Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. А. Москаленко, Л. А. Дохотару, Д. Ф. Дигор,
И. Д. Чеботарь, Динамика фоновых облаков коррели-
рованных поляронов, *ТМФ*, 2014, том 179, номер 2, 242–
250

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8592>

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

Параметры загрузки:

IP: 54.162.127.20

26 апреля 2023 г., 13:54:32

© 2014 г.

В. А. Москаленко^{*†}, Л. А. Дохотару[‡],
Д. Ф. Дигор^{*}, И. Д. Чеботарь^{*}

ДИНАМИКА ФОНОННЫХ ОБЛАКОВ КОРРЕЛИРОВАННЫХ ПОЛЯРОНОВ

Исследована модель Андерсона–Холстейна с сильным отталкиванием примесных электронов в приближении сильной связи. Сильное электрон-фононное взаимодействие обуславливает появление поляронов с тяжелыми фононными облаками, окружающими примесные электроны. Описана коллективная мода фононных облаков и установлено соотношение между электронными пропагаторами и корреляционными функциями. Получена зависимость энергии коллективной моды от параметра гибридизации для случая $T = 0$ и доказано ее подавление с ростом гибридизации.

Ключевые слова: сильно коррелированные электронные системы, уравнение Дайсона, функции Грина, полярон, фононные облака.

DOI: 10.4213/tmf8592

1. ВВЕДЕНИЕ

Эффект сильной корреляции в металлических системах может быть обусловлен как сильными электрон-электронными взаимодействиями, так и сильной электрон-фононной связью, в том числе их взаимным влиянием [1].

Существует множество систем с сильно коррелированными электронами, в которых также имеется сильная связь с решеткой, например V_2O_3 [2], [3], манганиты [4] и фуллериды [5]. Сильные электрон-электронные взаимодействия могут быть описаны с помощью моделей Хаббарда [6] и Андерсона [7]. Модель Холстейна [8] использовалась для изучения электрон-фононных взаимодействий. Модель Андерсона–Холстейна включает в себя оба вида взаимодействий.

^{*}Институт прикладной физики АН Молдовы, Кишинев, Молдова.
E-mail: statphys@asm.md

[†]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская обл., Россия.
E-mail: moskalen@theor.jinr.ru

[‡]Технический университет Молдовы, Кишинев, Молдова.
E-mail: l_dohotaru@mail.utm.md

Достижения в области молекулярной электроники оживили интерес к задаче электрон-фононного взаимодействия, поскольку электрон-колебательная связь в молекуле играет важную роль для понимания свойств таких систем. С теоретической точки зрения это задача малого полярона, обсуждавшаяся Холстейном [8].

Гамильтониан примесной модели Андерсона–Холстейна имеет вид

$$H = H_{\text{el}} + H_{\text{ph}} + H_{\text{hyb}} + H_{\text{el-ph}}, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} H_{\text{el}} &= \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon(\vec{k}) C_{\vec{k}\sigma}^+ C_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_f^0 f_{\sigma}^+ f_{\sigma} + U_0 n_{\uparrow} n_{\downarrow}, \\ H_{\text{ph}} &= \hbar\omega_0 \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right), \quad q = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+), \quad p = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^+ - a), \\ H_{\text{hyb}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, \sigma} (V_{\vec{k}} f_{\sigma}^+ C_{\vec{k}\sigma} + V_{\vec{k}}^* C_{\vec{k}\sigma}^+ f_{\sigma}), \\ H_{\text{el-ph}} &= \bar{g} q n, \quad n = \sum_{\sigma} n_{\sigma}, \quad n_{\sigma} = f_{\sigma}^+ f_{\sigma}, \end{aligned}$$

