объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17 - 12956

Г.М.Вуйичич,[1] З.К.Петру,[2] Н.М.Плакида

К ВЫВОДУ УРАВНЕНИЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ В ЭЛЕКТРОН-ИОННОЙ МОДЕЛИ МЕТАЛЛА

Направлено в ТМФ

[1] Институт ядерных наук им. Б.Кидрича, Белград /СФРЮ/.

[2] Институт теоретической физики Вроцлавского университета, Вроцлав /ПНР/.

1979

В связи с поиском сверхпроводящих материалов с высокой температурой перехода T_c возникла необходимость в выводе уравнений сверхпроводимости для общей модели металла [4], исходя из полученных в оригинальных работах [1-3] уравнений для простой модели Фрелиха. Среди большого числа работ на эту тему укажем работы [5,6], где была рассмотрена наиболее последовательная модель электрон-фононной системы в металле с учетом примесей в решетке и ангармонизма колебаний. В работе [7] была рассмотрена модель сверхпроводника со структурно-неустойчивой решеткой.

В настоящей работе, методической по своему характеру, уравнения сверхпроводимости получены для электрон-ионной модели металла при произвольном виде взаимодействия электронов с решеткой и с учетом прямого кулоновского взаимодействия электронов. В отличие от [6], используется более простой метод уравнений движения для двухвременных функций Грина [8], в котором процедура расцепления проводится только для приближенного вычисления массового оператора матричной электронной функции Грина. Пренебрегая перенормировкой вершины в электрон-ионном взаимодействии, получили при этом замкнутую систему уравнений. Эффективное взаимодействие электронов характеризуется полным динамическим структурным формфактором решетки. Последний может быть вычислен для определенной модели решетки или определен экспериментально по рассеянию нейтронов, что позволяет изучить влияние динамики решетки на сверхпроводящие свойства в рамках единой системы уравнений.

1. Гамильтониан электрон-ионной модели металла

Полный гамильтониан электрон-ионной системы представим в виде суммы

$$H = H_e + H_i + H_{e-i}\ , \tag{1}$$

где электронная часть гамильтониана

$$H_e = \sum_p \epsilon_p \psi_p^+ \tau_3 \psi_p + \frac{1}{2} \sum_{pp'q} v(q) (\psi^+_{p-q} \tau_3 \psi_p)(\psi^+_{p'+q} \tau_3 \psi_{p'}) \tag{2}$$

записана в представлении вторичного квантования с помощью операторов Намбу

$$\psi_p = \begin{pmatrix} a_{p\uparrow} \\ a^+_{-p\downarrow} \end{pmatrix}, \quad \psi_p^+ = (a^+_{p\uparrow} \;\; a_{-p\downarrow}) \tag{3}$$

и матриц Паули

$$\tau_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Кулоновское взаимодействие $v(q) = 4\pi e^2/q^2 V$, V – объем кристалла; $v(0) = 0$ в силу электронейтральности всей системы. Энергия блоховских электронов ϵ_p определяется в усредненном по колебаниям ионов самосогласованном поле решетки, так что электрон-фононное взаимодействие описывается рассеянием электронов только на флуктуациях плотности ионного заряда:

$$H_{e-i} = \sum_{pp'q} (\psi^+_p \tau_3 \psi_{p'}) \sum_\kappa V_\kappa (q|p,p') \rho_\kappa(q), \tag{5}$$

где фурье-компонента флуктуаций плотности ионов сорта κ равна

$$\rho_\kappa(q) = \frac{1}{N} \sum_\ell e^{i\vec{q}(\vec{\ell} + \vec{x}_\kappa)} \{ e^{i\vec{q}\vec{u}_{\ell\kappa}} - \langle e^{i\vec{q}\vec{u}_{\ell\kappa}} \rangle \}, \tag{6}$$

$u_{\ell\kappa}$ – смещение иона сорта κ, имеющего координату x_κ в ℓ-той элементарной ячейке, полное число которых равно N. Усреднение $\langle ... \rangle$ в (6) проведено по равновесному состоянию кристалла.

