала кадмия вблизи первого нуля формфактора.

Введение

Магнитные свойства кадмия чрезвычайно чувствительны к положению уровня Ферми относительно системы критических точек спектра, расположенных в малой окрестности точки симметрии K зоны Бриллюэна. При введении примеси магния реализуется ряд ярко выраженных особенностей в постоянной составляющей магнитной восприимчивости (рис. 1) [1, 2], которые обусловлены электронными переходами $2^{1/2}$ рода. Анализ экспериментальных данных на основе предложенной в [3, 4] теории магнитной восприимчивости двухвалентных гексагональных металлов позволил определить ряд параметров энергетического спектра кадмия и характер изменения расщеплений зон в окрестности точки K при введении примеси магния [5].

Целью настоящей работы является детальное изучение влияния изовалентных примесей (магния и ртути) и давления на энергетический спектр кадмия. При этом используются экспериментальные данные [2, 6] и теория магнитной восприимчивости сплавов кадмия [3–5].

1. Модель энергетического спектра в сплавах кадмия

Электронные переходы $2^{1/2}$ рода, определяющие особенности магнитных свойств сплавов кадмия, связаны с состояниями в малой окрестности точки симметрии K зоны Бриллюэна, где исходный трехкратно

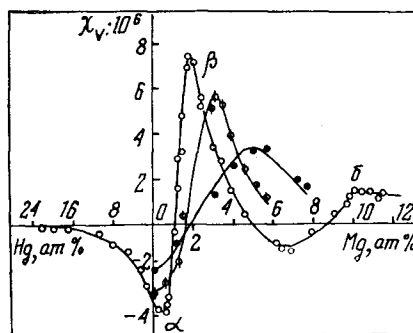
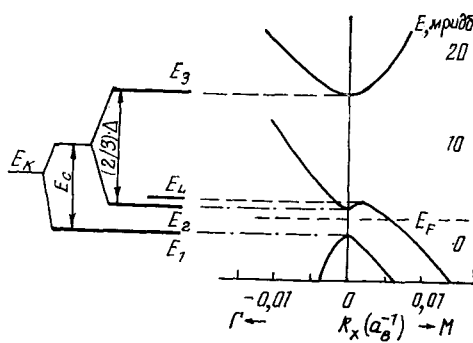


Рис. 1. Компонента тензора магнитной восприимчивости $\chi_{||}$ (параллельная оси шестого порядка) бинарных сплавов кадмия с магнием и ртутью при $T = 20$ К (○) и тройных сплавов Cd—Mg—Hg при $T = 4, 2$ К и концентрации ртути 1 ат. % (○) и 2 ат. % (●) (по данным [2]). Сплошные линии — результат модельного расчета. Данные приведены в СГС объемных единиц. Восприимчивость ионного остова исключена.

вырожденный уровень «пустой» решетки E_K слабо расщеплен на уровни:

$$\begin{aligned} E(K_7) &= E_1 = E_K - \frac{2}{3} E_C; \\ E(K_8) &= E_3 = E_K + \frac{1}{3} E_C \pm \frac{1}{3} \Delta. \end{aligned} \quad (1)$$



Параметры E_C и Δ соответствуют кристаллическому потенциалу и спин-орбитальному взаимодействию [7] (рис. 2). Далее, если это не оговорено специально, энергия отсчитывается от уровня E_1 . Электронные состояния в окрестности точки K описываются модельным трехзонным kp гамильтонианом

Рис. 2. Схема энергетических зон в окрестности точки симметрии K в кадмии.

[8-10], который будет использован при расчете магнитной восприимчивости:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} Dk_z^2 & Ak_+ & Ak_- \\ Ak_- & E_C - \Delta/3 + Dk_z^2 & Bk_+ \\ Ak_+ & Bk_- & E_C + \Delta/3 + Dk_z^2 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Здесь A и B — матричные элементы оператора импульса. Из релятивистских параметров ввиду их малости [9, 10] в (2) сохранены только Δ , поскольку $\Delta \simeq E_C$ [7]. Начало координат выбрано в точке K , если z и x параллельны линиям KH и ΓK соответственно, $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$. В спектре (2) имеется еще одна критическая точка — $E_L(\Delta, E_C, A, B)$ [3, 4]. Связь параметров модельного гамильтониана (2) с фурье-компонентами псевдопотенциала в кадмии имеет вид

$$E_C = \frac{3}{2} \omega_{10\bar{1}0}, \quad \Delta = \frac{9}{4} \lambda K^2, \quad (3)$$

где $\omega_{10\bar{1}0}$ — формфактор псевдопотенциала, соответствующий векторам обратной решетки $\langle 10\bar{1}0 \rangle$; λ — параметр спин-орбитального взаимодействия [7]; K — расстояние ΓK в зоне Бриллюэна. (Усечение матрицы гамильтониана до (2) не влияет на простое соотношение (3) для E_C благодаря большому энергетическому расстоянию до вышележащих уровней [7]).

