

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

О неадиабатических эффектах в фоновых спектрах металлов

Е.Г. Максимов, А.Е. Каракозов

Представлен краткий обзор экспериментальных и теоретических исследований неадиабатических эффектов в металлах. Показано, что эти эффекты наиболее ярко проявляются в спектрах оптических фононов при малых волновых векторах \mathbf{q} , удовлетворяющих условию $\mathbf{q}\mathbf{v}_F < \omega_0(\mathbf{q})$, где \mathbf{v}_F — фермиевская скорость электронов и $\omega_0(\mathbf{q})$ — фоновые частоты. Проведено обсуждение различных теоретических подходов к расчету неадиабатических эффектов. Подробно обсуждается феноменологическая теоретико-полевая модель Фрëлиха, наиболее часто применяемая в таких расчетах. Рассмотрены особенности ее использования и показана ее эффективность для изучения неадиабатических эффектов.

PACS numbers: 71.15.Md, 74.20. – z, 74.72. – h

DOI: 10.3367/UFNr.0178.200806a.0561

Содержание

1. Введение (561).
2. Адиабатическое приближение (562).
3. Неадиабатические эффекты в модели Фрëлиха (564).
4. Микроскопическая теория динамики решетки (571).
5. Заключение (575).

Список литературы (575).

1. Введение

Понятие об адиабатическом разделении медленных колебательных степеней свободы и быстрых электронных было впервые введено Борном и Опенгеймером [1]. Суть адиабатического приближения для расчета фоновых спектров кристаллов [2] крайне проста и сводится к следующему. Для учета электронного вклада в фоновые спектры достаточно вычислить отклик электронов на статическое перераспределение плотности ионов, рассматривая его как внешнее поле волны заряда. Последующий учет того факта, что ионы реально колеблются с конечной скоростью, приводит для большей части спектра лишь к малым поправкам по параметру $\sqrt{m/M}$, где m — масса электрона, а M — масса иона. Адиабатическое приближение действительно хорошо работает в диэлектриках и широкозонных полупроводниках. Гораздо сложнее обстоит дело в металлах [3].

Е.Г. Максимов. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Ленинский просп. 53, 119991 Москва, Российская Федерация
Тел. (499) 135-75-11. Факс (499) 135-85-33
E-mail: maksimov@lpi.ru

А.Е. Каракозов. Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, 142190 Троицк, Московская обл., Российская Федерация
Тел. (495) 334-05-82

Статья поступила 7 сентября 2007 г.,
после доработки 14 октября 2007 г.

Впервые Энгельсберг и Шриффер заметили [4], что неадиабатические эффекты могут быть не малыми для оптических фононов с волновыми векторами, удовлетворяющими условию $\mathbf{q}\mathbf{v}_F < \omega_0(\mathbf{q})$, где \mathbf{v}_F — фермиевская скорость электронов и $\omega_0(\mathbf{q})$ — затравочные частоты оптических фононов. В этом случае неадиабатические эффекты могут приводить к большой (т.е. не пропорциональной $\sqrt{m/M}$) перенормировке фоновых частот, сильной дисперсии фоновых частот при малых \mathbf{q} и к появлению конечной величины затухания таких фононов [5]. Хотя сразу же следует оговориться, что в самой работе [4] никаких слов об адиабатичности или неадиабатичности соответствующих фононов сказано не было. Подобное явление наблюдалось в комбинационном рассеянии света в некоторых полупроводниках и металлах [5–8]. Проблема неадиабатических эффектов была подробно рассмотрена для нормального состояния металла в работе [9]. Эти эффекты могут оказаться даже более существенными в сверхпроводящем состоянии для фоновых частот $\omega_{ph} \sim 2\Delta$, где Δ — сверхпроводящая щель. Изменение фоновых частот и затуханий при переходе в сверхпроводящее состояние наблюдалось в стандартном сверхпроводящем металле Nb [10]. Теория неадиабатических эффектов в сверхпроводниках для акустических фононов была развита Шустером [11] в приближении Бардина–Купера–Шриффера (БКШ), но, как и в работе [4], без указания, что речь идет именно о неадиабатических эффектах. В работе [4] была предсказана очень интересная возможность расщепления фоновой моды с энергией порядка сверхпроводящей щели $\omega_{ph} \approx 2\Delta$ на две моды. Позднее похожий эффект наблюдался экспериментально [12, 13].

Еще ранее в работе Мигдала [14] было детально изучено взаимное влияние электронов и фононов друг на друга в рамках теоретико-полевой модели Фрëлиха. В работе [14] была получена сильная перенормировка фоновых частот за счет электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ). Перенормировка возникла в работе Мигдала фактически в рамках адиабатического под-

хода. Этот результат, как и сама возможность использования модели Фрелиха для описания перенормировки фононных частот, неоднократно подвергались критике [15–17]. Подвергался критике и сам факт существования неадиабатических эффектов в фононных спектрах металлов [18, 19], в том числе, и в журнале *УФН* [20].

В данном обзоре на материале наших работ по этой теме [9, 21, 22], а также экспериментальных и теоретических исследований других авторов мы подробно рассмотрим ситуацию с неадиабатическими эффектами в фононных спектрах металлов. В работе используется атомная система единиц ($e = \hbar = 1$).

2. Адиабатическое приближение

Напомним основные положения адиабатического подхода [1, 2]. Критерием адиабатичности системы является отсутствие в ее электронном спектре возбуждений с энергиями порядка частот колебаний ионов. На первый взгляд, в металлах этот критерий заведомо нарушен, поскольку вблизи поверхности Ферми имеются электронные возбуждения со сколь угодно малой энергией. Однако число таких возбуждений в металлах весьма мало по сравнению с полным числом электронов, что и делает возможным использование адиабатического приближения для определения величин, интегральных по электронному спектру.

Запишем полный электрон-ионный гамильтониан в виде

$$H = H_e(\mathbf{r}) + H_i(\mathbf{R}) + H_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \quad (2.1)$$

Адиабатический подход к решению уравнения Шрёдингера с гамильтонианом (2.1) заключается в том, что его собственная функция $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ ищется в виде разложения по собственным функциям $\psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ оператора электронной энергии $H_e(\mathbf{r}) + H_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ для произвольной конфигурации ионов $\{\mathbf{R}\}$:

$$[H_e(\mathbf{r}) + H_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R})] \psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E_m(\mathbf{R}) \psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad (2.2)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_m \chi_m(\mathbf{R}) \psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \quad (2.3)$$

При этом функции $\chi_m(\mathbf{R})$, описывающие свойства ионной подсистемы, находятся из уравнений

$$[H_i(\mathbf{R}) + E_m(\mathbf{R})] \chi_m(\mathbf{R}) + \sum_n (A_{mn} + B_{mn}) \chi_n(\mathbf{R}) = E \chi_m(\mathbf{R}), \quad (2.4)$$

где

$$A_{mn} = \frac{1}{M} \sum_j (\nabla_{\mathbf{R}_j})_{mn} \nabla_{\mathbf{R}_j}, \quad B_{mn} = \frac{1}{M} \sum_j (\nabla_{\mathbf{R}_j}^2)_{mn}, \quad (2.5)$$

\mathbf{R}_j — координата j -го иона, $(\nabla_{\mathbf{R}_j})_{mn}$ — матричный элемент градиента $\nabla_{\mathbf{R}_j}$ по функциям $\psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R})$. Если в (2.4) пренебречь недиагональными слагаемыми A_{mn} и B_{mn} , то мы получим две независимые подсистемы: электронную, описываемую уравнением (2.2), и ионную, определяемую уравнением (2.4). В уравнение (2.4), описывающее колебательный спектр металла, в качестве потенциальной энергии входит выражение $E_m(\mathbf{R})$ — энергия элект-

ронов в заданном статическом поле ионов:

$$E_m(\mathbf{R}) = \left\langle H_e + \sum_n V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \right\rangle. \quad (2.6)$$

Здесь $V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ — потенциал электрон-ионного взаимодействия. Обычным образом, разлагая $H_i(\mathbf{R})$ и $E_m(\mathbf{R})$ вблизи положений равновесия ионов $\{\mathbf{R}_n^0\}$ по малым отклонениям $\mathbf{u}_n = \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_n^0$, можно получить выражение для силовой матрицы $C_{mm'}^{\alpha\beta}$, при этом электронный вклад в $C_{mm'}^{\alpha\beta}$ имеет вид

$$C_{mm'}^{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 E_m}{\partial R_n^\alpha \partial R_{n'}^\beta} = \frac{\partial^2}{\partial R_n^\alpha \partial R_{n'}^\beta} \left\langle H_e + \sum_m V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) \right\rangle = \frac{\partial}{\partial R_n^\alpha} \int d^3 r \rho(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial R_{n'}^\beta} V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{n'}), \quad (2.7)$$

где $\rho(\mathbf{r})$ — плотность электронов. При записи последнего выражения в (2.7) мы использовали теорему Гельмана – Фейнмана. Окончательно $C_{mm'}^{\alpha\beta}$ можно записать в виде

$$C_{mm'}^{\alpha\beta} = \int d^3 r \frac{\partial}{\partial R_n^\alpha} \rho(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial R_{n'}^\beta} V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{n'}) + \delta_{mm'} \int d^3 r \rho(\mathbf{r}) \frac{\partial^2}{\partial R_n^\alpha \partial R_n^\beta} V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n). \quad (2.8)$$

Как видно из формулы (2.8), вычисление вклада электронов в силовую матрицу $C_{mm'}^{\alpha\beta}$ связано, в основном, с расчетом производной от электронной плотности $\rho(\mathbf{r})$, поскольку вычисление производных электрон-ионного потенциала не представляет трудностей. В рамках стандартной квантовой теории возмущений производная от $\rho(\mathbf{r})$ может быть записана в виде

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_n} \rho(\mathbf{r}) = \int d^3 r' \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega = 0) \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_n} V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n). \quad (2.9)$$

Здесь $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega = 0)$ — статическая восприимчивость электронов кристалла. Частоты колебаний определяются, как обычно, из уравнения

$$\det |\bar{\Phi}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) - M\omega^2(\mathbf{q})\delta^{\alpha\beta}| = 0, \quad (2.10)$$

где $\bar{\Phi}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \Phi^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) - \Phi^{\alpha\beta}(0)$ — динамическая матрица колебаний, которую для кристаллов с одним атомом в элементарной ячейке можно записать в виде

$$\Phi^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2 Z^2}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G}} \frac{(\mathbf{q} + \mathbf{G})^\alpha (\mathbf{q} + \mathbf{G})^\beta}{(\mathbf{q} + \mathbf{G})^2} + \frac{1}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} (\mathbf{q} + \mathbf{G})^\alpha (\mathbf{q} + \mathbf{G}')^\beta V_{ei}(\mathbf{q} + \mathbf{G}) \times \chi(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}', \omega = 0) V_{ei}(\mathbf{q} + \mathbf{G}'). \quad (2.11)$$

Первое слагаемое в (2.11) представляет собой вклад ионов решетки в динамическую матрицу колебаний, второе определяется системой электронов в периодическом поле решетки. Здесь Z — заряд иона, \mathbf{G}, \mathbf{G}' — векторы обратной решетки, $V_{ei}(\mathbf{q} + \mathbf{G})$ — матричный элемент электрон-ионного взаимодействия, $\chi(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}', \omega = 0)$ — фурье-компонента статической восприимчивости электронов, представляющая собой

бесконечномерную матрицу в пространстве векторов обратной решетки \mathbf{G} , \mathbf{G}' , и Ω_0 — объем элементарной ячейки. Последовательная многочастичная теория динамики решетки, приводящая к формулам (2.9)–(2.11), была создана в 1960–1970-е гг. (см., например, обзоры [23, 24]), однако сколько-нибудь последовательных микроскопических расчетов фоновых спектров кристаллов в рамках этого подхода сделано не было. Можно отметить только расчеты динамики решетки простых металлов в теории возмущений по малому электронному псевдопотенциалу (см. обзор [16]). Трудности расчетов фононов с использованием формул (2.9)–(2.11) связаны, в основном, с вычислением матрицы электронной восприимчивости. Следует, однако, отметить, что общее и абсолютно строгое в адиабатическом и гармоническом приближении выражение (2.11) для электронного вклада в динамическую матрицу колебаний принесло значительную пользу для теории твердого тела. Оно позволило доказать целый ряд строгих и точных соотношений в динамике решетки, а также разработать множество приближенных и полуфеноменологических подходов к расчетам фоновых спектров кристаллов [16, 23, 24]. Это позволило, в частности, выяснить ряд вопросов, связанных с неустойчивостью фоновых возбуждений за счет аномалий в электронных спектрах — так называемого нестинга [21]. Мы еще вернемся к обсуждению проблемы расчета матрицы электронной восприимчивости в разделе 4, посвященном микроскопической теории динамики решетки. Здесь мы хотели бы отметить, что успехи теории линейного отклика в методе функционала плотности позволили вообще избежать расчета матрицы электронной восприимчивости при вычислении фоновых спектров в адиабатическом приближении. В рамках этого подхода можно непосредственно вычислить производную распределения электронной плотности $\rho(\mathbf{r})$, которая в соответствии с уравнением (2.8) и определяет электронный вклад в силовую матрицу кристалла (см. обзоры [25, 26]).

