

УДК 537.312

НЕАДИАБАТИЧЕСКИЕ ПОПРАВКИ К ЭЛЕКТРОННОЙ КВАЗИЧАСТИЧНОЙ СОБСТВЕННОЙ ЭНЕРГИИ

А. В. Даниленко, О. В. Долгов, В. В. Лосяков

Высокотемпературные сверхпроводники и фуллерены характеризуются малой шириной зоны, сравнимой с фоновыми частотами. Это обстоятельство может вызвать нарушение адиабатического приближения. В работе сравниваются два подхода к решению этой задачи. На основе результатов обсуждается влияние поправок на T_c , а также возможная неустойчивость, связанная с образованием поляронных состояний.

При описании электрон-фононного взаимодействия в обычных металлах используется так называемое адиабатическое приближение: предполагается, что быстрые электроны из-за электронейтральности обязаны следовать за "медленными" ионами. Узкие зоны и сильное электрон-фононное взаимодействие делают порядки их скоростей сравнимыми между собой. Возникает вопрос: приводит ли нарушение адиабатичности к увеличению межэлектронного взаимодействия (и в результате T_c)?

Традиционно считалось, что соответствующие поправки малы, так как мал мигдаловский параметр Ω_{ph}/W [1 - 4]. Однако в последнее время появились вещества (например, фуллерены и высокотемпературные сверхпроводники), где $\Omega_{ph} \sim W$. Таким образом, нарушается теорема Мигдала о малости вершинных поправок [1, 4]. Это дает повод не только обсуждать такие поправки, но даже рассматривать антиадиабатический предел $\Omega_{ph} \gg W$ [5]. Например, утверждается, что это приводит к росту межэлектронного взаимодействия и может увеличить T_c для сверхпроводников [6]. Однако и при малом Ω_{ph}/W делаются противоречивые выводы о важности этих поправок (авторы [1] считают их незначительными, а [5 - 7] - наоборот).

Таким образом, основной целью работы является исследование неадиабатических поправок к электронной собственной энергии в нормальном состоянии. Это поможет

выяснить их роль в сверхпроводящем состоянии. Кроме того, так как природа вершинных поправок связана с межэлектронными корреляциями, то последние могут привести к поляронным (биполяронным) состояниям. Мы полагаем, что учет неадиабатических поправок поможет выяснить природу перехода от ферми-жидкостного описания к полярному. До настоящего времени для значений параметра, характеризующего переход, разные данные дают оценки $\lambda\Omega_{ph}/W \sim 0,1 \div 10$.

