

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Электрон-фононное взаимодействие
и физические свойства металлов

Е.Г. Максимов, Д.Ю. Саврасов, С.Ю. Саврасов

Представлен обзор теории электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) и влияния ЭФВ на физические свойства металлов. Кратко описаны многочастичный подход к теории ЭФВ и использование теории ферми-жидкости Ландау. Продемонстрирована адекватность этих двух подходов для металлов, обладающих малым параметром адиабатичности $(\omega_D/\epsilon_F)^{1/2}$, где ω_D — характерная фононная частота, ϵ_F — энергия Ферми. Изложены методы расчета ЭФВ в теории функционала плотности и приведены результаты вычислений спектральных плотностей ЭФВ и физических свойств металлов, зависящих от ЭФВ, для ряда простых и переходных металлов. Обсуждаются возможности и пределы применимости метода функционала плотности в теории ЭФВ.

PACS numbers: 63.20.Kr, 71.10.+x, 71.20.Cf, 71.38.+i

Содержание

1. Введение (353).
2. Многочастичная теория электрон-фононного взаимодействия (354).
3. Применение теории ферми-жидкости Ландау к электрон-фононному взаимодействию (357).
4. Метод функционала плотности и электрон-фононное взаимодействие (360).
5. Теория линейного отклика и расчеты электрон-фононного взаимодействия в конкретных металлах (362).
6. Заключение (375).

Список литературы (375).

1. Введение

Электрон-фононное взаимодействие (ЭФВ) в металлах является объектом интенсивного теоретического и экспериментального исследования. Интерес к этой проблеме связан с ролью электрон-фононного взаимодействия в описании таких фундаментальных физических явлений, как сверхпроводимость и процессы переноса в металлах. К настоящему времени существует последовательная многочастичная теория ЭФВ, описывающая как нормальное, так и сверхпроводящее состояния металла (см. обзоры [1–4]). В рамках этого подхода все эффекты,

связанные с ЭФВ, выражаются в конечном итоге через так называемые спектральные плотности ЭФВ. Одна из них, а именно функция Элиашберга, описывающая изменение одночастичных свойств электронов в нормальном состоянии и фононный вклад в сверхпроводимость, может быть определена экспериментально. Эта функция восстанавливается из экспериментальных данных о зависимости туннельного тока между нормальным металлом и сверхпроводником от приложенного напряжения [5]. Функция Элиашберга может быть определена лишь в металлах, являющихся сверхпроводниками. Более того, ее определение существенно затруднено для анизотропных сверхпроводников и сверхпроводников с малой длиной когерентности.

Было бы желательно попытаться вычислить спектральные плотности ЭФВ в рамках последовательного микроскопического подхода. Такие попытки уже предпринимались ранее (см. [2]) и были во многих отношениях весьма непоследовательны. Как будет видно из дальнейшего, для расчета спектральных плотностей ЭФВ необходимо знать электронный и фононный спектры возбуждений, а также матричный элемент ЭФВ. Во многих предыдущих попытках микроскопических расчетов ЭФВ фононные спектры металлов не вычислялись из первых принципов. Вместо этого для их определения использовались различные феноменологические модели типа модели силовых постоянных Борна – Кармана. Матричные элементы ЭФВ также вычислялись с использованием различных упрощенных подходов типа модели жесткого ячеечного потенциала [6]. Но, пожалуй, наиболее существенным вопросом, практически необсуждавшимся ранее, является вопрос о том, какой электронный спектр должен использоваться в этих расчетах.

В большинстве работ по вычислению ЭФВ в качестве электронного спектра использовался спектр, возникаю-

Е.Г. Максимов, Д.Ю. Саврасов. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,
117929 Москва, Ленинский просп. 53, Россия
Тел. (095) 135-75-11
Факс (095) 135-85-33
E-mail: maksimov@lpi.ac.ru, savrasov@lpi.ac.ru
С.Ю. Саврасов. Институт Макса Планка,
70569 Штуттгарт, Германия

Статья поступила 18 декабря 1996 г.

ций в рамках метода функционала плотности [7, 8]. Как хорошо известно [9], метод функционала плотности (МФП) в его стандартной форме предназначен для описания свойств основного состояния взаимодействующих систем. В этом плане возможность использования МФП для расчета фоновых спектров не вызывает сомнения. Дело в том, что в рамках адиабатического приближения для расчета фононов необходимо вычислить энергию основного состояния электронной подсистемы как функцию ионных координат. С этой целью в рамках МФП созданы достаточно мощные и эффективные методы, основанные на использовании теории статического линейного отклика. Соответствующие расчеты фононов проведены для большого числа металлов и демонстрируют хорошее согласие с экспериментальными данными [10].

Иная ситуация существует для микроскопических расчетов электрон-фононного взаимодействия и обусловленных им эффектов таких, например, как электросопротивление и теплопроводность. Эти эффекты не являются свойством основного состояния. Существуют два возможных пути микроскопического расчета таких явлений. Можно воспользоваться разработанным в последние годы методом зависящего от времени функционала плотности (см. [11]). Формально система уравнений, описывающая поведение взаимодействующей системы электронов и ионов во внешнем поле, представляется достаточно просто. Фактически же до сих пор отсутствуют какие-либо точные и даже модельные представления для зависимости обменно-корреляционной энергии от плотности ионов. А именно эта величина и определяет электрон-фононное взаимодействие и его влияние на свойства электронной системы. Другой путь состоит в использовании так называемого ферми-жидкостного подхода к описанию эффектов электрон-фононного взаимодействия. Именно этот подход будет описан в данной работе. Содержание этого обзора может быть представлено кратко следующим образом. Мы представим результаты многочастичного рассмотрения эффектов электрон-фононного взаимодействия в рамках гамильтониана Фрелиха, опишем пути получения этого гамильтониана в рамках теории ферми-жидкости Ландау и обсудим возможности расчета его параметров в методе функционала плотности. Далее будут представлены результаты вычислений спектральных плотностей ЭФВ и физических свойств целого ряда конкретных металлов. В заключение обсудим дальнейшие возможности развития методов расчета ЭФВ.

