УДК 539.

#### Г. Е. ГРЕЧНЕВ

### ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ И ПРИМЕСЕЙ НА ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР КАДМИЯ

С использованием полуэмпирических нелокальных псевдопотенциалов рассчитаны изменения электронного спектра кадмия в области гелиевых температур при воздействии всестороннего и одноосного сжатия, а также при введении изовалентных примесей (магния и ртути). Вычислены локальные параметры затухания для электронных состояний в Cd—(Mg) и Cd—(Hg). Предсказан ряд электронных топологических переходов в точках симметрии K и L и на линии симметрии  $\Sigma$  зоны Бриллюэна. Обсуждается связь особенностей в поведении некоторых физических характеристик сплавов Cd—Мg и Cd—Hg, а также чистого кадмия под давленнем с изменениями топологии поверхности Ферми.

#### Введение

Сильная анизотропия сжимаемости кадмия, а также наличие в малой окрестности уровня Ферми ряда критических точек спектра [1] (рис. 1)

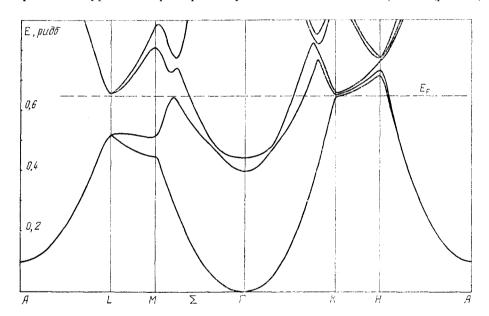


Рис. 1, Фрагмент электронного эпергетического спектра кадмия при T=4,2 K, рассчитанного с использованием псевдопотенциала [1].

являются предпосылками для наблюдения электронных переходов  $2^{1}/_{2}$  рода  $[^{2}]$ . Впервые изменение топологии поверхности Ферми было обнаружено именно в кадмии  $[^{3}]$  при исследовании изменения анизотропии магнито-сопротивления под давлением. Позднее в кадмин были обнаружены аномалии в поведении температуры перехода в сверхпроводящее состояние  $[^{4}]$ , коэффициентов Холла  $[^{5}]$ , сдвига Найта  $[^{6}]$ , а также неосциллирующей составляющей магнитной восприимчивости  $[^{7-9}]$  при воздействии давления и примесей. Эти аномалии были объяснены в  $[^{5-10}]$  влиянием электронных топологических переходов. Однако исследования  $[^{4-10}]$  не были дополнены непосредственным экспериментальным изучением топологии поверхности Ферми при соответствующих воздействиях, поэтому вопрос о связи наблюдаемых аномалий с возможными типами электронных топологических

переходов остается открытым. В настоящей работе проведено детальное теоретическое исследование ожидаемых электронных топологических переходов в кадмии в области гелиевых температур при воздействии всестороннего и одноосного сжатия, а также при введении изовалентных примесей (магния и ртути).

## 1. Влияние всестороннего сжатия и одноосной деформации на зонную структуру кадмия

Описание электронных спектров непереходных металлов в окрестности уровня Ферми  $E_F$  с использованием эмпирических псевдопотенциалов (ПП), полученных путем подгонки к экспериментальным данным, позволяет достигнуть точности порядка одного миллиридберга [11]. В настоящей работе использовались полуэмпирические модели нелокального ПП [1, 12], обеспечивающие количественное описание экстремальных сечений и диаметров поверхности Ферми кадмия в области  $T \cong 4,2$  К. Одноэлектронный псевдогамильтониан в представлении плоских волн имеет вид [11]

$$\langle \mathbf{k}_{i} | \mathcal{H} | \mathbf{k}_{i} \rangle = k_{i}^{2} \delta_{ij} + \delta_{k_{i} - k_{j}, G} S(G) \langle \mathbf{k}_{i} | w | \mathbf{k}_{j} \rangle, \tag{1}$$

