



7

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

1187/2-81

9/III-81

P17-80-773

Н.М.Плакида, А.Холас,^{*} А.Л.Куземский

ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ
В МОДЕЛИ ХАББАРДА
С СИЛЬНОЙ КОРРЕЛЯЦИЕЙ

^{*} Институт ядерных исследований, Свекр, Польша.

1980

1. ВВЕДЕНИЕ

Целью настоящей работы является вычисление ренормированного, за счет взаимодействия с фононами, одночастичного электронного спектра моттовского изолятора или полупроводника. Система описывается модельным гамильтонианом Хаббарда ^{1-3/}:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \quad /1/$$

Здесь $a_{i\sigma}^+$, $a_{i\sigma}$ - ферми-операторы рождения и уничтожения электрона со спином σ в состоянии Ванье, центрированном на узле \vec{R}_i ; U - интеграл кулоновского отталкивания электронов в одном узле. Интеграл перескока $t_{ij} = N^{-1} \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \exp[-i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)]$, где $\epsilon_{\vec{k}}$ - зонная энергия электронов.

Гамильтониан Хаббарда /1/ зависит от двух параметров: эффективной ширины зоны $W = 2t \cdot z$ / t - интеграл перескока между ближайшими соседями; z - число ближайших соседей/ и энергии внутриатомного кулоновского отталкивания электронов U . Когда отношение $U/W > 1$, гамильтониан /1/ описывает моттовский изолятор или полупроводник ^{2/}. В целом ряде соединений переходных металлов, а именно в окислах и сульфидах, реализуются состояния, соответствующие случаям моттовского изолятора или полупроводника.

Для описания фазовых переходов металл - изолятор и металл - полупроводник в соединениях переходных металлов необходимо учитывать электрон-фононное взаимодействие. За счет взаимодействия с колебаниями решетки при определенной температуре может исчезать щель в электронном спектре, то есть система перейдет в металлическое состояние.

В настоящей работе для описания взаимодействия сильно связанных d -электронов с колебаниями решетки воспользуемся гамильтонианом, полученным Барисичем, Лаббе и Фриделем ^{4/}. Этот гамильтониан представляет собой естественное обобщение гамильтониана Хаббарда /1/ для колеблющейся решетки. Рассматривается случай очень сильной кулоновской корреляции, когда для описания электронной подсистемы можно ограничиться приближением "Хаббард-1". Использование метода уравнений движения для функций Грина и двойного дифференцирования по первому и второму времени позволяет относительно просто найти ренормированный спектр электронов, который выражается через небольшое число характерных параметров системы.

2. ГАМИЛЬТониАН МОДЕЛИ

В переходных металлах и их соединениях доминирующую роль играют сильно связанные d -электроны. Согласно Барисичу-Лаббе-Фриделю^{/4/} при движении ионов волновые функции сильно связанных d -электронов мало деформируются. Это позволяет использовать гамильтониан Хаббарда /1/ для описания электронов в деформированной решетке.

Следуя работе^{/4/}, полный гамильтониан электрон-ионной модели представим в виде суммы:

$$H = H_e + H_i + H_{e-i}, \quad /2/$$

где

$$H_e = \sum_{j,\alpha} \sum_{\delta_\alpha, \sigma} t(\vec{a}_\alpha) a_{j\sigma} a_{j+\delta_\alpha, \sigma} + \frac{U}{2} \sum_{j\sigma} n_{j\sigma} n_{j-\sigma} \quad /3/$$

- гамильтониан Хаббарда /1/;

$$H_{e-i} = \frac{q}{\sqrt{NM}} \sum_{q\nu} \sum_{j\alpha} \sum_{\sigma\delta_\alpha} t(\vec{a}_\alpha) \frac{\vec{a}_{\delta_\alpha}}{a_\alpha} \vec{e}_{\vec{q}\nu} \{ e^{i\vec{q}\vec{R}_j} - e^{i\vec{q}\vec{R}_{j+\delta_\alpha}} \} Q_{\vec{q}\nu} a_{j\sigma}^+ a_{j+\delta_\alpha, \sigma} /4/$$

