

УДК 538-546.11

©1995

**ВЫЧИСЛЕНИЕ КОНСТАНТЫ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ  $\lambda$  В МЕТАЛЛИЧЕСКОМ ВОДОРОДЕ***Ю.И.Шилов, Н.Р.Иванов*

Москва

(Поступила в Редакцию 13 октября 1994 г.

В окончательной редакции 2 ноября 1994 г.)

Проведено вычисление функции электрон-фононного взаимодействия  $\alpha^2(\nu)F(\nu)$ . С помощью этой функции вычислен один из наиболее важных параметров теории сверхпроводимости — так называемая константа электрон-фононного взаимодействия. Исследовано влияние на эту константу дисперсии диэлектрической проницаемости свободного электронного газа.

Несмотря на то что большая часть вопросов физики сверхпроводимости была решена с помощью теории БКШ [1] (или основанных на ней более общих теорий, например теории Намбу-Горькова-Элиашберга [2-4]) одна из важных задач — вычисление температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$  — только недавно начала реализовываться. Причиной затруднений является тот факт, что  $T_c$  оказывается весьма чувствительной к свойствам нормального состояния металлов. В последнее время понимание свойств нормальных состояний в значительной степени углубилось, и поэтому сейчас могут быть сделаны более надежные вычисления  $T_c$ . До некоторой степени неплохой успех был достигнут в работе [5] для Al и Pb, хотя прямые вычисления температуры перехода  $T_c$  в металлах с нерегулируемыми параметрами достаточно трудны, а результаты отчасти менее убедительны, чем сама теория. Мак Миллан [6] провел детальное изучение зависимости  $T_c$  от величины электрон-фононной связи в металлах. Он нашел простую модельную формулу для  $T_c$  в зависимости от нескольких параметров, наиболее важным из которых является константа электрон-фононного взаимодействия  $\lambda$ .

Детальные и достаточно успешные вычисления  $\lambda$  в ряде простых металлов были проведены в работах [7-11]. Термин «простые металлы» относится к элементам, в которых внешние ( $s$  или  $p$ ) электроны проводимости достаточно удалены по энергии от  $d$ - или  $f$ -уровней, так что эти электроны проводимости могут рассматриваться как нелокализованные, почти свободные электроны. В этих металлах электрон-ионное взаимодействие может быть представлено псевдопотенциалом, а псевдоволновые функции аналогичны плоским волнам свободных электронов. Знание псевдопотенциала делает возможным реальное вычисление  $\lambda$  для простых металлов.

В работе [12] представлены вычисления  $\lambda$  и  $T_c$  для ряда простых металлов с использованием модельных потенциалов и (где это возможно) эмпирических псевдопотенциалов, полученных из расчета зонной структуры, согласованной с измерениями поверхности Ферми. Кроме того собраны и обсуждены предыдущие вычисления константы электрон-фононного взаимодействия. Доказано, что достаточно достоверное значение  $\lambda$  может быть получено при условии знания корректного псевдопотенциала и фононного спектра, даже если игнорируются эффекты фононной анизотропии и отклонение поведения электронов проводимости от свободных электронов.

## 1. Постановка задачи

До сих пор не полностью решена фундаментальная проблема: почему одни металлы являются сверхпроводниками при данной температуре, а другие нет. Обычно считают, что по крайней мере для простых металлов и, возможно, даже для ряда переходных металлов ответ зависит от конкуренции между усредненным фононным потенциалом притяжения для пары электронов на поверхности Ферми, способствующим сверхпроводимости, и их взаимным кулоновским отталкиванием, которое ее затрудняет.

В своей оригинальной работе [1] Бардин, Купер и Шриффер ввели параметр  $V$ , который представлял собой усредненный матричный элемент этих двух потенциалов. Это вносило приближение, которое не выявляло детали электрон-фононного взаимодействия, так что их формула, связывающая  $V$  с критической температурой  $T_c$ , не вполне пригодна для обсуждения ее зависимости от параметров нормального состояния металла. Этот недостаток теории БКШ особенно чувствуется в случае так называемых сверхпроводников с сильной связью таких, как свинец и ртуть, где наблюдается отклонение от простой теории БКШ, несмотря на то, что  $V$  выбирается в соответствии с измеренным значением  $T_c$ . Эти вещества имеют низкую температуру Дебая и потому высокую плотность возможных состояний фононов при низких энергиях. Для получения согласия в этом случае необходимо признать существенную динамическую природу электрон-фононного взаимодействия. Уравнения, объясняющие эти особенности, были развиты Элиашбергом и др. [2-4]. Эти уравнения непосредственно связывают вид фононного спектра металла с его сверхпроводящими свойствами. Параметрами, входящими в уравнения для щели в спектре элементарных возбуждений, являются кулоновский потенциал  $U_c$ , описывающий электрон-электронное отталкивание на поверхности Ферми, а также произведение функций  $\alpha^2(\nu)F(\nu)$ , относящихся к фононам.  $F(\nu)$  означает плотность фононных состояний с частотой  $\nu$ , а  $\alpha^2(\nu)$  является мерой эффективной электрон-фононной связи. Мы проведем вычисление  $\alpha^2(\nu)F(\nu)$  непосредственно из первых принципов. Основными составными частями, необходимыми для вычисления  $\alpha^2(\nu)F(\nu)$ , являются фононные частоты  $\nu(\mathbf{k}, \mu)$  для  $\mathbf{k}\mu$  моды колебаний решетки и их векторы поляризации  $\epsilon(\mathbf{k}, \mu)$ , где  $\mu$  — индекс ветви колебаний, а  $\mathbf{k}$  — волновой вектор фонона. Кроме того необходим форм-фактор электрон-ионного потенциала взаимодействия, а также ряд известных