В дальнейшем рассматриваются уравнения только для электронных функций Грина, при выводе которых явный вид матричного элемента электрон-ионного потенциала $V_\kappa(q|p,p')$ и гамильтониана H_i не понадобится. Для упрощения записи мы будем, однако, пользоваться приближением локального псевдопотенциала $V_\kappa(q)$, когда

$$V_\kappa(q|p,p') = V_\kappa(q) \Delta(\vec{p}\,' - \vec{p} - \vec{q}), \tag{7}$$

где $\Delta(\vec{k}) = 1$ при $\vec{k} = \vec{\tau}$ – вектору обратной решетки, $\Delta(\vec{k}) = 0$ при $\vec{k} \neq \vec{\tau}$. Рассеяние электронов на атомах примесей в металле также можно учесть в выражении (5). Влияние магнитных примесей требует более общего рассмотрения.

2. Электронные функции Грина

Рассмотрим уравнения движения для электронных функций Грина, которые в матричной записи (3) представим в следующем виде:

$$G_p(t-t') = \begin{Bmatrix} \langle\langle a_{p\uparrow} | a^+_{p\uparrow} \rangle\rangle & \langle\langle a_{p\uparrow} | a_{-p\downarrow} \rangle\rangle \\ \langle\langle a^+_{-p\downarrow} | a^+_{p\uparrow} \rangle\rangle & \langle\langle a^+_{-p\downarrow} | a_{-p\downarrow} \rangle\rangle \end{Bmatrix} = \langle\langle \psi_p(t) | \psi_p^+(t') \rangle\rangle\ , \tag{8}$$

где приняты обычные обозначения для двухвременных функций Грина [8]. Дифференцируя (8) по времени t с учетом гамильтониана (1), (2), (5) для фурье-компонент функций Грина, получим

$$(\omega \tau_0 - \epsilon_p \tau_3) G_p(\omega) =$$

$$= \tau_0 + \sum_q v(q) \langle\langle \rho_q \tau_3 \psi_{p-q} | \psi_p^+ \rangle\rangle_\omega +$$

$$+ \sum_{q\kappa} V_\kappa(q) \langle\langle \rho_\kappa(q) \tau_3 \psi_{p-q} | \psi_p^+ \rangle\rangle_\omega , \qquad (9)$$

где оператор плотности электронов ($q \neq 0$)

$$\rho_q = \sum_{p\sigma}' a^+_{p\sigma} a_{p+q\sigma} = \sum_p (\psi_p^+ \tau_3 \psi_{p+q}). \qquad (10)$$

Чтобы отделить перенормировку энергии электронов в приближении среднего поля Хартри-Фока-Боголюбова /9/ (с учетом аномальных средних) от перенормировки в высших порядках, обусловленной неупругим рассеянием, введем далее неприводимые части функций Грина. Для этого представим функции Грина в правой части (9) при кулоновском взаимодействии в виде

$$\langle\langle \rho_q a_{p-q\sigma} | \psi_p^+ \rangle\rangle = \langle\langle (\rho_q a_{p-q\sigma})^{ir} | \psi_p^+ \rangle\rangle +$$

$$+ \sum_{p'\sigma'} \{ \delta_{q,0} \langle a^+_{p'\sigma'} a_{p'\sigma'} \rangle \langle\langle a_{p-q\sigma} | \psi_p^+ \rangle\rangle - \qquad (11)$$

$$- \delta_{p',p-q} \delta_{\sigma,\sigma'} \langle a^+_{q-q,\sigma} a_{p-q,\sigma} \rangle \langle\langle a_{p\sigma} | \psi_p^+ \rangle\rangle +$$

$$+ \delta_{-p',p} \delta_{-\sigma',\sigma} \langle a_{-(p-q),-\sigma} a_{p-q,\sigma} \rangle \langle\langle a^+_{-p,-\sigma} | \psi_p^+ \rangle\rangle \},$$

$$\langle\langle a^+_{-p+q,-\sigma} \rho_q | \psi_p^+ \rangle\rangle = \langle\langle (a^+_{-p+q,-\sigma} \rho_q)^{ir} | \psi_p^+ \rangle\rangle +$$