где G — вектор обратной решетки;  $\langle \mathbf{k}_i | w | \mathbf{k}_i \rangle$  — формфактор ПП; S (G) — структурный фектор. При наличии всестороннего сжатия (а также одно-осной деформации) с учетом изменения длины векторов G и атомного объема  $\Omega$  формфактор нелокального полуэмпирического ПП из (1) представим в следующем виде:

$$\langle \mathbf{k}_i | w | \mathbf{k}_i \rangle \equiv w (\mathbf{k} - \mathbf{G}_i, \mathbf{k} - \mathbf{G}_i) = w (\mathbf{k} - \mathbf{G}_i^0, \mathbf{k} - \mathbf{G}_i^0) + \Delta w (G_m),$$
 (2)

$$\Delta w (G_m) = \left(\frac{\partial w_{Fs} (G_m)}{\partial G_m}\right) \Big|_{\Omega} \Delta G_m - w_{Fs} (G_m^0) \frac{\Delta \Omega}{\Omega};$$
 (3)

 ${f G}_m={f G}_i-{f G}_j;$   ${\it w}$  ( ${f k}-{f G}_i^0$ ) соответствует матричному элементу нелокального ПП для недеформированной решетки. Поправка  $\Delta {\it w}$  вычислена в приближении сферы Ферми (FS). Первое слагаемое в (3) определяется наклоном кривой  ${\it w}_{FS}(q)$  при  $q=G_m^0$ . Для построения такой кривой были использованы кубические сплайны, базирующиеся на соответствующих матричных элементах  ${\it w}$  ( ${\it k}_i={\it k}_f$ ,  ${\it G}_m^0$ ) исходного нелокального ПП [ $^{1,12}$ ] и обеспечивающие непрерывность производных  $\partial {\it w}_{FS}/\partial q$  в  $q=G_m^0$ . Эти производные приведены в табл. 1. Значения  $\Delta G_m$  и  $\Delta \Omega$  были

получены на основе низкотемпературных данных о сжимаемости решетки кадмия  $[^{13}]$ .

Для сравнения в табл. 1 приведены значения  $\partial w (G_m)/\partial G_m$ , полученные согласно (3) на основе анализа данных эффекта де Гаазаван Альфена в кадмии под давлением [14, 15]. Данные о поведении  $w(G_m)$  под давлением были получены в [14, 15] в приближении локального ПП, к тому же в [15] использовались «свернутые» секулярные уравнения малого порядка (2—4). Поскольку поверхность Ферми кадмия мало чувствительна к вариациям фурье-компо-

Таблица 1

Производные формфактора псевдопотенциала кадмия (в приближении сферы Ферми) в окрестности первых трех векторов обратной решетки  $\partial w \, (G_m)/\partial G_m, \; {\it pudf} \cdot {\it a}_{\it B}$ 

$\mathbf{G}_m$	Интерполяция формфакторов w (G <sub>m</sub> ) для моделей		Подгонка по эксперимен - тальным дан - ным (ДГВА под давлением)		Данные магнитной восприм-	
	[1]	[12]	[14]	[15]	[18]	
(0002) (1010) (1011)	0,53 0,43 0,35	0,55 0,44 0,24	0,39 0,63 0,42	0,32 0,31 0,30	 0,40 :	

ненты  $w_{10\overline{10}}$  [14], само значение  $w_{10\overline{10}}$ , как и  $dw_{10\overline{10}}/dP$ , определяется из данных [14, 15] с большой погрешностью. Более надежное значение  $dw_{10\overline{10}}/dP$ ,

непосредственно связанное с изменением расщепления зон в точке симметрии K, получено в [ $^{16}$ ] при анализе поведения магнитной восприим-

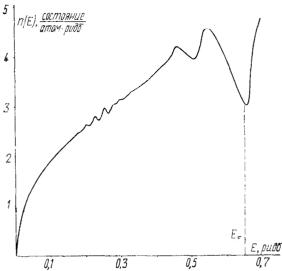


Рис. 2. Плотность электронных состояний в зоне проводимости кадмия при T=4,2 K, рассчитанная с использованием псевдопотенциала [1].