констант, характеризующих данное вещество. Затем уже с помощью этой функции мы вычислим константу электрон-фононного взаимодействия  $\lambda$ , которая совместно с константой кулоновского отталкивания электронов определяет температуру сверхпроводящего перехода, а также исследуем влияние на эту константу дисперсии диэлектрической проницаемости свободного электронного газа, экранирующего как потенциал электрон-ионного взаимодействия, так и потенциал электрон-электронного отталкивания.

## 2. Вычисление функции взаимодействия $\alpha^2(\nu)F(\nu)$

В общем случае функция  $\alpha^2(\nu)F(\nu) = \sum_{\mu} \alpha_{\mu}^2(\nu)F_{\mu}(\nu)$  описывает все возможные процессы рассеяния (благодаря фононам с частотой  $\nu$ ) отдельно взятого электрона на поверхности Ферми в произвольное состояние на той же поверхности, усредненные по конечным состояниям. Функции  $\alpha_{\mu}^2(\nu)F_{\mu}(\nu)$  определяют ядра Элиашберга  $K_{\pm}(\omega, \omega')$  в уравнении для щели  $\Delta(\omega)$  в спектре электронных возбуждений и имеют следующий вид

$$\alpha_{\mu}^2(\nu)F_{\mu}(\nu) = \frac{\Delta(P_F)}{8\pi P_F^2} \int_{q \leq 2P_F} \frac{d^3 \mathbf{q} |g_{\mathbf{P}, \mathbf{P}', \mu}|^2 \delta\{\nu - \nu(\mathbf{q}, \mu)\}}{q}. \quad (1)$$

Здесь интеграл по переданному импульсу  $\mathbf{q} = \mathbf{P} - \mathbf{P}'$  вычисляется по сфере с радиусом  $2P_F$ , где  $P_F$  — импульс Ферми,  $N(P_F)$  — плотность электронных состояний на поверхности Ферми, а

$$g_{\mathbf{P}, \mathbf{P}', \mu} = -i\{2\nu(\mathbf{q}, \mu)MN\}^{-1/2} \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{q}, \mu) \langle \mathbf{P}_F + \mathbf{q} | W | \mathbf{P}_F \rangle$$

— константа электрон-фононного взаимодействия [5].

Подставляя ее значение в (1), получим интересующее нас выражение для  $\alpha_{\mu}^2(\nu)F_{\mu}(\nu)$  в следующем виде

$$\alpha_{\mu}^2(\nu)F_{\mu}(\nu) = \frac{N(P_F)}{8\pi P_F^2} \int_{q \leq 2P_F} \frac{d^3 \mathbf{q} |q\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{q}, \mu)|^2 \langle \mathbf{P}_F + \mathbf{q} | W | \mathbf{P}_F \rangle^2 \delta\{\nu - \nu(\mathbf{q}, \mu)\}}{2MNq\nu(\mathbf{q}, \mu)}, \quad (2)$$

где  $M$  — полная масса элементарной ячейки кристалла, а  $N$  — плотность элементарных ячеек.

Необходимо отметить, что мы предполагаем поверхность Ферми сферической и что матричный элемент  $\langle \mathbf{P}_F + \mathbf{q} | W | \mathbf{P}_F \rangle$  для рассеяния из одной точки на поверхности Ферми в другую зависит только от переданного импульса  $\mathbf{q}$ , заключенного в интервале  $0 \leq |\mathbf{q}| \leq 2P_F$ .

