

СТРУКТУРА ПОЛОС ОПТИЧЕСКОЙ МЕЖЗОННОЙ ПРОВОДИМОСТИ
МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С РЕШЕТКОЙ А 15

И. Д. Маш

В работах /1-3/ было показано, что основная структура полос оптической межзонной проводимости связана с расщеплением энергии электронов на брэгговских плоскостях. Соответствующие полосы будем называть полосами первого порядка. Положение максимумов полос первого порядка и их ширины позволяют определить фурье-компоненты псевдопотенциала V_g (g - три индекса соответствующей брэгговской плоскости) и времена релаксации для межзонных переходов $\tau_g = \nu_g^{-1}$. В поливалентных металлах наблюдаются также полосы, связанные с линиями пересечения нескольких брэгговских плоскостей /4,5/, соответствующие полосы будем называть полосами второго порядка.

В настоящей работе рассматривается структура полос оптической межзонной проводимости $\sigma_p(\omega)$ металлических соединений с решеткой А 15. Эти соединения представляют большой интерес для сверхпроводимости, поскольку многие из них обладают высокими критическими параметрами. Изучение оптических межзонных переходов позволяет определить ν_g и τ_g для реальных сплавов, что может быть использовано при определении взаимодействия электронов с решеткой и межелектронного взаимодействия.

На оптические свойства металлов оказывают влияние лишь те брэгговские плоскости и линии их пересечения, которые пересекают поверхность Ферми. Для сверхпроводников с наиболее высокими T_c (Nb_3AlGe , Nb_3Al , Nb_3Sn , V_3Si , V_3Sn и др.) с валентностью 4,5 - 4,75 существенными оказываются 102 брэгговские плоскости /6/ с индексами {110}, {200}, {210}, {211}, {220} и {310}. Они дают 6 основных полос межзонных переходов. Помимо них будут полосы, связанные с линиями пересечения брэгговских плоскостей.

Обозначим $d_{g_1 g_2}$ расстояние от центра зоны (точки Γ) до линии пересечения двух брэгговских плоскостей с векторами обратной решетки \vec{g}_1 и \vec{g}_2 . Легко показать, что

$$d_{g_1 g_2} = \frac{|\vec{g}_1 - \vec{g}_2|}{2\sqrt{1 - (\vec{g}_1 \vec{g}_2)^2 / (g_1^2 g_2^2)}}. \quad (I)$$

На оптические свойства окажут влияние лишь те линии пересечения, для которых $d_{g_1 g_2} < r_F^0$, где r_F^0 - радиус сферы свободных электронов при концентрации, равной валентной. При указанной выше валентности это неравенство позволяет отобрать 1008 линий, пересекающих поверхность Ферми. Указанные линии дают 60 полос межзонной проводимости второго порядка. Значения энергетических щелей этих полос вычислялись методом, аналогичным методу, предложенному в работах /7,8/. Результаты приведены в таблице I, в которой приводятся индексы пересекающихся плоскостей g_i , число физически эквивалентных линий пересечения $n_{g_1 g_2}$ и энергетические щели, выраженные через фурье-компоненты псевдопотенциала. Как видно из таблицы, у решетки A 15 имеются линии пересечения двух, трех, пяти и семи брэгговских плоскостей. Линии пересечения пар брэгговских плоскостей даются под одним и тем же номером, если они равноудалены от точки Γ и характеризуются одинаковыми энергетическими щелями. В этом случае в графе $n_{g_1 g_2}$ дается общее число таких линий.

Нас будет интересовать соединение Nb_3Sn . К сожалению, в настоящее время нет экспериментальных значений v_g . Мы можем однако оценить необходимые нам v_g по формуле

$$v_g = \frac{1}{g} (U_g^{Nb} f_g^{Nb} + U_g^{Sn} f_g^{Sn}). \quad (2)$$

Здесь U_g^{Nb} и U_g^{Sn} - факторы ниобия и олова, f_g^{Nb} и f_g^{Sn} - структурные факторы подрешеток ниобия и олова. В формуле (2) учтено, что ячейка содержит 6 атомов ниобия и 2 атома олова. Для вычисления U_g^{Nb} и U_g^{Sn} воспользуемся результатами работы /9/

$$\frac{U_g^{Nb}}{[(r_F^0)^2 / 2m]} = - [16/15 \pi] \left[1 - \frac{3}{2} (r_g / r_F^0)^2 \right], \quad (3)$$

$$\frac{U_g^{Sn}}{[(r_F^0)^2 / 2m]} = - [4/3 \pi] \left[1 - \frac{3}{2} (r_g / r_F^0)^2 \right].$$

