Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. А. Москаленко, Электрон-фононное взаимодействие сильно-коррелированных систем. II. Предел сильной связи, *ТМФ*, 1997, том 113, номер 3, 432–437

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1090>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.224.187.69

26 апреля 2023 г., 06:39:52

В. А. Москаленко*

ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СИЛЬНО-КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ. II. ПРЕДЕЛ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

Модель Хаббарда, дополненная холстейновским взаимодействием электронов с оптическими бездисперсными фононами, исследуется в предположении наличия сильной связи. Найдена коллективная мода фоонного облака, окружающего полярон, и установлено влияние процессов испускания и поглощения этой моды на энергетический спектр как локализованных, так и делокализованных поляронов. Движение делокализованных поляронов, обязанное их межузельному перескоку, описано в приближении цепочечных диаграмм, когда не учитываются многочастичные неприводимые функции Грина полярона. Полученный электронный энергетический спектр имеет вид четырех подзон.

ВВЕДЕНИЕ

В этой работе, так же как и в предыдущих [1, 2], исследуется вопрос о совместном влиянии кулоновского отталкивания электронов и взаимодействия электронов с фононами на свойства сильно-коррелированных систем. Для исследования выбрана однозонная модель Хаббарда [3], дополненная взаимодействием Холстейна [4] между локальной флуктуацией заряда электрона и локальным фононом.

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

Ниже предполагается, что оба упомянутых взаимодействия являются сильными. Это означает 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 [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.

В работе используются формализм мацубаровских функций Грина и новый диаграммный подход [6–8], разработанный для электронной подсистемы.

* Институт прикладной физики АН Молдовы, Кишинев, Молдова

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. Это обстоятельство приводит к возникновению коллективных колебаний фононных облаков, окружающих поляроны, частота которых значительно больше частоты исходных фононов. Как будет видно из дальнейшего, испускание и поглощение таких коллективных мод уже в простейшем локальном приближении меняет энергии квантовых переходов полярона на узле решетки.

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

1. КОЛЛЕКТИВНАЯ ФОНОННАЯ МОДА

Характерный пропагатор фононов, окружающих полярон, имеет вид

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

где

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

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 функции (1):

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

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

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

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

Благодаря четности функции σ имеем

$$\begin{aligned} \Phi(i\Omega) &= e^{-\sigma(\beta)} \int_0^{\beta} \cos \Omega \tau e^{\sigma(\tau)} d\tau = \beta \cos \eta e^{-\sigma(\beta)} \int_0^1 \cos \eta t e^{\bar{\sigma}(t)} dt, \\ \bar{\sigma}(t) &= \alpha \frac{\text{ch} \xi t}{\text{sh} \xi}, \quad \xi = \frac{\hbar\omega\beta}{2}, \quad \eta = \frac{\beta\Omega}{2} = m\pi. \end{aligned} \quad (5)$$

Интеграл (5) является интегралом Лапласа [9] с большим положительным параметром α .

Функция $\bar{\sigma}(t)$ имеет максимум в точке $t = 1$, совпадающей 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 ($\varepsilon > 0$)

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

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

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

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

В простейшем приближении получаем свободный пропагатор коллективной моды с частотой $\omega_c = \alpha\omega$:

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

В данном приближении затухание этой моды не проявляется из-за ангармонизма колебаний. Выражение (8) существенным образом отличается от фурье-образа пропагатора свободного фонона

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

2. ЭЛЕКТРОННЫЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР

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

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

где

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

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

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

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

Химический потенциал системы μ и исходное кулоновское отталкивание электронов U модели [3] оказываются ренормированными. Это связано с косвенным притяжением электронов вследствие их прямого взаимодействия с фононами:

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

Внешнее магнитное поле h предполагается в дальнейшем отсутствующим, при этом $E_+ = E_-$.