2. Многочастичная теория электрон-фононного взаимодействия

Многочастичная теория ЭФВ изложена в большом количестве обзоров и книг, и мы не будем здесь останавливаться на ее подробном рассмотрении. Приведем лишь основные факты этой теории, а также формулы, которые будут использованы в дальнейших разделах этого обзора. Прежде всего отметим, что в многочастичной теории для описания ЭФВ обычно используется так называемый гамильтониан Фрелиха

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph}. \quad (1)$$

Здесь H_e описывает квазистационарные состояния электронов в жесткой решетке:

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}}, \quad (2)$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ — энергия электронных квазичастиц, $c_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ и $c_{\mathbf{k}}$ — операторы рождения и уничтожения квазичастиц; H_{ph} — гамильтониан невзаимодействующих фононов:

$$H_{ph} = \sum_{\mathbf{q}, \nu} \omega_{\mathbf{q}\nu} \left(b_{\mathbf{q}\nu}^{\dagger} b_{\mathbf{q}\nu} + \frac{1}{2} \right), \quad (3)$$

при этом $\omega_{\mathbf{q}\nu}$ — энергия фонона с поляризацией ν , а $b_{\mathbf{q}\nu}^{\dagger}$ и $b_{\mathbf{q}\nu}$ — соответствующие фононные операторы; H_{e-ph} представляет собой гамильтониан электрон-фононного взаимодействия:

$$H_{e-ph} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^{\mathbf{q}\nu} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} (b_{-\mathbf{q}\nu}^{\dagger} + b_{\mathbf{q}\nu}), \quad (4)$$

где $g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^{\mathbf{q}\nu}$ — матричный элемент ЭФВ. Позднее мы возвратимся к более подробному обсуждению возможности использования гамильтониана Фрелиха для описания ЭФВ и расчета входящих в него функций, таких как электронные и фононные энергии и матричный элемент ЭФВ.

В данный момент мы перейдем к изложению результатов расчетов ЭФВ в рамках гамильтониана Фрелиха. Для соответствующих расчетов в многочастичной теории ЭФВ используется обычно метод функций Грина. В задачи нашего обзора не входит, естественно, изложение этого метода. Подробно метод функций Грина в применении к ЭФВ изложен в работах [1, 12]. Впервые расчеты ЭФВ с использованием функций Грина были проведены Мигдалом [13] для нормального состояния металла и Элиашбергом [14] для сверхпроводящего состояния. Наше рассмотрение мы начнем со случая температур $T = 0$, поскольку при этом все соответствующие формулы выглядят гораздо проще и позволяют легко ввести определение необходимых для дальнейшего спектральных функций ЭФВ. Электронная функция Грина $G(\mathbf{k}, \omega)$ и фононная функция Грина $D(\mathbf{q}, \nu, \omega)$ могут быть записаны с помощью электронной $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ и фононной $\Pi(\mathbf{q}, \nu, \omega)$ собственно-энергетических частей в виде

$$G^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = G_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega) - \Sigma(\mathbf{k}, \omega), \quad (5)$$

$$D^{-1}(\mathbf{q}, \nu, \omega) = D_0^{-1}(\mathbf{q}, \nu, \omega) - \Pi(\mathbf{q}, \nu, \omega). \quad (6)$$

Здесь $G_0(\mathbf{k}, \omega)$ — функция Грина невзаимодействующих электронов, определяемая гамильтонианом H_e :

$$G_0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\delta}. \quad (7)$$

Функция $D_0(\mathbf{q}, \nu, \omega)$ определяется гамильтонианом H_{ph} и имеет вид

$$D_0(\mathbf{q}, \nu, \omega) = \frac{2\omega_{\mathbf{q}\nu}}{\omega^2 - \omega_{\mathbf{q}\nu}^2 + i\delta}. \quad (8)$$

Забегая вперед, отметим, что в общем случае самосогласованное вычисление функций Грина электронов и фононов в рамках гамильтониана Фрелиха не может быть строго обосновано. Точная функция $D(\mathbf{q}, \nu, \omega)$

должна вычисляться в рамках полного электрон-ионного гамильтониана. Для целого ряда задач, однако, гамильтониан Фрелиха можно использовать и для самосогласованного вычисления обеих функций Грина, определив соответствующим образом затравочные фононы в функции $D_0(\mathbf{q}, \nu, \omega)$. В любом случае затухание фононов, определяемое мнимой частью собственной энергии фононов $\Pi(\mathbf{q}, \nu, \omega)$, дается правильно в рамках этого гамильтониана (см. [15]). В дальнейшем мы не будем в этом обзоре обсуждать расчеты фононной функции Грина, считая, что во всех формулах, описывающих электронные свойства, определяемые ЭФВ, нужно использовать точные функции Грина фононов. Подробно процедура микроскопических расчетов точных фононных спектров металлов была описана в [10].

