сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-82-493

А.Л.Куземский, А.Холас,* Н.М.Плакида

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СИЛЬНОСВЯЗАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ С ФОНОНАМИ В ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛАХ И ИХ СОЕДИНЕНИЯХ

*Институт ядерных исследований, Сверк, Польша.

1982

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы большой интерес вызывает проблема описания электрических, тепловых и сверхпроводящих свойств переходных металлов, их сплавов и соединений. При этом важную роль имеет последовательное самосогласованное описание электрон-фононного взаимодействия [1-8]. Особые свойства переходных металлов, их сплавов и соединений в значительной мере определяются доминирующей ролью d-электронов. Для простых металлов, где справедливо приближение почти свободных электронов, разработаны эффективные методы учета электрон-фононного взаимодействия, в которых используется концепция псевдопотенциала [4,5]. В случае переходных металлов эти методы не применимы, т.к. волновые функции d-электронов сильно локализованы и, как правило, должны описываться в приближении сильной связи.

В работе Барисича-Лаббе-Фриделя [1] был предложен гамильтониан электрон-фононного взаимодействия для переходного металла, который представляет собой прямое обобщение хорошо известного гамильтониана Хаббарда [6] при учете колебаний решетки. Гамильтониан БЛФ [1] описывает взаимодействие сильносвязанных d-электронов с колебаниями решетки переходного металла на основе предположения о том, что волновые функции d-электронов "жестко" следуют за движущимися ионами, т.е. в приближении "жестких ионов". В отличие от других работ /см. [2,3] / гамильтониан БЛФ содержит в явном виде характерные параметры переходного металла. В работах [1,7-10] рассчитывался квадрат матричного элемента электрон-фононного взаимодействия в приближении сильной связи и физические величины, с ним связанные: энергия связи [1,8,10] и фактор Мак-Миллана, определяющий температуру сверхпроводящего перехода [1,3,8-10]. В работе [9] также вычислена парамагнитная восприимчивость, а в [11] - особенности фононного спектра квазиодномерных систем.

В настоящей работе модель БЛФ используется для самосогласованного вычисления перенормировки спектров электронов и фононов в переходных металлах и их соединениях. Найдены одночастичные плотности электронов и фононов, затухание фононов в переходных металлах и модифицированный критерий магнетизма Стонера. В случае сильной кулоновской корреляции обсуждается возможное влияние электрон-фононного взаимодействия на критерий перехода металл-изолятор в изоляторе-полупроводнике Мотта-Хаббарда. Получена система уравнений сверхпроводимости Элиашберга для модели БЛФ, позволяющая исследовать сверхпроводящие свойства переходных металлов и их соединений с единой точки зрения.

2. ГАМИЛЬТОНИАН МОДЕЛИ

Следуя работе[1], рассмотрим в однозонном приближении систему сильносвязанных d-электронов, описываемую гамильтонианом Хаббарда [6]:

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

где $a^+_{i\sigma}$, $a_{i\sigma}$ - операторы рождения и уничтожения электронов на узле $\vec R_i$, U - энергия кулоновского отталкивания электронов на одном узле. Интеграл перескока t_{ij} равен

$$t_{ij} = \int d^3r\, \phi^*(\vec r - \vec R_j)\Big[\frac{p^2}{2m} + \sum_e V(\vec r - \vec R_e)\Big]\phi(\vec r - \vec R_i), \qquad /2/$$

где $\{\phi(\vec r - \vec R_i)\}$ - полный ортонормированный набор волновых функций Ванье. Предполагая, что $V_s(\vec r)$ - короткодействующий самосогласованный потенциал, перепишем /2/ в следующей форме[1]:

$$t_{ij} \approx T_{ij} + J_{ij} + J^*_{ji} = t^\circ(\vec R_i - \vec R_j) = t^\circ_{ij} \quad (i \neq j), \qquad /3/$$

$$t_{ii} \approx \int d^3r\, \phi^*(\vec r)\Big[\frac{p^2}{2m} + V_s(\vec r)\Big]\phi(\vec r) = t_0. \qquad /4/$$

Здесь

$$T_{ij} = \int d^3r\, \phi^*(\vec r - \vec R_j + \vec R_i)\frac{p^2}{2m}\phi(\vec r),$$

$$J_{ij} = \int d^3r\, \phi^*(\vec r - \vec R_j + \vec R_i) V_s(\vec r)\phi(\vec r). \qquad /5/$$

Рассмотрим теперь влияние малых колебаний ионов $\vec u_i$ относительно равновесных положений $\vec R_i$. При этом будем использовать приближение "жестких ионов"[2]. В соответствии с работой[1] будем считать, что волновые функции d-электронов мало изменяются при смещении ионов и, следовательно, для деформированной решетки остаются справедливыми соотношения квазиортогональности[1]:

$$\langle \phi(\vec r - \vec R_j - \vec u_j) | \phi(\vec r - \vec R_i - \vec u_i)\rangle \approx \delta_{ij}. \qquad /6/$$

Из /6/ следует, что можно ввести операторы рождения и уничтожения электронов $a^+_{i\sigma}$, $a_{i\sigma}$ для деформированной решетки, с помощью которых гамильтониан /1/ можно представить в форме

$$H_e = \sum_{i\sigma} t_{ii} n_{i\sigma} + \sum_{i\neq j,\sigma} t_{ij}(\vec R_j + \vec u_j - \vec R_i - \vec u_i) a^+_{i\sigma} a_{j\sigma} + \frac{U}{2}\sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}. \qquad /7/$$

Для малых смещений $\vec u_i$ имеем

$$t_{ij} = t^\circ(\vec R_i - \vec R_j) + \frac{\partial t(\vec R)}{\partial \vec R}\Big|_{\vec R = \vec R_{j-i}} (\vec u_j - \vec u_i) + \dots . \qquad /8/$$

В работе БЛФ[1] для сильносвязанных электронов было использовано следующее полезное соотношение:

$$\frac{\partial t(\vec R)}{\partial \vec R}\Big|_{\vec R = \vec R_{j-i}} = -q_0 \frac{(\vec R_j - \vec R_i)}{|\vec R_j - \vec R_i|} t^\circ_{ij}. \qquad /9/$$

Здесь q_0 -слейтеровский коэффициент, характеризующий экспоненциальное убывание радиальной части d-функций $\Phi(|\vec r|) \sim \Phi_0 \exp(-q_0|\vec r|)$ / q_0 обычно порядка $1 A^{o-1}$ /.

В результате /7/ можно представить в виде

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

где

$$H^\circ_e = \sum_{i\sigma} t_{ii} n_{i\sigma} + \sum_{i\neq j\sigma} t^\circ_{ij} a^+_{i\sigma} a_{j\sigma} + \frac{U}{2}\sum n_{i\sigma} n_{i-\sigma}, \qquad /10/$$

$$H_{e-i} = q_0 \sum_{i\neq j\sigma} t^\circ_{ij} \frac{(\vec R_j - \vec R_i)}{|\vec R_j - \vec R_i|}(\vec u_i - \vec u_j) a^+_{i\sigma} a_{j\sigma}. \qquad /11/$$

Оператор H_{e-i} /11/ описывает взаимодействие сильносвязанных электронов с колебаниями решетки в локализованном базисе Ванье. Гамильтониан ионной подсистемы запишем в обычном виде:

$$H_i = \sum_i \frac{P_i^2}{2M} + \frac{1}{2}\sum_{ij}\sum_{\alpha\beta} u^\beta_i \Phi^{\beta\alpha}_{ij} u^\alpha_j. \qquad /12/$$

Полный гамильтониан системы представляет собой сумму операторов /10/, /11/ и /12/. Использованная запись в локализованном базисе подчеркивает сильносвязанный характер d-электронов, и, кроме того, она необходима при описании разупорядоченных сплавов переходных металлов и аморфных соединений [12-14]. Для кристалла удобно ввести нормальные координаты $Q_{\vec q\nu}$ и $P_{\vec q\nu}$,

$$\vec u_i = \frac{1}{\sqrt{MN}}\sum_{\vec q\nu} Q_{\vec q\nu} \vec e_{\vec q\nu} e^{i\vec q\vec R_i}, \qquad /13/$$

и записать /11/, /12/ в виде

$$H_{e-i} = \sum_{\vec q\nu}\sum_\sigma \sum_{i\neq j} A_{\vec q\nu}(i,j) Q_{\vec q\nu} a^+_{i\sigma} a_{j\sigma}, \qquad /14/$$

$$H_i = \frac{1}{2}\sum_{\vec q\nu}(P^+_{\vec q\nu} P_{\vec q\nu} + \omega^2_0(\vec q\nu)) Q^+_{\vec q\nu} Q_{\vec q\nu}. \qquad /15/$$

2. ГАМИЛЬТОНИАН МОДЕЛИ

Следуя работе [1], рассмотрим в однозонном приближении систему сильносвязанных d-электронов, описываемую гамильтонианом Хаббарда [6]:

