

Отличие функций Блоха от плоских волн — важно ли это в теории металлов и сверхпроводников?

П. И. Арсеев

Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

Как известно, волновая функция электрона в кристалле имеет специальный вид и называется функцией Блоха — это произведение быстро меняющейся на масштабах элементарной ячейки периодической функции и медленной огибающей в виде плоской волны [1]. Большим достижением теории твердого тела явилось в свое время доказательство того, что можно решать уравнения Шредингера только для огибающей функции и не учитывать явно периодический потенциал кристалла [2]. То есть, рассматривать электроны как свободные, но с некоторой другой эффективной массой. В теории полупроводников это приближение эффективной массы активно использовалось, но наряду с этим, никогда не забывали, что точные волновые функции электронов — это Блоховские функции. Например, межзонное поглощение света определяется в первую очередь матричными элементами между быстро осциллирующими частями функций Блоха валентной зоны и зоны проводимости.

Однако, теория металлов, в основном, строилась в подходе свободных электронов (в приближении эффективной массы). Под обычным металлом подразумевались кристаллы, построенные из одинаковых атомов с s-оболочками. Реальное строение волновой функции на масштабах элементарной ячейки не учитывалось, так как это было не важно для вычисления различных характеристик таких «обычных металлов».

Сейчас появился ряд соединений, которые исходно являются диэлектриками (полупроводниками), но при легировании становятся почти нормальными металлами и сверхпроводниками. Оказывается, что для таких соединений, которые являются «нестандартными» металлами с атомами различных элементов в элементарной ячейке, надо вспомнить о более сложном строении волновой функции на масштабах элементарной ячейки для того, чтобы вычислять стандартные для металлов характеристики. Например, такая величина, как измеряемая в туннельных экспериментах плотность состояний — это не то же самое, что плотность состояний, вычисляемая по спектру зоны проводимости [3]. Также могут возникать эффекты анизотропии при рассеянии на примесях, как следствие особого строения функций Ванье. Еще большее значение может иметь учет реального строения волновых функций для сверхпроводников. Так, появление сильно анизотропного параметра порядка может быть не связано с особенностями сверхпроводящего взаимодействия, а только

с особенностями функций Блоха [4].

Современные методы расчета электронных состояний позволяют вычислить атомно-подобные функции Ванье и Блоховские функции данной зоны [5,6] и дают наглядную визуализацию строения волновых функций в таких новых соединениях.

Литература

- [1] А. И. Ансельм. *Введение в теорию полупроводников* (2-е изд.). М.: Наука, 1978.
- [2] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **84**, 814 (1951).
- [3] С. О. Лойко, Н. К. Федоров, П. И. Арсеев. *ЖЭТФ*, **121**, 453, (2002).
- [4] П. И. Арсеев, С. О. Лойко, Н. К. Федоров. *Письма в ЖЭТФ* **87**, 350, (2008).
- [5] N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, *et al.*. arXiv:1112.5411 (to be published in *Rev. Mod. Phys*)
- [6] I. V. Solovyev, Z. V. Pchelkina, V. I. Anisimov, *Phys. Rev. B* **75**, 045110 (2007).