$$+ \sum_{p'\sigma'} \{ \delta_{q,0} \langle a^+_{p'\sigma'} a_{p'\sigma'} \rangle \langle\langle a^+_{-p+q,-\sigma} | \psi_p^+ \rangle\rangle - \qquad (12)$$

$$- \delta_{-p',p} \delta_{-\sigma',\sigma} \langle a^+_{-p+q,-\sigma} a_{-p+q,-\sigma} \rangle \langle\langle a^+_{-p,-\sigma} | \psi_p^+ \rangle\rangle +$$

$$+ \delta_{p',q-q} \delta_{\sigma',\sigma} \langle a^+_{-p+q,-\sigma} a^+_{p-q,\sigma} \rangle \langle\langle a_{p\sigma} | \psi_p^+ \rangle\rangle \}.$$

Выбор неприводимых (ir) частей функций Грина в (11), (12) однозначно определяется из условий

$$\langle [(\rho_q a_{p-q\sigma})^{ir}, \psi_p^+]_+ \rangle = 0,$$

$$\langle [(a^+_{-p+q,-\sigma} \rho_q)^{ir}, \psi_p^+]_+ \rangle = 0, \qquad (13)$$

которые приводят к обращению в нуль неоднородных членов в уравнениях для неприводимых функций Грина (см.(17)).

Используя (11), (12), приходим к уравнению для функции Грина (9) в виде

$$(\omega\tau_0 - \epsilon_p \tau_3 - \Sigma_p^c) G_p(\omega) =$$

$$= \tau_0 + \sum_q v(q) \langle\langle (N_q \tau_3 \psi_{p-q})^{ir} | \psi_p^+ \rangle\rangle_\omega , \qquad (14)$$

где введена фурье-компонента $N_q (q \neq 0)$ флуктуаций плотности полного заряда в решетке:

$$v(q) N_q = v(q) \rho_q + \sum_\kappa V_\kappa(q) \rho_\kappa(q) \qquad (15)$$

и массовый оператор в приближении среднего поля:

$$\Sigma_p^c = \sum_{p'} v(p-p') \tau_3 \langle \psi_{p'} \psi_{p'}^+ \rangle \tau_3 . \qquad (16)$$

Для вычисления неприводимой матричной функции Грина в (14) воспользуемся далее методом составления уравнений движения по второму времени t' (см., например, /10/). Учитывая (13), для фурье-компоненты функции Грина получаем уравнение

$$\langle\langle (N_q \tau_3 \psi_{p-q})^{ir} | \psi_p^+ \rangle\rangle_\omega (\omega\tau_0 - \epsilon_p \tau_3) =$$

$$- \sum_{q'} v(q') \langle\langle (N_q \tau_3 \psi_{p-q})^{ir} | \psi_{p-q'}^+ \tau_3 N_{-q'} \rangle\rangle . \qquad (17)$$

Повторяя в (17) аналогично (11),(12) процедуру выделения неприводимой части относительно операторов в правой части функции Грина, получим

$$\langle\langle (N_q \tau_3 \psi_{p-q})^{ir} \,|\, \psi_p^+ \rangle\rangle_\omega (\omega\tau_0 - \epsilon_p \tau_3 - \Sigma_p^c) =$$

$$= \sum_{q'} v(q') \langle\langle (N_q \tau_3 \psi_{p-q})^{ir} \,|\, (\psi^+_{p-q'} \tau_3 N_{-q'})^{ir} \rangle\rangle_\omega . \qquad (18)$$

Вводя нулевую функцию Грина

$$G_p^\circ(\omega) = (\omega\tau_0 - \epsilon_p \tau_3 - \Sigma_p^c)^{-1} , \qquad (19)$$

получаем решение системы уравнений (14), (18) в виде

$$G_p(\omega) = G_p^\circ(\omega) + G_p^\circ(\omega) T_p(\omega) G_p^\circ(\omega). \qquad (20)$$

