

1. Межов-Деглин Л. П. Теплопроводность кристаллов из чистого свинца при низких температурах // ЖЭТФ.— 1979.— 77, вып. 2.— С. 733—750.
2. Батдалов А. Б., Амирханова Д. Х., Плещева С. В. Тепловые и электрические свойства монокристаллов молибдена при низких температурах // ФТТ.— 1984.— 26, вып. 2.— С. 446—452.
3. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика.— М.: Наука, 1979.— 528 с.
4. Thermal and electrical conductivities of very-high-purity indium / M. E. de la Cruz, F. de la Cruz, J. M. Cotignola et al. // Phys. Rev.— 1968.— 176, N 3.— P. 871—875.
5. Groot D. G. de. On r. f. size effect measurements and the Fermi surface in indium: ter verkrijging van de Graad van doctor in de wiskunde en natuurwetenschappen aan de vrije Universiteit te Amsterdam.— Amsterdam, 1974.
6. Castaing B., Goy P. Cyclotron resonance in indium. Electron-phonon effects // J. Phys. C.— 1973.— 6, N 12.— P. 2040—2052.
7. Гаспаров В. А. Температурная зависимость вероятности рассеяния малых групп электронов в олове и индии // ЖЭТФ.— 1974.— 66, вып. 4.— С. 1492—1500.
8. Гантмахер В. Ф., Долгополов В. Т. Температурные зависимости длины свободного пробега электронов и дырок в сурьме // ЖЭТФ.— 1971.— 60, вып. 6.— С. 2260.
9. Гуржи Р. Н., Копелиович А. И. Низкотемпературная электропроводность чистых металлов // УФН.— 1981.— 133, № 1.— С. 33—74.
10. Ashcroft N. W., Lawrence W. E. Fermi surface and electronic structure of indium // Phys. Rev.— 1968.— 175, N 3.— P. 938—955.
11. Мина Р. Т., Хайкин М. С. Исследование поверхности Ферми и скоростей носителей тока в индии методом циклотронного резонанса // ЖЭТФ.— 1966.— 51, вып. 1.— С. 62—86.

Ин-т физики твердого тела  
АН СССР,  
Черноголовка,  
Московской обл.

Получено 13.12.88

УДК 537.622 : 3; 538.915

Н. В. САВЧЕНКО, Г. Е. ГРЕЧНЕВ

## АНИЗОТРОПИЯ $g$ -ФАКТОРОВ ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ В МОЛИБДЕНЕ И ВОЛЬФРАМЕ

Проведено теоретическое исследование  $g$ -факторов электронов проводимости в ОЦК переходных металлах молибдене и вольфраме. Установлена существенная анизотропия  $g$ -факторов в этих металлах для различных листов поверхности Ферми, а также экстремальных орбит на отдельных листах.

В результате наложения квантовых осцилляций намагниченности от электронов с двумя направлениями спина в выражении для амплитуды  $r$ -й гармоники в эффекте де Гааза — ван Альфена (дГВА) содержится сомножитель <sup>[1,2]</sup>

$$R_r = \cos \left( \frac{\pi}{2} r g_c m_c / m_0 \right). \quad (1)$$

Здесь  $m_c/m_0$  — отношение циклотронной массы к массе свободного электрона;  $g_c$  — усредненный по экстремальной орбите на поверхности Ферми (ПФ) <sup>[2]</sup> локальный  $g$ -фактор:

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

( $v_F(\mathbf{k})$  — фермиевская скорость, орт  $\hat{\alpha}$  обозначает направление магнитного поля  $\mathbf{H}$ ). Таким образом, исследования эффекта дГВА дают возможность изучить анизотропию  $g_c$  для орбит на различных листах ПФ. Отличие значений  $g_c$  от свободноелектронного ( $g_0 = 2.0023$ ) обусловлено спин-орбитальным и ферми-жидкостным взаимодействиями (СОВ и ФЖВ) <sup>[2]</sup> и зависит от характера гибридизации и заполнения зон <sup>[3]</sup>. Учет СОВ для

$d$ -электронов по теории возмущений (параметр  $\xi_d$ ) позволяет записать выражение для оценки  $g$ -факторов в переходных металлах [4]:

$$(g_n^{\hat{\alpha}}(\mathbf{k})/g_0)^2 = 1 + \xi_d \sum_{m \neq n} \frac{|\hat{\alpha} \langle n, \mathbf{k} | \mathbf{L} | m, \mathbf{k} \rangle|^2}{E_n(\mathbf{k}) - E_m(\mathbf{k})} \quad (3)$$