Таблица 2

Изменение положения критических точек в электронном спектре кадмия относительно уровня Ферми при воздействии давления P, одноосного сжатия  $\sigma$  и изовалентных примесей X при температуре  $4.2~{\rm K}^*$ 

1,6 1(						
	пп	$P = 0,$ $\sigma = 0,$ $X = 0$	P=10	$\sigma = 10$	$X_{\rm Mg}=10$	$X_{\mathrm{Hg}=10}$
$E_{K1}-E_F$	[12]	_3 _4	7,5 9	—13,5 —16	—10,5 —11	—1 —3
$E_{K2}-E_F$	[ <sup>1</sup> ] [ <sup>12</sup> ]	+1 +1	—2 —2	—12 —14,5	—8,5 —9	- <u>+</u> 4 +4
$E_{K3}$ — $E_F$	$\begin{bmatrix} 1 \\ 1^2 \end{bmatrix}$	+-8,5 +10	+6 +7	—4 —6	—0,5 —1	+12 +13
$E_{\Sigma}-E_{F}$	[1] [12]	1 1,5	+2,5 +2	+6 +6	$+3,5 \\ +3$	0 +1
$E_L - E_F$	[ <sup>1</sup> ]	+9 +6	+10 +8	+10 +11,5	+3,5	+6 +5
$E_{F}$	[ <sup>1</sup> ] [ <sup>12</sup> ]	651 623	659 631	657 629	655,5 628	649 621

<sup>\*</sup> Рассчитано с использованием нелокальных ПП  $[^{1,\ 12}]$ ; энергия — в миллиридбергах, давление — в килобарах, концентрация примеси — в ат. %; погрешность  $\simeq 1$  мри $\partial \delta,\ E_F$  отсчитывается от дна зоны проводимости.

чивости кадмия под давлением (табл. 1).

Решение матричной задачи на собственные значения для эрмитового гамильтониана (1) с целью получения зависимости  $E(\mathbf{k})$ , а также расчет плотности электронных состояний n(E) осуществлялись с использованием эффективных численных методов [17] и [18] соответственно. Порядок матрицы (N)определялся аналогично [1]: учитывались плоские волны, соответствующие набору ограниченных по модулю волновых векторов  $|{\bf k} - {\bf G}_i|^2 < 1$ <2 ридб (см. [11, ч. 11, § 11]). При этом в каждой из шести вершин **К**, неприводимой части Бриллюэна формируются полные звезды  $\{\mathbf{K}_{l}-\mathbf{G}_{i}\}$ , N изменяется от 18 до 32 (с учетом спин-орбитального взаимодействия) и обеспечивается сходимость ≤ 1,0 *мридб.* При сравнительно небольших затратах машинного времени метод [18] дает возможность детально воспроизвести крисостояний плотности (рис. 2) и получить  $E_F$  с точностью  $\approx 1.0$  мридб. Данные об изменении положений критических точек спектра вблизи  $E_F$  при воздействии всестороннего и одноосного (вдоль оси [0001]) сжатия, рассчитанные на основе нелокальных  $\Pi\Pi$  [1, 12], представлены табл. 2. Қак видно из этой таблицы, результаты расчетов, выполненных для обеих моделей ПП, находятся в качественном согласии. Ветви спектра 3-й и 4-й зон в точке симметрии L, соответствующие «бабочкам» и «сигарам» [1], при воздействии давлений удаляются от  $E_F$ . С другой стороны, имеется отчетливая тенденция к соединению рукавов дырочного «мон-

стра под давлением ( $E_{\Sigma}-E_F$  изменяет знак;  $E_{\Sigma}-$  максимум 2-й зоны на линии симметрии  $\Sigma$ ). Для системы почти вырожденных зон в окрест-

ности точки симметрии K также имеет место ряд электронных топологических переходов при сравнительно небольших величинах давления и одноосного сжатия.

