

530.145.7

## АДИАБАТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ МЕТАЛЛОВ И ПРОБЛЕМА УСТОЙЧИВОСТИ РЕШЕТКИ

*Б. Т. Гейликман*

### СОДЕРЖАНИЕ

|   |     |
|---|-----|
| 1. Введение . . . . .   | 403 |
| 2. Адиабатическое разложение для металлов . . . . .                                   | 406 |
| 3. Обычная теория возмущений на основе адиабатического разложения . . . . .           | 408 |
| 4. Модель Фрёлиха и устойчивость решетки . . . . .                                    | 414 |
| 5. Электрон-фононное взаимодействие в нормальных и сверхпроводящих металлах . . . . . | 417 |
| 6. Применение к теории молекул . . . . .  | 420 |
| Приложение . . . . .  | 421 |
| I. Учет экраинирования в электрон-фононных матричных элементах (421).                 |     |
| II. Диаграммная техника в адиабатической теории (423).                                |     |
| Цитированная литература . . . . .   | 426 |

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно, адиабатическое приближение, представляющее собой регулярное разложение по малому параметру  $\kappa = \sqrt[4]{m/M}$ , является наиболее строгим методом не только в теории молекул, но и в теории металлов ( $m$  — масса электрона,  $M$  — масса иона)<sup>1</sup>. Однако адиабатическая теория возмущений значительно сложнее обычной квантово-механической теории возмущений и применение ее при практических расчетах сопряжено с большими трудностями. Ввиду этого при различных конкретных расчетах в теории металлов обычно применялась модель Блоха — Фрёлиха, не имеющая строгого обоснования, но зато представляющая большие удобства при вычислениях, так как она сформулирована, как обычная квантово-механическая теория возмущений. В этой модели гамильтониан электрон-фононной системы предполагается равным сумме гамильтонианов свободного электронного и фононного полей  $\mathcal{H}_0$ , т. е. гамильтониана невзаимодействующих электронов, движущихся в периодическом потенциале решетки, и гамильтониана гармонических колебаний ионов, — и гамильтониана взаимодействия между ними, который приравнивается изменению потенциала, действующего на электроны, из-за смещения ионов:

$$\mathcal{H}' = \sum_i [V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{0i} - \Delta \mathbf{R}_i) - V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{0i})] = \sum_i (\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{0i}), \Delta \mathbf{R}_i),$$

где  $V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{0i})$  — потенциал, с которым  $i$ -й ион с равновесной координатой  $\mathbf{R}_{0i}$  действует на электрон с координатой  $\mathbf{r}$ ,  $\Delta \mathbf{R}_i$  — смещение иона из положения равновесия. В модели Фрёлиха постулируется, что затраченная частота фононов, т. е. частота свободного фононного поля  $\omega_0(q)$  при малых волновых векторах фононов  $q$  описывается акустическим

законом дисперсии. Эквивалентность модели Блоха — Фрёлиха в теории проводимости, т. е. при вычислении матричного элемента перехода электрона из состояния с импульсом  $\mathbf{k}$  в состояние с импульсом  $\mathbf{k}'$  с испусканием или поглощением фона, и адиабатической теории была доказана еще Займаном в 1955 г.<sup>2</sup>. В дальнейшем особенно большой интерес приобрел вопрос об энергии электрон-фононной системы и об энергетических спектрах возбуждений в этой системе. Были попытки доказать эквивалентность обеих теорий и в этом отношении, однако в действительности такая эквивалентность отсутствует, как будет выяснено ниже. Точный расчет в рамках модели Фрёлиха, основанный на суммировании всех существенных графиков<sup>3</sup> (приближенные оценки по теории возмущений были проведены в<sup>4-6</sup>), привел к двум важным результатам: 1) первоначальная скорость электронов на поверхности Ферми  $v_0$  благодаря электрон-фононному взаимодействию  $\mathcal{H}_F$  изменяется (перенормируется) на величину  $1 + \zeta_0$ :  $v = v_0/(1 + \zeta_0)$ , где  $\zeta_0$  — безразмерный параметр Фрёлиха, характеризующий электрон-фононное взаимодействие,  $\zeta_0 < 1$ ; одновременно происходит перенормировка химического потенциала  $\mu - \Delta\mu \sim \zeta_0\omega_D$ , где  $\omega_D$  — дебаевская частота; 2) при малых  $q$  (для простоты рассматривалось взаимодействие электронов лишь с продольными фононами и акустический закон дисперсии для  $\omega_0(q)$ ) фононная частота с учетом взаимодействия —  $\omega(q)$  — выражается через затравочную (нулевую) частоту  $\omega_0(q)$  по формуле  $\omega(q) = \omega_0(q)\sqrt{1 - 2\zeta_0}$ . Очевидно, таким же образом выражается и скорость продольного звука  $u_l = u_{l0}\sqrt{1 - 2\zeta_0}$ . Поэтому при  $\zeta_0 > 1/2$   $\omega(q)$  делается чисто мнимой, т. е. возникает неустойчивость решетки. Таким образом, значение  $1/2$  оказывается максимально возможным значением  $\zeta_0$ . В рамках модели Бардина согласно микроскопической теории сверхпроводимости (так называемая теория слабой связи) критическая температура сверхпроводника  $T_k$  определяется известной формулой  $T_k = 1,14\hbar\omega_D e^{-1/\zeta_0}$ . Поэтому максимально возможное значение  $T_k$  при заданной  $\omega_D$  равно  $T_{k\max} = 1,14\hbar\omega_D e^{-2}$ . Существование такого предельного значения  $T_k$  качественно хорошо согласуется с экспериментальными фактами.

Однако эта концепция предельного значения  $\zeta_0$ , связанного с возникновением неустойчивости решетки, вскоре столкнулась с двумя противоречиями.

1) В более точной формуле для  $T_k$ , полученной в работе<sup>7</sup>, параметр электрон-фононного взаимодействия, обозначаемый в работе<sup>7</sup> через  $\lambda$ , входит более сложным образом. При этом оказалось, что для некоторых сверхпроводников  $\lambda$  существенно превышает  $1/2$ , например, для Pb  $\lambda = 1,1-1,3$ , для Hg  $\lambda = 1,6$ , для Ga  $\lambda = 2,25$ ; при этом, конечно, экспериментальные данные о наличии некоторого верхнего предела для  $T_k$  сохраняют силу.

2) В работе<sup>8</sup> было показано, что если исходить из последовательной адиабатической теории, а не из интуитивной модели Фрёлиха, результат, касающийся перенормировки  $v_0$ , остается справедливым, а перенормировка фононной частоты оказывается поглощением малой  $\sim \chi^4$ . Ввиду этого был сделан вывод о неоправданности заключений в<sup>6</sup> относительно возможной неустойчивости решетки при сильном электрон-фононном взаимодействии.

После этого возник вопрос, насколько можно доверять другим результатам, полученным на основе модели Фрёлиха, и может ли гамильтониан Фрёлиха — Блоха быть строго получен из полного гамильтониана системы электронов и ионов. Для этого необходимо было провести сопоставление модели Фрёлиха и адиабатической теории возмущений. Но если

модель Фрёлиха представляет собой обычную квантовомеханическую теорию возмущений, то адиабатическая теория, как известно, имеет существенно иную структуру, и ввиду этого прямое сравнение обеих теорий весьма затруднительно. Оказалось, однако, возможным на основе адиабатической теории построить обычную квантовомеханическую теорию возмущений с нулевым гамильтонианом, зависящим, в отличие от адиабатической теории, одновременно и от электронных, и от ионных переменных<sup>9</sup>. Хотя эта теория по своей структуре совершенно отлична от адиабатической теории в ее канонической форме, но по своим результатам обе теории совершенно эквивалентны. Адиабатическое приближение в форме квантовомеханической теории возмущений позволяет использовать стандартную диаграммную технику, которая характеризуется, однако, наличием вершин не только с одним, но с двумя и более фононными концами. Это приводит, в частности, к тому, что помимо поправок к вершине с одним фононным концом, найденным в<sup>3</sup>, возникают дополнительные поправки, имеющие тот же порядок малости  $\sim \chi^2$ . Оператор возмущения  $\mathcal{H}'$  имеет своеобразную форму и заметно отличается от оператора возмущений в модели Фрёлиха  $\mathcal{H}'_F$ . Поэтому, хотя фононная частота, поскольку она уже в нулевом приближении совпадает с адиабатической, перенормируется очень мало (если учесть ангармонизм, то на величину порядка  $\chi^2$ , а не  $\chi^4$ ), но силы взаимодействия между электронами оказываются велики — порядка  $\zeta_0$ .

В настоящей статье, посвященной проблеме обоснования теории металлов, излагаются основные результаты работ по этому вопросу; при этом главное внимание уделяется вопросу о границах применимости модели Фрёлиха в теории металлов.

В работе<sup>9</sup> показано, что модель Фрёлиха с  $\mathcal{H}' = \mathcal{H}'_F$  не может быть получена из точного полного гамильтониана системы ни при каком выборе нулевого гамильтониана. Оператор возмущения, наиболее близкий к  $\mathcal{H}'_F$ , можно получить все же при определенном виде потенциальной энергии колебаний ионов  $U_i(\Delta \mathbf{R})$  в  $\mathcal{H}_0$ , существенно отличающемся от вида  $U_i$  в адиабатической теории (см. формулы (27), (28)) (в модели Фрёлиха вид  $U_i$  оставался неизвестным). Такой потенциальной энергии соответствует, однако, пулевая частота, равная ионной плазменной частоте, а не ткустической частоте, как постулировалось в модели Фрёлиха. Поэтому, хотя учет возмущения, которое в этой теории является немалым (близким к  $\mathcal{H}'_F$ ), дает для перенормированной, т. е. адиабатической, частоты формулу того же вида, что в модели Фрёлиха:  $\omega_{ad}(q) = \omega_0(q) \sqrt{1 - (\omega^2/\omega_0^2)}$ , но, так как  $\omega_0$  является ионной плазменной частотой, это приводит лишь к переходу от оптического закона дисперсии к акустическому при любом  $\zeta_0$  (как это уже было ранее известно в так называемой модели «голых» ионов<sup>10-13</sup>), а не к обращению частоты в нуль. Таким образом, вывод о возможной неустойчивости решетки на основе такого механизма в рамках модели Фрёлиха оказывается необоснованным.

Разумеется, это заключение не касается других возможных механизмов неустойчивости: так называемого пайерлсовского удвоения, мартенситных превращений в соединениях типа А-15, моттовского перехода и т. д.

Несмотря на то, что модель Фрёлиха в буквальной форме не согласуется с полным гамильтонианом системы электролов и ионов, ряд важных результатов, найденных в рамках модели Фрёлиха и определяемых непосредственно возмущением  $\mathcal{H}'_F$ , оказывается все же правильными: уравнение для спаривательной собственno-энергетической части  $\Sigma_2$  и сверхпроводящей щели, величина матричного элемента для перехода

электрона с испусканием или поглощением фонона в теории проводимости металлов, значение зависящей от энергии части массового оператора  $\Sigma_1$ , перенормировка скорости электронов  $v_0$  и величина электрон-электронных сил благодаря обмену виртуальными фононами. Во все эти величины вместо нулевой частоты  $\omega_0(q)$  входит только реальная фононная частота  $\omega(q)$ .

Существенную роль при вычислении поправок к энергии электрона и фона на играет вид электрон-фононных матричных элементов и их зависимость от импульса фона на. В статье проводится анализ этой зависимости и выясняются причины разногласий относительно вида матричных элементов в разных моделях.

В статье показано также, что верхний предел для критической температуры  $T_k$  сверхпроводника связан не с тем, что имеется  $\zeta_0$   $\text{max}$ , равное  $1/2$ , так как в формулу для  $T_k$  входит не  $\zeta_0$ , а  $\zeta$  (или  $\lambda = \zeta \langle \sum_{v=1}^3 u_v^2 q^2 \gamma_v \times \times \omega_v^{-2} (q) \rangle_{\text{ср}}$  при реальном законе дисперсии; см. (31)), которые могут принимать любые значения. Верхний предел для  $T_k$  связан с перенормированной спаривательной собственно-энергетической части  $\Sigma_2$  и щели. Исследование обычной и спаривательной собственно-энергетических частей  $\Sigma_1$  и  $\Sigma_2$  показывает, что они — и вследствие этого электронная эффективная масса и критическая температура — имеют заметную особенность как функции фермиевского импульса  $p_F \approx \hbar n^{1/3}$ , а следовательно, и плотности электронов  $n$  при  $2p_F = q_0$  ( $q_0$  — максимальный фононный импульс).

## 2. АДИАБАТИЧЕСКОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ ДЛЯ МЕТАЛЛОВ

Рассмотрим сначала обычную адиабатическую теорию возмущений<sup>1</sup>. Уравнение Шредингера для системы электронов с координатами  $r_i$  и ионов с координатами  $R_i$  в символической форме имеет вид

$$[\mathcal{H}_e + \mathcal{H}_i + \mathcal{H}_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R})] \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}); \quad (1)$$

$$\mathcal{H}_e = \sum_s^N \frac{p_s^2}{2m}, \quad \mathcal{H}_i = \sum_j^N \frac{P_j^2}{2M},$$

$$\mathcal{H}_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = V(\mathbf{r}, \mathbf{r}) + V(\mathbf{R}, \mathbf{R}) + V(\mathbf{r}, \mathbf{R})$$

— полная потенциальная энергия. Мы будем предполагать, что в  $V(\mathbf{R}, \mathbf{R})$  и  $V(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  учитывается потенциал ионов с электронами заполненных оболочек. При этом мы пренебрегаем обратным действием электронов проводимости на внутренние электроны, жестко связанные с ядрами в рамках адиабатической теории. Такое приближение является достаточно точным из-за наличия запрещенной зоны.

Так как кинетическая энергия ионов  $\mathcal{H}_i$  в  $\kappa^2$  раз меньше электронной энергии, то в адиабатической теории в нулевом приближении ею пренебрегают и рассматривают уравнение<sup>1</sup>

$$(\mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{ei}) \Psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E_m(\mathbf{R}) \Psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \quad (2)$$

Полную  $\Psi$ -функцию можно искать в виде разложения по полной ортогональной системе функций  $\Psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ ;  $\Psi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_m \Phi_{nm}(\mathbf{R}) \Psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ ; значок  $n$  указывает на то, что мы ищем полную  $\Psi$ -функцию, примыкающую к  $n$ -му электронному состоянию, при этом член с  $m = n$  является главным.

