

97-248



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P17-97-248

В.А.Москаленко*

ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ
СИЛЬНО СКОРРЕКТИРОВАННЫХ СИСТЕМ
Предел сильной связи

Направлено в журнал «Теоретическая и математическая физика»

* Институт прикладной физики АН Молдовы, Кишинев

1997

Введение

В настоящей работе также, как в предыдущих [1,2], исследуется вопрос о взаимном влиянии двух взаимодействий, а именно: кулоновского отталкивания электронов и их взаимодействие с фононами на свойства систем с сильными корреляциями.

Для исследования этого влияния выбрана однозонная модель Хаббарда [3], дополненная взаимодействием Холстейна [4] между локальной флуктуацией заряда электрона и локальным фононом.

Рассматриваемый вопрос актуален особенно в связи с выяснением роли фононов в процессе установления явления высокотемпературной сверхпроводимости в купратных соединениях.

Ниже предполагается, что оба упомянутых выше взаимодействия являются сильными и, следовательно, нуждаются в адекватном рассмотрении, которое, естественно, предполагает выход за рамки теории слабой связи.

При этом сильное кулоновское отталкивание электронов включено в нулевой гамильтониан локализованных электронов, а линейное электрон-решеточное взаимодействие исключается при помощи канонического преобразования Ланг — Фирсова [5].

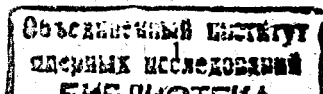
В результате этого преобразования возникают электроны, окруженные облаком фононов, т.е. поляроны. Процесс перескока поляронов между узлами решетки приводит к их делокализации и возникновению проводимости. Ниже используется формализм мацубаровских функций Грина и новый диаграммный подход, разработанный в работах [6—8], для электронной подсистемы.

В связи с предполагаемым сильным электрон-фононным взаимодействием диаграммная техника для фононной подсистемы несколько модифицирована и использует вместо линейных экспоненциальные по фононным операторам формы и соответствующие фононные пропагаторы.

Как будет видно из дальнейшего, это последнее обстоятельство приводит к возникновению коллективных колебаний фононных облаков, окружающих поляроны, частота которых значительно больше частоты исходных фононов.

Испускание и поглощение этих коллективных мод меняет уже в простейшем локальном приближении энергии квантовых переходов полярона на узле решетки.

Ниже для краткости используются без повторения основные определения работы [2].



1. Коллективная фононная мода

Рассмотрим характерный пропагатор фононов, окружающих полярон:

$$\langle T e^{i\bar{g}(p(\tau_1) - p(\tau_2))} \rangle_0 = \exp \left[-\frac{\bar{g}^2}{2} \langle T(p(\tau_1) - p(\tau_2))^2 \rangle_0 \right] = \exp [-\sigma(\beta) + \sigma(|\tau_1 - \tau_2|)], \quad (1)$$

$$\sigma(|\tau|) = \frac{\bar{g}^2}{2} \frac{\text{ch} [\hbar\omega(\beta/2 - |\tau|)]}{\text{sh}(\hbar\omega\beta/2)} \quad (2)$$

Здесь p_i — импульс локализованного на i -м узле кристаллической решетки бездисперсного фонона с частотой ω , $\bar{g} = g/\hbar\omega$ — безразмерная электрон-фононная константа связи, β — обратная температура $0 < \tau < \beta$ — мнимое время мацубаровской функции Грина.

Рассмотрим фурье-образ этой функции

$$\Phi(i\Omega_m) = \frac{e^{-\sigma(\beta)}}{2} \int_{-\beta}^{\beta} e^{i\Omega_m \tau + \sigma(|\tau|)} d\tau, \quad (3)$$

где $\Omega_m = 2m\pi/\beta$ — четная мацубаровская частота.

