

УДК 539.292

С. А. ВОРОНЦОВ, Г. Е. ГРЕЧНЕВ

# ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СДВИГА НАЙТА В СПЛАВАХ КАДМИЯ С МАГНИЕМ

Вычислен вклад в изотропную часть сдвига Найта  $K_{iso}$  в кадмии от состояний на узком перешейке дырочной поверхности второй зоны (монстра). Вследствие близости  $E_F$  к точке изменения топологии поверхности Ферми поведение  $K_{iso}$  с повышением температуры и введением примеси магния определяется в основном перестройкой электронного спектра из-за влияния фактора Дебая — Валлера, потенциала примеси и изменений параметров решетки. Рассчитанные температурная и концентрационная зависимости  $K_{iso}$  в сплавах  $Cd_{100-x}Mg_x$  согласуются с экспериментальными данными.

Изотропная часть сдвига Найта в  $s$ -,  $p$ -металлах возникает как следствие фермиевского контактного взаимодействия спинов электронов проводимости со спином ядра и обычно определяется при усреднении энергии взаимодействия [1]:

$$K_{iso} = \Delta H/H = (8\pi/3) \chi_s \langle |\psi_k(0)|^2 \rangle_F, \quad (1)$$

где  $\chi_s$  — спиновая восприимчивость;  $\langle |\psi_k(0)|^2 \rangle_F$  — плотность волновой функции электрона проводимости в точке расположения ядра, усредненная по состояниям на поверхности Ферми.

Сильная температурная зависимость сдвига Найта в чистом кадмии [2] была объяснена Касовским и Фаликовым [3] с использованием метода псевдопотенциала при учете термических изменений электронного спектра, происходящих в основном из-за наличия фактора Дебая — Валлера. Спиновая восприимчивость с учетом дополнительного множителя — фактора обменного усиления — определялась по плотности состояний на уровне Ферми.

Определяющий вклад в поведение  $K_{iso}$  кадмия при изменении температуры вносят состояния на узком перешейке дырочной поверхности второй зоны (монстра) [3], имеющие в основном  $s$ -характер. Эти состояния весьма чувствительны к небольшим изменениям решеточного потенциала поскольку их энергия близка к точке изменения топологии поверхности Ферми.

Для исследования вклада определенной группы состояний удобно непосредственно вычислять  $K_{iso}$  для данной группы, используя метод, предложенный в [4]:

$$K_{iso} = - \frac{1}{(2\pi)^3} g_0 \mu_B^2 \int dk \frac{1}{p} \frac{\partial}{\partial \epsilon_l} \left[ \frac{\mathcal{W} f(\epsilon - \zeta)}{p} \right]. \quad (2)$$

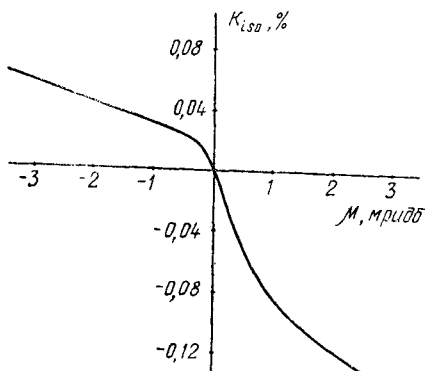
Здесь  $\mathcal{W} = \text{Sp}(S_z N v_p N)$ ;  $p = D'$ ;  $g_0$  —  $g$ -фактор свободных электронов;  $s$  — фактор обменного усиления;  $\mu_B$  — магнетон Бора;  $D$  — детерминант;  $N$  — матрица кофакторов матрицы  $\epsilon - \mathcal{H}$ ;  $(\epsilon - \mathcal{H})^{-1} = N/D$ ;  $\mathcal{H}$  — матрица  $k \cdot p$  гамильтониана (или псевдогамильтониана);  $\epsilon_l$  — энергия зоны;  $S_z$  — спин электрона;  $v_p$  — матрица оператора контактного взаимодействия;  $f$  — фермиевская функция распределения;  $\zeta$  — химический потенциал. Интегрирование в  $k$ -пространстве проводится фактически не по зоне Бриллюэна, а по области, в которой сосредоточены состояния данной группы. Предполагается, что вклады в сдвиг Найта других состояний образуют фон, слабо зависящий от температуры или концентрации примеси, поэтому достаточно описать лишь относительные изменения  $K_{iso}$ .