где q и p – локальная координата и импульс оптических фононов, ω_0 – их частота, a (a^+), $C_{\vec{k}\sigma}$ ($C_{\vec{k}\sigma}^+$) и f_{σ} (f_{σ}^+) – операторы уничтожения (рождения) фононов, электронов проводимости и примесных электронов соответственно, $\epsilon(\vec{k})$ – кинетическая энергия электронов проводимости, ϵ_f^0 – локальная энергия примесных электронов (обе величины энергии отсчитываются от химического потенциала μ_0 системы: $\epsilon(\vec{k}) = \xi(\vec{k}) - \mu_0$, $\epsilon_f^0 = \bar{\epsilon}_f^0 - \mu_0$), U_0 – одноузельное кулоновское отталкивание примесных электронов с противоположными спинами, $V_{\vec{k}}$ – матричный элемент гибридизации, N – число узлов решетки, $\bar{g}$ – константа электрон-фононного взаимодействия. Обе величины U_0 и $\bar{g}$ слишком велики для того, чтобы рассматриваться как возмущение, поэтому их необходимо включить в нулевой гамильтониан $H_0 = H_{\text{el}} + H_{\text{ph}}$.

Чтобы исключить линейный по q член гамильтониана, выполним преобразование Ланга–Фирсова [9]:

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= e^S H e^{-S}, \quad S = -i g n p, \quad g = \frac{\bar{g}}{\hbar\omega_0}, \\ \tilde{a} &= e^S a e^{-S} = a - \frac{ng}{\sqrt{2}}, \quad \tilde{a}^+ = e^S a^+ e^{-S} = a^+ - \frac{ng}{\sqrt{2}}, \\ \tilde{q} &= e^S q e^{-S} = q - ng, \quad n = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}, \\ \tilde{a}^+ \tilde{a} &= a^+ a - ngq + \frac{g^2}{2}(n_{\uparrow} + n_{\downarrow} + 2n_{\uparrow} n_{\downarrow}), \\ e^S (H_{\text{ph}} + H_{\text{el-ph}}) e^{-S} &= H_{\text{ph}} - \frac{g^2 \hbar\omega_0}{2}(n_{\uparrow} + n_{\downarrow} + 2n_{\uparrow} n_{\downarrow}), \\ \tilde{H}_{\text{el-ph}} &= \bar{g} n (q - ng). \end{aligned} \quad (2)$$

Примесные операторы имеют вид

$$\begin{aligned} \tilde{f}_{\sigma} &= e^S f_{\sigma} e^{-S} = e^{i g p} f_{\sigma}, \quad \tilde{f}_{\sigma}^+ = f_{\sigma}^+ e^{-i g p}, \\ \tilde{H}_{\text{hyb}} &= e^S H_{\text{hyb}} e^{-S} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}, \sigma} (V_{\vec{k}} f_{\sigma}^+ e^{-i g p} C_{\vec{k}\sigma} + V_{\vec{k}}^* C_{\vec{k}\sigma}^+ f_{\sigma} e^{i g p}). \end{aligned} \quad (3)$$

Операторы электронов проводимости остаются неизменными.

В результате получаем

$$\tilde{H} = H^0 + H_{\text{int}},$$

где

$$\begin{aligned} H^0 &= \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon(\vec{k}) C_{\vec{k}\sigma}^+ C_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_f n_{\sigma} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} + \hbar \omega_0 \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right), \\ H_{\text{int}} &= \sum_{\sigma} (\tilde{f}_{\sigma}^+ b_{\sigma} + b_{\sigma}^+ \tilde{f}_{\sigma}) \end{aligned} \quad (4)$$

и

$$\begin{aligned} \epsilon_f &= \epsilon_f^0 - \mu, \quad \mu = \mu_0 + \alpha \hbar \omega_0, \quad U = U_0 - 2\alpha \hbar \omega_0, \quad \alpha = \frac{g^2}{2}, \\ b_{\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}\sigma} V_{\vec{k}}, \quad b_{\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} V_{\vec{k}}^* C_{\vec{k}\sigma}^+. \end{aligned} \quad (5)$$

Оператор b_{σ} (b_{σ}^+) – локальный оператор электрона проводимости, $\tilde{f}_{\sigma}$ ($\tilde{f}_{\sigma}^+$) – оператор примесного электрона, окруженного фононами, т. е. полярона.