В рамках адиабатического приближения электрон-фононное взаимодействие содержится в недиагональных слагаемых уравнения (2.4) A_{mn} и B_{mn} . Учет этого взаимодействия, следуя Бровману и Кагану [15, 16], можно произвести следующим образом. Вычислим по теории возмущений неадиабатическую поправку ΔE к полной энергии системы. Затем, используя процедуру варьирования энергии по соответствующим числам заполнения, получим поправки к энергиям фононов $\omega_{q\lambda}$ и к энергиям электронов $\varepsilon_{\mathbf{k}}$:

$$\delta\omega_{q\lambda} = \frac{\delta(\Delta E)}{\delta N_{q\lambda}}, \quad \delta\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\delta(\Delta E)}{\delta n_{\mathbf{k}}}. \quad (2.12)$$

Учитывая, что

$$(\nabla_{\mathbf{R}_i})_{mn} = -\frac{[\nabla_{\mathbf{R}_i} H_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R})]_{mn}}{E_m - E_n},$$

и переходя к импульсному представлению для электронов и фононов, можно показать [15, 16], что

$$\begin{aligned} \delta\omega_{q\lambda} = & \sum_{\mathbf{k}} |M_{\mathbf{k}q\lambda}|^2 \frac{n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \omega_{q\lambda} + i\delta} - \\ & - \sum_{\mathbf{k}} |M_{\mathbf{k}q\lambda}|^2 \frac{n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

где $M_{\mathbf{k}q\lambda}$ — матричный элемент оператора

$$\sum_j [\nabla_{\mathbf{R}_j} H_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R})]_{mm}.$$

Легко убедиться из (2.13), что для большей части фоновых спектров, где выполняется условие $\mathbf{q}\mathbf{v}_F > \omega_{q\lambda}$, поправки за счет неадиабатических эффектов малы, как

$$\Delta\omega_{q\lambda} = \text{Re } \delta\omega_{q\lambda} \approx \omega_{q\lambda} \left(\frac{\bar{\omega}}{\varepsilon_F} \right)^2, \quad \Gamma_{q\lambda} = \text{Im } \delta\omega_{q\lambda} \approx \omega_{q\lambda} \frac{\bar{\omega}}{\varepsilon_F}. \quad (2.14)$$

Здесь $\bar{\omega}$ — величина порядка средних фоновых частот. Как было отмечено Бровманом и Каганом [15, 16], малость неадиабатической перенормировки фоновых частот при $\mathbf{q}\mathbf{v}_F > \omega_{q\lambda}$ возникает из-за взаимной компенсации двух слагаемых в (2.13), хотя сами по себе оба эти слагаемые не малы по $\sqrt{m/M}$. Условие $\mathbf{q}\mathbf{v}_F > \omega_{q\lambda}$ выполнено для акустического спектра во всей зоне Бриллюэна. Однако для оптических фононов при малых волновых векторах \mathbf{q} первое слагаемое в (2.13) обращается в нуль. Второе же слагаемое при этом приводит в области волновых векторов, удовлетворяющих условию $\mathbf{q}\mathbf{v}_F < \omega_{q\lambda}$, к сильной перенормировке частоты адиабатических фононов:

$$\delta\omega(\mathbf{q} = 0) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} M^2(\mathbf{k}, \mathbf{q} = 0). \quad (2.15)$$

К сожалению, в рамках адиабатического подхода трудно получить точное выражение для матричного элемента $M(\mathbf{k}, \mathbf{q})$. Простейшие модельные оценки выражения (2.15) показывают [17], что $\delta\omega \approx \lambda \langle \omega_{ad} \rangle$, где λ — константа ЭФВ и $\langle \omega_{ad} \rangle$ — средняя адиабатическая частота оптических фононов.

Для перенормировки электронного спектра получаем следующее выражение:

$$\Delta E_{\mathbf{k}} = \sum_{q\lambda} |M_{\mathbf{k}q\lambda}|^2 \frac{\omega_{q\lambda}(1 - 2n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2 - \omega_{q\lambda}^2}. \quad (2.16)$$

Легко видеть, что выражение (2.16) не мало для электронов вблизи поверхности Ферми, но спадает при удалении от нее. Неадиабатическое взаимодействие, в частности, определяет энергетическую релаксацию в металлах и их сверхпроводящие свойства. На основании приведенных здесь формул адиабатического приближения можно сделать следующие выводы о роли электрон-фононного взаимодействия в металлах.

1. При выполнении неравенства $\mathbf{q}\mathbf{v}_F > \omega_{q\lambda}$ динамическое взаимодействие электронов с фононами, возникающее за счет неадиабатических поправок A_{mn} и B_{mn} , слабо перенормирует фоновый спектр. Таким образом, фоновые частоты в металлах в большей части зоны Бриллюэна вычисляются в рамках адиабатического приближения с точностью порядка $\sqrt{m/M}$.

2. Частоты оптических фононов при условии $\mathbf{q}\mathbf{v}_F < \omega_{q\lambda}$ сильно перенормируются за счет неадиабатических поправок, и их необходимо учитывать при любых расчетах этих фононов.

3. Перенормировка электронов вблизи поверхности Ферми, обусловленная неадиабатическим электрон-фононным взаимодействием, велика и существенна для описания многих физических явлений в электронной системе.

4. Неустойчивость системы в рамках адиабатического приближения проявляется в появлении отрицательных значений $\omega_{\mathbf{q}\lambda}^2$; в адиабатическом уравнении (2.10).

Конкретное обсуждение причин этих неустойчивостей и возможной их связи с электрон-фононным взаимодействием мы отложим до следующего раздела. Здесь же мы отметим, что из-за своего негамильтонова характера и отсутствия удобной диаграммной техники для вычисления соответствующих поправок адиабатическое приближение мало пригодно для самосогласованных расчетов электронной и фононной систем.

3. Неадиабатические эффекты в модели Фрëлиха

Большая часть работ по изучению неадиабатических эффектов как в нормальном, так и в сверхпроводящем состояниях металла была выполнена в рамках модели Фрëлиха. Гамильтониан этой модели может быть записан в виде [27]

$$H = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \xi_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}\sigma} + \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \sigma, s} g_s(\mathbf{p}, \mathbf{q}) c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}^+ c_{\mathbf{p}\sigma} (b_{\mathbf{q}s} + b_{-\mathbf{q}s}^+) + \sum_{\mathbf{q}s} \omega_0(\mathbf{q}, s) \left(b_{\mathbf{q}s}^+ b_{\mathbf{q}s} + \frac{1}{2} \right), \quad (3.1)$$

где $c_{\mathbf{p}\sigma}^+$, $c_{\mathbf{p}\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электронов, $\xi_{\mathbf{p}}$ — спектр электронов, отсчитываемый от химического потенциала, $g_s(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ — матричный элемент ЭФВ, $b_{\mathbf{q}s}^+$, $b_{\mathbf{q}s}$ — операторы рождения и уничтожения фононов моды s с импульсом \mathbf{q} и энергией $\omega_0(\mathbf{q}, s)$.

Для фононной функции Грина $D_s(\mathbf{q}, \omega)$ можно написать выражение

$$D_s^{-1}(\mathbf{q}, \omega) = \omega_0^{-2}(\mathbf{q}, s) [\omega^2 - \omega_0^2(\mathbf{q}, s)] - \Pi_s(\mathbf{q}, \omega), \quad (3.2)$$

где $\Pi_s(\mathbf{q}, \omega)$ — поляризационный оператор. Перенормированная за счет ЭФВ фононная частота $\omega(\mathbf{q}, s)$, в соответствии с (3.2), находится из уравнения

$$\omega^2(\mathbf{q}, s) = \omega_0^2(\mathbf{q}, s) \left\{ 1 + \text{Re} \Pi_s[\mathbf{q}, \omega(\mathbf{q}, s)] \right\}. \quad (3.3)$$

В простейшем однопетлевом приближении (используя электронные функции Грина для свободных частиц и полагая $g_s(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \approx g$) для поляризационного оператора получим

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = 2g^2 \sum_{\mathbf{p}} \frac{n_{\mathbf{p}} - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}}{\omega - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{p}} + i\delta}. \quad (3.4)$$

Рассмотрим поведение фононных мод $\omega(\mathbf{q}, s)$ в двух предельных случаях: $\mathbf{q}\mathbf{v}_F \gg \omega_0(\mathbf{q}, s)$ и $\mathbf{q}\mathbf{v}_F \ll \omega_0(\mathbf{q}, s)$. В первом случае мы получим хорошо известное выражение, совпадающее с формулой, полученной Мигдалом [14]:

$$\omega^2(\mathbf{q}) = \omega_0^2(\mathbf{q}, s) [1 - 2g^2 N(0)]. \quad (3.5)$$

Величина $g^2 N(0)$ представляет собой безразмерную константу ЭФВ:

$$\lambda = g^2 N(0). \quad (3.6)$$

В металлах константа связи (3.6) обычно не мала и может быть порядка единицы. Таким образом, из соотношений (3.5), (3.6) следует, что ЭФВ сильно перенормирует

фононные частоты. Мигдал подробно рассматривал случай акустических фононов, для которых всегда выполнено условие $\mathbf{q}\mathbf{v}_F \gg \omega_0(\mathbf{q}, s)$, и получил именно этот ответ. Как мы уже отмечали, этот результат Мигдала многократно подвергался критике на том основании, что он противоречит адиабатическому приближению, в котором, как мы только что показали, неадиабатическое ЭФВ не перенормирует акустические фононы. И эта критика была бы справедлива, если бы кто-нибудь и когда-нибудь показал, что частота $\omega_0(\mathbf{q}, s)$ в гамильтониане Фрëлиха и есть точная адиабатическая фононная частота. Дело в том, что гамильтониан Фрëлиха, как и любая модельная система, в отличие от точного гамильтониана предполагает оптимальный (в основном, на интуитивном уровне или из эксперимента) подбор затравочных квазичастиц и констант взаимодействия, при которых данная упрощенная модель имеет физический смысл. Мы еще вернемся к обсуждению возможного физического смысла как модели Фрëлиха, так и входящих в нее параметров. Сейчас же по причинам, которые будут приведены ниже в этом разделе, мы условимся считать величину $\omega^2(\mathbf{q}) = \omega_0^2(\mathbf{q}, s)(1 - 2\lambda)$ адиабатической фононной частотой и будем рассматривать системы с $\lambda < 1/2$.

Рассмотрим теперь перенормировку оптических фононов в модели Фрëлиха, ограничившись для простоты, как и в работе [4], бездисперсионными затравочными фононами с частотой $\omega_0^2(\mathbf{q}, s) = \omega_0^2$. При больших волновых векторах \mathbf{q} , удовлетворяющих условиям $\mathbf{q}\mathbf{v}_F \gg \omega_0$ и $q \leq k_F$, частота фонона в соответствии с (3.5) перенормируется как

$$\omega^2(\mathbf{q}) = \omega_0^2 [1 - 2g^2 N(0)]. \quad (3.7)$$

При малых волновых векторах $q \rightarrow 0$, как следует из (3.3) и (3.4), $\Pi_s(\mathbf{q} = 0, \omega) = 0$, т.е. в этом случае частота фонона не перенормируется:

$$\omega^2(q \rightarrow 0) = \omega_0^2. \quad (3.8)$$

Как видно из (3.7) и (3.8), частота оптических фононов с $q \rightarrow 0$ может быть существенно выше, чем частоты фононов с большими волновыми векторами $q > \omega_0/v_F$. Разница этих частот $\Delta\omega^2 = \omega^2(\mathbf{q} = 0) - \omega^2(q > \omega_0/v_F)$ не мала по неадиабатическому параметру $\sqrt{m/M}$:

$$\Delta\omega^2 = 2\lambda\omega_0^2. \quad (3.9)$$

Как мы уже условились выше, будем рассматривать частоту (3.7) при $\mathbf{q}\mathbf{v}_F \gg \omega_0$ как адиабатическую, а при $q = 0$ как перенормированную неадиабатическим взаимодействием. В результате для слабой связи мы получим $\omega_{\text{nonad}}^2 \approx \omega_{\text{ad}}^2 + 2\lambda\omega_{\text{ad}}^2$, т.е. абсолютно то же выражение, какое можно получить и в рамках адиабатического подхода (см. формулы (2.13), (2.15)). Единственное отличие — это переобозначение адиабатической частоты, учитывающее связь затравочного спектра гамильтониана Фрëлиха с адиабатическим спектром вида $\omega_{\text{ad}}^2(\mathbf{q}, s) = \omega_0^2(\mathbf{q}, s)(1 - 2\lambda)$. Оценку величины константы связи λ мы отложим до раздела 4.

Можно также рассчитать дисперсию оптического фонона при $\mathbf{q}\mathbf{v} \leq \omega_0$, записав выражение для $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$ в виде [9]

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = 2g^2 \int \frac{dS_F}{v_F} \frac{\mathbf{q}\mathbf{v}_F}{\omega - \mathbf{q}\mathbf{v}_F + i\delta}. \quad (3.10)$$

Здесь интегрирование проводится по поверхности Ферми. Для величины $\omega^2(\mathbf{q})$ имеем

$$\omega^2(\mathbf{q}) = \omega_0^2 + a\lambda(\mathbf{q}\bar{v}_F)^2. \quad (3.11)$$

Здесь a — постоянная порядка единицы и \bar{v}_F — средняя скорость Ферми. Таким образом, мы видим, что при малых волновых векторах дисперсия оптических фононов может существенно превышать обычную скорость звука в металлах и быть сопоставимой со скоростью Ферми. Можно вычислить и затухание фононов (ширину фоновой линии):

$$\gamma(\mathbf{q}, \omega) = 2g^2 \int \frac{dS_F}{v_F} \delta(\omega - qv_F). \quad (3.12)$$

Из этой формулы следует, что при $T = 0$ затухание оптических фононов равно нулю при $q = 0$. Оно имеет порог при $\omega \approx (\mathbf{q}\bar{v}_F)_{\min}$ и максимум при $\omega \approx \mathbf{q}\bar{v}_F$.