Все дальнейшие вычисления выполняются в предположении, что константа связи \bar{g} велика, т.е. рассматривается асимптотика (3) при

$$\alpha \equiv \frac{\bar{g}^2}{2}, \quad \alpha \gg 1. \quad (4)$$

Благодаря четности функции σ имеем

$$\Phi(i\Omega) = e^{-\sigma(\beta)} \int_0^{\beta} \cos \Omega \tau e^{\sigma(\tau)} d\tau = \beta \cos \eta e^{-\sigma(\beta)} \int_0^1 \cos \eta t e^{\bar{\sigma}(t)} dt, \quad (5)$$

$$\bar{\sigma}(t) = \alpha \frac{\text{ch} \xi t}{\text{sh} \xi}, \quad \xi = \frac{\hbar\omega\beta}{2}, \quad \eta = \frac{\beta\Omega}{2} = m\pi.$$

Интеграл (5) является интегралом Лапласа [9] с большим положительным параметром α . Функция $\bar{\sigma}(t)$ имеет максимум в точке $t=1$, совпадающим с одним из концов отрезка интегрирования $[0, 1]$. Этот максимум тем резче, чем больше α .

Поэтому интеграл (5) можно приближенно заменить интегралом по малой окрестности точки $t=1$, и это приближение будет тем точнее, чем больше α .

Тогда получаем ($\epsilon > 0$)

$$\Phi(i\Omega) \simeq \beta \cos \eta e^{-\sigma(\beta)} \int_{1-\epsilon}^1 \cos \eta t e^{\bar{\sigma}(t)} dt. \quad (6)$$

Разложение в ряд Тейлора вблизи $t=1$ дает асимптотическое разложение

$$\Phi(i\Omega) \simeq \beta \left[\frac{\bar{\sigma}(1)}{\eta^2 + (\bar{\sigma}(1))^2} - \frac{\bar{\sigma}'(1)\bar{\sigma}''(1)(3\eta^2 - (\bar{\sigma}(1))^2)}{[\eta^2 + (\bar{\sigma}(1))^2]^3} + \dots \right], \quad (7)$$

$$\bar{\sigma}(1) = \sigma(\beta) = \alpha \text{cth} \xi, \quad \bar{\sigma}'(1) = \alpha \xi.$$

В простейшем приближении получаем свободный пропагатор коллективной моды с частотой ω_c

$$\Phi(i\Omega) \simeq \frac{2\omega_c}{\Omega^2 + \omega_c^2}, \quad \omega_c = \alpha\omega. \quad (8)$$

В принятом приближении (8) не проявляется затухание этой моды благодаря ангармонизму этих колебаний. Это выражение существенным образом отличается от фурье-образа пропагатора свободного фонона

$$D^0(i\Omega) = -\frac{\omega}{\Omega^2 + \omega^2}.$$

2. Электронный энергетический спектр

В присутствии фононов локальная функция Грина электронов превращается в ренормированную поляронную величину

$$\tilde{G}_{\sigma}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2) = G_{\sigma}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2) e^{-\sigma(\beta) + \sigma(|\tau_1 - \tau_2|)}, \quad (9)$$

где

$$G_{\sigma}^{(0)}(\tau) = -\frac{\theta(\tau)}{Z_0} \left[e^{-\beta E_0 + (E_0 - E_{\sigma})\tau} + e^{-\beta E_{-\sigma} + (E_{-\sigma} - E_2)\tau} \right] + \quad (10)$$

$$+ \frac{\theta(-\tau)}{Z_0} \left[e^{-\beta E_{\sigma} + (E_0 - E_{\sigma})\tau} + e^{-\beta E_2 + (E_{-\sigma} - E_2)\tau} \right],$$

Z_0 — является статистической суммой узельного электрона с энергетическим спектром $E_0, E_{\pm\sigma}, E_2$:

$$E_0 = 0, \quad E_{\sigma} = -\bar{\mu} - \frac{\hbar}{2} \sigma, \quad E_2 = \bar{U} + E_{+} + E_{-}, \quad (11)$$

$$Z_0 = e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_{\sigma}} + e^{-\beta E_{-\sigma}} + e^{-\beta E_2}.$$

Химический потенциал системы μ и исходное кулоновское отталкивание электронов U модели [3] оказываются ренормированными благодаря возникающему косвенному притяжению электронов вследствие их прямого взаимодействия с фононами:

$$\tilde{\mu} = \mu + \alpha\hbar\omega, \quad \tilde{U} = U - 2\alpha\hbar\omega, \quad (12)$$

\hbar — есть внешнее магнитное поле, которое будет полагаться в дальнейшем отсутствующим, ($E_+ = E$).