Один из основных результатов работы Мигдала состоит в том, что электронная собственно-энергетическая часть может быть вычислена с учетом простейших вкладов первого порядка по ЭФВ, а слагаемыми более высокого порядка можно пренебречь, поскольку они малы в отношении ω_D/ε_F . Здесь ω_D — характерная фононная частота и ε_F — энергия Ферми. В аналитическом виде выражение для $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ можно записать как

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = i \sum_{\mathbf{k}', \nu} \int \frac{d\omega'}{2\pi} |g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{\mathbf{k}-\mathbf{k}', \nu}|^2 D(\mathbf{k}-\mathbf{k}', \nu, \omega-\omega') G(\mathbf{k}', \omega'). \quad (9)$$

Для дальнейшего удобно воспользоваться спектральным представлением фононной функции $D(\mathbf{k}, \nu, \omega)$:

$$D(\mathbf{k}, \nu, \omega) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\Omega \operatorname{Im} D(\mathbf{k}, \nu, \Omega) \times \left(\frac{1}{\omega - \Omega + i\delta} - \frac{1}{\omega + \Omega - i\delta} \right). \quad (10)$$

В адиабатическом приближении и без учета взаимодействия фононов друг с другом $\operatorname{Im} D(\mathbf{k}, \nu, \omega)$ имеет вид

$$\operatorname{Im} D(\mathbf{k}, \nu, \omega) = \pi \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}\nu}). \quad (11)$$

Удобно также представить суммирование по векторам \mathbf{k}' в виде

$$\sum_{\mathbf{k}} = \int_{-\infty}^\infty d\varepsilon \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (12)$$

Используя введенные обозначения, можно переписать выражение для $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$:

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{i}{\pi} \int d\varepsilon \sum_{\mathbf{k}', \nu} |g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{\mathbf{k}-\mathbf{k}', \nu}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \times \\ &\times \int d\Omega \operatorname{Im} D(\mathbf{k}-\mathbf{k}', \nu, \Omega) \int \frac{d\omega'}{2\pi} G(\mathbf{k}', \omega') \times \\ &\times \left(\frac{1}{\omega - \omega' - \Omega + i\delta} - \frac{1}{\omega - \omega' + \Omega - i\delta} \right). \end{aligned} \quad (13)$$

Можно убедиться исходя из формулы (13), что $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ по абсолютной величине $\sim \omega_D$. Из этого следует, как было показано Мигдалом, что электронная функция Грина в выражении (13) может быть заменена на функцию Грина невзаимодействующих электронов $G_0(\mathbf{k}, \omega)$. В резуль-

тате (13) приобретает вид

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{i}{\pi} \int d\varepsilon \sum_{\mathbf{k}', \nu} |g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{\mathbf{k}-\mathbf{k}', \nu}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \times \\ &\times \int d\Omega \operatorname{Im} D(\mathbf{k}-\mathbf{k}', \nu, \Omega) \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{1}{\omega' - \varepsilon - i\delta} \times \\ &\times \left(\frac{1}{\omega - \omega' - \Omega + i\delta} - \frac{1}{\omega - \omega' + \Omega - i\delta} \right). \end{aligned} \quad (14)$$

Из анализа выражения (14), проведенного Мигдалом, следует, что существенные значения величин ω и ω' порядка ω_D . Это означает, что и для величины ε существенны тоже малые значения $\sim \omega_D$. В этом случае в величине $\delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}'})$ можно пренебречь ε . После этого интеграл по ε берется тривиально, и окончательно для $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ имеем

$$\begin{aligned} \Sigma(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{1}{\pi} \int d\Omega \sum_{\mathbf{k}', \nu} |g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{\mathbf{k}-\mathbf{k}', \nu}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}) \operatorname{Im} D(\mathbf{k}-\mathbf{k}', \nu, \Omega) \times \\ &\times \int d\omega' \left(\frac{1}{\omega - \omega' + \Omega - i\delta} - \frac{1}{\omega - \omega' - \Omega + i\delta} \right). \end{aligned} \quad (15)$$

Вводя спектральную плотность ЭФВ $\alpha_{\mathbf{k}}^2(\Omega)F(\Omega)$, равную

$$\alpha_{\mathbf{k}}^2(\Omega)F(\Omega) = \sum_{\mathbf{k}', \nu} |g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{\mathbf{k}-\mathbf{k}', \nu}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}) \operatorname{Im} D(\mathbf{k}-\mathbf{k}', \nu, \Omega), \quad (16)$$

выражение для $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ получим в виде

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \int d\Omega \alpha_{\mathbf{k}}^2(\Omega) F(\Omega) L(\omega, \Omega). \quad (17)$$

Здесь

$$L(\omega, \Omega) = \int d\omega' \left(\frac{1}{\omega - \omega' + \Omega - i\delta} - \frac{1}{\omega - \omega' - \Omega + i\delta} \right). \quad (18)$$

Заметим сразу, что в силу принятых приближений, а они верны при условии $\omega_D \ll \varepsilon_F$, функция $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ зависит лишь от угловой части вектора \mathbf{k} , лежащего на поверхности Ферми. Интеграл (18) для функции $L(\omega, \Omega)$ может быть легко вычислен, но мы не будем этого делать здесь. Легко показать, что выражение для собственной энергии $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ имеет в точности такой же вид, как и формула (17), и при любой температуре [15]. Выражение для функции $L(\omega, \Omega)$ при $T \neq 0$ записывается как

$$\begin{aligned} L(\omega, \Omega) &= -2\pi i \left[n(\Omega) + \frac{1}{2} \right] + \Psi \left(\frac{1}{2} + i \frac{\Omega - \omega}{2\pi T} \right) - \\ &- \Psi \left(\frac{1}{2} - i \frac{\Omega + \omega}{2\pi T} \right), \end{aligned} \quad (19)$$

где $\Psi(x)$ — дигамма-функция, $n(\Omega)$ — функция распределения Бозе. Можно определить функцию $\Sigma(\omega)$, дающую усредненное значение собственно-энергетической части по поверхности Ферми:

$$\Sigma(\omega) = \frac{1}{N(\varepsilon_F)} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \Sigma(\mathbf{k}, \omega), \quad (20)$$

где $N(\varepsilon_F)$ — плотность состояний электронов на поверхности Ферми;

$$\Sigma(\omega) = \int d\Omega \alpha^2(\Omega) F(\Omega) \left\{ -2\pi i \left[n(\Omega) + \frac{1}{2} \right] + \Psi \left(\frac{1}{2} + i \frac{\Omega - \omega}{2\pi T} \right) - \Psi \left(\frac{1}{2} - i \frac{\Omega + \omega}{2\pi T} \right) \right\}. \quad (21)$$

Введенная выше функция $\alpha^2(\Omega)F(\Omega)$ называется обычно спектральной плотностью ЭФВ или функцией Элиашберга и имеет вид

$$\alpha^2(\Omega)F(\Omega) = \frac{1}{N(\varepsilon_F)} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} |g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^{\mathbf{q}\nu}|^2 \delta(\Omega - \omega_{\mathbf{q}\nu}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}). \quad (22)$$

Эта функция определяет, в частности, сверхпроводящие свойства металлов.