Собственно говоря, именно эти эффекты, т.е. большая разность между частотами оптического фонона при $\mathbf{q} = 0$ и при $q > \omega_0/v_F$, не зависящая от неадиабатического параметра $\sqrt{m/M}$, а также наличие сильной дисперсии фоновой моды при $\mathbf{q}\bar{v}_F \cong \omega_0$, получили впоследствии название неадиабатических. Подобные эффекты были изучены теоретически в работах [4, 9, 28–30] (см. также обзор [5]). Помимо неадиабатической перенормировки частоты оптических фононов при $\mathbf{q} = 0$ и изменения дисперсии этих фононов при малых \mathbf{q} , можно вычислить и температурную зависимость неадиабатических эффектов. С этой целью необходимо учесть при расчете поляризационного оператора изменение с температурой электронной функции Грина за счет ЭФВ [9].

Экспериментально было отмечено влияние электронов проводимости на продольные оптические моды в полупроводниках и обычных металлах [5]. В большинстве экспериментальных работ по допированным полупроводникам [5] наблюдалось, главным образом, достаточно тривиальное явление, отмеченное еще в работе [28], а именно исчезновение расщепления частот продольной и поперечной оптических мод при $\mathbf{q} = 0$ при добавлении в ионный кристалл свободных носителей. В допированных полупроводниках и металлах наблюдались также изменения фоновых частот и их затухания (или ширин линий фононов) [5, 10, 31].

Наиболее впечатляющие экспериментальные результаты по неадиабатическим эффектам в фоновых спектрах металлов были получены Поносовым с соавторами [6–8]. Обычно считается, что с помощью рамановского (комбинационного) рассеяния света измеряются частоты оптических фононов при волновых векторах $q = 0$. В действительности при измерении рамановского рассеяния с использованием лазерного излучения, обладающего различными энергиями, возбуждаются фононы с разными, хотя и малыми, но конечными векторами \mathbf{q} . В работах Поносова и др. [6–8] была предложена методика, позволяющая измерять фоновые частоты и их дисперсию при волновых векторах $q \cong \omega_{ph}/v_F$, а также затухание фононов. Была изучена также зависимость этих величин от температуры. На рисунке 1 показаны результаты измерений дисперсии оптических фононов, а также ширин их линий в металлическом осмии. Качественно полученные результаты очень хорошо согласуются с теоретическими предсказаниями [9]. Возмож-

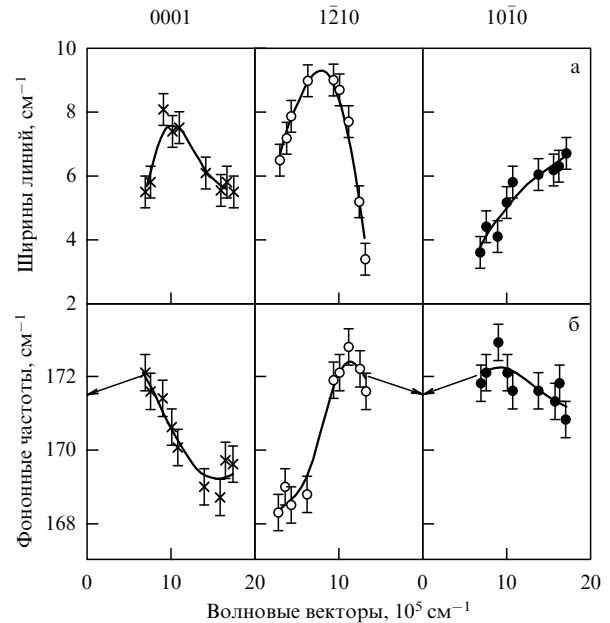


Рис. 1. Экспериментальные ширины линий (а) и частоты (б) фонона E_{2g} вдоль симметричных направлений зоны Бриллюэна (из работы [8]).

ность количественного описания этих экспериментов мы обсудим в разделе 4.

В проведенном рассмотрении неадиабатических эффектов в модели Фрелиха использовалось простейшее однопетлевое приближение для поляризационного оператора. Уже в работе Мигдала [14] отмечалось, что при малых волновых векторах \mathbf{q} при расчете поляризационного оператора необходимо учитывать вершинные поправки. Подобные результаты были получены и в ряде других работ [4, 9, 29, 30]. Было отмечено, что эти поправки в поляризационном операторе при $\mathbf{q}\bar{v}_F \leq \omega_{ph}$ не малы по параметру $\sqrt{m/M}$. Такие поправки приводят, во-первых, к тривиальному количественному изменению некоторых из результатов, приведенных выше, в частности, параметра a в дисперсии фононов (3.11). Мы используем слово "тривиальный", поскольку и без учета вершинных поправок нам неизвестны точные значения всех параметров модели Фрелиха, поэтому не велик резон вычислять для них дополнительную перенормировку. За счет вершинных поправок могут, однако, возникать и более существенные эффекты. Один из них был предсказан еще в работе Энгельсберга и Шриффера [4]. Вычислив вершинную функцию во втором порядке по малым импульсам \mathbf{q} , они показали, что бездисперсная оптическая фоновая мода может расщепиться на две моды $\omega^2(\mathbf{q}) = \omega_0^2 \pm c(\mathbf{q}\bar{v}_F)^2$, где c — некоторая постоянная, выражающаяся через константу электрон-фононной связи. На эксперименте подобное явление пока не наблюдалось. Более того, после публикации работы [4] этот вопрос лишь однажды кратко обсуждался в печати [30] и остается до конца неясным — есть ли результат о расщеплении оптической моды вследствие приближений, использованных в работе [4], или он сохранится и при более точном расчете. Отметим сразу же, что подобное расщепление фоновых мод действительно имеет место в сверхпроводниках. Вершинные поправки приводят и к еще одному нетривиальному следствию, которое нам

тоже удобнее обсудить на примере неадиабатических эффектов в сверхпроводящем состоянии, к рассмотрению которого мы сейчас и перейдем.

Фононные частоты в сверхпроводящем состоянии определяются по-прежнему уравнением (3.2). Поляризационный оператор в сверхпроводящем состоянии является [32] аналитическим продолжением выражения

$$\hat{H}_s(\mathbf{q}, i\omega_n) = T \sum_{m, \mathbf{p}} g_s(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \text{Tr} [\hat{\tau}_3 \hat{G}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\omega_m + i\omega_n) \times \\ \times \hat{H}_s(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\omega_m + i\omega_n, \mathbf{p}, i\omega_m) \hat{G}(\mathbf{p}, i\omega_m)], \quad (3.13)$$

где $\omega_m = \pi T(2m + 1)$, $\hat{G}(\mathbf{p}, i\omega_n)$ — электронная функция Грина в представлении Намбу, \hat{H}_s — матричная вершинная часть, удовлетворяющая уравнению типа Бете–Солпитера. В модели Фрёлеха межэлектронным взаимодействием, приводящим к сверхпроводимости, является ЭФВ, которое выражается через фононную функцию Грина и зависит от импульсов и энергии. В случае слабой связи теория Элиашберга [33] для сверхпроводников с ЭФВ сводится, как известно, к модели БКШ. Именно этим приближением мы пока и ограничимся. Влияние эффектов сильной электрон-фононной связи будет рассмотрено ниже в этом разделе.

В рамках модели БКШ вершинная часть \hat{H}_s удовлетворяет уравнению вида

$$\hat{H}_s(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\omega_m + i\omega_n, \mathbf{p}, i\omega_m) = g_s(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}) \hat{\tau}_3 - \\ - T \sum_{m', \mathbf{p}'} \hat{\tau}_3 \hat{G}(\mathbf{p}', i\omega_{m'}) \hat{H}_s(\mathbf{p}' + \mathbf{q}, i\omega_{m'} + i\omega_n, \mathbf{p}', i\omega_{m'}) \times \\ \times \hat{G}(\mathbf{p}' + \mathbf{q}, i\omega_{m'} + i\omega_n) \hat{\tau}_3 V(\mathbf{p}', \mathbf{p}), \quad (3.14)$$

где межэлектронное взаимодействие $V(\mathbf{p}', \mathbf{p})$ моделирует поведение суммы электрон-фононного и кулоновского взаимодействий в области энергий $\omega \leq \omega_c$:

$$V(\mathbf{p}', \mathbf{p}) \approx - \sum_{sL} g_{sL}^2 \Psi_L^*(\mathbf{p}') \Psi_L(\mathbf{p}) \Theta(\omega_c - |\xi_{\mathbf{p}}|) \Theta(\omega_c - |\xi_{\mathbf{p}'}|). \quad (3.15)$$

Здесь ω_c — энергия обрезания, равная по порядку величины характерной фононной энергии $\langle \Omega_{\text{ph}} \rangle$, а Ψ_L — некоторый полный набор ортогональных функций. Он может быть выбран, например, в виде ферми-поверхностных гармоник Аллена [34]. Их конкретный вид для наших целей несуществен. Электронная функция Грина БКШ равна

$$\hat{G}(\mathbf{p}, i\omega_n) = - \frac{i\omega_n \hat{\tau}_0 + \Delta_{\mathbf{p}} \hat{\tau}_1 + \xi_{\mathbf{p}} \hat{\tau}_3}{\omega_n^2 + \Delta_{\mathbf{p}}^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2}, \quad (3.16)$$

где $\xi_{\mathbf{p}}$ — спектр одноэлектронных возбуждений и $\Delta_{\mathbf{p}}$ — сверхпроводящая щель, удовлетворяющая основному уравнению БКШ:

$$\hat{\tau}_3 \Delta_{\mathbf{p}} = -T \sum_{m, \mathbf{p}'} \hat{\tau}_3 \hat{G}(\mathbf{p}', i\omega_m) \hat{\tau}_2 \Delta_{\mathbf{p}'} \hat{\tau}_3 V(\mathbf{p}', \mathbf{p}). \quad (3.17)$$

Матричная вершинная часть \hat{H}_s в (3.14) может быть записана в виде

$$\hat{H}_s = \Gamma_s^{(2)} \hat{\tau}_2 + \Gamma_s^{(3)} \hat{\tau}_3, \quad (3.18)$$

где

$$\Gamma_s^{(2,3)}(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = \sum_L \Gamma_{sL}^{(2,3)} \Psi_L^*(\mathbf{p}') \Psi_L(\mathbf{p}).$$

В простейшем случае изотропного s-спаривания энергетическая щель $\Delta_{\mathbf{p}}$ будет иметь лишь одну гармонику с $L = 0$:

$$\Delta_{\mathbf{p}} = \Psi_{L=0}(\mathbf{p}) \Delta_{L=0}. \quad (3.19)$$

В рамках приведенных выше стандартных приближений для модели БКШ вершинная функция зависит только от переданного импульса и энергии, и уравнение (3.14) решается точно. Аналитическое продолжение решения (3.14) имеет простой, хотя и довольно громоздкий вид. Приведем результат:

$$\Gamma_{sL}^{(2)}(\mathbf{q}, \omega) = \\ = g_{sL}(\mathbf{q}) \frac{ig_L^2 I_2^L(\mathbf{q}, \omega)}{[1 + g_L^2 I_3^L(\mathbf{q}, \omega)] [1 - g_L^2 I_1^L(\mathbf{q}, \omega)] + [g_L^2 I_2^L(\mathbf{q}, \omega)]^2}, \quad (3.20)$$

$$\Gamma_{sL}^{(3)}(\mathbf{q}, \omega) = g_{sL}(\mathbf{q}) \times \\ \times \left(1 - \frac{g_L^2 I_3^L(\mathbf{q}, \omega) - g_L^4 \{I_1^L(\mathbf{q}, \omega) I_3^L(\mathbf{q}, \omega) - [I_2^L(\mathbf{q}, \omega)]^2\}}{[1 + g_L^2 I_3^L(\mathbf{q}, \omega)] [1 - g_L^2 I_1^L(\mathbf{q}, \omega)] + [g_L^2 I_2^L(\mathbf{q}, \omega)]^2} \right), \quad (3.21)$$

где введены обозначения $g_{sL}(\mathbf{q}) = g_{sL} \Psi_L(\mathbf{q})$, $\Gamma_{sL}^{(2,3)}(\mathbf{q}, \omega) = \Gamma_{sL}^{(2,3)}(\omega) \Psi_L(\mathbf{q})$ и $g_L^2 = \sum_s g_{sL}^2$. Явный вид функций $I_j^L(\mathbf{q}, \omega)$ определяется заданной для каждого значения $j = 1, 2, 3$ комбинацией индексов α, β, γ в интеграле

$$I_{\alpha\beta\gamma}^L(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{p}} |\Psi_L(\mathbf{p})|^2 \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{p}}}{2T} \right) \times \\ \times [M_{\alpha\beta\gamma}^+ K^-(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}, \omega) + M_{\alpha\beta\gamma}^- K^+(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}, \omega)] \Theta(\omega_c - |\xi_{\mathbf{p}}|), \quad (3.22)$$

в который включены факторы когерентности

$$M_{\alpha\beta\gamma}^{\pm} = \alpha \pm \frac{\beta \Delta^2 + \gamma \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} \xi_{\mathbf{p}}}{E_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} E_{\mathbf{p}}} \quad (3.23)$$

и функции

$$K^{\pm}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}, \omega) = \frac{1}{E_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} \pm E_{\mathbf{p}} + \omega + i\delta} + \frac{1}{E_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} \pm E_{\mathbf{p}} - \omega - i\delta}.$$

Здесь $E_{\mathbf{p}} = (\xi_{\mathbf{p}}^2 + \Delta^2)^{1/2}$ — спектр квазичастиц в сверхпроводнике. Индексам j в функциях $I_j^L(\mathbf{q}, \omega)$ соответствуют следующие комбинации α, β, γ в формулах (3.22) и (3.23):

$$\begin{aligned} j = 1 & \quad \alpha = 1, \quad \beta = -1, \quad \gamma = -1, \\ j = 2 & \quad \alpha = 0, \quad \beta = \frac{\omega}{\Delta}, \quad \gamma = 0, \\ j = 3 & \quad \alpha = 1, \quad \beta = -1, \quad \gamma = 1. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Полученные выражения для вершинных функций имеют вид, очень сходный с тем, что был получен в работах [35–37] при расчете диэлектрического отклика сверхпроводника. Воспользовавшись результатами этих работ,

можно показать, что в рамках адиабатического приближения, т.е. при $\omega = 0$, сверхпроводимость оказывает очень малое влияние на фононные частоты — порядка $(\Delta/\varepsilon_F)^2$. В нашем рассмотрении полностью отсутствует, однако, дальнедействующее кулоновское взаимодействие, которое, как мы убедимся, не оказывает непосредственного влияния на изучаемые нами неадиабатические явления.