- оператор электрон-фононного взаимодействия. Здесь $t(\vec{a}_\alpha)$ - интеграл перескока между ближайшими соседями; \vec{a}_α ($\alpha = x, y, z$) - единичные векторы решетки; $\vec{a}_{\delta_\alpha} = \vec{R}_{j+\delta_\alpha} - \vec{R}_j$; $\delta_\alpha = (\pm 1)$; $\vec{e}_{\vec{q}\nu}$ - вектор поляризации колебаний решетки; q_0 - слейтеровский коэффициент, характеризующий экспоненциальное убывание d -функций.

Ионную подсистему будем описывать оператором

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}\nu} (P_{\vec{q}\nu}^+ P_{\vec{q}\nu} + \omega_0^2(\vec{q}\nu) Q_{\vec{q}\nu}^+ Q_{\vec{q}\nu}), \quad /5/$$

$\omega_0(\vec{q}\nu)$ - частоты акустических фононов без учета d -электронов. Подсистема s -электронов в явном виде не рассматривается.

Косвенно влияние s -электронов учтено. Считается, что все три ветви колебаний $\omega_0(\vec{q}\nu)$ ($\nu = 1, 2, 3$) соответствуют акустическим частотам^{/5/} и, кроме того, величина кулоновского отталкивания U перенормирована за счет экранирования s -электронами.

Гамильтониан электрон-фононного взаимодействия Барисича-Лаббе-Фриделя /4/ описывает наиболее существенные аспекты поведения связанных электронной и ионной подсистем в переходных металлах и их соединениях. Приближение сильной связи, в котором получен этот гамильтониан, более справедливо для узкозонных веществ и становится точным расчетом в пределе нулевой ширины зоны. Мы рассмотрим вычисление спектра электронов в этом пределе в следующих разделах.

3. ЭЛЕКТРОННЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА

Введем двухвременные функции Грина для электронных и фоновых операторов:

$$G_{ie}(t-t') = \langle\langle a_{i\sigma}(t), a_{e\sigma}^+(t') \rangle\rangle = -i\theta(t-t') \langle [a_{i\sigma}(t), a_{e\sigma}^+(t')] \rangle, \quad /6/$$

$$D_{\vec{q}\nu}(t-t') = \langle\langle Q_{\vec{q}\nu}(t), Q_{\vec{q}\nu}^+(t') \rangle\rangle = -i\theta(t-t') \langle [Q_{\vec{q}\nu}(t), Q_{\vec{q}\nu}^+(t')] \rangle.$$

Уравнение движения для фурье-образа функции Грина $G_{ie}(\omega)$ представим в виде

$$\omega G_{ie}(\omega) = \delta_{ie} + \sum_n t_{in} G_{ne}(\omega) + U \Gamma_{ie}^\sigma(\omega) + \sum_{\vec{q}\nu} \sum_{\alpha\delta_\alpha} V_{\vec{q}\nu}^\alpha(a_{\delta_\alpha}) \langle\langle Q_{\vec{q}\nu} a_{i+\delta_\alpha,\sigma} | a_{e\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega. \quad /7/$$

Здесь введены обозначения:

$$\Gamma_{ie}^\sigma(\omega) = \langle\langle a_{i\sigma} n_{i-\sigma} | a_{e\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega, \quad /8/$$

$$V_{\vec{q}\nu}^\alpha(\vec{a}_{\delta_\alpha}) = \frac{q_0}{\sqrt{NM}} t(\vec{a}_{\delta_\alpha}) \left(\frac{\vec{a}_{\delta_\alpha}}{a_{\delta_\alpha}} \cdot \vec{e}_{\vec{q}\nu} \right) \{ e^{i\vec{q}\vec{R}_i} - e^{i\vec{q}\vec{R}_{i+\delta_\alpha}} \}.$$