Основным механизмом реализации электронных переходов в изовалентных сплавах кадмия является изменение соотношения периодов решетки c/a , которое изменяет энергию E_K в (1) и эквивалентно сдвигу локального уровня химического потенциала

$$\mu_K = E_F - E_K = \mu - \frac{2}{3} E_C, \quad (4)$$

где энергия Ферми E_F , как и E_K , отсчитывается от дна зоны. Для параболической зоны при $\mu_K/E_F \ll 1$

$$\delta\mu_K = -\frac{2}{3} E_F \frac{\delta(c/a)}{c/a}, \quad (5)$$

сдвиг μ_K линейно связан с изменением c/a и, следовательно, с концентрацией примеси или с давлением [11, 12]. Несмотря на существенную нелокальность

псевдопотенциала, спектр кадмия в направлении ГК близок к параболическому (с $m^* \approx 0,85m_0$ [7]), так что выражение (5) может оказаться справедливым даже количественно, если пользоваться вычисленным в [7] значением $E_F = 0,651$ ридб.

Параметры энергетического спектра кадмия могут изменяться под воздействием примесей и давления. Путем расчета спектра в рамках модели нелокального псевдопотенциала [7] для кадмия установлено [10], что матричные элементы оператора импульса в модельном гамильтониане (2) мало чувствительны к вариациям периодов решетки и псевдопотенциала, в частности параметр D практически совпадает со свободноэлектронным значением $D = 1$. Поэтому изменениями параметров A , B и D при введении примесей и под давлением можно пренебречь. Рассматриваемые в настоящей работе воздействия не приводят также к сколько-нибудь заметным изменениям параметра Δ , вычисленного согласно (3). Так, при максимальных вариациях константы спин-орбитального взаимодействия λ в исследованных сплавах кадмий — магний величина $\delta\Delta/\Delta$ ($\sim 0,01$) не превышает погрешности определения Δ , полученной по данным о магнитной восприимчивости (см. [4, 5]). Формфактор $\omega_{10\bar{1}0}$ псевдопотенциала кадмия близок к нулю, но очень чувствителен к величине вектора обратной решетки $G_{10\bar{1}0}$ [13]. Поэтому зависимость E_c от давления и концентрации примеси должна учитываться и в области малых воздействий предполагается линейной.

Таким образом, влияние различных возмущений на фрагмент спектра кадмия вблизи точки К естественно описывать в координатах (μ, E_c) , связанных к тому же некоторой прямой линией благодаря линейной зависимости от рассматриваемых возмущений как μ , так и E_c . Изменение спектра будет полностью характеризоваться величиной и направлением отрезка этой прямой, т. е. вектором реакции на возмущение \mathbf{R} (или \mathbf{r} , отнесенным к единичному воздействию — 1 ат. % примеси, давлению 1 кбар). Согласно (4), вектор \mathbf{R} может быть представлен суммой двух векторов

$$\mathbf{R} = \delta\mu (\delta\mu_K, 0) + \delta E ({}^2/3 \delta E_c, \delta E_c) \quad (6)$$

с фиксированными углами наклона к оси абсцисс.

2. Расчет магнитной восприимчивости сплавов кадмия

Формула для орбитальной магнитной восприимчивости системы блоховских электронов в слабом магнитном поле имеет вид [14]

$$\chi = \left(\frac{e\hbar}{c}\right)^2 \frac{k_B T}{(2\pi)^3} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int dk \operatorname{Sp} (\gamma^x g \gamma^y g \gamma^x g \gamma^y g). \quad (7)$$

Здесь χ — компонента тензора восприимчивости (на единицу объема) вдоль оси z ; γ^x и γ^y — матрицы компонент импульса, вычисленные в том же представлении, что и исходный гамильтониан \mathcal{H} ; g — мацубаровская функция Грина:

$$g = [i\pi k_B T (2n + 1) + \mu - \mathcal{H}]^{-1}. \quad (8)$$

Интегрирование в (7) проводится по зоне Бриллюэна. С помощью ряда преобразований выражение (7) для спектра (2) сводится к вычислению двойного интеграла, которое выполняется на ЭВМ (детали преобразований и окончательные выражения см. в [3, 4]).

Спиновый и дополнительный спин-орбитальный вклады в восприимчивость рассматриваемых состояний (2) получены в [3, 15]. Амплитуда модуляции этих вкладов в критических точках спектра находится в пределах погрешности эксперимента, и ими можно пренебречь. Значительно важнее

тронная частота, τ_{tr} — транспортное время релаксации). При $H = 12,0$ кэ $T_{мин} = 23,1$ К.