Эта формула справедлива при  $|E_n(\mathbf{k}) - E_m(\mathbf{k})| \gg \xi_d$ . Она требует знания не только энергий  $E_n(\mathbf{k})$ , но и зонных волновых функций  $|n, \mathbf{k}\rangle$  при вычислении матричных элементов оператора углового момента  $\mathbf{L}$ , и поэтому ее разумно использовать для качественных оценок. ФЖВ проявляется в перенормировке зонных  $g$ -факторов  $g_c$  в (1):  $g_c^* = S_{xc} g_c$  —, где  $S_{xc}$  — усредненный по орбиталям фактор обменно-корреляционного усиления. Сительную роль и особенности проявления СОВ и ФЖВ для различных электронных состояний можно выделить путем сопоставления данных об эффекте дГВА с результатами зонных расчетов  $g_c$ . Необходимость теоретического анализа обусловлена и проблемой однозначного выбора экспериментальных значений  $g_c^*$  при обращении косинуса (1). В настоящей работе впервые проведено теоретическое исследование  $g$ -факторов электронов проводимости в ОЦК переходных металлах — молибдене и вольфраме.

Для электронов в кристалле с центром инверсии двукратное крамеровское вырождение уровней сохраняется и при наличии СОВ, однако электронные состояния уже не будут чисто спиновыми. Локальный  $g$ -фактор для таких состояний можно определить через расщепление энергетического уровня  $n$ -й зоны в магнитном поле [2-4]:

$$g_n^{\hat{\alpha}}(\mathbf{k}) \mu_B H = E_n^+(\mathbf{k}, \mathbf{H}) - E_n^-(\mathbf{k}, \mathbf{H}). \quad (4)$$

Электронные состояния в однородном магнитном поле фактически являются уровнями Ландау, а не блоховскими функциями. Однако, как было показано в [5],  $g_n^{\hat{\alpha}}(\mathbf{k})$  можно определить в терминах разности ожидаемых значений оператора энергии для волновых пакетов, достаточно локализованных в импульсном пространстве.

Локальные  $g$ -факторы определялись в настоящей работе согласно (4) путем расчета электронной структуры металла с модифицированным гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{LMTO} + \mathcal{H}_{SO} + \mathcal{H}_Z. \quad (5)$$

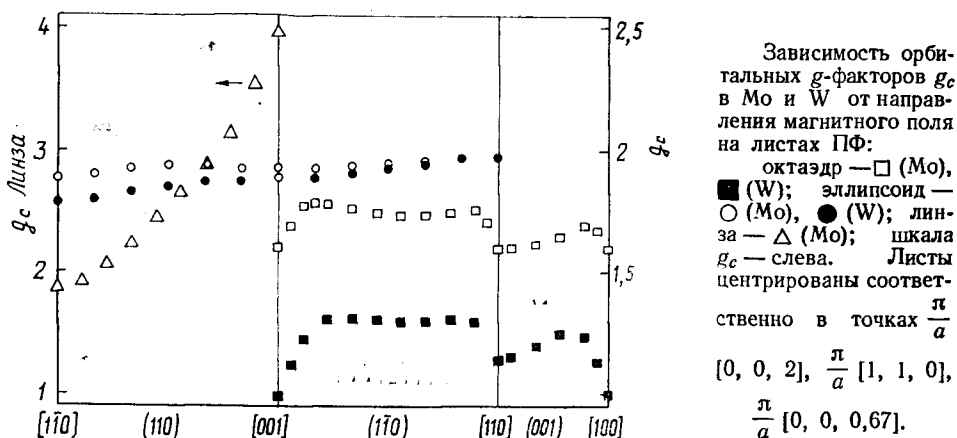
Релятивистские эффекты учитывались в рамках формализма Паули в скалярно-релятивистском гамильтониане  $\mathcal{H}_{LMTO}$  и операторе СОВ  $\mathcal{H}_{SO}$  в соответствии с [6,7]. Внешнее магнитное поле учитывалось в первом порядке по  $\mathbf{H}$  путем включения в матрицу гамильтониана зеемановского члена  $\mathcal{H}_Z = \mu_B \mathbf{H}(\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{L})$  в базисе ЛМТО ( $\boldsymbol{\sigma}_i$  — матрицы Паули). Потенциальные параметры и параметры СОВ, необходимые для построения матрицы гамильтониана (5), были получены путем самосогласованного расчета зонной структуры молибдена и вольфрама в отсутствие магнитного поля. Обменно-корреляционные эффекты учитывались в локальном приближении теории функционала электронной плотности [8]. В целом методика расчета  $g_n^{\hat{\alpha}}(\mathbf{k})$  аналогична [9].