Приведем выражение для L -й гармоники фононной собственно-энергетической части:

$$\begin{aligned} \Pi_{sL}(\mathbf{q}, \omega) = & -2g_L^2 \tilde{I}_3^L(\mathbf{q}, \omega) - \\ & -2g_L^2 \frac{I_3^L(\mathbf{q}, \omega)[1 - g_L^2 I_1^L(\mathbf{q}, \omega)] + g_L^2 [I_2^L(\mathbf{q}, \omega)]^2}{[1 + g_L^2 I_3^L(\mathbf{q}, \omega)][1 - g_L^2 I_1^L(\mathbf{q}, \omega)] + [g_L^2 I_2^L(\mathbf{q}, \omega)]^2}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Здесь функция $\tilde{I}_3^L(\mathbf{q}, \omega)$ также определяется интегралом вида (3.13), но с заменой $\Theta(\omega_c - |\xi_{\mathbf{p}}|)$ на $\Theta(|\xi_{\mathbf{p}}| - \omega_c)$. Эта функция описывает в рамках модели Фрелиха вклад ЭФВ в собственно-энергетическую часть фононов от областей, далеких от поверхности Ферми. В силу этого выражение $\tilde{I}_3^L(\mathbf{q}, \omega)$ совершенно не зависит от параметров сверхпроводимости, и при его расчете сверхпроводящую щель Δ можно положить равной нулю. Полученные выше формулы полностью описывают ситуацию в системах с s -спариванием для любых значений волновых векторов \mathbf{q} и частот ω . Они могут быть применены для исследования неадиабатических эффектов как в квазиизотропных системах, так и для фононных мод вблизи коновских аномалий, в частности, для систем с нестингом.

Рассмотрим предел $\mathbf{q} = 0$ и $T = 0$, в котором функции $I_j^L(\mathbf{q}, \omega)$ имеют простой вид:

$$\begin{aligned} I_1^L(0, \omega) &= g_0^{-2} + \left(\frac{\omega}{2\Delta}\right)^2 N(0)I(\omega), \\ I_2^L(0, \omega) &= -\frac{\omega}{2\Delta} N(0)I(\omega), \\ I_3^L(0, \omega) &= N(0)I(\omega), \quad \tilde{I}_3^L(0, \omega) = 0, \end{aligned} \quad (3.26)$$

где

$$I(\omega) = \frac{2\Delta}{\omega} \begin{cases} \frac{\arcsin(\omega/2\Delta)}{\sqrt{1 - (\omega/2\Delta)^2}}, & \omega < 2\Delta, \\ \frac{\pi/2 - \operatorname{arsinh} \sqrt{(\omega/2\Delta)^2 - 1}}{\sqrt{(\omega/2\Delta)^2 - 1}}, & \omega > 2\Delta. \end{cases} \quad (3.27)$$

Как можно видеть из формул (3.25), (3.26),

$$\Pi_{s, L=0}(\mathbf{q} = 0, \omega) = 0. \quad (3.28)$$

Этот результат является следствием тождества Уорда, имеющего место в модели Фрелиха, как и в любых системах с градиентно-инвариантным гамильтонианом. Оно выполняется лишь при правильном учете вершинных поправок [35]. Это и есть то самое нетривиальное следствие учета вершинных поправок, о котором мы упоминали чуть выше. Затравочное значение фононной собственно-энергетической части без учета вершинных

поправок (т.е. при $\Gamma = g$) не удовлетворяет тождеству (3.28). Как было показано в работах [32, 38], изотропное дальнедействующее кулоновское взаимодействие, связанное непосредственно с $L = 0$ компонентой собственно-энергетической части $\Pi_{s, L=0}(\mathbf{q}, \omega)$, обращает ее в нуль при $q = 0$. В системах с градиентно-инвариантным гамильтонианом эта величина, как мы убедились, равна нулю и сама по себе. Поэтому фононы с $q = 0$, обладающие представлением с $L = 0$ (или, с точки зрения теории кристаллических групп, единичным представлением с полной симметрией точечной группы), не взаимодействуют с электронами ни в нормальном, ни в сверхпроводящем состояниях и не имеют неадиабатических поправок. Этот ответ, в противоречие с утверждениями, имеющимися в работах [32, 38], возникает за счет правильного учета вершинных поправок даже в отсутствие дальнедействующего кулоновского взаимодействия. Конечно, учет кулоновского взаимодействия может приводить, как и в случае диэлектрического отклика [35–37], к перенормировке соответствующих поляризационных операторов и характеризующих их констант, таких как, например, $N(0)$. Но это обстоятельство совершенно не изменяет физики неадиабатических эффектов до тех пор, пока отсутствуют низкоэнергетические коллективные возбуждения плотности заряда или спина электронов.

Рассмотрим теперь $L \neq 0$ компоненты собственно-энергетической части фононов, которые вообще не зависят от дальнедействующего изотропного кулоновского взаимодействия:

$$\Pi_L(\mathbf{q}, \omega) = -2\lambda_L \frac{I(\omega)}{1 - \lambda_L \beta_L(\omega/2\Delta) I(\omega)}, \quad (3.29)$$

где $\lambda_L = g_L^2 N(0)$ — константа связи в L -канале и функция

$$\beta_L\left(\frac{\omega}{2\Delta}\right) = \left(\frac{\omega}{2\Delta}\right)^2 \frac{\lambda_0}{\lambda_0 - \lambda_L} - 1. \quad (3.30)$$

Выражение (3.29) демонстрирует хорошо известную в теории электромагнитного отклика сверхпроводников [35] возможность существования полюса в поляризационном операторе в $L \neq 0$ канале при условии

$$1 - \lambda_L I(\omega_b) \beta_L\left(\frac{\omega_b}{2\Delta}\right) = 0. \quad (3.31)$$

Отсюда находится энергия коллективных возбуждений

$$\omega_b \approx 2\Delta - \Delta \lambda_L^2 \left(\frac{\lambda_L}{\lambda}\right)^2. \quad (3.32)$$

Как было показано в давней работе Маки и Цунето [39], учет примесного рассеяния электронов может существенно изменить полученные выше выражения для электронных функций отклика. В частности, это может привести к исчезновению полюса в поляризационном операторе и, следовательно, к исчезновению коллективных электронных возбуждений. Эта проблема подробно обсуждалась в работе [40] при изучении спектров рамановского рассеяния света в сверхпроводниках. В ней были подтверждены результаты, полученные в [39], и было показано, что вершинными поправками можно пренебречь в случае сильно неупорядоченных систем.

Эти результаты легко обобщить и на рассматриваемый нами случай неадиабатических эффектов в фононных спектрах сверхпроводников. Для оптических фононов с $q = 0$ подобное обобщение было проведено в работе [41], где рассматривались случаи как изотропного s-спаривания, так и анизотропного d-спаривания. В этой работе было показано, в частности, что в приближении слабой связи учет вершинных поправок не приводит к существенному изменению фононных спектральных функций даже для систем без примесей.

Перейдем теперь к рассмотрению неадиабатических поправок для оптических фононов с $L \neq 0$ в простейшем приближении без учета вершин. С этой целью перепишем уравнение (3.3), определяющее перенормировку фононных частот:

$$\omega_{sL}^2 = \omega_0^2(0, s, L) [1 + P_{sL}(0, \omega_{sL})]. \quad (3.33)$$

Поляризационный оператор в этом приближении имеет вид [22]

$$P_{sL}(0, \omega) = -2\lambda_{sL} \left(\frac{2\Delta}{\omega} \right) \begin{cases} \arcsin(\omega/2\Delta), & \omega < 2\Delta, \\ \sqrt{1 - (\omega/2\Delta)^2}, & \omega < 2\Delta, \\ i\pi/2 - \operatorname{arsinh} \sqrt{(\omega/2\Delta)^2 - 1}, & \omega > 2\Delta. \\ \sqrt{(\omega/2\Delta)^2 - 1} \end{cases} \quad (3.34)$$

Отметим, прежде всего, что в рамках использованных нами простейших приближений возникает целый ряд совсем нетривиальных эффектов. Во-первых, затухание фононов при энергиях $\omega \leq 2\Delta$ обращается в нуль при $T = 0$, но отлично от нуля в сверхпроводящем состоянии при $T < T_c$. Затухание оптических фононов при $\omega \geq 2\Delta$ в сверхпроводящем состоянии не равно нулю даже при $T = 0$. Отсутствие затухания при энергиях $\omega \leq 2\Delta$ лишь на первый взгляд кажется просто естественным следствием наличия щели в спектре электронных возбуждений. Здесь следует помнить, что в нормальном состоянии затухание оптических фононов при $\mathbf{q} = 0$ равно нулю при любых значениях частоты. Его отличие от нуля в сверхпроводящем состоянии при всех энергиях, а при $\omega \geq 2\Delta$ также и при $T = 0$, есть следствие появления нового канала в ЭФВ, связанного с возможностью развала куперовской пары электронов.

Во-вторых, фононы при $\omega \leq 2\Delta$ смягчаются, т.е. их частоты уменьшаются. Более того, при малых частотах поляризационный оператор может быть представлен в виде

$$P_{sL}(\omega) \approx -2\lambda_{sL} \left[1 + \frac{2}{3} \left(\frac{\omega}{2\Delta} \right)^2 \right]. \quad (3.35)$$

Это означает, что сверхпроводящая система, если так можно сказать, "адиабатизируется" по отношению к низкочастотным фононам. Ситуация с перенормировкой фононных частот и их затуханием в сверхпроводящем состоянии при $\omega < 2\Delta$ напоминает поведение недодопированных узкозонных полупроводников.

Выражение для поляризационного оператора, совпадающее с (3.34), было получено в работе Цайера и Цвикнагель [42]. Однако эти авторы в своей последующей

публикации [32] вычли из поляризационного оператора постоянную составляющую $-2\lambda_s$. Причина этого связана с простым обстоятельством. В работах [32, 42] использовалась константа ЭФВ $\lambda = 2,9$, но уравнения (3.33) и (3.34) не имеют решения для $\omega < 2\Delta$ при $\lambda > 1/2$, что, в свою очередь, является следствием неустойчивости затравочных фононов при $\lambda > 1/2$ (см. формулы (3.5) и (3.7)). Процедура с вычитанием из поляризационного оператора постоянной составляющей $P_{sL}(0) = -2\lambda_{sL}$ устраняет эту особенность модели Фрелиха. Однако при этом из решений уравнений (3.33), (3.34) исчезает полученная нами выше (см. (3.35)) и физически ясная "адиабатизация" фононных мод, возникающая в сверхпроводящей системе при $\omega < 2\Delta$. К обсуждению этих проблем мы еще вернемся в следующем разделе нашего обзора.

Частоты оптических фононов при $\omega_{ph} \geq 2\Delta$, как это следует из формулы (3.34), ужестчаются по сравнению со спектрами в нормальном состоянии. При этом величины соответствующих эффектов максимальны при $\omega_{ph} \approx 2\Delta$. Подобные эффекты наблюдались при исследованиях фононов в высокотемпературных сверхпроводниках [31, 43].

Следует сразу отметить, что при $\omega_{ph} \approx 2\Delta$ в рамках изложенного нами приближения возникают и более интересные эффекты, чем просто изменения фононных частот. Из-за наличия в поляризационном операторе (3.34) корневой особенности при $\omega = 2\Delta$ возникает возможность появления в уравнении (3.33) двух решений для квадрата фононной частоты. Впервые такая возможность, как мы уже упоминали, была предсказана в работе Шустера [11] для акустических фононов. Возникновение подобных линий, однако, не было обнаружено для акустических фононов [10]. Позднее соответствующее поведение фононной спектральной функции наблюдалось [12] в NbSe_2 для низкочастотного оптического фонона с $\omega_{ph} \approx 2\Delta$. В работе [44] была дана теоретическая интерпретация этого явления близкая к той, что предлагалась Шустером в [11]. Существование двух решений в уравнении (3.33) легко понять, рассматривая моду $\omega_0 \geq 2\Delta$. В этом случае для первого из этих решений ($\omega_1 \approx \omega_0 \geq 2\Delta$) имеем

$$\omega_1^2 \approx \omega_0^2 \left(1 + 2\lambda_s \ln \frac{\omega_0}{2\Delta} \right). \quad (3.36)$$

Второе решение ($\omega_2 < 2\Delta$) равно

$$\omega_2^2 \approx (2\Delta)^2 (1 - \pi^2 \lambda_L^2). \quad (3.37)$$

Таким образом, отщепившаяся мода с энергией ω_2 существует для оптических фононов с любой энергией ω_0 , и ее частота практически не зависит от энергии фонона ω_0 . Для получения более точных результатов в этой области энергий необходимо проведение численных расчетов как энергии отщепленной моды, так и ее интенсивности. Некоторые результаты таких расчетов будут приведены ниже.