Матрица рассеяния определяется неприводимой частью многочастичной функции Грина в (18):

$$T_p(\omega) = \sum_{qq'} v(q) v(q') \langle\langle (N_q \tau_3 \psi_{p-q})^{ir} \,|\, (\psi^+_{p-q'} \tau_3 N_{-q'})^{ir} \rangle\rangle . \qquad (21)$$

Уравнение (20) можно записать также в виде уравнения Дайсона:

$$G_p(\omega)^{-1} = G_p^\circ(\omega)^{-1} - \Sigma_p(\omega), \qquad (22)$$

если ввести массовый оператор $\Sigma_p(\omega)$, который связан с матрицей рассеяния уравнением

$$T_p(\omega) = \Sigma_p(\omega) + \Sigma_p(\omega) G_p^\circ(\omega) T_p(\omega). \qquad (23)$$

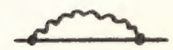
Как следует из этого уравнения, массовый оператор является связанной (или "собственной") частью матрицы рассеяния, в которой не содержится одиночных нулевых функций Грина. Следовательно, для массового оператора в (22) находим точное представление через многочастичную функцию Грина

$$\Sigma_p(\omega) = \sum_{qq'} v(q) v(q') \langle\langle (N_q \tau_3 \psi_{p-q})^{ir} \,|\, (\psi^+_{p-q'} \tau_3 N_{-q'})^{ir} \rangle\rangle^{(c)} . \qquad (24)$$

В результате получаем наиболее общее выражение для электронной функции (22) с учетом (16), (19) в сверхпроводнике при произвольном электрон-ионном взаимодействии (5).

3. Приближенное вычисление массового оператора

Для получения замкнутой самосогласованной системы уравнений для массового оператора (24) необходимо найти приближенное выражение его через функцию Грина (8). Массовый оператор (24) описывает неупругое рассеяние электронов (упругая часть содержится в Σ_p^c (16)) на флуктуациях плотности полного электрон-ионного заряда в решетке и схематически может быть представлен диаграммой:

$\Sigma_p(\omega) =$  $\approx$  , (25)

где волнистая линия соответствует распространению флуктуаций плотности заряда N_q, а прямая - распространению выделенного электрона (дырки). Если пренебречь перенормировкой вершины, то есть корреляцией в распространении этих двух типов возбуждений, то получается приближенное выражение для массового оператора, схематически представленное в правой части (25), где волнистой линии соответствует полная функция Грина $\langle\langle N_q | N_{-q} \rangle\rangle$, описывающая эффективное запаздывающее взаимодействие электронов в решетке, а прямой линии - полная функция Грина (22). Нетрудно получить аналитическое выражение для массового оператора в этом приближении "двух взаимодействующих мод", если записать спектральное представление для (24) в виде

$$\Sigma_p(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} (1 + e^{-\beta\omega'}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{i\omega' t} \sum_{qq'} v(q) v(q') \times \qquad (26)$$

$$\times \langle (N_q(t) \tau_3 \psi_{p-q}(t))^{ir} \,|\, (\psi^+_{p-q'} \tau_3 N_{-q'})^{ir} \rangle^{(c)}$$

и в соответствии с (25) провести расцепление:

$$\langle (N_q(t)\tau_3\psi_{p-q}(t))^{ir}\,|\,(\psi^+_{p-q'}\tau_3 N_{-q'})^{ir}\rangle^{(c)} \approx$$
$$\approx \langle N_q(t)N_{-q'}\rangle\,\tau_3\,\langle\psi_{p-q}(t)\psi^+_{p-q'}\rangle\,\tau_3 \; . \qquad (27)$$

Заметим, что согласно определению неприводимых частей в (11), (12) спаривание операторов, относящихся к одному моменту времени, дает нулевой вклад - эти средние уже учтены в массовом операторе в приближении среднего поля (16).