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

где $a^+_{i\sigma}$, $a_{i\sigma}$ - операторы рождения и уничтожения электронов на узле $\vec R_i$, U - энергия кулоновского отталкивания электронов на одном узле. Интеграл перескока t_{ij} равен

$$t_{ij} = \int d^3 r\, \phi^*(\vec r - \vec R_j)\left[\frac{p^2}{2m} + \sum_e V(\vec r - \vec R_e)\right]\phi(\vec r - \vec R_i), \qquad /2/$$

где $\{\phi(\vec r - \vec R_i)\}$ - полный ортонормированный набор волновых функций Ванье. Предполагая, что $V_s(\vec r)$ - короткодействующий самосогласованный потенциал, перепишем /2/ в следующей форме [1]:

$$t_{ij} \approx T_{ij} + J_{ij} + J^*_{ji} = t^\circ(\vec R_i - \vec R_j) = t^\circ_{ij} \quad (i \neq j), \qquad /3/$$

$$t_{ii} \approx \int d^3 r\, \phi^*(\vec r)\left[\frac{p^2}{2m} + V_s(\vec r)\right]\phi(\vec r) = t_0 . \qquad /4/$$

Здесь

$$T_{ij} = \int d^3 r\, \phi^*(\vec r - \vec R_j + \vec R_i)\frac{p^2}{2m}\phi(\vec r),$$

$$J_{ij} = \int d^3 r\, \phi^*(\vec r - \vec R_j + \vec R_i) V_s(\vec r)\phi(\vec r). \qquad /5/$$

Рассмотрим теперь влияние малых колебаний ионов $\vec u_i$ относительно равновесных положений $\vec R_i$. При этом будем использовать приближение "жестких ионов" [2]. В соответствии с работой [1] будем считать, что волновые функции d-электронов мало изменяются при смещении ионов и, следовательно, для деформированной решетки остаются справедливыми соотношения квазиортогональности [1]:

$$\langle \phi(\vec r - \vec R_j - \vec u_j) | \phi(\vec r - \vec R_i - \vec u_i)\rangle \approx \delta_{ij} . \qquad /6/$$

Из /6/ следует, что можно ввести операторы рождения и уничтожения электронов $a^+_{i\sigma}$, $a_{i\sigma}$ для деформированной решетки, с помощью которых гамильтониан /1/ можно представить в форме

$$H_e = \sum_{i\sigma} t_{ii} n_{i\sigma} + \sum_{i\neq j,\sigma} t_{ij}(\vec R_j + \vec u_j - \vec R_i - \vec u_i) a^+_{i\sigma} a_{j\sigma} + \frac{U}{2}\sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} . \qquad /7/$$

Для малых смещений $\vec u_i$ имеем

$$t_{ij} = t^\circ(\vec R_i - \vec R_j) + \frac{\partial t(\vec R)}{\partial \vec R}\Big|_{\vec R = \vec R_{j-i}} (\vec u_j - \vec u_i) + \dots \qquad /8/$$

В работе БЛФ [1] для сильносвязанных электронов было использовано следующее полезное соотношение:

$$\frac{\partial t(\vec R)}{\partial \vec R}\Big|_{\vec R = \vec R_{j-i}} = -q_0 \frac{(\vec R_j - \vec R_i)}{|\vec R_j - \vec R_i|} t^\circ_{ij} . \qquad /9/$$

Здесь q_0 -слейтеровский коэффициент, характеризующий экспоненциальное убывание радиальной части d-функций $\Phi(|\vec r|) \sim \Phi_0 \exp(-q_0|\vec r|)$ / q_0 обычно порядка $1 A^{o-1}$ /.

В результате /7/ можно представить в виде

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

где

$$H^\circ_e = \sum_{i\sigma} t_{ii} n_{i\sigma} + \sum_{i\neq j\sigma} t^\circ_{ij} a^+_{i\sigma} a_{j\sigma} + \frac{U}{2}\sum n_{i\sigma} n_{i-\sigma}, \qquad /10/$$

$$H_{e-i} = q_0 \sum_{i\neq j\sigma} t^\circ_{ij} \frac{(\vec R_j - \vec R_i)}{|\vec R_j - \vec R_i|}(\vec u_i - \vec u_j) a^+_{i\sigma} a_{j\sigma} . \qquad /11/$$

Оператор H_{e-i} /11/ описывает взаимодействие сильносвязанных электронов с колебаниями решетки в локализованном базисе Ванье. Гамильтониан ионной подсистемы запишем в обычном виде:

$$H_i = \sum_i \frac{P_i^2}{2M} + \frac{1}{2}\sum_{ij}\sum_{\alpha\beta} u^\beta_i \Phi^{\beta\alpha}_{ij} u^\alpha_j . \qquad /12/$$

Полный гамильтониан системы представляет собой сумму операторов /10/, /11/ и /12/. Использованная запись в локализованном базисе подчеркивает сильносвязанный характер d-электронов, и, кроме того, она необходима при описании разупорядоченных сплавов переходных металлов и аморфных соединений [12-14]. Для кристалла удобно ввести нормальные координаты $Q_{\vec q\nu}$ и $P_{\vec q\nu}$,

$$\vec u_i = \frac{1}{\sqrt{MN}} \sum_{\vec q\nu} Q_{\vec q\nu} \vec e_{\vec q\nu}\, e^{i\vec q \vec R_i} , \qquad /13/$$

и записать /11/, /12/ в виде

$$H_{e-i} = \sum_{\vec q\nu}\sum_\sigma \sum_{i\neq j} A_{\vec q\nu}(i,j) Q_{\vec q\nu} a^+_{i\sigma} a_{j\sigma} , \qquad /14/$$

$$H_i = \frac{1}{2}\sum_{\vec q\nu}\left(P^+_{\vec q\nu} P_{\vec q\nu} + \omega_0^2(\vec q\nu)\right) Q^+_{\vec q\nu} Q_{\vec q\nu} . \qquad /15/$$

Здесь

$$A_{\vec{q}\nu}(i,j) = \frac{q_0}{\sqrt{MN}} t^{\circ}_{ij} \frac{\vec{R}_{j-i}}{|\vec{R}_{j-i}|} \vec{e}_{\vec{q}\nu} \left(e^{i\vec{q}\vec{R}_i} - e^{i\vec{q}\vec{R}_j}\right) - \qquad /16/$$

матричный элемент электрон-фононного взаимодействия, записанный через параметры переходного металла q_0, t°_{ij}, M. Величины $\omega_0(\vec{q}\nu)$ -частоты фононов без учета взаимодействия d-электронов с фононами [8].

Чтобы связать интеграл перескока t°_{ij} с наблюдаемой физической величиной - шириной зоны $W = 2zt^{\circ}(\vec{R}_\kappa)$, введем приближение ближайших соседей. Для определенности будем рассматривать решетки Браве с центром инверсии. Обозначим через $\vec{R}_\kappa$ расстояние до ближайшего соседа по отношению к узлу в начале координат:

$$\vec{R}_\kappa = \sum_{\alpha=1}^{3} \kappa_\alpha \vec{a}_\alpha, \qquad \kappa = (\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3),$$

$$\vec{R}_{i+\kappa} = \vec{R}_i + \vec{R}_\kappa = \sum_{\alpha=1}^{3} (i_\alpha + \kappa_\alpha)\vec{a}_\alpha. \qquad /17/$$

Из /17/ следует, что в приближении ближайших соседей

$$\sum_{i \neq j} \sum_{\sigma} t^{\circ}_{ij} a^{+}_{i\sigma} a_{j\sigma} \to \sum_{i,\kappa,\sigma} t^{\circ}_{i,i+\kappa} a^{+}_{i\sigma} a_{i+\kappa,\sigma} = \qquad /18/$$

$$= \sum_{i\kappa\sigma} t^{\circ}(\vec{R}_\kappa) a^{+}_{i\sigma} a_{i+\kappa,\sigma},$$

$$H_{e-i} = \sum_{\vec{q}\nu} \sum_{\sigma} \sum_{i\kappa} A_{\vec{q}\nu}(i, i+\kappa) Q_{\vec{q}\nu} a^{+}_{i\sigma} a_{i+\kappa,\sigma}, \qquad /19/$$

$$A(i, i+\kappa) = \frac{q_0}{\sqrt{NM}} t^{\circ}(\vec{R}_\kappa) \frac{\vec{R}_\kappa}{|\vec{R}_\kappa|} \vec{e}_{\vec{q}\nu} e^{i\vec{q}\vec{R}_i} \left(1 - e^{i\vec{q}\vec{R}_\kappa}\right). \qquad /20/$$

Заметим, что в модели "жестких ионов" БЛФ [1], как и в модели Хаббарда [6], s - электроны явно не учитываются. Однако косвенно их влияние принято во внимание. Считается, что все три ветви колебаний $\omega_0(\vec{q}\nu)$ соответствуют акустическим частотам [5,8], а величина кулоновского отталкивания U перенормирована за счет экранировки s-электронами.

3. ЭЛЕКТРОННЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА

Проведем сначала вычисления в случае переходного металла, т.е. в зонном пределе для гамильтониана Хаббарда /1/, когда $U/W < 1$ /заметим, что для никеля, железа и кобальта $U/W \approx 0{,}14 \div 0{,}16$/. Удобно переписать полный гамильтониан в импульсном представлении:

$$H^{\circ}_{e} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k a^{+}_{k\sigma} a_{k\sigma} + \frac{U}{2N} \sum_{k_1,k_2} \sum_{q\sigma} a^{+}_{k_1+q\sigma} a_{k_1\sigma} a^{+}_{k_2-q,-\sigma} a_{k_2,-\sigma}, \qquad /21/$$

где импульсы $\vec{k}_1$, $\vec{k}_2$, $\vec{q}$ лежат в зоне Бриллуэна.

Зонная энергия ϵ_k равна

$$\epsilon_k = t_0 + \sum_{\kappa} t^{\circ}(\vec{R}_\kappa) e^{i\vec{k}\vec{R}_\kappa}. \qquad /22/$$

Для решеток с центром инверсии $t^{\circ}(\vec{R}) = t^{\circ}(-\vec{R})$ / t_0 - действительная величина/ и

$$\epsilon_k = t_0 + \sum_{\kappa} t^{\circ}(\vec{R}_\kappa) \cos(\vec{k}\vec{R}_\kappa). \qquad /23/$$

Заметим также, что $t_0 \neq t^{\circ}(0)$. Взаимодействие

$$H_{e-i} = \sum_{\vec{q}\nu} \sum_{k\sigma} V_\nu(\vec{k}, \vec{k}+\vec{q}) Q_{\vec{q}\nu} a^{+}_{k+q\sigma} a_{k\sigma}, \qquad /24/$$

$$V_\nu(\vec{k}, \vec{k}+\vec{q}) = \frac{iq_0}{\sqrt{NM}} \sum_{\kappa} t^{\circ}(\vec{R}_\kappa) \frac{\vec{R}_\kappa \vec{e}_{\vec{q}\nu}}{|\vec{R}_\kappa|} [\sin(\vec{k}\vec{R}_\kappa) - \sin(\vec{k}+\vec{q})\vec{R}_\kappa].$$

Выражения /21/ и /24/ записаны в приведенной зонной схеме. При выводе /24/ было учтено соотношение $t(\vec{R}_{-\kappa}) = t(-\vec{R}_\kappa) = t(\vec{R}_\kappa)$. В этом разделе t_0 можно для сокращения записи опустить.

Введем двухвременные функции Грина для электронных и фононных операторов [15]:

$$G_{\vec{p}\sigma}(t-t') = \langle\langle a_{p\sigma}(t), a^{+}_{p\sigma}(t')\rangle\rangle = -i\theta(t-t')\langle[a_{p\sigma}(t), a^{+}_{p\sigma}(t')]_{+}\rangle,$$

$$D_{\vec{q}\nu}(t-t') = \langle\langle Q_{\vec{q}\nu}(t), Q^{+}_{\vec{q}\nu}(t')\rangle\rangle = -i\theta(t-t')\langle[Q_{\vec{q}\nu}(t), Q^{+}_{\vec{q}\nu}(t')]\rangle. \qquad /25/$$

Вычисление /25/ проведем с помощью метода уравнений движения для ФГ [15-17]. В результате получим следующее уравнение для Фурье-образа электронной ФГ:

$$(\omega - \epsilon^{\circ}(\vec{p}\sigma)) G_{\vec{p}\sigma}(\omega) = 1 + \sum_{\vec{q}\nu} V_\nu(\vec{p}-\vec{q}, \vec{p}) \langle\langle a_{p-q\sigma} Q_{q\nu} | a^{+}_{p\sigma}\rangle\rangle_\omega, \qquad /26/$$

где

$$\epsilon^{\circ}(\vec{p}\sigma) = \epsilon_{\vec{p}} + \frac{U}{N} \sum_{k} \langle n_{k,-\sigma}\rangle. \qquad /27/$$

Для простоты в настоящей работе учитываем только упругие процессы электрон-электронного рассеяния:

$$\langle\langle a_{p+q,\sigma} a^{+}_{k+q,-\sigma} a_{k,-\sigma} | a^{+}_{p\sigma}\rangle\rangle \approx \delta_{q,0} \langle n_{k,-\sigma}\rangle G_{p\sigma}(\omega).$$

Учет неупругих процессов можно провести с помощью метода неприводимых ФГ [16,17]. Для вычисления функции Грина, стоящей в правой части /26/, продифференцируем ее по второму времени t'. После несложных преобразований получим [16]:

$$G_{\vec{p}\sigma}(\omega) = G^{\circ}_{\vec{p}\sigma}(\omega) + G^{\circ}_{\vec{p}\sigma}(\omega) P_\sigma(\vec{p}, \omega) G^{\circ}_{\vec{p}\sigma}(\omega). \qquad /28/$$

Нулевая ФГ G° и оператор рассеяния P имеют вид:

$$G^{\circ}_{\vec{p}\sigma}(\omega) = (\omega - \epsilon^{\circ}(\vec{p}, \sigma))^{-1}, \qquad /29/$$

$$P_\sigma(\vec{p},\omega) = \sum_{\vec{q}\nu}\sum_{\vec{q}'\nu'} V_\nu(\vec{p}-\vec{q},\vec{p})V_{\nu'}(\vec{p},\vec{p}-\vec{q}') \langle\langle a_{p-q\sigma}Q_{q\nu}|Q^+_{q'\nu'}a^+_{p-q',\sigma}\rangle\rangle_\omega .$$

Следуя работам [16,17], 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 /28/, /29/ получим уравнение Дайсона

$$G_{\vec{p}\sigma}(\omega) = [(G^\circ_{\vec{p}\sigma}(\omega))^{-1} - M_\sigma(p,\omega)]^{-1} . \qquad /30/$$

Для самосогласованного вычисления массового оператора ФГ в правой части /29/ запишем в виде

$$\langle\langle a_{p-q\sigma}Q_{q\nu} | Q^+_{q'\nu'} a^+_{p-q'\sigma}\rangle\rangle_\omega = \qquad /31/$$

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

Предполагая, что перенормировкой вершины в электрон-фононном взаимодействии можно пренебречь /ср. с работой Мигдала [18] /, запишем двухчастичную корреляционную функцию в /31/ следующим образом:

$$\langle Q^+_{q'\nu'}(t)a^+_{p-q'\sigma}(t)a_{p-q\sigma}Q_{q\nu}\rangle \approx \langle Q^+_{q'\nu'}(t)Q_{q\nu}\rangle\langle a^+_{p-q'\sigma}(t)a_{p-q\sigma}\rangle . \qquad /32/$$

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

$$M_\sigma(\vec{p},\omega) = \sum_{\vec{q}\nu}|V_\nu(\vec{p},\vec{p}-\vec{q})|^2\iint\frac{d\omega_1 d\omega_2}{\pi^2}\,\frac{1-n(\omega_1)+N(\omega_2)}{\omega-(\omega_1+\omega_2)}\times$$
$$\times \operatorname{Im}G_{\vec{p}-\vec{q},\sigma}(\omega_1+i\epsilon)\operatorname{Im}D_{\vec{q}\nu}(\omega_2+i\epsilon). \qquad /33/$$

Здесь $N(\omega)$ и $n(\omega)$ - функции распределения Бозе и Ферми соответственно.

4. ФОНОННЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА

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

$$(\omega^2-\omega_0^2(\vec{p}\nu))D_{\vec{p}\nu}(\omega) = 1 + \sum_{\vec{q}\sigma}V_\nu(\vec{q},\vec{q}-\vec{p})\langle\langle a^+_{q-p\sigma}a_{q\sigma}|Q^+_{p\nu}\rangle\rangle_\omega . \qquad /34/$$

Как и в предыдущем разделе, дифференцирование по второму времени высшей ФГ в правой части /34/ приводит к уравнению

$$D_{\vec{p}\nu}(\omega) = D^\circ_{\vec{p}\nu}(\omega) + D^\circ_{\vec{p}\nu}(\omega)T_{\vec{p}\nu}(\omega)D^\circ_{\vec{p}\nu}(\omega), \qquad /35/$$

где

$$D^\circ_{\vec{p}\nu}(\omega) = (\omega^2 - \omega_0^2(\vec{p}\nu))^{-1} ,$$
$$T_{p\nu}(\omega) = \sum_{q\sigma}\sum_{q'\sigma'}V_\nu(\vec{q},\vec{q}-\vec{p})V_\nu(q',q'+p)\langle\langle a^+_{q-p\sigma}a_{q\sigma}|a^+_{q'+p\sigma'}a_{q'\sigma'}\rangle\rangle_\omega . \qquad /36/$$