Для нахождения  $g_c$  согласно (2) необходимо знать координаты экстремальных орбит в  $\mathbf{k}$ -пространстве, поведение фермиевских скоростей по орбитам а также циклотронные массы. Такие характеристики, полученные в настоящей работе при проведении ЛМТО расчетов электронной структуры, удовлетворительно согласуются с изменяющимися данными о ПФ молибдена и вольфрама.

На рисунке представлены рассчитанные угловые зависимости  $g_c$  для экстремальных орбит на листах ПФ молибдена и вольфрама. В таблице приведены результаты усреднения локальных  $g$ -факторов по всей ПФ. листам ПФ для отдельных зон  $\langle g \rangle_{\text{band}}$ , а также по соседним орбитам  $\pi$  и  $\sigma$

( $H \parallel \langle 001 \rangle$ ) на сфероиде «валета» в обоих металлах (методика усреднения по ПФ аналогична [3]).

Для дырочных эллипсоидов в окрестности точки симметрии  $N$  зоны Бриллюэна характерна слабая анизотропия  $g_c$  как в молибдене, так и в вольфраме. Состояния на поверхности эллипсоидов приблизительно равноудалены от выше- и нижележащих зон, так что поправки к значению  $g_0$  в некоторой степени компенсируются согласно (3). Состояния на вершинах



дырочных октаэдров близки по энергии к вышележащей четвертой зоне. При этом малая энергетическая разность в знаменателе второго слагаемого в (3) обеспечивает существенный отрицательный сдвиг  $\Delta g = g - g_0$ . Для направлений магнитного поля  $H \parallel \langle 001 \rangle$  экстремальные орбиты проходят через вершины октаэдров, что и обеспечивает минимум на угловой зависимости  $g_c$ . Как видно из рисунка, угловые зависимости  $g_c$  в молибдене и вольфраме

подобны, однако сдвиг  $\Delta g$  больше для последнего. Согласно (4), масштаб  $\Delta g$  пропорционален параметру СОВ, который существенно больше у вольфрама. Это объясняет и соотношение между значениями  $\langle g \rangle$ , усредненными по ПФ, а также и по отдельным листам ее в Mo и W (см. таблицу).

Металл	$\langle g \rangle$	Номер зоны	Лист ПФ	$\langle g \rangle_{\text{band}}$	Орбита
Mo	1,98	3	Октаэдр	1,89	$\sigma$ 0,78 $\pi$ 2,16
		4	Эллипсоид	2,01	
		5	Валет	2,21	
W	1,85	3	Линза	2,21	$\sigma$ 1,00 $\pi$ 2,58
		4	Октаэдр	1,63	
			Эллипсоид	1,99	
			Валет	1,99	

Этот сдвиг больше для последнего. Согласно (4), масштаб  $\Delta g$  пропорционален параметру СОВ, который существенно больше у вольфрама. Это объясняет и соотношение между значениями  $\langle g \rangle$ , усредненными по ПФ, а также и по отдельным листам ее в Mo и W (см. таблицу).

СОВ заметно влияет на электронный спектр в окрестности сфероидов «валета», в частности расщепляет состояния четвертой зоны на перешейках «валета» и «линз» пятой зоны в молибдене. С увеличением этого расщепления в вольфраме «линзы» вообще исчезают. Ближайшей к состояниям на орбите  $\pi$  сфероида является ветвь третьей энергетической зоны, что и обеспечивает положительный сдвиг  $\Delta g$  для обоих металлов. Напротив, для орбит  $\sigma$  на перешейках ближайшими по энергии являются состояния пятой зоны, и  $\Delta g$  отрицательно. Максимальному сечению «линз» в молибдене соответствуют орбиты, вложенные в  $\sigma$ . В этом случае  $\Delta g$  определяется малой положительной разностью  $E_5(k) - E_4(k)$  что и дает значение  $g_c \approx 4$  для направлений  $H \parallel \langle 100 \rangle$ . Тонкая структура энергетических зон в этой области  $k$ -пространства определяет и ярко выраженную анизотропию  $g_c$  для «линз» (см. рисунок).