При $H \parallel \langle 10\bar{1}0 \rangle$ величина $\Delta\rho_H$ изменяется с температурой немонотонно (рис. 2): на кривой $\Delta\rho_H(T)$ наблюдается максимум. Температурное положение максимума зависит от температуры магнитного поля; при $H = 12,0$ кэ $T_{макс} = 32$ К, а при $H = 4,0$ кэ $T_{макс} = 26$ К.

Такое различие в температурных зависимостях $\Delta\rho_H(T)$ связано с характером движения электронов проводимости, который определяется топологией поверхности Ферми рения (см. вставку на рис. 4, 5). Поверхность Ферми этого металла [2, 3] состоит из замкнутых дырочных листов $L5h$, $L6h$, $L7h^*$, замкнутого электронного листа $\Gamma 8e$ и открытой электронной поверхности $\Gamma A 8e$, имеющей форму гофрированного цилиндра с осью вдоль ΓA . При $H \parallel 10\bar{1}0$, $j \parallel \langle 1\bar{2}10 \rangle$ электроны гофрированного цилиндра $\Gamma A 8e$ движутся по открытым траекториям в направлении, совпадающем в координатном пространстве с направлением тока. Поэтому в области высоких магнитных полей $\omega\tau \gg 1$ величина $\Omega\rho_H(T)/\rho_0(T)$ не зависит от H и стремится к насыщению [4, с. 219–250], а $\Delta\rho_H(T)$ возрастает при повышении температуры. В условиях $\omega\tau < 1$ сопротивление $\Delta\rho(T) \sim H^2/\rho_0(T)$ [4] и уменьшается при повышении температуры.

Таким образом, положение максимума в зависимости $\Delta\rho_H(T)$ соответствует условию $\omega\tau_{tr} \sim 1$. Отсюда получаем для этой ориентации магнитного поля при $T = 23,1$ К и $H = 12$ кэ $\omega\tau_{tr} = \rho_{32,1}/\rho_{23,1} = 4,5$.

При $H \parallel \langle 0001 \rangle$ все траектории электронов замкнуты (см. вставку на рис. 5) и достаточно сильное поле ($\omega\tau \gg 1$) приводит к тому, что в плоскости, перпендикулярной к магнитному полю, электрон локализован на орбите, размеры которой r_H . Ток может возникнуть только за счет рассеяния электронов. При $T < 0,1\Theta_D$, согласно расчету [4] для изотропного электрон-фононного рассеяния, проводимость в магнитном поле $\sigma_H(T) \sim T^5$. Согласно измерениям коэффициента Холла Re-1 (см. далее п. 2), в диапазоне температур $4,2 - 25$ К $(\rho_{xy}/\rho_{xx})^2 \leq 0,005$. Поэтому проводимость $\sigma_H = \sigma_{xx}$ связана с магнитосопротивлением $\rho_H = \rho_{xx}(H)$ соотношением $\sigma_H = 1/\rho_H$. Как видно из рис. 3, при $T < 20$ К и $H = 12$ кэ температурная зависимость проводимости

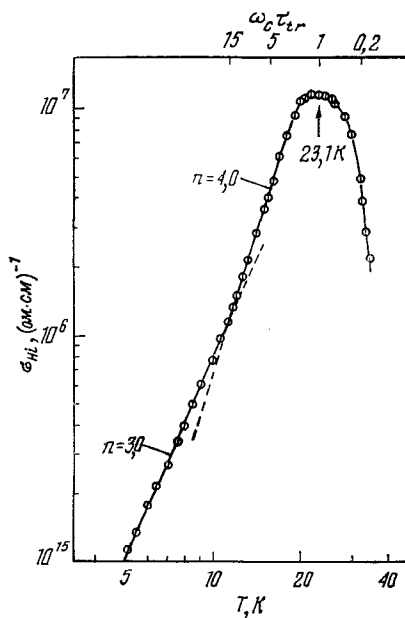


Рис. 3. Температурная зависимость проводимости в магнитном поле $\sigma_{H_i}(T) = \sigma_H(T) - \sigma_H(0)$ образца Re-1 при $j \parallel \langle 1\bar{2}10 \rangle$, $H \parallel \langle 0001 \rangle$, $H = 12$ кэ.

$$\sigma_{H_i}(T) = \sigma_{H_i}(T) - \sigma_H(0) = \frac{1}{\rho_H(T)} - \frac{1}{\rho_H(0)} \quad (5)$$

* Здесь и в дальнейшем первая буква указывает, в какой точке симметрии зоны Бриллюэна центрирован лист поверхности Ферми (либо указывает направление открытости поверхности), цифра соответствует номеру полосы (зоны), к которой относится данный лист, буквы e и h характеризуют тип листа: e — электронный, h — дырочный.