Сейчас очень удобно сравнить полученное выражение для  $\alpha^2(\nu)F(\nu)$  с выражением для обычной плотности фононных состояний  $F(\nu)$ , имеющим вид

$$F(\nu) = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \int \frac{d^3 \mathbf{q}}{(2\pi)^3} \delta\{\nu - \nu(\mathbf{q}, \mu)\}, \quad (3)$$

где интеграл ограничен первой зоной Бриллюэна. С другой стороны, формула (2) для  $\alpha^2(\nu)F(\nu)$  может быть написана в виде

$$\alpha^2(\nu)F(\nu) = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} L_{\mu}(\mathbf{q}) \delta\{\nu - \nu(\mathbf{q}, \mu)\}. \quad (4)$$

Дополнительный член  $L_{\mu}(\mathbf{q})$  в выражении (4) определяется в этом случае соотношением

$$L_{\mu}(\mathbf{q}) = \frac{m_e}{4M} \frac{|\mathbf{q}\epsilon(\mathbf{q}, \mu)|^2}{P_F q \nu(\mathbf{q}, \mu)} |W(\mathbf{q})|^2, \quad (5)$$

для получения которого мы предположили, что плотность состояний с определенным направлением спина на поверхности Ферми  $N(P_F)$  определяется ее значением для свободных электронов, а именно  $N(P_F) = \frac{m P_F}{2\pi^2 \hbar^2}$ .

Мы видим, что в  $L_{\mu}(\mathbf{q})$  наряду с частотой фононов  $\nu(\mathbf{q}, \mu)$  входит также скалярное произведение вектора поляризации фононов  $\epsilon$  и их импульса  $\mathbf{q}$ , определяющего направление распространения фононов в кристалле. В общем случае эти величины могут быть получены из соответствующих динамических уравнений, для решения которых в конечном счете необходимо знание силовых констант, которые выбираются с помощью подгонки под дисперсионные кривые, измеренные в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов. Поскольку в нашем распоряжении нет таких данных, то для дальнейших вычислений, как говорят «из первых принципов», мы воспользуемся модельным описанием фононного спектра.

Однако использование широко распространенной в теории твердого тела дебаевской модели колебаний решетки было бы связано в данном случае со значительным упрощением реальной картины. Действительно, в этой модели предполагается существование двух поперечных и одной продольной моды колебаний, распространяющихся с различными скоростями и имеющих три взаимноперпендикулярных вектора поляризации. При этом вектор поляризации одной продольной моды всегда совпадает с направлением распространения колебаний, определяемым импульсом  $\mathbf{q}$ . В этом случае, согласно (3), вклад поперечной моды в функцию электрон-фононного взаимодействия  $\alpha^2(\nu)F(\nu)$  всегда равен нулю, в то время как в более общем случае произвольной ориентации векторов поляризации  $\epsilon$  относительно  $\mathbf{q}$  этот вклад, естественно, будет отличен от нуля. Усредняя скалярное произведение  $\mathbf{q}\epsilon(\mathbf{q}, \mu)$  по всем возможным направлениям вектора  $\epsilon(\mathbf{q}, \mu)$  относительно  $\mathbf{q}$ , мы получим в (5) для всех трех мод один и тот же коэффициент  $1/3$ . В этом случае окончательно выражение для  $L_{\mu}(\mathbf{q})$  примет следующий вид

$$L_{\mu}(\mathbf{q}) = \frac{m_e}{12M} \frac{q|W(\mathbf{q})|^2}{P_F \nu(\mathbf{q}, \mu)}. \quad (6)$$

1) *Вычисление функции взаимодействия  $\alpha_{\parallel}^2(\nu)F_{\parallel}(\nu)$  для продольных колебаний решетки.* Далее вычисления для продольных и поперечных колебаний должны быть проведены отдельно, так как частоты  $\nu(\mathbf{q}, \mu)$  этих колебаний имеют существенно различную зависимость от

импульса фононов  $\mathbf{q}$ . Так, известно [13], что частота продольных колебаний решетки при учете влияния свободных электронов принимает вид

$$\nu_q^2 = \Omega_p^2 / \varepsilon(\mathbf{q}, 0),$$

где  $\Omega_p^\varepsilon = \frac{4\pi n_i z^2 e^2}{M}$  — плазменная частота ионов,  $n_i$  и  $ze$  — концентрация и заряд ионов соответственно,  $\varepsilon(\mathbf{q}, 0)$  — диэлектрическая проницаемость свободного электронного газа. Используя приближенное выражение для  $\varepsilon(\mathbf{q}, 0)$  (см. [13] гл. 5, раздел 2), находим  $\nu_q^2 = \Omega_p^2 q^2 / q^2 + \lambda_0^2$ , где  $\lambda_0^2 = 4\pi e^2 N(\varepsilon_F)$  — параметр экранирования Лебая–Хюккеля. Другими словами, при  $q \rightarrow 0$  скорость распространения колебаний продольной акустической ветви стремится к некоторой величине, равной скорости звука  $S = (mz/3M)^{1/2} v_F$ , где  $v_F$  — фермиевская скорость электронов. Кроме того, с возрастанием  $|\mathbf{q}|$  проявляется дисперсия. Вводя безразмерный импульс фононов  $y = q/2P_F$ , получим для частоты  $\nu_q$  следующее выражение:

