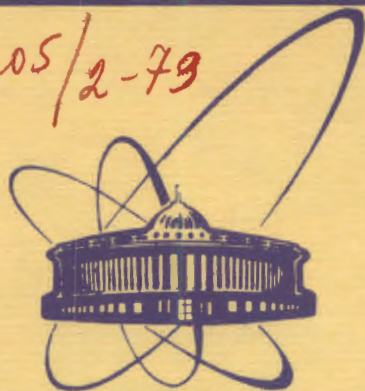


1205/2-79



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

C 326

2/12-79

P-22

P17 - 12103

Й. М. Рангелов

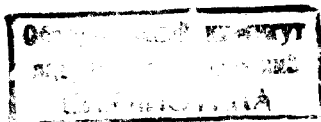
ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР
ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ

1979

P17 - 12103

Й. М. Рангелов

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР
ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ



Рангелов И.М.

P17 - 12103

Влияние электрон-фононного взаимодействия на энергетический спектр электронов проводимости

Исследовано влияние неупругих когерентных процессов рассеяния между колебаниями решетки и коллективизированными валентными электронами (КВЭ) на движение последних в металле. Путем численного определения интеграла Мигдала получено изменение энергетического спектра КВЭ, обусловленное электрон-фононным взаимодействием (ЭФВ). При одновременном учете экранировки константы ЭФВ и спектра фононов ЭФВ установлена связь между энергетическими спектрами "голых" и "одетых" КВЭ (в аналитическом виде). Показано, что только с помощью полного учета экранировки можно получить правильную связь между спектрами ω_q и ω_q^0 ($\omega_q = \omega_q^0 / \sqrt{\epsilon(q)}$). Показано также, что экранировка константы ЭФВ сильно уменьшает изменение энергетического спектра КВЭ при ЭФВ. Предполагается, что учет зонной структуры фононного спектра устранит неоднозначность в энергетическом спектре КВЭ. Тогда влияние ЭФВ на энергетический спектр КВЭ можно будет учесть путем изменения их эффективной массы. Получена связь между эффективными массами "голых" и "одетых" КВЭ.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Rangelov J.M.

P17 - 12103

Influence of the Electron-Phonon Interaction Upon the Energy Spectrum of the Conduction Electrons

The influence of coherent inelastic scattering processes between the collectivized valence electrons (CVE) and the lattice oscillations on its moving in a metal is studied. The change of the CVE energy spectrum owing to electron-phonon interaction (EPI) is obtained by numerical calculations of the Migdal integral. The connection between the energy spectra of the "bare" and "dressed" CVE in analytical form is obtained by the simultaneous account of screening of the EPI constant and the phonon spectrum. It is shown that the correct connection between the spectra ω_q and $\omega_q^0 / \omega_q = \omega_q^0 / \sqrt{\epsilon(q)}$ can be obtained only by means of the full consideration of the screening by the EPI. It is shown that the screening of the EPI constant powerfully decreases the change of the CVE energy spectrum owing to EPI. It is supposed that multivaluedness of the CVE energy spectrum can be pushed away by the consideration of the zone structure of the phonon spectrum. Then the influence of the EPI over the CVE energy spectrum can be taken into account by the change of its effective mass. The connection between the effective masses of the "bare" and "dressed" CVE is obtained.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

В настоящей работе установлено, что сильное электрон-фононное взаимодействие /ЭФВ/ может привести к неустойчивости энергетического спектра электронов проводимости /ЭП/ относительно появления новой энергетической ветви. Отмечено, что эта неустойчивость получается без учета динамического электрон-электронного взаимодействия, обусловленного обменом виртуальными фононами и обеспечивающего энергетическую выгодность сверхпроводящего состояния.

Внимательное исследование экспериментально определенных ферми-поверхностей /ФП/ коллективизированных валентных электронов /КВЭ/^{1-4/} показывает, что все они могут быть получены путем слабой деформации ферми-сферы^{5,6/}. Это подтверждает предположение о существовании в металле "свободных" электронов проводимости /ЭП/, движущихся в слабом потенциале кристаллической решетки /ПКР/. Поэтому в приближении "свободных" электронов /ПСЭ/ и при учете взаимодействия КВЭ с периодическим ПКР и друг с другом, а также взаимодействия ЭП с колебаниями ионных остовов /ИО/ решетки можно построить последовательную теорию металлического состояния.

Адиабатическое приближение Борна-Опенхаймера^{7/} является основным приближением теории металлов, в котором благодаря большой разности между массами ИО и КВЭ ($M \geq 10^5 m$) и слабой связи между ними, движение КВЭ можно отделить от движения ИО. Обычно предполагается, что движение КВЭ адиабатически следует за движением ИО. Поэтому влияние КВЭ на движение ИО учитывается с помощью самосогласованной экранировки КВЭ кулоновского взаимодействия между ближайшими ИО. Для этого вводится константа диэлектрической проницаемости $\epsilon(q)$. Наоборот, влияние колебаний ИО на

энергетический спектр КВЭ можно учесть, если рассмотреть в отдельности два явления: а/ упругое когерентное рассеяние КВЭ на колебаниях ИО, при котором изменение квазимпульса КВЭ передается кристаллической решетке как целой, без испускания или поглощения фононов; б/ неупругое когерентное рассеяние КВЭ на колебаниях ИО, при котором изменение квазимпульса КВЭ происходит с одновременным рождением или поглощением фонона.

Упругое рассеяние КВЭ на колебаниях ИО решетки приводит к появлению фактора Дебая^{8/} - Валлера^{9/} в матричном элементе перехода, что равносильно замене кулоновского потенциала δ -образно распределенного заряда неподвижного ядра кулоновским потенциалом размытого в пространстве заряда колеблющегося ядра. Эта замена приводит к сильному ограничению и сглаживанию ПКР в точке равновесного положения ИО.