Пользуясь далее спектральными представлениями для корреляционных функций в (27):

$$\langle\psi_p(t)\psi^+_{p'}\rangle = -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\pi}\,\frac{e^{-i\omega t}}{1+e^{-\beta\omega}}\,\mathrm{Im}\langle\langle\psi_p|\psi^+_{p'}\rangle\rangle_{\omega+i\delta}\,, \qquad (28)$$

$$\langle N_q(t)N_{q'}\rangle = -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\pi}\,\frac{e^{-i\omega t}}{1-e^{-\beta\omega}}\,\mathrm{Im}\langle\langle N_q|N_{q'}\rangle\rangle_{\omega+i\delta} \qquad (29)$$

и подставляя (27) в (26), получаем аналитическое выражение для массового оператора:

$$\Sigma_p(\omega) = \frac{1}{2\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega_1 d\omega_2}{\omega-\omega_1-\omega_2}\left(\mathrm{th}\frac{\beta\omega_1}{2} + \mathrm{cth}\frac{\beta\omega_2}{2}\right)\times$$
$$\times\sum_{qq'} v(q)v(q')\,\mathrm{Im}\langle\langle N_q|N_{-q'}\rangle\rangle_{\omega_2+i\delta}\,\tau_3\,\times \qquad (30)$$
$$\times\;\mathrm{Im}\langle\langle\psi_{p-q}|\psi^+_{p-q'}\rangle\rangle_{\omega_1-i\delta}\,\tau_3 \; .$$

Эффективное электрон-электронное взаимодействие, определяемое в (30) функцией Грина флуктуаций плотности заряда, может быть выражено через полную диэлектрическую проницаемость электрон-ионной системы согласно соотношению (см. [4] или, например, [11]):

$$v(q)v(q')\langle\langle N_q|N_{-q'}\rangle\rangle_\omega = v(q)\left[\epsilon^{-1}_{e-i}(q,q',\omega) - \delta_{q,q'}\right]. \qquad (31)$$

При вычислении последней можно пренебречь сверхпроводящими корреляциями, поскольку они оказывают слабое влияние на коллективные колебания плотности заряда в решетке. В частности, в стандартном приближении случайных фаз (ПСФ) получаем (см., например, [11])

$$v(q)v(q')\langle\langle N_q|N_{-q'}\rangle\rangle_\omega = \delta_{qq'}\,v(q)(\epsilon^{-1}(q,\omega)-1) +$$
$$+\sum_{\kappa\kappa'} V_\kappa(q,\omega)V_{\kappa'}(-q',\omega)\langle\langle\rho_\kappa(q)|\rho_{\kappa'}(-q')\rangle\rangle_\omega\,, \qquad (32)$$

где диэлектрическая проницаемость электронного газа в ПСФ имеет вид

$$\epsilon(q,\omega) = 1 - v(q)\sum_p\frac{n_p - n_{p+q}}{\omega-(\epsilon_{p+q}-\epsilon_p)}\,, \qquad (33)$$

n_p -ферми-распределение. Экранированный электрон-ионный потенциал $V_\kappa(q,\omega) = V_\kappa(q)/\epsilon(q,\omega)$. Подставляя (32) в (30) и учитывая (16), полный массовый оператор представим в виде

$$\Sigma^c_p + \Sigma_p(\omega) = -\sum_{qq'}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega_1}{2\pi}\{V_c(q|\omega,\omega_1)\delta_{qq'} +$$
$$+ V_{ph}(q,q'|\omega,\omega_1)\}\tau_3\,\mathrm{Im}\langle\langle\psi_{p-q}|\psi^+_{p-q'}\rangle\rangle_{\omega_1+i\delta}\,\tau_3\,, \qquad (34)$$

где эффективное кулоновское взаимодействие

$$V_c(q|\omega,\omega_1) = v(q)\Big\{\mathrm{th}\frac{\beta\omega_1}{2} -$$
$$-\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\omega-\omega_1-\omega'}\left(\mathrm{th}\frac{\beta\omega_1}{2}+\mathrm{cth}\frac{\beta\omega'}{2}\right)\mathrm{Im}\frac{1}{\epsilon(q,\omega'+i\delta)}\Big\} =$$

$$= \frac{v(q)}{\epsilon(q,\omega-\omega_1)}\,\mathrm{th}\frac{\beta\omega_1}{2} - \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\omega-\omega_1-\omega'}\,\mathrm{cth}\frac{\beta\omega'}{2}\,\mathrm{Im}\frac{1}{\epsilon(q,\omega'+i\delta)}. \qquad (35)$$

Последнее соотношение получено на основе спектрального представления для обратной диэлектрической проницаемости. Первый член в нем описывает экранированное кулоновское взаимодействие , а второй, содержащий $\mathrm{cth}(\beta\omega'/2)$, – вклад плазмонов, который обычно не учитывается ввиду его малости по параметру ω_1/ω_0 по сравнению с первым, ω_0 – плазменная частота (ср. с /4/).

