сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-80-741

А.Холас[*], Н.М.Плакида, А.Л.Кузамский

САМОСОГЛАСОВАННАЯ ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛАХ

[*] Институт ядерных исследований, Сверк, Польша.

1980

В настоящей работе вычисляется ренормированный, за счет взаимодействия с фононами, спектр электронов для модели переходного металла Барисича-Лаббе-Фриделя /БЛФ/ [1]. В работе [1] был записан гамильтониан электрон-фононного взаимодействия для переходного металла, который представляет собой прямое обобщение хорошо известного гамильтониана Хаббарда [2] для случая колеблющейся решетки. Последовательное самосогласованное описание взаимодействующих электронной и фононной подсистем в реальных металлах и их соединениях - одна из центральных проблем в физике твердого тела [3,4]. Для простых металлов, где справедливо приближение почти свободных электронов, разработаны эффективные методы решения этой проблемы, в которых используется концепция псевдопотенциала [4,5].

Особые свойства переходных металлов и их соединений в значительной мере определяются доминирующей ролью d-электронов [6]. Волновые функции d-электронов сильно локализованы и, как правило, должны описываться в приближении сильной связи. Гамильтониан БЛФ [1] описывает взаимодействие сильно связанных d-электронов с колебаниями решетки переходного металла на основе предположения о том, что волновые функции d-электронов "жестко" следуют за движущимися ионами. В отличие от других работ /см., например, [7] / гамильтониан БЛФ содержит в явном виде характерные параметры переходного металла. Идея о жесткой связи сильно локализованных электронов с движущимися ионами использовалась для вычисления матричных элементов электрон-фононного взаимодействия в одномерных системах [8,9]. В общем случае этот подход был развит и обоснован в работах [1,10-15]. Рассчитывались квадрат матричного элемента электрон-фононного взаимодействия в приближении сильной связи и физические величины, которые через него выражаются, - энергия связи [1,11,14] и параметр Мак-Миллана, определяющий температуру сверхпроводящего перехода [11-14]. В работе [12] также вычислена парамагнитная восприимчивость, а в [11,15] - особенности фононного спектра квазиодномерных систем.

В данной работе найден ренормированный спектр сильно связанных электронов в модели БЛФ [1] в приближении хаотических фаз, то есть в зонном пределе для модели Хаббарда [16,17]. С помощью метода уравнений движения для двухвременных функций Грина [18,19] /используется прием дифференцирования функции Грина по первому и второму времени [17,20-22] / получена самосогласованная система уравнений для электрон-фононной системы. Приближенное решение этой системы позволяет получить явные аналитические выражения для ренормированного электронного и фононного спектров.

1. ГАМИЛЬТОНИАН ЭЛЕКТРОН-ИОННОЙ МОДЕЛИ ПЕРЕХОДНОГО МЕТАЛЛА

Следуя работе /1/, рассмотрим в однозонном приближении систему сильно связанных d-электронов, описываемую гамильтонианом Хаббарда /2/:

$$H_e = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a^+_{i\sigma} a_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} , \qquad /1/$$

где $a^+_{i\sigma}$, $a_{i\sigma}$ - операторы рождения и уничтожения электронов на узле i; U - энергия кулоновского отталкивания электронов с противоположными спинами на одном узле и $t_{ij} = N^{-1} \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \exp[i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)]$ - интеграл перескока.

Рассмотрим теперь влияние малых колебаний ионов $\vec{u}_i$ относительно равновесных положений $\vec{R}_i$ на электронную подсистему металла с гамильтонианом /1/. Предположим, в соответствии с приближением сильной связи, что волновые функции d-электронов мало изменяются при смещении ионов и, следовательно, для деформированной решетки остаются справедливыми соотношения квазиортогональности:

$$\langle \phi(\vec{r} - \vec{R}_j - \vec{u}_j) | \phi(\vec{r} - \vec{R}_i - \vec{u}_i) \rangle \approx \delta_{ij} . \qquad /2/$$

Из /2/ следует, что можно ввести операторы рождения и уничтожения электронов $a^+_{j\sigma}$ и $a_{j\sigma}$ для деформированной решетки, с помощью которых гамильтониан /1/ можно записать в следующем виде:

$$H = \sum_{j\alpha\delta_\alpha\sigma} t_{j,\delta_\alpha} a^+_{j\sigma} a_{j+\delta_\alpha,\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{j\sigma} n_{j\sigma} n_{j-\sigma} . \qquad /3/$$