Благодаря взаимодействию между ЭП и фононами может наступить изменение как энергетического спектра фононов /искажение решетки/, так и изменение энергетического спектра ЭП. Надо сказать, что оба эффекта исследовались ранее¹⁰⁻¹⁵. Может быть, самым главным результатом этих исследований является объяснение причины сверхпроводимости¹⁶⁻²⁰. При низких температурах, когда число фононов сильно уменьшается, след поляризуемости кристаллической решетки вокруг движущегося ЭП сохраняется настолько, что с ней может эффективно взаимодействовать другой ЭП. Конечно, максимальный эффект этого взаимодействия будет, когда второй ЭП пройдет вдоль всего следа поляризуемости первого ЭП, т.е. при встречном движении двух ЭП. А для того чтобы разминка была возможна, необходимо, чтобы оба ЭП имели противоположные спины. Это динамическое взаимодействие между ЭП можно описать с помощью обмена виртуальными фононами в модели фреilihовского гамильтониана^{21/}:

$$H = H_0 + H_{\text{ЭФВ}}, \quad /1/$$

где

$$H_0 = \sum_k \epsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sum_q \hbar \omega_q^0 b_q^+ b_q \quad /2a/$$

и

$$H_{\text{ЭФВ}} = \sum_q \alpha_q^0 a_{k+q\sigma}^+ a_{k\sigma} (b_q + b_{-q}^+). \quad /2б/$$

В /2/ $a_{k\sigma}^+$, $a_{k\sigma}$, b_q^+ и b_q являются операторами порождения и уничтожения КВЭ и фононов соответственно, а α_q^0 - константой электрон-фононного взаимодействия /ЭФВ/, которая

при малых q имеет вид $\alpha_q^0 = \sqrt{\frac{\lambda_0 \pi^2 \hbar^3 \omega_q^0}{2\rho_F m}}$, если $\omega_q^0 = c_0 q$ -

частота фононов и c - неперенормированная скорость звука / $c_0 \sim 1/\sqrt{M}$, где M - масса ИО/. Безразмерный фреilihовский параметр λ_0 характеризует силу ЭФВ^{22/}.

В работе Мигдаля^{14/} исследовалось влияние ЭФВ на энергетический спектр ЭП без учета аномально сильного динамического взаимодействия между ЭП с равными, но противоположно направленными квазимпульсами и спинами. Поэтому вполне естественно, что полученная слабая благодаря ЭФВ перенормировка эффективной массы ЭП не могла вызвать подозрение. Так как не учтено динамическое взаимодействие между ЭП, то не должна получаться и куперовская перестройка энергетического спектра ЭП^{16/}, переводящая металл из нормального в сверхпроводящее состояние. Цель настоящей работы - показать, что и без учета аномального куперовского спаривания сильное ЭФВ может привести к неустойчивости энергетического спектра ЭП относительно появления новой энергетической ветви. Хотя нам понадобится только результат работы Мигдаля^{14/}, ради полноты изложения и критического отношения к ее выводам мы повторим основные моменты получения конечного уравнения.

В работе^{14/} вводятся функции распространения КВЭ и фононов

$$G = i \langle T \psi(1) \psi^+(2) \rangle, \quad /3/$$

$$D = i \langle T \phi(1) \phi(2) \rangle, \quad /4/$$

где усреднение производится по основному состоянию системы*:

$$\phi = e^{iHt} \sum_{q < q_m} (b_q + b_{-q}^+) \alpha_q^0 e^{iqr} e^{-iHt}, \quad /5/$$

$$\psi = e^{iHt} \sum_k a_k e^{ikr} e^{-iHt}. \quad /6/$$

*Здесь и далее $\hbar = 1$.

Тогда энергия ЭФВ в /26/ может быть записана в виде

$$H_{\text{ЭФВ}} = \sum \psi_{k+q}^+ \psi_k \phi_q, \quad /7/$$

где ψ_k и ϕ_q - пространственные компоненты Фурье от операторов, входящих в функции Грина. В импульсном представлении уравнения Дайсона имеют вид

$$\mathcal{G}(p) = \mathcal{G}_0(p) + \mathcal{G}_0(p) \Sigma(p) \mathcal{G}(p), \quad /8/$$

$$\Sigma(p) = -i \int \mathcal{G}(p-q) D(q) \Gamma(p - \frac{q}{2}, q) d^4q, \quad /9/$$

$$D(q) = D_0(q) + D_0(q) \Pi(q) D(q), \quad /10/$$

$$\Pi(q) = -i \int \mathcal{G}(p + \frac{q}{2}) \Gamma(p, q) \mathcal{G}(p - \frac{q}{2}) d^4p, \quad /11/$$

где $d^4p = \frac{d\epsilon d\vec{p}}{(2\pi)^4}$, $d^4q = \frac{d\omega d\vec{q}}{(2\pi)^4}$, а Σ и Π - неприводимые

части собственной энергии КВЭ и фонона. \mathcal{G}_0 и D_0 - функции Грина КВЭ и фонона при отсутствии ЭФВ:

$$\mathcal{G}_0(p) = \{ \epsilon_p^\circ - \epsilon - i\Lambda(p) \}^{-1}, \quad /12/$$

$$D_0(q) = (\alpha_q^-)^2 \{ (\omega_q^\circ - \omega - i\delta)^{-1} + (\omega_q^\circ + \omega - i\delta)^{-1} \}, \quad /13/$$

где $\Lambda(p) \rightarrow \begin{cases} +0 & p > p_F \\ -0 & p < p_F \end{cases}$; $\delta \rightarrow +0$.

Мигдалом показано, что

$$\Gamma_1 \sim \lambda_0 \omega_0^2 p_F^2 \sim \lambda_0^2 \sqrt{M} \quad /14/$$

намного меньше 1, поэтому в работе /14/ принималось $\Gamma_1 \Gamma_0 = 1$. Тогда для поляризационного оператора из /11/ после интегрирования по ϵ и \vec{p} получается

$$\Pi(q, \omega) = \frac{p_F m}{7^2} \{ g(\frac{q}{2k_F}) + \pi i \frac{|\omega|}{2qp_F} \}, \quad /15/$$

$$g(x) = \frac{1}{2} \{ 1 + \frac{1-x^2}{2x} \ln | \frac{1+x}{1-x} | \}. \quad /16/$$

В /14/ гриновская функция перенормированных фононов имеет вид

$$D(q, \omega) = \frac{(\alpha_q^\circ)^2 \omega_q^\circ}{\omega_q} \{ (\omega_q - \omega - i\delta_1 \frac{\omega}{|\omega|})^{-1} + (\omega_q + \omega - i\delta_1 \frac{\omega}{|\omega|})^{-1} \}, \quad /17/$$

где перенормированная частота фононов определяется равенством

$$\omega_q^2 = (\omega_q^\circ)^2 [1 - \lambda_0 g(q/2k_F)]. \quad /18/$$

Таким образом, функция Грина фонона D , полученная с учетом ЭФВ, отличается от D_0 заменой частоты ω_q° на частоту $\omega_q - i\delta_1$ и появлением перенормировочного множителя $\frac{\omega_q^\circ}{\omega_q}$ в константе ЭФВ. Об изменении константы ЭФВ

α_q° ничего не говорилось.