Гамильтониан H^0 есть главная часть $\tilde{H}$, а H_{int} – возмущение системы. Гамильтониан H_{int} содержит как электронные, так и поляронные операторы. Благодаря присутствию сильного отталкивания U нулевой гамильтониан H^0 описывает не только свободные частицы, а следовательно, обычная теорема Вика не может быть применена для всех электронов.

В развиваемом в дальнейшем подходе теории возмущений воспользуемся обобщенной теоремой Вика, предложенной в работах [10]–[14] для сильно коррелированных систем. Эта обобщенная теорема будет применена для подсистемы примесных электронов, а обычная теорема Вика – для электронов проводимости и оптических фононов.

В разделе 2 мы начинаем с ввода температурных мацубаровских функций Грина для электронов проводимости и примесных электронов в представлении взаимодействия. Раздел 3 посвящен анализу динамики фононных облаков. В разделе 4 обсуждаются полученные результаты и сделаны соответствующие выводы.

2. ДИАГРАММНЫЙ ПОДХОД

Мацубаровские перенормированные функции Грина электронов проводимости и примесных электронов в представлении взаимодействия определяются как

$$\begin{aligned} G(\sigma\tau|\sigma'\tau') &= -\langle T b_{\sigma}(\tau) \bar{b}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ g_e(\sigma\tau|\sigma'\tau') &= -\langle T f_{\sigma}(\tau) \bar{f}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ g_p(\sigma\tau|\sigma'\tau') &= -\langle T \tilde{f}_{\sigma}(\tau) \tilde{\bar{f}}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \end{aligned} \quad (6)$$

где τ (τ') обозначает мнимое время для $0 < \tau < \beta$, β – обратная температура системы, T – хронологический оператор упорядочения. Статистическое усреднение $\langle \cdot \rangle_0^c$ выполняется при помощи оператора плотности большого канонического ансамбля нулевого порядка $e^{-\beta H^0} / (\text{Tr } e^{-\beta H^0})$. Индекс “с” в (6) означает, что учитываются только связные диаграммы.

Оператор эволюции $U(\beta)$ определяется как

$$U(\beta) = T \exp \left(- \int_0^\beta H_{\text{int}}(\tau) d\tau \right). \quad (7)$$

Определение (6) учитывает существование электронных g_e и поляронных g_p пропагаторов.

Кроме нормальных функций Грина (6), существуют аномальные функции Грина, определяемые как

$$\begin{aligned} F(\sigma\tau | -\sigma'\tau') &= -\langle T b_\sigma(\tau) b_{-\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ \bar{F}(-\sigma\tau | \sigma'\tau') &= -\langle T \bar{b}_{-\sigma}(\tau) \bar{b}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ f_e(\sigma\tau | -\sigma'\tau') &= -\langle T f_\sigma(\tau) f_{-\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ f_p(\sigma\tau | -\sigma'\tau') &= -\langle T \tilde{f}_\sigma(\tau) \tilde{f}_{-\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ \bar{f}_e(-\sigma\tau | \sigma'\tau') &= -\langle T \bar{f}_{-\sigma}(\tau) \bar{f}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ \bar{f}_p(-\sigma\tau | \sigma'\tau') &= -\langle T \tilde{\bar{f}}_{-\sigma}(\tau) \tilde{\bar{f}}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \end{aligned} \quad (8)$$

если система находится в сверхпроводящем состоянии.

Существуют также пропагаторы фононных облаков

$$\begin{aligned} \Phi(\tau_1 - \tau_2) &= \langle T e^{ig(p(\tau_1) - p(\tau_2))} U(\beta) \rangle_0^c, \\ \varphi(\tau_1 - \tau_2) &= \langle T e^{ig(p(\tau_1) + p(\tau_2))} U(\beta) \rangle_0^c, \\ \bar{\varphi}(\tau_1 - \tau_2) &= \langle T e^{-ig(p(\tau_1) + p(\tau_2))} U(\beta) \rangle_0^c, \\ \Phi(\tau_1\tau_2 | \tau_3\tau_4) &= \langle T e^{ig(p(\tau_1) + p(\tau_2) - p(\tau_3) - p(\tau_4))} U(\beta) \rangle_0^c. \end{aligned} \quad (9)$$

В дальнейшем будем полагать, что система находится в парамагнитном состоянии.