Согласно проведенным расчетам, топологические переходы в чистом кадмии при  $T \simeq 4,2$  K, связанные с соединением в точке K лепестков дырочного «монстра» ( $E_{K^2} = E_F$ ) и рукавов «монстра» ( $E_\Sigma = E_F$ ) и с появлением электронных «игл» 3-ей зоны в K ( $E_{K^3} = E_F$ ), ожидаются при давлениях 1,5; 5 и 30 кбар соответственно. Эти результаты в целом согласуются с данными анализа поведения магнитосопротивления [ $^3$ ,  $^{19}$ ] и магнитной восприимчивости [ $^9$ ,  $^{16}$  кадмия под давлением.

#### 2. Влияние изовалентных примесей на зонную структуру кадмия

Использование теории ПП для описания примесного рассеяния в непереходных металлах представляется интересным и перспективным, поскольку позволяет в простой и удобной форме учесть особенности зонной структуры металла-матрицы (несферичность поверхности Ферми, многозонные эффекты  $[^{20-22}]$ ). В блоховском представлении диагональный матричный элемент конфигурационно усредненной функции Грина имеет вид

$$\langle \Psi_{\mathbf{k}} | G | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle = [E - E_0(\mathbf{k}) - \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{k}, E)]^{-1}, \tag{4}$$

где  $\Psi_{\bf k}$  и  $E_0({\bf k})$  — решения уравнения Шредингера в отсутствие примесей;  $\sum ({\bf k}, E)$  — собственно энергетическая часть;  $\langle \Psi_{\bf k} | G | \Psi_{\bf k} \rangle$  имеет комплексные полюсы, определяющие перенормированную энергию электрона проводимости

$$E(\mathbf{k}) = E_0(\mathbf{k}) + \text{Re}\{\sum (\mathbf{k}, E)\}$$
 (5)

и параметр затухания для состояния  $\Psi_{\mathbf{k}}$ :

$$\Gamma(\mathbf{k}) = \operatorname{Im} \left\{ \sum (\mathbf{k}, E) \right\}. \tag{6}$$

Для разбавленных сплавов, в предположении сферической симметрии потенциала рассеяния,  $\sum$  (k, E) можно выразить в терминах парциальных фазовых сдвигов  $\delta_l$ . Если  $\Psi_{\bf k}$  представляет собой линейную комбинацию плоских волн

$$\Psi_{\mathbf{k}} = V^{-1/2} \sum_{n} a_{n}(\mathbf{k}) \exp \left\{ i \left( \mathbf{k} + \mathbf{G}_{n} \right) \mathbf{r} \right\}$$
 (7)

(V - объем кристалла), то из  $[^{21, 22}]$  следует

$$\sum_{l} (\mathbf{k}, E_F) = -\frac{2\pi h^2 x}{m k_F \Omega} \sum_{l} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) \sum_{nn'} a_n^* (\mathbf{k}) a_{n'} (\mathbf{k}) P_l (\cos \Theta_{nn'}),$$
(8)

где  $x \ll 1$  — концентрация примеси;  $P_l$  — полиномы Лежандра;  $\theta_{nn'}$  — угол между векто рами  $\mathbf{k} + \mathbf{G}_n$  и  $\mathbf{k} + \mathbf{G}_{n'}$ ; m — масса электрона (в приближении параболической зоны).

С помощью эмпирических  $\delta_l$ , рассматриваемых как подгоночные параметры, в  $[^{20,\ 21}]$  удалось количественно описать анизотропию температуры Дингла для экспериментально исследованных сечений поверхности Ферми в ряде разбавленных сплавов магния. (Использование в  $[^{21}]$   $\delta_l$ , вычисленных на основе теоретических ПП, не позволило описать экспериментальные данные.) Следует отметить, что эмпирические фазовые сдвиги можно определить лишь используя весьма обширную информацию о влиянии примесей на спектр  $[^{20,\ 21}]$ . При этом практически исключается возможность предсказания априори изменений в электронных спектрах металлов. Более перспективным представляется использование индивидуальных эмпирических ПП для описания примесных эффектов в зонной структуре  $[^{22}]$ .