Задача нахождения полной функции Грина КВЭ \mathcal{G} сводилась к решению интегрального уравнения /9/. После введения обозначений

$$(\epsilon_p^\circ - \mu_0) / \omega_0 = \xi, \quad (\epsilon_p - \mu) / \omega_0 = \eta,$$

$$\Sigma(\xi, \eta) = \Sigma(0,0) + \alpha_0 f(\xi, \eta), \quad /19/$$

где

$$\mu = \mu_0 - \Sigma(0,0), \quad \omega_0 = \omega_q |_{q=2k_F}, \quad /20/$$

полную функцию Грина КВЭ \mathcal{G} можно было записать в виде

$$\mathcal{G}(\xi, \eta) = \omega_0^{-1} [\xi - \eta - f(\xi, \eta) - i\Delta(p)]^{-1}. \quad /21/$$

Из сказанного выше следует, что представляют интерес значения ξ и $\eta \sim 1$. После долгих вычислений для реальной $f_0(\eta)$ и мнимой $f_1(\eta)$ части функции $f(\xi, \eta)$ получалось:

$$f_0(\eta) = \lambda_0 \int_0^{x_1} \frac{(\omega_q^0)^2}{\omega_0 \omega_q} \ln \left| \frac{\eta \omega_0 + \omega_q}{\eta \omega_0 - \omega_q} \right| x dx, \quad /22/$$

$$f_1(\eta) = \pi \lambda_0 \int_0^y \frac{(\omega_q^0)^2}{\omega_0 \omega_q} x dx. \quad /23/$$

Здесь $x_1 = q_1/2k_F$, где q_1 есть меньшее из чисел q_m и $2k_F$; $y = g/2k_F$, где g определяется условием $\omega_g = \omega_0 \eta$ при $|\eta| < 1$ и $y = x_1$ при $|\eta| > 1$.

После введения переменной $t = \omega_q / \omega_0$, которая с помощью /18/ связывает t с x соотношением

$$t^2(1 - \lambda_0/2) = x^2(1 - \lambda_0 + \frac{\lambda_0}{2} x^2), \quad /24/$$

для $f_0(\eta)$ получалось

$$f_0(\eta) = \int_0^1 \ln \left| \frac{t+\eta}{t-\eta} \right| \left(1 - \frac{a}{\sqrt{a^2+t^2}} \right) dt, \quad /25/$$

где

$$a^2 = (1 - \lambda_0)^2 / [\lambda_0(2 - \lambda_0)].$$

Хотя говорилось, что интерес представляют значения ξ и $\eta \sim 1$, в работе /14/ исследовано решение интеграла /25/ для $\eta \ll 1$, когда пренебрегая членами третьего порядка по η , для $f_0(\eta)$ получаем

$$f_0(\eta) \approx 2\eta \ln \left(\frac{1 - \lambda_0/2}{1 - \lambda_0} \right) = \lambda \eta. \quad /26/$$

Так как согласно /21/ энергетический спектр "одетых" КВЭ должен определяться уравнением

$$\eta + f_0(\eta) = \xi, \quad /27/$$

то получилось, что для $\eta \ll 1$ ЭФВ приводит только к увеличению эффективной массы ЭП вблизи ФП КВЭ ($m^* = (1 + \lambda)m$), что эквивалентно уменьшению ферми-скорости ЭП ($v_F = v_F^0 / (1 + \lambda)$).

Учитывая, что сделанное в /14/ приближение при вычислении /25/ для $\eta \ll 1$ очень грубо для больших η , автор пытался найти лучшее разложение. Конечно, можно разложить величину под корнем по отношению разности $(t^2 - \eta^2)$ к сумме $(a^2 + \eta^2)$, чтобы уменьшить влияние логарифмической расходимости. Но не удалось получить короткого и удобного выражения для наглядного получения энергетического спектра КВЭ. Поэтому автору пришлось использовать ЭВМ для численного вычисления интеграла /22/. С одной стороны, это неудобно, так как нельзя представить изменение энергетического спектра КВЭ в аналитическом виде, но, с другой стороны, численное решение дало возможность проверить зависимость изменения энергетического спектра КВЭ при ЭФВ от энергетического спектра фононов. Поэтому были сделаны вычисления интеграла /22/ для двух спектров: $\omega_q^0 = \omega_0^0 \sin(x)$ и $\omega_q^0 = \omega_0^0 x$. На рис. 1 представлена зависимость энергетического спектра "одетых" КВЭ ϵ_k от ϵ_k^0 , т.е. от энергетического спектра "голых" КВЭ, для различных значений константы ЭФВ, когда энергетический спектр фононов описывается формулой $\omega_q^0 = \omega_0^0 x$, а на рис. 2 - эта же зависимость при $\omega_q^0 = \omega_0^0 \sin(x)$. Из обоих рисунков видно, что имеется разность только в величине критического значения константы ЭФВ, при которой появляется неоднозначность. Неоднозначная связь между ϵ_k и ϵ_k^0 указывает на появление новой энергетической ветви в энергетическом спектре КВЭ.

Чтобы не связывать появление неустойчивости энергетического спектра КВЭ с экранировкой взаимодействия между ИО, можно решить интеграл /22/, полагая $\omega_q = \omega_q^0$, как это сделано в /23/. Эта проверка полезна тем более, что в случае $\omega_q = \omega_q^0 = \omega_0^0 x$ интеграл /22/ переходит в

$$f_0(\eta) = \lambda_0 \int_0^1 t^2 \ln \left| \frac{t+\eta}{t-\eta} \right| dt, \quad /28/$$

который интегрируется легко. Получаем, что

$$f_0(\eta) = \frac{\lambda_0}{3} \left\{ \eta + (1 - \eta^3) \ln \left| \frac{1+\eta}{1-\eta} \right| + 2\eta^3 \ln \left(\frac{1+\eta}{\eta} \right) \right\}. \quad /29/$$