Для функции Грина Γ_{ie}^σ имеем уравнение

$$\omega \Gamma_{ie}^\sigma(\omega) = \delta_{ie} \langle n_{i-\sigma} \rangle + t_0 \Gamma_{ie}^\sigma(\omega) + U \Gamma_{ie}^\sigma(\omega) + \sum_{n \neq i} t_{in} \langle\langle n_{i-\sigma} a_{n\sigma} | a_{e\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega + \sum_{n \neq i} t_{in} \{ \langle\langle a_{i-\sigma}^+ a_{n-\sigma} a_{i\sigma} | a_{e\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega - \langle\langle a_{n-\sigma}^+ a_{i-\sigma} a_{i\sigma} | a_{e\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega \} + \sum_{\vec{q}\nu} \sum_{\alpha\delta_\alpha} V_{\vec{q}\nu}^\alpha(\vec{a}_{\delta_\alpha}) \{ \langle\langle Q_{\vec{q}\nu} n_{i-\sigma} a_{i+\delta_\alpha,\sigma} | a_{e\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega + \langle\langle Q_{\vec{q}\nu} (a_{i-\sigma}^+ a_{i+\delta_\alpha,\sigma} a_{i\sigma} - a_{i-\sigma}^+ a_{i+\delta_\alpha,\sigma} a_{i-\sigma} a_{i\sigma}) | a_{e\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega \}, \quad /9/$$

где $t_0 = N^{-1} \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}}$.

Электронную подсистему в уравнениях /7/ и /9/ описываем в приближении "Хаббард-1". Этому приближению соответствуют следующие расщепления /1/:

$$\langle\langle n_{i-\sigma} a_{n\sigma} | a_{e\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} \approx \langle n_{i-\sigma} \rangle G_{ne}(\omega),$$

$$\langle\langle a_{i-\sigma}^+ a_{n-\sigma} a_{i\sigma} | a_{e\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} \approx \langle a_{i-\sigma}^+ a_{n-\sigma} \rangle G_{ie}(\omega),$$

$$\langle\langle a_{n-\sigma}^+ a_{i-\sigma} a_{i\sigma} | a_{e\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} \approx \langle a_{n-\sigma}^+ a_{i-\sigma} \rangle G_{ie}(\omega). \quad /10/$$

Подставляя /10/ в /7/ и /9/, получим приближенное уравнение движения для фурье-образа функции Грина $G_{ie}(\omega)$ в виде

$$\begin{aligned} \omega G_{ie}(\omega) = & \left\{ 1 + \frac{Un_{-\sigma}}{\omega - t_0 - U} \right\} \left\{ \delta_{ie} + \sum_n t_{in} G_{ne}(\omega) \right\} + \\ & + \left\{ 1 + \frac{Un_{-\sigma}}{\omega - t_0 - U} \right\} \sum_{\vec{q}\nu} \sum_{\alpha\delta\alpha} V_{\vec{q}\nu}^{\alpha}(\vec{a}_{\delta\alpha}) \langle\langle Q_{\vec{q}\nu} a_{i+\delta, \sigma} | a_{e\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega}. \end{aligned} \quad /11/$$

Для вычисления смешанной двухчастичной функции Грина, стоящей в правой части /11/, продифференцируем ее по второму времени t' . В результате получим

$$\begin{aligned} \omega \langle\langle Q_{\vec{q}\nu} a_{i+\delta, \sigma} | a_{e\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = & \\ = & \left\{ 1 + \frac{Un_{-\sigma}}{\omega - t_0 - U} \right\} \sum_m t_{me} \langle\langle Q_{\vec{q}\nu} a_{i+\delta, \sigma} | a_{m\sigma} \rangle\rangle_{\omega} + \\ & + \left\{ 1 + \frac{Un_{-\sigma}}{\omega - t_0 - U} \right\} \sum_{\vec{q}'\nu'} \sum_{\beta\delta\beta} V_{\vec{q}'\nu'}^{\beta}(\vec{a}_{\delta\beta}) \langle\langle Q_{\vec{q}\nu} a_{i+\delta, \sigma} | Q_{\vec{q}'\nu'} a_{e-\delta\beta}^+ \rangle\rangle_{\omega}. \end{aligned} \quad /12/$$

При выводе уравнения /12/ мы использовали для электронной подсистемы расщепление /10/.