Для определенности будем рассматривать случай простой кубической решетки Браве и учитывать взаимодействие только между ближайшими соседями. Тогда величина

$$t_{j,\delta_\alpha} = t(\vec{a}_{\delta_\alpha} + \vec{u}_{j+\delta_\alpha} - \vec{u}_j) = \int d^3 r \, \phi(\vec{r} + \vec{a}_{\delta_\alpha} + \vec{u}_{j+\delta_\alpha} - \vec{u}_j) \tilde{V}_s(\vec{r}) \phi(\vec{r}) \qquad /4/$$

представляет собой интеграл перескока между узлом j и одним из двух соседних узлов $\delta_\alpha (= \pm 1)$, лежащих на решеточной оси $\vec{a}_\alpha$, где $\vec{a}_\alpha (\alpha = x, y, z)$ - единичные векторы решетки и $\vec{a}_{\delta_\alpha} = \vec{R}_{j+\delta_\alpha} - \vec{R}_j$.

Оператор $\tilde{V}_s(\vec{r})$ - самосогласованный одноузельный потенциал в недеформированной решетке /1/.

Для малых смещений u_j имеем

$$t_{j,\delta_\alpha} = t(\vec{a}_\alpha) + \frac{\partial t(\vec{R})}{\partial \vec{R}}\Big|_{\vec{R}=\vec{a}_{\delta_\alpha}} (\vec{u}_{j+\delta_\alpha} - \vec{u}_j) + \dots . \qquad /5/$$

Далее примем во внимание, что для сильно связанных d - электронов

$$\frac{\partial t(\vec{R})}{\partial \vec{R}}\Big|_{\vec{R}=\vec{a}_{\delta_\alpha}} = -q_0\, t(\vec{a}_\alpha)\frac{\vec{a}_{\delta_\alpha}}{a_\alpha} . \qquad /6/$$

Здесь q_0 - слейтеровский коэффициент, характеризующий экспоненциальное убывание радиальной части d-функции /q_0 обычно порядка $1\,\text{Å}^{-1}$ /.

Учитывая /5/, /6/ и переходя в k-пространство, перепишем оператор /3/ в следующем виде:

$$H = H_e + H_{e-i} ,$$

где

$$H_e = \sum_{k\sigma} \epsilon_k a^+_{k\sigma} a_{k\sigma} + \frac{U}{2N}\sum_{k_1 k_2 q} a^+_{k_1+q,\sigma} a_{k_1,\sigma} a^+_{k_2-q,-\sigma} a_{k_2,-\sigma} , \qquad /7/$$

$$H_{e-i} = \frac{2iq_0}{\sqrt{NM}} \sum_{\alpha\sigma} \sum_{\vec{k}\,\vec{q}\nu} t(\vec{a}_\alpha) e^\alpha_\nu(\vec{q}) \{\sin \vec{a}_\alpha \cdot \vec{k} - \sin \vec{a}_\alpha (\vec{k}+\vec{q})\} Q_{\vec{q}\nu} a^+_{k+q\sigma} a_{k\sigma} . \qquad /8/$$

Здесь

$$\epsilon_{\vec{k}} = 2\sum_\alpha t(\vec{a}_\alpha)\cos(\vec{k}\cdot\vec{a}_\alpha) \qquad /9/$$

- закон дисперсии сильно связанных d -электронов; N - число атомов в решетке; M - масса иона; $\vec{e}_\nu(q)$ - векторы поляризации $(\nu = 1,2,3)$; $Q_{q\nu}$ - нормальная координата движущегося иона.

Ионную подсистему переходного металла описываем оператором

$$H_i = \frac{1}{2}\sum_{\vec{q}\nu} (P^+_{\vec{q}\nu} P_{\vec{q}\nu} + \omega_0^2(\vec{q}\nu) Q^+_{\vec{q}\nu} Q_{\vec{q}\nu}) , \qquad /10/$$

где $\omega_0^2(\vec{q}\nu)$ - частоты фононов без учета d -электронов.