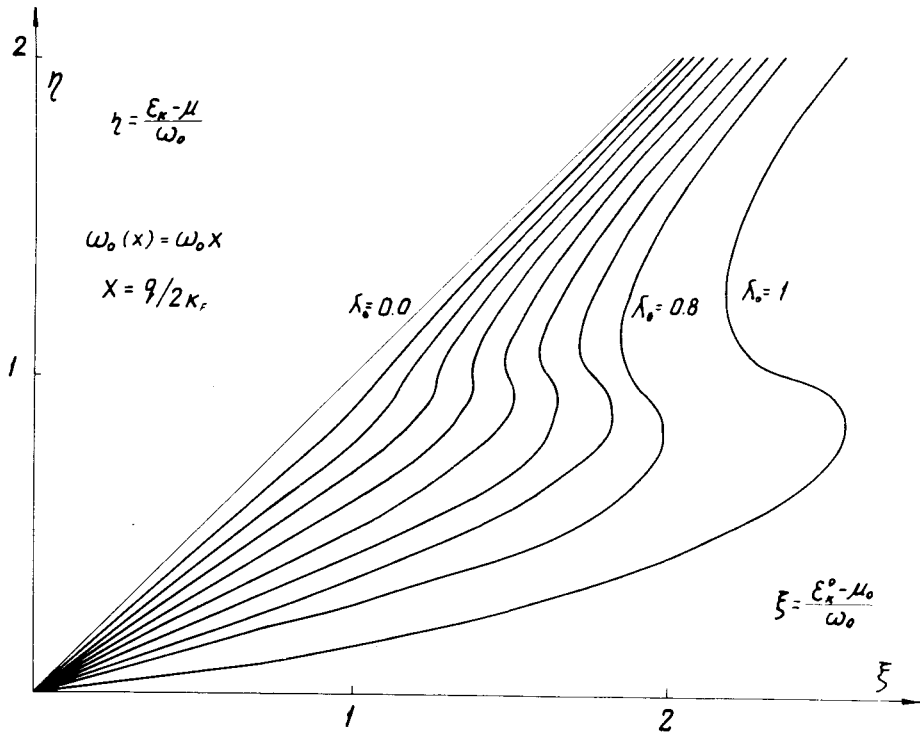


Рис.1. Энергетический спектр "одетых" КВЭ при α_q^0 и $\omega_q = \omega_0 x(1 - \lambda_0 g(x))$.

Для $\eta \ll 1$ выражение /29/ можно разложить и с точностью до η^3 получить:

$$f_0(\eta) = \lambda_0 \left(\eta + \frac{2}{3} \eta^3 \ln \left\{ \frac{\sqrt[3]{e}}{\eta} \right\} \right). \quad /30/$$

Путем подстановки /29/ в /27/ получаем уравнение для $\eta(\xi)$:

$$\eta + \frac{\lambda_0}{3} \left\{ \eta + (1 - \eta^3) \ln \left| \frac{1 + \eta}{1 - \eta} \right| + 2\eta^3 \ln \left(\frac{1 + \eta}{\eta} \right) \right\} = \xi, \quad /31/$$

а подстановки /30/ в /27/ - уравнение

$$\eta + \lambda_0 \left(\eta + \frac{2}{3} \eta^3 \ln \left\{ \frac{\sqrt[3]{e}}{\eta} \right\} \right) = \xi. \quad /32/$$

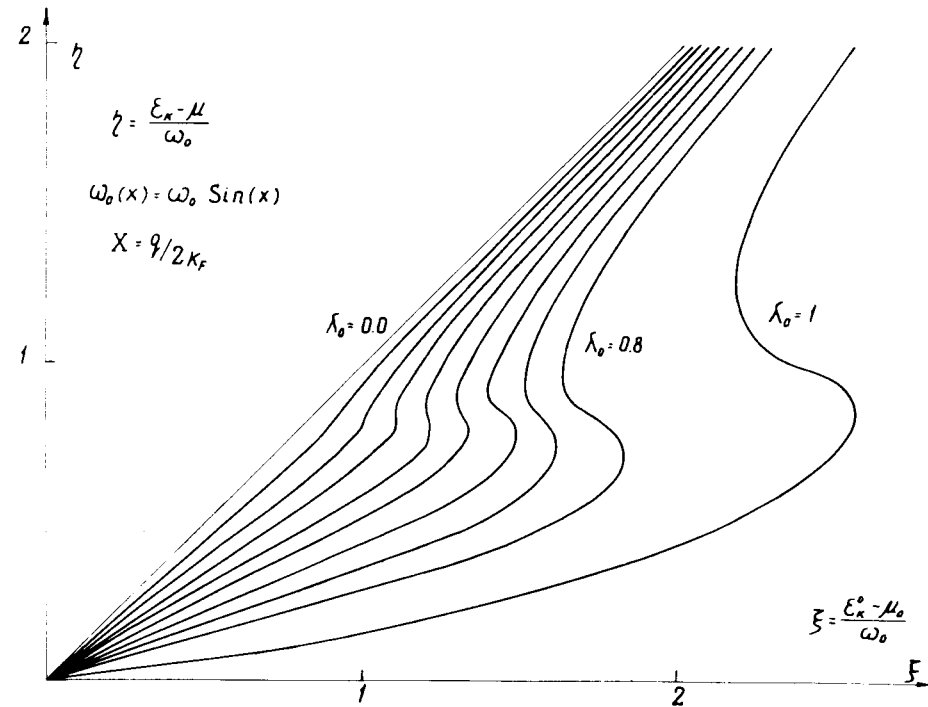


Рис.2. Энергетический спектр "одетых" КВЭ при α_q^0 и $\omega_q = \omega_0 \sin(x)(1 - \lambda_0 g(x))$.

Результаты вычисления изменения энергетического спектра КВЭ вследствие ЭФВ с помощью формулы /31/ представлены на рис. 3. Сравнение рис. 1 и рис. 3 показывает, каково влияние неправильного /неполного/ учета экранировки КВЭ на взаимодействие между ИО.

Действительно, в работе^{/14/} Мигдалом показано, что можно пренебречь влиянием экранировки ЭФВ на константу ЭФВ. Но если посмотрим на уравнения /10/ и /11/, то увидим, что влияние экранировки из-за ЭФВ на фоновый спектр ω_q , который определяется полной гриновской функцией $D(q, \omega)$, учитывается произведением

$$D_0(q) \Pi(q) = -i D_0(q) \int \mathcal{G}_0(p + \frac{q}{2}) \mathcal{G}_0(p - \frac{q}{2}) d^4 p, \quad /33/$$