Целью настоящей работы является теоретическое рассмотрение поведения  $K_{iso}$  при изменении температуры и введении примеси магния в сплавах  $Cd_{100-x}Mg_x$  в рамках данного метода.

Сдвиг резонансной частоты ядерного момента пропорционален локальному значению электронной намагниченности. В сплавах ядерные моменты в окрестности примесного атома испытывают воздействие локального поля, отличающегося от своего значения для идеального кристалла. Будем, однако, предполагать, что зависимость сдвига Найта от внешних воздействий (температуры, примеси) в разбавленных сплавах кадмия определяется главным образом изменениями зонной структуры, а не локальным окружением ядерного момента атома матрицы, участвующего в резонансе.

Для описания состояний дырочно-го монстра использована матрица псевдогамильтониана в окрестности точки на линии симметрии  $\Sigma$ -зоны Бриллюэна, где трехкратно вырожденный уровень пустой решетки расщепляется кристаллическим потенциалом. Матрица псевдогамильтониана размерности  $3 \times 3$  получена в приближении трех плоских волн, из которых построены симметризованные комбинации.

При вычислении матричных элементов оператора контактного взаимодействия псевдоволновые функции (плоские волны) необходимо ортогонализировать к волновым функциям электронов внутренних оболочек. Учет ортогонализации можно свести к умножению матричных элементов оператора контактного взаимодействия на коэффициент  $C^2$ , общий для всех состояний на поверхности Ферми, который определяется только видом атомных волновых функций. В работе использовано значение  $C^2 = 669$ , вычисленное в [3] согласно [5].



Зависимость изотропной части сдвига Найта от уровня Ферми при  $T = 20$  К ( $K_{iso}$  отсчитывается от значения при  $\mu = 0$ ).

$T, K$	$x, ат. \%$	$W_{0002}, мридб$	$W_{1011}, мридб$	$\mu, мридб$	$K_{iso}$ (эксперимент) [ $10^3$ ]	$K_{iso} = 0,348 + \Delta K_{iso}$ (расчет)
20	0	-46,8	43,5	2	0,348	$0,348 \pm 0,04$
	10	-35,3	44,7	-3	0,408	$0,433 \pm 0,02$
298	0	-52,2	34,0	-2	0,415	$0,438 \pm 0,025$
	10	-41,8	39,4	-8	0,505	$0,493 \pm 0,012$

В чистом кадмии при  $T = 0$  уровень Ферми находится в непосредственной близости к критической точке спектра на линии  $\Sigma$  (выше на 2—3 мридб [6]). Вычисление с помощью (2) зависимости  $K_{iso}$  от  $\mu$  — положения уровня Ферми относительно критической точки спектра  $E_k$  ( $\mu = \zeta - E_k$ ) — для состояний монстра показывает, что прохождение уровня Ферми через критическую точку сопровождается ростом изотропной части сдвига Найта (рисунок). Изменение  $K_{iso}$  с температурой и введением примеси магния об-

условлено также и деформацией зон вследствие влияния фактора Дебая — Валлера, потенциала примеси и изменений параметров решетки.

Было проведено вычисление величин  $\Delta K_{iso} = K_{iso}(x, T) - K_{iso}(0, 20)$  при  $T = 20$  К и  $T = 298$  К для чистого кадмия и для сплава, содержащего 10 ат. % примеси магния. Результаты (к ним добавлено экспериментально наблюдаемое значение  $K_{iso}$  чистого кадмия при  $T = 20$  К) приведены в таблице.

Численные значения фурье-компонент псевдопотенциала  $W_{0002}$  и  $W_{1011}$ , относительного положения уровня химического потенциала (см. таблицу) и затухания электронных волн  $\Gamma$  для состояний на перешейке монстра ( $\Gamma =$

$= 16 \text{ К/ат. \%}$ ) задавались исходя из расчета зонной структуры сплавов  $\text{Cd}_{100-x}\text{Mg}_x$  [7]. Влияние примесного рассеяния на сдвиг Найта учитывалось путем замены температуры  $T$  в функции распределения эффективным значением  $T^* = T + xT$ . Фактор обменного усиления для кадмия составляет 1,55 [8]. Вычисления фактора Дебая — Валлера проводились на основе нейтронографических данных о плотности фононных состояний в кадмии [9] с учетом различия массы ионов кадмия и магния. Теоретические значения  $K_{\text{iso}}(x, T)$  согласуются с экспериментальными данными [10] (см. таблицу) в пределах погрешности расчета, которая обусловлена главным образом погрешностью вычислений  $\mu$  ( $\leq 1 \text{ мридб}$ ).