Заметим, что в модели переходного металла БЛФ /1/, как и в гамильтониане Хаббарда /1/, s - электроны явно не учитываются. Однако косвенно их влияние принято во внимание. Считается, что все три ветви колебаний $\omega_0^2(q\nu)$ соответствуют акустическим частотам[4],а величина кулоновского отталкивания U перенормирована за счет экранировки s-электронами.

Полный гамильтониан электрон-ионной модели переходного металла БЛФ является суммой операторов /7/,/8/, /10/. Наиболее серьезные допущения, которые делаются в этой модели, следующие: 1/ пренебрегается неортогональностью d-состояний на разных узлах; 2/ считается, что одноузельный потенциал в идеальной (i) решетке $V_s^i(r)$ равен одноузельному потенциалу в деформированной (d) решетке $\tilde{V}_s^d(r)$ и 3/ пренебрегается избыточной зарядовой плотностью, возникающей в элементарной ячейке за счет деформации решетки, то есть предполагается, что $\langle n_{j\sigma}\rangle^i = = \langle n_{j\sigma}\rangle^d = Q$.

Анализ, проведенный в работах[11-14,23,24], показал обоснованность этих приближений. Поправки, связанные с неортогональностью, малы, и их можно учесть по теории возмущений [14,23,24]. В работе[14] было показано, что вычисление матричных элементов электрон-фононного взаимодействия можно провести в неортогональном базисе. При учете поправок, связанных с неортогональностью, в гармоническом приближении подходы БЛФ [1] и работы[14] приводят к эквивалентным результатам для матричных элементов электрон-фононного взаимодействия[23,24]. Результаты работ [11-14,23,24] показывают, что модель БЛФ[1] удовлетворительно описывает наиболее существенные аспекты поведения связанных электронной и ионной подсистем в переходных металлах и их соединениях. Существенно, что оператор электрон-фононного взаимодействия /8/ в явном виде содержит характерные параметры переходного металла: t, q_0, M.

2. ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА

Введем двухвременные функции Грина [18,19] для электронных и фононных операторов:

$$G_{\vec{p}\sigma}(t-t') = \langle\langle a_{\vec{p}\sigma}(t), a^+_{\vec{p}\sigma}(t')\rangle\rangle = -i\Theta(t-t')\langle[a_{\vec{p}\sigma}(t), a^+_{\vec{p}\sigma}(t')]_+\rangle,$$
$$D_{\vec{q}\nu}(t-t') = \langle\langle Q_{\vec{q}\nu}(t), Q^+_{\vec{q}\nu}(t')\rangle\rangle = -i\Theta(t-t')\langle[Q_{\vec{q}\nu}(t), Q^+_{\vec{q}\nu}(t')]_-\rangle. \qquad /11/$$

Используя уравнения движения для электронных операторов и расцепляя электронные функции Грина в приближении среднего поля ($\langle\langle a_{\vec{k}+\vec{p},\sigma}\, a_{\vec{p}+\vec{q},-\sigma}\, a_{\vec{q},-\sigma} \mid a_{\vec{k}\sigma}\rangle\rangle \approx \delta_{\vec{p},0}\langle n_{\vec{q},-\sigma}\rangle G_{\vec{k}\sigma}$), получим следующее уравнение для фурье-образа электронной функции Грина:

$$(\omega - \epsilon(\vec{p}\sigma))\, G_{\vec{p}\sigma}(\omega) = 1 + \sum_{\vec{q}\nu\alpha} V^{\alpha}_{\vec{q}\nu}(\vec{p}-\vec{q},\vec{p}) \langle\langle a_{\vec{p}-\vec{q},\sigma}\, Q_{\vec{q}\nu} \mid a^+_{\vec{p}\sigma}\rangle\rangle_\omega . \qquad /12/$$

Здесь введены обозначения

$$V^{\alpha}_{\vec{q}\nu}(\vec{p}-\vec{q},\vec{p}) = \frac{2iq_0}{\sqrt{NM}}\, t(\vec{a}_{\alpha})\, e^{\alpha}_{\nu}(\vec{q})\{\sin\vec{a}_{\alpha}(\vec{p}-\vec{q}) - \sin\vec{a}_{\alpha}\cdot\vec{p}\},$$

$$\epsilon(\vec{p}\sigma) = \epsilon_{\vec{p}} + \frac{U}{N}\sum_{\vec{k}} \langle n_{\vec{k},-\sigma}\rangle . \qquad /13/$$