Последние слагаемые в правой части соответствуют учету концентрационных смещений экстремума β в сплавах Cd—Mg [2] при изменении температуры. В действительности T_{Mg}^* определяется системой (11) с большой погрешностью; более надежное значение получено в [6] путем аналогичного сравнения амплитуд экстремумов восприимчивости, реализованных примесью магния и давлением. Окончательные результаты для T^* , использованные в дальнейших вычислениях, приведены в табл. 1.

3. Влияние примесей магния на энергетический спектр кадмия

Путем варьирования отдельных параметров спектра в [4, 5] была установлена их связь с характером поведения восприимчивости. Для параметра Δ были взяты значения 12, 15 и 18 *мридб*, близкие к результатам прямого расчета зонной структуры [7, 10]. Согласно [4], параметр $\beta = \bar{B}/A$ влияет лишь на отношение амплитуд экстремумов β и δ на рис. 1. Полученное в эксперименте [2] отношение реализуется при $\beta \approx 1,1$.

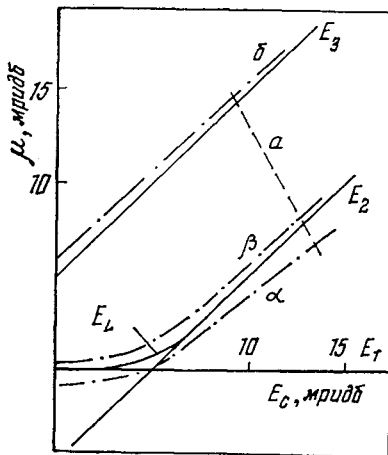


Рис. 3. Зависимость положений критических точек спектра и экстремумов восприимчивости от параметра E_c в системе кадмий—магний при $T = 20$ К, $\Delta = 15$ *мридб*. Обозначения экстремумов те же, что на рис. 1.

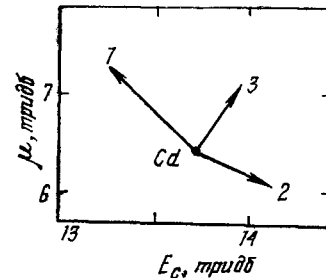


Рис. 4. Изменение параметров энергетического спектра кадмия при введении 1 ат.% Mg (1), 1 ат.% Hg (2) и под давлением 1 *кбар* (3) в координатах (μ, E_c) .

Магнитная восприимчивость $\chi(\mu, E_c, T)$ рассчитывалась по описанной в предыдущем разделе схеме в диапазоне параметров μ и $E_c \sim 20$ *мридб* при нескольких значениях температуры. На рис. 3 в координатах (μ, E_c) приведено взаимное расположение энергетических уровней (1) и E_L , а также линии, описывающие расчетное положение экстремумов восприимчивости при эффективной температуре

$$T_i^{\text{эф}} = x_i T_{\text{Mg}}^* + 20,$$

где x_i — концентрация магния, соответствующая данному экстремуму в эксперименте при 20 К (см. рис. 1). Как было показано в разделе 1, связь μ и E_c в сплавах кадмия задается на рис. 3 прямой линией. Положение этой прямой определяется двумя требованиями: а) относительное расположение на прямой точек пересечения с линиями экстремумов восприимчивости должно соответствовать относительному положению экстремумов на экспериментальной кривой $\chi(x_{\text{Mg}})$ (рис. 1); б) отношение амплитуд экстремумов α и β в найденных точках должно соответствовать эксперименту. Наилучшим образом удовлетворить этим требованиям удастся при $\Delta = 15$ *мридб*, и соответствующая прямая (а) представлена на рис. 3. По положению экстремумов легко установить концентрационный масштаб вектора реакции $R(\text{Mg})$ и параметры

спектра чистого кадмия (рис. 4). Количественное совмещение масштаба расчетных и экспериментальных значений экстремумов восприимчивости достигается подбором различных значений параметра A ($\chi \sim A^2$). При этом отклонения расчетной кривой от экспериментальных точек находятся в пределах погрешности эксперимента во всем интервале концентраций магния (см. рис. 1).

Результаты анализа параметров гамильтониана (2) для кадмия и их поведение в сплавах с магнием представлены в табл. 1. Как видно из этой таблицы, изменения μ_K при введении магния согласуются с приближением параболической зоны (5). Можно считать это заключение справедливым и для других видов воздействия на кадмий (не изменяющих, разумеется, электронную концентрацию), так что при известном изменении c/a выражение (5) определяет составляющую вектора реакции (6) и начало составляющей δE (см. рис. 4). Наклон составляющей δE задан (согласно (4), $\partial\mu/\partial E_c = 2/3$), а величина δE_c определяется точкой пересечения с линией, описывающей в координатах (μ, E_c) достигнутое при рассматриваемом воздействии значение восприимчивости. Для однозначности полезно (хотя и не обязательно) пользоваться линиями экстремумов.