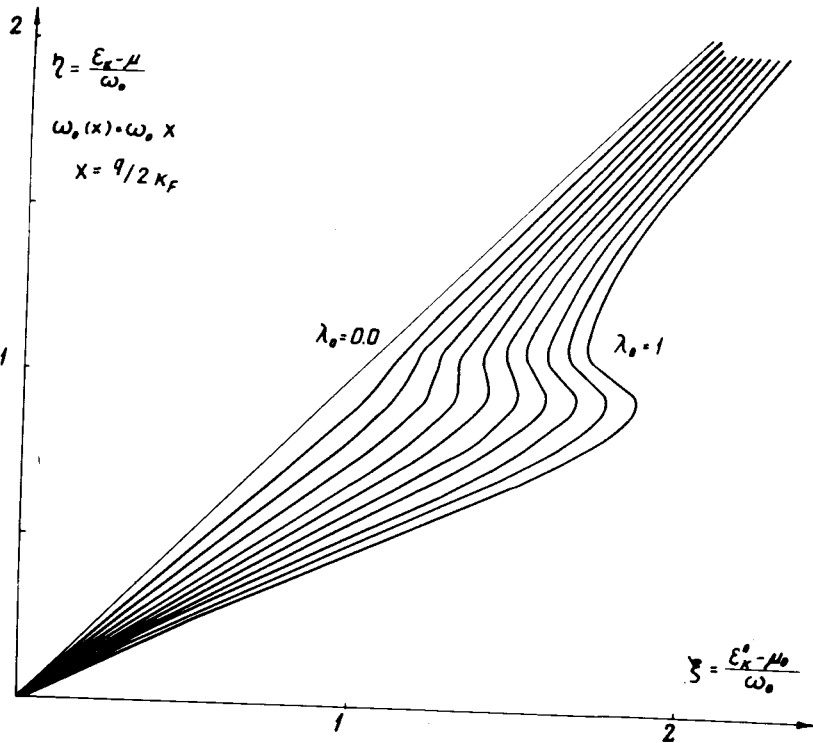


Рис.3. Энергетический спектр "одетых" КВЭ при α_q^0 и $\omega_q = \omega_0 x$.

если принять, что вершинная часть $\Gamma(p, q)$ совпадает с $\Gamma_0(p, q) = 1$. А для поправки $\Gamma_1(p, q)$ к вершинной части $\Gamma_0(p, q)$ используется выражение

$$\Gamma_1(p, q) = i \int D_0(p-p_1) \mathcal{G}_0(p_1 + \frac{q}{2}) \mathcal{G}_0(p_1 - \frac{q}{2}) d^4 p_1. \quad /34/$$

После учета свойств функции Грина фононов $D_0(p-p_1)$ и после ее вынесения из-под знака интеграла для оценки $\Gamma_1(p, q)$ получаем

$$\Gamma_1(p, q) = i D_0(q, 0) \int_{\epsilon_1 - \frac{\omega_0}{2}}^{\epsilon_1 + \frac{\omega_0}{2}} \frac{d\epsilon_1}{2\pi} \int_{|p-p_1| < q_m} \mathcal{G}_0(p_1 + \frac{q}{2}, \epsilon_1 + \frac{\omega_0}{2}) \times \mathcal{G}_0(p_1 - \frac{q}{2}, \epsilon_1 - \frac{\omega_0}{2}) \frac{d\vec{p}_1}{(2\pi)^3}. \quad /35/$$

Сравнение /33/ с /35/ показывает, что влияние ЭФВ на фоновый спектр ω_q и константу ЭФВ одинаково. Действительно, если частота колебаний ИО без учета экранировки определялась потенциалом $V_i(q)$, то частота ω_q колебаний ИО при учете экранировки ЭФВ определяется потенциалом $V_i(q)/\epsilon(q)$, где $\epsilon(q)$ - диэлектрическая проницаемость, описывающая экранировку взаимодействия между ИО за счет ЭФВ:

$$\epsilon(q) = 1 + \lambda_0 g(q/2k_F). \quad /36/$$

Специальный вид /36/ диэлектрической проницаемости $\epsilon(q)$ не должен нас пугать. Учет кулоновского взаимодействия между неподвижными ИО и КВЭ приводит к появлению диэлектрической проницаемости

$$\tilde{\epsilon}(q) = 1 + \frac{e^2 m}{\pi k_F x^2} g(x). \quad /37/$$

Это - статическая диэлектрическая проницаемость. А если учесть еще обменное и корреляционное взаимодействия между КВЭ, то вместо /37/ можно пользоваться эффективной диэлектрической проницаемостью^{/24,25/}:

$$\epsilon^*(q) = 1 + \left(\frac{4\pi e^2}{q^2} + X_q \right) \frac{m k_F}{\pi^2} g(q/2k_F), \quad /38/$$

где /25/

$$X_q = - \frac{6\pi e^2}{3q^2 + 4k_F^2}. \quad /39/$$

Именно таким образом можно рассматривать и совместное влияние кулоновского взаимодействия между ИО и КВЭ и ЭФВ на взаимодействие между ИО, когда вместо /38/ могли бы написать

$$\tilde{\epsilon}^*(q) = 1 + \left(\lambda_0 + \frac{e^2 m}{\pi k_F x^2} \right) g(x) \quad /40/$$

В духе сказанного выше можно утверждать, что влияние /36/ и /37/, что в линейном приближении, без учета их взаимного влияния, выражается влиянием /40/, можно учесть одним только /37/, если заменить массу "голого" КВЭ m на массу "одетого" КВЭ $m^* = m(1 + \lambda)$.

Необходимо отметить, что дисперсия в спектре колебаний ИО обеспечивается путем учета связи между колебаниями соседних ИО^{26/}. Экранировка взаимодействия между ИО приводит к замене частоты ω_q° на частоту $\omega_q = \omega_q^\circ / \sqrt{\epsilon(q)}$, а константы ЭФВ $\alpha^\circ(q)$ - на константу $\alpha(q) = \alpha^\circ(q) / \epsilon(q)$. Именно путем одновременного учета влияния ЭФВ можно получить правильную формулу, описывающую дисперсию фононного спектра.

Действительно, энергетический спектр $\omega(q)$ колебаний ИО при учете ЭФВ должен определяться уравнением

$$\omega_q^2 - \omega_q^{\circ 2} + 2\alpha_q^2 \omega_q^\circ \Pi(q, \omega) = 0. \quad /41/$$

Если учесть, что

$$\alpha_q^2 = \frac{\alpha_q^\circ}{\epsilon^2(q)} = \frac{\lambda_0}{\epsilon(q)} \frac{\pi^2}{mp_F} \frac{\omega_q^\circ}{2\epsilon(q)}, \quad /42/$$

то /41/ можно переписать в следующем виде:

$$\omega_q^2 - \omega_q^{\circ 2} + \lambda g(x) \omega_q^{\circ 2} / \epsilon(q) = 0, \quad /43/$$

где $\lambda = \lambda_0 / \epsilon(q)$. После подстановки $\epsilon(q) = 1 + \lambda g(x)$ в /43/ получаем

$$\omega_q^2 = \omega_q^{\circ 2} / [1 + \lambda g(x)]. \quad /44/$$

Приведенное выше доказательство устраняет мнимую неустойчивость фононного спектра, которая без учета анизотропии ФП КВЭ являлась только следствием сильного ЭФВ^{10,13/}. В работе Мигдала^{14/} используется следующее приближение:

$$\omega_q^2 = \omega_q^{\circ 2} [1 - \lambda_0 g(x)]. \quad /45/$$

Как видно из /45/, в этом приближении для λ_0 , при которых выполняется неравенство $\lambda_0 g(x) > 1$, частота фононов становится мнимой, что указывает на нестабильность кристаллической решетки.

