Краткие сообщения по физике № 9 1978

ВЛИЯНИЕ ГРАНИЦ ЗОНЫ БРИЛЛЮЭНА НА КУЛОНОВСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В СВЕРХПРОВОДНИКАХ

О. В. Долгов, В. С. Карахтанов

УДК 537.312.62

Исследовано влияние брэгговских плоскостей на кулоновскую константу связи μ. Показано, что величина μ возрастает по сравнению с изотропным случаем в металлах с поверхностью Ферми, лежащей в первой зоне Бриллюэна, и уменьшается в поливалентных металлах. Эффект усиливается с увеличением электрон-ионного потенциала.

Обычно при вычислении кулоновской константы связи, входящей в выражение для критической температуры сверхпроводящего перехода T_c, рассматривается приближение свободных электронов. Это приближение несправедливо для поливалентных металлов, ферми-поверхность которых не лежит в первой зоне Бриллюэна. В данной работе мы рассмотрим влияние двух параллельных брэгговских плоскостей, разделенных вектором обратной решетки $\vec{Q}$.

Кулоновская константа связи представляется в виде (см. /I/)

$$\mu = N(0)\langle V\rangle. \qquad (I)$$

Здесь

$$N(0) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,\delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_F) \qquad (2)$$

электронная плотность состояний,

$$\langle V\rangle = \frac{1}{(N(0))^2}\iint \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\,V_{\vec{k}\vec{k}'}\,\delta(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_F)\,\delta(\varepsilon_{\vec{k}'} - \varepsilon_F) \qquad (3)$$

усредненный по поверхности Ферми эффективный потенциал, связанный с экранированным кулоновским взаимодействием между электронами $V_{coul}(\vec{r},\vec{r}',\omega)$ соотношением /2/:

$$V_{\vec{k}\vec{k}'} = \iint d^3r d^3r' \chi^*_{\vec{k}}(\vec{r})\chi^*_{\vec{k}'}(\vec{r}')V_{coul}(\vec{r},\vec{r}',0)\chi_{\vec{k}'}(\vec{r})\chi_{\vec{k}}(\vec{r}'), \quad (4)$$

$\chi_{\vec{k}}(\vec{r})$ – одноэлектронные волновые функции.

В приближении свободных электронов имеем /I/:

$$\mu = (\alpha/2)\ln(1/\alpha + 1), \quad (5)$$

где $\alpha = (me^2/\pi p_F)$ (Здесь и далее для простоты экранированное взаимодействие рассматривается в приближении Томаса-Ферми $V_{coul}(\vec{k},\vec{k}') = 4\pi e^2/(|\vec{k} - \vec{k}'|^2 + \varkappa^2)$, где $\varkappa$ – обратный радиус дебаевского экранирования).

При наличии брэгговского отражения блоховскую волновую функцию электронов можно представить в виде суммы двух плоских волн /3/

$$\chi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \alpha_{\vec{k},\vec{Q}} \exp(i\vec{k}\vec{r}) + \beta_{\vec{k},\vec{Q}} \exp[i(\vec{k} - \vec{Q})\vec{r}], \quad (6)$$

где $\vec{k}$ – импульс в расширенной зоне Бриллюэна. Коэффициенты $\alpha_{\vec{k},\vec{Q}}$ и $\beta_{\vec{k},\vec{Q}}$ определяются системой уравнений:

$$\begin{cases} \left(\dfrac{k_\perp^2 + k_z^2}{2m} - \varepsilon_{\vec{k}}\right)\alpha_{\vec{k},\vec{Q}} + \Phi(\vec{Q})\beta_{\vec{k},\vec{Q}} = 0, \\ \Phi(\vec{Q})\alpha_{\vec{k},\vec{Q}} + \left(\dfrac{k_\perp^2 + (k_z - Q)^2}{2m} - \varepsilon_{\vec{k}}\right)\beta_{\vec{k},\vec{Q}} = 0. \end{cases} \quad (7)$$

Здесь $k_\perp$ и k_z – перепендикулярная и параллельная $\vec{Q}$ проекции импульса $\vec{k}$, $\varepsilon_{\vec{k}}$ – энергия электрона с импульсом $\vec{k}$, $\Phi(\vec{Q})$ – электрон-ионный потенциал.

Подставляя (6) в (4), получаем, что кроме членов вида

$$|\alpha_{\vec{k},\vec{Q}}\alpha_{\vec{k}',\vec{Q}} + \beta_{\vec{k},\vec{Q}}\beta_{\vec{k}',\vec{Q}}|^2 \, 4\pi e^2/(|\vec{k} - \vec{k}'|^2 + \varkappa^2),$$

существующих и в изотропном случае (и дающих наибольший вклад при совпадающих $\vec{k}$ и $\vec{k}'$), появляются дополнительные слагаемые вида:

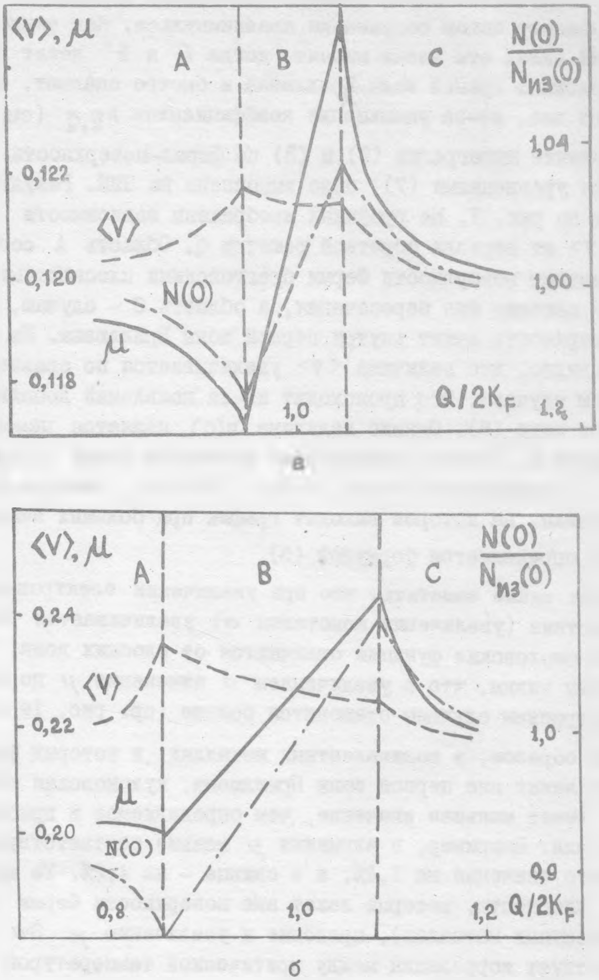
$$|\alpha_{\vec{k}',\vec{Q}}\beta_{\vec{k},-\vec{Q}} + \alpha_{\vec{k},-\vec{Q}}\beta_{\vec{k}',\vec{Q}}|^2 \, 4\pi e^2/(|\vec{k}' - \vec{k} - \vec{Q}|^2 + \varkappa^2). \quad (8)$$

Эти члены получаются из-за отличия блоховских функций от плоских волн и выражают закон сохранения квазиимпульса. Как видно из (8), наибольший вклад эти члены вносят, когда $\vec{k}$ и $\vec{k}'$ лежат вблизи противоположных граней зоны Бриллюэна и быстро спадают, если мы отходим от нее, из-за уменьшения коэффициентов $\beta_{\vec{k},\vec{Q}}$ (см. (7)).

Вычисление интегралов (2) и (3) по ферми-поверхности, определяющейся уравнениями (7), было выполнено на ЭВМ. Результаты приведены на рис. I. На графиках изображены зависимости μ, $N(0)$ и $\langle V \rangle$ от периода обратной решетки Q. Область A соответствует пересечению поверхности Ферми брэгговскими плоскостями, область B – касанию без пересечения, а область C – случаю, когда ферми-поверхность лежит внутри первой зоны Бриллюэна. Из этих графиков видно, что величина $\langle V \rangle$ увеличивается по сравнению с изотропным случаем. Это происходит из-за появления дополнительных членов вида (8). Однако величина $N(0)$ является немонотонной функцией $\vec{Q}$. Поэтому кулоновская константа связи μ при $|\vec{Q}| \gtrsim 2k_F$ оказывается больше, а при $|\vec{Q}| \lesssim 2k_F$ меньше изотропного значения, на которое выходит график при больших значениях Q, и которое определяется формулой (5).

Следует также заметить, что при увеличении электрон-ионного взаимодействия (увеличении константы α) увеличивается область, в которой блоховские функции отличаются от плоских волн. В результате мы видим, что с увеличением α изменение μ по сравнению с изотропным случаем становится больше (ср. рис. Iа и Iб).

Таким образом, в поливалентных металлах, в которых ферми-поверхность лежит вне первой зоны Бриллюэна, кулоновская константа связи μ имеет меньшее значение, чем определяемое в приближении плоских волн. Например, в алюминии μ меньше соответствующего изотропного значения на I,4%, а в свинце – на 4,2%. Те же брэгговские плоскости, которые лежат вне поверхности Ферми (например, в одновалентных металлах), приводят к увеличению μ. Это означает, что существует корреляция между критической температурой T_c и брэгговскими плоскостями (см. /4/), однако для определения этой зависимости необходимо исследовать поведение фононной константы λ, у которой также можно ожидать немонотонной зависимости от вектора обратной решетки, аналогичной поведению кулоновской константы.



Р и с. 1 Зависимость кулоновской константы связи μ взаимодействия, усредненного по поверхности Ферми, $\langle V \rangle$ и плотности состояний N(0) от вектора обратной решетки $\vec{Q}$: а) α = 0,1; б) α = 0,3

Авторы благодарят Д. А. Киржница и Е. Г. Максимова за интерес к работе и обсуждения результатов.

Поступила в редакцию
2 июня 1978 г.

Литература

I. Проблема высокотемпературной сверхпроводимости, под ред. В. Л. Гинзбурга и Д. А. Киржница, "Наука", М., 1977 г.
2. О. В. Долгов, Препринт ФИАН № 92, 1977 г.
3. У. Харрисон, Псевдопотенциалы в теории металлов, "Мир", М., 1968 г.
4. А. И. Головашкин, И. С. Левченко, Г. П. Мотулевич, Препринт ФИАН № 166, 1969 г.