Для решения системы уравнений /11/ и /12/ введем фурье-преобразование функции Грина:

$$G_{\sigma}(\vec{k}, \omega) = N^{-1} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_e)} G_{ie}(\omega). \quad /13/$$

Используя /13/, в /11/ и /12/ получим

$$G_{\sigma}(\vec{k}, \omega) = G_{\sigma}^{\circ}(\vec{k}, \omega) + G_{\sigma}^{\circ}(\vec{k}, \omega) P_{\sigma}(\vec{k}, \omega) G_{\sigma}^{\circ}(\vec{k}, \omega). \quad /14/$$

Здесь введены обозначения:

$$G_{\sigma}^{\circ}(\vec{k}, \omega) = \left\{ F_0^{\sigma}(\omega) - (\epsilon_{\sigma} - t_0) \right\}^{-1} \quad /15/$$

- решение гамильтониана Хаббарда /1/ для жесткой решетки в приближении "Хаббард-1" /10/. Величина $F_0^\sigma(\omega)$ равна /1/

$$F_0^\sigma(\omega) = \left\{ \frac{1-n_{-\sigma}}{\omega-t_0} + \frac{n_{-\sigma}}{\omega-t_0-U} \right\}^{-1}. \quad /16/$$

Оператор рассеяния $P_\sigma(\mathbf{k}, \omega)$ имеет вид

$$P_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = N^{-1} \sum_{\vec{q}\nu} \sum_{\vec{q}'\nu'} \sum_{\alpha\delta_\alpha} \sum_{\beta\delta_\beta} \sum_{\substack{\vec{R}_i+\delta_\alpha \\ \vec{R}_i-\delta_\beta}} V_{\vec{q}\nu}^\alpha(\vec{a}_{\delta_\alpha}) V_{\vec{q}'\nu'}^\beta(\vec{a}_{\delta_\beta}) e^{i\mathbf{k}(\vec{R}_i-\vec{R}_i)} \times \quad /17/$$

$$\times \langle\langle Q_{\vec{q}\nu}^\dagger a_{i+\delta_\alpha, \sigma} | Q_{\vec{q}'\nu'} a_{e-\delta_\beta, \sigma}^+ \rangle\rangle_\omega.$$

Массовый оператор $M_\sigma(\mathbf{k}, \omega)$ определим как собственную часть /не содержащую частей, соединенных линией G^0 / оператора $P_\sigma(\mathbf{k}, \omega)$, то есть $M_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \{P_\sigma(\mathbf{k}, \omega)\}^P$. В результате получим из /14/ уравнение

$$G_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = G_\sigma^0(\mathbf{k}, \omega) + G_\sigma^0(\mathbf{k}, \omega) M_\sigma(\mathbf{k}, \omega) G_\sigma(\mathbf{k}, \omega), \quad /18/$$

которое представляет собой уравнение Дайсона для одноэлектронной функции Грина $G(\mathbf{k}, \omega)$. Решение уравнения /18/ имеет вид

$$G_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \{F_0^\sigma(\omega) - (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) - M_\sigma(\mathbf{k}, \omega)\}^{-1}. \quad /19/$$

Теперь необходимо вычислить массовый оператор $M_\sigma(\mathbf{k}, \omega)$.

4. ПРИБЛИЖЕННОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ МАССОВОГО ОПЕРАТОРА

В настоящем разделе мы получим приближенное представление для массового оператора, предполагая, по аналогии с теорией Мигдала /6/, что можно пренебречь перенормировкой вершины в электрон-фононном взаимодействии. Переходя к представлению через корреляционные функции в правой части /17/, двухчастичную корреляционную функцию запишем в виде

$$\begin{aligned} \langle Q_{\vec{q}\nu}^\dagger(t) a_{e-\delta_\beta, \sigma}^+(t) Q_{\vec{q}'\nu'} a_{i+\delta_\alpha, \sigma} \rangle &\approx \\ \approx \langle Q_{\vec{q}\nu}^\dagger(t) Q_{\vec{q}'\nu'} \rangle \langle a_{e-\delta_\beta, \sigma}^+(t) a_{i+\delta_\alpha, \sigma} \rangle. \end{aligned} \quad /20/$$

Подставляя сюда выражения для фоновой и электронной одночастичных корреляционных функций, вычисленных на основе соответствующих функций Грина /6/, для массового оператора $M_\sigma(\vec{k}, \omega)$ получим следующее выражение:

$$M_\sigma(\vec{k}, \omega) = N^{-1} \sum_{\vec{R}_i + \delta_\alpha} \sum_{\vec{q}} \sum_{\alpha \delta_\alpha} \sum_{\beta \delta_\beta} V_{\vec{q}\nu}^\alpha(a_{\delta_\alpha}) V_{-\vec{q}\nu}^\beta(a_{\delta_\beta}) e^{ik(\vec{R}_e - \vec{R}_i)} \times \quad /21/$$

$$\times \iint \frac{d\omega_1 d\omega_2}{\pi^2} \frac{1 + N(\omega_2) - n(\omega_1)}{\omega - \omega_1 - \omega_2} \text{Im} D_{\vec{q}\nu}(\omega_2 + i\epsilon) \text{Im} \langle\langle a_{i+\delta_\alpha, \sigma}^+ | a_{e-\delta_\beta, \sigma}^+ \rangle\rangle_\omega.$$

Величины $N(\omega)$ и $n(\omega)$ - функции распределения Бозе и Ферми соответственно. Уравнения /18/ и /21/ представляют собой самосогласованную систему уравнений для функции Грина электронов $G_\sigma(\vec{k}, \omega)$, а массовый оператор /21/ является самосогласованным выражением, вычисление которого не связано с конкретным начальным приближением. Для приближенного самосогласованного вычисления функции Грина $G_\sigma(\vec{k}, \omega)$ воспользуемся полными приближениями для спектральных интенсивностей в виде

$$\text{Im} D_{\vec{q}\nu}(\omega_2 + i\epsilon) = -\frac{\pi}{2\omega_{\vec{q}\nu}} \{ \delta(\omega_2 - \omega_{\vec{q}\nu}) - \delta(\omega_2 + \omega_{\vec{q}\nu}) \}, \quad /22/$$

$$\text{Im} \langle\langle a_{i+\delta_\alpha, \sigma}^+ | a_{e-\delta_\beta, \sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega_1 + i\epsilon} = \quad /23/$$

$$= -\pi \delta_{i+\delta_\alpha, e-\delta_\beta} \{ (1 - n_{-\sigma}) \delta(\omega_1 - t_0) + n_{-\sigma} \delta(\omega_1 - t_0 - U) \}.$$

Выражение /23/ соответствует атомному решению модели Хаббарда /1/, когда $t_{ij} = 0$, то есть когда ширина зон обращается в нуль и спектр системы состоит из двух уровней.