В работах [11, 44] для описания неадиабатических эффектов в фононных спектрах сверхпроводников использовался такой же стандартный гамильтониан Фрелиха, как и в приведенном нами изложении, в котором отсутствует прямое кулоновское межэлектронное взаимодействие. На этом основании результаты, полученные

в работе [44], были подвергнуты критике Литтлвудом и Вармой [38]. В их работе утверждалось, что учет дальнего действующего кулоновского взаимодействия приводит при малых волновых векторах к полной экранировке всех вкладов электрон-фононного взаимодействия (включая и неадиабатические) в фононные частоты. Для объяснения наблюдаемых в эксперименте явлений они привлекали специфику низкочастотной оптической моды в NbSe_2 , рассматривая ее как амплитудную моду волны зарядовой плотности, существующей, по их представлениям, в этой системе. Следует сразу же отметить, что никакой особой специфики у данной оптической моды, связанной со структурным переходом в несоизмеримую фазу, нет. Особенность этой моды состоит, во-первых, в том, что ее частота существенно ниже частот всех остальных оптических фононов в данном металле и сравнима по величине с 2Δ . Во-вторых, эта мода не обладает полной симметрией кристаллической решетки, поэтому она не экранируется кулоновским взаимодействием и матричный элемент неадиабатического взаимодействия электронов с ней не равен нулю.

Появление в сверхпроводящем состоянии новой фононной моды с энергией $\omega(\mathbf{q}) \leq 2\Delta$ может иметь место также и при больших волновых векторах \mathbf{q} . Так, при изучении фононных спектров низкоэнергетических акустической и оптической ветвей в сверхпроводящих никелевых борокарбидах $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$ и $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ с помощью неупругого рассеяния нейтронов [13, 45, 46] было обнаружено, что частоты обеих ветвей в направлении $(\xi, 0, 0)$ при волновых векторах \mathbf{q} порядка половины вектора обратной решетки ($\xi \approx 0,55$) в нормальном состоянии уменьшались с понижением температуры, причем ниже температуры сверхпроводящего перехода T_c фононный спектр изменялся радикально. Возникал узкий пик при энергиях ~ 4 мэВ, что несколько ниже величины 2Δ , и широкий максимум, отвечающий энергии изучаемых фононов. Объяснение этого эффекта было предложено в работах [47, 48], в которых вычислялся поляризационный оператор $\Pi_{sL}(\mathbf{q}, \omega)$ для конечных \mathbf{q} в квазиизотропном приближении. Результаты этих расчетов очень близки к результатам Шустера [11] и могут быть получены с помощью формул (3.22)–(3.25) для импульсов $q \neq 0$, удовлетворяющих условию

$$k_F > q > \frac{\omega}{v_F}, \frac{2\Delta}{v_F}. \quad (3.38)$$

Легко показать, что функции $I_j^L(\mathbf{q}, \omega)$ сводятся в этом случае к выражениям

$$\begin{aligned} \tilde{I}_3(\mathbf{q}, \omega) &\approx N(0), \\ I_2(\mathbf{q}, \omega) &= -\frac{\omega}{2\Delta} N(0) I_3(\mathbf{q}, \omega), \\ I_1(\mathbf{q}, \omega) &\approx N(0) I_3(\mathbf{q}, \omega). \end{aligned} \quad (3.39)$$

Из формул (3.34) и (3.25) следует, что вершинные поправки при больших значениях импульсов фононов \mathbf{q} не приводят к появлению полюса в вершинных функциях и в рассматриваемом приближении слабой связи ими можно пренебречь. Собственно-энергетическая часть фононной функции Грина в этом случае имеет вид

$$\Pi_s(\mathbf{q}, \omega) = -2g_s^2 N(0) - 2g_s^2 N(0) I_3(\mathbf{q}, \omega), \quad (3.40)$$

где при энергиях $\omega \rightarrow 2\Delta$

$$I_3(\mathbf{q}, \omega) \approx \frac{\pi\omega}{2\mathbf{q}v_F} \left[\ln \frac{2\Delta}{|2\Delta - \omega|} + i\Theta(\omega - 2\Delta) \right], \quad (3.41)$$

что в точности совпадает с результатом, полученным в работах [11, 47]. Можно показать [48], что в этом случае спектральный вес отщепляющейся моды и величина расщепления $|2\Delta - \omega(\mathbf{q})|/2\Delta$ имеют экспоненциальную малость $\sim \exp(-\mathbf{q}v_F/\lambda\Delta) \ll 1$. С формальной точки зрения эти формулы, как показано в работе [47], можно применить для описания экспериментальных данных [13, 45, 46]. Фактически же предложенная в [47, 48] квазиизотропная модель явно не подходит для этой цели, поскольку слабая логарифмическая сингулярность в поляризационном операторе (3.41) приводит к выбору параметров, необходимых для описания ситуации при $T < T_c$, которые, на наш взгляд, явно нереалистичны.

Тот факт, что частоты фононов обеих ветвей с волновыми векторами порядка половины вектора обратной решетки уменьшаются с понижением температуры, а также теоретические расчеты [49] электронной поляризуемости соединения $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$, указывают на наличие в электронном спектре так называемого нестинга для достаточно больших участков поверхности Ферми. Под нестингом обычно понимают выполнение соотношения

$$\xi_{\mathbf{p}} \approx -\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} \quad (3.42)$$

для одноэлектронных энергий в некотором конечном фазовом объеме вблизи поверхности Ферми. Вектор \mathbf{Q} , для которого имеет место соотношение (3.42), называется вектором нестинга. Как известно [50], при точном выполнении условия (3.42) (идеальный нестинг) статическая поляризуемость электронов $\chi(\mathbf{q}, 0)$ при волновом векторе $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ имеет особенность (полюс). Это обстоятельство в свою очередь может привести к существенному смягчению фононных мод с волновыми векторами \mathbf{q} , близкими к вектору нестинга \mathbf{Q} и, в частности, к структурному переходу.

Найдем $\Pi_{sL}(\mathbf{Q}, \omega)$ для случая идеального нестинга, используя (3.22)–(3.25):

$$\begin{aligned} I_1(\mathbf{Q}, \omega) &\approx N(0)I(\omega), \quad I_2(\mathbf{Q}, \omega) = -\frac{\omega}{2\Delta} N(0)I(\omega), \\ I_3(\mathbf{Q}, \omega) &= N(0) \ln \left(\frac{2\omega_c}{\Delta} \right) + \left(\frac{\omega}{2\Delta} \right)^2 N(0)I(\omega), \\ \tilde{I}_3(\mathbf{Q}, \omega) &= N(0) \ln \left(\frac{\varepsilon_F}{\omega_c} \right). \end{aligned} \quad (3.43)$$

Соответственно, в канале $L = 0$, полагая для простоты $\lambda_{L=0} \approx \lambda \approx \lambda_{\mathbf{Q}}$, при $T = 0$ находим, что $\Pi_{sL=0}(\mathbf{Q}, \omega \rightarrow 2\Delta)$ имеет вид

$$\Pi_{sL}(\mathbf{Q}, \omega) = -2\lambda_{\mathbf{Q}} \ln \left(\frac{\varepsilon_F}{\Delta} \right) - 2\lambda_{\mathbf{Q}} \frac{1/\lambda - I(\omega)}{2 - \lambda_{\mathbf{Q}}I(\omega)}. \quad (3.44)$$

Здесь $\lambda_{\mathbf{Q}} = g^2(\mathbf{Q})N(0)$ и λ — полная константа электрон-фононной связи, определяемая условием

$$1 = \lambda \ln \left(\frac{2\omega_c}{\Delta} \right). \quad (3.45)$$

Первое слагаемое в (3.44) хорошо известно [50, 51] и описывает устранение сингулярности статических функций отклика в системах с нестингом при переходе системы в сверхпроводящее состояние. (В нормальном состоянии этот член равен $-2\lambda_Q \ln(\epsilon_F / \max\{\omega, T\})$.) Это обстоятельство приводит, в частности, к прекращению смягчения фононных мод в адиабатическом приближении и к отсутствию структурных превращений при $T < T_c$. Второе слагаемое описывает сингулярное поведение функции $P_{sL}(\mathbf{Q}, \omega)$ при энергиях $\omega \approx 2\Delta$ и обусловлено именно переходом в сверхпроводящее состояние. Из выражения (3.44) видно, что $P_s(\mathbf{Q}, \omega)$, как и в случае $q = 0$, имеет полюс, отвечающий коллективным возбуждениям. Сравнивая выражения для поляризационного оператора в нулевом приближении (3.44) и (3.29), можно видеть, что $P_{sL}(\mathbf{Q}, \omega)$ при $\omega \approx 2\Delta$ в случае нестинга имеет точно такую же сингулярность, что и при $q = 0$, т.е. $\sim 1/[1 - (\omega/2\Delta)^2]^{1/2}$, но уже и в изотропном канале с $L = 0$.

Поскольку идеальный нестинг в реальных физических системах маловероятен, для более детального моделирования эксперимента в нашей работе [22] были проведены численные расчеты $\text{Im} D_s(\mathbf{q}, \omega)$ с использованием модели, в которой возможно изменение нестинга от идеального до его полного отсутствия. Для этой цели применялась двумерная модель квадратной решетки сильно связанных электронов с перекрытием ближайших соседей. Электронный спектр такой системы может быть записан в виде

$$\xi_{\mathbf{p}} = -2t(\cos p_x + \cos p_y) - \mu,$$

где μ — химический потенциал системы, характеризующий степень заполнения зоны, и t — интеграл перекрытия. При половинном заполнении зоны ($\mu = 0$) поверхность Ферми представляет собой квадрат, т.е. систему с идеальным нестингом. При малом заполнении поверхность Ферми близка к окружности, т.е. представляет собой стандартную квазиизотропную систему. Меняя степень заполнения зоны, можно исследовать всю переходную область от идеального нестинга к изотропной системе. Ранее эта модель использовалась в работе [52] для расчета собственно-энергетических частей фононных функций Грина в сверхпроводниках. Сами фононные функции Грина, а также их спектральные плотности $\text{Im} D_s(\mathbf{q}, \omega)$ в этой работе, однако, не вычислялись. Нами были произведены численные расчеты функции $\text{Im} D_s(\mathbf{q}, \omega)$ в рамках модели с изотропным спариванием с полным учетом вершинных поправок. Рассматривалось поведение двух фононных мод $\omega^{(1)}(\mathbf{q})$ и $\omega^{(2)}(\mathbf{q})$ с разными константами связи в зависимости от температуры, причем предполагалось, что затравочные частоты этих мод (без учета ЭФВ) вырождены, т.е. $\omega_0^{(1)}(\mathbf{q}, s) = \omega_0^{(2)}(\mathbf{q}, s) = 250$ К. Константы электрон-фононной связи этих мод были выбраны равными $\lambda_1 = 0,1$ и $\lambda_2 = 0,085$, соответственно, так что $\lambda_1 > \lambda_2$. Полная константа связи $\lambda = 0,372$ определялась из условия (3.32) так, чтобы $\Delta \approx 3$ мэВ при $\omega_c \approx 3$ мэВ. Такой выбор Δ и ω_c примерно соответствует наблюдаемым в борокарбидах величинам. Рассчитанная нами интенсивность фононных мод $\omega^{(1,2)}(\mathbf{q})$ с вектором квазинестинга \mathbf{q} , соединяющим участки поверхности Ферми с близкой кривизной, для заполнения зоны, соответствующего 1,11 и 0,89 электрона на центр ($\mu = \pm 0,2$) при температурах

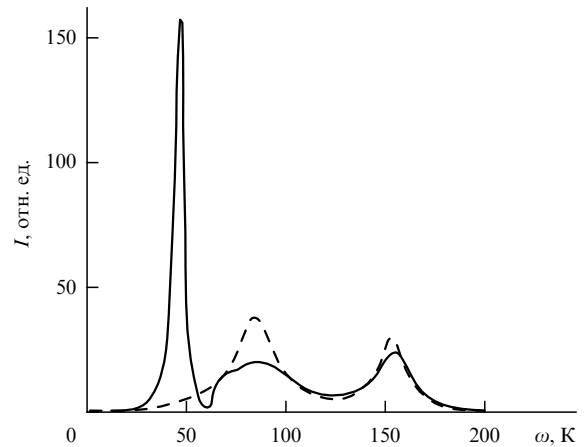


Рис. 2. Интенсивность двух фононных линий при $T = 0$ (сплошная линия) и при $T > T_c$ (штриховая линия). Расчет в модели Фрелиха.

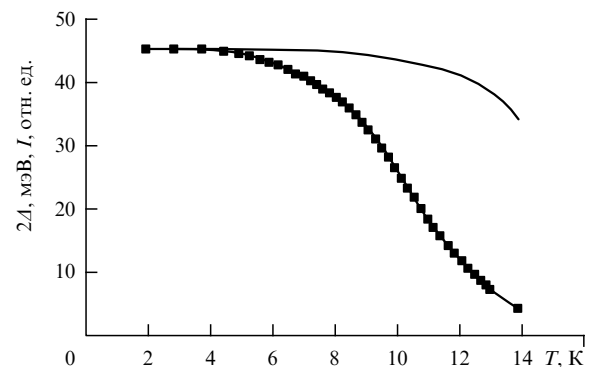


Рис. 3. Вычисленная температурная зависимость энергии (сплошная линия) и интенсивности (квадраты) отщепившейся фононной моды в сверхпроводящем состоянии.

$T = T_c$ и $T = 0$ показана на рис. 2. Теоретические кривые на рис. 2 качественно согласуются с экспериментальными данными [13, 45, 46]. На нем ясно видно появление при $T < T_c$ узкой дополнительной моды с энергией меньше 2Δ . Видно также, что в сверхпроводящем состоянии происходит резкое уширение фононных линий с энергиями больше 2Δ и значительный перенос их интенсивности в область дополнительной моды, причем этот перенос тем больше, чем ближе энергия моды к 2Δ (перенос интенсивности от более мягкой моды 1 существенно больше, чем от моды 2).