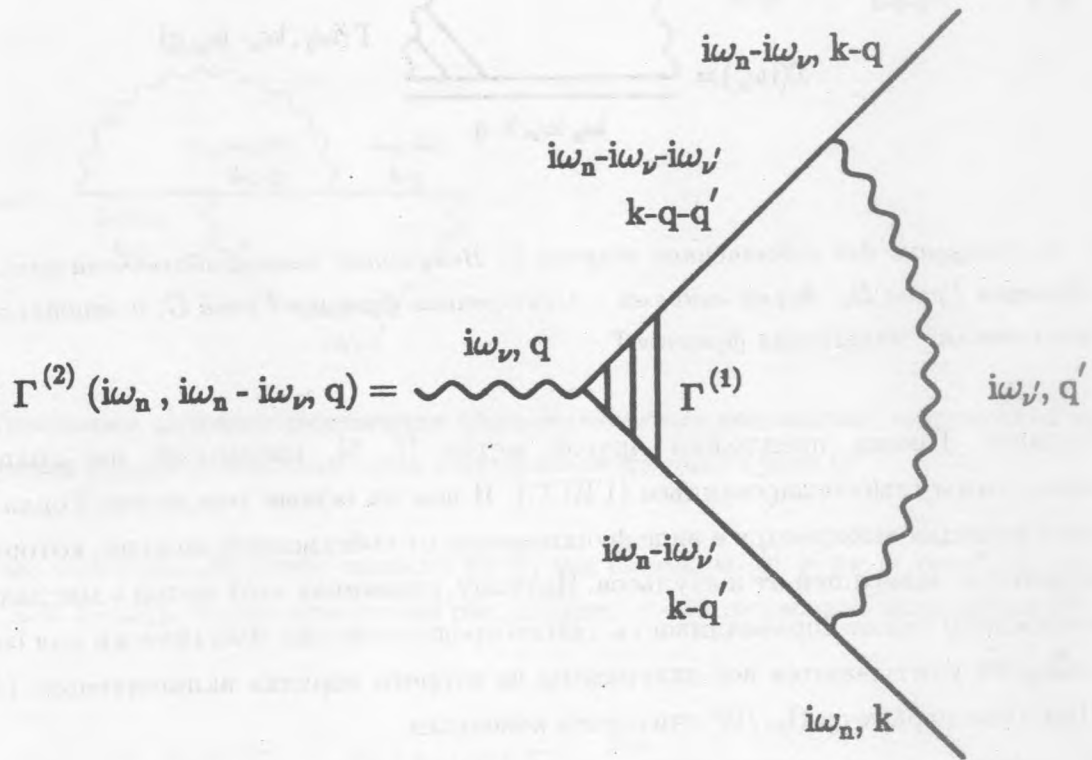


Рис. 1. Уравнение для вершинной функции $\Gamma^{(2)}$ в методе Мигдала. Выходящие линии показаны для наглядности и в определение Γ не входят.

Существуют два метода учета неадиабатических поправок. Один из них, который можно условно назвать мигдаловским, основан на решении уравнения Бете – Салпитера для вершинной функции [1 – 3]. В низшем приближении первая поправка к единичной вершине определяется диаграммой, показанной на рис. 1. Далее с полученной вершинной функцией находится собственная энергия Σ (см. рис. 2). Этот традиционный метод не дает возможности аналитически учесть диаграммы высокого порядка из-за сложности интегрирования по импульсам. В некоторых работах [6] предлагается ввести импульс

обрезания q_c , что значительно увеличивает вершинные поправки и приводит к росту T_c . При вычислении Σ мы выясняем роль такого предположения, сравнивая с традиционным способом интегрирования по импульсам [2].

$$\Sigma(i\omega_n) = \frac{\text{Contour}}{i\omega_n - i\omega_n, k - q}$$

Рис. 2. Уравнение для собственной энергии Σ . Волнистой линией обозначена голая фононная функция Грина D_0 , двумя линиями – электронная функция Грина G , а заштрихованным треугольником – вершинная функция Γ .

Недавно Такада предложил другой метод [7, 5], названный им градиентно-инвариантным самосогласованным (ГИСС). В нем на основе тождества Уорда [2] вершинная функция выбирается в виде функционала от собственной энергии, которая предполагается не зависящей от импульсов. Поэтому, сравнивая этот метод с мигдаловским, мы обсуждаем также справедливость такого предположения. Фактически для собственной энергии учитываются все диаграммы до второго порядка включительно (см. рис. 3). При этом параметр Ω_{ph}/W считается конечным.

В работе для простоты рассматривается модель ферми-жидкости с обычным фрёлиховским гамильтонианом [4] и эйнштейновским спектром фононов. Это соответствует $\alpha^2 F_E(\Omega) = (1/2)\lambda\Omega_{ph}\delta(\Omega - \Omega_{ph})$, где Ω_{ph} – не зависящая от импульса фононная частота, а λ – константа электрон-фононного взаимодействия. Предполагается, что плотность состояний является постоянной $N(0)$ при $-W < \epsilon < W$, где $2W = 2p_F v_F$ – ширина зоны. При этом химический потенциал равен нулю, что соответствует половине заполненной зоны. Считается, что $\lambda \sim 1$, а Ω_{ph}/W может быть произвольным.

Мы интересуемся квазичастичной собственной энергией Σ на мнимой оси, которая определяется диаграммой рис. 2. Фононная функция Грина $D_0(i\omega_\nu) = -\Omega_{ph}^2(\omega_\nu^2 + \Omega_{ph}^2)^{-1}$, $\omega_\nu = 2\nu\pi T$, а электронная функция Грина $G(i\omega_n, \vec{p}) = (i\omega_n - \epsilon_{\vec{p}} - \Sigma(i\omega_n, \vec{p}))^{-1}$, $\omega_n = (2n + 1)\pi T$, $\epsilon_{\vec{p}}$ – электронный спектр.

