

НАРУШЕНИЕ ТЕОРЕМЫ МИГДАЛА ДЛЯ СИЛЬНО СВЯЗАННОЙ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЙ СИСТЕМЫ

А.С.Александров, В.Н.Гребенев, Е.А.Мазур

В рамках классической теории электрон-фононного взаимодействия в металлах показано, что при сильной связи $\lambda > 1$ учет конечной ширины электронной зоны приводит к ее поляронному коллапсу. Перенормированная электрон-фононным взаимодействием ширина зоны оказывается меньше характерных фононных частот и взаимодействие становится существенно неадиабатическим.

К настоящему времени синтезирован обширный класс сверхпроводящих соединений, которые отличаются большой величиной константы связи электронов с фононами $\lambda > 1$ и даже $\lambda \gg 1$: соединения А-15, фазы Шевреля, карбиды, нитриды переходных металлов, керамика

BaVіPbO₃, соединения меди и лантана, SrTiO₃. Возможно, что в соединениях с тяжелыми фермионами (СТФ) *f*-электроны также сильно связаны с колебаниями решетки. Названные вещества обладают аномальными свойствами в нормальном и сверхпроводящем состоянии, которые не описываются обычной теорией электрон-фононного взаимодействия в металлах^{1, 2}. Причиной аномального поведения интерметаллидов с $\lambda > 1$, как отмечалось ранее³, (см. также работу⁴) может быть поляронный коллапс (сужение) электронной зоны, обусловленный локальной нестабильностью решетки, в результате которой резко увеличивается масса электрона, а в сверхпроводящих соединениях образуются тяжелые заряженные биполроны малого радиуса³.

В настоящем сообщении мы показываем, что если учесть дискретность решетки, т. е. конечную ширину электронной зоны *D*, то поляронный коллапс возникает при $\lambda > 1$ уже в рамках классического рассмотрения электрон-фононного взаимодействия¹, основанного на значительном различии электронных энергий ($\sim D$) и характерных фононных частот $\omega \ll D$. Как известно, последнее неравенство позволяет пренебречь вершинными фононными поправками в уравнении для собственно-энергетической части Σ электронной гриновской функции $G(\mathbf{k}, i\omega_n)$ ("теорема" Мигдала):

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = -T \sum_{\mathbf{k}', n'} |\tilde{g}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}|^2 D(\mathbf{k} - \mathbf{k}', i\omega_n - i\omega_{n'}) G(\mathbf{k}', i\omega_{n'}), \quad (1)$$

где \tilde{g} – перенормированная кулоновским взаимодействием электрон-фононная вершина; $D(\mathbf{q}, i\nu_n)$ – точная гриновская функция фононов; $\omega_n = (2n + 1)\pi T$, $\nu_n = 2n\pi T$, ($n = 0, \pm 1, \dots$). С помощью стандартных преобразований уравнение (1) можно привести к следующему виду:

$$\text{Re } \Sigma(\epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon' N(\epsilon') \int_0^{\infty} d\Omega \alpha^2 F(\Omega) \left[\frac{n(\Omega) + f(-\epsilon')}{\epsilon - \Omega - \epsilon'} + \frac{n(\Omega) + f(\epsilon')}{\epsilon + \Omega - \epsilon'} \right], \quad (2)$$

$$\text{Im } \Sigma(\epsilon) = -\pi \int_0^{\infty} d\Omega \alpha^2 F(\Omega) [N(\epsilon - \Omega)(n(\Omega) + f(\Omega - \epsilon)) + N(\epsilon + \Omega)(n(\Omega) + f(\epsilon + \Omega))] \text{sign } (\epsilon),$$

где $\Sigma(\epsilon)$ – аналитическое продолжение $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)$ на вещественную ось $i\omega_n \rightarrow \epsilon + i\eta$; $f(\epsilon)$, $n(\Omega)$ – фермиевская и бозевская функции соответственно,

$$\alpha^2 F(\Omega) = N_0^{-1}(\xi) N_0^{-1}(\xi') \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} |\tilde{g}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}|^2 B(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \Omega) \delta(\xi - \xi_{\mathbf{k}}) \delta(\xi' - \xi_{\mathbf{k}'});$$

$B(\mathbf{q}, \Omega)$ – спектральная плотность фононной функции Грина; $\xi_{\mathbf{k}}$, $N_0(\xi)$ – энергетический спектр и плотность электронных состояний в идеальной решетке (без учета электрон-фононного взаимодействия). Перестройка электронного спектра в результате электрон-фононного взаимодействия описывается одночастичной плотностью состояний $N(\epsilon)$:

$$N(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi N_0(\xi) \text{Im } G(\xi, \epsilon), \quad (3)$$

$$G^{-1}(\xi, \epsilon) = \epsilon - \xi + \Sigma(\epsilon).$$

Для наглядности мы ограничимся эйнштейновской моделью фононного спектра:

$$\alpha^2 F(\Omega) = \frac{1}{2} N_0^{-1}(0) \lambda \omega \delta(\Omega - \omega) \quad (4)$$

и $T = 0$. Здесь $N_0(0)$ – величина неперенормированной плотности состояний на уровне Ферми.