Остановимся кратко на температурной зависимости характеристик фононной моды, наблюдающейся в сверхпроводящем состоянии ниже 2Δ . В рамках рассмотренной ранее модели БКШ температурная зависимость энергии и интенсивности этой моды определяется зависимостью от температуры величины 2Δ . Экспериментальные данные [13, 45, 46] показывают заведомое отклонение от такого поведения. Так, энергия дополнительной моды практически не зависит от температуры, а ее интенсивность убывает с ростом температуры значительно быстрее, чем величина 2Δ . Это обстоятельство может быть вполне естественно объяснено в рамках теории сильной связи, основанной на уравнениях Элиашберга [33]. Причина состоит в том, что ЭФВ приводит к появлению у электронов даже в сверхпроводящем

состоянии конечного времени жизни, к тому же зависящего от энергии и температуры, и устранению сингулярностей в функциях отклика и в плотности электронных состояний [53]. Время релаксации электронов резко возрастает при приближении к T_c , что и приводит к резкому уменьшению интенсивности дополнительной моды. Естественно, что и в рамках теории сильной связи энергия моды начинает сильно уменьшаться при T , стремящейся к T_c , но это уменьшение происходит как раз в той области температур, где интенсивность этой моды мала и фактически она не наблюдаема. Результаты численных расчетов зависимости энергии отщепившейся моды и ее интенсивности изображены на рис. 3. Они, без сомнения, подтверждают приведенное качественное объяснение.

4. Микроскопическая теория динамики решетки

Чтобы точнее разобраться в том, имеет ли гамильтониан Фрѐлиха какой-либо физический смысл, и вообще в том, что такое адиабатические фононы и неадиабатические поправки, необходимо обратиться к точной микроскопической теории динамики решетки, поскольку в рамках адиабатического приближения затруднительно использовать стандартные методы теории многих тел.

В работе [23] в рамках стандартной многочастичной теории возмущений для электрон-ионного гамильтониана были получены точные уравнения для одночастичных функций Грина электронов и фононов. Фононный вклад в спектр возбуждений электронов имеет формально такой же вид, как и неадиабатические поправки к энергии электрона в рамках адиабатического подхода (см. формулу (2.15)). Этот же ответ получен и в рамках модели Фрѐлиха. Проблемы возникают при попытках последовательного микроскопического расчета матричного элемента ЭФВ. В этом расчете необходимо учитывать не только экранировку градиента электрон-ионного потенциала, но и вершинные поправки за счет кулоновского межэлектронного взаимодействия. Имеется и еще одно отличие между результатами для перенормировки электронного спектра, полученными в адиабатическом подходе (2.15) и в микроскопической теории решетки. Оно в значительной мере связано с отличиями математического аппарата, используемого в этих подходах. В микроскопическом подходе используется техника функций Грина и вычисляется собственно-энергетическая часть одночастичной функции Грина электрона. Можно показать, что как и в модели Фрѐлиха, собственно-энергетическая часть не зависит от импульса электрона \mathbf{p} , а зависит от энергии ω , что связано с запаздывающим характером ЭФВ. Это обстоятельство весьма существенно при описании многих свойств электронной подсистемы кристалла, в частности, фотоэмиссионных спектров [54]. Функция Грина электрона представляется в виде

$$G^{-1}(\mathbf{p}, \omega) = \omega - \xi_{\mathbf{p}} - \Xi(\omega), \quad (4.1)$$

где $\Xi(\omega)$ — собственно-энергетическая часть [58]. При нулевой температуре и малых энергиях $\Xi(\omega)$ может быть записана в простом виде

$$\Xi(\omega) = \lambda\omega, \quad (4.2)$$

где λ — константа электрон-фононной связи. Из условия $G^{-1}(\mathbf{q}, \omega) = 0$ можно вычислить спектр электронных возбуждений, и он будет совпадать с результатами, полученными в адиабатическом подходе. В рамках теории функционала плотности была разработана [55] эффективная методика расчета матричных элементов ЭФВ и их последующего использования в модели Фрѐлиха для расчета электронных свойств нормального и сверхпроводящего состояний металла, в частности константы ЭФВ, но изложение этой методики выходит далеко за рамки нашего обзора.

В работе [23] было показано также, что в гармоническом приближении одночастичная функция Грина фононов описывается точно таким же уравнением, как и в адиабатическом приближении, но электронный вклад в динамическую матрицу колебаний дается частотно-зависящей восприимчивостью электронов. Это означает, что в уравнениях (2.10) и (2.11) для матрицы $\bar{\Phi}^{\alpha\beta}(\mathbf{q})$ мы должны заменить матрицу статической восприимчивости $\chi(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}', \omega = 0)$ на матрицу $\chi(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}', \omega)$. В таком многочастичном подходе неадиабатические поправки к фононным спектрам металлов возникают по следующим причинам: во-первых, из-за частотной зависимости матрицы электронной восприимчивости; во-вторых, из-за того, что эта восприимчивость должна теперь вычисляться с учетом ЭФВ, а не для неподвижной решетки, как в адиабатическом приближении. Это означает, что при вычислении электронных петель мы должны использовать одноэлектронные функции Грина, учитывая вклад в них ЭФВ. Необходимо также, если это существенно, учитывать вклады электрон-фононного взаимодействия и в вершинные функции.

Как мы уже отмечали, точные количественные расчеты бесконечномерной матрицы электронной восприимчивости находятся за пределами наших вычислительных возможностей. В теории функционала плотности используются прямые методы расчета изменения электронной плотности при статическом сдвиге ионов, что позволяет вычислить силы, действующие на ион, и соответственно, динамическую матрицу колебаний (см. обзоры [25, 26]). К сожалению, подобные первопринципные методы расчета неадиабатических эффектов пока не разработаны. Для этой цели, как минимум, необходимо обобщить метод функционала плотности так, чтобы он был функционалом не только электронной, но и ионной плотностей. Тем не менее можно выяснить многие принципиальные вопросы, связанные с неадиабатическими эффектами в фононных спектрах металлов, используя общие выражения для динамической матрицы колебаний, представленные в разделе 2.

Запишем электронный вклад в матрицу колебаний в виде двух слагаемых, используя прием, предложенный Алленом [56]. Представим эту процедуру для простоты в символическом виде, записывая электронную восприимчивость как

$$\chi = P\varepsilon^{-1}, \quad (4.3)$$

где P — поляризационный оператор. Умножим теперь это равенство слева на $1 = \tilde{\varepsilon}^{-1}\tilde{\varepsilon}$, где $\tilde{\varepsilon}$ — транспонированная матрица диэлектрической проницаемости электронов. Тогда будем иметь

$$\chi = \tilde{\varepsilon}^{-1}(1 - PV_c)P\varepsilon^{-1} = \tilde{\varepsilon}^{-1}P\varepsilon^{-1} - \tilde{\chi}V_c\chi. \quad (4.4)$$

Здесь V_c — матричный элемент кулоновского межэлектронного взаимодействия. Электронный вклад в матрицу силовых постоянных $C_{mm'}^{\alpha\beta}$ можно написать в виде

$$C_{mm'}^{\alpha\beta} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \nabla_\alpha \tilde{V}_{ci}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \nabla_\beta \tilde{V}_{ci}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_{n'}) - \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \delta\rho_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) V_c(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta\rho_\beta(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_{n'}). \quad (4.5)$$

Мы ввели обозначения для экранированного электронного взаимодействия $\nabla_\alpha \tilde{V}_{ci}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ и изменения плотности электронного заряда $\delta\rho_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$:

$$\nabla_\alpha \tilde{V}_{ci}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \int d\mathbf{r}' \nabla_\alpha V_{ci}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_n) \tilde{\varepsilon}^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega), \quad (4.6)$$

$$\delta\rho_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) = \int d\mathbf{r}' \nabla_\alpha V_{ci}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_n) \tilde{\chi}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega). \quad (4.7)$$

Второе слагаемое в (4.5) — это кулоновское взаимодействие распределенных электронных зарядов. Можно точно показать [56], и мы это сделаем ниже в простейшем приближении для матриц электронного отклика, что это слагаемое совместно с ионным вкладом в металлах дает "правильное" металлическое поведение фоновых частот. Это означает, что продольные акустические моды при учете ионного вклада и второго слагаемого в (4.5) имеют звуковой характер и отсутствует расщепление продольных и поперечных оптических мод. Сам по себе учет только этих слагаемых не описывает точных фоновых частот металла, поскольку первое слагаемое в (4.5) тоже дает вклад в дисперсию фононов и этот вклад отнюдь не мал. Посмотрим более внимательно на первое слагаемое в (4.5). По своей форме оно очень напоминает вклад, возникающий от электрон-фононного взаимодействия в модели Фрëлиха. Мы покажем, что именно из этого вклада и происходят основные неадиабатические поправки к фоновым частотам. Естественно, что он дает, как мы уже отмечали, ненулевой вклад и в дисперсию фононов. В этом смысле приведенную процедуру разделения электронного вклада в динамическую матрицу колебаний можно в какой-то мере рассматривать как некое "обоснование" модели Фрëлиха, в которой затравочные фоновые частоты возникают за счет ион-ионного взаимодействия и второго слагаемого в (4.5). В буквальном же смысле, как мы убедимся ниже, модель Фрëлиха не может быть полностью обоснована в рамках микроскопической теории.

Рассмотрим теперь простейшее приближение для металла, считая его электроны свободными частицами. Подобный подход плодотворно применялся для описания динамики решетчатых простых металлов (см. обзор [16]). Обоснованием для его использования служит малость электрон-ионного псевдопотенциала по сравнению с прямым кулоновским электрон-ионным взаимодействием. В первом приближении по этому малому псевдопотенциалу матрицу электронного отклика можно написать в виде

$$\varepsilon(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}', \omega) = \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} \varepsilon(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega), \quad (4.8)$$

где $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ — диэлектрическая проницаемость свободного электронного газа, но с учетом, естественно, кулоновского межэлектронного взаимодействия. Элект-

ронный вклад в динамическую матрицу колебаний (4.5) можно записать как

$$\begin{aligned} \Phi^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) &= \frac{1}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G}} \frac{(\mathbf{q} + \mathbf{G})^\alpha V_{ci}(\mathbf{q} + \mathbf{G})}{\varepsilon(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega)} \Pi(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega) \times \\ &\times \frac{(\mathbf{q} + \mathbf{G})^\beta V_{ci}(\mathbf{q} + \mathbf{G})}{\varepsilon(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega)} - \\ &- \frac{1}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G}} (\mathbf{q} + \mathbf{G})^\alpha V_{ci}(\mathbf{q} + \mathbf{G}) \frac{\Pi(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega)}{\varepsilon(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega)} \frac{4\pi e^2}{(\mathbf{q} + \mathbf{G})^2} \times \\ &\times \frac{\Pi(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega)}{\varepsilon(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega)} (\mathbf{q} + \mathbf{G})^\beta V_{ci}(\mathbf{q} + \mathbf{G}). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Мы написали выражение (4.9) для случая кристалла с одним атомом в элементарной ячейке, чтобы не загромождать формулы. Прежде всего, отметим, что в функциях $\varepsilon(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega)$ и $\Pi(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega)$ при $\mathbf{G} \neq 0$ можно пренебречь зависимостью их от ω , поскольку $\mathbf{G}v_F \gg \omega$. Рассмотрим подробнее второе слагаемое с $\mathbf{G} = 0$:

$$-\frac{1}{\Omega_0} q^\alpha V_{ci}(\mathbf{q}) \frac{\Pi(\mathbf{q}, \omega)}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)} \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{\Pi(\mathbf{q}, \omega)}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)} q^\beta V_{ci}(\mathbf{q}). \quad (4.10)$$

Записывая $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$ в виде

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \Pi(\mathbf{q}, \omega), \quad (4.11)$$

легко убедиться, что зависимость от ω полностью исчезает в выражении (4.10) при $q \rightarrow 0$, и вместо (4.10) получаем

$$-\frac{4\pi e^2 Z^2}{\Omega_0} \frac{q^\alpha q^\beta}{q^2}. \quad (4.12)$$

При выводе этой формулы мы оставили в электронном псевдопотенциале только наиболее существенную его часть при малых \mathbf{q} , т.е. кулоновский вклад $V_{ci}(\mathbf{q}) \approx 4\pi e^2 Z^2 / q^2$. Легко убедиться, что электронный вклад (4.12) в динамическую матрицу колебаний полностью компенсирует в акустической продольной моде такой же вклад от ионных колебаний, превращая эту моду из плазменной в акустическую. Для оптических колебаний этот же вклад полностью компенсирует расщепление продольных и поперечных мод, существующее в ионном вкладе, так что

$$\omega_{LO}^2(\mathbf{q} = 0) = \omega_{TO}^2(\mathbf{q} = 0). \quad (4.13)$$

Мы показали таким образом, что второе слагаемое в (4.9) вместе с вкладом от ионов приводит к спектру кристалла металлического типа. Никаких неадиабатических поправок, кроме тех, что малы в меру $\sqrt{m/M}$, это слагаемое, по крайней мере, в приближении свободных электронов, не содержит.