Рассмотрим фурье-образ функции Грина (9)

$$\tilde{G}_\sigma^{(0)}(i\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} e^{i\omega_n \tau} \tilde{G}_\sigma^{(0)}(\tau) d\tau, \quad (13)$$

$$\omega_n = (2n+1)\pi/\beta.$$

Асимптотическая оценка этого интеграла при $\alpha \gg 1$ дает

$$\tilde{G}_\sigma^{(0)}(i\omega) \simeq \frac{1}{Z_0} \left[\frac{e^{-\beta E_0}}{\lambda_\sigma(i\omega) - \hbar\omega_c} + \frac{e^{-\beta E_\sigma}}{\lambda_\sigma(i\omega) + \hbar\omega_c} + \frac{e^{-\beta E_{-\sigma}}}{\bar{\lambda}_{-\sigma}(i\omega) - \hbar\omega_c} + \frac{e^{-\beta E_2}}{\bar{\lambda}_{-\sigma}(i\omega) + \hbar\omega_c} \right], \quad (14)$$

где

$$\lambda_\sigma(i\omega) = i\omega + E_0 - E_\sigma, \quad \bar{\lambda}_{-\sigma}(i\omega) = i\omega + E_{-\sigma} - E_2. \quad (15)$$

Формула (14) указывает на существенное изменение двух энергий квантовых переходов на узле, а именно: $E_0 - E_\sigma$ и $E_{-\sigma} - E_2$ и замены их на четыре новые величины $E_0 - E_\sigma \pm \hbar\omega_c$ и $E_{-\sigma} - E_2 \pm \hbar\omega_c$. Изменение произошло благодаря тому, что в присутствии фононного облака квантовые переходы на одном узле решетки могут происходить как с испусканием, так и с поглощением коллективной фононной моды.

Последующий учет перескоков поляронов между узлами решетки приводит к делокализации поляронов и их функции Грина и к перенормировке последней.

Если принять во внимание простейшие цепочечные диаграммы, описанные в работах [6—8], и тем самым опустить все неприводимые многочастичные функции Грина, то возникнет приближение, известное как Хаббард I аппроксимация. В нашем случае модели Хаббарда — Холстейна [3,4] оно имеет вид

$$\tilde{G}_\sigma^J(\mathbf{k}, i\omega) = \frac{\tilde{G}_\sigma^{(0)}(i\omega)}{1 - \varepsilon(\mathbf{k})\tilde{G}_\sigma^{(0)}(i\omega)}. \quad (16)$$

Выполним аналитическое продолжение этой функции с дискретного ряда точек $i\omega_n$ на верхнюю полуплоскость $z = i\omega_n$ ($\omega_n > 0$).

Подставим (14) в (16) и рассмотрим полюса запаздывающей функции Грина, которые определяют ренормированный энергетический спектр.

Благодаря делокализации, 4 энергии квантовых переходов на узле $E_0 - E_\sigma \pm \hbar\omega_c$ и $E_{-\sigma} - E_2 \pm \hbar\omega_c$ расщепляются на четыре подзоны $E_i(\mathbf{k})$ $i = +1, 2, 3, 4$. Эти значения определяются как корни уравнения четвертой степени для $E(\mathbf{k})$:

$$[E^2 - \hbar^2\omega_c^2][(E' - \tilde{U})^2 - \hbar^2\omega_c^2] = \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{Z_0} \{ [E'(1 + \zeta) + \hbar\omega_c(1 - \zeta)] \times \\ \times [(E' - \tilde{U})^2 - \hbar^2\omega_c^2] + \zeta[(E' - \tilde{U})(1 + \zeta\chi) + \hbar\omega_c(1 - \zeta\chi)][E^2 - \hbar^2\omega_c^2] \}, \quad (17)$$