В настоящей работе установлена существенная анизотропия  $g$ -факторов в молибдене и вольфраме для различных листов ПФ, а также орбит на отдельных листах. В этих металлах уровень Ферми проходит в области сильной  $sp-d$  гибридизации энергетических зон, что приводит к заметным сдвигам  $\Delta g$  даже для умеренного СОВ. Проведенные в настоящей работе расчеты спин-поляризованной электронной структуры (согласно [7]) позволили получить наряду с  $g_c$  и усредненные по ПФ значения  $S_{xc}$  (факторы Стонера):  $S_{xc}^{Mo} = 1,25$  и  $S_{xc}^W = 1,20$ . На основе рассчитанных  $g_c$  и экспериментальных данных о  $g_c^*$  возможно изучение анизотропии параметра  $S_{xc}$ . К сожалению, данные о  $g_c^*$  ограничиваются пока лишь наблюдениями спинового нуля на эллипсоидах в вольфраме [10], и очевидна необходимость детальных экспериментальных исследований квантовых осцилляций в Мо и W. С учетом полученных значений фактора Стонера и угловых зависимостей  $g_c$  и  $m_c$  можно ожидать выполнения условия  $R_r = 0$  в (1) для  $r = 1$  на эллипсоидах и октаэдрах в Мо и W и «линзах» в Мо. Для уточнения направлений, соответствующих этим спиновым нулям, необходимо более прецизионное описание экстремальных орбит и циклотронных масс, чем дает априорный ЛМТО расчет (в особенности для «линзы» и «валета»).

Авторы выражают благодарность И. В. Свечкареву за внимание к работе и полезные обсуждения результатов.

N. V. SAVCHENKO and G. E. GRECHNEV  
ANISOTROPY OF CONDUCTION ELECTRON  $g$ -FACTORS  
IN MOLYBDENUM AND TUNGSTEN

The theoretical investigation of conduction electron  $g$ -factors in bcc transition metals molybdenum and tungsten is carried out. A pronounced anisotropy is found both for different extremal orbits on a given sheet and for different sheets of the Fermi surface in these metals.

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

FIGURE CAPTION. Angular dependence on the magnetic field direction of orbital  $g$ -factor  $g_c$  in Mo and W for the Fermi surface sheets: octahedron —  $\square$  (Mo),  $\blacksquare$  (W); ellipsoid —  $\circ$  (Mo),  $\bullet$  (W); lens —  $\triangle$  (Mo);  $g_c$ -scale is to the left. The sheets are centered at the points  $\pi/a [0, 0, 2]$ ,  $\pi/a [1, 1, 0]$ ,  $\pi/a [0, 0, 0.67]$ , respectively.

1. Лифшиц И. М., Косевич А. М. К теории магнитной восприимчивости металлов при низких температурах // ЖЭТФ.— 1955.— 29, вып. 6.— С. 730—742.
2. Шенберг Д. Магнитные осцилляции в металлах.— М.: Мир, 1986.— 678 с.
3. MacDonald A. H. Transition-metal  $g$ -factor trends // J. Phys. F.— 1982.— 12, N 12.— P. 2579—2589.
4. Koelling D. D., MacDonald A. H. Relativistic effects in solids // Proc. NATO ASI. On relativistic effects in atoms, molecules and solids.— New York; London, 1983.— P. 227—304.
5. Graff A. M. de, Overhauser A. W. Theory of the  $g$ -shift of conduction electrons // Phys. Rev.— 1969.— 180, N 3.— P. 701—706.
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 spin-polarized case. I // J. Phys. C.— 1972.— 5, N 13.— P. 1629—1642.
9. Анизотропия зеемановского расщепления для электронов проводимости в палладии и золоте / Г. Е. Гречнев, Н. В. Савченко, И. В. Свечкарев и др. // ФНТ.— 1987. 13, № 11.— С. 1219—1222.
10. Perz J. M. Conduction electron  $g$ -factor in tungsten from quantum oscillations in ultrasonic velocity // Can. J. Phys.— 1977.— 55, N 4.— P. 356—363.

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

Получено 14.12.88