Используя обычную теорему Вика для фононных операторов, для нулевых пропагаторов $\Phi_0(\tau)$ и $\Phi_0(\tau_1\tau_2 | \tau_3\tau_4)$ получаем [14]

$$\Phi_0(\tau_1 - \tau_2) = e^{-g^2 \langle T [p(\tau_1) - p(\tau_2)]^2 \rangle_0 / 2} = e^{-\sigma(\beta) + \sigma(\tau_1 - \tau_2)}, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \Phi_0(\tau_1\tau_2 | \tau_3\tau_4) &= e^{-g^2 \langle T [p(\tau_1) + p(\tau_2) - p(\tau_3) - p(\tau_4)]^2 \rangle_0 / 2} = \\ &= e^{\sigma(|\tau_1 - \tau_3|) + \sigma(|\tau_1 - \tau_4|) + \sigma(|\tau_2 - \tau_3|) + \sigma(|\tau_2 - \tau_4|) - \sigma(|\tau_1 - \tau_2|) - \sigma(|\tau_3 - \tau_4|) - 2\sigma(\beta)}, \end{aligned} \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned} \sigma(|\tau_1 - \tau_2|) &= g^2 \langle T (p(\tau_1) p(\tau_2)) \rangle_0 = \frac{\alpha \operatorname{ch}[\hbar\omega_0(\beta/2 - |\tau_1 - \tau_2|)]}{\operatorname{sh}(\beta\hbar\omega_0/2)}, \\ \sigma(\beta) &= \sigma(0) = \alpha \operatorname{cth} \frac{\beta\hbar\omega_0}{2}. \end{aligned} \quad (12)$$

Нам необходимо представление Фурье этих функций. Например,

$$\Phi(\tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega} e^{-i\Omega(\tau - \tau')} \Phi(i\Omega), \quad \Omega = \frac{2n\pi}{\beta}. \quad (13)$$

Представление Фурье пропагаторов фононных облаков (10), полученное с помощью приближения Лапласа в пределе сильной связи $\alpha \gg 1$, имеет вид [14], [15]

$$\Phi_0(i\Omega) \approx \frac{2\omega_c}{\Omega^2 + \omega_c^2}, \quad \omega_c = \alpha\omega_0. \quad (14)$$

Этот член представляет собой гармонический пропагатор коллективной моды фононов, принадлежащих поляронному облаку с коллективной частотой ω_c . Это концепция свободных коллективных осцилляций фононных облаков, окружающих поляроны.

В нашем приближении другие два пропагатора (9) $\varphi(\tau, \tau')$ и $\bar{\varphi}(\tau, \tau')$ являются малыми величинами в нормальном состоянии системы, но они значительны в сверхпроводящем состоянии:

$$\begin{aligned} \varphi_0(\tau, \tau') &= \langle T e^{ig(p(\tau_1)+p(\tau_2))} \rangle_0 = e^{-g^2 \langle T[p(\tau_1)+p(\tau_2)]^2 \rangle_0 / 2} = \\ &= e^{-(\sigma(\beta)+\sigma(\tau-\tau'))}, \quad \varphi_0(\tau, \tau') \sim e^{-\alpha}. \end{aligned} \quad (15)$$

Используемое нами для предела сильной связи приближение Лапласа $\alpha \gg 1$ позволяет доказать соотношение [14]

$$\Phi_0(\tau_1\tau_2|\tau_3\tau_4) \approx \Phi_0(\tau_1|\tau_3)\Phi_0(\tau_2|\tau_4) + \Phi_0(\tau_1|\tau_4)\Phi_0(\tau_2|\tau_3). \quad (16)$$

Это уравнение и его обобщение на многовременные аргументы рассматривается как теорема Вика для фононных облаков в режиме сильно связанных поляронов.