Рассмотрим фурье-образ функции Грина (9)

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

где

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

Асимптотическая оценка этого интеграла при $\alpha \rightarrow \infty$ дает

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

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 $E_{-\sigma} - E_2$ заменяются на четыре новые величины $E_0 - E_\sigma \pm \hbar\omega_c$ и $E_{-\sigma} - E_2 \pm \hbar\omega_c$. Это изменение связано с тем, 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 возникает приближение, известное как “Хаббард I”-аппроксимация. В нашем случае модели Хаббарда–Холстейна [3, 4] оно имеет вид

$$\tilde{G}_\sigma^I(\vec{k}, i\omega) = \frac{\tilde{G}_\sigma^{(0)}(i\omega)}{1 - \epsilon(\vec{k})\tilde{G}_\sigma^{(0)}(i\omega)}. \quad (16)$$

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

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

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

$$\begin{aligned} [E'^2 - \hbar^2\omega_c^2][(E' - \tilde{U})^2 - \hbar^2\omega_c^2] = \\ = \frac{\epsilon(k)}{Z_0} \left\{ [E'(1 + \zeta) + \hbar\omega_c(1 - \zeta)][(E' - \tilde{U})^2 - \hbar^2\omega_c^2] + \right. \\ \left. + \zeta[(E' - \tilde{U})(1 + \zeta\chi) + \hbar\omega_c(1 - \zeta\chi)][E'^2 - \hbar^2\omega_c^2] \right\}, \end{aligned} \quad (17)$$

где

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

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

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

В этом случае энергетический спектр состоит из двух локальных уровней

$$\begin{aligned} E &= -\tilde{\mu} + \hbar\omega_c = -\mu, \\ E &= -\tilde{\mu} - \hbar\omega_c = -\mu - 2\hbar\omega_c \end{aligned} \quad (19)$$

и двух энергетических подзон

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

ВЫВОДЫ

В данной работе в предположении наличия сильной электрон-фононной связи исследованы спектр коллективного движения фононов и характер поляронного спектра как в локализованном, так и в делокализованном приближениях. Частота коллективной фононной моды ω_c при $\alpha \gg 1$ значительно превосходит частоту индивидуального свободного фонона. Благодаря испусканию и поглощению коллективной фононной моды существенно меняется энергия квантовых переходов полярона на узле решетки. Вместо двух возникают четыре собственных значения энергии таких переходов. Учет перескоков 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 компенсации кулоновского отталкивания электронов притяжением, обусловленным фононами, имеет место зонное расщепление, но на этот раз на две подзоны.

Автор признателен Н. М. Плакиде за интерес к работе и ценные замечания.

Список литературы

- [1] *V. A. Moskalenko, Wang Xi-Fu, Wang Zhi-Xing, Yi Xue-Xi*. ТМФ. 1995. Т. 103. С. 138.
- [2] *B. A. Москаленко*. ТМФ. 1997. Т. 111. С. 439.
- [3] *J. Hubbard*. J. Proc. R. Soc. A. 1963. V. 276. P. 233.
- [4] *T. Holstein*. Ann. Phys. 1959. V. 8. P. 325.
- [5] *И. Г. Ланг, Ю. А. Фурсов*. ЖЭТФ. 1962. Т. 43. С. 1843.
- [6] *М. И. Владимир, В. А. Москаленко*. ТМФ. 1990. Т. 82. С. 428.
- [7] *С. И. Вакару, М. И. Владимир, В. А. Москаленко*. ТМФ. 1990. Т. 85. С. 248.
- [8] *V. A. Moskalenko, S. P. Cojocaru, M. I. Vladimir*. A diagram technique for strongly interacting fermion systems. One- and two-band Hubbard models. Preprint International Centre for Theoretical Physics. Trieste, 1994. IC/94/182.
- [9] *М. В. Федоряк*. Асимптотика: интегралы и ряды. М.: Наука, 1987.

Поступила в редакцию 14.VIII.1997 г.

V. A. Moskalenko

**ELECTRON-PHONON INTERACTION OF STRONGLY
CORRELATED SYSTEMS. II. STRONG COUPLING LIMIT**

The Hubbard-Holstein model containing interaction between localized electrons and dispersionless phonons is investigated. The frequency of collective mode of the phonon cloud surrounding the polaron is determined in the strong coupling limit. The influence of this mode on the radiation and adsorption processes in the energy spectrum of both localized and delocalized polarons is established. The motion of delocalized polarons is described in the chain diagram approximation, without taking into account multiparticle irreducible Green functions of polarons.