Так как мы интересуемся только влиянием "диэлектрической" проницаемости /36/, то в дальнейших вычислениях будем учитывать только ее. Тогда для вычисления $f_0(\eta)$ вместо /22/ необходимо пользоваться следующей формулой:

$$\tilde{f}_0(\eta) = \lambda_0 \int_0^1 \frac{x dx}{\epsilon(x)} \frac{\omega_q}{\omega_0} \ln \left| \frac{\omega_q + \eta \omega_0}{\omega_q - \eta \omega_0} \right|. \quad /46/$$

После подстановки $\frac{\omega_q}{\omega_0} = t$ в /46/ и с помощью связи

$$t^2 = x^2 / [1 + \gamma(1 - x^2)] \quad \text{или} \quad x^2 = (1 + \gamma)t^2 / (1 + \gamma t^2) \quad /47/$$

формулу /46/ можно переписать в более удобном виде

$$\tilde{f}_0(\eta) = 2\gamma \int_0^1 \frac{t^2 dt}{1 + \gamma t^2} \ln \left| \frac{t + \eta}{t - \eta} \right|, \quad /48/$$

где $\gamma = \lambda_0 / [2 + \lambda_0]$. Таким образом, получилась формула, аналогичная формуле /28/ для $f_0(\eta)$ в случае, когда $\omega_q = \omega_q^\circ$. Различие заключается только в том, что в /48/ вместо λ_0 перед интегралом стоит $\frac{2\lambda_0}{2 + \lambda_0}$ и в знаменателе подынтегральной функции

появился множитель $[1 + \gamma t^2]$. Учитывая, что $\gamma \leq 1/3 \ll 1$ и $t^2 \leq 1$, можно разложить знаменатель $[1 + \gamma t^2]$ с достаточной точностью и после несложных преобразований получить для $f_0(\eta)$

$$\begin{aligned} \tilde{f}_0(\eta) &= \frac{2\lambda_0}{2 + \lambda_0 + \lambda_0 \eta^2} \int_0^1 t^2 \ln \left| \frac{t + \eta}{t - \eta} \right| dt - \\ &- \frac{2\lambda_0^2}{(2 + \lambda_0 + \lambda_0 \eta^2)^2} \int_0^1 t^2 (t^2 - \eta^2) \ln \left| \frac{t + \eta}{t - \eta} \right| dt. \quad /49/ \end{aligned}$$

Так как второй интеграл содержит множитель $(t^2 - \eta^2)$, который меняет знак подынтегральной функции и устраняет логарифмическую расходимость множителя $\ln \left| \frac{t + \eta}{t - \eta} \right|$, значение этого интеграла мало. Поэтому вторым членом можно пренебречь. Тогда с помощью результата /29/ интегрирования /28/ (случая /22/ при $\omega_q = \omega_q^\circ = \omega_0 x$) из /49/ с достаточной точностью получаем

$$\tilde{f}_0(\eta) = \frac{2}{2 + \lambda_0 + \lambda_0 \eta^2} f_0(\eta). \quad /50/$$

В этом приближении энергетический спектр "одетых" КВЭ должен определяться не /31/, а следующей формулой:

$$\eta + \frac{2\lambda_0}{3(2 + \lambda_0 + \lambda_0 \eta^2)} \left\{ \eta + (1 - \eta^2) \ln \left| \frac{1 + \eta}{1 - \eta} \right| + 2\eta^3 \ln \left(\frac{1 + \eta}{\eta} \right) \right\} = \xi. \quad /51/$$

Анализ формулы /51/ показывает, что учет влияния экранировки ЭФВ на константу ЭФВ λ_0 действительно приводит к экранировке константы ЭФВ, т.е. к появлению множителя $2/[2+\lambda_0+\lambda_0\eta^2]$, который очень сильно уменьшает эффективную константу ЭФВ:

$$\lambda_1 = 2\lambda_0 / [2 + \lambda_0 + \lambda_0\eta^2]. \quad /52/$$

Как видно из таблицы, где представлена зависимость /52/ эффективной константы ЭФВ λ_1 от незэкранированной константы ЭФВ λ_0 и от квазичастичной энергии ϵ_k КВЭ, при $\eta^2=1$ вместо $\lambda_0=1$ имеем $\lambda_1=0,5$. Это сильное уменьшение эффективной константы ЭФВ λ хотя и не приводит к стабилизации энергетичес-

Таблица 1. Зависимость экранированной константы ЭФВ λ_1 от λ_0 и η .

$\eta \backslash \lambda_0$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
0.0	0.095	0.182	0.261	0.333	0.400	0.462	0.519	0.572	0.621	0.667
0.1	0.095	0.182	0.261	0.333	0.399	0.460	0.517	0.570	0.619	0.664
0.2	0.095	0.181	0.260	0.332	0.398	0.457	0.514	0.565	0.614	0.658
0.3	0.095	0.180	0.258	0.329	0.394	0.453	0.507	0.557	0.604	0.647
0.4	0.094	0.179	0.256	0.325	0.388	0.446	0.499	0.546	0.591	0.633
0.5	0.094	0.178	0.253	0.320	0.382	0.437	0.488	0.533	0.576	0.615
0.6	0.093	0.176	0.249	0.314	0.374	0.427	0.475	0.519	0.558	0.595
0.7	0.093	0.174	0.245	0.306	0.365	0.415	0.460	0.503	0.538	0.573
0.8	0.092	0.172	0.239	0.298	0.355	0.402	0.444	0.483	0.518	0.550
0.9	0.091	0.169	0.235	0.292	0.344	0.388	0.428	0.463	0.497	0.524
1.0	0.091	0.167	0.231	0.286	0.333	0.374	0.412	0.444	0.474	0.500
1.1	0.090	0.165	0.226	0.278	0.321	0.361	0.396	0.426	0.452	0.475
1.2	0.088	0.162	0.220	0.270	0.310	0.346	0.378	0.406	0.429	0.450
1.3	0.087	0.160	0.214	0.260	0.300	0.332	0.361	0.386	0.407	0.426
1.4	0.086	0.156	0.208	0.250	0.290	0.318	0.344	0.367	0.387	0.403
1.5	0.085	0.152	0.202	0.240	0.280	0.304	0.328	0.348	0.366	0.381
1.6	0.084	0.148	0.196	0.232	0.268	0.291	0.313	0.330	0.346	0.360
1.7	0.083	0.144	0.190	0.224	0.256	0.279	0.299	0.313	0.327	0.340
1.8	0.082	0.140	0.184	0.216	0.245	0.266	0.282	0.297	0.309	0.321
1.9	0.081	0.136	0.178	0.208	0.234	0.253	0.264	0.281	0.293	0.302
2.0	0.080	0.133	0.172	0.200	0.222	0.240	0.252	0.264	0.275	0.286

кого спектра КВЭ, все таки сильно уменьшает изменение их эффективной массы. Из таблицы видно, что экранировка ЭФВ ограничивает увеличение эффективной массы КВЭ до $2/3 m$. На рис. 4 представлено изменение энергетического спектра КВЭ вследствие ЭФВ при учете влияния ЭФВ на константу ЭФВ.