Обратимся теперь к рассмотрению первого слагаемого в (4.9). Легко убедиться, что в адиабатическом приближении, т.е. в пренебрежении зависимостью функций отклика от частоты ω , это слагаемое дает вклад только в дисперсию акустических и оптических мод. При этом его вклад, по крайней мере, в продольные моды не является малым. Для частоты продольной оптической моды можно тогда получить выражение при

$\mathbf{q} \rightarrow 0$:

$$\omega_{\text{LO}}^2 = \omega_{\text{TO}}^2 + \frac{4\pi e^2 Z_1 Z_2}{\Omega_0 \tilde{M}} \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (4.14)$$

Здесь \tilde{M} — приведенная масса ионов в решетке. В адиабатическом приближении второе слагаемое в (4.14) обращается в нуль при $\mathbf{q} \rightarrow 0$. В неадиабатическом же пределе будем иметь

$$\omega_{\text{LO}}^2 = \omega_{\text{TO}}^2 - \frac{4\pi e^2 Z_1 Z_2}{\Omega_0 \tilde{M}} \frac{\omega_{\text{LO}}^2}{\omega_{\text{pl}}^2}, \quad (4.15)$$

где ω_{pl} — электронная плазменная частота

$$\omega_{\text{pl}}^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}. \quad (4.16)$$

Из выражений (4.15) и (4.16) видно, что в неадиабатическом пределе возникает расщепление продольных и поперечных мод. При этом частота продольной моды становится меньше, чем поперечной, т.е. возникает явление антиэкранировки продольных мод. Величина же этого расщепления в приближении свободных электронов мала в меру малости $\sqrt{m/M}$. Можно, конечно, вычислить затухание фононных мод, обусловленное эффектами неадиабатичности, но из приведенного рассмотрения ясно, что в приближении свободных электронов никаких неадиабатических эффектов, не имеющих малости по $\sqrt{m/M}$, в металле не возникает.

Истинные неадиабатические эффекты как в самих фононных частотах, так и в их дисперсии при $\mathbf{q}\mathbf{v}_F \leq \omega_{\text{ph}}$, содержатся в недиагональных матричных элементах электронных функций отклика. В металлах, которые могут быть описаны с помощью слабого электронного псевдопотенциала, недиагональные матричные элементы малы в меру малости отношения $V_{\text{ei}}(\mathbf{G})/\varepsilon_F$, где ε_F — фермиевская энергия. Методика расчета недиагональных элементов разложением в ряд по малому параметру $V_{\text{ei}}(\mathbf{G})/\varepsilon_F$ была предложена в работе [57]. Наибольшие неадиабатические эффекты возникают из первого слагаемого в (4.5), которое можно записать в виде

$$\Phi^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G} \neq \mathbf{G}'} \frac{(\mathbf{q} + \mathbf{G})^\alpha V_{\text{ei}}(\mathbf{q} + \mathbf{G})}{\varepsilon(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega)} \Pi(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}', \omega) \times \\ \times \frac{(\mathbf{q} + \mathbf{G}')^\beta V_{\text{ei}}(\mathbf{q} + \mathbf{G}')}{\varepsilon(\mathbf{q} + \mathbf{G}', \omega)}. \quad (4.17)$$

При записи этого выражения мы пренебрегли недиагональными матричными элементами в матрице обратной диэлектрической функции $\varepsilon^{-1}(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}', \omega)$, поскольку они приводят к неадиабатическим поправкам более высокого порядка малости по псевдопотенциалу по сравнению с учтенными в (4.17). В диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \omega)$ можно, естественно, пренебречь ее зависимостью от частоты ω . Недиagonalный матричный элемент матрицы поляризуемости $\Pi(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}', \omega)$, в соответствии с результатами работы [57], можно написать в виде

$$\Pi(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}', \omega) = \frac{V_{\text{ei}}(\mathbf{G}' - \mathbf{G})}{\varepsilon(\mathbf{G}' - \mathbf{G}, 0)} A^3(\omega, \mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}') + \\ + \sum_{\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2} \frac{V_{\text{ei}}(\mathbf{G}_1)}{\varepsilon(\mathbf{G}_1, 0)} \frac{V_{\text{ei}}(\mathbf{G}_2)}{\varepsilon(\mathbf{G}_2, 0)} A^4(\omega, \mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}', \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2). \quad (4.18)$$

Введенные в уравнения обозначения

$$A^3(\omega, \mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}') \quad \text{и} \quad A^4(\omega, \mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}', \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)$$

являются, по существу, теми самыми "многохвостками", которые были подробно изучены в работах Бровмана и Кагана [15, 16] для адиабатического приближения (т.е. для $\omega = 0$). Четыреххвостка $A^4(\omega, \mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}', \mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2)$ содержит дельта-функцию от импульсов, так что

$$\mathbf{G} + \mathbf{G}' + \mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2 = 0. \quad (4.19)$$

Мы не будем здесь выписывать подробно выражения для "многохвосток" A^3 и A^4 из-за их громоздкости, а сразу укажем, что никаких сильных неадиабатических эффектов в A^3 не содержится. Во втором же слагаемом в (4.16) существует неадиабатический вклад, связанный со слагаемыми в сумме, когда $\mathbf{G}_1 = -\mathbf{G}$ и $\mathbf{G}_2 = -\mathbf{G}'$. При малых \mathbf{q} $\Pi(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}', \omega)$ может быть записан в виде

$$\Pi(\mathbf{q} + \mathbf{G}, \mathbf{q} + \mathbf{G}', \omega) = \frac{V_{\text{ei}}(\mathbf{G})}{\varepsilon(\mathbf{G}, 0)} \frac{V_{\text{ei}}(\mathbf{G}')}{\varepsilon(\mathbf{G}', 0)} \times \\ \times \sum_{\mathbf{p}} \frac{n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{p}}}{\omega - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{p}} - i\delta} \frac{2}{(\xi_{\mathbf{p}} - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{G}})(\xi_{\mathbf{p}} - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{G}'})}. \quad (4.20)$$

Для двухатомного кристалла в направлении высокой симметрии вклад динамической матрицы (4.14) в частоту оптического фонона можно, используя (4.20), записать в виде

$$\Delta\omega_{\alpha}^2(\mathbf{q} \rightarrow 0) = \frac{1}{\Omega_0 M} \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}', \mathbf{p}} G^{\alpha} G'^{\beta} \frac{V_{\text{ei}}^2(\mathbf{G})}{\varepsilon^2(\mathbf{G})} \frac{V_{\text{ei}}^2(\mathbf{G}')}{\varepsilon^2(\mathbf{G}')} \times \\ \times \frac{n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{p}}}{\omega - \mathbf{q}\mathbf{v}_F} \frac{2 \sin(\mathbf{G}\mathbf{l}) \sin(\mathbf{G}'\mathbf{l})}{(\xi_{\mathbf{p}} - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{G}})(\xi_{\mathbf{p}} - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{G}'}), \quad (4.21)$$

где \mathbf{l} — вектор, соединяющий два ближайших атома в элементарной ячейке. Это выражение удобно переписать в виде

$$\Delta\omega_{\alpha}^2(\mathbf{q} \rightarrow 0) = \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{p}} (V_{\mathbf{p}}^{\alpha})^2 \frac{n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{p}}}{\omega - \mathbf{q}\mathbf{v}_F}, \quad (4.22)$$

где

$$V_{\mathbf{p}}^{\alpha} = \frac{1}{\Omega_0} \sum_{\mathbf{G}} G^{\alpha} \frac{2V_{\text{ei}}^2(\mathbf{G}) \sin \mathbf{G}\mathbf{l}}{\varepsilon^2(\mathbf{G})(\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{G}} - \xi_{\mathbf{p}})}. \quad (4.23)$$

Эти результаты, но в несколько ином подходе к расчету "многохвосток", были получены более 30 лет назад в работе Ипатовой и Субашиева [29]. Формула (4.22) показывает, что в микроскопическом подходе в электронном вкладе в фононные частоты существует слагаемое, формально точно соответствующее тому, что возникает в модели Фрёлыха. Это слагаемое дает вклад в четвертом порядке малости по псевдопотенциалу как в адиабатические фононные частоты при $\mathbf{q}\mathbf{v}_F \geq \omega_{\text{ph}}$, так и в неадиабатические эффекты при $\mathbf{q}\mathbf{v}_F < \omega_{\text{ph}}$. Следует отметить, что адиабатические вклады в оптические частоты от других электронных слагаемых дают величины, имеющие второй порядок малости по псевдопотенциалу. Однако неадиабатические поправки, хотя и имеют четвертый порядок малости по псевдопотенциалу, не малы по параметру неадиабатичности. Заме-

тим также, что параметр $V_{ei}(\mathbf{G})/\varepsilon_F$ не так уж и мал для поливалентных, а тем более для переходных металлов. Имеется и еще одно существенное обстоятельство, вытекающее из формулы (4.21), а именно то, что неадиабатические поправки возникают за счет процессов переброса (т.е. при \mathbf{G} и \mathbf{G}' не равных нулю). Поэтому они действуют одинаково на продольные и поперечные моды. Единственное слагаемое, которое отличается по своему действию на продольные и поперечные оптические моды, возникает из диагональных слагаемых с $\mathbf{G} = \mathbf{G}' = 0$. Оно устраняет расщепление продольных и поперечных мод, существующее для ионного вклада в адиабатическом приближении и приводит, как было показано (см. (4.15)), лишь к слабой антиэкранировке продольной оптической моды.

Резюмируя все сказанное выше, можно утверждать, что неадиабатические эффекты в спектрах оптических фононов, предсказанные в рамках модели Фрѐлиха, могут быть получены как в адиабатическом приближении, так и в микроскопической теории динамики решетки. Конечно, к конкретным значениям величины этих эффектов, полученных в модели Фрѐлиха, следует относиться с осторожностью. Необходимо учитывать, что электронные и фононные спектры перенормируются за счет ЭФВ разными константами связи. Подобная ситуация имеет место уже в простейшем варианте модели Фрѐлиха, в котором собственно-энергетическая часть равна [58] $\Xi(\omega) = -\omega\lambda_{el}$, где

$$\begin{aligned}\lambda_{el} &= g^2 N(0) \int_0^{2k_F} \frac{q dq}{2k_F^2} D(q, \omega = 0) = \\ &= \lambda \int_0^{2k_F} \frac{q dq}{2k_F^2} \frac{\omega_0^2}{\omega^2(q)} = \frac{\lambda}{1 - 2\lambda}.\end{aligned}\quad (4.24)$$

Как мы уже упоминали, в работах [32, 42] была выбрана константа связи $\lambda_{el} = 2,9$. Столь большое значение λ_{el} было использовано, чтобы получить значение $T_c = 91$ К в соединении $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Перенормировку электронного спектра и критическую температуру сверхпроводящего перехода определяет именно λ_{el} . Как следует из (4.24), константа перенормировки фононного спектра имеет при этом величину равную лишь 0,4. Таким образом, никаких проблем не должно было возникать в работах [32, 42] при решении уравнений (3.33), (3.34) при последовательном использовании модели Фрѐлиха.

Реальное отличие констант связи, перенормирующих электронные и фононные спектры обусловлено не только использованием перенормированных фононов при расчете электронного спектра, как это имеет место в модели Фрѐлиха. Оно связано с существенным отличием и матричных элементов ЭФВ, определяющих перенормировку обоих спектров. Это хорошо видно на примере металла со слабым псевдопотенциалом. Электронные спектры в нем будут перенормироваться во втором порядке по $V_{ei}(\mathbf{G})/\varepsilon_F$, в то время как неадиабатические перенормировки фононных спектров будут иметь малость четвертого порядка. Это обстоятельство позволяет, в частности, понять, почему наблюдаемая в работах [6–8] неадиабатическая дисперсия фононов при $\mathbf{q}\mathbf{v}_F \leq \omega_{ph}$ составляет величину порядка $d\omega/dq \approx 10^6$ см с^{-1} , хотя скорость Ферми в осмии $v_F \sim (3-5) \times 10^7$ см с^{-1} , т.е. дисперсия фононов на порядок меньше скорости Ферми. При этом не следует забывать, что скорость звука в

осмии $\approx 10^4$ см с^{-1} , т.е. еще на два порядка меньше, чем дисперсия оптических фононов при $\mathbf{q}\mathbf{v}_F < \omega_{ph}$. Это означает просто, что константа связи, описывающая неадиабатические эффекты, $\lambda \simeq 0,1$, хотя в осмии константа ЭФВ, перенормирующая электронный спектр $\lambda_{el} = 0,4$.

Здесь следует отметить, что в модели Фрѐлиха, как и в микроскопической теории динамики решетки, существует электронный вклад в фононные частоты (см. (4.22)), который эффективен как для адиабатических процессов, так и для неадиабатики. Поэтому, на наш взгляд, лишены смысла попытки улучшить модель Фрѐлиха с помощью различных эмпирических правил: использовать, например, при расчете фононных спектров вместо поляризационного оператора $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$ величину $\Pi(\mathbf{q}, \omega) - \Pi(\mathbf{q}, 0)$ [17, 20]. Подобная процедура действительно устраняет перенормировку затравочных фононных частот в адиабатическом пределе, но она не приведет к исчезновению неадиабатических эффектов для оптических фононов при $\mathbf{q}\mathbf{v}_F < \omega_{ph}$. Кроме того, эта процедура создаст серьезные трудности при рассмотрении неадиабатических эффектов в сверхпроводящем состоянии металла. Нельзя улучшить модель Фрѐлиха мелкими исправлениями и при этом не потерять той разумной физической основы, которая в ней содержится и которая согласуется с микроскопической теорией.