Подставив этот ряд для  $\Psi_n$  в (1), умножив потом на  $\psi_s^*$  и проинтегрировав по  $\mathbf{r}$ , получим

$$\begin{aligned}
 & (\mathcal{H}_i + E_s^0) \Phi_s + \sum_m C_{sm} \Phi_m = E_n \Phi_s, \\
 & \Phi_s \equiv \Phi_{ns}, \quad E_s^0 = E_s(\mathbf{R}), \quad C_{sm} = A_{sm} + B_{sm}, \\
 & A_{sm} = -\frac{\hbar^2}{M} \sum_j^N \sum_{\alpha}^3 A_{sm\alpha}^j \frac{\partial}{\partial X_{j\alpha}}, \quad B_{sm} = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_j^N B_{sm}^j, \\
 & A_{sm\alpha}^j = \int \psi_s^* \frac{\partial \psi_m}{\partial X_{j\alpha}} d\mathbf{r}, \quad B_{sm}^j = \int \psi_s^* \Delta_{\mathbf{R}_j} \psi_m d\mathbf{r}, \quad d\mathbf{r} \equiv \prod_i^N d\mathbf{r}_i.
 \end{aligned} \tag{3}$$

Полагая, что  $\Phi_n \Psi_n \ll \sum_{m \neq n} \Phi_m \psi_m$ , находим при помощи метода последовательных приближений выражения для  $\Phi_s$  с любой точностью<sup>1, 9</sup>.

Уравнение для  $\Phi_n \equiv \Phi_{nv}$  имеет вид

$$\begin{aligned}
 & (\mathcal{H}_i + U_{2n} + \mathcal{H}'_{pn}) \Phi_{nv} = [E_{nv} - E_n(\mathbf{R}_0)] \Phi_{nv}, \\
 & \mathcal{H}'_{pn} = (C_{nn} + \sum_{s \neq n} C_{ns} D_{sn} + \sum_{\substack{s \neq n \\ m \neq n}} C_{ns} D_{sm} D_{mn} + \dots) + \\
 & \quad + (U_{3n} + U_{4n} + \dots), \quad D_{sm} = (E_n - \mathcal{H}_i - E_s^0)^{-1} C_{sm}, \\
 & U_{2n} = \frac{1}{2} \sum_{ij}^N \sum_{\alpha\beta}^3 \frac{\partial^2 E_n(\mathbf{R})}{\partial X_{i\alpha} \partial X_{j\beta}} \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} \Delta X_{i\alpha} \Delta X_{j\beta}, \\
 & U_{3n} = \frac{1}{6} \sum_{ijk} \sum_{\alpha\beta\gamma} \frac{\partial^3 E_n(\mathbf{R})}{\partial X_{i\alpha} \partial X_{j\beta} \partial X_{k\gamma}} \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} \Delta X_{i\alpha} \Delta X_{j\beta} \Delta X_{k\gamma},
 \end{aligned} \tag{4}$$

$\Delta X_{i\alpha} = X_{i\alpha} - X_{0i\alpha}$ ,  $v$  — совокупность фононных квантовых чисел. Выражение для  $\mathcal{H}'_{pn}$  см. в<sup>9</sup>.

Целесообразно  $\psi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  в (2) также разложить в ряд<sup>1</sup> по степеням  $\Delta X_{i\alpha}$  вблизи положений равновесия  $\mathbf{R}_{0i}$ :

$$\psi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \psi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R}_0) + \sum_{i\alpha} \frac{\partial \psi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R})}{\partial X_{i\alpha}} \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} \Delta X_{i\alpha} + \dots = \psi_n^0(\mathbf{r}) + \psi'_n(\mathbf{r}, \mathbf{R}).$$

Так как  $\partial \psi_n / \partial X_{i\alpha} \sim \psi_n / d$ , а  $[(\Delta X_{i\alpha})_{\text{cp}}^2]^{1/2} \sim a_0$ , то второй член будет порядка  $a_0/d \sim \kappa$ , третий —  $\kappa^2$  и т. д.,  $d$  — постоянная решетки,  $a_0 \sim \sqrt{\hbar/M\omega_D}$  — амплитуда нулевых колебаний,  $\omega_D$  — дебаевская частота. Поэтому соответствующие им члены в выражении  $\Psi$ -функции системы следует включить в поправку  $\Psi'_{nv}$  к  $\Psi$ -функции нулевого приближения  $\Psi_{nv}^0$ .

Тогда  $\Psi'_{nv} = \Phi_{nv}^0(\mathbf{R}) \psi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R}_0)$ , а поправка

$$\begin{aligned}
 \Psi'_{nv} = & \sum_{m \neq n} \Phi_{mv}(\mathbf{R}) \psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + \Phi_{nv}^0(\mathbf{R}) \psi'_n(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + \\
 & + \Phi'_{nv} \psi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R}_0) + \Phi'_{nv} \psi'_n(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad \Phi'_{nv} = \Phi_{nv} - \Phi_{nv}^0 \sim \kappa \Phi_{nv}^0.
 \end{aligned}$$

Дифференцируя уравнение (2) по  $X_{j\alpha}$ , умножая затем на  $\psi_s^*$  и интегрируя по  $\mathbf{r}$ , находим для  $s \neq m$

$$A_{sm}^j = |\nabla_{\mathbf{R}_j} \mathcal{H}_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R})|_{sm} (E_m^0 - E_s^0)^{-1} \tag{5}$$

и, используя (5), имеем

$$B_{sm}^j = |\Delta_{R_j} \mathcal{H}_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R})|_{sm} (E_m^0 - E_s^0)^{-1} + \\ + 2 \sum_{r \neq m} (|\nabla_{R_j} \mathcal{H}_{ei}|_{sr}, |\nabla_{R_j} \mathcal{H}_{ei}|_{rm}) (E_m^0 - E_r^0)^{-1} (E_m^0 - E_s^0)^{-1} + \\ + 2 \left( \left[ \int \psi_m^* \nabla_{R_j} \psi_m d\mathbf{r} - |\nabla_{R_j} \mathcal{H}_{ei}|_{mm} (E_m^0 - E_s^0)^{-1} \right], |\nabla_{R_j} \mathcal{H}_{ei}|_{sm} \right). \quad (6)$$

Для  $m = n$  находим

$$\frac{\partial^2 E_n(\mathbf{R})}{\partial X_{i\alpha} \partial X_{j\beta}} = \left| \frac{\partial^2 \mathcal{H}_{ei}}{\partial X_{i\alpha} \partial X_{j\beta}} \right|_{nn} + \sum_{m \neq n} \left[ \left| \frac{\partial \mathcal{H}_{ei}}{\partial X_{i\alpha}} \right|_{nm} \left| \frac{\partial \mathcal{H}_{ei}}{\partial X_{j\beta}} \right|_{mn} + \right. \\ \left. + \left| \frac{\partial \mathcal{H}_{ei}}{\partial X_{j\beta}} \right|_{nm} \left| \frac{\partial \mathcal{H}_{ei}}{\partial X_{i\alpha}} \right|_{mn} \right] (E_n^0 - E_m^0)^{-1}. \quad (7)$$

Если воспользоваться представлением одночастичных блоховских электронных  $\Psi$ -функций  $\Psi_{\mathbf{k}} = e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{r})} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  ( $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  — периодическая функция; вопрос об учете кулоновского взаимодействия будет рассмотрен ниже), то

$$|\nabla_{R_j} \mathcal{H}_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R}_0)|_{nm} = |\nabla_{R_j} \sum_s V(\mathbf{r}_s - \mathbf{R}_{0j})|_{nm} = \mathbf{U}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^j = e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \mathbf{R}_{0j})} \mathbf{U}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (8)$$

$$\mathbf{U}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = - \int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_j) \nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r}_j) \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j, \quad \mathbf{r}_j = \mathbf{r} - \mathbf{R}_{0j}.$$

В представлении одночастичных функций выражение (7) имеет вид (для  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_0$ )

$$\left. \frac{\partial^2 E_n(\mathbf{R})}{\partial X_{i\alpha} \partial X_{j\beta}} \right|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} = \sum_{\mathbf{k}} \left| \frac{\partial^2 V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)}{\partial X_{i\alpha} \partial X_{j\beta}} \right|_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \delta_{ij} n_{\mathbf{k}} + \\ + \left. \frac{\partial^2 V(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j)}{\partial X_{i\alpha} \partial X_{j\beta}} \right|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} [U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^i U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}'}^j + U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^j U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}'}^i] (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'})^{-1} n_{\mathbf{k}} (1 - n_{\mathbf{k}}), \quad (9)$$

где  $E_n(\mathbf{R})$  — собственное значение уравнения (2),  $n_{\mathbf{k}}$  — электронные числа заполнения.

В формуле (9) в последнем члене множитель  $n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}'}$  под знаком суммы можно заменить на  $n_{\mathbf{k}}$  или в обычной симметричной форме — на  $(n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}'})/2$ , так как сумма с симметричным членом  $n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}'}$ , очевидно, равна нулю, поскольку при замене  $\mathbf{k}$  на  $\mathbf{k}'$  знаменатель суммируемого выражения меняет знак на обратный, а числитель не меняется.

### 3. ОБЫЧНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ НА ОСНОВЕ АДИАБАТИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ

Основным практическим недостатком адиабатической теории является невозможность выделить гамильтониан нулевого приближения  $\mathcal{H}_0$ , зависящий одновременно от  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{R}$  (от  $\mathbf{R}$  — не как от параметров), и найти его собственные функции, имеющие вид произведений  $\psi_m(\mathbf{r}) \Phi_{\nu}(\mathbf{R})$ , и оператор возмущения  $\mathcal{H}'(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  в явном виде. Это не позволяет развить обычную квантовомеханическую теорию возмущений и применить стандартную диаграммную технику.

Нетрудно видеть, что такая обычная теория возмущений может быть развита на основе результатов адиабатического приближения<sup>9</sup>. Будем искать полную  $\Psi$ -функцию, примыкающую к  $n$ -му электронному состоянию. Адиабатическая функция нулевого приближения в этом случае — в гармоническом приближении для фононов — нам известна:  $\Psi_{nv}^0 = \psi_n(\mathbf{r}, \mathbf{R}_0) \Phi_{nv}^0(\mathbf{R})$ . Найдем гамильтониан, зависящий от  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{R}$ ,

одна из собственных функций которого равна  $\Psi_{nv}^0$ , и воспользуемся им как гамильтонианом нулевого приближения.

Очевидно,

$$\mathcal{H}_0(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \mathcal{H}_{0e}(\mathbf{r}) + \mathcal{H}_{0i}(\mathbf{R}), \quad (10)$$

$$\mathcal{H}_{0e} = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R}_0), \quad \mathcal{H}_{0i} = \mathcal{H}_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i\alpha \\ j\beta}} \frac{\partial^2 E_n(\mathbf{R})}{\partial X_{i\alpha} \partial X_{j\beta}} \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} \Delta X_{i\alpha} \Delta X_{j\beta},$$

$$\mathcal{H}_0(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \Psi_{m\mu}^0(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E_{m\mu}^0 \Psi_{m\mu}^0(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad \mathbf{R}_0 \equiv \mathbf{R}_{0n}.$$

Как обычно, фурье-компоненту кулоновского потенциала взаимодействия  $V_c(\mathbf{k})$  с  $\mathbf{k} = 0$  можно положить равной нулю, так как она компенсируется потенциалом ионов. Вообще говоря, остальные собственные функции полной ортогональной системы  $\Psi_{m\mu}^0$ , кроме  $\Psi_{nv}^0$ , не имеют реального смысла, так как в (10) для всех  $m$  координаты равны  $\mathbf{R}_{0n}$  (а не  $\mathbf{R}_{0m}$ ) и частоты  $\omega(q)$  равны  $\omega^n(q)$  (а не  $\omega^m(q)$ ), но если две электронные функции отличаются друг от друга тем, что с электронов изменили свои импульсы  $\mathbf{k}_s$  на  $\mathbf{k}'_s$ , то  $\mathbf{R}_{0n}$  и  $\omega^n(q)$  для них будут отличаться на величину порядка  $s/N$ , поэтому для состояний, близких к основному, зависимостью  $\mathbf{R}_{0n}$  и  $\omega^n(q)$  от  $n$  можно пренебречь и, следовательно, все  $\Psi_{m\mu}^0$  имеют непосредственный физический смысл.

Оператор возмущения  $\mathcal{H}'$ , очевидно, равен

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' = \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 &= -U_{2n} + \mathcal{H}_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) - \mathcal{H}_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R}_0) = \\ &= -U_{2n} + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3 + \dots, \end{aligned} \quad (11)$$

где

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{i\alpha} \frac{\partial \mathcal{H}_{ei}}{\partial X_{i\alpha}} \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} \Delta X_{i\alpha}, \quad \mathcal{H}_2 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i\alpha \\ j\beta}} \frac{\partial^2 \mathcal{H}_{ei}}{\partial X_{i\alpha} \partial X_{j\beta}} \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} \Delta X_{i\alpha} \Delta X_{j\beta}$$

и т. д.