$$\nu_q = \Omega_p Y / (y^2 + \frac{\lambda_0^2}{4P_F^2})^{1/2}. \quad (7)$$

Отсюда находим предельное значение  $\nu_q$  в спектре фононов, дающих вклад в функцию  $\alpha_{\parallel}^2(\nu) F_{\parallel}(\nu)$

$$\nu_{qk} = \Omega_p / (1 + \lambda_0^2 / 4P_F^2)^{1/2}.$$

Наличие  $\delta$ -функции в подынтегральном выражении (4) существенно упрощает интегрирование, а именно: подынтегральное выражение должно быть взято в точке  $y$ , определяемой равенством  $\nu_q(y) = \nu$ , где  $\nu$  — текущая переменная в произведении  $\alpha_{\parallel}^2(\nu) F_{\parallel}(\nu)$ . Видно также для удобства последующих вычислений безразмерную переменную  $\nu$  по формуле  $x = \nu/\nu_k$ , с помощью соотношения (7) находим связь между  $x$  и  $y$

$$y = \lambda_0 \nu_k x / 2P_F (\Omega_p^2 - \nu_k^2 x^2)^{1/2}. \quad (8)$$

С учетом этих замечаний, а также принимая во внимание тот факт, что форм-фактор потенциала взаимодействия свободного электрона с ионом решетки с учетом экранирования этого потенциала свободными электронами имеет вид

$$W(q) = \frac{1}{v_c} \left( \frac{4\pi e^2}{\lambda_0^2 + q^2} \right)$$

для вклада продольной моды в функцию взаимодействия имеем следующее выражение:

$$\begin{aligned} \alpha_{\parallel}^2(\nu) F_{\parallel}(\nu) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{n_N} \int 4\pi q^2 dq \delta(\hbar\nu - \hbar\nu_q) \frac{m_e}{12M} \frac{q|W(q)|^2}{\hbar P_F \nu(q)} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{n_N} \frac{\pi}{3} \frac{m_e}{M} \frac{1}{\hbar\nu} \frac{1}{P_F} \frac{\lambda_0}{2P_F} \frac{1}{\hbar\Omega_p} \int (2P_F)^4 y^3 dy |W(y)|^2 \delta(\nu - \nu_q) = \\ &= \frac{2}{3} e^4 n_N \frac{m_e}{M} \frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{P_F} \frac{1}{\Omega_p^2} \frac{x^2}{(1 + \lambda_0^2 / 4P_F^2)} \left\{ 1 - \frac{x^2}{1 + \lambda_0^2 / 4P_F^2} \right\}^{1/2}. \quad (9) \end{aligned}$$

2) Вычисление функции взаимодействия  $\alpha_{\perp}^2(\nu)F_{\perp}(\nu)$  для поперечных колебаний решетки. Поскольку две поперечные моды колебаний в выбранной модели эквивалентны, то вклад каждой из них в функцию связи одинаков и, следовательно, мы можем написать

$$\alpha_{\perp}^2(\nu)F_{\perp}(\nu) = \frac{2}{n_N} \int_{q \leq 2P_F} \frac{L_{\perp}(q)\delta(\hbar\nu - \hbar\nu_q)}{(2\pi)^3} =$$

$$= \frac{2}{n_N} \int \frac{4\pi q^2 dq}{(2\pi)^3} \frac{m_e}{12M} \frac{1}{\hbar\nu_q} \frac{q}{P_F} |W(q)|^2 \delta(\hbar\nu - \hbar\nu_q). \quad (10)$$

Для поперечных колебаний, в отличие от продольных, влияние экранировки свободными электронами на спектр колебаний незначительно. Как правило, зависимость  $\nu(\mathbf{q})$  имеет линейный характер со скоростью звука в два раза меньшей скорости распространения продольных колебаний. Следовательно, мы можем записать

$$\nu_q = \Omega_p q / 2\lambda_0 = \frac{P_F \Omega_p}{\lambda_0} y.$$

Предельная частота фононов, участвующих в формировании произведения  $\alpha_{\perp}^2(\nu)F_{\perp}(\nu)$ , в этом случае равна  $\nu_k = P_F \Omega_p / \lambda_0$ .

Снова вводя безразмерную переменную для  $\nu$  по формуле  $\nu = \nu_k x$ , находим связь между  $x$  и  $y$ , возникающую благодаря наличию  $\delta$ -функции в подинтегральном выражении (4)

$$\nu_q = P_F \Omega_p y / \lambda_0 = \nu = P_F \Omega_p x / \lambda_0.$$

Отсюда находим, что в этом случае, в отличие от предыдущего,  $y$  просто равен  $x$ . С учетом этого, продолжая вычисление  $\alpha_{\perp}^2(\nu)F_{\perp}(\nu)$ , находим

$$\alpha_{\perp}^2(\nu)F_{\perp}(\nu) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{n_N} \frac{2 \cdot 4\pi m_e}{12M} \frac{1}{P_F} \frac{1}{\hbar\nu} \frac{\lambda_0}{P_F} \frac{1}{\hbar\Omega_p} \times$$