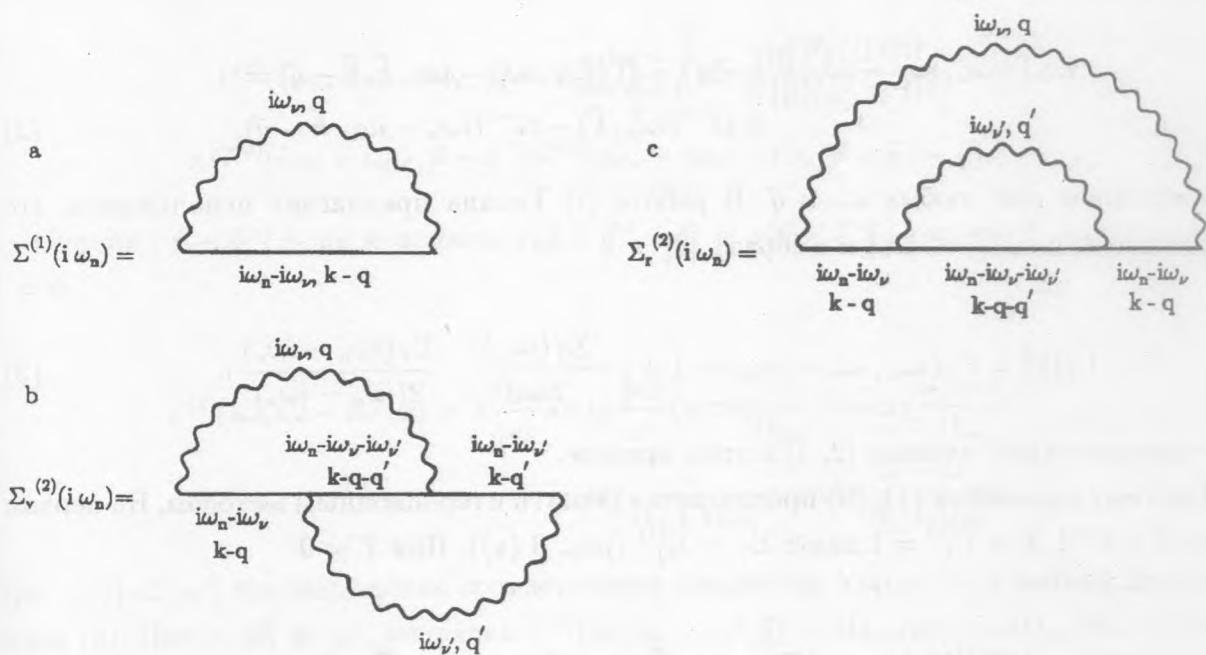


Рис. 3. Диаграммы, которые фактически учитываются при нахождении собственной энергии Σ . Прямой линией обозначена голая электронная функция Грина $G^{(0)}$.

Считая, что $\Sigma(i\omega_n, \vec{k})$ слабо зависит от \vec{k} , мы положим $|\vec{k}| = p_F = const$, и, таким образом, $\Sigma = \Sigma(i\omega_n)$. Тогда диаграмме рис. 2 будет соответствовать выражение [4]

$$\Sigma(i\omega_n) = \int_0^\infty d\Omega \alpha^2 F_E(\Omega) T \sum_{\omega_n'} \frac{2\Omega}{\omega_n'^2 + \Omega^2} \frac{1}{N(0)} \times \sum_{\vec{q}} G(i\omega_n - i\omega_n', \vec{k} - \vec{q}) \Gamma(i\omega_n, i\omega_n - i\omega_n', \vec{q}). \tag{1}$$

Методам Такады и Мигдала будет отвечать разный выбор вершинной функции, и об этом речь пойдет ниже. В дальнейшем мы получим результаты для $T = 0$, и для переменных используются следующие обозначения: $\omega_n \rightarrow \omega$, $\omega_n' \rightarrow \omega'$. При этом переменные остаются на мнимой оси.