Подставляя /22/, /23/ в выражение для массового оператора /21/, получим

$$M_\sigma(\vec{k}, \omega) = \frac{q_0^2}{NM} t^2 \sum_{\vec{q}\nu} \sum_{\alpha \delta_\alpha} |e_{\vec{q}\nu}^\alpha|^2 \frac{A(\vec{q}, \vec{k})}{2\omega_{\vec{q}\nu}} \times \quad /24/$$

$$\times \left\{ (1 - n_{-\sigma}) \left[\frac{1 + N(\omega_{\vec{q}\nu}) - n(t_0)}{\omega - t_0 - \omega_{\vec{q}\nu}} + \frac{N(\omega_{\vec{q}\nu}) + n(t_0)}{\omega - t_0 + \omega_{\vec{q}\nu}} \right] + \right.$$

$$\left. + n_{-\sigma} \left[\frac{1 + N(\omega_{\vec{q}\nu}) - n(t_0 + U)}{\omega - \omega_{\vec{q}\nu} - t_0 - U} + \frac{N(\omega_{\vec{q}\nu}) + n(t_0 + U)}{\omega + \omega_{\vec{q}\nu} - t_0 - U} \right] \right\}.$$

Здесь

$$A(\vec{q}, \vec{k}) = \{1 - e^{i\vec{q}\vec{a}}\delta_a\} \{e^{-i\vec{q}\vec{a}}\delta_{a-1}\} e^{i(\vec{k}+\vec{q})\vec{a}}\delta_a =$$

$$= -4 \sin \frac{\vec{q}\vec{a}}{2} \alpha \exp[i(\vec{k}+\vec{q})\vec{a}}\delta_a]. \quad /25/$$

Массовый оператор /24/ определяет ренормировку спектра электронов за счет взаимодействия с фононами в случае сильной корреляции. Используемый метод самосогласованного расчета очень удобен, поскольку он позволяет определить массовый оператор /24/ на основе подстановки в /21/ атомного решения /23/. В принципе вместо /23/ можно применить другое приближенное решение, например, двухполюсное, получаемое с помощью метода моментов /7,8/ или метода Рот /9/.

Массовый оператор /24/ зависит от температуры, в результате чего при определенных значениях параметров системы может исчезать щель в спектре квазичастичных возбуждений; при этом система перейдет в металлическое состояние. Исследование этого вопроса предполагается провести в отдельной работе.

5. ОБСУЖДЕНИЕ

В настоящей работе для модели Барисича-Лаббе-Фриделя нам удалось относительно просто найти ренормированный, за счет взаимодействия с фононами, спектр электронов изолятора Мотта-Хаббарда. Развита теория является самосогласованной, позволяющей строить приближенные решения для одноэлектронной функции Грина $G_{ie}(\omega)$, не опираясь на конкретное нулевое приближение. В результате взаимодействия с фононами электронный спектр перенормируется; возникают сдвиг энергии и затухание, определяемые действительной и мнимой частью массового оператора $M_\sigma(\vec{k}, \omega + i\epsilon) = \Delta_{\vec{k}}(\omega) - i\Gamma_{\vec{k}}(\omega)$. При этом, в отличие от модели Фрелиха, в модели БЛФ учитывается анизотропия и непараболический характер дисперсии связанных электронов, что представляет особый интерес при рассмотрении электрических и магнитных свойств реальных соединений переходных металлов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Hubbard J. Proc.Roy.Soc., 1963, A276, p.238.
2. Yoffa E.J., Rodrigues W.A., Adler D. Phys.Rev., 1979, B19, p.1203.
3. Куземский А.Л. ТМФ, 1978, 36, с.208.

4. Barišić S., Labbe J., Friedel J. Phys.Rev.Lett., 1970, 25, p.919.
5. Бровман Е.Г., Каган Ю.М. УФН, 1974, 112, с.369.
6. Мигдал А.Б. ЖЭТФ, 1958, 34, с.1438.
7. Калашников О.К., Фрадкин Е.С. ТМФ, 1970, 5, с.417.
8. Tahir-Kheli R.A., Jarrett H.S. Phys.Rev., 1969, 180, p.544.
9. Roth L.M. Phys.Rev., 1969, 184, p.451.

Рукопись поступила в издательский отдел
28 ноября 1980 года.