Как мы уже отмечали ранее, хотя гамильтониан Фрелиха в общем случае не пригоден для расчета точных фононных спектров, затухание фононов может быть вычислено в его рамках. С этой целью необходимо вычислить мнимую часть собственной энергии фононов $\Pi(\mathbf{q}, \nu, \omega)$. Подобные расчеты были проведены Алленом в [16], где было показано, что затухание фононов $\gamma_{\mathbf{q}, \nu}$ с данной энергией $\omega_{\mathbf{q}, \nu}$ есть

$$\gamma_{\mathbf{q}\nu} = 2\pi\omega_{\mathbf{q}\nu} \sum_{\mathbf{k}} |g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^{\mathbf{q}\nu}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}). \quad (23)$$

Сравнивая формулы (22) и (23), видим, что функция Элиашберга может быть выражена через величины затухания фононов следующим образом:

$$\alpha^2(\Omega)F(\Omega) = \frac{1}{2\pi N(\varepsilon_F)} \sum_{\mathbf{q}, \nu} \frac{\gamma_{\mathbf{q}\nu}}{\omega_{\mathbf{q}\nu}} \delta(\Omega - \omega_{\mathbf{q}\nu}). \quad (24)$$

Собственно-энергетическая часть $\Sigma(\omega)$ имеет действительную и мнимую части и может быть представлена в виде

$$\Sigma(\omega) = -\omega\lambda(\omega, T) - \frac{i}{2\tau(\omega, T)}. \quad (25)$$

Как хорошо известно, функция $\lambda(\omega, T)$ характеризует перенормировку массы электронов за счет ЭФВ, и $\tau(\omega, T)$ характеризует время жизни электрона. В этом легко убедиться, переписывая выражение для функции Грина в виде

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \left[\frac{m^*(\omega, T)}{m} \omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2\tau(\omega, T)} \right]^{-1}, \quad (26)$$

где введено обозначение

$$\frac{m^*(\omega, T)}{m} = 1 + \lambda(\omega, T). \quad (27)$$

Здесь m — масса невзаимодействующих зонных электронов. При $T = 0$ и $\omega = 0$ величина $\lambda(\omega, T)$ представляет собой константу электрон-фононной связи

$$\lambda = 2 \int_0^\infty \frac{d\Omega}{\Omega} \alpha^2(\Omega) F(\Omega). \quad (28)$$

Энергия квазичастицы определяется полюсом функции Грина, и мы имеем

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{m}{m^*(E_{\mathbf{k}}, T)} \varepsilon_{\mathbf{k}} - \frac{i}{2\tilde{\tau}(E_{\mathbf{k}}, T)}, \quad (29)$$

где $\tilde{\tau}(\omega, T) = \tau(\omega, T)m^*(\omega, T)/m$. Естественно, что хорошо определенные квазичастицы существуют лишь при условии

$$\frac{1}{2\tilde{\tau}(E_{\mathbf{k}}, T)} \ll E_{\mathbf{k}}. \quad (30)$$

Как мы убедимся в дальнейшем, это неравенство в металлах нарушается в довольно широком интервале энергий вблизи поверхности Ферми. Само же по себе выражение (26) для функции Грина электронов имеет гораздо большую область применимости в системах с ЭФВ и остается справедливым при наличии лишь малого параметра ω_D/ε_F . Мнимая часть функции Грина может быть непосредственно измерена в экспериментах по фотоэмиссии с угловым разрешением [17].

С использованием гамильтониана Фрелиха может быть вычислена и электропроводность $\sigma(\omega)$ металлов, обусловленная ЭФВ. (Подробный обзор соответствующих методов расчета дается в [18].) С этой целью необходимо вычислить электромагнитное ядро $K_{\mu\nu}(\omega) = 4\pi\sigma_{\mu\nu}(\omega)/\omega$, где $\mu = x, y, z$. В металлах с кубической решеткой, которые и будут рассмотрены в данном обзоре, этот тензор сводится к скаляру $K(\omega)$. В технике температурных функций Грина $K(\omega)$ дается следующим выражением:

$$K(v_m) = 4\pi e^2 T \sum_{\omega_n} \sum_{\mathbf{k}, \mu} v_{\mathbf{k}}^\mu G_{\mathbf{k}}(\omega_n) G_{\mathbf{k}}(\omega_n + v_m) \times \Gamma_{\mathbf{k}}^\mu(\omega_n, \omega_n + v_m). \quad (31)$$

Здесь $v_m = 2\pi T m$ и $\omega_n = \pi T(2n + 1)$, $v_{\mathbf{k}}^\mu$ — компоненты электронной скорости, $\Gamma_{\mathbf{k}}^\mu(\omega_n, \omega_n + v_m)$ — вершинная функция. Для вершинной функции, в свою очередь, можно написать интегральное уравнение

$$\Gamma_{\mathbf{k}}^\mu(\omega_n, \omega_n + v_m) = v_{\mathbf{k}}^\mu + T \sum_{\omega'_n} \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') G_{\mathbf{k}'}(\omega'_n) \times G_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}}(\omega_n - \omega'_n) \Gamma_{\mathbf{k}'}^\mu(\omega'_n, \omega'_n + v_m). \quad (32)$$