$$\times \int_0^1 (2P_F)^4 y^3 |W(y)|^2 \delta(\hbar\nu - \hbar\nu_q) dy =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{n_N} \frac{8\pi m_e}{12M} \frac{\lambda_0}{P_F} \frac{1}{\hbar\Omega_p} \frac{(2P_F)^4 x^3 n_N^2}{P_F} \left\{ \frac{4\pi e^2}{\lambda_0^2 + (2P_F)^2 x^2} \right\}^2 =$$

$$= \frac{16}{3} e^4 n_N \frac{m_e}{M} \frac{1}{\hbar^2} \frac{1}{P_F} \left( \frac{\lambda_0}{2P_F} \right)^2 \frac{1}{\Omega_p^2} \frac{x^2}{\{x^2 + (\lambda_0^2 / 4P_F^2)\}^2}. \quad (11)$$

Итак, в первом приближении мы вычислили функцию взаимодействия электронов проводимости с колебаниями решетки. Эта функция в свою очередь будет использована для определения очень важного параметра теории сверхпроводимости — так называемой константы электрон-фононного взаимодействия  $\lambda$ .

3) *Дополнительный учет влияния дисперсии  $\varepsilon(q, 0)$  на функцию связи  $\alpha^2(\nu)F(\nu)$ .* Формула  $\varepsilon(q, 0) = 1 + \lambda_0^2/q^2$  для диэлектрической проницаемости свободного электронного газа, которой мы пользовались в предыдущих вычислениях, справедлива только приближенно. Более точное вычисление  $\varepsilon(q, 0)$  (см. [13], гл. 5, раздел 4), выполненное для модели свободных электронов при абсолютном нуле температуры, приводит к результату

$$\varepsilon(q, 0) = 1 + \frac{4\pi e^2 n_e}{q^2 \frac{2}{3} \varepsilon_F} \left\{ 1/2 + \frac{4P_F^2 - q^2}{8P_F q} \ln \left| \frac{2P_F + q}{2P_F - q} \right| \right\}. \quad (12)$$

Если представить это выражение формально в виде  $\varepsilon(q, 0) = 1 + \frac{\lambda^2}{q^2}$ , то величина  $\lambda$  окажется функцией  $q$ , которая при  $q \rightarrow 0$  стремится к значению, определяемому формулой  $\lambda_0^2 = 4\pi e^2 N(\varepsilon_F)$ . Эффективная длина экранирования  $1/\lambda$  растет с увеличением  $q$ , т.е. коротковолновые компоненты как электрон-ионного, так и ион-ионного потенциала взаимодействия экранируются свободными электронами все с большим и большим трудом. В результате этого силы взаимодействия между ионами возрастают, а спектр колебаний решетки становится жестче. Это ведет в конечном счете к уменьшению константы электрон-фононного взаимодействия.

С другой стороны, взаимодействие между электроном и фононом также возрастает, что ведет к воздействию  $\lambda$ . Таким образом дополнительный учет дисперсии диэлектрической проницаемости свободного электронного газа должен привести к изменению константы электрон-фононного взаимодействия. Нас интересует степень и характер этого изменения. С этой целью мы должны учесть указанные замечания и снова вычислить функцию связи  $\alpha^2(\nu)F(\nu)$ . Начнем с поперечной составляющей этой функции.

$$\begin{aligned} \alpha_{\perp}^2(\nu)F_{\perp}(\nu) &= \frac{2}{n_N} \int \frac{d^3 \mathbf{q}}{(2\pi)^3} L_{\perp}(q) \delta\{\hbar\nu - \hbar\nu(q, \mu)\} = \\ &= \frac{2}{n_N} \int \frac{4\pi q^2 dq}{(2\pi)^3} \frac{m_e}{12M} \frac{q}{\hbar\nu(q, \mu)} \frac{|W(q)|^2}{P_F} \delta\{\hbar\nu - \hbar\nu(q, \mu)\}. \end{aligned} \quad (13)$$

Теперь

$$\begin{aligned} W(q) &= \frac{1}{v_c} \left\{ \frac{4\pi e^2}{\lambda_0^2 f(q) + q^2} \right\}, \quad \varepsilon(q, 0) = 1 + \frac{\lambda_0^2 f(q)}{q^2}, \\ \lambda_0^2 &= 4\pi e^2 N(\varepsilon_F), \quad f(q) = \left\{ \frac{1}{2} + \frac{4P_F^2 - q^2}{8P_F q} \ln \left| \frac{2P_F + q}{2P_F - q} \right| \right\}. \end{aligned}$$

Для поперечной колебательной моды  $\nu_q = P_F \Omega_p y / \lambda_0$ ,  $\nu_k = P_F \Omega_p / \lambda_0$ , а  $\delta$ -функция дает связь между  $x$  и  $y$ .