Таблица I

№№	ξ_1	n_{g1g2}	Энергетические щели
I	200 010 210	24	$2 \sqrt{v_{200}} \pm v_{210} $ $2 \sqrt{v_{210}} $
2	200 011 211	24	$2 \sqrt{v_{211}} \pm v_{200} $ $2 \sqrt{v_{211}} \pm v_{110} $
3	210 001 211	24	$2 \sqrt{v_{211}} \pm v_{210} $ $2 \sqrt{v_{211}} $
4	210 121 211 111	72	$\sqrt{v_{211}^2 + v_{210}^2}$ $2\sqrt{v_{211}^2 + v_{210}^2}$
5	200 120 210 210	48	$2\sqrt{\left(\frac{v_{200}}{2}\right)^2 + 2v_{210}^2}$ $\left \frac{3}{2}v_{200} \pm \sqrt{\left(\frac{v_{200}}{2}\right)^2 + 2v_{210}^2}\right $
6	200 121 121 121	96	$2\sqrt{\left(\frac{v_{200}}{2}\right)^2 + 2v_{211}^2}$ $\left \frac{3}{2}v_{200} \pm \sqrt{\left(\frac{v_{200}}{2}\right)^2 + 2v_{211}^2}\right $
7	210 211 210 102 210 112	144	$2\sqrt{\left(\frac{v_{211}}{2}\right)^2 + 2v_{210}^2}$ $\left \frac{3}{2}v_{211} \pm \sqrt{\left(\frac{v_{211}}{2}\right)^2 + 2v_{210}^2}\right $

Продолжение таблицы I

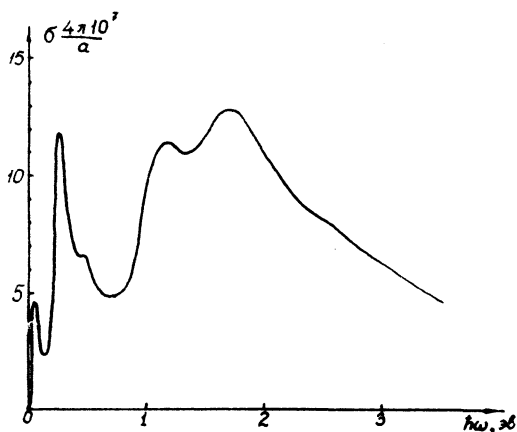
№№	ϵ_1	$n_{\text{ггг}}$	Энергетические щели
8	210 112 122	24	$2 v_{211} $ $2 v_{210} $
9	210 121 311	24	$2 v_{210} $ $2 v_{211} $
10	110 110 200	12	$2 v_{200} \pm v_{110} $
11	110 110 201	24	$2 v_{210} \pm v_{110} $
12	200 020 220	12	$2 v_{200} \pm v_{220} $
13	210 120 110 220 300 010 310	24	$2 v_{210} + v_{310} \pm v_{220} $ $2 v_{210} + v_{310} \pm v_{110} $
14	110 110 022 121 112	12	$ 3v_{211} + v_{110} + 2v_{220} $ $ 3v_{211} - v_{110} - 2v_{220} $

№№	Б ₁	h _{Б1Б2}	Энергетические щели
I5	I10 2II 2II I2I	48	$2\sqrt{\left(\frac{v_{110}}{2}\right)^2 + 2v_{211}^2}$ $\left \frac{3}{2}v_{110} \pm \sqrt{\left(\frac{v_{110}}{2}\right)^2 + 2v_{211}^2}\right $
I6	2II 022 I00 I22 III 2II 2II 300 III III	48	$2\sqrt{\left(\frac{v_{220}}{2}\right)^2 + 2v_{211}^2}$ $\left \frac{3}{2}v_{220} \pm \sqrt{\left(\frac{v_{220}}{2}\right)^2 + 2v_{211}^2}\right $
I7	3I0 2I0 2II I2I	48	$2\sqrt{\left(\frac{v_{310}}{2}\right)^2 + 2v_{211}^2}$ $\left \frac{3}{2}v_{310} \pm \sqrt{\left(\frac{v_{310}}{2}\right)^2 + 2v_{211}^2}\right $
I8	I10 2II 03I 2II 220 30I	48	$2\sqrt{\left(\frac{v_{110} - v_{220}}{2}\right)^2 + (v_{211} \pm v_{310})^2}$ $2 v_{220} - v_{110} $
I9	I10 2I0 2I0 I20	48	$2\sqrt{\left(\frac{v_{110}}{2}\right)^2 + 2v_{210}^2}$ $\left \frac{3}{2}v_{110} \pm \sqrt{\left(\frac{v_{110}}{2}\right)^2 + 2v_{210}^2}\right $