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

$$D_{\vec{p}\nu}(\omega) = D^\circ_{\vec{p}\nu}(\omega) + D^\circ_{\vec{p}\nu}(\omega)\Pi_{\vec{p}\nu}(\omega)D_{\vec{p}\nu}(\omega) . \qquad /37/$$

Как и ранее, предполагаем, что при вычислении массового оператора $\Pi_{k\nu}(\omega)$ можно пренебречь перенормировкой вершины, что соответствует следующему расцеплению двухчастичной корреляционной функции:

$$\langle a^+_{q'+p\sigma}(t)a_{q'\sigma'}(t)a^+_{q-p\sigma}a_{q\sigma}\rangle \approx \langle a^+_{q'+p\sigma}(t)a_{q\sigma}\rangle\langle a_{q'\sigma}(t)a^+_{q-p\sigma}\rangle . \qquad /38/$$

Используя /38/, в /36/ получим для массового оператора фононной функции Грина следующее выражение:

$$\Pi_{\vec{p}\nu}(\omega) = \sum_{\vec{q}\sigma}|V_\nu(\vec{q}-\vec{p},\vec{q})|^2\iint\frac{d\omega_1 d\omega_2}{\pi^2}\,\frac{n(\omega_1)-n(\omega_2)}{\omega+\omega_1-\omega_2}\times \qquad /39/$$
$$\times \operatorname{Im}G_{\vec{q}-\vec{p},\sigma}(\omega_1)\operatorname{Im}G_{\vec{q}\sigma}(\omega_2).$$

5. ПЕРЕНОРМИРОВКА СПЕКТРА ЭЛЕКТРОНОВ И ФОНОНОВ

Полная самосогласованная система уравнений для электронной и фононной ФГ имеет вид:

$$G_{\vec{p}\sigma}(\omega) = \{\omega - \epsilon^\circ(\vec{p}\sigma) - M_\sigma(\vec{p},\omega)\}^{-1} ,$$

$$D_{\vec{k}\nu}(\omega) = \{\omega^2 - \omega_0^2(\vec{k}\nu) - \Pi_{\vec{k}\nu}(\omega)\}^{-1} ,$$

$$M_\sigma(\vec{p},\omega) = \sum_{\vec{q}\nu}|V_\nu(\vec{p}-\vec{q},\vec{p})|^2\iint\frac{d\omega_1 d\omega_2}{\pi^2}\,\frac{1-n(\omega_1)+N(\omega_2)}{\omega-(\omega_1+\omega_2)}\times \qquad /40/$$
$$\times \operatorname{Im}G_{\vec{p}-\vec{q}\sigma}(\omega_1)\operatorname{Im}D_{\vec{q}\nu}(\omega_2),$$

$$\Pi_{\vec{k}\nu}(\omega) = \sum_{\vec{q}}|V_\nu(\vec{q}-\vec{k},\vec{q})|^2\iint\frac{d\omega_1 d\omega_2}{\pi^2}\,\frac{n(\omega_1)-n(\omega_2)}{\omega+\omega_1-\omega_2}\times$$
$$\times\sum_\sigma \operatorname{Im}G_{\vec{q}-\vec{k}\sigma}(\omega_1)\operatorname{Im}G_{\vec{q}\sigma}(\omega_2) .$$

В настоящей работе для приближенного самосогласованного вычисления функций Грина G и D воспользуемся полюсным приближением для спектральных интенсивностей в M и П /первое итерационное приближение/:

$$\operatorname{Im} G_{\vec p\sigma}(\omega_1 + i\epsilon) = -\pi\delta(\omega_1' - \epsilon(\vec p\sigma)), \qquad /41/$$

$$\operatorname{Im} D_{\vec q\nu}(\omega_2 + i\epsilon) = -\pi \frac{1}{2\omega_{\vec q\nu}} \{\delta(\omega_2 - \omega_{\vec q\nu}) - \delta(\omega_2 + \omega_{\vec q\nu})\}. \qquad /42/$$

Подставив /41/ и /42/ в /40/, получим:

$$M_\sigma(\vec p,\omega) = \sum_{\vec q\nu} \frac{|V_\nu(\vec p-\vec q,\vec p)|^2}{2\omega_{\vec q\nu}} \left\{ \frac{1 + N(\omega_{\vec q\nu}) - n(\epsilon(\vec p-\vec q,\sigma))}{\omega - \omega_{\vec q\nu} - \epsilon(\vec p-\vec q,\sigma)} + \right.$$
$$\left. + \frac{N(\omega_{\vec q\nu}) - n(\epsilon(\vec p-\vec q,\sigma))}{\omega + \omega_{\vec q\nu} - \epsilon(\vec p-\vec q,\sigma)} \right\}, \qquad /43/$$

$$\Pi_{\vec k\nu}(\omega) = \sum_{\vec q\sigma} |V_\nu(\vec q-\vec k,\vec q)|^2 \frac{n(\epsilon(\vec q-\vec k,\sigma)) - n(\epsilon(\vec q,\sigma))}{\omega - \epsilon(\vec q,\sigma) + \epsilon(\vec q-\vec k,\sigma)}, \qquad /44/$$

где $\epsilon(\vec k\sigma)$ и $\omega_{\vec q\nu}$ - перенормированные энергии электронов и фононов, которые определяются из уравнений [15]

$$\epsilon(\vec k\sigma) - \epsilon^{0}(\vec k\sigma) - M(\vec k, \epsilon(\vec k\sigma)) = 0,$$
$$\omega_{\vec q\nu} - \omega_0(\vec q\nu) - \Pi_{\vec q\nu}(\omega_{\vec q\nu}) = 0. \qquad /45/$$

Таким образом, мы пришли к самосогласованной системе нелинейных уравнений, которые описывают перенормировку электронного и фононного спектров. На основе уравнений /45/ вычисляется сдвиг и затухание электронов и фононов[15]. В последнее время большой интерес вызывает теоретическое вычисление ширины фононной линии в переходных металлах, как Pd и Nb, и сравнение этих расчетов с результатами неупругого рассеяния медленных нейтронов [19-23].

Следуя [15], получим из /45/ выражение для затухания фононов $\Gamma_{\vec q\nu}(\omega) = \operatorname{Im}\Pi_{\vec q\nu}(\omega + i\epsilon)$ в виде

$$\tilde\Gamma_{\vec q\nu} = \Gamma_{\vec q\nu}(\omega_{\vec q\nu})\left[1 - \left(\frac{d\Pi_{\vec q\nu}}{d\omega}\right)_{\omega=\omega_{\vec q\nu}}\right]^{-1}. \qquad /46/$$

В отличие от работ [21,22], где при вычислении затухания фононов матричный элемент электрон-фононного взаимодействия вычислялся с помощью RMTA [24], в настоящей работе использование модели БЛФ позволяет записать матричный элемент через характерные параметры переходного металла M, q_0, $t^{\circ}(\vec R_\kappa)$; последние два, как и величина кулоновского взаимодействия U, являются подгоночными

параметрами. В отличие от модели Фрелиха модель БЛФ позволяет также учитывать анизотропию и интегрирование по сферической поверхности Ферми не применимо. Выражения для спектров $\epsilon(\vec k\sigma)$ и $\omega_{\vec q\nu}$ могут быть найдены численным образом.

Оценим температурную зависимость массового оператора $M_\sigma(\vec p\omega)$ /43/ при низких температурах. Простые расчеты для /43/ дают

$$M_\sigma(\vec p\omega) \sim \frac{4q_0^2}{NM}\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\sum_\kappa \int dq\, q^2 \int d\Omega\, (t^{\circ}(R_\kappa))^2 \cos^2(\vec R_\kappa\cdot\vec p) \times$$
$$\times \left(\vec R_\kappa \frac{\vec q}{|\vec q|}\right)^2 q^2 \sum_\nu \frac{|\vec e_{0\nu}|^2}{2v_\nu q} P\left(\frac{1}{\omega - \epsilon(p-q,\sigma)}\right)\frac{1}{e^{\beta v_\nu q} - 1} \sim T^4, \qquad /47/$$

где

$$\omega_{q\nu} = v_\nu q.$$

6. РЕНОРМИРОВАННЫЙ СПЕКТР ИЗОЛЯТОРА МОТТА-ХАББАРДА

В настоящем разделе вычислим ренормированный электронный спектр моттовского изолятора или полупроводника. Для этого запишем гамильтониан системы в виде суммы операторов /1/, /14/ и /15/ в предствлении Ванье. Рассмотрим случай, когда $U/W > 1$. Такая ситуация реализуется в целом ряде соединений переходных металлов, а именно, в окислах и сульфидах[25]. Запишем уравнение движения для одноэлектронной ФГ $G_{jj'\sigma}(t) = \langle\langle a_{j\sigma}(t)\, a^+_{j'\sigma}(t')\rangle\rangle$:

$$(\omega - t_0)G_{jj'\sigma}(\omega) = \delta_{jj'} + \sum t_{j,j+\kappa} G_{j+\kappa,j'\sigma}(\omega) + U\Gamma_{jj'\sigma}(\omega) +$$
$$+ \sum_{q\nu\kappa} A_{q\nu}(j, j+\kappa)\,\Phi_{q\nu,j+\kappa;j'\sigma}, \qquad /48/$$