$$\nu_q = \frac{P_F \Omega_p}{\lambda_0} y = \nu = \nu_k x = \frac{P_F \Omega_p}{\lambda_0} x \quad \text{или} \quad x = y.$$

В этом случае интересующая нас функция принимает следующий вид

$$\begin{aligned} \alpha_{\perp}^2(\nu)F_{\perp}(\nu) &= \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{1}{n_N} \frac{4\pi m_e}{12M} \frac{1}{P_F} \frac{1}{\hbar\nu} \frac{1}{\hbar\Omega_p} \frac{\lambda_0}{P_F} \times \\ &\times \int (2P_F)^4 y^3 dy |W(y)|^2 \delta(\nu - \nu_q) = \\ &= \frac{16}{3} e^4 n_N \frac{m_e}{M} \frac{1}{P_F} \left( \frac{\lambda_0}{2P_F} \right)^2 \frac{1}{\hbar^2 \Omega_p^2} \frac{x^2}{\{\lambda_0^2 f(x)/(2P_F)^2 + x^2\}^2}. \end{aligned} \quad (14)$$

Для продольной колебательной моды связь между частотой и импульсом теперь становится более сложной

$$\nu_q^2 = \frac{\Omega_p^2 q^2}{q^2 + \lambda_0^2 f(q)} = \frac{\Omega_p^2 (2P_F)^2 y^2}{(2P_F)^2 y^2 + \lambda_0^2 f(y)}. \quad (15)$$

Предельная частота фононов, участвующих в формировании функции взаимодействия, в этом случае равна

$$\nu_{qk}^2 = \Omega_p^2 (2P_F)^2 / ((2P_F)^2 + \lambda_0^2 f(1)),$$

а связь между частотой  $\nu$  в функции взаимодействия и импульсом соответствующего фонона, устанавливаемая  $\delta$ -функцией в подинтегральном выражении (4), принимает следующий вид

$$\nu^2 = \nu_k^2 x^2 = \nu_q^2 = \Omega_p^2 (2P_F)^2 y^2 / ((2P_F)^2 y^2 + \lambda_0^2 f(y)). \quad (16)$$

Отсюда

$$x^2 = \frac{\{(2P_F)^2 + \lambda_0^2 f(1)\} y^2}{(2P_F)^2 y^2 + \lambda_0^2 f(y)}.$$

Сама функция  $\alpha_{\parallel}^2(\nu)F_{\parallel}(\nu)$  оказывается равной

$$\begin{aligned} \alpha_{\parallel}^2(x)F_{\parallel}(x) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{n_N} \frac{4\pi m_e}{12M} \frac{1}{\hbar\nu} \frac{1}{P_F} \frac{\lambda_0}{2P_F} \frac{1}{\hbar\Omega_p} \times \\ &\times \int (2P_F)^4 y^3 dy |W(y)|^2 \delta(\nu - \nu_q) = \\ &= \frac{2}{3} e^4 n_N \frac{m_e}{M} \left( \frac{\lambda_0}{2P_F} \right) \frac{1}{P_F} \frac{1}{\hbar^2 \Omega_p^2} \frac{y^2}{\left\{ y^2 + \frac{\lambda_0^2}{(2P_F)^2} f(y) \right\}^{3/2}}. \end{aligned} \quad (17)$$

Таким образом для функции  $\alpha_{\parallel}^2(x)F_{\parallel}(x)$  получили сложное выражение, в котором параметр  $y$  связан с аргументом  $x$  соотношением

$$x = \left\{ \frac{1 + \lambda_0^2 / 4P_F^2 f(1)}{y^2 + \lambda_0^2 / 4P_F^2 f(y)} \right\}^{1/2} y.$$



### 3. Вычисление константы электрон-фононного взаимодействия $\lambda$ и выводы

Ядро Элиашберга в интегральном уравнении Намбу-Горькова [5] включает в себя функцию электрон-фононного взаимодействия  $\alpha^2(\nu)F(\nu)$ , где  $F(\nu)$  — плотность фононных состояний, а  $\alpha^2(\nu)$  представляет собой меру связи электрона с фононом с частотой  $\nu$ . В этой теории определение безразмерной константы электрон-фононного взаимодействия возникает естественным образом и имеет следующий вид

$$\lambda = 2 \int_0^{\infty} \frac{d\nu}{\nu} \alpha^2(\nu) F(\nu). \quad (18)$$

Мак Миллан [6] нашел приближенное решение уравнений Намбу-Горькова-Элиашберга, представив температуру перехода  $T_c$  как функцию  $\lambda$  и константы кулоновского отталкивания  $\mu^*$

$$T_c = \frac{\theta_D}{1.45} \exp \left[ - \left\{ \frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)} \right\} \right], \quad (19)$$

где

$$\mu^* = \mu / \{1 - \mu \ln(E_F/\theta_D)\}, \quad \mu = N(\epsilon_F) \int_0^{2P_F} \frac{q dq}{(2P_F)^2} V_c(q).$$