где

$$E' = E(\mathbf{k}) + \tilde{\mu}, \quad \zeta = e^{\beta\tilde{\mu}}, \quad \chi = e^{-\beta\tilde{U}}.$$

В частном случае, когда происходит компенсация кулоновского отталкивания электронов и их косвенного притяжения благодаря фононам, т.е. при $\tilde{U} = 0$ уравнение (17) сводится к более простому выражению

$$[E^2 - \omega_c^2\hbar^2] \left\{ E^2 - \varepsilon(\mathbf{k}) \left[E + \omega_c\hbar \frac{1 - \zeta}{1 + \zeta} \right] - \omega_c^2\hbar^2 \right\} = 0. \quad (18)$$

В этом случае энергетический спектр состоит из двух локальных уровней

$$E = -\tilde{\mu} + \hbar\omega_c = -\mu, \quad (19)$$

$$E = -\tilde{\mu} - \hbar\omega_c = -\mu - 2\hbar\omega_c$$

и двух энергетических подзон

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = -\tilde{\mu} + \frac{1}{2} \left[\varepsilon(\mathbf{k}) \pm \sqrt{\left(\varepsilon(\mathbf{k}) + 2\hbar\omega_c \frac{1 - \zeta}{1 + \zeta} \right)^2 + \frac{16\zeta\hbar^2\omega_c^2}{(1 + \zeta)^2}} \right]. \quad (20)$$

Выводы

В настоящей работе на основе предположения о сильной электрон-фононной связи исследован спектр коллективного движения фононов и характер поляронного спектра как в локализованном, так и в делокализованном приближении. Частота коллективной фононной моды ω_c при $\alpha \gg 1$, что предполагается, значительно превосходит частоту индивидуального свободного фонона. Благодаря испусканию и поглощению коллективной фононной моды меняется существенно энергия квантовых переходов полярона на узле

решетки. Возникают вместо двух четыре энергии таких переходов. Учет пере-скоков поляронов между узлами решетки уже в простейшем приближении цепочечных диаграмм приводит к расширению этих уровней энергии и к возникновению четырех энергетических подзон. Даже при полной компен-сации кулоновского отталкивания электронов притяжением, обусловленным фононами, имеет место зонное расщепление, но на этот раз на две подзоны.

Автор пользуется случаем выразить признательность профессорам Н.М.Плакиде и П.Ентелю за интерес к работе и ценные замечания.

Работа выполнена по программе Гейзенберга — Ландау.

Литература

1. Moskalenko V.A., Wang Xi-Fu, Wang Zhi-Xing, Yi Xue-Xi. — ТМФ, 1995, т.103, с.138.
2. Москаленко В.А. — ТМФ, 1997, т.111, с.439.
3. Hubbard J. — J. Proc. R. Soc. A, 1963, v.276, p.233.
4. Holstein T. — Ann. Phys., 1959, v.8, p.325.
5. Ланг И.Г., Фирсов Ю.А. — ЖЭТФ, 1962, т.43, с.1843.
6. Владимир М.И., Москаленко В.А. — ТМФ, 1990, т.82, с.428.
7. Вакару С.И., Владимир М.И., Москаленко В.А. — ТМФ, 1990, т.85, с.248.
8. Moskalenko V.A., Cojocarui S.P., Vladimir M.I. — Diagram Technique for Strongly Interacting Fermion Systems. One- and Two-Band Hubbard Models. Preprint International Centre for Theoretical Physics, 1994, IC/94/182.
9. Федорюк М.В. — Асимптотика: интегралы и ряды. М., Наука, 1987.

Рукопись поступила в издательский отдел

8 августа 1997 года.