Согласно ГИСС методу Такады вершинную функцию можно выбрать в виде функционала от собственной энергии [7] $\Gamma_T = \Gamma_T[\Sigma_T]$. Этот выбор основывается на тождестве Уорда [2]

$$\begin{aligned} i\omega_\nu \Gamma(i\omega_n, i\omega_n - i\omega_\nu, \vec{k}, \vec{k} - \vec{q}) - \vec{q} \vec{\Gamma}(i\omega_n, i\omega_n - i\omega_\nu, \vec{k}, \vec{k} - \vec{q}) = \\ = G^{-1}(i\omega_n, \vec{k}) - G^{-1}(i\omega_n - i\omega_\nu, \vec{k} - \vec{q}), \end{aligned} \quad (2)$$

справедливым при любых ω_ν и \vec{q} . В работе [7] Такада предлагает использовать это тождество при $v_F |\vec{q}| \ll |\omega_\nu|$ и выбрать [8]

$$\Gamma_T[\Sigma] = \Gamma_T(i\omega_n, i\omega_n - i\omega_\nu) = 1 + \left(-\frac{\Sigma_T(i\omega_n)}{2i\omega_n} - \frac{\Sigma_T(i\omega_n - i\omega_\nu)}{2(i\omega_n - i\omega_\nu)} \right), \quad (3)$$

что соответствует оценкам [2, 3] в этом пределе.

Систему уравнений (1), (3) предлагается решать итерационным методом. На первом шаге $G = G^{(0)}$, $\Gamma = \Gamma_T^{(1)} = 1$ дают $\Sigma_T = \Sigma_T^{(1)}$ (рис. 3 (а)). При $T = 0$

$$\Sigma_T^{(1)}(i\omega) = -i\lambda\Omega_{ph} \operatorname{arctg} \frac{\omega}{\Omega_{ph}} + i\lambda\Omega_{ph} \operatorname{arctg} \frac{\omega}{W + \Omega_{ph}}, \quad (4)$$

что соответствует результатам [2, 6]. На втором шаге $G = G[\Sigma_T^{(1)}]$, и поправка $\Gamma_T^{(2)}$ при $\Omega_{ph}/W \ll 1$ дает:

$$\begin{aligned} \Sigma_T^{(2)} = \Sigma_T^{(2)a} + \Sigma_T^{(2)b} + \Sigma_T^{(2)c}, \\ \Sigma_T^{(2)a}(i\omega) \sim -i\lambda^2\Omega_{ph}, \quad \Sigma_T^{(2)b}(i\omega) \sim i\lambda^3 \frac{\Omega_{ph}^2}{W}, \quad \Sigma_T^{(2)c}(i\omega) \sim i\lambda^2 \frac{\Omega_{ph}^2}{W}. \end{aligned}$$

Здесь $\Sigma_T^{(2)a}$ получена с использованием (4) при бесконечных пределах интегрирования по $d\varepsilon$. При этом методе Такады вершина $\Gamma_T^{(2)}$ порядка λ при любых q , что неверно. Таким образом, основной член поправки, $\Sigma_T^{(2)a}$, не содержит малого параметра Ω_{ph}/W , то есть в методе Такады для собственной энергии не выполняется теорема Мигдала. Это объясняется тем, что область $v_F |\vec{q}| \ll |\omega'|$, когда $\Gamma \sim \lambda$, дает на самом деле малый вклад в Σ . А при $v_F |\vec{q}| \gg |\omega'|$ вершинная функция $\Gamma \sim \lambda\Omega_{ph}/W$, что даст $\Sigma^{(2)} \sim \lambda\Omega_{ph}^2/W$ (см. ниже).

В методе, который можно условно назвать мигдаловским, рассматривается первая поправка к единичной вершинной функции $\Gamma^{(1)}$. Эта поправка изображена на рис. 1. Она оценивалась во многих работах [1, 3], а сейчас приобрела особенное значение [6], так как оказалось, что параметр $\lambda\Omega_{ph}/W$ может быть не очень малым.

Диаграмма на рис. 1 соответствует выражению

$$\Gamma^{(2)}(i\omega_n, i\omega_n - i\omega_{\nu'}, \vec{q}) = T \sum_{\omega_{\nu'}} \sum_{\vec{q}'} \int_0^{\infty} d\Omega \frac{\alpha^2 F_E(\Omega) 2\Omega}{N(0)(\omega_{\nu'}^2 + \Omega^2)} \times \\ \times G^{(0)}(i\omega_n - i\omega_{\nu'}, \vec{p} - \vec{q}') G^{(0)}(i\omega_n - i\omega_{\nu'} - i\omega_{\nu}, \vec{p} - \vec{q}' - \vec{q}). \quad (5)$$