Здесь $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ — электрон-фононное взаимодействие:

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{\nu} |g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{\mathbf{k}-\mathbf{k}', \nu}|^2 \frac{2\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'\nu}}{\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'\nu}^2 - (\omega_n - \omega'_n)^2}. \quad (33)$$

Уравнение для вершинной функции $\Gamma_{\mathbf{k}}^\mu(\omega_n, \omega_n + v_m)$ можно решить вариационным методом, выбирая для $\Gamma_{\mathbf{k}}^\mu(\omega_n, \omega_n + v_m)$ пробную функцию в виде

$$\Gamma_{\mathbf{k}}^\mu(\omega_n, \omega_n + v_m) = v_{\mathbf{k}}^\mu f(\omega_n, \omega_n + v_m). \quad (34)$$

Учитывая, как и при рассмотрении одночастичной функции Грина, что ЭФВ локализовано вблизи поверхности Ферми, где все остальные величины за исключением одночастичной функции Грина меняются слабо, можно получить окончательный ответ для проводимости $\sigma(\omega)$ в виде, очень напоминающем одночастичную функцию

Грина:

$$\sigma(\omega) = \frac{\omega_p^2}{4\pi} \frac{1}{-i\omega + \Sigma_{tr}(\omega)}. \quad (35)$$

Функция $\Sigma_{tr}(\omega)$ по аналогии с собственнo-энергетической частью $\Sigma(\omega)$ также может быть выражена через перенормированную массу и время релаксации:

$$\Sigma_{tr}(\omega) = i\omega \left[1 - \frac{m_{tr}^*(\omega, T)}{m} \right] + \frac{1}{\tau_{tr}(\omega, T)}. \quad (36)$$

Выражения для транспортных перенормированной массы и времени релаксации, вообще говоря, отличаются от даваемых формулой (21). Впервые для $T = 0$ формулы для

$$\frac{m_{tr}^*(\omega, T)}{m} \quad \text{и} \quad \frac{1}{\tau_{tr}(\omega, T)}$$

были получены Алленом [19]. Позднее они были обобщены на случай конечных температур в [20, 21]. В общем случае эти формулы имеют вид

$$\Sigma_{tr}(\omega) = -2i \int_0^\infty d\Omega \alpha_{tr}^2(\Omega) F(\Omega) K\left(\frac{\omega}{2\pi T}, \frac{\Omega}{2\pi T}\right), \quad (37)$$

где

$$K(x, y) = \frac{i}{y} + \left\{ \frac{y-x}{x} [\Psi(1 - ix + iy) - \Psi(1 + iy)] \right\} - \{y \rightarrow -y\}. \quad (38)$$

При описании процессов переноса и, в частности, оптической проводимости появляется еще одна спектральная плотность ЭФВ $\alpha_{tr}^2(\Omega)F(\Omega)$, которая может быть представлена в виде

$$\alpha_{tr}^2(\Omega)F(\Omega) = \alpha_{out}^2(\Omega)F(\Omega) - \alpha_{in}^2(\Omega)F(\Omega), \quad (39)$$

где

$$\alpha_{out(in)}^2(\Omega)F(\Omega) = \frac{1}{N(\epsilon_F)\langle v_x^2 \rangle} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', v} |g_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{\mathbf{k}-\mathbf{k}', v}|^2 v_x(k) v_x(k') \times \times \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'v}) \delta(\epsilon_{\mathbf{k}}) \delta(\epsilon_{\mathbf{k}'}). \quad (40)$$

Здесь $\langle v_x^2 \rangle$ — усредненный квадрат скорости электрона на поверхности Ферми. Эта величина непосредственно связана с плазменной энергией ω_p , входящей в определение оптической проводимости:

$$\omega_p^2 = 4\pi e^2 N(\epsilon_F) \langle v_x^2 \rangle. \quad (41)$$

В заключении этого раздела мы приведем для справки без всякого вывода уравнения Элиашберга, описывающие сверхпроводящие свойства металлов. Эти уравнения включают две функции: параметр порядка $\Delta(\omega)$ и функцию перенормировки $Z(\omega)$. В нормальном состоянии величина $\Delta(\omega)$, естественно, равна нулю, а функция перенормировки $Z(\omega)$ переходит в ранее введенную функцию перенормировки массы $Z^N(\omega, T) = m^*(\omega, T)/m$,

$$Z(\omega)\Delta(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \operatorname{Re} \left\{ \frac{\Delta(\omega')}{[\omega'^2 - \Delta^2(\omega')]^{1/2}} \right\} \times$$

$$\times \int_0^\infty d\Omega \alpha^2(\Omega) F(\Omega) \left[\frac{f(-\omega') + n(\Omega)}{\omega' + \Omega - \omega} + \frac{f(\omega') + n(\Omega)}{\omega' - \Omega - \omega} \right] - \mu(\epsilon_F) \int_0^{\epsilon_F} d\omega' \operatorname{Re} \left\{ \frac{\Delta(\omega')}{[\omega'^2 - \Delta^2(\omega')]^{1/2}} \right\} \tanh \frac{\omega'}{2T}, \quad (42)$$

$$[1 - Z(\omega)]\omega = \int_0^\infty d\omega' \operatorname{Re} \left\{ \frac{\omega'}{[\omega'^2 - \Delta^2(\omega')]^{1/2}} \right\} \times \times \int_0^\infty d\Omega \alpha^2(\Omega) F(\Omega) \left[\frac{f(-\omega') + n(\Omega)}{\omega' + \Omega + \omega} - \frac{f(-\omega') + n(\Omega)}{\omega' + \Omega - \omega} + \right. \\ \left. + \frac{f(\omega') + n(\Omega)}{-\omega' + \Omega + \omega} - \frac{f(\omega') + n(\Omega)}{-\omega' + \Omega - \omega} \right]. \quad (43)$$

Здесь $f(\omega)$ — фермиевская функция распределения, $\mu(\epsilon_F)$ — усредненное кулоновское межэлектронное взаимодействие. К сожалению, до настоящего времени отсутствуют какие-либо разумные методы расчета величины $\mu(\epsilon_F)$, и чаще всего $\mu(\epsilon_F)$ рассматривается как некоторая феноменологическая постоянная.