В заключение этого раздела нам хотелось бы кратко ответить на критику как самой идеи о существовании неадиабатических эффектов в фононных спектрах металлов, так и наших работ в этой области. В наиболее явной форме эта критика была выражена в работах Фальковского [19, 20, 59], в которых содержится утверждение, что ошибочна сама идея о существовании неадиабатических эффектов, которые были бы не малы в меру отношения $\sqrt{m/M}$, и, следовательно, ошибочны большинство работ, в которых эти эффекты обсуждаются. Так, при обсуждении экспериментальных данных, полученных в работах Поносова и др. [6–8], утверждается [19, 20, 59], что наблюдаемая в [6–8] дисперсия оптического фонона в осмии не свидетельствует о существовании неадиабатических эффектов в этом металле. Этот вывод сделан на том основании, что эта дисперсия в 10 раз меньше скорости Ферми. При этом автор работ [19, 20, 59] не обращает внимания на тот факт, что указанная дисперсия в 100 раз больше скорости звука и стандартной дисперсии оптических фононов и что не существует никакой другой возможности для объяснения этой огромной разницы в дисперсиях кроме неадиабатических явлений. В работе [59] приведены формулы для частоты поперечной оптической моды фононов для случаев $\mathbf{q}\mathbf{v}_F < \omega_q$ и $\mathbf{q}\mathbf{v}_F > \omega_q$, которые и переписаны ниже (см. формулы (35), (36) в [59]):

$$\omega_{TO}^2 - i\omega_{TO}^2\Gamma = \omega_q^2 + \lambda\omega_0^2 \frac{\omega_q}{\omega_q + iy} \quad (\mathbf{q}\mathbf{v}_F < \omega_q) \quad (4.25)$$

и

$$\omega_{TO}^2 - i\omega_{TO}^2\Gamma = \omega_q^2 + \lambda\omega_0^2 \left(\frac{\omega_q}{\mathbf{q}\mathbf{v}_F} \right)^2 \quad (\mathbf{q}\mathbf{v}_F > \omega_q). \quad (4.26)$$

Здесь ω_q — затравочный спектр фононов, который в [59] рассматривается в качестве адиабатического, при этом $\omega_q^2 = \omega_0^2 \pm s^2 q^2$, где s — скорость звука, а λ — константа электрон-фононной связи. Хорошо видно, что эти формулы для ТО-фонона не только не опровергают резуль-

татов критикуемых в [59] работ [4, 6–9, 29, 30], а полностью совпадают с полученными ранее в модели Фрëлиха с некоторым различием в обозначениях. Так, отличие квадрата неадиабатической частоты ТО-фонона от адиабатической, в соответствии с формулами (4.25) и (4.26), составляет величину, равную $\lambda\omega_0^2$. Это и не удивительно, поскольку используемый в работах [19, 20, 59] подход в очень сильной мере совпадает с моделью Фрëлиха, по крайней мере, для ТО-фононов.

5. Заключение

Кратко сформулируем результаты обсуждения проведенного в данном обзоре. Во-первых, неадиабатические эффекты в фоновых спектрах металлов, безусловно, существуют и наблюдаются экспериментально. Они возникают за счет ЭФВ и не имеют малости по параметру $\sqrt{m/M}$. Помимо простейших эффектов типа сдвига оптических фоновых частот и увеличения или уменьшения соответствующих ширин фоновых линий, они могут приводить и к более сильным изменениям фоновых спектров. К ним можно отнести появление при $qv_F < \omega_{ph}$ аномально большой дисперсии фононов, на порядки превышающей соответствующую скорость звука, а также возникновение в сверхпроводящем состоянии дополнительных фоновых линий при $\omega_{ph} \approx 2\Delta$. Во-вторых, показано, что подобные эффекты возникают как в модели Фрëлиха, так и в микроскопической теории динамики решетки. Из сравнения этих двух подходов к расчету неадиабатических эффектов сделан вывод, что модель Фрëлиха может быть использована для описания неадиабатических эффектов в металлах, при этом влияние ЭФВ на свойства электронной подсистемы металла может быть вычислено с хорошей количественной точностью. При расчете неадиабатических эффектов в фоновых спектрах металлов модель Фрëлиха дает лишь качественное, но физически разумное описание этих эффектов.

Авторам приятно выразить глубокую благодарность А.С. Александрову, П.И. Арсееву и О.В. Долгову за полезные дискуссии. Авторы благодарны за финансовую поддержку Правительственной программе поддержки научных школ, научным программам Президиума РАН и Отделения физических наук РАН, а также РФФИ (гранты №№ 06-02-16978, 07-02-00456, 08-02-00757).

Список литературы

- Born M, Oppenheimer R *Ann. Phys. (Leipzig)* **84** 457 (1927)
- Born M, Huang K *Dynamical Theory of Crystal Lattices* (Oxford: Clarendon Press, 1954) [Борн М, Хуан Кунь *Динамическая теория кристаллических решеток* (М.: ИЛ, 1958)]
- Chester G V *Adv. Phys.* **10** 357 (1961)
- Engelsberg S, Schrieffer J R *Phys. Rev.* **131** 993 (1963)
- Cardona M, Ipatova I P, in *Elementary Excitations in Solids* (Eds J L Birman, S Sébenne, R F Wallis) (Amsterdam: North-Holland, 1992) Ch. 13
- Поносов Ю С и др. *ФТТ* **26** 815 (1984) [Ponosov Yu S et al. *Sov. Phys. Solid State* **26** 491 (1984)]
- Болотин Г А, Поносов Ю С *ФТТ* **27** 2636 (1985) [Bolotin G A, Ponosov Yu S *Sov. Phys. Solid State* **27** 1581 (1985)]
- Ponosov Yu S et al. *Phys. Status Solidi B* **208** 257 (1998)
- Maksimov E G, Shulga S V *Solid State Commun.* **97** 553 (1996)
- Axe J D, Shirane G *Phys. Rev. B* **8** 1965 (1973)
- Schuster H G *Solid State Commun.* **13** 1559 (1973)
- Sooryakumar R, Klein M V *Phys. Rev. Lett.* **45** 660 (1980)
- Kawano H et al. *Phys. Rev. Lett.* **77** 4628 (1996)
- Мигдал А Б *ЖЭТФ* **34** 1438 (1958) [Migdal A B *Sov. Phys. JETP* **7** 996 (1958)]
- Бровман Е Г, Каган Ю М *ЖЭТФ* **52** 557 (1967) [Brovman E G, Kagan Yu M *Sov. Phys. JETP* **25** 365 (1967)]
- Бровман Е Г, Каган Ю М *УФН* **112** 369 (1974) [Brovman E G, Kagan Yu M *Sov. Phys. Usp.* **17** 125 (1974)]
- Гейликман Б Т *УФН* **115** 403 (1975) [Geilikman B T *Sov. Phys. Usp.* **18** 190 (1975)]
- Reizer M *Phys. Rev. B* **61** 40 (2000)
- Falkovsky L A *ЖЭТФ* **124** 886 (2003) [*JETP* **97** 794 (2003)]
- Фальковский Л А *УФН* **174** 259 (2004) [Falkovsky L A *Phys. Usp.* **47** 249 (2004)]
- Максимов Е Г *ЖЭТФ* **69** 2236 (1975) [Maksimov E G *Sov. Phys. JETP* **42** 1138 (1975)]
- Каракозов А Е, Максимов Е Г *ЖЭТФ* **115** 1799 (1999) [Karakozev A E, Maksimov E G *JETP* **88** 987 (1999)]
- Sinha S K, in *Dynamical Properties of Solids* Vol. 3 (Eds G K Horton, A A Maradudin) (Amsterdam: North-Holland, 1980) p. 3
- Sham L J, in *Dynamical Properties of Solids* Vol. 1 (Eds G K Horton, A A Maradudin) (Amsterdam: North-Holland, 1974) p. 301
- Саврасов С Ю, Максимов Е Г *УФН* **165** 773 (1995) [Savrasov S Yu, Maksimov E G *Phys. Usp.* **38** 737 (1995)]
- Varoni S et al. *Rev. Mod. Phys.* **73** 515 (2001)
- Абрикосов А А, Горьков Л П, Дзялошинский И Е *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (М.: Физматгиз, 1962) [Translated into English: Abrikosov A A, Gorkov L P, Dzyaloshinski I E *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (New York: Dover Publ., 1975)]
- Гуревич В А, Ларкин А И, Фирсов Ю А *ФТТ* **4** 185 (1962) [Gurevich V A, Larkin A I, Firsov Yu A *Sov. Phys. Solid State* **4** 131 (1962)]
- Ипатова И П, Субашиев А В *ЖЭТФ* **66** 722 (1974) [Ipatova I P, Subashiev A V *Sov. Phys. JETP* **39** 349 (1974)]
- Alexandrov A S, Schrieffer J R *Phys. Rev. B* **56** 13731 (1997)
- Pintschovious L, Reichardt W, in *Neutron Scattering in Layered Copper-Oxide Superconductors* (Physics and Chemistry of Materials with Low-Dimensional Structures, Vol. 20, Ed. A Furrer) (Dordrecht: Kluwer Acad., 1998)
- Zeyher R, Zwicky G Z. *Phys. B* **78** 175 (1990)
- Элиашберг Г М *ЖЭТФ* **38** 966 (1960) [Eliashberg G M *Sov. Phys. JETP* **11** 696 (1960)]
- Allen P B *Phys. Rev. B* **13** 1416 (1976)
- Schrieffer J *Theory of Superconductivity* (New York: W.A. Benjamin, 1964) [Шрифффер Дж *Теория сверхпроводимости* (М.: Наука, 1970)]
- Prange R E *Phys. Rev.* **129** 2495 (1963)
- Вакс В Г, Галицкий В М, Ларкин А И *ЖЭТФ* **41** 1655 (1961) [Vaks V G, Galitskii V M, Larkin A I *Sov. Phys. JETP* **14** 1177 (1961)]
- Littlewood P B, Varma C M *Phys. Rev. B* **26** 4883 (1982)
- Maki K, Tsuneto T *Prog. Theor. Phys.* **28** 163 (1962)
- Devereaux T P *Phys. Rev. B* **47** 5230 (1993)
- Devereaux T P *Phys. Rev. B* **50** 10287 (1994)
- Zeyher R, Zwicky G *Solid State Commun.* **66** 617 (1988)
- Thomsen C, in *Light Scattering in Solids* Vol. 6 (Eds M Cardona) (Heidelberg: Springer-Verlag, 1995) p. 285
- Balseiro C A, Falikov L M *Phys. Rev. Lett.* **45** 662 (1980)
- Stassis C et al. *Phys. Rev. B* **55** R8678 (1997)
- Bullock M et al. *Phys. Rev. B* **57** 7916 (1998)
- Allen P B et al. *Phys. Rev. B* **56** 5552 (1997)
- Kee H-Y, Varma C M *Phys. Rev. Lett.* **79** 4250 (1997)
- Rhee J Y, Wang X, Harmon B N *Phys. Rev. B* **51** 15585 (1995)
- Кобаев Ю В *Труды ФИАН* **86** 3 (1975)
- Ramakrishnan T V, Varma C M *Phys. Rev. B* **24** 137 (1981)
- Marsiglio F *Phys. Rev. B* **47** 5419 (1993)
- Каракозов А Е, Максимов Е Г, Михайловский А Б *ЖЭТФ* **102** 132 (1992) [Karakozev A E, Maksimov E G, Mikhailovskii A B *JETP* **75** 70 (1992)]
- Максимов Е Г, Саврасов С Ю *УФН* **160** (9) 155 (1990) [Maksimov E G, Savrasov S Yu *Sov. Phys. Usp.* **33** 763 (1990)]

55. Максимов Е Г, Саврасов Д Ю, Саврасов С Ю *УФН* **167** 353 (1997) [Maksimov E G, Savrasov D Yu, Savrasov S Yu *Phys. Usp.* **40** 337 (1997)]
56. Allen P B, in *Dynamical Properties of Solids* Vol. 3 (Eds G K Horton, A A Maradudin) (Amsterdam: North-Holland, 1980) p. 108
57. Горобченко В Д, Максимов Е Г *ЖЭТФ* **81** 1847 (1981) [Gorobchenko V D, Maksimov E G *Sov. Phys. JETP* **54** 978 (1981)]
58. *Проблема высокотемпературной сверхпроводимости* (Под ред. В Л Гинзбурга, Д А Киржница) (М.: Наука, 1977) [Translated into English: Ginzburg V L, Kirzhnits D A (Eds) *High-Temperature Superconductivity* (New York: Consultants Bureau, 1982)]
59. Фальковский Л А *ЖЭТФ* **122** 411 (2002) [Falkovsky L A *JETP* **95** 354 (2002)]

On nonadiabatic effects in the phonon spectra of metals

E.G. Maksimov

P.N. Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences,

Leninskii prosp. 53, 119991 Moscow, Russian Federation

Tel. (7-499) 135-75 11. Fax (7-499) 135-85 33

E-mail: maksimov@lpi.ru

A.E. Karakozov

L.F. Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, Russian Academy of Sciences,

142190 Troitsk, Moscow Region, Russian Federation

Tel. (7-495) 334-05 82

Experimental and theoretical research on nonadiabatic effects in metals is briefly reviewed. It is shown that these effects are most manifest in optical phonon spectra at wave vectors \mathbf{q} such that $\mathbf{q}\mathbf{v}_F < \omega_0(\mathbf{q})$, where \mathbf{v}_F is the electron Fermi velocity and $\omega_0(\mathbf{q})$ is the phonon frequency. The various theoretical approaches to calculating the nonadiabatic effects are examined. Froelich's phenomenological field-theoretical model most widely used in such calculations is reviewed in detail, some aspects of its application are considered, and its efficiency as a tool for studying nonadiabatic effects is discussed.

PACS numbers: 71.15.Md, **74.20. - z**, **74.72. - h**

DOI: 10.3367/UFNr.0178.200806a.0561

Bibliography — 59 references

Received 7 September 2007, revised 14 October 2007

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **178** (6) 561–576 (2008)

Physics – Uspekhi **51** (6) (2008)