В этих уравнениях  $\theta_D$  — температура Дебая,  $E_F$  — энергия Ферми,  $V_c$  — полностью экранированное кулоновское взаимодействие между электронами. Уравнение (19) известно как уравнение Мак Миллана для температуры сверхпроводящего перехода. Для сверхпроводников со слабой и промежуточной связью ( $\lambda \leq 0.5$ ) значения  $T_c$ , полученные из уравнения (19), вполне приемлемы. Для сверхпроводников с сильной связью таких, например, как свинец и ртуть, это уравнение работает не так хорошо, поскольку  $T_c$  становится чувствительной к точной форме фононного спектра. Имея в виду в дальнейшем исследование возможности перехода металлического водорода в сверхпроводящее состояние, мы начнем с вычисления наиболее важной константы электрон-фононного взаимодействия.

Рассмотрим отдельно вклад в  $\lambda$  от продольных и поперечных колебаний решетки. В терминах безразмерной частоты  $x = \nu/\nu_k$ , где  $\nu_k = \Omega_p / (1 + \lambda_0^2/4P_F^2)^{1/2}$ , вклад от продольных колебаний согласно (18) имеет следующий вид

$$\begin{aligned} \lambda_{\parallel} &= 2 \int \frac{d\nu}{\nu} \alpha_{\parallel}^2(\nu) F_{\parallel}(\nu) = \frac{4}{3} e^4 n_N \frac{m_e}{M} \frac{1}{P_F} \frac{1}{\hbar^2 \Omega_p^2} \frac{1}{(1 + \lambda_0^2/4P_F^2)} \times \\ &\quad \times \int_0^1 x \{1 - x^2 / (1 + \lambda_0^2/4P_F^2)\}^{1/2} dx = \\ &= \frac{2}{3} e^4 n_D \frac{m_e}{M} \frac{1}{P_F^2} \frac{1}{\hbar^2 \omega_p^2} \frac{1}{(1 + \lambda_0^2/4P_F^2)} \left\{ \left[ 1 - \frac{1}{(1 + \lambda_0^2/4P_F^2)} \right]^{3/2} - 1 \right\}. \quad (20) \end{aligned}$$

В этом выражении

$$\lambda_0^2 = 4\pi e^2 N(\varepsilon_F) = \frac{6\pi e^2 n_e}{\varepsilon_F} = \frac{6\pi e^2 2m_e}{\hbar^2 (3\pi^2 z\rho/M)^{2/3}} \frac{z\rho}{M},$$

$$\lambda_0^2/4P_F^2 = \frac{3\pi e^2 z\rho m_e}{\hbar^2 (3\pi^2 z\rho/M)^{4/3} M}, \quad \Omega_p = (4\pi\rho)^{1/2} \frac{ze}{M}.$$

Мы провели вычисления, считая кристаллическую решетку металлического водорода кубической с одним атомом в элементарной ячейке, для трех значений плотности  $\rho = 1, 1.5, 2 \text{ g/cm}^2$  и получили соответственно значения  $\lambda_{\parallel} = 2.347 \cdot 10^{-2}, 2.078 \cdot 10^{-2}, 1.904 \cdot 10^{-2}$ , т.е. константа связи  $\lambda$  уменьшается с увеличением плотности.

Вклад поперечных колебаний решетки в константу связи соответственно равен

$$\begin{aligned} \lambda_{\perp} &= 2 \int_0^{\infty} \frac{d\nu}{\nu} \alpha_{\perp}^2(\nu) F(\nu) = \frac{32}{3} e^4 n_M \frac{m_e}{M} \frac{1}{P_F} \left( \frac{\lambda_0}{2P_F} \right)^2 \times \\ &\quad \times \frac{1}{\hbar^2 \Omega_p^2} \int_0^1 \frac{x dx}{(\lambda_0^2/4P_F^2 + x^2)^2} = \\ &= 32/6 e^4 n_N \frac{m_e}{M} \frac{1}{P_F} \left( \frac{\lambda_0}{2P_F} \right)^2 \frac{1}{\hbar^2 \Omega_0^2} \frac{1}{\lambda_0^2/4P_F^2 (1 + \lambda_0^2/4P_F^2)}. \end{aligned} \quad (21)$$

Все константы, входящие в (21) имеют вышеуказанные значения. Проведенные вычисления для тех же значений плотности дали соответственно результаты  $\lambda_{\perp} = 2.49 \cdot 10^{-1}, 2.23 \cdot 10^{-1}, 2.06 \cdot 10^{-1}$ . Мы видим, что тенденция изменения  $\lambda_{\perp}$  с увеличением плотности сохранилась, а вот абсолютные значения  $\lambda_{\perp}$  практически на порядок превосходят значения  $\lambda_{\parallel}$ . Таким образом, влияние продольных колебаний в рассмотренном нами приближении сказывается только во втором знаке величины  $\lambda_{\perp}$ , что составляет порядка 10% от полного значения.