Для вычисления двухчастичной функции Грина, стоящей в правой части /12/, продифференцируем ее по второму времени t':

$$(\omega-\epsilon(\vec{p}\sigma)) \langle\langle a_{\vec{p}-\vec{q}\sigma} Q_{\vec{q}\nu} | a^{+}_{\vec{p}\sigma}\rangle\rangle_{\omega} =$$

$$= \sum_{\vec{q}'\alpha'\mu} V^{\alpha'}_{\vec{q}'\mu}(\vec{p},\vec{p}+\vec{q}') \langle\langle a_{\vec{p}-\vec{q}\sigma} Q_{\vec{q}\nu} | Q_{\vec{q}'\mu} a^{+}_{\vec{p}+\vec{q}'\sigma}\rangle\rangle_{\omega} . \qquad /14/$$

Систему уравнений /12/, /14/ перепишем в следующем виде [16,17,20-22]:

$$G_{\vec{p}\sigma}(\omega) = G^{\circ}_{\vec{p}\sigma}(\omega) + G^{\circ}_{\vec{p}\sigma}(\omega) P_{\sigma}(\vec{p},\omega) G^{\circ}_{\vec{p}\sigma}(\omega) . \qquad /15/$$

Нулевая функция Грина $G^{\circ}_{\vec{p}\sigma}(\omega)$ и оператор рассеяния $P_{\sigma}(p,\omega)$ имеют вид

$$G^{\circ}_{\vec{p}\sigma}(\omega) = (\omega - \epsilon(\vec{p}\sigma))^{-1} , \qquad /16/$$

$$P = \sum_{\vec{q}\nu\sigma} \sum_{\vec{q}'\mu\alpha'} V^{\alpha}_{\vec{q}\nu}(\vec{p}-\vec{q},\vec{p}) V^{\alpha'}_{\vec{q}'\mu}(\vec{p},\vec{p}+\vec{q}) \langle\langle a_{\vec{p}-\vec{q},\sigma} Q_{\vec{q}\nu} | Q_{\vec{q}'\mu} a^{+}_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}\rangle\rangle_{\omega} . \qquad /17/$$

Следуя работам [16,17,20-22], введем массовый оператор $M_{\sigma}(\vec{p},\omega)$ как собственную часть оператора P /не содержащую частей, соединенных одной линией G° /, т.е. $M_{\sigma}(\vec{p},\omega) = \{P_{\sigma}(\vec{p},\omega)\}^{p}$. Тогда из /15/ получим уравнение Дайсона:

$$G_{\vec{p}\sigma}(\omega) = G^{\circ}_{\vec{p}\sigma}(\omega) + G^{\circ}_{\vec{p}\sigma}(\omega) M_{\sigma}(\vec{p},\omega) G_{\vec{p}\sigma}(\omega) , \qquad /18/$$

для одноэлектронной функции Грина $G_{\vec{p}\sigma}(\omega)$. Функцию Грина в правой части /17/ запишем в виде

$$\langle\langle a_{\vec{p}-\vec{q}\sigma} Q_{\vec{q}\nu} | Q_{\vec{q}'\mu} a^{+}_{\vec{p}+\vec{q}\sigma}\rangle\rangle_{\omega} =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega-\omega'} (e^{\omega'/\theta}+1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega' t} \langle Q_{\vec{q}'\mu}(t)\, a^{+}_{\vec{p}+\vec{q}'\sigma}(t)\, a_{\vec{p}-\vec{q}\sigma} Q_{\vec{q}\nu}\rangle . \qquad /19/$$

Предполагая, что перенормировкой вершины в электрон-фононном взаимодействии можно пренебречь /ср. с работой Мигдала /25//, запишем двухчастичную корреляционную функцию в /19/ следующим образом:

$$< Q_{\vec{q}'\mu}(t) a^{+}_{\vec{p}+\vec{q}'\sigma}(t) a_{\vec{p}-\vec{q}\sigma} Q_{\vec{q}\nu} > \approx < Q_{\vec{q}'\mu}(t) Q_{\vec{q}\nu} >< a^{+}_{\vec{p}+\vec{q}'\sigma}(t)\, a_{\vec{p}-\vec{q}\sigma} > . \qquad /20/$$