3. Применение теории ферми-жидкости Ландау к электрон-фононному взаимодействию

Вклад ЭФВ в одночастичную функцию Грина электронов формально точно можно вычислить в рамках многочастичной теории возмущений для полного электрон-ионного (или точнее, электрон-ядерного) гамильтониана. В рамках этого подхода для вклада ЭФВ в собственнo-энергетическую часть $\Sigma(x, x')$ можно написать следующее выражение [1, 22]:

$$\Sigma_{ph} = \int G_e \nabla \tilde{V} D G \nabla \tilde{V} G_e. \quad (44)$$

Чтобы не усложнять запись этой формулы, мы не расставляем в ней всех индексов и лишь поясним смысл использованных обозначений. Здесь G и D — соответственно электронная и фононная функции Грина. Величина $\nabla \tilde{V}$ представляет собой экранированный градиент электрон-ионного потенциала V_{ei} :

$$\nabla \tilde{V} = \sum_m \int \epsilon^{-1} \nabla V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m). \quad (45)$$

Здесь ϵ — диэлектрическая проницаемость электронной подсистемы, имеющая вид

$$\epsilon = 1 + \int V_C G_e G G, \quad (46)$$

V_C — кулоновское межэлектронное взаимодействие. Функция $G_e = G_e(x_1, x_2, x_3)$ — трехточечная вершинная функция, определяемая, в свою очередь, сложным интегральным уравнением.

Подробный анализ выражения (44) показывает [1, 22], что фононный вклад в собственнo-энергетическую часть формально полностью совпадает с тем, который дается гамильтонианом Фрелиха. Матричный элемент электрон-фононного взаимодействия представляет собой достаточно сложное выражение, включающее в себя экранированный градиент затравочного кулоновского электрон-ионного потенциала и вершинную функцию кулоновского межэлектронного взаимодействия. В данный момент мы продемонстрируем иной подход к

выводу матричного элемента ЭФВ, основанный на теории ферми-жидкости Ландау. Прежде всего мы покажем, что этот подход приводит к точно такому же выражению для матричного элемента ЭФВ, что и стандартная теория функций Грина в рамках полного электрон-ионного гамильтониана. Вторая цель используемого подхода — установить связь между точными выражениями для матричного элемента ЭФВ и различными приближениями, широко используемыми в настоящее время для численных расчетов.

Как хорошо известно, из теории ферми-жидкости Ландау [23] следует, что низкоэнергетические и низкотемпературные свойства системы сильновзаимодействующих ферми-частиц могут быть описаны в рамках системы слабовзаимодействующих квазичастиц с измененным за счет взаимодействия спектром возбуждений. Полное число квазичастиц совпадает при этом с полным числом частиц. Идеи теории ферми-жидкости были использованы в ряде работ для изучения эффектов ЭФВ (см., например, [24, 25]). Основная суть данного подхода к теории ЭФВ заключается в следующем. Поскольку эффекты ЭФВ существенны лишь вблизи поверхности Ферми, предположим, что мы каким-то способом определили энергии электронных возбуждений, или, что то же самое, функцию Гамильтона с полным учетом кулоновского взаимодействия при произвольном расположении ионов. Пусть это будет $H(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t, \{\mathbf{R}_n\})$, где \mathbf{p} — импульс электрона, \mathbf{r} — его координата, t — время. В этой записи учтено также, что энергия $H(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t, \{\mathbf{R}_n\})$ есть некий функционал положения ионов $\{\mathbf{R}_n\}$. После этого можно разложить функцию $H(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t, \{\mathbf{R}_n\})$ по малым смещениям ионов \mathbf{u}_n от положения равновесия \mathbf{R}_n^0 :

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t, \{\mathbf{R}_n\}) = H_0(\mathbf{p}, t) + \sum_n \frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}_n} \cdot \mathbf{u}_n. \quad (47)$$

Величину $\partial H / \partial \mathbf{R}_n$ можно определить различными приближенными методами с использованием, например, метода деформационного потенциала. Знание функции Гамильтона позволяет написать кинетическое уравнение для функции распределения электронов и вычислить затем влияние ЭФВ на физические свойства электронов и, в частности, на процессы переноса.

Мы не будем останавливаться дальше на отмеченном выше ферми-жидкостном подходе к ЭФВ, а рассмотрим несколько подробнее проблему микроскопического обоснования теории ферми-жидкости Ландау. Этот анализ позволит, в частности, более последовательно сформулировать ферми-жидкостный подход к ЭФВ. С этой целью рассмотрим одночастичную функцию Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$, позволяющую определить спектр возбуждений квазичастиц:

$$G^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \omega + \frac{\nabla^2}{2m} - \sum_m V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) - \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) - \mu. \quad (48)$$

Здесь $\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ — собственно-энергетическая часть. В работах Латтинжера и Уорда [26, 27] был введен функционал Φ , с помощью которого собственно-энергетическая часть $\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ может быть представлена как

$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{\partial \Phi}{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)}. \quad (49)$$

Ими же был предложен метод приближенного построения функционала Φ в рамках самосогласованной теории возмущений. Соответствующая методика для однородного электронного газа изложена в недавней работе Ясухары и Осаки [28], и мы не будем здесь подробно ее обсуждать, ограничившись рассмотрением вопросов наиболее существенных для дальнейшего изложения.