Предложенный в  $[^{22}]$  формализм может быть использован для расчетов электронных спектров разбавленных изовалентных сплавов кадмия с магнием и ртутью. Для этих металлов  $\Omega_{\rm Cd} \simeq \Omega_{\rm Mg} \simeq \Omega_{\rm Hg}$   $[^{11, \ c. \ 232}]$ , и изме-

нения атомного объема кадмия при введении примесей малы [ $^{23}$ ]. Поэтому можно предполагать, что механизм рассеяния, связанный с различием ПП атомов матрицы и примеси, является определяющим в Cd — (Mg) и Cd — (Hg). Фазовые сдвиги были вычислены в борновском приближении с использованием полуэмпирических ПП для кадмия и примесей [ $^{1}$ ,  $^{12}$ ,  $^{24}$ ,  $^{25}$ ] путем решения переопределенной системы линейных уравнений для  $\delta_0$ ,  $\delta_1$  и  $\delta_2$  [22]:

[22]: 
$$\langle \mathbf{k} + \mathbf{G}_n | w_{pl} | \mathbf{k} + \mathbf{G}_{n'} \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{mk_F\Omega} \sum_{l} (2l+1) \, \delta_l P_l (\cos \theta_{nn'}), \tag{9}$$

где  $w_{pt} = w_{\rm Mg} - w_{\rm Cd}$  или  $w_{\rm Hg} - w_{\rm Cd}$ . (Поскольку в рассматриваемых металлах состояния f-типа удалены от зоны проводимости и не учитываются в нелокальных ПП [ $^{1, 12, 24, 25}$ ], нет оснований сохранять в (9)  $\delta_l$  с l > 2.) Для ПП кадмия [ $^{1}$ ] были получены следующие решения системы (9):

$$\begin{array}{l} \delta_0 = 0{,}226; \quad \delta_1 = 0{,}026; \quad \delta_2 = -0{,}061 \text{ для } \omega_{pt}^{\rm Mg}; \\ \delta_0 = -0{,}411; \quad \delta_1 = 0{,}075; \quad \delta_2 = 0{,}037 \text{ для } \omega_{pt}^{\rm Hg}. \end{array}$$

При расчете электронных спектров Cd — (Mg) и Cd — (Hg) на предварительном этапе вычислялись  $E_0$  (k) и  $\Psi_{\bf k}$  из (5) и (7) путем решения матричной задачи на собственные значения для гамильтониана (1). Поскольку матричные элементы ПП кадмия в (1) должны соответствовать параметрам решетки разбавленного сплава [23], они рассчитывались согласно (2) и (3). Учет рассеяния на поверхности Ферми сводился к вычислению  $\sum$  (k,  $E_F$ ) согласно (8). При этом учитывались коэффициенты  $a_n$  (k) из (7) для плоских волн с  $|{\bf k}+{\bf G}_n|\simeq k_F$ . (Для состояний вблизи поверхности Ферми лишь  $a_n$  ( $k_F$ )  $\leqslant$  1. Остальные  $a_n$  ( $k_F$ )  $\leqslant$  1.

Расчетные данные о поведении критических точек спектра кадмия вблизи  $E_F$  при введении примесей магния и ртути представлены в табл. 2. Как и в случае расчетов зонной структуры кадмия под давлением, результаты, полученные для обеих моделей ПП кадмия [1, 12], находятся в качественном согласии. При введении примеси магния ветви спектра 3-й и 4-й зон в точке L приближаются к  $E_F$ . Электронный топологический переход ожидается при  $X_{\rm Mg}=12\pm2$  ат. %, что соответствует границе гексагональной  $\alpha$ -фазы [26, c. 29]. Сближение  $E_L$  и  $E_F$  имеет место и в Cd — (Hg), однако эффект существенно слабее, так что электронный переход  $E_L=E_F$  в области существенно слабее, так что электронный переход  $E_L=E_F$  в области существенно слабее, так что электронный гереход  $E_L=E_F$  в области существеннох для дырочных состояний 2-й зоны [26, с. 171] является проблематичным. Для дырочных состояний 2-й зоны

Таблица 3 Локальные параметры затухания в изовалентных сплавах кадмия, *мридб/ат*. %