Считая $|\vec{p} - \vec{q}'| \sim p_F$ и полагая $\varepsilon(\vec{p} - \vec{q}' - \vec{q}) \approx \varepsilon(\vec{p} - \vec{q}') - qv_F \cos \theta$, получим при $T = 0$:

$$\Gamma^{(2)}(i\omega, i\omega - i\omega', \vec{q}) = \lambda \frac{\Omega_{ph}}{qv_F} \operatorname{arctg} \frac{qv_F}{\omega'} \left(\operatorname{arctg} \frac{\omega}{\Omega_{ph}} - \operatorname{arctg} \frac{\omega - \omega'}{\Omega_{ph}} \right. \\ \left. - \operatorname{arctg} \frac{\omega}{W + \Omega_{ph}} + \operatorname{arctg} \frac{\omega - \omega'}{W + \Omega_{ph}} \right). \quad (6)$$

При $v_F |\vec{q}| \ll |\omega'|$ это выражение соответствует тождеству Уорда (2) и выбору функционала (3). При $v_F |\vec{q}| \gg |\omega'|$ поправка $\Gamma^{(2)}(i\omega, i\omega - i\omega', \vec{q}) \sim \lambda \Omega_{ph} / qv_F \sim \lambda \Omega_{ph} / W$, то есть выполняется теорема Мигдала.

Видно, что поправка к вершинной функции имеет положительный знак при любых значениях параметров. Таким образом, она должна приводить к уменьшению T_c [9], что ставит под сомнение результаты работы [6], где авторы получили отрицательные значения вершинной поправки.

Соответствующая собственная энергия тогда равняется (см. рис. 3) $\Sigma = \Sigma^{(1)} + \Sigma_v^{(2)} + \Sigma_T^{(2)}$. $\Sigma^{(1)}$ равна соответствующей $\Sigma_T^{(1)}$, так как отвечает $\Gamma^{(1)} = 1$. Для поправки за счет $\Gamma^{(2)}$, $\Sigma_v^{(2)}$, можно получить:

$$\Sigma_v^{(2)}(i\omega) = i\lambda^2 \frac{\Omega_{ph}^2}{W} d_v(m, m_0), \quad \text{где } m = \frac{\omega}{\Omega_{ph}}, \quad m_0 = \frac{\Omega_{ph}}{W},$$

$$d_v(m, m_0) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{y^2 + 1} \operatorname{arctg} \frac{1}{m_0(m-y)} (\operatorname{arctg} m - \operatorname{arctg}(m-y) - \\ - \operatorname{arctg} \frac{m}{m_0^{-1} + 1} + \operatorname{arctg} \frac{m-y}{m_0^{-1} + 1}) (2\operatorname{arctg} \frac{2}{ym_0} - \frac{1}{2} y m_0 \ln(\frac{4}{y^2 m_0^2} + 1)). \quad (7)$$

Если при вычислении $\Sigma_v^{(2)}$ ввести искусственное обрезание [6] $|\vec{q}| < q_c$, то для $m_0 \rightarrow 0$ это совпадет с нашим результатом при $q_c = 2p_F$. Таким образом, q_c нельзя считать свободным параметром, и тем более нельзя полагать $q_c \ll p_F$.

Радужная диаграмма второго порядка равна (см. рис. 3 (с)) $\Sigma_r^{(2)}(i\omega) = i\lambda^2\Omega_{ph}d_r(m, m_0)$, где

$$d_r(m, m_0) = \frac{1}{m_0(m^4 + 2m^2 + 1 + m_0^{-4} + 2(m/m_0)^2 - 2m_0^{-2})} \left(m \ln \frac{m^2 + 2^2}{m^2 + (2 + m_0^{-1})^2} + \right. \\ \left. + (\arctg \frac{m}{2} - \arctg \frac{m}{2 + m_0^{-1}})(m^2 - 1 + m_0^{-2}) - 2m \ln \frac{m_0 + 1}{m_0 + 2} \right). \quad (8)$$

В данном приближении можно найти векторную вершинную функцию $\vec{\Gamma}$ и показать, что ею действительно нельзя пренебрегать. С учетом электронно-дырочной симметрии, с бесконечной шириной зоны, в нашей модели

$$\vec{\Gamma}(i\omega, i\omega - i\omega', \vec{k}, \vec{k} - \vec{q}) = \vec{\Gamma}^{(1)} + \vec{\Gamma}^{(2)}, \text{ где } \vec{\Gamma}^{(1)} \approx \vec{k}/m, \\ \vec{q}\vec{\Gamma}^{(2)} = -i\lambda\Omega_{ph} \left(1 - \frac{\omega'}{qv_F} \arctg \frac{qv_F}{\omega'} \right) \left(\arctg \frac{\omega}{\Omega_{ph}} - \arctg \frac{\omega - \omega'}{\Omega_{ph}} \right).$$