Эффективное взаимодействие электронов через колебание решетки имеет вид

$$V_{ph}(q,q'|\omega,\omega_1) = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\omega-\omega_1-\omega'}\left(\mathrm{th}\frac{\beta\omega_1}{2} + \mathrm{cth}\frac{\beta\omega'}{2}\right)\times \qquad (36)$$

$$\times \sum_{\kappa\kappa' qq'} V_\kappa(q,\omega')V_{\kappa'}(-q',\omega')\,\mathrm{Im}\langle\langle\rho_\kappa(q)|\rho_{\kappa'}(-q')\rangle\rangle_{\omega'+i\delta} ,$$

оно отличается от общепринятого выражения (см./4/) заменой однофононной функции Грина на полный динамический структурный формфактор решетки – временную корреляционную функцию операторов плотности $\rho_\kappa(q)$ (6). Подобное же выражение на основе техники функционального дифференцирования было получено в /6/, где рассматривалось влияние ангармонизма на температуру перехода T_c. Дальнейший анализ полученной системы уравнений (22), (34)-(36), в частности, вывод уравнения для T_c может быть проведен стандартными методами (см., например, /4/) и поэтому здесь не рассматривается.

В заключение обсудим, однако, важный вопрос о влиянии структурной неустойчивости решетки на сверхпроводимость, которое экспериментально наблюдается в большом числе сплавов и соединений. Структурная неустойчивость характеризуется появлением в спектре колебаний решетки сильноангармонических мод, описание которых в рамках обычной ангармонической теории возмущений, как например, в /6/ , малоэффективно. Поэтому в этом случае необходимо использовать более общие модели для описания

динамики решетки, анализ которых с помощью общей формулы (36) особенно удобен. В частности, в работе/7/ на основе полученных здесь уравнений было исследовано влияние квазилокальных возбуждений на температуру перехода T_c. Для описания динамики решетки в этой модели было использовано псевдоспиновое представление, широко применяющееся при изучении структурных переходов (см., например,/12/).

Литература

1. Боголюбов Н.Н. ЖЭТФ, 1958, 34, с.58;
Боголюбов Н.Н., Толмачев В.В., Ширков Д.В. Новый метод в теории сверхпроводимости. Изд-во АН СССР, 1958.
2. Элиашберг Г.М. ЖЭТФ, 1960, 38, с.966.
3. Зубарев Д.Н. ДАН СССР, 1960, 132, с.1055.
4. Проблема высокотемпературной сверхпроводимости /под ред. В.Л.Гинзбурга, Д.А.Киржница/. "Наука," М., 1977.
5. Максимов Е.Г. ЖЭТФ, 1969, 57, с.1660.
6. Каракозов А.Е., Максимов Е.Г. ЖЭТФ, 1978, 74,с.681.
7. Вуйичич Г. и др. ОИЯИ, Р17-12561,Дубна, 1979;
Phys.Lett.,1979, 73A, N 6.
8. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. ДАН СССР, 1959, 126, с.53;
Зубарев Д.Н. УФН, 1960, 71, с.71.
9. Боголюбов Н.Н. ДАН СССР, 1958, 119, с.244.
10. Церковников Ю.А. ДАН СССР, 1962, 143, с.832;
Маилян Г.Л., Петру З.К. ТМФ, 1976, 27, с.233.
11. Плакида Н.М. ДАН СССР, 1965, 161, с.88.
12. Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. "Мир", М., 1975, гл.5.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 ноября 1979 года.