Подставляя сюда выражения для фононной и электронной одночастичных корреляционных функций через соответствующие функции Грина /11/, для массового оператора $M_\sigma(\vec{p},\omega)$ получим выражение

$$M_\sigma(\vec{p},\omega) = \frac{4q_0^2 t^2}{NM} \sum_{\vec{q}\alpha\nu} [\sin \vec{a}_\alpha \cdot \vec{p} - \sin \vec{a}_\alpha (\vec{p}-\vec{q})]^2 | e^{\alpha}_{\nu}(\vec{q})|^2 \times \qquad /21/$$

$$\times \iint \frac{d\omega_1 d\omega_2}{\pi^2} \frac{1+N(\omega_2)+n(\omega_1)}{\omega-\omega_1-\omega_2} \operatorname{Im} G_{\vec{p}-\vec{q}\sigma}(\omega_1+i\epsilon)\cdot \operatorname{Im} D_{\vec{q}\nu}(\omega_2+i\epsilon) .$$

Здесь $N(\omega)$ и $n(\omega)$ - функции распределения Бозе и Ферми соответственно. Уравнения /18/ и /21/ представляют собой самосогласованную систему уравнений для одночастичной функции Грина $G_{p\sigma}(\omega)$. Массовый оператор /21/ является самосогласованным выражением, вычисление которого не опирается на какое-либо конкретное начальное приближение.

В настоящей работе для приближенного самосогласованного вычисления функции Грина /11/ воспользуемся полюсным приближением для спектральных интенсивностей функций Грина. Для этого запишем электронную и фононную спектральные интенсивности в массовом операторе /21/ в виде δ -функций:

$$\operatorname{Im} G_{p-q\sigma}(\omega_1+i\epsilon) = -\pi\delta(\omega_1+\epsilon(p-q,\sigma)) , \qquad /22/$$

$$\operatorname{Im} D_{q\nu}(\omega_2+i\epsilon) = -\pi \frac{1}{2\omega_{q\nu}} \{\delta(\omega_2-\omega_{q\nu}) - \delta(\omega_2+\omega_{q\nu})\}, \qquad /23/$$

где $\epsilon(\vec{k},\sigma)$ и $\omega_{q\nu}$ - перенормированные энергии электронов и фононов.

Подставляя /22/ и /23/ в правую часть /21/, получим

$$M_\sigma(p,\omega) = \frac{4q_0^2 t^2}{NM} \sum_{\vec{q}\alpha\nu} [\sin \vec{a}_\alpha \cdot \vec{p} - \sin \vec{a}_\alpha (\vec{p}-\vec{q})]^2 \frac{|e^{\alpha}_{\nu}(q)|^2}{2\omega} \times$$

$$\times \left\{ \frac{1+N(\omega_{\vec{q}\nu}) - n(\epsilon(\vec{p}-\vec{q},\sigma))}{\omega-\omega_{\vec{q}\nu}-\epsilon(\vec{p}-\vec{q},\sigma)} - \frac{N(\omega_{\vec{q}\nu}) + n(\epsilon(\vec{p}-\vec{q},\sigma))}{\omega-\omega_{\vec{q}\nu}-\epsilon(\vec{p}-\vec{q},\sigma)} \right\} . \qquad /24/$$

Вообще говоря, как показал Барисич [11], взаимодействия электронов с продольной и поперечными модами могут быть одинаково важны. Для случая взаимодействия электронов только с продольной модой массовый оператор /24/ можно представить в виде

$$M_\sigma^e(\vec{p},\omega)=\frac{4q_0^2t^2}{NM}\sum_{\vec{q}}\frac{g(\vec{p},\vec{p}-\vec{q})}{2\omega_{q_\nu}}\left\{\frac{\operatorname{cth}\frac{\beta\omega_{q_\nu}}{2}+\operatorname{th}\frac{\beta\epsilon(\vec{p}-\vec{q},\sigma)}{2}}{\omega-\omega_{q_\nu}-\epsilon(\vec{p}-\vec{q},\sigma)}-\right. \qquad /25/$$

$$\left.-\frac{\operatorname{cth}\frac{\beta\omega_{q_\nu}}{2}-\operatorname{th}\frac{\beta\epsilon(\vec{p}-\vec{q},\sigma)}{2}}{\omega+\omega_{q_\nu}-\epsilon(\vec{p}-\vec{q},\sigma)}\right\},$$