где

$$\Gamma_{jj'\sigma}(\omega) = \langle\langle a_{j\sigma} n_{j-\sigma} | a^+_{j'\sigma}\rangle\rangle_\omega,$$
$$\Phi_{q\nu,j'',j'\sigma}(\omega) = \langle\langle Q_{q\nu} a_{j''\sigma} | a^+_{j'\sigma}\rangle\rangle_\omega. \qquad /49/$$

Для функции Грина $\Gamma_{jj'\sigma}$ имеем уравнение

$$\omega\Gamma_{jj'\sigma}(\omega) = \delta_{jj'}\langle n_{j-\sigma}\rangle + t_0\Gamma_{jj'\sigma} + \sum_n \{ t_{jn} \langle\langle n_{j-\sigma} a_{n\sigma} | a^+_{j'\sigma}\rangle\rangle_\omega +$$
$$+ t_{jn}\langle\langle a_{j-\sigma} a_{n-\sigma} a_{j\sigma} | a^+_{j'\sigma}\rangle\rangle_\omega - t_{nj}\langle\langle a^+_{n-\sigma} a_{j-\sigma} a_{j\sigma} | a^+_{j'\sigma}\rangle\rangle_\omega \} +$$
$$+ U\Gamma_{jj'\sigma}(\omega) + \sum_{q\nu j''}\{ A_{q\nu}(j,j'') \langle\langle Q_{q\nu} n_{j-\sigma} a_{j''\sigma} | a^+_{j'\sigma}\rangle\rangle_\omega +$$

$$+ A_{q\nu}(j,j'') \ll Q_{q\nu} a^{+}_{j-\sigma} a_{j''-\sigma} a_{j\sigma} | a^{+}_{j'\sigma} \gg_{\omega} -$$

$$- A_{q\nu}(j'',j) \ll Q_{q\nu} a^{+}_{j''-\sigma} a_{j-\sigma} a_{j\sigma} | a^{+}_{j'\sigma} \gg_{\omega} \} . \qquad /50/$$

Электронную подсистему в уравнениях /48/ и /50/ описываем в приближении "Хаббард-1". Этому приближению соответствуют следующие расцепления:

$$\ll Q_{q\nu} n_{j-\sigma} a_{n\sigma} | a^{+}_{j'\sigma} \gg \approx \langle n_{j-\sigma} \rangle \Phi_{q\nu,\, n;\, j'\sigma} ,$$

$$\ll Q_{q\nu} a^{+}_{j-\sigma} a_{n-\sigma} a_{j\sigma} | a^{+}_{j'\sigma} \gg \approx \langle a^{+}_{j-\sigma} a_{n-\sigma} \rangle \Phi_{q\nu,\, j;\, j'\sigma}, \qquad /51/$$

$$\ll Q_{q\nu} a^{+}_{n-\sigma} a_{j\sigma} a_{j-\sigma} | a^{+}_{j'\sigma} \gg \approx \langle a^{+}_{n-\sigma} a_{j-\sigma} \rangle \Phi_{q\nu,\, j,\, j'\sigma} .$$

С учетом /51/ получим для фурье-образа $G_{jj'\sigma}(\omega)$

$$\omega G_{jj'\sigma}(\omega) = \{1 - \frac{Un_{-\sigma}}{\omega - t_0 - U}\}\{\delta_{jj'} + \sum_{\kappa} t_{j,j+\kappa} G_{j+\kappa,\, j'\sigma}(\omega)\} +$$

$$+ \{1 + \frac{Un_{-\sigma}}{\omega - t_0 - U}\} \sum_{q\nu\kappa} A_{q\nu}(j, j+\kappa)\, \Phi_{q\nu,\, j+\kappa;\, j'\sigma}(\omega) . \qquad /52/$$

Для получения уравнения Дайсона продифференцируем ФГ в правой части /52/ по второму времени t'. После несложных вычислений получим:

$$G_{\sigma}(\vec{k}, \omega) = G^{o}_{\sigma}(\vec{k}, \omega) + G^{o}_{\sigma}(\vec{k}, \omega) P_{\sigma}(\vec{k}, \omega) G^{o}_{\sigma}(\vec{k}, \omega) . \qquad /53/$$

Здесь введем обозначения

$$G_{\sigma}(\vec{k}, \omega) = N^{-1} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{R}_j - \vec{R}_{j'})} G_{jj'\sigma}(\omega) , \qquad /54/$$

$$G^{o}_{\sigma}(\vec{k}, \omega) = \{ F^{\sigma}_{0}(\omega) - (\epsilon_{\vec{k}} - t_0) \}^{-1} , \qquad /55/$$

$$F^{\sigma}_{0}(\omega) = \{ \frac{1 - n_{-\sigma}}{\omega - t_0} + \frac{n_{-\sigma}}{\omega - t_0 - U} \} . \qquad /56/$$

Оператор рассеяния P имеет вид

$$P_{\sigma}(\vec{k}\omega) = N^{-1} \sum_{q\nu j_2} \sum_{q'\nu' j'_2} \sum_{jj'} A_{q\nu}(j, j_2) A_{q'\nu'}(j'_2, j) e^{i\vec{k}(\vec{R}_j - \vec{R}_{j'})} \times \qquad /57/$$

$$\times \ll Q_{q\nu} a_{j_2\sigma} || Q^{+}_{q'\nu'} a^{+}_{j'_2\sigma} \gg_{\omega} .$$

Массовый оператор $M_{\sigma}(\vec{k}, \omega) = \{P_{\sigma}(\vec{k}\omega)\}^{p}$ позволяет записать решение задачи в виде

$$G_{\sigma}(\vec{k}\omega) = \{ F^{\sigma}_{0}(\omega) - (\epsilon_{\vec{k}} - t_0) - M_{\sigma}(\vec{k}, \omega) \}^{-1} . \qquad /58/$$

Приближенное самосогласованное выражение для массового оператора найдем, как и в разделе 3, пренебрегая перенормировкой вершины:

$$M_{\sigma}(\vec{k}, \omega) = \sum_{\vec{q}\nu} |A_{\vec{q}\nu}(\vec{k})|^2 \iint \frac{d\omega_1\, d\omega_2}{\pi^2} \frac{1 + N(\omega_2) - n(\omega_1)}{\omega - \omega_1 - \omega_2} \times \qquad /59/$$

$$\times \operatorname{Im} D_{\vec{q}\nu}(\omega_2 + i\epsilon) \operatorname{Im} G_{\vec{k}\sigma}(\omega_1 + i\epsilon) ,$$

где

$$|A_{\vec{q}\nu}(\vec{k})|^2 = \frac{q_0^2}{NM} \Big| \sum_{\kappa} \frac{t^{o}(\vec{R}_{\kappa}) \vec{R}_{\kappa} \vec{e}_{q\nu}}{|\vec{R}_{\kappa}|} (e^{i\vec{k}\vec{R}_{\kappa}} - e^{i(\vec{k}+\vec{q})\vec{R}_{\kappa}}) \Big|^2 . \qquad /60/$$

Для приближенного самосогласованного вычисления массового оператора воспользуемся полюсными приближениями для спектральных интенсивностей /первое итерационное приближение/:

$$\operatorname{Im} D_{\vec{q}\nu}(\omega_2 + i\epsilon) = - \frac{\pi}{2\omega_{\vec{q}\nu}} \{ \delta(\omega_2 - \omega_{\vec{q}\nu}) - \delta(\omega_2 + \omega_{\vec{q}\nu}) \} , \qquad /61/$$

$$\operatorname{Im} G_{\vec{k}\sigma}(\omega + i\epsilon) = N^{-1} \sum_{jj'} e^{i\vec{k}(\vec{R}_j - \vec{R}_{j'})} \operatorname{Im} G_{jj'\sigma}(\omega + i\epsilon) , \qquad /62/$$

$$\operatorname{Im} G_{jj'\sigma}(\omega_1 + i\epsilon) = -\pi \delta_{jj'} \{ (1 - n_{-\sigma}) \delta(\omega_1 - t_0) + n_{-\sigma} \delta(\omega_1 - t_0 - U) \} .$$

Решение /62/ соответствует атомному решению модели Хаббарда, когда $t^{o}(\vec{R}_{\kappa}) = 0$, т.е. когда ширина зон обращается в нуль и спектр системы состоит из двух вырожденных уровней.