Используя соотношение (7), находим

$$\begin{aligned} U_{2n} &= |\mathcal{H}_2|_{nn} + \mathcal{H}_{2n}, \quad \mathcal{H}_{2n} = \sum_m |\mathcal{H}_1|_{nm}^2 (E_{0n}^0 - E_{0m}^0)^{-1}, \\ E_{0m}^0 &= E_m(\mathbf{R}_0). \end{aligned} \quad (12)$$

Подставляя (12) в (11), получаем

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H}_1 + \overline{\mathcal{H}}_2 - \mathcal{H}_{2n} + \sum_{s=3}^{\infty} \mathcal{H}_s, \quad (13)$$

здесь  $\overline{\mathcal{H}}_2 = \mathcal{H}_2 - |\mathcal{H}_2|_{nn}$ ;  $|\mathcal{H}_1|_{nn} = 0$ , так как

$$\frac{\partial E_n}{\partial X_{i\alpha}} \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} = \left| \frac{\partial \mathcal{H}_{ei}}{\partial X_{i\alpha}} \right|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} = 0.$$

$|\mathcal{H}_2|_{nn}$  и  $\mathcal{H}_{2n}$  являются операторами по фононным степеням свободы и классическими величинами по электронным переменным. Теория возмущений для  $\mathcal{H}'$  по своим результатам, очевидно, полностью эквивалентна адиабатической теории возмущений, хотя по своей структуре обе теории и отличны. Отметим, что рассматриваемая теория возмущений с  $\mathcal{H}'$  в виде (11) полностью применима и в случае перекрывающихся зон, так как в отличие от теории молекул (эффект Яна — Теллера) вырождение для металла, как известно, снимается уже в рамках только электронной задачи (в случае сильной связи для электронов см. 14, 15) и  $E_n(\mathbf{R})$  определяется электронами всех перекрывающихся зон. Как известно, в модели

Фрёлиха оператор возмущения равен  $\mathcal{H}'_F = \sum_{i\alpha} (\partial V(\mathbf{r}, \mathbf{R})/\partial X_{0i\alpha}) \Delta X_{i\alpha}$ , т. е. оператору  $\mathcal{H}_1$  без члена  $\sum_{i\alpha} (\partial V(\mathbf{R}, \mathbf{R})/\partial X_{0i\alpha}) \Delta X_{i\alpha}$ , который, однако, равен нулю при наличии центра симметрии. Таким образом, (11) соответствует исправленной модели Фрёлиха — Блоха, так как теперь  $\mathcal{H}'$  равен не просто  $\mathcal{H}_1$ , а  $\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 - \mathcal{H}_{2n} + \mathcal{H}_3 + \dots$ , и частоты  $\omega(g)$  в (10) равны частотам в адиабатическом приближении, так как потенциальная энергия колебаний  $U_i(\Delta\mathbf{R})$  равна

$$\frac{1}{2} \sum_{i\alpha j\beta} \frac{\partial^2 E_n^0}{\partial X_{i\alpha} \partial X_{j\beta}} \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} \Delta X_{i\alpha} \Delta X_{j\beta}$$

в соответствии с нулевым приближением адиабатической теории. Оценим порядок членов, входящих в  $\mathcal{H}'$ :  $\mathcal{H}_2 \sim \mathcal{H}_{2n} \sim |\mathcal{H}_2|_{nn} \sim \hbar\omega_D$ , как  $\mathcal{H}_i$ ;  $\mathcal{H}_1 \sim \hbar\omega_D/\kappa$ ; и далее  $\mathcal{H}_s \sim \kappa\mathcal{H}_{s-1}$ . Поправки к энергии  $E_{m\mu}^0$  вычисляются по формулам обычной теории возмущений. Нетрудно видеть, что хотя  $\mathcal{H}_1 \sim \hbar\omega_D/\kappa$  и  $\mathcal{H}_2 \sim \mathcal{H}_{2n} \sim \hbar\omega_D$ , первая поправка к энергии  $E_{nv1}$  будет порядка  $\kappa^2\hbar\omega_D$ , как и в адиабатическом разложении. Действительно, учтем сначала поправку от членов  $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_{2n}$ . Она равна диагональному матричному элементу от  $\mathcal{H}_2$  и  $-\mathcal{H}_{2n}$  и второму приближению от  $\mathcal{H}_1$ , так как  $|\mathcal{H}_1|_{nv; nv} = 0$ :

$$E_{nv1}^I = |\mathcal{H}_2|_{nv; nv} - |\mathcal{H}_{2n}|_{nv; nv} + \sum_{m, \mu} |\mathcal{H}_1|_{nv; m\mu}^2 (E_{nv}^0 - E_{m\mu}^0)^{-1}.$$

Из определения  $\mathcal{H}_2$  следует, что  $|\mathcal{H}_2|_{nv; nv} = 0$ . Поэтому

$$\begin{aligned} E_{nv1}^I &= \sum_{m, \mu} |\mathcal{H}_1|_{nv; m\mu}^2 (E_{nv}^0 - E_{m\mu}^0)^{-1} - \sum_m |\mathcal{H}_1|_{nm}^2 |_{vv} (E_{0n}^0 - E_{0m}^0)^{-1} \equiv \\ &\equiv |\mathcal{H}_1|_{nv}^2 (E_{nv}^0 - \mathcal{H}_0)^{-1} |\mathcal{H}_1|_{nv; nv} - \sum_m |\mathcal{H}_1|_{nm}^2 |_{vv} (E_{0n}^0 - E_{0m}^0)^{-1}. \end{aligned} \quad (14)$$

Из-за недиагональности по  $v$  матричных элементов  $\mathcal{H}_1$  в энергетических знаменателях первого члена в (14) помимо разности  $E_{0n}^0 - E_{0m}^0$  появляются слагаемые  $\pm\hbar\omega_q$ . Поэтому  $E_{nv1}^I$  будет порядка  $\hbar\omega_D |\mathcal{H}_{2n}|_{vv} / \epsilon_F \sim \kappa^2 \hbar\omega_D$  ( $\epsilon_F = \frac{p_F^3}{2m}$  — энергия Ферми). Действительно, подставляя формулу (8) и известные выражения  $\Delta\mathbf{R}_i$  через фононные амплитуды  $b_{q\lambda}$ <sup>14, 16</sup>

$$\begin{aligned} \Delta\mathbf{R}_i &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q\lambda} \mathbf{e}_{q\lambda} (b_{q\lambda} e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_0 i)} + \text{э. с.}) \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{q\lambda}}}, \\ [b_{q\lambda}, b_{q'\lambda'}^+] &= \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{qq'} \end{aligned}$$

( $\mathbf{e}_{q\lambda}$  — единичный вектор поляризации фонона;  $N$  — число ионов в единице объема) в (14), находим первый член в формуле (14):

$$\begin{aligned} E'_{nv1} &= \sum_{\mathbf{k}q\lambda} |M_{\mathbf{k}q\lambda}|^2 [(N_{q\lambda} + 1) (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+q} - \hbar\omega_{q\lambda})^{-1} + \\ &\quad + N_{q\lambda} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+q} + \hbar\omega_{q\lambda})^{-1}] n_{\mathbf{k}} (1 - n_{\mathbf{k}+q}) \end{aligned} \quad (15)$$

и второй член:

$$E''_{nv1} = - \sum_{\mathbf{k}q\lambda} |M_{\mathbf{k}q\lambda}|^2 (2N_{q\lambda} + 1) (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+q})^{-1} n_{\mathbf{k}} (1 - n_{\mathbf{k}+q}). \quad (16)$$

Суммирование по  $\mathbf{R}_0 i$  дает  $\delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+q+g}$ ;  $g$  — умноженный на  $2\pi$  целочисленный вектор обратной решетки; мы будем полагать  $g = 0$ .

Следует заметить, что в (15) учтено электрон-фононное взаимодействие, поэтому  $n_k$  в (16) могут отличаться от (15) на величину  $\sim \kappa^2$ , которой мы здесь пренебрегаем (см. приложение II).

В (15), (16) мы ввели блоховский матричный элемент  $M_{kq\lambda}$ :

$$M_{kq\lambda} = -\sqrt{\frac{\hbar N}{2M\omega_{q\lambda}}} (e_{q\lambda}, U_{k, k+q}). \quad (17)$$

Отсюда получаем

$$\begin{aligned} E_{nv1}^I = \sum_{kq\lambda} |M_{kq\lambda}|^2 n_k (1 - n_{k+q}) (\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q})^{-1} \{ \hbar\omega_{q\lambda} (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k + \hbar\omega_{q\lambda})^{-1} - \\ - 2N_{q\lambda}\hbar^2\omega_{q\lambda}^2 [(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k)^2 - \hbar^2\omega_{q\lambda}^2]^{-1} \}, \quad (18) \\ E_{nv1}^I \sim \kappa^2\hbar\omega_D, \end{aligned}$$

так как

$$M_{kq\lambda} \sim \varepsilon_F a_0/d \sim \kappa\varepsilon_F, \text{ а } \hbar\omega_{q\lambda} (\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q})^{-1} (\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k + \hbar\omega_{q\lambda})^{-1} \sim \hbar\omega_D/\varepsilon_F^2.$$

Таким образом, хотя каждый член в  $E_{nv1}^I$  порядка  $\hbar\omega_D$ , из-за их взаимной компенсации  $E_{nv1}^I$  он оказывается порядка  $\kappa^2\hbar\omega_D$ , как в адиабатической теории возмущений (см. выше). Эта компенсация  $\mathcal{H}_2$  и  $|\mathcal{H}_2|_{nn}$ , а также  $\mathcal{H}_1$  и  $\mathcal{H}_{2n}$ , играет существенную роль не только в первом, но и в более высоких приближениях теории возмущений. Если энергетические знаменатели не будут содержать электронные энергии, а только энергию фона, т. е. будут порядка  $\hbar\omega_D$ , а не  $\varepsilon_F$ , то поскольку  $\mathcal{H}_1 \sim \hbar\omega_D/\kappa$ , а  $\mathcal{H}_2 \sim \sim \mathcal{H}_{2n} \sim \hbar\omega_D$ , в следующих приближениях для  $\mathcal{H}_2$  и  $\mathcal{H}_1$  поправки могут оказаться порядка  $\hbar\omega_D$  (или больше — в случае  $\mathcal{H}_1$ ), а не  $\kappa^2\hbar\omega_D$ . Энергетические знаменатели могут быть порядка  $\hbar\omega_D$  только в том случае, если существуют отличные от нуля матричные элементы  $\mathcal{H}_2$  и  $\mathcal{H}_1$ , диагональные по электронным квантовым числам  $n$  и недиагональные по  $v$ . Из определения  $\mathcal{H}_2$  видно, что  $|\mathcal{H}_2|_{nn} = 0$ ;  $|\mathcal{H}_1|_{nn}$  также равно нулю. Однако оператор второго приближения от  $\mathcal{H}_1$ , равный  $\mathcal{H}_1 (E_{nv}^0 - \mathcal{H}_0)^{-1} \mathcal{H}_1$ , который имеет порядок  $\hbar\omega_D$  (так как  $E_{nv}^0 - \mathcal{H}_0 \sim \varepsilon_F$ ), может иметь отличные от нуля матричные элементы, диагональные по  $n$  и недиагональные по  $v$ . Но такой матричный элемент в любом приближении, как легко видеть, входит лишь в виде разности  $|\mathcal{H}_1 (E_{nv}^0 - \mathcal{H}_0)^{-1} \mathcal{H}_1|_{nn} - \mathcal{H}_{2n}$ , которая, как мы видели, порядка  $\kappa^2\hbar\omega_D$ . Следовательно, и в высших приближениях энергетические знаменатели для  $\mathcal{H}_2$  и  $\mathcal{H}_1$  будут порядка  $\varepsilon_F$ . Что касается высших приближений от  $\mathcal{H}_3$ ,  $\mathcal{H}_4$  и т. д., то они не могут дать поправки порядка  $\hbar\omega_D$ , так как  $\mathcal{H}_3 \sim \kappa\hbar\omega_D$ ,  $\mathcal{H}_4 \sim \kappa^2\hbar\omega_D$  и т. д. Таким образом, вычитание  $U_{2n}$  из  $\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3 + \dots$  в выражении для  $\mathcal{H}_1$  играет весьма важную роль.

Мы вычислили  $E_{nv1}^I$ . Второй член  $E_{nv1}^{\text{II}} \sim \kappa^2\hbar\omega_D$  складывается из пяти слагаемых:

1) первое приближение от  $\mathcal{H}_4$ :  $|\mathcal{H}_4|_{nv; nv}$ ; 2) второе приближение от  $\mathcal{H}_2$ ; 3) первое приближение по  $\mathcal{H}_1$  и первое по  $\mathcal{H}_3$ ; 4) второе приближение по  $\mathcal{H}_1$  (с вычитанием  $\mathcal{H}_{2n}$ ; см. выше) и первое — по  $\mathcal{H}_2$  и 5) четвертое приближение по  $\mathcal{H}_1$  (также с соответствующим вычитанием  $\mathcal{H}_{2n}$  (см. <sup>9</sup>). Следующие поправки  $E_{nv1}$  будут порядка  $\kappa^4\hbar\omega_D$  и выше. Мы видим, что для вычисления энергии  $E_{nv}$  с точностью  $\kappa^2\hbar\omega_D$  мы должны учесть в  $\mathcal{H}'$  (13) все  $\mathcal{H}_s$  вплоть до  $\mathcal{H}_4$ .

Вариация  $E_{nv1}$  по  $N_{q\lambda}$  определяет неадиабатическую поправку к частоте фона —  $\omega_{q\lambda} - \Delta\omega_{q\lambda}$ . Нетрудно видеть, что хотя  $E_{nv1}^I$  дает для

$\Delta\omega_{q\lambda}/\omega_{q\lambda}$  величину порядка  $\kappa^4$ ,  $\Delta E_{nv1}^{\text{II}}$  дает  $\Delta\omega_{q\lambda}/\omega_{q\lambda} \sim \kappa^2$ . Легко видеть также, что поправка к скорости электрона  $v$  на поверхности Ферми  $\partial\Delta\epsilon_p/\partial p|_{p=p_F}$  за счет первого члена (15) в  $E_{nv1}^{\text{I}}$ , как и в расчетах, основанных на модели Фрёлиха<sup>3</sup>, и по обычной адиабатической теории<sup>8</sup> оказывается порядка  $\zeta v_0$ ; здесь  $p_F$  — фермиевский импульс и  $\zeta$  — так называемый параметр Фрёлиха, определяемый по формуле

$$\zeta_\lambda = |M_{\mathbf{k}q\lambda}^3|^2 \frac{Vmp_F}{2\pi^2\hbar^4\omega_{q\lambda}}, \quad (19)$$

$M_{\mathbf{k}q\lambda}^3 = M_{\mathbf{k}q\lambda}$  с учетом экранирования (см. (23)); при акустическом законе дисперсии  $\zeta_l \equiv \zeta = \text{const}$ , индекс  $l$  соответствует продольной ветви.

Такая большая поправка возникает благодаря тому, что энергетические знаменатели в (15) содержат  $\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \pm \hbar\omega_{q\lambda}$  и область  $|\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_D$  вносит существенный вклад в  $v$ .