Параметр	Примесь	Расчет с эмпирически- ми ПП [1, 24, 25]	Данные магиитной восприимчи- вости [ <sup>16</sup> ]
$\Gamma\left(K_{1}\right)$	Магний Ртуть	$  \begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	
$\Gamma(K_2)$	Магний Ртуть		$0.083 \pm 0.005 \ 0.253 \pm 0.010$
$\Gamma(\Sigma_2)$	Магний Ртуть	$0,100 \pm 0,010 \\ 0,190 \pm 0,020$	

наиболее примечательна тенденция к соединению рукавов «монстра» в базисной плоскости при введении примесей магния и ртути. Соответствующий электронный топологический переход  $E_2=E_F$  ожидается при  $X_{\rm Mg}=3\pm1$  ат. % или  $X_{\rm Hg}=8\pm2$  ат. %.

Согласно проведенным расчетам (см. табл. 2), для системы почти вырожденных зон в окрестности точки K имеет место ряд электронных топологических переходов при введении до 10 ат. % магния. В сплавах Cd— (Hg) имеется тенденция к сближению  $E_F$ 

и уровня  $E_{K1}$ . Не исключена возможность электронного перехода  $E_{K1}=E_F$ , приводящего к связыванию дырочных «пирамид» 1-й зоны в единую поверхность, открытую вдоль направления [0001], при  $X_{\rm Hg}\simeq 20$  ат. % (т. е. на границе существования  $\alpha$ -фазы Cd—Hg [ $^{26}$ ]).

На основе формализма фазовых сдвигов (6) — (8) был проведен расчет локальных параметров затухания  $\Gamma(\mathbf{k})$  в сплавах  $\mathrm{Cd}$  —  $(\mathrm{Mg})$  и  $\mathrm{Cd}$  —  $(\mathrm{Hg})$  для состояний в точке K, а также на середине рукавов дырочного «монстра». Результаты приведены в табл. 3.

#### Заключение

Согласно проведенным расчетам зонной структуры, при воздействии всестороннего и одноосного сжатия в кадмии в области низких температур ожидается ряд электронных переходов  $2^1/_2$  рода. Большой интерес представляют исследования осцилляционных эффектов (де Гааза — ван Альфена и Шубникова — де Гааза) в кадмии при больших давлениях ( $P \geqslant 30~\kappa \delta ap$ ) и деформациях. Такие исследования позволят непосредственно установить связь наблюдаемых аномалий термодинамических и кинетических характеристик кадмия  $[^{3,4,9}]$  с конкретными типами электронных топологических переходов. Предварительные результаты исследования эффекта де Гааза — ван Альфена в кадмии при давлениях до  $30~\kappa \delta ap$   $[^{27}]$  качественно согласуются с результатами настоящей работы. Необходимо отметить, что при одинаковых значениях приложенного давления одноосное сжатие вдоль оси [0001] по сравнению со всесторонним сжатием приводит к существенно более сильным эффектам в спектре (см. табл. 2).

Исследование топологии поверхности Ферми в сплавах кадмия традиционными методами связано с известными трудностями. Поэтому представляет интерес поиск предсказанных в настоящей работе электронных топологических переходов с использованием новых экспериментальных методов (фотоэмиссия с угловым разрешением, двумерная угловая корреляция у-излучения при аннигиляции позитронов) и нейтронографических исследований коновских особенностей в фононных спектрах. Электронные переходы в окрестности точки К в сплавах Cd—Mg (а также в тройных сплавах Cd—Mg—(Hg)) были установлены при исследовании поведения неосциллирующей составляющей магнитной восприимчивости [7,8,16]. Рассчитанные для Cd-Mg и Cd-Hg изменения положений критических точек спектра в точке K (табл. 2), а также параметры затухания (табл. 3) согласуются с данными [16]. (Уширение уровней вследствие затухания остается меньше расщепления зон в точке K, и спектр хорошо определен до концентраций ~10 ат. %.) Это согласие свидетельствует о надежности предложенного подхода к расчету электронных спектров разбавленных сплавов, основанного на использовании эмпирических ПП.