Описанный анализ можно провести и при ограниченной экспериментальной информации, в частности о влиянии на восприимчивость кадмия давления [6] или примесей ртути [2].

4. Влияние малых примесей ртути на энергетический спектр кадмия

Восприимчивость бинарных сплавов Cd—Hg характерных особенностей не проявляет (см. рис. 1 работы [2]). Поскольку область существования тройных сплавов Cd—Mg—Hg очень ограничена, исследовано только влияние

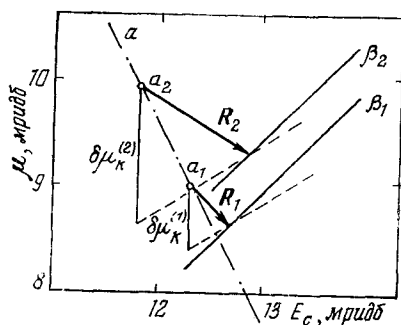


Рис. 5. Определение графическим методом изменений параметров энергетического спектра сплавов $Cd_{100-x}Mg_x$ (в координатах (μ, E_c)) при введении малых примесей ртути.

1 и 2 ат. % примеси Hg на амплитуду и положение экстремума β в системе Cd—Mg при 4,2 К (рис. 1 [2]). Экстремум β в этих сплавах наблюдается при следующих составах*: сплав 1: Cd + 3,2 ат. % Mg + 1 ат. % Hg; $a = 2,9852 \text{ \AA}$, $c/a = 1,8738$; сплав 2: Cd + 4,9 ат. % Mg + 2 ат. % Hg; $a = 2,9878 \text{ \AA}$, $c/a = 1,8668$, которым отвечают эффективные температуры $T_1^{\text{эф}} = 89 \text{ К}$ и $T_2^{\text{эф}} = 153 \text{ К}$ (они задаются левой частью уравнений (11) со значениями T^* из табл. 1). Полученные прямым расчетом $\chi(\mu, E_c)$ линии экстремумов β_1 и β_2 для этих температур представлены рис. 5 с фрагментом прямой α из рис. 3. Векторы реакции на введение примеси Hg описывают переход из точек a_1 и a_2 на прямой α , соответствующих концентрациям 3,2 и 4,9 ат. % Mg, на линии экстремумов β_i . По приведенным выше значениям c/a для сплавов Cd—Mg—Hg и данным [11] для Cd—Mg определены изменения c/a при введении ртути и с использованием (5) на рис. 5 построены составляющие $\delta\mu_K$; пунктирные прямые имеют наклон векторов δE , и точки их пересечения с линиями β_i определяют векторы R_i и значения dE_c/dx_{Hg} .

Усредненная величина вектора $r(Hg)$ и производной dE_c/dx_{Hg} представлены на рис. 4 и в табл. 1. Неопределенность отношения c/a в ста-

* Параметры решетки измерены аналогично [11]. Авторы глубоко признательны А. А. Гурсасу и Л. С. Литинской, проделавшим эти измерения.

реюющих сплавах Cd—Mg—Hg при малом значении угла между векторами δE и линиями β_i (рис. 5) может быть причиной наблюдаемых погрешностей определения dE_c/dx_{Hg} . Тем не менее, принятые значения этой производной, $d\mu_K/dx_{Hg}$ и других параметров спектра из табл. 1 хорошо описывают поведение восприимчивости как тройных, так и бинарных сплавов Cd—Hg в широком концентрационном диапазоне (см. рис. 1).

5. Влияние давления на энергетический спектр кадмия

Газовым давлением при $T = 20$ К удается реализовать не более одного экстремума восприимчивости в любом из сплавов Cd—Mg [6]. Зависимость восприимчивости от давления для образцов трех концентраций ($x_1 = 0$, $x_2 = 1$, $x_3 = 1,4$ ат. % Mg) представлена на рис. 6 в виде функции от c/a для

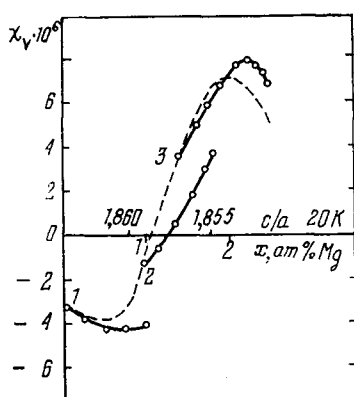


Рис. 6. Поведение магнитной восприимчивости кадмия и сплавов Cd—Mg под давлением как функции отношения параметров решетки c/a при $T = 20$ К: \circ — экспериментальные данные [6]; сплошные линии — результат расчета (раздел 5). Пунктирная линия соответствует концентрационной зависимости χ сплавов Cd—Mg.