Прежде всего отметим невозможность диагонализации одночастичной функции Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ при конечных ω в представлении блоховских волновых функций даже для периодической решетки. Можно, однако, ввести представление о зонной структуре электронов, используя функцию Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)$:

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + \sum_m V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m^0) + \mu \right] \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0) \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}') = \varepsilon_{\mathbf{k}\lambda} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}). \quad (50)$$

В работе Элиашберга [29] эта зонная структура была названа кинематической, и были обсуждены некоторые ее свойства. Мы кратко воспроизведем их ниже. Во-первых, как это было указано еще Латтинжером [27], зонная структура, заданная уравнением (50), определяет ферми-поверхность металла условием

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda} = \mu, \quad (51)$$

где \mathbf{k}_F — фермиевский импульс, при котором энергия электронов из зоны λ пересекает уровень химического потенциала. Второе важное свойство этой зонной структуры заключается в том, что для нее справедлива так называемая теорема Латтинжера о равенстве числа частиц и квазичастиц:

$$\frac{N}{\Omega} = \frac{\partial \Phi}{\partial \mu} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} f_{\mathbf{k}\lambda}(\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda}). \quad (52)$$

Здесь

$$f_{\mathbf{k}\lambda} = \begin{cases} 1, & \varepsilon_{\mathbf{k}\lambda} \leq \mu, \\ 0, & \varepsilon_{\mathbf{k}\lambda} > \mu. \end{cases} \quad (53)$$

Эта же зонная структура определяет и плотность состояний электронов на поверхности Ферми (и только на ней!):

$$N(\varepsilon_F) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \text{Im} G(\mathbf{k}, \lambda, 0) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} f_{\mathbf{k}\lambda} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda} - \mu). \quad (54)$$

Следует сразу же отметить, что соответствующая электронная зонная структура практически ни разу не вычислялась для реальных металлических систем. Существует, по-видимому, лишь единственная работа [30], где были проведены численные расчеты такой зонной структуры для одномерной цепочки Хаббарда с десятью узлами. В этой работе было показано, что в системах с сильной корреляцией данная зонная структура обладает целым рядом весьма специфических свойств. Подробное обсуждение данного вопроса, однако, далеко выходит за рамки нашего обзора.

Сразу же отметим, что введенная уравнением (50) зонная энергия $\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda}$ не определяет спектр квазичастиц даже вблизи поверхности Ферми. Одночастичная функ-

ция Грина $G(\mathbf{k}, \lambda, \omega)$ вблизи поверхности Ферми может быть представлена в виде [12, 31]

$$G(\mathbf{k}, \lambda, \omega) = \frac{Z_{\mathbf{k}\lambda}}{\omega - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}} + f(\mathbf{k}, \lambda, \omega), \quad (55)$$

где $f(\mathbf{k}, \lambda, \omega)$ — некогерентная часть, не обладающая особенностями вблизи поверхности Ферми. Спектр возбуждений квазичастиц $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}$ вблизи поверхности Ферми имеет вид

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda} = Z_{\mathbf{k}\lambda} \epsilon_{\mathbf{k}\lambda}. \quad (56)$$

Функция $Z_{\mathbf{k}\lambda}$ характеризует величину вычета в полюсе функции Грина и может быть представлена как

$$\frac{1}{Z_{\mathbf{k}\lambda}} = 1 - \left\langle \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) \left| \frac{\partial \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)}{\partial \omega} \right| \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}') \right\rangle \Big|_{\omega = \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}}. \quad (57)$$

При микроскопическом обосновании теории ферми-жидкости Ландау было показано [12, 31], что величина $Z_{\mathbf{k}\lambda}$ может быть исключена из рассмотрения соответствующей перенормировкой эффективных взаимодействий.

Поступим теперь в соответствии с духом теории ферми-жидкости Ландау и ранними работами по ее применению к теории ЭФВ. С этой целью введем функцию Гамильтона для электронов, взаимодействующих с ионами, слабо отклоненными от положения равновесия:

$$H = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \left(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda} + Z_{\mathbf{k}\lambda} \sum_n \frac{\partial \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda, \mathbf{k}'\lambda'} \{ \mathbf{R}_n \}}{\partial \mathbf{R}_n} \cdot \mathbf{u}_n \right), \quad (58)$$

где

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda, \mathbf{k}'\lambda'} = \left\langle \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) \left| G^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0) \right| \Psi_{\mathbf{k}'\lambda'}(\mathbf{r}') \right\rangle. \quad (59)$$

Функция Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ определяется следующим уравнением, записанным в операторном виде:

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + \sum_m V_{\text{ei}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) + \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \right] G(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (60)$$

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_n^0 + \mathbf{u}_n. \quad (61)$$

Для установления точного значения функции Гамильтона необходимо вычислить функцию

$$\sum_n \left\langle \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) \left| \frac{\partial G^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)}{\partial \mathbf{R}_n} \right| \Psi_{\mathbf{k}'\lambda'}(\mathbf{r}') \right\rangle. \quad (62)$$

С этой целью воспользуемся уравнением (60) для функции Грина. Прежде всего перепишем выражение для собственно-энергетической части $\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ в виде

$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \Sigma_{\text{H}}(\mathbf{r}) + \Sigma_{\text{xc}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega). \quad (63)$$

Здесь $\Sigma_{\text{H}}(\mathbf{r})$ — хартриевский вклад:

$$\Sigma_{\text{H}}(\mathbf{r}) = e^2 \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (64)$$

$\Sigma_{\text{xc}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ — обменно-корреляционный вклад. Далее из уравнения (60) следует

$$\frac{\partial G^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)}{\partial \mathbf{R}_n} = \nabla V_{\text{ei}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) + e^2 \int \frac{d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \frac{\partial n(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{R}_n} + \frac{\partial \Sigma_{\text{xc}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)}{\partial \mathbf{R}_n}. \quad (65)$$

В соответствии с определением электронной восприимчивости $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ можно написать [22]

$$\frac{\partial n(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{R}_n} = \int d\mathbf{r}'' \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', 0) \nabla V_{\text{ei}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n). \quad (66)$$