Проведенное рассмотрение температурной и концентрационной зависимостей изотропной части сдвига Найта для состояний монстра в сплавах кадмия с магнием показывает, что в случае, когда энергия Ферми близка к точке изменения топологии изознергетической поверхности, поведение  $K_{\text{iso}}$  определяется в основном перестройкой зонного спектра электронов. Следует отметить, что подход, использованный в настоящей работе, позволяет обойтись без вычисления волновой функции и ее усреднения по состояниям на поверхности Ферми и непосредственно выразить относительные изменения  $K_{\text{iso}}(x, T)$  для данной группы состояний через параметры спектра.

Авторы выражают искреннюю благодарность И. В. Свечкареву за интерес к работе и ценные замечания.

S. A. VORONTSOV and G. E. GRECHNEV

## TEMPERATURE DEPENDENCE OF KNIGHT SHIFT IN Cd-Mg ALLOYS (Short note)

The contribution to the isotropic part of the Knight shift in cadmium from the states on the narrow neck of the hole surface of the second zone (monster) is calculated. Because of  $E_F$  proximity to the point where the Fermi surface topology changes, the behavior of  $K_{\text{iso}}$  with rising temperature and magnesium impurity addition is mainly governed by the electron spectrum rearrangement due to the effects of the Debye — Waller factor, the impurity potential and the lattice parameter variations. The calculated dependences of  $K_{\text{iso}}$  on temperature and concentration in  $\text{Cd}_{100-x}\text{Mg}_x$  alloys are consistent with experimental results.

### LIST OF SYMBOLS

$K_{\text{iso}}$ , isotropic part of the Knight shift;  $s$ , exchange enhancement factor;  $\psi_k(0)$ , conduction electron wave function at the nuclear site;  $\mu$ , chemical potential level position with respect to the point where the Fermi surface topology changes;  $\chi_s$ , spin susceptibility;  $\mathcal{H}$ , Hamiltonian matrix;  $W$ , Fourier components of pseudopotential.

### FIGURE CAPTION

Dependence of the isotropic part of the Knight shift on the Fermi level at  $T = 20 \text{ К}$  ( $K_{\text{iso}}$  is counted off from the value at  $\mu = 0$ ).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сликтер Ч. Основы теории магнитного резонанса. — М.: Мир, 1967. — 124 с.
2. Seymour E. F. W., Styles G. A. Nuclear magnetic resonance line shift in cadmium. — Phys. Lett., 1964, 10, N 3, p. 269—271.

3. *Kasowski R. V., Falicov L. M.* Calculation of the temperature dependence of the Knight shift in cadmium.— *Phys. Rev. Lett.*, 1969, 22, № 19, p. 1001—1003.
4. *Воронцов С. А., Долгополов Д. Г.* Теория сдвига Найта вблизи точек изменения топологии поверхности Ферми.— *ФНТ*, 1979, 5, № 12, с. 1409—1417.
5. *Herman F., Skillman S.* Atomic structure calculations.— Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1965.
6. *Stark R. W., Falicov L. M.* Band structure and Fermi surface of zinc and cadmium.— *Phys. Rev. Lett.*, 1967, 19, N 14, p. 795—798.
7. *Гречнев Г. Е.* Примесное рассеяние в изовалентных сплавах кадмия: псевдопотенциальный подход.— В кн.: 21-е Всесоюз. совещ. по физике низких температур: Тез. докл. Харьков, 1980, ч. 3, с. 124—125.
8. *Dupree R., Geldart D. J. W.* Exchange enhancement of the spin susceptibility of metals.— *Solid State Communs*, 1971, 9, N 2, p. 145—149.
9. *Еремеев И. П., Чернышов А. А., Садилов И. П.* Плотность состояний фононов в кадмии.— *Письма в ЖЭТФ*, 1973, 18, вып. 5, с. 302—305.
10. *Свечкарев И. В., Жуков В. В., Жук Г. М.* Сдвиг Найта в сплавах кадмия.— *ФТТ*, 1973, 15, № 4, с. 1260—1262.

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

Получено 31.01.83