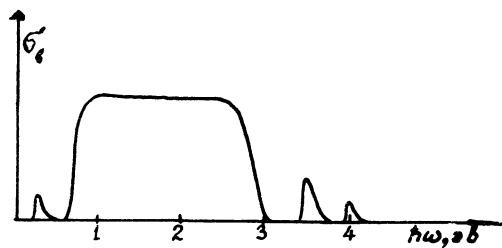
№	ϵ_1	$n_{\epsilon_1 \epsilon_2}$	Энергетические щели
20	220 02I 02I 20I	72	$2\sqrt{\left(\frac{v_{220}}{2}\right)^2 + 2v_{210}^2}$ $\left \frac{3}{2}v_{220} \pm \sqrt{\left(\frac{v_{220}}{2}\right)^2 + v_{210}^2}\right $
21	310 20I III 2II	72	$\sqrt{v_{310}^2 + v_{210}^2}$ $2\sqrt{v_{310}^2 + v_{210}^2}$
22	310 020 310 310	48	$2\sqrt{\left(\frac{v_{200}}{2}\right)^2 + 2v_{310}^2}$ $\left \frac{3}{2}v_{200} \pm \sqrt{\left(\frac{v_{200}}{2}\right)^2 + v_{310}^2}\right $
23	10I 110	12	$3 v_{110} $

Вычисление r_{ϵ}^{Nb} и r_{ϵ}^{Sn} не представляет труда. В результате такой оценки мы имеем: $v_{110} = 0,23$; $v_{200} = -1,27$; $v_{210} = -0,78$; $v_{211} = -0,5$; $v_{220} = 0,03$; $v_{310} = 0,115$. Сумма полос межзонной проводимости первого порядка для Nb_3Sn , вычисленная по формулам работы /3/, приводится на рис. 1. При расчете использованы вышеуказанные значения v_{ϵ} и $v' = 0,2$. Указанный рисунок может помочь в отождествлении экспериментально наблюдаемых полос оптической межзонной проводимости и в определении основных Фурье-компонент псевдопотенциала.

Частоты полос второго порядка межзонного поглощения для Nb_3Sn легко определить по таблице I. В интервале 0,6–3 эв имеется 53 перекрывающихся полос второго порядка, что должно давать слабо зависящий от частоты вклад в межзонную проводимость.



Р и с. 1. Сумма полюсов межзонной проводимости первого порядка для Nb_3Sn , вычисленная по формулам работы /3/. Безразмерный параметр релаксации $\nu^* = 0,2$.



Р и с. 2. Схема для суммы полюсов второго порядка по результатам табл. I.

В интервале $\hbar\omega < 0,6$ эв имеются 3 полосы, частоты которых практически совпадают с частотой полосы первого порядка $\{\text{IIO}\}$. В интервале $\hbar\omega > 3$ эв имеются 3 перекрывающихся полосы второго порядка со средней частотой $\cong 3,5$ эв и одна полоса с частотой $\cong 4,1$ эв. Эти полосы могут проявиться в эксперименте. В этом случае их можно использовать для определения фурье-компонент псевдопотенциала. Сумма полос второго порядка схематически изображена на рис. 2.

Считаю своим приятным долгом выразить глубокую благодарность Г. П. Мотулевич за предложение темы и руководство работой, а также А. И. Головашкину за обсуждение результатов.

Поступила в редакцию
12 мая 1972 г.

Л и т е р а т у р а

1. Г. П. Мотулевич. УФН 97, 211 (1969).
2. Г. П. Мотулевич. Труды ФИАН, 55, 3 (1971).
3. А. И. Головашкин, Г. П. Мотулевич. ЖЭТФ, 57, 1058 (1969).
4. А. И. Головашкин, И. Д. Маш, Г. П. Мотулевич. Краткие сообщения по физике, № 9, 51 (1970).
5. А. И. Головашкин, И. Е. Лесина, Г. П. Мотулевич, А. А. Шубин. ЖЭТФ, 56, 51 (1969).
6. А. И. Головашкин, И. С. Левченко, Г. П. Мотулевич. ЖЭТФ, 57, 74 (1969). Препринт ФИАН № 166, 1969 г.
7. У. Харрисон. Псевдопотенциалы в теории металлов. изд. "Мир", М., 1968 г.
8. W. A. Harrison. Phys. Rev., 118, 1182 (1960).
9. Р. Г. Архипов. ЖЭТФ, 59, 1715 (1970).