Силы взаимодействия между электронами через фононы можно найти обычным образом в рамках теории возмущений. Матричный элемент взаимодействия двух электронов с начальными импульсами  $\mathbf{p}_1$  и  $\mathbf{p}_2$  и конечными  $\mathbf{p}_3$  и  $\mathbf{p}_4$ , связанный с обменом виртуальными фононами (если число фононов в начале равно нулю), равен

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2; \mathbf{p}_3 \mathbf{p}_4} &= M_1 + M_2, \\ M_1 &= |\mathcal{H}_1|_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 N_{q\lambda}=0; \mathbf{p}_3 \mathbf{p}_2 N_{q\lambda}=1} \frac{|\mathcal{H}_4|_{\mathbf{p}_3 \mathbf{p}_2 N_{q\lambda}=1; \mathbf{p}_3 \mathbf{p}_4 N_{q\lambda}=0}}{\epsilon_{\mathbf{p}_1} - \epsilon_{\mathbf{p}_3} - \hbar\omega_{q\lambda}} + \\ &+ |\mathcal{H}_1|_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 N_{q\lambda}=0; \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_4 N_{q\lambda}=1} \frac{|\mathcal{H}_4|_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_4 N_{q\lambda}=1; \mathbf{p}_3 \mathbf{p}_4 N_{q\lambda}=0}}{\epsilon_{\mathbf{p}_2} - \epsilon_{\mathbf{p}_4} - \hbar\omega_{q\lambda}}, \\ \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_1 &= \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_4 = \mathbf{q}, \quad \epsilon_{\mathbf{p}_1} - \epsilon_{\mathbf{p}_3} = \epsilon_{\mathbf{p}_4} - \epsilon_{\mathbf{p}_2}, \\ M_2 &= \frac{\sum_{m\mu} |\mathcal{H}_2|_{nv; m\mu} |\mathcal{H}_2|_{m\mu; sv}}{E_{nv}^0 - E_{m\mu}^0} + \\ &+ \sum_{m\mu} \left[ \frac{|\mathcal{H}_2|_{nv; m\mu} |\mathcal{H}_4|_{m\mu; l\lambda} |\mathcal{H}_4|_{l\lambda; sv}}{(E_{nv}^0 - E_{m\mu}^0)(E_{nv}^0 - E_{l\lambda}^0)} + 2 \right] \quad (20) \end{aligned}$$

Члены  $-|\mathcal{H}_2|_{nn}$  и  $-|\mathcal{H}_2|_{nn}$  в  $\mathcal{H}'$ , являющиеся числами по электронным переменным, не вносят никакого вклада в  $M_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2; \mathbf{p}_3 \mathbf{p}_4}$ . Никакой компенсации разных слагаемых, подобной той, которая существовала для поправки к энергии системы, для  $M$  не существует. Второй член, связанный с  $\mathcal{H}_2$ , в  $\kappa^2$  раз меньше, чем  $M_1$ , и им можно пренебречь. Первый же член  $M_1$  совпадает с матричным элементом, который получался в обычной модели Фрёлиха. Если передаваемая энергия  $|\epsilon_{\mathbf{p}_1} - \epsilon_{\mathbf{p}_3}| < \hbar\omega_D$ ,  $M_1$  очень велик:  $\sim \epsilon_F$ , т. е. взаимодействие электронов оказывается существенно неадиабатическим эффектом. Ниже взаимодействие электронов будет рассмотрено точно, а не по теории возмущений (см. выражения (22), (23)).

В матричных элементах  $|\mathcal{H}_s|_{mn}$  и, в частности, в  $M_{\mathbf{k}q\lambda}$  в одночастичном представлении должно быть учтено кулоновское взаимодействие между электронами. Так как кулоновское взаимодействие является немалым, его нельзя учесть по теории возмущений. Правда всего это сделать, пользуясь диаграммной техникой. Как показано в приложении I (фор-

мулы (П.1) — (П.3)), при этом в формулах (8), (9), (15) — (18) следует положить

$$|M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}|^2 = \frac{|M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H|^2}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}\lambda})}, \quad M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H \underset{q \rightarrow 0}{=} -i \frac{4\pi Ze^2}{q} \sqrt{\frac{\hbar N}{2M\omega_{\mathbf{q}\lambda}}} \left( \mathbf{e}_{\mathbf{q}\lambda}, \frac{\mathbf{q}}{q} \right), \quad (21)$$

где  $M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H$  — матричный элемент без учета экранирования, а  $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - V_{c0}(\mathbf{q}) P(\mathbf{q}, \omega)$  — диэлектрическая проницаемость,  $V_{c0} \underset{q \rightarrow 0}{=} \frac{4\pi e^2}{q^2} \rho$ ;  $P(\mathbf{q}, \omega)$  — так называемая поляризационная петля,  $Z$  — заряд иона, объем кристалла  $V$  полагаем равным единице. В (21) можно  $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}\lambda})$  заменить приближенно на  $\varepsilon(\mathbf{q}, 0) = 1 + (\kappa_D^2/q^2)$ . Таким образом, в произведении  $M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}$  один множитель должен браться с учетом экранирования, а другой — без учета экранирования. Выражение для матричного элемента  $|\mathcal{H}_2|_{mn}$  приведено в приложении I (П.8).

Мы вычислили поправку к энергии системы, связанную с электрон-фононным взаимодействием. При этом кулоновское отталкивание между электронами мы рассматривали лишь как причину экранировки электрон-фононного взаимодействия. Однако кулоновское отталкивание вносит, разумеется, и непосредственный вклад в энергию системы. Для вычисления этого вклада проще всего найти полное эффективное взаимодействие между электронами, так называемый четырехполюсник  $V_{\text{eff}}$ . Как показано в приложении I (формулы (П.4) — (П.6)), он равен взаимодействию через фононы, описываемому выражением для  $M_1$  в (20),  $-V'_{ep}$ , экранированному кулоновскому отталкиванию  $V_c$  и смешанному члену  $V_{epc}$ :

$$V_{\text{eff}} = V'_{ep} + V_c + V_{epc}, \quad V'_{ep} = \sum_{\lambda} [|M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H|^2 D_{\lambda}(\omega, \mathbf{q}) / \varepsilon(\mathbf{q}, \omega)], \quad (22)$$

$$V_c = V_{c0}(\mathbf{q}) / \varepsilon(\mathbf{q}, \omega), \quad V_{epc} = V'_{ep} P(\mathbf{q}, \omega) V_c,$$

$$D_{\lambda}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{2\omega_{\mathbf{q}\lambda}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}\lambda}^2 + i\delta}. \quad (23)$$

Так как

$$V'_{ep} + V_{epc} = V_{ep} \equiv \sum_{\lambda} |M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H|^2 (D_{\lambda} \omega, \mathbf{q}),$$

то

$$V_{\text{eff}} = V_c + V_{ep}, \quad M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H = \frac{M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H}{\varepsilon(\mathbf{q}; \omega)};$$

$D_{\lambda}$  — фононная функция Грина.

Таким образом, благодаря наличию смешанного члена, в полное электрон-фононное взаимодействие, получающееся из четырехполюсника после вычитания экранированного кулоновского отталкивания, и в поправку к энергии электрона входит множитель  $|M^H|^2/\varepsilon^2$ , который ведет себя как  $q^2/\omega_q$  при  $q \rightarrow 0$ , а не  $|M^H|^2/\varepsilon$ , как в поправке к энергии фона  $\Pi = |M^H|^2 P / \varepsilon$  (см. (П.2)).

На основе развитой выше обычной теории возмущений, которая основывается на адиабатическом разложении, может быть построена стандартная диаграммная техника; она излагается в приложении II.

Хотя в адиабатической теории, как мы видели, поправки к энергии системы и к вершинам (см. приложение II) представляют собой разложение по степеням  $\kappa^2$ , но из-за неадиабатического поведения электронов в тонком слое толщиной порядка  $\hbar \omega_D$  вблизи поверхности Ферми, поправка к полной  $\Psi$ -функции системы может оказаться немалой. С этим свя-

заны такие неадиабатические эффекты, как большая величина константы взаимодействия электронов через фононы и перенормировка электронной скорости на поверхности Ферми порядка  $\zeta$ .

Как мы видели, оператор возмущения в нашей теории возмущений  $\mathcal{H}'$  (11), (13) имеет сложную структуру, он представляет собой ряд по степеням  $\kappa$  из членов, описывающих электрон-фононное взаимодействие и чисто фононное взаимодействие. Своёобразие оператора  $\mathcal{H}'$  заключается в том, что старший член, входящий в него,  $-\mathcal{H}_1$  — порядка  $\hbar\omega_D/\kappa$  и лишь следующий член — порядка  $\hbar\omega_D$ , тогда как энергия колебаний решетки в нулевом гамильтониане — порядка  $\hbar\omega_D$ . Хотя наибольшая поправка к энергии системы оказывается, тем не менее, порядка  $\kappa^2\hbar\omega_D$ , а следующие слагаемые —  $\kappa^4\hbar\omega_D$  и т. д., т. е. не содержат неадиабатических членов, но более тонкие характеристики металла, определяющиеся непосредственно оператором  $\mathcal{H}_1$  в  $\mathcal{H}'$ : поправка к  $\Psi$ -функции  $\Psi'$ , матричный элемент перехода электрона с излучением фона  $M_{\mathbf{k}q\lambda} (\sim \hbar\omega_D/\kappa)$ , электрон-электронное взаимодействие через виртуальные фононы ( $\sim \varepsilon_F$  при  $|\varepsilon_{\mathbf{p}_3} - \varepsilon_{\mathbf{p}_1}| < \hbar\omega_D$ ), собственноэнергетическая часть  $\Sigma_1 (\sim \hbar\omega_D)$  и перенормировка электронной скорости на поверхности Ферми ( $\sim \zeta$ ) — оказываются большими (см. приложение II). Значения этих неадиабатических величин дополнительно увеличиваются, если они определяются интегралами не по всей ферми- сфере, а главный вклад в них вносит слой неадиабатических электронов толщиной  $\hbar\omega_D$  вблизи ферми-поверхности.

#### 4. МОДЕЛЬ ФРЁЛИХА И УСТОЙЧИВОСТЬ РЕШЕТКИ

Как известно, из расчетов, основанных на модели Фрёлиха, вытекает, что при малых  $q$  перенормированная частота для продольных фононов  $\omega_l(q)$  имеет вид  $\omega_l(q) = \omega_{l0}(q)\sqrt{1 - 2\zeta_0}$ , где  $\zeta_0$  определяется формулой (19) с заменой  $\omega(q)$  на  $\omega_0(q)$ ,  $\omega_0(q)$  — затравочная частота; при этом предполагается, что при  $q \rightarrow 0$   $\omega_0 = u_0 q$ , т. е. что  $\omega_0(q)$  описывается акустическим законом дисперсии. Таким образом, при  $\zeta_0 \geq 1/2$  решетка должна стать неустойчивой. Мы видели выше, однако, что в рамках адиабатической теории фононная частота перенормируется из-за неадиабатических и ангармонических членов лишь на малую величину порядка  $\kappa^2$ .

Отсюда можно сделать вывод о том, что заключение относительно неустойчивости решетки при  $\zeta_0 \geq 1/2$  является иллюзорным<sup>8</sup>. Однако такой вывод нельзя заранее считать полностью обоснованным, так как сама неперенормирующая адиабатическая частота может существенно зависеть от параметра  $\zeta_0$  и при достаточно большой величине  $\zeta_0$  обращаться в нуль.

Действительно, из (7) следует, что адиабатическая силовая матрица  $(\partial^2 E_n^0 / \partial X_{0i\alpha} \partial X_{0j\beta})$  равна сумме положительно определенной матрицы  $|\mathcal{H}_2|_{nn} / (\Delta X_{i\alpha} \Delta X_{j\beta})$  и отрицательно определенной матрицы  $\mathcal{H}_{2n} / (\Delta X_{i\alpha} \Delta X_{j\beta})$  (знаменатели  $E_{0n}^0 - E_{0m}^0$  отрицательны, так как  $E_n^0$  — энергия основного состояния). Используя формулу (9) и известную формулу для частоты<sup>16</sup>

$$\omega_{q\lambda}^2 = \sum_{\alpha\beta} e_{q\lambda\alpha} D_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) e_{q\lambda\beta}, \quad D_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{R}_{0ij}} \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_{0ij}) e^{-i(\mathbf{q}, \mathbf{R}_{0ij})},$$

$$\Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_{0ij}) = \frac{\partial^2 E_n^0}{\partial X_{0i\alpha} \partial X_{0j\beta}}, \quad (24)$$

получаем для продольной частоты выражение

$$\omega_l(q) = \omega_{l0}(q) \sqrt{1 - (\bar{\omega}^2 / \omega_{l0}^2)}, \quad (25)$$

т. е. выражение такого же типа, как в модели Фрёлиха с  $2\zeta_0 = \bar{\omega}^2/\omega_{l0}^2$ .

При этом  $\bar{\omega}^2 = \sum_{\mathbf{k}} \frac{2\omega_{\mathbf{q}\lambda}}{\hbar} |M_{\mathbf{kq}\lambda}|^2 (n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k+q}}) (\epsilon_{\mathbf{k+q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})^{-1} > 0$  и пропорционально величине квадрата модуля матричного элемента электрон-фононного взаимодействия. Однако  $\omega_{l0}^2$  согласно (9) определяется силовой матрицей

$$\left| \frac{\partial^2 \mathcal{H}_{ei}}{\partial X_{0i\alpha} \partial X_{0j\beta}} \right|_{nn} = \sum_{\mathbf{k}} \left| \frac{\partial^2 V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)}{\partial X_{0i\alpha} \partial X_{0j\beta}} \right|_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \delta_{ij} n_{\mathbf{k}} + \frac{\partial^2 V(\mathbf{R}_{0i} - \mathbf{R}_{0j})}{\partial X_{0i\alpha} \partial X_{0j\beta}},$$

т. е. при  $R_{0ij} \neq 0$  эта матрица определяется только кулоновским отталкиванием одних ионов. Так как  $V(\mathbf{R}_{ij})_{R_{ij} \rightarrow \infty} = Z^2 e^2 / R_{ij}$ , то для  $\omega_{l0}$  при малых  $q$  находим из (24), как модели «голых» ионов <sup>10-13, 17-20</sup>,

$$\omega_{l0}^2 = \frac{4\pi Z^2 e^2 N}{M} + a^2 q^2 \quad (26)$$

(член  $a^2 q^2$  связан с поведением  $V(R_{ij})$  при небольших  $R_{ij}$ ). Следовательно,  $\omega_{l0}$  является плазменной ионной частотой и описывается, таким образом, не акустическим, как в модели Фрёлиха, а оптическим законом дисперсии при  $q \rightarrow 0$ . Может ли это привести к обращению  $\omega_l(q)$  в нуль при больших значениях  $\zeta_0$  и к неустойчивости решетки, легко решить, вычислив  $\omega_l(q)$  по формуле (25). Мы проведем этот расчет несколько другим путем, который позволяет одновременно выяснить обоснованность модели Фрёлиха.