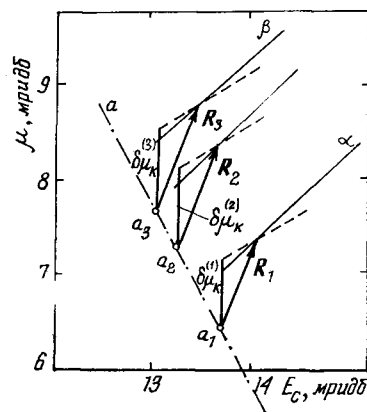


Рис. 7. Определение графическим методом изменений параметров энергетического спектра кадмия и сплавов $Cd_{100-x}Mg_x$ ($x_2 = 1,0$ ат. %, $x_3 = 1,4$ ат. %) под давлением (в координатах (μ, E_c)).

удобства сравнения с концентрационной зависимостью [2] (при этом использованы сведения о параметрах решетки [11,20] и о сжимаемости сплавов Cd—Mg [21] и чистого кадмия [12]). Для образцов 1 и 3 при давлениях $P_1 = 1,4$ и $P_3 = 1,5$ кбар соответственно реализуются экстремумы α и β (рис. 6), для образца 2 при давлении $P_2 = 1,6$ кбар достигается значение $\chi(x_2, P_2) = \chi(x_3, P = 0)$. По аналогии с предыдущим разделом в точках a_1 , a_2 и a_3 на прямой a (рис. 7), соответствующих содержанию магния в образцах, по данным [12, 21] и (5) строятся векторы $\delta\mu_{K_i}$ и пунктирные прямые, задающие направление векторов δE_i . Точки пересечения прямых с линиями экстремумов α , β и для $i = 2$ с линией фиксированного значения $\chi(\mu, E_c) = \chi(x_3)$ определяют векторы R_i и значения dE_c/dP . (Линии экстремумов α , β и линия фиксированного значения $\chi(\mu, E_c) = \chi(x_3)$ определены путем расчета $\chi(\mu, E_c)$ с параметрами спектра, полученными в разделе 3 с учетом соответствующих эффективных температур.)

Величины векторов r_i и dE_c/dP практически совпадают для всех образцов, их средние значения приведены на рис. 4 и в табл. 1. Вычисленные с использованием полученных данных зависимости восприимчивости от давления хорошо согласуются с экспериментом (рис. 6).

6. Обсуждение результатов

Отнесенные к единичному воздействию векторы \mathbf{r} на рис. 4 определяют изменение наиболее чувствительных параметров электронного спектра кадмия в точке K — μ и E_c — под влиянием изовалентных примесей и давления. С их помощью можно прогнозировать поведение спектра при комбинированных воздействиях. Полная сводка параметров, описывающих фрагмент спектра кадмия и его изменения и удовлетворяющих всем экспериментальным данным о восприимчивости, приведена в табл. 1. Аналогичные параметры для чистого кадмия вычислены с использованием процедуры [10] в модели полуэмпирического нелокального псевдопотенциала [22]. Как видно из табл. 1, результаты, полученные на основе модели [22], в пределах погрешностей хорошо согласуются с данными магнитной спектроскопии.

Значение dE_c/dP позволяет уточнить структуру псевдопотенциального формфактора $w(q)$ кадмия в приближении «на сфере Ферми» для $q \approx G_{10\bar{1}0}$. В окрестности этого вектора обратной решетки формфактор сильно и практически линейно зависит от q [13], так что изменение $G_{10\bar{1}0}$ является определяющим в поведении $w_{10\bar{1}0}$. Поправка на перенормировку $w(q)$ за счет изменения атомного объема Ω и экранирования $\varepsilon(q)$ [13]

$$w = \frac{\varepsilon_0 \Omega_0 w_0(q)}{\varepsilon(q) \Omega} \quad (12)$$

Таблица 2

Поведение формфактора псевдопотенциала кадмия $w(q)$ в окрестности $q \approx G_{10\bar{1}0}$ (в приближении «на сфере Ферми») и соответствующего параметра w в сплавах Cd—Mg и Cd—Hg

| Параметр | Анализ восприимчивости | Псевдопотенциальный расчет для моделей | |
|---|------------------------|--|------|
| | | [22] | [23] |
| dw/dq , $\text{ридб} \cdot \text{аВ}$ | $0,45 \pm 0,03$ | 0,44 | 0,62 |
| dw/dx_{Mg} , мридб/ат. \% | $-0,30 \pm 0,03$ | -0,27 | — |
| dw/dx_{Hg} , мридб/ат. \% | $0,3 \pm 0,1$ | 0,15 | — |

пренебрежимо мала. Значение dw/dq при $G_{10\bar{1}0}$, найденное из dE_c/dp и данных [12], приведено в табл. 2 и подтверждает результаты расчета с использованием нелокального псевдопотенциала [22] в том же приближении. Для сравнения в табл. 2 приведено значение, полученное при описании эффекта де Гааза — ван Альфена под давлением с локальным псевдопотенциалом [23].