3. ДИНАМИКА ФОНОННЫХ ОБЛАКОВ

Исследуем процесс перенормировки пропагаторов фононных облаков, обусловленный гибридизацией электронных орбиталей. Во втором и четвертом порядках теории возмущений получим вклады, изображенные на рис. 1. Вклады от некоторых из диаграмм имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \Phi^{(2)}(\tau - \tau') &= \iint d\tau_1 d\tau_2 \Phi^{(0)}(\tau - \tau_1) \Pi_2(\tau_1 - \tau_2) \Phi^{(0)}(\tau_2 - \tau'), \\ \varphi^{(2)}(\tau - \tau') &= \iint d\tau_1 d\tau_2 \Phi^{(0)}(\tau - \tau_1) \Pi_2^s(\tau_1 - \tau_2) \Phi^{(0)}(\tau' - \tau_2), \\ \Phi_a^{(4)}(\tau - \tau') &= \iiint d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 d\tau_4 \Phi^{(0)}(\tau - \tau_1) \times \\ &\quad \times \Pi_2(\tau_1 - \tau_2) \Phi^{(0)}(\tau_2 - \tau_3) \Pi_2(\tau_3 - \tau_4) \Phi^{(0)}(\tau_4 - \tau'), \end{aligned} \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} \Pi_2(\tau_1 - \tau_2) &= -\langle T b_1 \bar{b}_2 \rangle_0 \langle T f_2 \bar{f}_1 \rangle_0, \\ \Pi_2^s(\tau_1 - \tau_2) &= \langle T b_1 b_2 \rangle_0 \langle T \bar{f}_2 \bar{f}_1 \rangle_0, \\ \bar{\Pi}_2^s(\tau_1 - \tau_2) &= \langle T \bar{b}_1 \bar{b}_2 \rangle_0 \langle T f_2 f_1 \rangle_0. \end{aligned} \quad (18)$$

В нормальном состоянии системы все аномальные функции Грина равны нулю, и мы полагаем, что малые пропагаторы φ и $\bar{\varphi}$ также равны нулю.

$$\begin{aligned}
\Phi^{(0)}(\tau - \tau') &= \text{---}\tau \text{---}\tau' \\
\Phi^{(2)}(\tau - \tau') &= -1 \text{---}\tau \text{---} 1 \text{---} \text{---} 2 \text{---}\tau' \\
\Phi_a^{(4)}(\tau - \tau') &= +1 \text{---}\tau \text{---} 1 \text{---} \text{---} 2 \text{---} \text{---} 3 \text{---} \text{---} 4 \text{---}\tau' \\
\Phi_b^{(4)}(\tau - \tau') &= +1 \text{---}\tau \text{---} 1 \text{---} \text{---} 2 \text{---} \text{---} 3 \text{---} \text{---} 4 \text{---}\tau' \\
\varphi^{(2)}(\tau - \tau') &= +1 \text{---}\tau \text{---} 1 \text{---} \text{---} 2 \text{---}\tau' \\
\bar{\varphi}^{(2)}(\tau - \tau') &= +1 \text{---}\tau \text{---} 1 \text{---} \text{---} 2 \text{---}\tau' \\
\varphi_a^{(4)}(\tau - \tau') &= -1 \text{---}\tau \text{---} 1 \text{---} \text{---} 2 \text{---} \text{---} 3 \text{---} \text{---} 4 \text{---}\tau' \\
\varphi_b^{(4)}(\tau - \tau') &= -1 \text{---}\tau \text{---} 1 \text{---} \text{---} 2 \text{---} \text{---} 3 \text{---} \text{---} 4 \text{---}\tau'
\end{aligned}$$

Рис. 1. Перенормировка вкладов фононных облаков. Сплошная линия соответствует пропагатору электрона проводимости, а штриховая – пропагатору примесного электрона. Диаграммы изображают простейшие вклады второго и четвертого порядков теории возмущений. Петли представляют простейшие поляризационные операторы.