Сравнение модели Фрёлиха с адиабатическим приближением в его канонической форме трудно провести; но это легко сделать, если воспользоваться адиабатической теорией в форме обычной квантовомеханической теории возмущений в (10) — (13).

Мы видели, что оператор возмущения  $\tilde{\mathcal{H}}'$  для адиабатической теории согласно (13) существенно отличается от  $\tilde{\mathcal{H}}' = \tilde{\mathcal{H}}_1$  в модели Фрёлиха. Может быть, можно все же найти такой нулевой гамильтониан  $\tilde{\mathcal{H}}_0$ , равный сумме гамильтонианов невзаимодействующих электронного и фононного полей, чтобы оператор возмущения  $\tilde{\mathcal{H}}'$ , равный разности точного гамильтониана (1) и  $\tilde{\mathcal{H}}_0$ , равнялся  $\tilde{\mathcal{H}}_1$ ? Из (1), (10), (13) видно, что это невозможно, т. е. что модель Фрёлиха в буквальной форме не может быть получена из точного гамильтониана (1). Однако можно выбрать  $\tilde{\mathcal{H}}_0$  таким образом, чтобы поправки к энергии системы и энергии возбуждений — порядка  $\hbar\omega_D$  — определялись только членом  $\tilde{\mathcal{H}}_1$ , как в модели Фрёлиха; поправки порядка  $\hbar^2\omega_D$  будут определяться и другими членами в  $\tilde{\mathcal{H}}'$ . Нетрудно видеть, что  $\tilde{\mathcal{H}}_0$  при этом должен иметь вид <sup>9</sup>:

$$\tilde{\mathcal{H}}_0 = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R}_0) + \tilde{\mathcal{H}}_{0i}, \quad \tilde{\mathcal{H}}_{0i} = \mathcal{H}_i + |\mathcal{H}_2|_{nn}, \quad (27)$$

что соответствует существенному иному, чем в (10), выбору силовой матрицы в  $\tilde{\mathcal{H}}_{0i}$ . При этом оператор возмущения равен

$$\tilde{\mathcal{H}}' = \mathcal{H} - \tilde{\mathcal{H}}_0 = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \sum_{s=3}^{\infty} \mathcal{H}_s, \quad (28)$$

и, следовательно, поправка к энергии  $E_{nv1} = \sum_{m\mu} |\mathcal{H}_1|_{nv; m\mu}^2 (E_{nv}^0 - E_{m\mu}^0)^{-1} \sim \sim \hbar\omega_D$ , т. е., действительно, главная поправка  $\sim \hbar\omega_D$  определяется членом  $\mathcal{H}_1$  в  $\tilde{\mathcal{H}}'$ ; остальные члены в (28) дают поправки  $\sim \hbar^2\omega_D$  и выше.

Поскольку мы исходим из точного гамильтониана  $\mathcal{H}$  (1), в отличие от модели Фрёлиха, силовая матрица в  $\mathcal{H}_0$  известна и, как было показано выше, затравочная продольная частота  $\omega_{l0}$  определяется формулой (26). Так как  $\tilde{\mathcal{H}}'$  согласно (28) не содержит малого параметра  $\kappa$ , как в случае (13), мы не можем пользоваться теорией возмущений; но если нас интересуют поправки к энергии возбуждений и энергии системы только порядка  $\hbar\omega_D$ , можно провести суммирование всех существенных графиков, оставив в  $\tilde{\mathcal{H}}'$  лишь член  $\mathcal{H}_1$ . При этом электронная собственно-энергетическая часть  $\Sigma_1$  и фононный поляризационный оператор  $\Pi$  (см. приложение II) будут определяться рис. 6, 7, в которых оставлены только вторые графики, а  $\Sigma_2$  — рис. 8 с одним первым графиком, как в модели «голых» ионов (и модели Фрёлиха). Для  $\Pi_l$ , согласно (21) и (П.2), при этом находим<sup>21, 22</sup>

$$\Pi_l = |M_{\mathbf{k}q_l}^H|^2 P/\varepsilon(\mathbf{q}, \omega_{lq}) = |M_{\mathbf{k}q_l}^H|^2 V_{c0}^{-1}(q) (\varepsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega_{lq}) - 1).$$

При малых  $q$  — это соответствует так называемой модели «желе» —  $M^H$  определяется выражением (П.3). При этом  $|M^H|^2/\varepsilon \underset{q \rightarrow 0}{\sim} 1/\omega_0(q)$ . Поэтому, определяя  $\omega(q)$  из условия  $D^{-1} = D_0^{-1} - \Pi = 0$ , получаем<sup>10</sup>

$$\omega_l^2(q) = \frac{4\pi e^2 Z^2 N}{M} \left( 1 - \frac{s-1}{\varepsilon} \right) + a^2 q^2 \approx \frac{4\pi Z^2 N e^2}{M \varepsilon(\mathbf{q}, 0)} + a^2 q^2 \approx \frac{4\pi e^2 Z^2 N}{M \kappa_D^2} q^2 + a^2 q^2. \quad (29)$$

Можно получить более точное выражение для  $\omega_l(q)$ , если воспользоваться при вычислении  $M^H$  более точным выражением  $V(R_{ij})$ , чем в (П.3), не ограничиваясь приближением большой плотности при расчете  $P$  и вычислять  $M^H$ ,  $V_{c0}$  и  $P$ , применяя блоховские функции, а не плоские волны. При этом частота, определяемая выражением вида (29), с точностью до членов порядка  $\kappa^2 \hbar \omega_D$  будет совпадать с адиабатической частотой. Как известно, из (29) следует существование коновских особенностей для  $\omega(q)$  при  $q = 2p_F$ .

Мы видим, что исходящая из точного гамильтониана системы электронов и ионов модель, наиболее близкая к обычной модели Фрёлиха, совпадает с моделью «голых» ионов, рассматривавшейся ранее независимо от модели Фрёлиха. Нетрудно видеть, что лежащее в основе модели Фрёлиха допущение об акустическом законе дисперсии для затравочных продольных частот и одновременно о виде оператора возмущения  $\tilde{\mathcal{H}}' = \mathcal{H}_1$  фактически основано на предположении о возможности независимого выбора нулевого гамильтониана и оператора возмущения. Однако ясно, что при заданном полном гамильтониане системы независимый выбор  $\mathcal{H}_0$  и  $\tilde{\mathcal{H}}'$  невозможен. Разумеется, выбор нулевого гамильтониана в виде (27) нерационален, так как оператор возмущения, как и в модели Фрёлиха, не содержит малого параметра  $\kappa$  и ввиду этого поправка к  $\omega_{l0}(q)$  и к энергии  $E_{nv}$  оказывается того же порядка, что энергия колебаний решетки в нулевом гамильтониане, а частотам  $\omega_0(q)$  не соответствуют даже положения равновесия ионов — как в адиабатической теории. Если в адиабатической теории фононы уже в нулевом приближении являются «одетыми», то для  $\tilde{\mathcal{H}}_0$  в виде (27) они являются «голыми».

Таким образом, вычитание  $\bar{\omega}^2$  из  $\omega_{l0}^2$  не может привести, как в модели Фрёлиха, к нулевым или мнимым значениям  $\omega_l(q)$ , так как  $\omega_{l0}(q)$  описывается не акустическим, а оптическим законом дисперсии. Характерно, что в (29) входит  $(\varepsilon - 1)/(2\varepsilon) = \kappa_D^2/[2(\kappa_D^2 + q^2)]$ , а не  $\zeta_0$ ; это связано с тем, что во второй график рис. 7 входит  $|M^H|^2/\varepsilon$ , а не  $|M^H|^2 = |M^H|^2/\varepsilon^2$ , как во второй график рис. 6 (см. приложение); поэтому

выражения для  $\Sigma_1$  и  $\Sigma_2$  содержат  $\zeta$  или  $\lambda = \zeta \left( \sum_v u_v^2 q^2 \gamma_v / \omega_v^2(q) \right)_{\text{ср}}$ ; см. (31), (32) и приложение II. Поскольку при любом значении  $\zeta_0$  или  $\zeta$  учет электрон-фононного взаимодействия приводит лишь к переходу от оптического закона дисперсии к акустическому, а не к обращению  $\omega_l(q)$  в нуль, заключение о возможной неустойчивости решетки в рассматриваемом трехмерном случае при больших значениях  $\zeta_0$ , в конечном счете, оказывается необоснованным. Однако этот результат не является универсальным. Для двумерных или одномерных систем положение существенно изменяется. В одномерном случае ионная плазменная частота  $\omega_0 = u_0 q$  и  $\epsilon(\mathbf{q}, 0) \sim \text{const}$ ; можно показать, что при низких температурах<sup>24a</sup> (см. также<sup>24b</sup>)  $2P |M^a|^2 / \epsilon \omega_0 \approx -\tilde{\zeta} \ln(\epsilon_F/T)$ . Поэтому из (25) находим  $\omega = \omega_0 \sqrt{1 - \tilde{\zeta} \ln(\epsilon_F/T)}$ , т. е. при достаточно низкой температуре решетка может стать неустойчивой при любом значении параметра  $\tilde{\zeta}$ .

Как известно, существуют другие вполне реальные механизмы неустойчивости решетки: моттовский переход диэлектрика в металл, так называемое пайерлсовское удвоение, мартенситное превращение в соединениях типа A-15, по своей природе, согласно моделям Лаббе — Фриделя и Горькова<sup>23, 24a</sup>, близкое к пайерлсовскому переходу, и т. д. Переходы последнего типа связаны с тем, что при изменении симметрии решетки выигрывается электронная энергия. Они соответствуют квазидиономерной картине (см. выше) и также приводят к особенностям фононного поляризационного оператора. Однако рассмотрение неустойчивостей и структурных переходов этого типа не входит в задачу настоящей статьи (см. <sup>35</sup>).

Следует заметить, что если даже в противоречии с гамильтонианом (1) принять, что  $\omega_{l0} = u_{l0} q$  при  $q \rightarrow 0$ , для перенормированной частоты получается выражение  $\omega_l(q) = \omega_{l0}(q) \sqrt{1 - (2\zeta_0 \kappa_D^2 / q^2)}$ , а не  $\omega_l(q) = \omega_{l0}(q) \sqrt{1 - 2\zeta_0}$ , так как во второй график рис. 7 входит  $M^{a*} M^a$ , а не  $|M^a|^2$ , как предполагалось в расчетах по модели Фрёлиха. Мы видим, что применение модели Фрёлиха с затравочной акустической продольной частотой и взаимодействием типа  $|M^a|^2$  приводит к некорректным результатам при вычислении фононного спектра.

## 5. ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В НОРМАЛЬНЫХ И СВЕРХПРОВОДЯЩИХ МЕТАЛЛАХ

Остановимся теперь на некоторых вопросах, связанных с сверхпроводимостью металлов. Как показано в приложении II (см. рис. 8), уравнение для спаривательной собственno-энергетической части  $\Sigma_2$ , определяющей сверхпроводящую щель, имеет такой же вид, как в модели Фрёлиха<sup>25</sup>:

$$\left. \begin{aligned} \Sigma_2(\mathbf{p}, \omega_n) &= \frac{T}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda, \omega_{n'}} \int \Gamma_1^\lambda(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{p}-\mathbf{k}) D_\lambda(\mathbf{p} - \mathbf{k}, \omega_n - \omega_{n'}) \times \\ &\times \Gamma_1^\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{k}-\mathbf{p}) F^+(k) d\mathbf{k} \quad (\hbar = 1), \quad D_\lambda(q) = \frac{-2\omega_{q\lambda}}{\omega_n^2 + \omega_{q\lambda}^2}, \\ F^+ &= \frac{\Sigma_2}{(G_0^{-1} - \Sigma_1)(G_0^{-1} - \Sigma_1) + \Sigma_2^2}, \quad \Gamma_1^\lambda = M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^3, \quad \omega_n = (2n + 1)\pi T. \end{aligned} \right\} \quad (30)$$

Нулевая функция Грина  $G_0 = (i\omega_n - \xi)^{-1}$ ;  $\xi$  — энергия свободной частицы, отсчитанная от энергии Ферми;  $G_{0-} = G_0(-\omega_n)$ ,  $\Sigma_{1-} = \Sigma_1(-\omega_n)$ . В формуле (30) в выражение для матричного элемента  $M^a$  и  $D$ -функции

всюду входит реальная фононная частота, совпадающая, как было показано выше, с адиабатической частотой. Нетрудно видеть, однако, что если бы мы не пользовались адиабатической теорией, а исходили бы из гамильтониана  $\tilde{\mathcal{H}}_0$  (27), когда  $M^3$  содержит  $\omega_0(q)$ , а не  $\omega(q)$ , — нулевая частота  $\omega_0(q)$  также выпала бы из уравнения (30) для  $\Sigma_2$  и соответствующего уравнения для  $\Sigma_1$  (см. (32)), и поэтому в  $\Sigma_1$  и  $\Sigma_2$  и в этом случае будет входить параметр  $\zeta$ , а не  $\zeta_0$ . Это объясняется тем, что в такой модели  $D$ -функция имеет вид<sup>34</sup>  $D_F = 2\omega_0(q)/[\omega^2 - \omega^2(q) + i\delta]$ , и, следовательно,  $|M^3(\omega_0)|^2 D_F = |M^3(\omega)|^2 D$ .