Простейшим способом учета изменений спектра при сплавлении является прибли-

жение средней решетки, в котором эффективный потенциал сплава имеет вид

$$w = w_m + x(w_n - w_m), \quad (13)$$

где w_m и w_n — псевдопотенциалы матрицы и примеси. Полезно оценить, какую роль в экспериментально наблюдаемых значениях dw/dx (соответствующие данные в табл. 2 получены из dE_c/dx в табл. 1) играет изменение геометрических факторов — атомного объема и величины $G_{10\bar{1}0}$. Это легко сделать, пользуясь сведениями о параметрах решетки [11, 20], значением dw/dq из табл. 2 и выражением (12). Вычисленные значения производных также приведены в табл. 2. Из сравнения с экспериментом следует, что геометрические факторы являются определяющими в поведении E_c сплавов Cd—Mg, и в этой системе нет необходимости учитывать второе слагаемое в (13) при описании достаточно точных изменений спектра. В сплавах Cd—Hg роль этого слагаемого существенна. Об этом свидетельствует и различие в сравниваемых системах эффектов рассеяния,

которые также обусловлены разностью псевдопотенциалов компонент сплава. Параметры T_{Mg}^* и T_{Hg}^* численно коррелируют с расхождениями расчетных значений $d\omega/dx_i$ (графа 2 табл. 2) и полученных методом магнитной спектроскопии (графа 1).

G. E. GRECHNEV and I. V. SVECHKAREV

THE EFFECT OF HOMOVALENT IMPURITIES AND PRESSURE ON THE MAGNETIC PROPERTIES AND ENERGY SPECTRUM PARAMETERS OF CADMIUM

The previously developed theory of magnetism of simple hcp metals is employed to analyze magnetic susceptibility of pure cadmium crystals containing homovalent impurities under pressure at low ($T = 20$ K) temperatures. The effect of impurity scattering on the magnetic susceptibility is taken into account in terms of an «effective temperature» determined from measurements. By comparing experimental and theoretical values of the magnetic susceptibility we have determined some of the energy-spectrum parameters of pure cadmium, as well as band splittings and the relative position of the Fermi level as functions of the concentration of magnesium and mercury impurities and the pressure. Quantitative characteristics of the cadmium pseudopotential near the first formfactor's zero is also determined in the «on-Fermi-sphere» approximation.

LIST OF SYMBOLS

χ , magnetic susceptibility; X , concentration of impurities; P , pressure; E_C , crystal potential parameter; Δ , spin-orbit coupling parameter, E_F , Fermi energy; ω , pseudopotential; ϵ , dielectric function; m_0 , free electron mass.

FIGURE CAPTIONS

Fig. 1. The component of the magnetic susceptibility tensor parallel to the 6-fold axis for the binary cadmium-magnesium and cadmium-mercury alloys at $T = 20$ K (○) and ternary Cd-Mg-Hg alloys with mercury concentration 1 at. % (○) and 2 at. % (●) at 4.2 K according to the data of Ref. [2]. The solid lines are results of a model calculation. The susceptibility of the ion core is excluded

Fig. 2. The energy bands near the symmetry point K in cadmium, schematic.

Fig. 3. Positions of the critical points of the spectrum and of the susceptibility extrema as functions of the parameter E_C in the cadmium-magnesium system ($T = 20$ K, $\Delta = 15$ mRy). The designation of the extrema is the same as in *Fig. 1*.

Fig. 4. Variations of the cadmium energy-spectrum parameters due to impurities 1 at. % Mg (1), 1 at. % Hg (2) and pressure of 1 kbar (3) in coordinates (μ , E_C).

Fig. 5. A graphical determination of the energy-spectrum parameters, of Cd—Mg alloys with varying mercury content (in coordinates (μ , E_C)).

Fig. 6. The magnetic susceptibility of cadmium and Cd—Mg alloys under pressure as a function of the lattice parameter ratio c/a . The points (○) are experimental data of Ref. [6]. The solid curves show results of a calculation (part 6). The dot curve is the concentration dependence of χ in Cd—Mg alloys. All data correspond to $T = 20$ K.