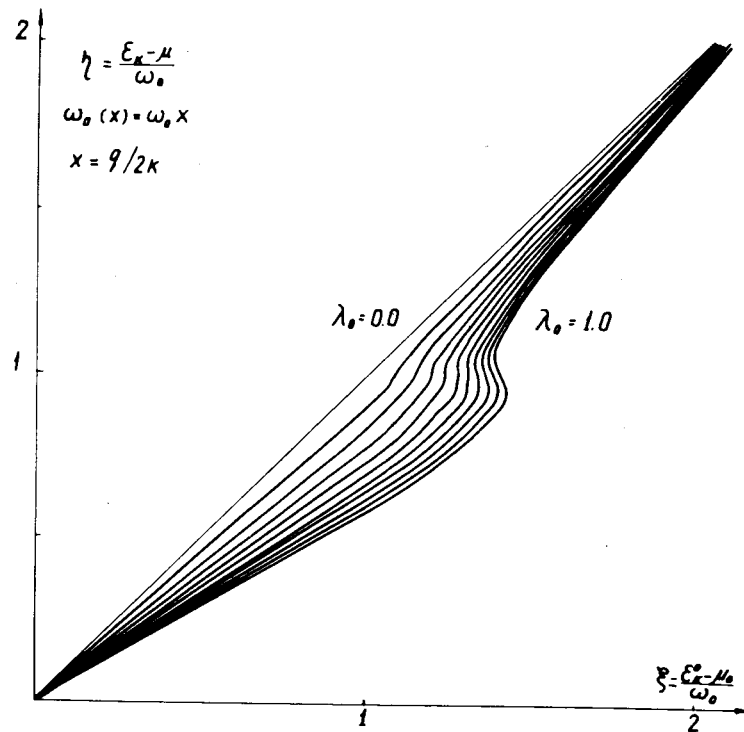


Рис.4. Энергетический спектр "одетых" КВЭ при a_q и $\omega_q = \omega_0 x / (1 + \lambda g(x))$.

Ради полноты изложения и понимания полученного результата необходимо отметить, что исходя из общих принципов Тода еще в /27/ получил, что измененный энергетический спектр КВЭ вследствие ЭФВ имеет вид, показанный на рис. 5. Такое же изменение повторяется и в работе Хейне /28/. Различие состоит только в предположении Тода о том, что вычисленное им изменение энергетического спектра КВЭ

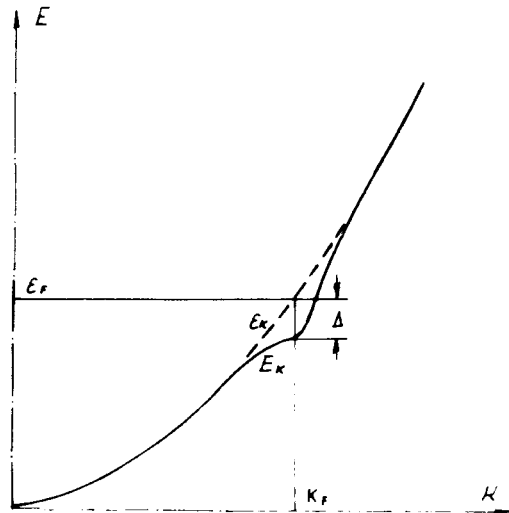


Рис.5. Энергетический спектр "одетых" КВЭ в модели Тода и Хейне.

$$\epsilon_k - \mu = \begin{cases} -\sqrt{(\epsilon_k^0 - \mu)^2 + \Delta_k^2} & , \text{ если } \epsilon_k^0 < \mu & /53a/ \\ 2(\epsilon_k^0 - \mu) - \sqrt{(\epsilon_k^0 - \mu)^2 + \Delta_k^2} & , \text{ если } \epsilon_k^0 > \mu & /53b/ \end{cases}$$

/или более наглядно $\epsilon_k = \epsilon_k^0 - \Delta_k^2 / [\sqrt{(\epsilon_k^0 - \mu)^2 + \Delta_k^2} + |\epsilon_k^0 - \mu|]$ / описывает переход металла из нормального в сверхпроводящее состояние. В работе Хейне говорится, что энергетический спектр КВЭ /53/ (или на рис. 5), является следствием электрон-электронного взаимодействия через виртуальные фононы вблизи $O K$, т.е. следствием ЭФВ. Но так как дальше говорится о циклотронной массе КВЭ, то ясно что имеется в виду нормальное состояние металла.

Конечно, так как Тода, как и мы, не вводил аномальных корреляций между КВЭ куперовской пары, то он не должен был получить изменение энергетического спектра КВЭ при переходе металла из нормального в сверхпроводящее состояние. Однако, если принять, что КВЭ в сверхпроводнике имеют энергетический спектр /53/, их полная квазичастичная энергия должна описываться выражением

$$E_s = - \sum \left(1 + \frac{\nu_k}{\sqrt{\nu_k^2 + \Delta_k^2}} \right) f_k \sqrt{\nu_k^2 + \Delta_k^2} + \sum \left(1 - \frac{\nu_k}{\sqrt{\nu_k^2 + \Delta_k^2}} \right) \times \\ \times (1 - f_k^*) (2\nu_k - \sqrt{\nu_k^2 + \Delta_k^2}), \quad /54/$$

где $\nu_k = \epsilon_k^0 - \mu$, $1 - f_k^* = f_k$ и $f_k = \{ \exp(-\beta \sqrt{\nu_k^2 + \Delta_k^2}) + 1 \}^{-1}$ /55a,б,в/

После перемножения и перегруппировки /54/ можно переписать в виде

$$E_s = - \sum (\nu_k + \sqrt{\nu_k^2 + \Delta_k^2}) f_k + \sum (3\nu_k - 3\sqrt{\nu_k^2 + \Delta_k^2} + \frac{2\Delta_k^2}{\sqrt{\nu_k^2 + \Delta_k^2}}) (1 - f_k^*). \quad /56/$$