Косвенным подтверждением наличия переходов  $E_{\Sigma}=E_F$  являются концентрационные зависимости изотропной части сдвига Найта в сплавах Cd—Mg и Cd—Hg [6], а также коэффициентов Холла в Cd—Mg [5]. Эти эффекты были качественно объяснены в [5,6] на основе предположения о смыкании рукавов «монстра» кадмия при введении примесей Mg и Hg. Прямые экспериментальные данные о соединении рукавов «монстра» в сплавах кадмия до настоящего времени отсутствуют. Исследование эффекта де Гааза — ван Альфена в сплавах Cd—(Mg) [28,29] проводились лишь для ориентаций вблизи  $\mathbf{H} \parallel [001]$ , что, в принципе, не позволяло обнаружить малые сечения рукавов «монстра». Следует отметить, что с помощью осцилляционных методик возможно обнаружение ряда электронных переходов  $2^{1}/_{2}$  рода при комбинированных воздействиях на кадмий примесей и давлений.

Автор глубоко признателен И. В. Свечкареву за внимание к работе и ценные замечания.

#### G. E. GRECHNEV

# EFFECT OF PRESSURE AND IMPURITIES ON THE ELECTRINIC SPECTRUM OF CADMIUM

Using semiempirical nonlocal pseudopotentials, calculation is made of cadmium electronic spectrum changes at helium temperatures under uniform and uniaxial compression, as well as when doping with isovalent impurities (magnesium and mercury). Local dampingpara meters are calculated for electronic states in Gd-(Mg) and Gd-(Hg). A number of electronic topological transitions are predicted at K and L symmetry points, and on  $\Sigma$  symmetry line in the Brillouin zone. The relation betweeen specific behaviour of some physical characteristics of Gd-Mg and Gd-Hg alloys, as well as of pure Gd under pressure, and topological changes of the Fermi surface is discussed.

#### LIST OF SYMBOLS

P, pressure;  $\sigma$ , stress; X, atomic concentration of impurities;  $\mathbf{k}$ , wave vector;  $\mathbf{G}_l$ , reciprocal lattice vectors;  $\Omega$ , atomic volume;  $k_F$ , Fermi sphere radius;  $E_F$ , Fermi energy measured from the band bottom;  $\mathbf{w}$ , pseudopotential;  $E(\mathbf{k})$ , energy of electronic state;  $\psi_{\mathbf{k}}$ , pseudo-wave function;  $\sum$ , self-energy part;  $\Gamma$ , electronic decay;  $\delta_l$ , partia phase shift; n(E), electronic density of states.

#### FIGURE CAPTIONS

Fig. 1. Fragment of electronic energy spectrum of cadmium at T=4.2 K calcula ted with use of pseudopotential  $[^1]$ .

Fig. 2. Electronic density of states in cadmium conduction band at T=4.2 K

calculated with the use of pseudopotential.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. 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.
- 2. Лифшиц И. М. Об аномалиях электронных характеристик металла в обл ст : больших давлений.— ЖЭТФ, 1960, 38, вып. 5, с. 1569—1576.
- 3. Ицкевич Е. С., Вороновский А. Н. Изменение топологии поверхности Ферми кадмия под давлением.— Письма в ЖЭТФ, 1966, 4, вып. 6, с. 226—230.
- 4. Watlington C. L., Cook J. W., Jr., Skove M. J. Effect of large uniaxial stress on the superconducting transition temperature of zinc and cadmium.— Phys. Rev. B, 1977, 15, N 3, p. 1370—1377.
- 5. Stringer J., Hill J., Huglin A. S. Hall effect studies in magnesium cadmium alloys.— Phil. Mag., 1974, 29, N 4, p. 859—875.
- 6. Свечкарев И. В., Жуков В. В., Жук Г. М. Сдвиг Найта в сплавах кадмия.— ФТТ, 1973, 15, № 4, с. 1260—1262.
- 7. Веркин Б. И., Кузьмичева Л. Б., Свечкарев И. В. Магнитные свойства металлов. IV. Чистый цинк и твердые растворы магния в кадмии.— ЖЭТФ, 1968, 54, вып. 1, с. 74—77.
- 8. 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—678.
- 9. Манченко В. Н., Свечкарев И. В., Середа Ю. П. Влияние давления на анизотропию магнитной восприимчивости сплавов кадмий магний. ФНТ, 1980, 6, № 2, с. 178—183.
- Макаров В. И., Клейнер В. З., Игнатьева Т. А. О проявлениях фазовых переходов 2¹/2 рода в электронных свойствах урана и кадмия. — ФНТ, 1979, 5, № 9, с. 1022— 1034.
- 11. Хейне В., Коэн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала.— М.: Мир, 1973.— 560 с.
- 12. Auluck S. On the pseudopotential coefficients for zinc and cadmium. Phys. status solidi (b), 1976, 74, N 2, p. K 129—K133.
- 13. Garland C. W., Silverman J. Elastic constants of Cd from 4.2 K to 300 K.— Phys Rev. 1961, 119, N 4, p. 1218—1225.