Диаграммы для нормального пропагатора $\Phi(\tau - \tau')$ могут быть суммированы в виде уравнения Дайсона

$$\Phi(\tau - \tau') = \Phi^{(0)}(\tau - \tau') + \iint d\tau_1 d\tau_2 \Phi^{(0)}(\tau - \tau_1) \Pi(\tau_1 - \tau_2) \Phi(\tau_2 - \tau'), \quad (19)$$

где $\Pi(\tau)$ – полный поляризационный оператор.

В представлении Фурье имеем

$$\begin{aligned}
\Phi(i\Omega) &= \Phi^{(0)}(i\Omega) + \Phi^{(0)}(i\Omega) \Pi(i\Omega) \Phi(i\Omega), \\
\Phi(i\Omega) &= \frac{\Phi^{(0)}(i\Omega)}{1 - \Phi^{(0)}(i\Omega) \Pi(i\Omega)} = \frac{1}{(\Phi^{(0)}(i\Omega))^{-1} - \Pi(i\Omega)}.
\end{aligned} \quad (20)$$

Используя выражение (14), получаем

$$\Phi(i\Omega) = \frac{2\omega_c}{\Omega^2 + \omega_c^2 - 2\omega_c\Pi(i\Omega)}. \quad (21)$$

Это уравнение определяет перенормировку коллективной фононной частоты ω_c . Новая частота определяется из уравнения

$$E^2 - \omega_c^2 + 2\omega_c\Pi(E) = 0. \quad (22)$$

Простейшие электронные функции Грина имеют вид ($\bar{\sigma} = -\sigma$, $\omega = (2n+1)\pi/\beta$)

$$G_\sigma^0(i\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{i\omega - \epsilon(\vec{k})}, \quad g_\sigma^0(i\omega) = \frac{1 - n_{-\sigma}}{\lambda_\sigma(i\omega)} + \frac{n_{-\sigma}}{\bar{\lambda}_\sigma(i\omega)}, \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned} \lambda_\sigma(i\omega) &= i\omega + E_0 - E_\sigma, & E_0 &= 0, & E_\sigma &= \epsilon_f, & E_2 &= U + 2\epsilon_f, \\ \bar{\lambda}_\sigma(i\omega) &= i\omega + E_{-\sigma} - E_2, & Z_0 &= e^{-\beta E_0} + 2e^{-\beta E_\sigma} + e^{-\beta E_2}, \\ n_{\bar{\sigma}} &= \frac{e^{-\beta E_\sigma} + e^{-\beta E_2}}{Z_0}, & 1 - n_{\bar{\sigma}} &= \frac{e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_\sigma}}{Z_0}. \end{aligned}$$

Эти функции определяют простейший поляризационный оператор $\Pi_2(i\Omega)$ в нормальном состоянии:

$$\Pi_2(i\Omega) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega} G_\sigma^0(i\omega) g_\sigma^0(i\omega - i\Omega). \quad (24)$$

Суммирование по частотам приводит к следующему результату:

$$\begin{aligned} \Pi_2(i\Omega) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \sigma} |V_{\vec{k}}|^2 \left\{ \frac{1 - n_{\bar{\sigma}}}{i\Omega - \epsilon(\vec{k}) + \epsilon_f} \left[\frac{1}{e^{\beta\epsilon(\vec{k})} + 1} - \frac{1}{e^{\beta\epsilon_f} + 1} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{n_{\bar{\sigma}}}{i\Omega - \epsilon(\vec{k}) + U + \epsilon_f} \left[\frac{1}{e^{\beta\epsilon(\vec{k})} + 1} - \frac{1}{e^{\beta(U+\epsilon_f)} + 1} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (25)$$

Для выполнения суммирования по вектору $\vec{k}$ перейдем к интегрированию по энергиям:

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} (\cdot) \longrightarrow \int (\cdot) \rho(E) dE,$$

где $\rho(E)$ – плотность состояний.