Диаграмма на рис. 1 соответствует $\vec{\Gamma}^{(2)}$, если заменить $\Gamma^{(1)}$ на $\vec{\Gamma}^{(1)}$, а $\Gamma^{(2)}(i\omega_n, i\omega_n - i\omega', \vec{q})$ — на $\vec{\Gamma}^{(2)}(i\omega, i\omega - i\omega', -\vec{q})$.

Если обозначить $x = \omega'/qv_F$, то, используя при $\Omega_{ph}/W \ll 1$ выражение для $\Gamma^{(2)}$ (6), полученное выше, найдем, что члены $\omega'\Gamma^{(2)}$ и $\vec{q}\vec{\Gamma}^{(2)}$ из (2) сравниваются по величине при $x_0 \arctg(1/x_0) = 1 - x_0 \arctg(1/x_0)$, откуда $x_0 = 0,43$. Если же $\omega'/qv_F < x_0$, то доминирует векторный член и им нельзя пренебрегать.

Для стабильной системы должно выполняться условие [10] $\text{Im } \Sigma(i\omega_n) < 0$ при $\omega_n > 0$ (что эквивалентно условию $Z(i\omega_n) > 1$). Однако существуют такие значения λ , $\Omega_{ph}/W > 1$, при которых оно может нарушаться. Таким образом, корреляции уменьшают ренормализационный фактор Z (вплоть до неустойчивости). Фактически это значит, что уменьшается эффективное межэлектронное взаимодействие.

При $\text{Im } \Sigma(i\omega_n) = 0$

$$\lambda = \frac{\arctg m - \arctg \frac{m}{m_0^{-1} + 1}}{m_0 d_v(m, m_0) + d_r(m, m_0)}. \quad (9)$$

Кривая $\lambda(\Omega_{ph}/W)$, выше которой возможна неустойчивость, при нескольких значениях ω/Ω_{ph} показана на рис. 4. То есть формально при данных соотношениях Ω_{ph}/W мы имеем ограничения на λ . Это означает: чтобы достичь $\lambda = 3$ (что вполне возможно в высокотемпературных сверхпроводниках), достаточно иметь $\Omega_{ph} = 0,36W$, то есть

$W \geq 0,28$ эВ при $\Omega_{ph} = 0,1$ эВ, что тоже не противоречит данным по ВТСП. В то же время, в некоторых работах [11] выдвигаются ограничения $\lambda \approx 1$ независимо от мигдаловского параметра. Но, как видно из выражения (9) для критической λ и рисунка 4, это справедливо лишь при больших мигдаловских параметрах, когда $\lambda \rightarrow 1,5$, а при малых для данного ограничения нет оснований.