Перейдем от интегрирования по  $\theta$  и  $|k|$  к интегрированию по  $q$  и  $\xi$ . Учтем также зависимость  $M^3$  от  $\omega(q)$  при реальном законе дисперсии согласно<sup>7</sup>, при этом из (21) получаем  $p_F m |M_\lambda^3|^2 / (2\pi^2) = -\zeta \gamma_\lambda(q) u_l^2 q^2 / 2\omega_{q\lambda}$ ;  $\gamma_\lambda = (e_{q\lambda}, q/q)^2 \varphi(q)$ ,  $\varphi$  — медленно меняющаяся функция от  $q$ ;  $\varphi(0) = 1$  (см. 26);  $\zeta$  — параметр Фрёлиха, определяющийся уравнением (19). Тогда из (30) находим уравнение<sup>9, 26</sup> для

$$\begin{aligned} \Delta(\omega_n) &= \Sigma_2(\omega_n) / [1 - (if(\omega_n)/\omega_n)], \quad f(\omega_n) = \Sigma_1|_{\omega_n=0} - \Sigma_1(\omega_n) \\ \Delta(\omega_n) &= \frac{\zeta T}{2Z(\omega_n) p_F^2} \sum_{\omega_{n'}} \int_0^{k_1} q dq \sum_{\lambda}^3 [u_l^2 q^2 \gamma_\lambda(q) / \omega_{\lambda}^2(q)] \times \\ &\quad \times \int d\xi \frac{\omega_{\lambda}^2(q)}{\omega_{\lambda}^2(q) + (\omega_n - \omega_{n'})^2} \frac{\Delta(\omega_{n'})}{\omega_{n'}^2 + \xi^2 + \Delta^2(\omega_{n'})}, \quad (31) \\ Z(\omega_n) &= 1 - if(\omega_n)/\omega_n, \quad k_1 = \min(q_0, 2p_F). \end{aligned}$$

Сверхпроводящая щель  $\Delta(T)$ , как известно, определяется из уравнения  $\Delta(\omega)|_{\omega=\Delta(T)} = \Delta(T)$ , где  $\Delta(\omega)$  — аналитическое продолжение  $\Delta(\omega_n)$  к вещественным непрерывным частотам. Из формулы (31) видно, что безразмерной константой взаимодействия является величина

$$\lambda_{\text{eff}} = \zeta \left\langle \sum_v^3 \frac{u_l^2 q^2 \gamma_v}{\omega_v^2(q)} \right\rangle_{\text{cp}} \left( 1 + \frac{f(\omega)}{\omega} \right)^{-1} \Big|_{\omega=\Delta(T)},$$

причем среднее берется по фононному спектру, а значение  $f(\omega)/\omega|_{\omega=\Delta(T)}$  близко к  $f(\omega)/\omega|_{\omega=0}$ , так как  $\Delta(T) \ll \omega_D$ .

При акустическом законе дисперсии для  $\omega_l(q)$  в случае нормального металла при  $T=0$   $f(\omega)$  имеет вид<sup>9</sup>

$$\text{Re } f(\omega) = \frac{\zeta}{4p_F^2} \int_0^{k_1} \omega(q) \ln \left| \frac{\omega + \omega(q)}{\omega - \omega(q)} \right| q dq,$$

при  $\omega \ll \omega_D$   $\text{Re } f = \zeta \omega k_1^4 / 4p_F^2 \equiv b\omega$ , при  $\omega \gg \omega_D$   $\text{Re } f = \zeta u^2 k_1^4 / 8p_F^2 \omega$ ,

$$\text{Im } f = \begin{cases} \pi \zeta \omega^3 / 12p_F^2 u^2, & \sqrt{\frac{m}{M}} \omega_D \ll |\omega| < \omega_D, \\ \pi \zeta u k_1^3 \text{sgn } \omega / 12p_F^2, & |\omega| > \omega_D. \end{cases} \quad (32)$$

$q_0$  — максимальный фононный импульс,  $u$  — скорость звука. Если пользоваться реальным законом дисперсии, то параметр  $\zeta$  заменяется величиной  $\lambda = \zeta \langle \sum_v u_l^2 q^2 \gamma_v / \omega_v^2(q) \rangle_{\text{cp}}$ <sup>26, 27</sup>. В случае сверхпроводника поправка для  $f(\omega)$  будет порядка  $\Delta^2/\omega_D^2$ .

Таким образом, безразмерная эффективная константа взаимодействия оказывается равной  $\lambda_{\text{eff}} = \lambda/(1 + \lambda)$ . Эта замена является следствием перенормировки  $\Sigma_1$  и  $\Sigma_2$ .

Мы видим, что поскольку выражение для  $|M^a|^2 D$  содержит только реальную фононную частоту, параметр  $\zeta_0$  не входит в уравнение для щели и, следовательно, в выражение для критической температуры  $T_k$ . При акустическом законе дисперсии в уравнение (31) входит  $\zeta$ , а при реальном законе дисперсии —  $\lambda$ . Поэтому верхний предел для  $T_k$ , очевидно, не может быть связан с максимальным значением  $\zeta_0$ , равным  $1/2$ , как ранее предполагалось. Помимо того, что такое максимальное значение не существует, даже в случае слабой связи ( $\zeta \ll 1$ ) и акустического закона дисперсии для фононной (реальной) частоты  $T_k$  будет определяться формулой  $T_k = 1,14 \hbar \omega_D e^{-1/\zeta}$ , а не  $T_k = 1,14 \hbar \omega_D e^{-1/\zeta_0}$ . При реальном законе дисперсии  $\zeta$  заменяется величиной  $\lambda = \zeta \langle \sum_v [u_v^2 q^2 \gamma_v / \omega_v^2(q)] \rangle_{\text{ср}}$  (см. выше).

В случае же сильной связи, как мы видели, из-за перенормировки  $\Sigma_2$  и  $\Sigma_1$ , параметром взаимодействия является вместо  $\lambda$  величина  $\lambda_{\text{eff}} = \lambda/(1 + \lambda)$ , которая даже при  $\lambda \rightarrow \infty$  стремится к единице. Эта константа согласно<sup>7</sup> и определяет критическую температуру (см. также<sup>28</sup>). Наличие верхнего предела для  $\lambda_{\text{eff}}$ , равного единице, является главной причиной верхнего предела для  $T_k$ . В (30), (31) не рассматривался эффект кулоновского отталкивания, уменьшающего  $T_k$ , учет его не представляет труда (см. <sup>7</sup>).

Отметим одну особенность поведения скорости электронов на поверхности Ферми и критической температуры в зависимости от плотности электронов  $n$ . Согласно (32)  $\text{Re } \Sigma_1$  и  $\text{Im } \Sigma_1$  обнаруживают неаналитическое поведение в точке  $q_0 = 2p_F$ ,  $p_F \sim \hbar \sqrt[3]{n}$ . Эта особенность является особенностью типа коновской, но не для поляризационного оператора  $\Pi$  (и, следовательно, для  $\omega(q)$ ), а для электронного массового оператора  $\Sigma_1$ , и притом как функции параметра  $p_F$ , а не переменной  $\omega$  ( $\Pi$ , как известно, имеет особенность по переменной  $q$ ). Аналогичная зависимость для  $\Sigma_1$  получается и в эйнштейновской модели с одной частотой<sup>26</sup> и в случае реального фононного спектра из-за верхнего предела  $k_1$  в (32). В действительности имеется еще кулоновское отталкивание, поэтому  $b = b_{ph} + b_c$ . Неаналитическая зависимость  $b$ , а следовательно, и скорости  $v = v_0/(1 + b)$  на поверхности Ферми и эффективной массы  $m^*$  от  $p_F \sim \hbar n^{1/3}$ , т. е. разрыв производных  $db/dn = dm^*/dn$ , может экспериментально наблюдаться при изменении плотности электронов  $n$  (например, при введении примесей) в туннельных экспериментах Томаша и Роуэлла, в измерениях теплоемкости и циклотронной массы. Такая же особенность коновского типа возникает и для  $\Sigma_2$  согласно уравнению (31) из-за верхнего предела  $k_1$  интеграла в (31), т. е.  $\Sigma_2$  также обладает неаналитической зависимостью от  $n$  в точке  $q_0 = 2p_F$ . В работе<sup>26</sup> был найден максимум критической температуры  $T_k$  как функции  $n$  в эйнштейновской модели, являющийся следствием этой особенности (см. также<sup>29</sup>). Такая же неаналитическая зависимость  $\Sigma_2$  и  $T_k$  должна наблюдаться и в случае реального фононного спектра. Учет анизотропии и процессов переброса несколько сглаживает эту особенность для  $\Sigma_1$  и  $\Sigma_2$ . Возможно, что наблюдаемая в экспериментах<sup>30</sup> немонотонная зависимость  $T_k$  от давления при введении примесей связана не только с изменением топологии поверхности Ферми, но и с этой особенностью коновского типа.

В заключение остановимся на вопросе о проводимости нормальных металлов. На основе канонической адиабатической теории возмущений матричный элемент перехода электрона из состояния  $k$  в состояние  $k'$

с поглощением или испусканием фона на  $A^{\text{ad}}$  согласно<sup>2</sup> (см. также<sup>3</sup>) равен

$$|A_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\text{ad}}|_{N_{\mathbf{q}\lambda}, N_{\mathbf{q}\lambda} \mp 1} = \mp \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}\lambda}}{\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}} M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda} (N_{\mathbf{q}\lambda} + 1/2 \mp 1/2) \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} \mp \mathbf{q} + \mathbf{g}} = \\ = \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}\lambda}}{\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}} U_{\mathbf{k}N_{\mathbf{q}\lambda}; \mathbf{k}'N_{\mathbf{q}\lambda} \mp 1}^B. \quad (33)$$

где  $U^B$  — матричный элемент в модели Блоха. Так как  $\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar\omega_{\mathbf{q}\lambda}$ , то  $A^{\text{ad}} = U^B$ . Таким образом, теория проводимости, в которой применяется нестрогая модель Блоха, оказывается вполне корректной. Тот же результат получается, разумеется, если пользоваться обычной теорией возмущений, основанной на адиабатическом разложении согласно (10) — (13).  $M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}$  в (33) определяется формулами (8), (17), соответствующими так называемой модели жесткого иона. Как показано в приложении II (П.7), этот матричный элемент  $M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}$  для реального процесса связан с матричным элементом  $M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H$  без учета экранирования соотношением<sup>11, 31</sup>

$$M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda} = M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H / \varepsilon(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}}) \approx M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H / \varepsilon(\mathbf{q}, 0), \\ M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H \approx \frac{4\pi Z e^2}{i_q} \sqrt{\frac{N\hbar}{2M\omega_{\mathbf{q}\lambda}}} \left( e_{\mathbf{q}\lambda}, \frac{\mathbf{q}}{q} \right).$$

Пропорциональность  $M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}$  величине  $q/\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}}$  при  $q \rightarrow 0$ , учитывавшаяся с самого начала в теории проводимости Блоха, является непосредственным следствием экранировки, т. е. кулоновского взаимодействия электронов. Таким образом, кулоновское отталкивание между электронами фактически всегда принималось во внимание в теории Блоха, хотя обычно считается, что взаимодействие между электронами в теории проводимости в ее обычной формулировке не учитывается.

## 6. ПРИМЕНЕНИЕ К ТЕОРИИ МОЛЕКУЛ

Обычная теория возмущений на основе адиабатической теории, развитая в гл. 5, и основанная на ней диаграммная техника (см. приложение II) могут быть полностью применены и в теории молекул, если отсутствует вырождение или квазивырождение электронных состояний (эффекты Яна — Теллера и Реннера); в последнем случае следует пользоваться обычной формой адиабатической теории. В случае молекул имеются, однако, некоторые отличия: 1)  $\mathcal{H}_i$ , как известно, может быть представлена в виде суммы  $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_{\text{vib}} + \mathcal{H}_{\text{rot}}$ , где  $\mathcal{H}_{\text{vib}}$  — кинетическая энергия колебаний, а  $\mathcal{H}_{\text{rot}}(\Omega, \mathbf{R})$  — вращательная энергия (в движущейся системе координат;  $\Omega$  — совокупность углов Эйлера); 2) в полную энергию взаимодействия  $\mathcal{H}_{ei}$  предполагаются включенными релятивистские члены и 3) роль параметров  $\varepsilon_F$  и  $\omega_D$  играют  $\varepsilon_{el}$  и  $\omega_0$  ( $\hbar\omega_0$  — величина вибрационного кванта). Энергия вращения может быть записана в виде суммы  $\mathcal{H}_{\text{rot}} = \mathcal{H}_{\text{rot}}^0(\Omega, \mathbf{R}_{0n}) + \mathcal{H}'_{\text{rot}}(\Omega, \Delta\mathbf{R})$  ( $\mathbf{R}_{0n}$  теперь существенно зависит от электронного квантового числа  $n$ ). Очевидно,  $\mathcal{H}_{\text{rot}}^0$  следует включить в нулевой гамильтониан  $\mathcal{H}_0$ , а  $\mathcal{H}'_{\text{rot}}$  — в  $\mathcal{H}'$ . Поэтому в случае молекул (10), (11), (13) заменяются следующими выражениями:

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{0n}) + \mathcal{H}_{\text{vib}} + U_{2n} + \mathcal{H}_{\text{rot}}^0, \quad (34) \\ \mathcal{H}' = \mathcal{H}_i + \overline{\mathcal{H}}_2 - \mathcal{H}_{2n} + \sum_{s=3}^{\infty} \mathcal{H}_s + \mathcal{H}'_{\text{rot}}, \\ \mathcal{H}'_{\text{rot}} = \sum_{s=1} \mathcal{H}_{\text{rot}}^{(s)}, \quad \mathcal{H}_{\text{rot}}^{(s)} \sim \kappa \mathcal{H}_{\text{rot}}^{(s-1)}, \quad \mathcal{H}_{\text{rot}}^{(1)} = \sum_{i\alpha} \frac{\partial \mathcal{H}_{\text{rot}}}{\partial X_{0i\alpha}} \Delta X_{i\alpha} \sim \kappa^3 \hbar \omega_0.$$

Ввиду этого  $\Psi$ -функция нулевого приближения представляет произведение электронной, колебательной и вращательной функций:  $\Psi_{n\nu j}^0 = \Psi_n^0(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{0n}) \Psi_{n\nu}^0(\Delta \mathbf{R}) \Psi_{n\nu j}^0(\Omega)$ . После этого, как и в гл. 3, может применяться аппарат обычной теории возмущений, что по сравнению с адабатической теорией в прежней форме представляет существенное преимущество для применений, в частности, при вычислении вероятностей оптических переходов с любой точностью и переходов с испусканием вибрационных и ротационных квантов. При этом теория возмущений, как и в гл. 3, строится для  $n$ -го электронного состояния, причем предполагается, что оно соответствует связанному состоянию молекулы. Ввиду того, что нижний участок спектра — дискретный, в случае молекул отсутствуют трудности, связанные в случае металла со слоем неадиабатических электронов. В частности, поправка к  $\Psi$ -функции системы:  $\Psi'_{n\nu j} = \sum_{n'\nu'j'} |\mathcal{H}'|_{n\nu j, n'\nu'j'} (E_{n\nu j}^0 - E_{n'\nu'j'}^0)^{-1} \Psi_{n'\nu'j'}^0$  будет порядка  $\omega_0$ , так как хотя  $\mathcal{H}' \sim \mathcal{H}_1 \sim \omega_0/\kappa$ , но  $(E_{n\nu j}^0 - E_{n'\nu'j'}^0)_{\text{ср}} \sim \epsilon_{el}$ .