где

$$g(\vec{p},\vec{p}-\vec{q})=\sum_\alpha\left(\frac{q^\alpha}{q}\right)^2[\sin\vec{a}_\alpha\cdot\vec{p}-\sin\vec{a}_\alpha(\vec{p}-\vec{q})]^2 .$$

При малых q фактор анизотропии в /25/ $g(p,p-q)\sim a^2q^2$, где a - постоянная решетки. Структура массового оператора /24/, /25/ имеет вид, характерный для электрон-фононной системы [25,26]; отличие состоит в том, что явно учитывается сильно связанный характер d-электронов. Анизотропная зависимость существенна, и поэтому интегрирование по сферической поверхности Ферми здесь неприменимо. Выражения /24/ и /27/ должны исследоваться численным образом.

Спектр квазичастичных возбуждений электронной системы определяется полюсами функции Грина:

$$G_{\vec{p}\sigma}(\omega)=\{\omega-2\sum_\alpha t(\vec{a}_\alpha)\cos(\vec{p}\cdot\vec{a}_\alpha)-\frac{U}{N}\sum_{\vec{k}}\langle n_{\vec{k},-\sigma}\rangle-M_\sigma(\vec{p},\omega)\}^{-1} . \qquad /26/$$

Вводя действительную и мнимую части массового оператора $M_\sigma(p,\omega+i\epsilon)=\Lambda_{p\sigma}(\omega+i\epsilon)+i\Gamma_{p\sigma}(\omega+i\epsilon)$, квазичастичный спектр $E_{p\sigma}$ определим согласно уравнению

$$E_{\vec{p}\sigma}=\epsilon(\vec{p}\sigma)+\Lambda_{\vec{p}\sigma}(E_{\vec{p}\sigma}). \qquad /27/$$

Полученный ренормированный спектр электронов /27/ записан через параметры t, q_0, M и числа заполнения электронов и фононов. В отличие от простых металлов [25] здесь существенны анизотропия взаимодействия и непараболический закон дисперсии электронов.

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ РЕНОРМИРОВАННОГО ФОНОННОГО СПЕКТРА

Рассмотрим теперь фононную функцию Грина $D_{\vec{k}\nu}(\omega)$. Уравнение движения в этом случае можно представить в виде

$$(\omega^2-\omega_0^2(\vec{k}\nu))D_{\vec{k}\nu}(\omega)=1+\sum_{\vec{q}\alpha\sigma} V^{\alpha}_{-\vec{k}\nu}(\vec{q},\vec{q}-\vec{k}) \ll a^{+}_{\vec{q}-\vec{k}\sigma}\, a_{\vec{q}\sigma} \mid Q^{+}_{\vec{k}\nu} \gg_{\omega} . \qquad /28/$$

Как и в предыдущем разделе, продифференцируем двухчастичную функцию Грина в правой части /28/ по второму времени t':

$$(\omega^2-\omega_0^2(\vec{k}\nu)) \ll a^{+}_{\vec{q}-\vec{k}\sigma}\, a_{\vec{q}\sigma} \mid Q^{+}_{\vec{k}\nu} \gg_{\omega} =$$

$$= \sum_{\vec{q}'\alpha'\sigma'} V^{\alpha}_{\vec{k}\nu}(\vec{q}',\vec{k}+\vec{q}') \ll a^{+}_{\vec{q}-\vec{k}\sigma} a_{\vec{q}\sigma} \mid a^{+}_{\vec{k}+\vec{q}'\sigma'} a_{\vec{q}'\sigma'} \gg \quad . \qquad /29/$$

Решая совместно уравнения /28/ и /29/, получим

$$D_{\vec{k}\nu}(\omega)=D^{0}_{\vec{k}\nu}(\omega)+D^{0}_{\vec{k}\nu}(\omega)\,T_{\vec{k}\nu}(\omega)\,D^{0}_{\vec{k}\nu}(\omega) , \qquad /30/$$