Тогда при $T=O K$ разность между полными квазичастичными энергиями КВЭ в сверхпроводнике и нормальном металле должна определяться формулой

$$E_s^0 - E_n^0 = 2N(\mu) [(\omega_D)^2 - (\omega_D) \sqrt{(\omega_D)^2 + \Delta^2}], \quad /57/$$

где $N(\mu)$ - плотность состояний КВЭ с определенным спином на их ФП. Из /57/ видно, что в модели Тода переход металла из нормального в сверхпроводящее состояние энергетически выгоден. Кроме того, благодаря неравенству $\omega_D \gg \Delta$ разность $E_s^0 - E_n^0$ в /57/ можно записать как

$$E_s^0 - E_n^0 = -N(\mu) \Delta^2. \quad /58/$$

Формула /58/ показывает, что в модели Тода энергетическая выгодность сверхпроводящего состояния равна удвоенному выигрышу энергии в теории БКШ^{/17/} и в эксперименте. Кроме того, нельзя рассматривать спектр /53/ как спектр КВЭ в нормальном металле.

Итак, приведенное выше отклонение показало, что полученный нами результат описывает только изменение энергии КВЭ в нормальном металле при $T \rightarrow O K$ благодаря ЭФВ. Неустойчивость энергетического спектра КВЭ можно отнести за счет пренебрежения влиянием зоны на энергетический спектр фононов. Действи-

тельно, в нашей модели при больших $q \sim q_m$, где $\omega_q \sim \omega_0$, плотность состояний фононов росла неограниченно. В действительности же, благодаря учету границы зоны Бриллюэна для фононов, их плотность состояний уменьшается при $q \rightarrow q_m$. Поэтому можно надеяться, что учет зонной структуры в фононном спектре приведет к уменьшению влияния ЭФВ на спектр КВЭ в области $q \sim q_m$ /или $\omega_q \sim \omega_0$ / и устранил неоднозначность между энергетическими спектрами "голых" и "одетых" КВЭ. Тогда можно было бы утверждать, что влияние ЭФВ на спектр КВЭ можно учесть путем изменения их эффективной массы. Как видно из рис. 4, эффективная масса "одетых" КВЭ почти постоянная в большом интервале энергии / $|\epsilon_k^0 - \mu| \leq \omega_0$ /. Поэтому ее можно было бы получить с помощью равенства

$$m^*(\eta) = m \left\{ 1 + \frac{2\lambda_0}{3(2 + \lambda_0 + \lambda_0 \eta^2)} \left[1 + \frac{(1-\eta^3)}{\eta} \ln \left| \frac{1+\eta}{1-\eta} \right| + 2\eta^2 \ln \left(\frac{1+\eta}{\eta} \right) \right] \right\},$$

которое при $\eta \rightarrow 0$ дает

$$m^* = \lim_{\eta \rightarrow 0} m^*(\eta) = m \left(1 + \frac{2\lambda_0}{2 + \lambda_0} \right).$$

Из /60/ видно, что при $\lambda_0 \ll 1$ полученный нами ответ совпадает с ответом Мигдала ($m^* = m(1 + \lambda_0)$).

Проведенные выше исследования показывают, что учет экранирования константы ЭФВ самим ЭФВ сильно уменьшает изменение энергетического спектра КВЭ благодаря ЭФВ, хотя и не устраняет неоднозначности в их спектре. Кроме того, учет экранировки константы ЭФВ самим ЭФВ устраняет искусственную особенность в энергетическом спектре фононов /неустойчивость решетки/. Полученная нами особенность в энергетическом спектре фононов показывает, насколько необходим правильный учет влияния зоны на плотность состояний фононов. Увеличение эффективной массы КВЭ /60/ увеличивает их плотность состояний на ФП / $N^*(\mu^*) = (1+\lambda)N(\mu)$ /, снижает их ферми-уровень / $\mu^* = \mu(1+\lambda)$ / и уменьшает их полную энергию.

Литература

1. Займан Дж. Электроны и фононы. ИЛ, М., 1962.
2. Каллуей Дж. Теория энергетической зонной структуры. "Мир", М., 1969.

3. Cracknell A.P. Adv.Phys., 1969, 18, 681; 1971, 20, 1.
4. Крэкнелл А., Уонг К. Поверхность Ферми. Атомиздат, М., 1978.
5. Gold A.V. Phys.Trans.Roy.Soc., 1958, A251, 85.
6. Harrison W.A. Phys.Rev., 1959, 116, 555; 1960, 118, 1182, 1190.
7. Born M., Openheimer J.R. Ann.Phys., 1928, 84, 457.
8. Debay P., Verh.Deutsch.Ges., 1913, 15, 678, 738, 847. Ann.Phys., 1914, 43, 49.
9. Waller I. Zsch.Phys., 1923, 17, 398; 1928, 51, 213; Dissertazion Uppsala, 1925.
10. Ventzel G. Phys.Rev., 1951, 83, 168.
11. Huang K. Proc. Phys.Soc., 1951, A64, 867.
12. Frohlich H. Proc.Roy.Soc., 1954, A223, 296.
13. Тябликов С.В., Толмачов В.В. ЖЭТФ, 1958, 34, с.1254.
14. Мигдаль А.Б. ЖЭТФ, 1958, 34, с. 1438.
15. Афанасьев А.М., Казан Ю.М. ЖЭТФ, 1962, 43, с.1456.
16. Cooper L.N. Phys.Rev., 1956, 104, 1189.
17. Bardeen J., Cooper L.N., Schriffer J.R. Phys.Rev., 1957, 106, 162; 1957, 108, 1175.
18. Боголюбов Н.Н. ЖЭТФ, 1958, 34, с. 58, 73. Nuovo Cimento, 1958, 7, 798.
19. Valatin J.G. Nuovo Cimento, 1958, 7, 843.
20. Горьков Л.П. ЖЭТФ, 1958, 34, с. 735.
21. Frohlich H. Phys.Rev., 1950, 79, 845.
22. Frohlich. Proc.Roy.Soc., 1952, A215, 291.
23. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Статистическая физика, "Наука" М., 1978, ч.II.
24. Харрисон У. Теория твердого тела. "Мир", М., 1972.
25. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. "Мир", М., 1968.
26. Маттук Р. Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел. "Мир", М., 1969.
27. Morikazu Toda. Proc.In.C.Th.Phys., Kyoto & Tokyo, September, 1953.
28. Хейне В. В кн: Физика металлов, т.I. Электроны. /под ред. Дж.Займана/, "Мир", М., 1972, с.11.

Рукопись поступила в издательский отдел
18 декабря 1978 года