Подставляя /61/ и /62/ в /59/, получим

$$M_{\sigma}(\vec{k}, \omega) = \sum_{\vec{q}\nu} |A_{\vec{q}\nu}(\vec{k})|^2 \{ (1 - n_{-\sigma}) [\frac{1 + N(\omega_{q\nu}) - n(t_0)}{\omega - t_0 - \omega_{q\nu}} + \frac{N(\omega_{q\nu}) - n(t_0)}{\omega - t_0 + \omega_{q\nu}}] + \qquad /63/$$

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

Можно улучшить приближение /62/, если взять в качестве начального приближение [8]

$$\operatorname{Im} G_{\vec{k}\sigma}(\omega_1 + i\epsilon) = -\pi \{ (1 - n_{-\sigma}) \delta(\omega_1 - t_0 - (\epsilon_{\vec{k}} - t_0)(1 - n_{-\sigma})) + \qquad /64/$$

$$+ n_{-\sigma} \delta(\omega_1 - t_0 - U - (\epsilon_{\vec{k}} - t_0) n_{-\sigma}) \} .$$

Тогда для $M_\sigma(\vec{k},\omega)$ получим:

$$M_\sigma(\vec{k},\omega) = \sum_{\vec{q}\nu} |A_{\vec{q}\nu}(\vec{k})|^2 \{(1-n_{-\sigma})[\frac{1+N(\omega_{q\nu})-n(E_1(k))}{\omega-E_1(\vec{k})-\omega_{q\nu}} +$$

$$+\frac{N(\omega_{q\nu})-n(E_1(k))}{\omega-E_1(\vec{k})+\omega_{q\nu}}] + \qquad /65/$$

$$+ n_{-\sigma}[\frac{1+N(\omega_{q\nu})-n(E_2(k))}{\omega-\omega_{q\nu}-E_2(\vec{k})} + \frac{N(\omega_{q\nu})-n(E_2(k))}{\omega+\omega_{q\nu}-E_2(\vec{k})}]\},$$

где

$$E_1(\vec{k}) = t_0 + (\epsilon_{\vec{k}} - t_0)(1-n_{-\sigma}),$$

$$E_2(\vec{k}) = t_0 + U + (\epsilon_{\vec{k}} - t_0)n_{-\sigma}.$$

Массовый оператор /63/ и /65/ определяет перенормировку спектра электронов за счет взаимодействия с фононами, когда есть расщепление на две подзоны. Уравнение для спектра в этом случае имеет вид

$$F_0^\sigma(E) + t_0 - \epsilon_k - M_\sigma(k,E) = 0. \qquad /66/$$

Обозначим через $\tilde{E}_1^\circ < \tilde{E}_2^\circ$ решение гамильтониана Хаббарда в приближении "Хаббард I" [/8/]./Для упрощения записи рассматриваем "Хаббард I", а не "Хаббард III"./ Поправки к этим решениям за счет электрон-фононного взаимодействия найдем из /66/ в виде

$$\tilde{E}_{1,2} = \tilde{E}^\circ_{1,2} + \Delta E_{1,2}, \quad \Delta E_{1,2}/\tilde{E}^\circ_{1,2} < 1. \qquad /67/$$

Исходя из /67/ можно записать общее выражение для критерия перехода металл-изолятор:

$$\min_{\{k\}} \tilde{E}_2(k) - \max_{\{k\}} \tilde{E}_1(k) = 0. \qquad /68/$$

Или, записывая /68/ в явном виде,

$$\tilde{E}_2^\circ(0) + \tilde{E}_1^\circ(k_0) = \frac{M_\sigma(0,\omega)}{\frac{d}{d\omega}(F_0^\sigma(\omega)+M_\sigma(0,\omega))}\Big|_{\omega=\tilde{E}_2^\circ(0)} - \qquad /69/$$

$$- \frac{M_\sigma(k_0,\omega)}{\frac{d}{d\omega}(F_0^\sigma(\omega)+M_\sigma(k_0,\omega))}\Big|_{\omega=\tilde{E}_1^\circ(k_0)},$$

где k_0 - значение волнового вектора, при котором нижнее решение $\tilde{E}_1^\circ$ принимает максимальное значение. При T=0 поправки ΔE_1 и $\Delta E_2 < 0$. При $T \neq 0$ исследование физических решений уравнения /69/ необходимо проводить численным образом. Заметим, что условие /68/ в этом случае необходимо записать для решения "Хаббард III" при $U/W \sim 1$.

7. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

В работе [/14/] были получены уравнения сверхпроводимости для переходного металла в представлении Ванье для электрон-фононного взаимодействия общего вида:

$$H_{e-i} = \sum_{ij\sigma\alpha} T^\alpha_{ij} u^\alpha_{ij} a^+_{i\sigma} a_{j\sigma}, \qquad /70/$$

где $u^\alpha_{ij} = u^\alpha_i - u^\alpha_j$.

Полезно записать эти уравнения для рассмотренной в данной работе модели БЛФ, когда

$$T^\alpha_{ij} = q_0 t^\circ_{ij} \frac{R^\alpha_{ji}}{|\vec{R}_{ji}|}. \qquad /71/$$

Опуская промежуточные выкладки, для матричной ФГ $\bar{G}_{ij}(\omega)$,

$$\bar{G}_{ij}(\omega) = \begin{bmatrix} \langle\langle a_{i\uparrow}|a^+_{j\uparrow}\rangle\rangle_\omega & \langle\langle a_{i\uparrow}|a_{j\downarrow}\rangle\rangle_\omega \\ \langle\langle a^+_{i\downarrow}|a^+_{j\uparrow}\rangle\rangle_\omega & \langle\langle a^+_{i\downarrow}|a_{j\downarrow}\rangle\rangle_\omega \end{bmatrix}, \qquad /72/$$

запишем уравнение Дайсона /см. работу [/14/] /:

$$\bar{G}_{nj}(\omega) = \bar{G}^\circ_{nj} + \sum_{i\ell} \bar{G}^\circ_{ni} \bar{M}_{i\ell} \bar{G}_{\ell j}, \qquad /73/$$

где

$$\bar{M}_{i\ell} = \bar{M}^{e-ph}_{i\ell} + \bar{M}^{e-e}_{i\ell} \quad - \qquad /74/$$

массовый оператор.

Самосогласованное выражение для $\bar{M}^{e-ph}_{i\ell}$ в пренебрежении перенормировкой вершины имеет вид

$$\bar{M}^{e-ph}_{i\ell} = (-\frac{1}{\pi^2}) \iint_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 \frac{1+N(\omega_1)-n(\omega_2)}{\omega-\omega_1-\omega_2} \times \qquad /75/$$

$$\times \sum_{m\ell'} \sum_{\alpha\beta} T^\alpha_{im} \mathrm{Im}\langle\langle u^\alpha_{im}|u^\beta_{\ell'\ell}\rangle\rangle_{\omega_1} \tau_3 \mathrm{Im}\bar{G}_{m\ell'}(\omega_2)\tau_3 T^\beta_{\ell'\ell}.$$

С учетом /70/ получим из /75/ выражение для $M^{e-ph}_{i\ell}(\omega)$ в представлении Ванье. Переходя в импульсное пространство, запишем /73/ в следующем виде:

$$\bar{G}_k(\omega) = \bar{G}^\circ_k(\omega) + \bar{G}^\circ_k(\omega)\bar{M}_k(\omega)\bar{G}_k(\omega), \qquad /76/$$

Тогда для $M_\sigma(\vec{k},\omega)$ получим:

$$M_\sigma(\vec{k},\omega) = \sum_{\vec{q}\nu} |A_{\vec{q}\nu}(\vec{k})|^2 \{(1-n_{-\sigma})[\frac{1+N(\omega_{q\nu})-n(E_1(k))}{\omega-E_1(\vec{k})-\omega_{q\nu}} + \frac{N(\omega_{q\nu})-n(E_1(k))}{\omega-E_1(\vec{k})+\omega_{q\nu}}] + \qquad /65/$$

$$+ n_{-\sigma}[\frac{1+N(\omega_{q\nu})-n(E_2(k))}{\omega-\omega_{q\nu}-E_2(\vec{k})} + \frac{N(\omega_{q\nu})-n(E_2(k))}{\omega+\omega_{q\nu}-E_2(\vec{k})}]\},$$

где

$$E_1(\vec{k}) = t_0 + (\epsilon_{\vec{k}} - t_0)(1-n_{-\sigma}),$$

$$E_2(\vec{k}) = t_0 + U + (\epsilon_{\vec{k}} - t_0) n_{-\sigma}.$$

Массовый оператор /63/ и /65/ определяет перенормировку спектра электронов за счет взаимодействия с фононами, когда есть расщепление на две подзоны. Уравнение для спектра в этом случае имеет вид

$$F_0^\sigma(E) + t_0 - \epsilon_k - M_\sigma(k, E) = 0. \qquad /66/$$

Обозначим через $\tilde{E}_1^\circ < \tilde{E}_2^\circ$ решение гамильтониана Хаббарда в приближении "Хаббард I" /6/./Для упрощения записи рассматриваем "Хаббард I", а не "ХаббардIII"./ Поправки к этим решениям за счет электрон-фононного взаимодействия найдем из /66/ в виде

$$\tilde{E}_{1,2} = \tilde{E}_{1,2}^\circ + \Delta E_{1,2}, \quad \Delta E_{1,2}/\tilde{E}_{1,2}^\circ < 1. \qquad /67/$$

Исходя из /67/ можно записать общее выражение для критерия перехода металл-изолятор:

$$\min_{\{k\}} \tilde{E}_2(k) - \max_{\{k\}} \tilde{E}_1(k) = 0. \qquad /68/$$

Или, записывая /68/ в явном виде,

$$\tilde{E}_2^\circ(0) + \tilde{E}_1^\circ(k_0) = \frac{M_\sigma(0,\omega)}{\frac{d}{d\omega}(F_0^\sigma(\omega) + M_\sigma(0,\omega))}\Big|_{\omega=\tilde{E}_2^\circ(0)} - \frac{M_\sigma(k_0,\omega)}{\frac{d}{d\omega}(F_0^\sigma(\omega) + M_\sigma(k_0,\omega))}\Big|_{\omega=\tilde{E}_1^\circ(k_0)}, \qquad /69/$$

где k_0 - значение волнового вектора, при котором нижнее решение $\tilde{E}_1^\circ$ принимает максимальное значение. При T=0 поправки ΔE_1 и $\Delta E_2 < 0$. При $T \neq 0$ исследование физических решений уравнения /69/ необходимо проводить численным образом. Заметим, что условие /68/ в этом случае необходимо записать для решения "ХаббардIII" при $U/W \sim 1$.

7. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

В работе [14] были получены уравнения сверхпроводимости для переходного металла в представлении Ванье для электрон-фононного взаимодействия общего вида:

$$H_{e-i} = \sum_{ij\sigma\alpha} T_{ij}^\alpha u_{ij}^\alpha a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}, \qquad /70/$$

где $u_{ij}^\alpha = u_i^\alpha - u_j^\alpha$.

Полезно записать эти уравнения для рассмотренной в данной работе модели БЛФ, когда

$$T_{ij}^\alpha = q_0 t_{ij}^\circ \frac{R_{ji}^\alpha}{|\vec{R}_{ji}|}. \qquad /71/$$

Опуская промежуточные выкладки, для матричной ФГ $\bar{G}_{ij}(\omega)$,

$$\bar{G}_{ij}(\omega) = \begin{bmatrix} \langle\langle a_{i\uparrow} | a_{j\uparrow}^+ \rangle\rangle_\omega & \langle\langle a_{i\uparrow} | a_{j\downarrow} \rangle\rangle_\omega \\ \langle\langle a_{i\downarrow}^+ | a_{j\uparrow}^+ \rangle\rangle_\omega & \langle\langle a_{i\downarrow}^+ | a_{j\downarrow} \rangle\rangle_\omega \end{bmatrix}, \qquad /72/$$

запишем уравнение Дайсона /см. работу [14] /:

$$\bar{G}_{nj}(\omega) = \bar{G}_{nj}^\circ + \sum_{i\ell} \bar{G}_{ni}^\circ \bar{M}_{i\ell} \bar{G}_{\ell j}, \qquad /73/$$

где

$$\bar{M}_{i\ell} = \bar{M}_{i\ell}^{e-ph} + \bar{M}_{i\ell}^{e-e} \quad - \qquad /74/$$

массовый оператор.

Самосогласованное выражение для $\bar{M}_{i\ell}^{e-ph}$ в пренебрежении перенормировкой вершины имеет вид

$$\bar{M}_{i\ell}^{e-ph} = (-\frac{1}{\pi^2}) \iint_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 \frac{1+N(\omega_1)-n(\omega_2)}{\omega-\omega_1-\omega_2} \times \sum_{m\ell'} \sum_{\alpha\beta} T_{im}^\alpha \operatorname{Im}\langle\langle u_{im}^\alpha | u_{\ell'\ell}^\beta \rangle\rangle_{\omega_1} \tau_3 \operatorname{Im}\bar{G}_{m\ell'}(\omega_2) \tau_3 T_{\ell'\ell}^\beta. \qquad /75/$$

С учетом /70/ получим из /75/ выражение для $M_{i\ell}^{e-ph}(\omega)$ в представлении Ванье. Переходя в импульсное пространство, запишем /73/ в следующем виде:

$$\bar{G}_k(\omega) = \bar{G}_k^\circ(\omega) + \bar{G}_k^\circ(\omega) \bar{M}_k(\omega) \bar{G}_k(\omega), \qquad /76/$$

где

$$\bar G_k(\omega) = \begin{bmatrix} \langle\langle a_{k\uparrow}|a^+_{k\uparrow}\rangle\rangle_\omega & \langle\langle a_{k\uparrow}|a_{-k\downarrow}\rangle\rangle_\omega \\ \langle\langle a^+_{-k\downarrow}|a^+_{k\uparrow}\rangle\rangle_\omega & \langle\langle a^+_{-k\downarrow}|a_{-k\downarrow}\rangle\rangle_\omega \end{bmatrix}, \qquad /77/$$

$$\bar M_k(\omega) = \bar M_k^{e-ph}(\omega) + M_k^{e-e}(\omega), \qquad /78/$$

$$\bar M_k^{e-ph}(\omega) = \frac{q_0^2}{a^2 MN}\sum_{\vec q\lambda\alpha}\left[e^\alpha_{\vec q\lambda}\left(\frac{\partial\epsilon_k}{\partial k^\alpha} - \frac{\partial\epsilon_{k-q}}{\partial(k-q)^\alpha}\right)\right]^2 \times$$

$$\times\frac{1}{\pi^2}\iint_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 \frac{\frac{1}{2}\left(\mathrm{th}\frac{\beta\omega_1}{2}+\mathrm{cth}\frac{\beta\omega_2}{2}\right)}{\omega-\omega_1-\omega_2}\times \qquad /79/$$

$$\times\,\tau_3\,\mathrm{Im}\,\bar G_{k-q}(\omega_1+i\epsilon)\tau_3\,\mathrm{Im}\,D_{\vec q\lambda}(\omega_2+i\epsilon).$$

При выводе /79/ было учтено, что

$$\langle\langle u_i^\alpha|u_{\ell'}^\alpha\rangle\rangle_\omega = \frac{1}{NM}\sum_{\vec q\lambda} D_{\vec q\lambda}(\omega)\, e^\alpha_{\vec q\lambda}\, e^\alpha_{\vec q\lambda}\, e^{i\vec q(\vec R_i-\vec R_{\ell'})},$$

величина a - постоянная решетки. Для кулоновского члена ограничимся приближением Хартри-Фока /полное выражение см. в [14]/:

$$\bar M^{e-e}_{\vec k} = U\begin{bmatrix}\langle n_{k\downarrow}\rangle & -\langle a_{-k\downarrow}a_{k\uparrow}\rangle \\ -\langle a^+_{k\uparrow}a^+_{-k\downarrow}\rangle & -\langle n_{-k\uparrow}\rangle\end{bmatrix} =$$

$$= U\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\tau_3\,\mathrm{Im}\,\bar G_k(\omega)\tau_3\,\mathrm{th}\frac{\omega}{2T}. \qquad /80/$$

Полученные самосогласованные выражения для электрон-фононной и кулоновской части массового оператора /79/ и /80/ описывают сверхпроводящие свойства переходного металла в рамках модели БЛФ [1]. Эти уравнения аналогичны уравнениям Элиашберга [3] для простых металлов и позволяют исследовать сверхпроводящие свойства переходных металлов и сплавов в рамках единой системы уравнений. Они записаны через небольшое число характерных параметров переходного металла: q_0, a, M, U, $t°$. Учитывая, что кулоновский интеграл U является подгоночным параметром, можно вывести стандартные уравнения Элиашберга [3]:

$$[1-Z(\omega)]\omega = -\int_{-\infty}^{\infty} dz' K_{ph}(z',\omega)\,\mathrm{Re}\frac{z'}{\sqrt{z'^2-\Delta^2(z')}}\,\mathrm{sign}\,z', \qquad /81/$$

$$Z(\omega)\Delta(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dz' K_{ph}(z',\omega)\,\mathrm{Re}\frac{\Delta(z')}{\sqrt{z'^2-\Delta^2(z')}}\,\mathrm{sign}\,z' - \qquad /82/$$

$$-\,UN(0)\int_0^{\omega_c} dz'\,\mathrm{th}\frac{z'}{2T}\,\mathrm{Re}\frac{\Delta(z')}{\sqrt{z'^2-\Delta^2(z')}},$$

где

$$K_{ph}(z',\omega) = \int_0^\infty d\omega'\alpha^2(\omega')F(\omega')\,\frac{1}{2}\left\{\frac{\mathrm{th}\frac{z'}{2T}+\mathrm{cth}\frac{\omega'}{2T}}{z'+\omega'-\omega+i\epsilon} - \right. \qquad /83/$$

$$\left. - \frac{\mathrm{th}\frac{z'}{2T}-\mathrm{cth}\frac{\omega'}{2T}}{z'-\omega'-\omega+i\epsilon}\right\}.$$

Величина $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ - электрон-фононная спектральная функция [2,3]

$$\alpha^2(\omega)F(\omega) = \frac{q_0^2}{a^2MN}\int_{S_F}\frac{d^2k}{v_k}\int_{S_F}\frac{d^2k'}{v_{k'}}\sum_{\lambda\alpha}\left[e^\alpha_{k-k',\lambda}\left(\frac{\partial\epsilon_k}{\partial k^\alpha}-\frac{\partial\epsilon_{k'}}{\partial k'^\alpha}\right)\right]^2 \times \qquad /84/$$

$$\times\left(-\frac{1}{\pi}\right)\mathrm{Im}\,D_{k-k',\lambda}(\omega+i\epsilon)\Big/\int_{S_F}\frac{d^2k}{v_k}.$$

Уравнения /81/ и /82/ сводятся к линеаризованным уравнениям Элиашберга [3], которые и определяют температуру сверхпроводящего перехода.