В этом случае система уравнений (2) значительно упрощается:

$$\text{Re } \Sigma(\epsilon) = \frac{\lambda \omega}{2N_0(0)} \int_0^{\infty} d\epsilon' \left[\frac{N(-\epsilon')}{\epsilon' + \epsilon + \omega} - \frac{N(\epsilon')}{\epsilon' - \epsilon + \omega} \right],$$

$$\text{Im } \Sigma(\epsilon) = - \frac{\lambda \omega \pi}{2N_0(0)} [N(\epsilon - \omega)\theta(\epsilon - \omega) + N(\epsilon + \omega)(1 - \theta(\epsilon + \omega))] \text{sign}(\epsilon), \quad (5)$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0. \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

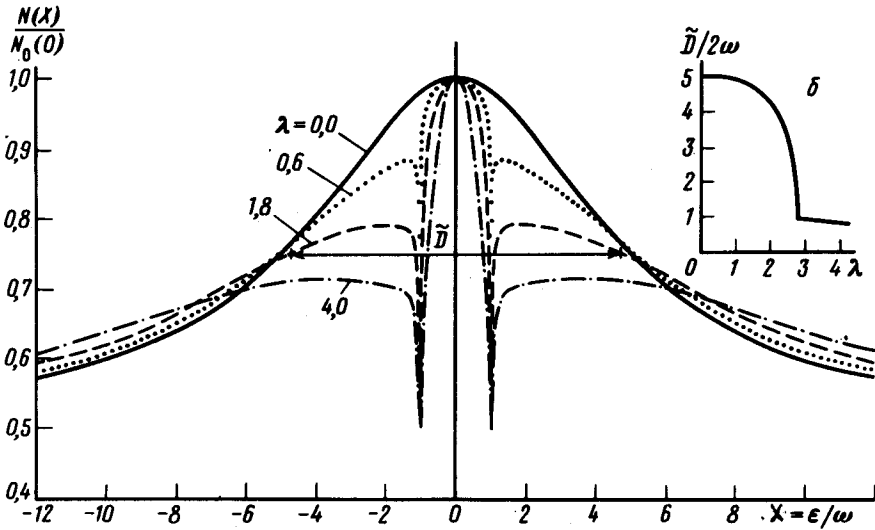
Конечную ширину электронной зоны D удобно моделировать лоренцевской формой перенормированной плотности состояний:

$$N_0(\xi) = \frac{N_0(0)}{1 + N_s} \left[\frac{D^2/4}{\xi^2 + D^2/4} + N_s \right] \quad (6)$$

где N_s — постоянная составляющая, соответствующая в реальных кристаллах вкладу от широких зон, электроны которых слабо взаимодействуют с фононами. Подстановка (6) в (3) дает:

$$N(\epsilon) = \frac{N_0(0)}{1 + N_s} \left[\frac{(|\text{Im } \Sigma(\epsilon)| + D/2)D/2}{(\epsilon - \text{Re } \Sigma(\epsilon))^2 + (|\text{Im } \Sigma(\epsilon)| + D/2)^2} + N_s \right]. \quad (7)$$

В обычной теории электрон-фононного взаимодействия^{1, 2} плотность электронных состояний принимается независимой от энергии $N_0(\xi) = N_0(0)$, что соответствует в (6) пределу $D \rightarrow \infty$. В этом случае, как легко увидеть, электрон-фононное взаимодействие не изменяет ее, т. е. при любых значениях λ $N(\epsilon) = N_0(0)$.



Одночастичная плотность электронных состояний, перенормированная электрон-фононным взаимодействием; \tilde{D} — перенормированная ширина, определяемая на полувысоте зависящей от энергии составляющей $N(\epsilon)$ ($D = 10 \omega$, $N_s = 1$)

Качественно иная ситуация возникает при конечных, хотя и больших ($\gg \omega$) значениях D . Результаты численного расчета системы уравнений (5), (7) по простой итерационной схеме приведены на рисунке. ($D = 10 \omega$). На рис. б приведена перенормированная электрон-фононным взаимодействием ширина зоны \tilde{D} , определяемая по ширине переменной составляющей линии $N(\epsilon)$ на полувысоте, как функция λ . Из рис. а и б видно, что при некоторой $\lambda \geq \lambda^* > 1$ ширина зоны резко уменьшается до значений $\tilde{D} < \omega$. Кинетическая энергия электронов становится меньше характерных фононных частот, так что взаимодействие становится существенно неадиабатическим.

Физическая причина поляронного коллапса заключается в том, что при $\lambda \simeq \tilde{g}^2 N_0(0) > 1$ глубина поляронной ямы $\epsilon_p \simeq \tilde{g}^2$ ⁵ превосходит кинетическую энергию электрона D . Вследствие нормировки $N_0(0) \simeq D^{-1}$, поэтому условие сильной связи $\lambda > 1$ ограничивает исходную ширину электронной зоны D и делает недопустимым приближение $N_0(\xi) = N_0(0)$.

Ввиду неадиабатичности взаимодействия ($\tilde{D} < \omega$) вершинные фононные поправки оказываются существенными и уравнение (1), строго говоря, неприменимо при $\lambda > 1$. Последовательное рассмотрение ^{3, 4} многоэлектронной системы, возможное при $\lambda \gg 1$ на основе теории полярона малого радиуса ⁵, приводит к выводу о существовании нового механизма сверхпроводимости по типу сверхтекучести He⁴.

Авторы глубоко благодарны академику А.Б.Мигдалу, академику Ю.М.Кагану и профессору Г.М.Элиашбергу за плодотворные обсуждения затронутой здесь проблемы.

Литература

1. Мигдал А.Б. ЖЭТФ, 1958, **34**, 1438.
2. Элиашберг Г.М. ЖЭТФ, 1960, **38**, 366.
3. Alexandrov A., Ranninger J. Phys. Rev. B, 1981, **23**, 1796; Александров А.С. Ж. физ. химии, 1983, **57**, 273.
4. Alexandrov A.S., Ranninger J., Robaszkiewicz S. Phys. Rev. B, 1986, **33**, 4526.
5. Фирсов Ю.А. Полярны малого радиуса. Явления переноса. Сб. "Полярны", М.: Наука, 1975.

Московский
инженерно-физический институт

Поступила в редакцию
3 марта 1987 г.