При более точном учете дисперсии диэлектрической проницаемости свободного электронного газа поперечная составляющая функции взаимодействия, как было установлено ранее (14), имеет следующий вид

$$\alpha_{\perp}^2(x) F_{\perp}(x) = \frac{16}{3} e^4 n_N \frac{m_e}{M} \frac{1}{P_F} \left( \frac{\lambda_0}{2P_F} \right)^2 \frac{1}{\hbar^2 \Omega_p^2} \frac{x^2}{\{\lambda_0^2 f(x)/4P_F^2 + x^2\}^2}, \quad (22)$$

где  $f(x) = \left\{ 1/2 + \frac{(1-x^2)}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right\}$ . Соответствующий вклад в константу связи  $\lambda_{\perp}$  равен

$$\lambda_{\perp} = \frac{32}{3} e^4 n_M \frac{m_e}{M} \frac{1}{P_F} \left( \frac{\lambda_0}{2P_F} \right)^2 \frac{1}{\hbar^2 \Omega_p^2} \int_0^1 \frac{x dx}{\{\lambda_0^2 f(x)/4P_F^2 + x^2\}^2}. \quad (23)$$

Численные значения  $\lambda_{\perp}$ , полученные при тех же значениях плотности  $\rho$ , оказались равными  $5.08 \cdot 10^{-1}$ ,  $5.24 \cdot 10^{-1}$ ,  $5.41 \cdot 10^{-1}$ , что более чем в 2 раза превышает значения  $\lambda_{\perp}$ , полученные без учета дополнительной дисперсии  $\varepsilon(q, 0)$ . Кроме того, в последнем случае с ростом  $\rho\lambda_{\perp}$  также возрастает. Вклад продольной составляющей функции  $\alpha^2(\nu)F(\nu)$  в константу электрон-фононной связи  $\lambda$  может быть представлен в следующем виде

$$\alpha_{\parallel} = 2 \int_0^f \frac{\alpha_{\parallel}^2(x)F(x)dx}{x} =$$

$$= \frac{4e^4}{3} n_N \frac{m_e}{M} \left( \frac{\lambda_0}{2P_F} \right) \frac{1}{P_F} \frac{1}{\hbar^2 \Omega_p^2} \int_0^1 \frac{y^2 d \ln \left\{ \frac{1 + \lambda_0^2/4P_F^2 \cdot f(1)}{y^2 + \lambda_0^2/4P_F^2 \cdot f(y)} \right\}^{1/2} y}{\{y^2 + \lambda_0^2/4P_F^2 \cdot f(y)\}^{3/2}}.$$

Соответствующие значения  $\lambda_{\parallel}$  равны  $4.28 \cdot 10^{-2}$ ,  $3.84 \cdot 10^{-2}$ ,  $3.55 \cdot 10^{-2}$ .

В заключение выйдем полные значения  $\lambda = \lambda_{\perp} + \lambda_{\parallel}$  в том и другом случае  $\lambda_1 = 2.72 \cdot 10^{-1}$ ,  $2.44 \cdot 10^{-1}$ ,  $2.25 \cdot 10^{-1}$ ;  $\lambda_2 = 5.51 \cdot 10^{-1}$ ,  $5.62 \cdot 10^{-1}$ ,  $5.76 \cdot 10^{-1}$ .

Таким образом, более точный учет дисперсии диэлектрической проницаемости свободного электронного газа существенно меняет как абсолютное значение константы электрон-фононного взаимодействия, так и характер ее зависимости от плотности  $\rho$ .

#### Список литературы

- [1] Bardeen J., Cooper L.N., Schrieffer J.R. Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [2] Hambu Y. Phys. Rev. **117**, 648. (1960).
- [3] Горьков Л.П. ЖЭТФ **38**, 2, 735 (1958).
- [4] Элиашберг Г.М. ЖЭТФ **38**, 3, 966 (1960).
- [5] Garbotte J.P., Dynes R.C. Phys. Rev. **172**, 476 (1968).
- [6] McMillon W.L. Phys. Rev. **167**, 331 (1968).
- [7] Ashcroft N.W., Wilkins J.W. Phys. Lett. **14**, 4, 285 (1965).
- [8] Animalu A.O.E., Bonsignori F., Bortoloni V. Nuovo Cimento B **42**, 83 (1966).
- [9] Janak J.F. Phys. Lett. A. **27**, 105 (1968).
- [10] Trofimenkoff P.N., Carbotte J.P., Dynes R.C. Phys. Lett. A. **27**, 394 (1968).
- [11] Rice T.M. Phys. Rev. **175**, 858 (1968).
- [12] Allen P.V., Cohen M.L. Phys. Rev. **187**, 525 (1969).
- [13] Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М. (1966). 416 с.