Fig. 7. A graphical determination of the energy-spectrum parameters of cadmium and Cd_{100-x}Mg_x alloys ($X_2 = 1.0$ at. %, $X_3 = 1.4$ at. %) under pressure (in coordinates (μ , E_C)).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Svechkaev I. V., Kuzmicheva L. B.* Electron phase transition display in susceptibility of cadmium alloys.— *Phys. status solidi (b)*, 1970, 39, N 2, p. K113—K115.
2. *Свечкарев И. В., Кузьмичева Л. Б., Полторацкий В. И.* Магнитные свойства цинка и сплавов кадмия с магнием и ртутью.— *ФНТ*, 1977, 3, № 5, с. 663—676.
3. *McClure J. W., Martyniuk J.* Theory of diamagnetism of cadmium alloys.— *Phys. Rev. Lett.*, 1972, 29, N 16, p. 1095—1098.
4. *Мак-Клор Дж. В., Свечкарев И. В., Гречнев Г. Е.* Магнитные свойства и параметры энергетического спектра сплавов $Cd_{1-x}Mg_x$.— *ФНТ*, 1978, 4, № 12, с. 1534—1543.
5. *Гречнев Г. Е., Свечкарев И. В., Мак-Клор Дж. В.* Магнитные свойства и энергетический спектр сплавов $Cd_{1-x}Mg_x$.— *ФНТ*, 1980, 6, № 3, с. 324—331.
6. *Манченко В. Н., Свечкарев И. В., Середа Ю. П.* Влияние давления на анизотропию магнитной восприимчивости сплавов $Cd-Mg$.— *ФНТ*, 1980, 6, № 2, с. 178—183.
7. *Stark R. W., Falicov L. M.* Band structure and Fermi surface for zinc and cadmium.— *Phys. Rev. Lett.*, 1967, 19, N 14, p. 795—798.
8. *Bennett A. J., Falicov L. M.* *g*-Factor in metallic zinc.— *Phys. Rev. A*, 1964, 136, N 4, p. 998—1002.
9. *Van Dyke J. P., McClure J. W., Doar J. F.* Theory of magnetic breakdown, *g*-factor and energy band structure of zinc.— *Phys. Rev. B*, 1970, 1, N 6, p. 2511—2522.
10. *Гречнев Г. Е.* Построение $k \cdot p$ моделей энергетического спектра с помощью метода псевдопотенциалов: квазивыврожденный спектр в кадмии. Харьков, 1979, 15 с. Рукопись деп. в ВИНТИ, № 3080-79 Деп.
11. *Свечкарев И. В., Солнышкин Д. Д.* Параметры решетки сплавов кадмий—магний и кадмий—ртуть.— В кн.: *Физика низких температур*. Харьков, 1972, вып. 18, с. 119—122.
12. *Garland C. W., Silverman J.* Elastic constants of Cd from 4.2 to 300 K.— *Phys. Rev.*, 1960, 119, N 4, p. 1218—1222.
13. *Хейне В., Козн М., Уэйр Д.* Теория псевдопотенциала. М.: Мир, 1973, с. 126, 245.
14. *Fukuyama H.* Theory of orbital magnetism of Bloch electrons.— *Progr. Theor. Phys.*, 1971, 45, N 3, p. 704—729.
15. *Воронцов С. А.* Теория спиновой и спин-орбитальной магнитной восприимчивости сплавов кадмия.— *ФНТ*, 1978, 4, № 9, с. 1161—1166.
16. *Johnson L. G.* Effect of impurities on the orbital magnetic susceptibility.— *Phys. Rev. B*, 1977, 15, N 6, p. 3054—3059.
17. *Takahashi Y., Shimizu M.* Orbital magnetic susceptibility of conduction electron in a disordered system.— *J. Phys. F*, 1978, 8, N 7, p. 1491—1500.
18. *Mann E.* Influence of impurities on the de Haas-van Alphen effect. *Phys. Condens. Matter.*, 1971, 12, N 3, p. 210—225.
19. *Воронцов С. А., Долгополов Д. Г.* Влияние примеси и температуры на особенности магнитной восприимчивости металлов.— *ФНТ*, 1978, 4, № 5, с. 639—645.
20. *Boyd J. R., Reschly J. R., Gordon W. L.* Fermi surface changes in dilute alloys of magnesium in cadmium.— *Phys. Lett. A*, 1974, 47, N 2, p. 137—138.
21. *Mannel P., Günther F.* Elastic constants of a single crystalline and polycrystalline cadmium-magnesium alloys.— *Phys. status solidi (a)*, 1970, 3, N 1, p. 137—141.
22. *Auluck S.* On the pseudopotential coefficients for zinc and cadmium.— *Phys. status solidi (b)*, 1976, 74, N 2, p. K129—K133.
23. Влияние давления на поверхность Ферми кадмия / *Вентцель В. А., Воронов О. А., Лухтер А. И., Руднев А. В.*— *ЖЭТФ*, 1976, 70, вып. 1, с. 272—280.

Физико-технический институт
низких температур АН УССР,
г. Харьков

Поступила в редакцию
9 февраля 1981 г.