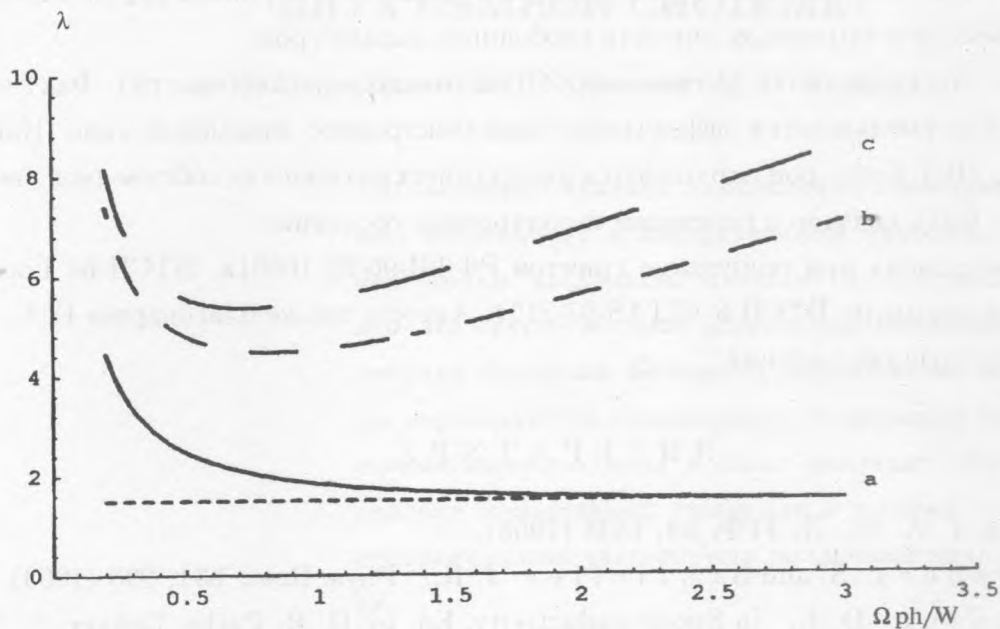


Рис. 4. График $\lambda(\Omega_{ph}/W)$ на границе устойчивости $\Sigma(i\omega) = 0$ при нескольких значениях $\omega/\Omega_{ph} = 0$ (a), 0,8 (b), 2,0 (c). Неустойчивому состоянию соответствует область, расположенной выше самой нижней из линий со всевозможными параметрами ω/Ω_{ph} .

Однако это выражение и график являются качественными, так как мы учли только первые порядки вершинных поправок для Σ вместо, например, лестничного приближения.

Таким образом, в работе последовательно рассмотрен вклад неадиабатических эффектов в электронную собственную энергию в первых порядках по λ . Сравнивались два метода учета неадиабатических поправок: 1) мигдаловский и 2) ГИСС, предложенный Такадой.

Показано, что последний метод дает для собственной энергии физически некорректный результат. Это связано с тем, что основной вклад в Σ вносит область $qv_F \gg \omega'$, в которой $\Gamma \sim \lambda\Omega_{ph}/W$. Это означает, что в тождестве Уорда нельзя пренебрегать векторным членом, как предлагает Такада. В рамках стандартного (мигдаловского) подхода

в низшем приближении оценен параметр $x = \omega'/qv_F$, при котором вклады векторного и скалярного членов оказываются одного порядка. Они сравниваются при $x_0 = 0,43$. Таким образом, для большинства металлов, где $x \ll 1$, ГИСС метод неприменим.

Так как поправка к вершинной функции имеет положительный знак при любых значениях параметров, то она должна приводить к уменьшению T_c .

Выяснено, что импульс обрезания q_c , который вводится в [6], равен $2p_F$ для плоского фононного спектра и его нельзя считать свободным параметром.

Показано, что корреляции уменьшают Z (вплоть до неустойчивости). Фактически это значит, что уменьшается эффективное межэлектронное взаимодействие. Найдена область $\lambda(\Omega_{ph}/W)$, в которой нарушаются аналитические свойства собственной энергии Σ , что может быть связано с переходом в поляронное состояние.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ-96-02-16661а, ВТСП-64 Государственной программы по ВТСП и INTAS-93-2154. Авторы также благодарны Е. Г. Максиму за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Мигдал А. Б. ЖЭТФ, **34**, 1438 (1958).
- [2] Engelsberg S. and Schrieffer J. R., Phys. Rev., **131**, 993 (1963).
- [3] Scalapino D. J., in Superconductivity, Ed. by D. R. Parks, Dekker, N. Y., 1, 449 (1969).
- [4] Allen P. B. and Mitrović B. in Solid State Physics, Ed. by H. Ehrenreich, Seitz F. and Turnbull D. Academic N. Y., **37**, 1 (1982).
- [5] Takada Y. J. Superconductivity, **8**, 4 (1995).
- [6] Pietronero L., Strässler S., and Grimaldi C, Phys. Rev. B **52**, 10516, 10531 (1995).
- [7] Takada Y., J. Phys. Chem. Solids, **54**, 1779 (1993). Techn. Rep. of ISSP, Ser. A, **2732** (1993).
- [8] Nambu Y., Phys. Rev., **117**, 648 (1960).
- [9] Kostur V. N., Mitrović B., Phys. Rev., B **50**, 12774 (1994).
- [10] Dolgov O. V., Losyakov V. V., Phys. Lett., A, **190**, 189 (1994).
- [11] Alexandrov A. S., Kabanov V. V., Phys. Rev., B **54**, 3655 (1996).

Поступила в редакцию 6 ноября 1996 г.