- 14. Влияние давления на поверхность Ферми кадмия/В. А. Вентцель, О. А. Вороно, А. И. Лихтер, А. В. Руднев. ЖЭТФ, 1976, 70, вып. 1, с. 272—280.
- 15. Watts B. R., Mayers J. Stress induced changes in the Fermi surfaces of beryllium cadmium and the group II. Hexagonal-close-packed metals.— J. Phys. F, 1980, 10, N 8, p. 1693—1718.
- 16. Гречнев Г. Е., Свечкарев И. В. Влияние изовалентных примесей и давления на магнитные свойства и параметры энергетического спектра кадмия.— ФНТ, 1981, 7. № 9. с. 1137—1146.
- 17. Уилкинсон Дж., Райнш К. Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра.— М.: Машиностроение, 1976.— 390 с.
- Chen A.-B. Simple Brillouin-zone scheme for the spectral properties of solids.— Phys. Rev. B, 1977, 16, N 8, p. 3291—3302.
- Ицкевич Е. С. Исследование поверхности Ферми металлов под давлением. В кн.:
   Физика и техника высоких давлений. Киев: Наук. думка, 1980, вып. 1, с. 53—75.
- 20. Fung W. K., Gordon W. L. Calculation of Dingle temperatures in dilute magnesium alloys.— Phys. Rev. B, 1976, 14, N 4, p. 1770—1771.
- Sorbello R. S. Effect of impurities on electronic structure.— J. Nucl. Mater., 1978, 69, N 1/2, p. 652—655.
   Гречнев Г. Е. Примесное рассеяние в изовалентных сплавах кадмия: псевдопотен-
- 22. 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.
- 23. Свечкарев И.В., Солнышкин А. Д. Параметры решетки сплавов кадмий магний и кадмий ртуть. В кн.: Физика низких температур. Харьков: ФТИНТ АН УССР, 1972, с. 119—122.
- 24. Kimball J. C., Stark R. W., Mueller F. M. The Fermi surface of magnesium. Local and nonlocal pseudopotential band structure models.— Phys. Rev., 1967, 162, N 3, p. 600—608.
- 25. Jones J. C., Datars W. R. Pseudopotential calculations of the band structure and Fermi surface of mercury.—Canad. J. Phys., 1972, 50, N 14, p. 1659—1675.
- Вол А. Е., Каган И. К. Строение и свойства двойных металлических систем.
   Т. 4.— М.: Наука, 1979.— 590 с.
- 27. Изменение поверхности Ферми кадмия под давлением до 30 кбар/А. Н.Вороновский, А. Г. Гапотченко, Е. С. Ицкевич, С. Л. Будько.— В кн.: 22-е Всесоюзсовещ по физике низких температур: Тез. докл. Кишинев, 1982, ч. 2, с. с. 134—135.
- 28. 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.
- 29 The effect of pressure on the Fermi surface of cadmium and cadmium-magnesium alloys/E. S. Itskevich, A. M. Sobko, V. A. Sukhoparov, I. M. Tempelton.— High temp.— High pressure, 1975, 7, p. 657—658.

Физико-технический институт низких температур АН УССР, г. Харьков Получено 22.03.83