где

$$D^{0}_{\vec{k}\nu}(\omega)=(\omega^2-\omega_0^2(\vec{k}\nu))^{-1} ,$$

$$T_{\vec{k}\nu}(\omega)=\sum_{\vec{q}\vec{q}'}\sum_{\alpha\alpha'}\sum_{\sigma\sigma'} V^{\alpha}_{-\vec{k}\nu}(\vec{q},\vec{q}-\vec{k})\, V^{\alpha'}_{\vec{k}\nu}(\vec{q}',\vec{k}+\vec{q}') \times \qquad /31/$$

$$\times \ll a^{+}_{\vec{q}-\vec{k}\sigma}\, a_{\vec{q}\sigma} \mid a^{+}_{\vec{k}+\vec{q}'\sigma'} a_{\vec{q}'\sigma'} \gg_{\omega} \quad .$$

Определяя массовый оператор $\Pi_{\vec{k}\nu}(\omega)$ как собственную часть оператора рассеяния $T_{\vec{k}\nu}(\omega)$, т.е. $\Pi_{\vec{k}\nu}(\omega)=\{T_{\vec{k}\nu}(\omega)\}^{p}$, получим уравнение Дайсона для однофононной функции Грина:

$$D_{\vec{k}\nu}(\omega)=D^{0}_{\vec{k}\nu}(\omega)+D^{0}_{\vec{k}\nu}(\omega)\,\Pi_{\vec{k}\nu}(\omega)\,D_{\vec{k}\nu}(\omega). \qquad /32/$$

Ренормированный фононный спектр с учетом d-электронов определяется полюсами однофононной функции Грина:

$$D_{\vec{k}\nu}(\omega)=\{\omega^2-\omega_0^2(\vec{k}\nu)-2\omega_0(\vec{k}\nu)\,\Pi_{\vec{k}\nu}(\omega)\}^{-1} \quad . \qquad /33/$$

Как и в предыдущем разделе, предполагаем, что при вычислении массового оператора $\Pi_{\vec{k}\nu}(\omega)$ можно пренебречь перенормировкой вершины /ср. с /25//, что соответствует следующему расцеплению двухчастичной корреляционной функции:

$$< a^{+}_{k+q'\sigma}(t)\, a_{q'\sigma}(t)\, a^{+}_{q-k\sigma}\, a_{q\sigma} > \approx < a^{+}_{k+q'\sigma}(t)\, a_{q\sigma} >< a_{q'\sigma}(t)\, a^{+}_{q-k\sigma} >. \quad /34/$$

Используя /34/, получим для массового оператора фононной функции Грина следующее выражение:

$$\Pi_{k\nu}(\omega)=\frac{4q_0^2t^2}{NM}\sum_{\vec{q}\alpha\sigma}[\sin\vec{a}_\alpha\cdot\vec{q}-\sin\vec{a}_\alpha(\vec{q}-\vec{k})]^2\,|e^\alpha_\nu(\vec{k})|^2\times$$
$$\times\iint\frac{d\omega_1\,d\omega_2}{\pi^2}\,\mathrm{Im}\,G_{\vec{q}-\vec{k}\sigma}(\omega_1+i\epsilon)\,\mathrm{Im}\,G_{\vec{q}\sigma}(\omega_2+i\epsilon)\,\frac{n(\omega_1)-n(\omega_2)}{\omega-\omega_2+\omega_1}\,. \qquad /35/$$

Уравнения /32/ и /35/ - самосогласованная система уравнений для определения однофононной функции Грина $D_{q\nu}(\omega)$. Для вычисления /35/, аналогично /22/, воспользуемся полюсным приближением для электронной спектральной интенсивности:

$$\mathrm{Im}\,G_{\vec{q}\sigma}(\omega_2+i\epsilon)=-\pi\delta(\omega_2-\epsilon(\vec{q},\sigma)). \qquad /36/$$

В результате получим из /35/

$$\Pi_{\vec{k}\nu}(\omega)=\frac{4q_0^2t^2}{NM}\sum_{\vec{p}\alpha\sigma}[\sin\vec{a}_\alpha\cdot\vec{p}-\sin\vec{a}_\alpha(\vec{p}-\vec{k})]^2\,|e^\alpha_\nu(\vec{k})|^2\times$$
$$\times\frac{n(\epsilon(\vec{p}-\vec{k},\sigma))-n(\epsilon(\vec{p},\sigma))}{\omega-\epsilon(\vec{p}\sigma)-\epsilon(\vec{p}-\vec{k},\sigma)}\,. \qquad /37/$$