8. ОБСУЖДЕНИЕ

В настоящей работе развита самосогласованная теория электрон-фононного взаимодействия в модели БЛФ [1] как для случая металла, когда $U/W < 1$, так и для изолятора Мотта-Хаббарда, когда $U/W > 1$. Найденные выражения /43/ и /44/ определяют ренормированные одночастичные плотности состояний электронов и фононов

$$N^e(\omega) = -\frac{1}{\pi N}\sum_{k\sigma}\mathrm{Im}\,G_{k\sigma}(\omega+i\epsilon), \qquad /85/$$

$$N^{ph}(\omega) = -\frac{1}{3\pi N}\sum_{k\nu}\mathrm{Im}\,D_{k\nu}(\omega+i\epsilon).$$

С учетом /84/ параметр электрон-фононного взаимодействия, определяющий ренормировку электронного спектра, можно представить в виде [2,3]

$$\lambda_{e-ph} = 2\int\omega^{-1}\alpha^2(\omega)F(\omega)d\omega. \qquad /86/$$

С помощью /86/ выражение для $N^e(\omega)$ запишем как

$$N^{e}(\epsilon_f) = N_0(\epsilon_f)(1 + \lambda_{e-ph}). \qquad /87/$$

В результате критерий магнетизма Стонера $UN^{e}(\epsilon_f) > 1$ примет вид

$$UN_0(\epsilon_f)(1 + \lambda_{e-ph}) > 1. \qquad /88/$$

Из /88/ следует, что электрон-фононное взаимодействие при низких температурах облегчает возникновение магнитоупорядоченного состояния за счет одевания электрона облаком фононов.

Сверхпроводящие свойства модели описываются на основе уравнений /81/, /82/, позволяющих изучать сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений в рамках единой системы уравнений [3,14]. Модель БЛФ оказалась также полезной для построения теории электропроводности в однозонном случае с учетом сдвига поверхности Ферми и ее деформации [26]. При этом получено существенно новое выражение для температурной зависимости электросопротивления при низких температурах, которое согласуется с результатами работы [24]. С учетом электрон-фононного взаимодействия в виде /24/ было найдено затухание магнонов в обобщенной модели РККИ. Получено выражение для низкотемпературной зависимости затухания в тяжелых редкоземельных металлах типа гадолиния [27]. В работе [12] было дано обобщение гамильтониана электрон-фононного взаимодействия для разупорядоченного бинарного сплава переходных металлов A_xB_{1-x}. Использование подхода [12,14] позволяет вывести уравнения сверхпроводимости, подобные /79/ и /80/, и для разупорядоченных сплавов.

Следует отметить, что модель БЛФ не свободна от недостатков и содержит целый ряд допущений. Однако проведенный в последние годы анализ показал [2,3,8,10,28,30], что во многих физически интересных случаях эти допущения оправданы и ведут к разумным следствиям.

Результаты настоящей работы и работ [12,14,26,27] также показывают, что модель БЛФ эффективна для описания различных свойств переходных металлов и их соединений.

В заключение выражаем благодарность Ф.Кристофу, Г.М.Вуйчичу, К.Эльку и К.И.Високиньскому за полезные обсуждения и замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Barišič S., Labbe J., Friedel J. Phys.Rev.Lett., 1970, 25, p. 919
2. Sinha S.K. In Dynamical Properties of Solids; Horton G.K., Maradudin A.A. eds. (North-Hollans Publishing Company, 1980), p. 1, chapt. 1.
3. Allen P.B. In Dynamical Properties of Solids; Horton G.K., Maradudin A.A. eds. (North-Holland Publishing Company, 1980), p. 95, chapt. 2.

4. Brovman E.G., Kagan Yu.M., Holas A. Zh.Eksp.Teor.Fiz., 1969, 57, p. 1635.
5. Brovman E.G., Kagan Yu.M. In Dynamical Properties of Solids; Horton G.K., Maradudin A.A. eds. (North-Holland Publishing Company, 1974), p. 191, chapt.1.
6. Hubbard J. Proc.Roy.Soc., 1963, A276, p. 238.
7. Mitra T.K. J.Phys.C: Solid State Phys., 1969, 2, p. 52; 1357.
8. Barišić S. Phys.Rev., 1972, B5, p. 932, 941.
9. Peter M. et al. Helvetica Phys.Acta, 1974, 47, p. 807.
10. Varma C.M. et al. Phys.Rev., 1979, B19, p. 6130.
11. Bjelis A., Saub K., Barišić S. Nuovo Cimento, 1974, 23B, p. 102.
12. Wysokiński K.I., Kuzemsky A.L. Communication JINR, E17-81-614, Dubna, 1981.
13. Poon S.J. Sol.St.Comm., 1976, 18, p. 1489.
14. Plakida N.M., Vujičić G.M., Kuzemsky A.L. JINR, P17-81-588, Dubna, 1981.
15. Bogolubov N.N., Tyablicov S.V. Soviet Phys.Doklady, 1959, 4, p. 604; Zubarev D.N. Sov.Phys.-Usp., 1960, 3, p. 320.
16. Plakida N.M. J.Phys. C: Solid State Phys., 1971, 4, p.1680.
17. Kuzemsky A.L. Teor.Math.Phys., 1978, 36, p. 208.
18. Migdal A.B. Zh.Eksp.Teor.Fiz., 1958, 34, p. 1438.
19. Shapiro S.M., Shirane G., Axe J.D. Phys.Rev., 1975, B12, p. 4899.
20. Butler W.H., Smith H.G., Wakabayashi N. Phys.Rev.Lett., 1977, 39, p. 1004.
21. Butler W.H., Pinski F.J., Allen P.B. Phys.Rev., 1979, B19, p. 3708.
22. Pinski F.J., Butler W.H. Phys.Rev., 1979, B19, p. 6010.
23. Youngblood R., Noda Y., Shirane G. Phys.Rev., 1979, B19, p. 6016.
24. Pinski F.J., Allen P.B., Butler W.H. Phys.Rev., 1981, B23, p. 5080.
25. Yoffa E.J., Rodrigues W.A., Adler D. Phys.Rev., 1979, B19, p. 1203.
26. Christoph V., Kuzemsky A.L. phys.stat.sol., 1982, B111, No. 1, p. K1.
27. Kuzemsky A.L., Christoph V., Frauenhaim Th. JINR, P17-81-561, Dubna, 1981.
28. Van Hay J.C. J.Phys. C: Solid State Phys., 1977, 10, L337.
29. Achkenazi J., Dacorogna M., Peter M. Sol.St.Comm., 1979, 29, p. 181.
30. Entin-Wohlman O. Sol.St.Comm., 1980, 34, p. 879.

Рукопись поступила в издательский отдел
28 июня 1982 года.

Куземский А.Л., Холас А., Плакида Н.М. Взаимодействие сильносвязанных электронов с фононами в переходных металлах и их соединениях P17-82-493

Вычислены перенормированные спектры сильносвязанных электронов и фононов в модели Барисича-Лаббе-Фриделя /БЛФ/, описывающей электрон-фононное взаимодействие в переходных металлах и их соединениях. С помощью метода двухвременных функций Грина получена самосогласованная система уравнений для электрон-фононной модели. Рассмотрены зонный и атомный пределы для модели Хаббарда. Найден модифицированный критерий магнетизма Стонера. Обсуждается влияние взаимодействия с фононами на переход металл-изолятор. Выведены уравнения сверхпроводимости Элиашберга для модели БЛФ.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Kuzemsky A.L., Holas A., Plakida N.M. Interaction of Tight-binding Electrons with Phonons in Transition Metals and Their Compounds P17-82-493

The renormalized electronic and phonon spectra of the Barisic-Labbe-Friedel model of transition metals and their compounds are calculated. By the method of double-time thermal Green functions the selfconsistent system of equations for electron-phonon model is obtained. In the band and the atomic limits for the Hubbard model the explicit solutions for the electronic and phonon spectra are obtained. The modified Stoner criterion and condition of the metal-insulator transition are discussed. The Eliashberg-type equations of superconductivity is obtained.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.