Рассматриваемая теория возмущений с соответствующими изменениями может быть использована и в теории ядра — в так называемой обобщенной модели ядра для описания взаимодействия нуклонных (быстрых) степеней свободы с коллективными колебательными и вращательными (медленными).

В заключение выражают благодарность Е. Г. Бровману и В. З. Крессину за интересную дискуссию.

#### ПРИЛОЖЕНИЕ

##### I. УЧЕТ ЭКРАНИРОВАНИЯ В ЭЛЕКТРОН-ФОНОННЫХ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ

При переходе в матричных элементах  $|\mathcal{H}_i|_{n\lambda m}$  и, в частности, в  $M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H$  к одиночественному представлению мы должны точно учесть кулоновское взаимодействие. Чтобы выяснить этот вопрос, найдем поправку к  $\omega_{\mathbf{q}\lambda}$ , связанную с  $E'_{n\nu 1}$ , т. е.

$$\Delta\omega'_{\mathbf{q}\lambda} = \frac{\delta E'_{n\nu 1}}{\delta N_{\mathbf{q}\lambda}} = \sum_{\mathbf{k}} |M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}|^2 \left[ \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}\lambda}} + \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}\lambda}} \right] n_{\mathbf{k}} (1 - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}).$$

Заменяя во втором слагаемом  $\mathbf{k}$  на  $-\mathbf{k} - \mathbf{q}$ , получаем

$$\Delta\omega'_{\mathbf{q}\lambda} = \sum_{\mathbf{k}} |M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}|^2 \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}\lambda}}. \quad (\text{П.1})$$

С другой стороны, если применять диаграммную технику,  $\omega_{\mathbf{q}\lambda}$  находится как полюс фононной функции Грина  $D_{\lambda}(\omega, \mathbf{q})$  (учитывающей только график, соответствующий  $E'_{n\nu 1}$ ):  $D_{\lambda}^{-1} = D_{\lambda 0}^{-1} - \Pi_{\lambda} = 0$ ,  $D_{\lambda 0} = 2\omega_{\mathbf{q}\lambda 0}/(\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}\lambda 0}^2 + i\delta)$  — нулевая  $D$ -функция, т. е. при  $\mathcal{H}' = 0$  в предположении, что  $\mathcal{H}' = \mathcal{H}_1$ ;  $\Pi_{\lambda}(\mathbf{q}, \omega)$  — фононный

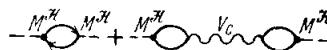


Рис. 1.

поляризационный оператор. Отсюда в рамках теории возмущений находим  $\Delta\omega_{\mathbf{q}\lambda} = \Pi_{\lambda}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}\lambda})$ . Если ввести матричный элемент  $M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H$  (вершину  $\Gamma_1^H$ ), в котором не учитывается экранирование, связанное с кулоновским взаимодействием электронов, то<sup>21,22</sup> (рис. 1)

$$\Pi_{\lambda} = M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^{H*} P M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H + M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^{H*} P V_c P M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H = M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^{H*} P M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H, \quad (\text{П.2})$$

где

$$M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^{\theta} = \frac{M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}\lambda})}, \quad \varepsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 - V_{c0}(\mathbf{q}) P(\mathbf{q}, \omega),$$

$$V_{c0} = \int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \frac{e^2}{r} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \underset{q \rightarrow 0}{\approx} \frac{4\pi e^2}{q^2}, \quad V_c = \frac{V_{c0}}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)}$$

и поляризационная петля — в приближении хаотических фаз (большой плотности;  $G$  — электронная функция Грина):

$$P = i \int G(p) G(p+q) \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{k}}}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \omega};$$

Сравнивая (П.1) и (П.2), мы видим, что в (8), (9), (15) — (18)  $|M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H|^2$  следует приравнять  $|M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H|^2/\varepsilon(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}\lambda})$ . При малых  $q \ll \sqrt[3]{n} M^H$  будет, очевидно, таким же, как для свободных электронов, т. е. при  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx 1$

$$M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H \underset{q \rightarrow 0}{=} -i \frac{4\pi Z e^2}{q} \sqrt{\frac{\hbar N}{2M\omega_{\mathbf{q}\lambda}}} \left( \mathbf{e}_{\mathbf{q}\lambda} \cdot \frac{\mathbf{q}}{q} \right),$$

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega_q) \approx \varepsilon(\mathbf{q}, 0) = 1 + \frac{\kappa_D^2}{q^2}.$$

Поэтому

$$\frac{|M_{\mathbf{k}\mathbf{q}l}^H|^2}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}l})} \underset{q \rightarrow 0}{\rightarrow} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}l}} \quad (\mathbf{e}_{\mathbf{q}l} \parallel \mathbf{q}), \quad \frac{|M_{\mathbf{k}\mathbf{q}t}^H|^2}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}t})} \underset{q \rightarrow 0}{\rightarrow} 0 \quad (\mathbf{e}_{\mathbf{q}t} \perp \mathbf{q}), \quad (\text{П.3})$$

$\kappa_D^{-1}$  — дебаевский радиус. Тот же результат получается, если вычислять  $\Delta\varepsilon_p$ . Нетрудно видеть, что при  $N_{\mathbf{q}\lambda} = 0$   $E'_{\mathbf{p}\mathbf{p}1}$  (записанную в симметричной форме) можно рассматривать как поправку к энергии системы, связанную с взаимодействием между электронами, вида

$$V'_{ep} = \sum_{\lambda} |M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H|^2 \left[ \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}\lambda}} - \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}\lambda}} \right] =$$

$$= \sum_{\lambda} |M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H|^2 D_{\lambda}(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}, \mathbf{q}).$$

В рамках же диаграммной техники четырехполюсник  $V'_{ep}$  с учетом экранирования описывается выражением (соответствующим обычному сабиранию графиков в одну сторону, как в (П.2))

$$V'_{ep} = \sum_{\lambda} M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^{H*} D_{\lambda} M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^{\theta}.$$

Таким образом, мы вновь находим  $|M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H|^2 = |M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H|^2/\varepsilon(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}\lambda})$ . Электронный массовый оператор в символической записи равен  $\Sigma'_{ep} = (V'_{ep} G)$  ( $G$  — электронная функция Грина). Очевидно, и в  $\mathcal{H}_{2n}$ , и в  $|\mathcal{H}_2|_{nn}$  следует положить  $|M|^2 = |M^H|^2/\varepsilon$ .

При вычислении  $\Delta\varepsilon_p$  и  $\Sigma_1$  обычно, однако, рассматривается сразу не только вклад электрон-фононного взаимодействия (с учетом кулоновского экранирования), но и непосредственный вклад кулоновского отталкивания.

Тогда полный четырехполюсник  $V = V_{\text{eff}}$  будет равен

$$V = V'_{ep} + V_c + V_{epc}, \quad (\text{П.4})$$

где  $V_c = V_{c0}/(1 - P V_{c0})$  и смешанный член  $V_{epc} = V'_{ep} P V_c$ .

Из (П.4) находим

$$V = V_c + V_{ep}, \quad V_{ep} = \sum_{\lambda} M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^{\theta*} D_{\lambda} M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^{\theta}. \quad (\text{П.5})$$

Выражение (П.5) совпадает с известным выражением для  $V$ , которое получается суммированием геометрической прогрессии<sup>11, 21, 22</sup>:

$$V = \frac{V_0}{1 - PV_0}. \quad V_0 = V_{c0} + \sum_{\lambda} |M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H|^2 D_{\lambda 0}. \quad (\text{П.6})$$

Учитывая, что  $D^{-1} = D_0^{-1} - \Pi$ , из (П.5) и (П.2) находим (П.6). При малых  $q$   $|M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H|^2 \sim \sim q^2/\omega_{\mathbf{q}\lambda}$ . Массовый оператор  $\Sigma_1 = (VG) = \Sigma_c + \Sigma_{ep}$ ,  $\Sigma_c = (V_c G)$ ,  $\Sigma_{ep} = = (\sum_{\lambda} |M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H|^2 D_{\lambda 0}) G$ . Обычно  $\Sigma_c$  рассматривается как вклад в  $\Sigma_1$  кулоновского взаимодействия, и ввиду этого  $\Sigma_{ep}$ , а не  $\Sigma'_{ep}$  — как вклад взаимодействия между электронами через фононы. В  $V_{ep}$  и  $\Sigma_{ep}$ , в отличие от  $V'_{ep}$  и  $\Sigma'_{ep}$ , входит не  $M^H M^*$ , а  $|M^H|^2$ . Таким образом, если при вычислении  $\Pi$  в одной электрон-фононной вершине экранирование учитывается, а в другой — нет, то при вычислении  $\Sigma_{ep}$  экранирование должно учитываться в обеих вершинах. Выше при вычислении  $\Sigma_1$  и  $\Pi$  мы рассматривали лишь слагаемые, связанные с членом  $\mathcal{H}_1$  в  $\mathcal{H}'$  и не рассматривали остальных членов. Разумеется, они тоже должны быть учтены (см. ниже). В теорию проводимости входит матричный элемент  $|\mathcal{H}_1|_{nv, m\mu}$ , или в одночастичном представлении —  $M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}$  для реального процесса — перехода электрона из состояния  $\mathbf{k}$  в  $\mathbf{k}'$  с испусканием или поглощением фона. Очевидно, в этом случае (см. 11, 13, 30)  $M^r = = M^H/\epsilon(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}})$ . Этот результат вытекает из известного уравнения для электронного матричного элемента в поле с учетом взаимодействия между электронами, которое в символической форме имеет вид<sup>32</sup> (рис. 2)

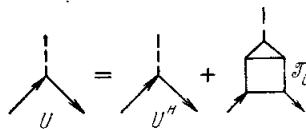


Рис. 2.

$$U = U^H + T_c G G U. \quad (\text{П.7})$$

$\mathcal{T}_c$  — четырехполюсник для кулоновского взаимодействия между электронами, неприводимый по стрелкам противоположного направления, который в приближении большой плотности можно принять равным матричному элементу кулоновского потенциала  $V_{c0}$ ; при малых  $q$   $V_{c0} \approx 4\pi e^2/q^2$ ,  $U^H$  — матричный элемент без учета взаимодействия; так как  $(GG) = P$ , то из (П.7) находим  $U = U^H/(1 - V_{c0}P)$ , откуда

$$M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^r = \frac{M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}^H}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}})}.$$

Мы видим, что согласно адиабатической теории  $M_{\mathbf{k}\mathbf{q}\lambda}$  соответствует модели жесткого иона.

Матричный элемент  $|\mathcal{H}_2|_{nv, m\mu}$  равен<sup>9</sup>

$$\frac{\hbar}{2M \sqrt{\omega_{\mathbf{q}_1\lambda_1} \omega_{\mathbf{q}_2\lambda_2}}} L_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda_1\lambda_2}, \quad L_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\lambda_1\lambda_2} = \sum_{\alpha\beta} e_{\mathbf{q}_1\lambda_1\alpha} e_{\mathbf{q}_2\lambda_2\beta} \int \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_j) \frac{\partial^2 V(\mathbf{r}_j)}{\partial x_{\alpha} \partial x_{\beta}} \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j.$$

Из (П.7) находим  $L^H = L^H/\epsilon(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{q}})$ ,  $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{g}$ ,  $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_{\mathbf{q}_1\lambda_1} + \omega_{\mathbf{q}_2\lambda_2}$ , при малых  $\mathbf{q}$ , очевидно (полагаем  $\mathbf{g} = 0$ ),

$$L_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^H \approx (e_{\mathbf{q}_1\lambda_1}, \mathbf{q}) (e_{\mathbf{q}_2\lambda_2}, \mathbf{q}) \frac{4\pi Ze^2}{q^2}, \quad \mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}. \quad (\text{П.8})$$

## II. ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА В АДИАБАТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ

На основе обычной теории возмущений легко может быть развита стандартная диаграммная техника<sup>9</sup>. Очевидно, каждому из членов  $\mathcal{H}_s$  в  $\mathcal{H}'$  соответствуют, как указано на рис. 3, вершинные части  $\Gamma_s^{\lambda}$  с числом фононных концов, равным индексу  $s$  (одним, двумя и т. д.), и двумя электронными концами, либо без электронных концов (благодаря члену  $V(\mathbf{R}, \mathbf{R})$  в  $\mathcal{H}_{ei}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ ; поляризационный индекс  $\lambda$  мы будем часто

опускать);  $\Gamma_s \sim \chi \Gamma_{s-1}$ . Таким образом,  $\Gamma_s = \Gamma_{s2} + \Gamma_{s0}$  (второй индекс равен числу электронных концов; на рис. 3 не указано распадение вершины  $\Gamma_s$  на  $\Gamma_{s2}$  и  $\Gamma_{s0}$ ).