С помощью уравнения (22) для случая $T = 0$ при

$$\rho(E) = \frac{1}{2W} \begin{cases} 1, & E < |W|, \\ 0, & E > |W|, \end{cases}$$

Рис. 2. Энергия коллективной моды E в зависимости от параметра гибридизации V для различных значений ширины зоны: $W = 0.5$ эВ (сплошная линия) и $W = 1$ эВ (штриховая линия). Другие параметры приняты следующими: $\omega_c = 0.075$ эВ, $U = 5.85$ эВ, $\epsilon_F = -0.095$ эВ.

где W – ширина зоны, мы исследовали зависимость энергии коллективной моды E относительно параметра гибридизации V . Результаты численных расчетов представлены на рис. 2.

Согласно этим результатам перенормированная энергия коллективной моды E фононных облаков уменьшается с увеличением величины V и становится равной нулю при критическом значении

$$V_c = \sqrt{\frac{\hbar\omega_c W}{\ln |(W - \epsilon_f)(W + U + \epsilon_f)/(\epsilon_f(U + \epsilon_f))|}}. \quad (26)$$

Очевидно, что для больших значений ширины энергетической зоны W критическое значение V_c возрастает.

Таким образом, мы делаем вывод, что коллективная мода подавляется гибридизацией.

4. ВЫВОДЫ

Развит диаграммный подход для модели Андерсона–Холстейна в предположении сильного кулоновского межатомного взаимодействия примесных электронов и при наличии сильной связи электрон-фононного взаимодействия этих электронов с оптическими фононами. Оба взаимодействия считаются сильными и учитываются в главной части гамильтониана.

Исследована динамика фононных облаков поляронов, подробно описана перенормировка их коллективной частоты.

Доказано, что при $T = 0$ коллективная мода подавляется, если гибридизация становится сильной.

Благодарности. Авторы благодарны С. Кожокару за очень полезное обсуждение.

Список литературы

- [1] W. Koller, D. Meyer, Y. Ōno, A. C. Hewson, *Europhys. Lett.*, **66**:4 (2004), 559–564, arXiv: cond-mat/0312367.
- [2] P. Majumdar, H. R. Krishnamurthy, *Phys. Rev. Lett.*, **73**:11 (1994), 1525–5128.
- [3] M. Imada, A. Fujimori, Y. Tokura, *Rev. Modern Phys.*, **70**:4 (1998), 1039–1263.
- [4] A. J. Millis, P. B. Littlewood, B. J. Shraiman, *Phys. Rev. Lett.*, **74**:25 (1995), 5144–5147.
- [5] O. Gunnarsson, *Rev. Modern Phys.*, **69**:2 (1997), 575–606.
- [6] J. H. Hubbard, *Proc. R. Soc. London Ser. A*, **276**:1365 (1963), 238–257; **281**:1386 (1964), 401–419; **285**:1403 (1965), 542–560.
- [7] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **124**:1 (1961), 41–53.
- [8] T. Holstein, *Ann. Phys.*, **8**:3 (1959), 343–389.
- [9] I. G. Lang, Yu. A. Firsov, *ЖЭТФ*, **43** (1962), 1843–1860.
- [10] М. И. Владимир, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **82**:3 (1990), 428–437.
- [11] С. И. Вакару, М. И. Владимир, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **85**:2 (1990), 248–257.
- [12] Н. Н. Боголюбов, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **86**:1 (1991), 16–30.
- [13] Н. Н. Боголюбов, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **92**:2 (1992), 182–190.
- [14] V. A. Moskalenko, P. Entel, D. F. Digor, *Phys. Rev. B*, **59**:1 (1999), 619–635.
- [15] В. А. Москаленко, *ТМФ*, **111**:3 (1997), 439–451; **113**:3 (1997), 432–437.

Поступила в редакцию 4.09.2013,
после доработки 20.11.2013