Массовый оператор /37/ позволяет в явной аналитической форме определить поправки к спектру фононов за счет d-электронов. В общем случае, для полностью самосогласованного расчета, необходимо рассматривать две подсистемы s - и d-электронов, взаимодействующих с колебаниями решетки.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Найденный ренормированный электронный /27/ и фононный /37/ спектры переходного металла для модели БЛФ [1] выражаются через небольшое число характерных параметров t, q_0 и M, которые определяются независимым образом. Спектр содержит сдвиг энергии и затухание, что приводит к изменению одночастичной плотности состояний системы $\rho_\sigma(\epsilon_f)$ на уровне Ферми. Поскольку критерий Стонера возникновения магнитоупорядоченного состояния

$$U\rho_\sigma(\epsilon_f)>1 \qquad /38/$$

для рассмотренной нами модели БЛФ по форме совпадает с обычным критерием Стонера для модели Хаббарда [2], изменение плотности состояний $\rho_\sigma(\epsilon_f)$ может для случая низких температур приводить к увеличению тенденции системы к образованию магнитоупорядоченного состояния за счет "одевания" электрона облаком фононов. Мы ограничились в данной работе зонным пределом, когда отношение $U/W < 1$ /для никеля, железа и кобальта $U/W \approx \approx 0,14-0,16$/. Модель БЛФ допускает рассмотрение этого случая, хотя сама схема сильной связи более применима в атомном пределе, становясь точной, когда ширина d-зоны равна нулю. Представляется интересным вычисление ренормированного электронного спектра для модели БЛФ в атомном пределе.

В заключение благодарим В.Л.Аксенова за полезные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Barišic S., Labbe J., Friedel J. Phys.Rev.Lett., 1970, 25, p.919.
2. Hubbard J. Proc.Roy.Soc., 1963, A276, p.238.
3. Проблема высокотемпературной сверхпроводимости /под ред. В.Л.Гинзбурга, В.Д.Киржница/. "Наука", М., 1977.
4. Бровман Е.Г., Каган Ю.М. УФН, 1974, 112, с.369.
5. Бровман Е.Г., Каган Ю.М., Холас А. ЖЭТФ, 1969, 57, с.1635.
6. Фридель Ж. Физика металлов /под ред. Дж.Займана/. "Мир", М., 1972.
7. Максимов Е.Г. ЖЭТФ, 1969, 57, с.1660.
8. Овчинников А.А. ФТТ, 1965, 7, с.832.
9. Friedman L. Phys.Rev., 1965, 140, p.A1649.
10. Mitra T.K. J.Phys., 1969, C2, pp.52,1357.
11. Barišic S. Phys.Rev., 1972, B5, pp.932,941.
12. Peter M. et al. Helv.Phys.Acta, 1974, 47, p.807.
13. Azizi H. J.Phys., 1975, F5, p.2307.
14. Varma C.M. et al. Phys.Rev., 1979, B19, p.6130.
15. Bjeliš A., Šaub K., Barišic S. Nuovo Cim., 1974, 23B,p.102.
16. Куземский А.Л. ОИЯИ, Р4-7225, Дубна, 1973.
17. Куземский А.Л. ТМФ, 1978, 36, с.208.
18. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. ДАН СССР, 1959, 126, с.53.
19. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма. "Наука", М., 1975.
20. Плакида Н.М. ТМФ, 1970, 5, с.147.
21. Маилян Г.Л., Петру З.К. ТМФ, 1976, 27, с.233.
22. Вуйчич Г.М., Петру З.К.,Плакида Н.М. ОИЯИ, Р17-12956, Дубна, 1979.
23. Van Hay J.C. J.Phys., 1977, C10, p.L337.
24. Ashkenazi J., Dacorogna M., Peter M. Sol.St.Comm.,1979,29, p.181.

25. Мигдал А.Б. ЖЭТФ, 1958, 34, с.1438.
26. Элиашберг Г.М. ЖЭТФ, 1960, 39, с.1437.

Рукопись поступила в издательский отдел
17 ноября 1980 года.