Член  $-U_{2n}$  в  $\mathcal{H}'$  дает вклад не только в фононный поляризационный оператор  $\Pi$ , но и в электронный массовый оператор, так как  $-U_{2n}$  определяемая им часть

поправки к энергии  $E_{nvi}$  является функционалом от  $n_{\mathbf{k}}$  и ввиду этого вносит вклад в поправку (независящую от частоты) к энергии электрона  $\Delta \epsilon_p^{(i)} = \delta E_{nvi} / \delta n_{\mathbf{p}}$ , а следовательно, и в  $\Sigma_1$ . Таким образом, вклад  $-U_{2n}$  в  $\Sigma_1$  может быть учтен при помощи формулы  $\Delta \epsilon_p'' = -\delta E_{nvi}'' / \delta n_{\mathbf{p}}$ <sup>9</sup>. Прямая проверка показывает, что те же результаты для  $\Sigma_1$  и  $\Pi$  получаются, если в выражении для  $U_{2n}$  (12), (9) величина  $n_{\mathbf{p}}$ , т. е. среднее значение диагонального по числам заполнения оператора  $a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}}$  в представлении неподвижных ионов, заменяется самим оператором  $a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}}$ . Хотя, разумеется,  $a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} \neq n_{\mathbf{p}} \equiv \langle a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} \rangle_e$ , такой прием приводит к правильным результатам, если в графиках для  $\Sigma_1$  и  $\Pi$  не учитывать все усложнения, связанные с электронными концами вершины  $\Gamma_2'$ , соответствующей члену  $-\mathcal{H}_{2n}$  в  $\mathcal{H}'$ , и  $\Gamma_2''$ , соответствующей члену  $-\|\mathcal{H}_2\|_{nn}$ . (Это означает, что оператор  $a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}}$  берется в представлении неподвижных ионов, отвечающих нулевому гамильтониану<sup>33</sup>.) Вершины  $\Gamma_2'$  и  $\Gamma_2'' = \Gamma_{22} + \Gamma_{20}''$  указаны на рис. 4\*). Нетрудно показать, пользуясь формулой<sup>34</sup>

$$\langle a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} \rangle = -2i \lim_{t \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{\infty} G(\mathbf{p}, \omega) e^{i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi},$$

что

$$\langle a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} \rangle - \langle a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} \rangle_e \approx -2i \lim_{t \rightarrow +0} \int_{-\infty}^{\infty} \Sigma_1 G^2 e^{i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} \sim \frac{\omega_D}{\epsilon_F} \sim \chi^2$$

так как  $\Sigma_1 \sim \omega_D$ ; см. (32).

В работе<sup>33</sup> для сравнения с теорией возмущений и приведения подобных членов в выражении для  $-\mathcal{H}_{2n}$  оставлялся равный нулю член с  $n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}'}$  (см. (9)) и соответствующая вершина  $\Gamma_{24}'$ , не указанная на рис. 4. Мы объединили в (13)  $\mathcal{H}_2$  и  $|\mathcal{H}_2|_{nn}$  в  $\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_2 - |\mathcal{H}_2|_{nn}$ . Поэтому целесообразно ввести вершину  $\bar{\Gamma}_2 = \Gamma_2 + \Gamma_2''$ . Если не учитывать усложнений вершины  $\Gamma_2$ , т. е. в приближении  $\hbar \omega_D$  для  $\Sigma_1$  и  $\Pi$  (эти усложнения дают величины порядка  $\chi^2 \hbar \omega_D$ ; ввиду этого третий член в графиках рис. 6 и 7 для  $\Sigma_1$  и  $\Pi$  дают величины  $\sim \chi^2 \hbar \omega_D$ ; см. ниже)  $\Gamma_2''(p, p; q, q) = -\Gamma_2(p, p; q, q)$ , т. е.  $\bar{\Gamma}_2(p, p; q, q) = 0$ .

Графические уравнения для вершин с точностью до  $\sim \chi^2$  указаны на рис. 5 (аналогичный вид имеют поправки к вершинам  $\Gamma_3$  и т. д.). Из рис. 5 видно, что помимо поправки  $\delta \Gamma_1^{(1)}$  к  $\Gamma_1$  порядка  $\chi^2 \Gamma_1$ , рассмотренной в работе<sup>3</sup>, возникают поправки, изображаемые двумя последними слагаемыми — также порядка  $\chi^2 \Gamma_1 (\delta \Gamma_1^{(2)} \sim \Sigma_1 \Gamma_2 / \Gamma_1 \sim \chi^2 \Gamma_1; \delta \Gamma_1^{(3)} \sim \Gamma_3 \sim \chi^2 \Gamma_1; \delta \Gamma_1^{(2)} \sim \delta \Gamma_2^{(3)} \sim \chi^2 \Gamma_2)$ ,  $D$  — фононная функция Грина,  $F$  —  $F$ -функция. Уравнения для  $\Sigma_1$ ,  $\Pi$  и спаривательной собственно-энергетической части  $\Sigma_2$ , учитывающие электрон-фононное взаимодействие (но не учитываящие  $V_C$ ), указаны на рис. 6—8. При этом мы ограничились приближением  $\chi^2 \hbar \omega_D$ . На рис. 6—8  $\Gamma_s^H$  — вершина  $\Gamma_s$  без учета экранирования, а  $\Gamma_s \equiv \Gamma_s^H$  — с учетом экранирования (см. выше). В четвертом графике рис. 6 и втором — рис. 8 обе вершины  $\Gamma_2$  — с учетом экранирования, так как соответствующий электронный четырехполюсник  $V_{2ep}$  ( $\Sigma_1^{(4)} = (V_{2ep} G)$ ) так же, как в (П.4), равен сумме члена  $V_{ep}' = \Gamma_2^H D D \Gamma_2$  и смешанного члена  $V_{2ep}^* V_C$ , которая равна  $V_{2ep} = \Gamma_2 D D \Gamma_2$ . Четвертый же график рис. 7 может быть записан как  $\Pi^{(4)} = (WD)$ , причем фононный четырехполюсник  $W$

\*<sup>33</sup> В работе<sup>33</sup> вершина  $\Gamma_2'$  обозначалась как  $\Gamma_2''$ , и наоборот.

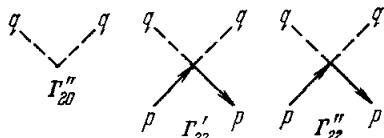


Рис. 4.

определяется уравнением, аналогичным (П.2):

$$W = \Gamma_2^H P \Gamma_2^H + \Gamma_2^H P V_c P \Gamma_2^H = \Gamma_2^H P \Gamma_2.$$

В работах <sup>9, 27, 33</sup> на рис. 6—8 были включены еще графики порядка  $\kappa^2 \hbar \omega_D$ , указанные для  $\Sigma_1$  на рис. 9, и аналогичные графики для  $\Pi$  и  $\Sigma_2$ . При этом предполага-

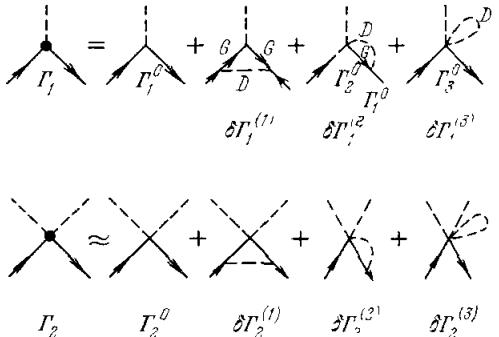


Рис. 5.

лось, что в вершинах  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_2$  не учитываются усложнения, связанные с другими вершинами. При последовательном подходе эти усложнения (два последние графика на рис. 5) следует учитывать наряду с усложнениями, описываемыми вторыми графиками

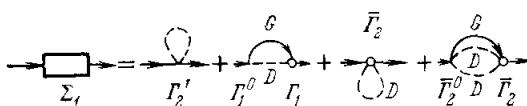


Рис. 6.

на рис. 5. При этом графики рис. 9 и соответствующие графики для  $\Pi$  и один график для  $\Sigma_2$  оказываются включенными во второй и третий графики на рис. 6 и 7 и второй график на рис. 8.

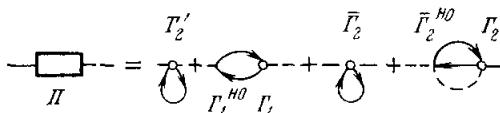


Рис. 7.

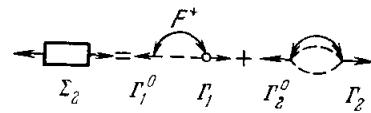


Рис. 8.

Вычисление  $\Sigma_1$ ,  $\Pi$  и анализ уравнения для  $\Sigma_2$  были проведены в работах <sup>9, 27</sup>. Следует, однако, иметь в виду, что поскольку мы вычисляем  $\Sigma_{ep}$ , а не  $\Sigma'_{ep}$ , постоянное слагаемое от второго графика на рис. 6 (содержащее  $|M^3|^2$ ), которое дает перенормировку химического потенциала  $\mu$ , не компенсируется первым графиком, который пропорционален  $M^{H*} M^3$  (см. выше). Поэтому перенормировка химического потенциала  $\Delta\mu$  будет порядка  $\hbar\omega_D$ . Указанная в <sup>9, 27</sup> компенсация этих двух графиков с точностью  $\sim \kappa^2 \hbar \omega_D$  и связанные с этим оценка  $\Delta\mu \sim \kappa^2 \hbar \omega_D$  соответствует вычислению  $\Sigma_{ep}$ , а не  $\Sigma'_{ep}$ . Все остальные результаты этих работ сохраняют силу. Отметим также, что во второй член для  $\Pi$  на рис. 7 входит множитель  $\Gamma_1^H \Gamma_1 (M^{H*} M^3)$ , который при акустическом законе дисперсии для  $\omega (q)$  согласно (П.3) при малых  $q$  ведет себя как  $\sim 1/q$ , в отличие от  $\Gamma_1^2$ , который ведет себя как  $q$  при  $q \rightarrow 0$ . Однако и в первый член на рис. 7, компенсирующий второй с точностью до  $\kappa^2 \hbar \omega_D$ , также входит  $\Gamma_1^H \Gamma_1$ , поэтому малая разность этих двух членов  $\sim \kappa^2 \hbar \omega_D$  <sup>9, 27</sup> не имеет никаких особенностей при малых  $q$ .

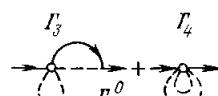


Рис. 9.

Как известно, мнимая часть  $\Pi$ , возникающая от второго графика на рис. 7, порядка  $\sim \hbar^2 \omega_D^3$ . Нетрудно видеть, что четвертый график на рис. 7 также дает величину порядка  $\sim \hbar^2 \omega_D^3$ <sup>27,33</sup>. Поэтому для вычисления  $\text{Im } \Pi$  он играет существенную роль.

Уравнения для электронной и фононной функции Грина в общем виде в рамках наиболее общей схемы, не использующей адабатического приближения, были получены в работе<sup>12</sup>. Однако они не были применены для вычисления собственно-энергетических частей  $\Sigma_1$ ,  $\Sigma_2$  и  $\Pi$ .

Институт атомной энергии  
им. И. В. Курчатова

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. М. В о г н, R. Орр е н х е и м е р, Ann. d. Phys. 84, 457 (1927); М. Б о р и, Х у а н К у н и, Динамическая теория кристаллических решеток, М., ИЛ, 1958, стр. 469 и 474.
2. J. Z i m a n, Proc. Cambr. Phil. Soc. 51, 707 (1955).
3. А. Б. М и г д а л, ЖЭТФ, 34, 1438 (1958).
4. H. F r ö h l i c h, Phys. Rev. 79, 845 (1950).
5. G. W e n t z e l, ibid. 83, 168 (1951).
6. С. В. Т я б л и к о в, В. В. Т о л м а ч е в, ЖЭТФ 34, 1254 (1958).
7. W. M c M i l l a n, Phys. Rev. 167, 331 (1968).
8. Е. Б р о в м а н, Ю. К а г а н, ЖЭТФ 52, 557 (1967).
9. В. Т. Г е и л и к м а н, J. Low Temp. Phys. 4, 189 (1971); Препринт ИАЭ им. И. В. Курчатова ИАЭ-2029, Москва, 1970.
10. D. B o h m, T. S t a v e r, Phys. Rev. 84, 836 (1952).
11. Д. П айн с, Ф. Н о з в е р, Теория квантовых жидкостей, М., «Мир», 1967.
12. S. K. J o s h i, A. K. R a j a g o p a l, Sol. State Phys. 22, 168 (1968); A. K. R a j a g o p a l, M. C o h e n, Coll. Phenomena 1, 9 (1972).
13. Д. П айн с, Элементарные возбуждения в твердых телах, М., «Мир», 1965.
14. Г. Б е т е, А. З о м м е р ф е л ь д, Электронная теория металлов, М., ОНТИ, 1938, стр. 73.
15. Физика металлов. I. Электроны, под. ред. Дж. Займана, М., «Мир», 1972.
16. А. М а р а д у д и н, Э. М о н т р о л л, Дж. В ей с с, Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении, М., «Мир», 1965.
17. Ч. К ит т е л ь, Квантовая теория твердых тел, М., «Наука», 1967.
18. G. V. C h e s t e r, Adv. Phys. 10, 357 (1961).
19. R. E. R g a n g e, A. S a c h s, Phys. Rev. 158, 672 (1967).
20. Э. Г. Б ат ы з е в, В. Л. П о к р о в с к и й, ЖЭТФ 46, 262 (1964).
21. Дж. Ш р и ф ф е р, Теория сверхпроводимости, М., «Наука», 1970.
22. Р. М а т т у к, Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел, М., «Мир», 1969.
23. J. L a b b e, J. F r i e d e l, J. Phys. et Radium 27, 153, 303 (1966); J. L a b b e, Phys. Rev. 158, 647 (1967).
24. а) Л. П. Г о рь к о в, Письма ЖЭТФ 17, 525 (1973); 20, 571 (1974); ЖЭТФ 65, 1658 (1973); б) А. М. А ф а н а с ь е в, Ю. М. К а г а н, ЖЭТФ 43, 1456 (1962).
25. Г. М. Э л и а ш б е р г, ЖЭТФ 38, 966 (1960); 40, 684 (1961).
26. В. Т. Г е и л и к м а н, J. Low Temp. Phys. 4, 181 (1971).
27. Б. Т. Г ейликман, М. Ю. Р ей з е р, ФТТ 16, 152 (1974).
28. В. Т. Г е и л и к м а н, N. F. M a s h a g o v, Phys. Stat. Sol. 41, K31 (1970).
29. В. З. К р е с и н, ФТТ 13, 2937 (1971).
30. Б. Г. Л а з а р е в, В. И. М а к а р о в и д р. ЖЭТФ 48, 1065 (1965); В. Г. Б а р ь я х т а р, В. И. М а к а р о в и д р., ЖЭТФ 62, 418 (1972).
31. J. B a r g e e n, Phys. Rev. 52, 688 (1937); J. B a r g e e n, D. P i n e s, ibid. 99, 1140 (1955).
32. А. Б. М и г д а л, Метод квазичастиц в теории ядра, М., «Наука», 1967.
33. В. Т. Г е и л и к м а н, J. Low Temp. Phys. 9, 539 (1972).
34. А. А. А б р и к о с о в, Л. П. Г о рь к о в, И. Е. Д з я л о ш и н с к и й, Методы квантовой теории поля в статистической физике, М., Физматгиз, 1962.
35. Л. Н. Б у ла е в с к и й, УФН 115, 263 (1975).