Объединяя теперь первое и второе слагаемые в правой части уравнения (65), имеем

$$\frac{\partial G^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)}{\partial \mathbf{R}_n} = \int d\mathbf{r}'' \epsilon^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', 0) \nabla V_{\text{ei}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) + \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\omega \frac{\partial \Sigma_{\text{xc}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)}{\partial G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)} \frac{\partial G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)}{\partial \mathbf{R}_n}. \quad (67)$$

Здесь $\epsilon^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)$ — обратная диэлектрическая проницаемость электронной системы, равная по определению следующей величине:

$$\epsilon^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + e^2 \int \frac{d\mathbf{r}''}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}''|} \chi(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', 0). \quad (68)$$

Используя тождество

$$\frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)}{\partial \mathbf{R}_n} = - \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \omega) \times \frac{\partial G^{-1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)}{\partial \mathbf{R}_n} G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}', \omega), \quad (69)$$

мы можем написать окончательное уравнение для определения функции

$$\frac{\partial G^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)}{\partial \mathbf{R}_n}$$

в виде

$$\frac{\partial G^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)}{\partial \mathbf{R}_n} = \int d\mathbf{r}'' \epsilon^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', 0) \nabla V_{\text{ei}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) - \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 d\omega \frac{\partial \Sigma_{\text{xc}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)}{\partial G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega)} G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \omega) \times \frac{\partial G^{-1}(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \omega)}{\partial \mathbf{R}_n} G(\mathbf{r}_4, \mathbf{r}_2, \omega). \quad (70)$$

Уравнение (70) легко решается с помощью уже введенной нами трехточечной вершинной функции $\Gamma(x, x', x_1)$, для которой можно написать следующее уравнение в координатном пространстве:

$$\Gamma(x, x', x_1) = \delta(x - x') \delta(x - x_1) + \int dx_2 dx_3 dx_4 dx_5 \frac{\partial \Sigma_{\text{xc}}(x, x')}{\partial G(x_2, x_3)} \times G(x_2, x_4) \Gamma(x_4, x_5, x_1) G(x_5, x_3). \quad (71)$$

В результате имеем

$$\frac{\partial G^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)}{\partial \mathbf{R}_n} = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega = 0, \mathbf{r}_1) \times \\ \times \epsilon^{-1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, 0) \mathbf{V} V_{\text{ei}}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_n). \quad (72)$$

Сравнивая полученное выражение для

$$\frac{\partial G^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)}{\partial \mathbf{R}_n}$$

с формулой (44) для собственно-энергетической части, обусловленной ЭФВ, видим, что для вершинной функции ЭФВ в рамках ферми-жидкостного подхода возникает в точности то же выражение, что и в рамках многочастичной теории функций Грина. К сожалению, вычислить точно величину матричного элемента ЭФВ в настоящий момент не представляется возможным. Обратная диэлектрическая проницаемость $\epsilon^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)$ и электронная вершинная функция $\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega = 0, \mathbf{r}_1)$ не могут быть сами по себе вычислены в рамках теории ферми-жидкости, поскольку они определяются не только свойствами электронов на поверхности Ферми, где, собственно, и применима эта теория, но и свойствами электронов вдали от поверхности Ферми. Тем не менее ферми-жидкостный подход, так же, впрочем, как и многочастичная теория функций Грина, дает обоснование использования гамильтониана Фрелиха для описания влияния ЭФВ на свойства электронной системы металла как в нормальном, так и в сверхпроводящем состояниях. Но это возможно, естественно, лишь при наличии в системе малого адиабатического параметра ω_D/ϵ_F . Следует еще раз отметить, что сам матричный элемент ЭФВ и возникающие при его использовании спектральные плотности ЭФВ остаются неопределенными материальными параметрами системы. Они должны определяться из каких-либо экспериментальных данных, например из измерений туннельных спектров.

В последнее время достигнут определенный успех в расчете функций Грина и вершинных функций однородного электронного газа [28]. Это могло бы позволить рассчитать свойства ряда простых металлов со слабым электрон-ионным псевдопотенциалом. Однако сколько-либо существенного прогресса в этом направлении до сих пор нет. Большая часть существующих к настоящему времени расчетов матричного элемента ЭФВ вовсе не основана на многочастичной теории функций Грина, а использует совершенно иные подходы. В следующем разделе мы подробно остановимся на методике этих расчетов и на обсуждении обоснованности этих подходов и пределов их применимости.

4. Метод функционала плотности и электрон-фононное взаимодействие

Большая часть существующих к настоящему времени расчетов ЭФВ основана на методе функционала плотности (МФП), введенного впервые Коном, Хоэнбергом и Шемом [7, 8] (подробнее см. [9]). Основная суть этого метода заключается в том, что, как доказано, энергия и другие свойства основного состояния электронной системы являются однозначным функционалом распределения плотности $n(\mathbf{r})$. Равновесная плотность опреде-

ляется минимумом этого функционала:

$$\frac{\delta E\{n(\mathbf{r})\}}{\delta n(\mathbf{r})} = 0. \quad (73)$$

В работе Кона и Шема [8] было предложено определять плотность системы взаимодействующих электронов как плотность некоторой эффективной системы невзаимодействующих электронов, находящихся в некотором эффективном поле. В этом случае $n(\mathbf{r})$ может быть представлена в виде

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} f_{\mathbf{k}\lambda} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}), \quad (74)$$

где

$$f_{\mathbf{k}\lambda} = \begin{cases} 1, & \epsilon_{\mathbf{k}\lambda} \leq \mu, \\ 0, & \epsilon_{\mathbf{k}\lambda} > \mu. \end{cases} \quad (75)$$

Волновая же функция эффективной системы описывается следующим уравнением Шрёдингера (обычно в этом случае называемым уравнением Кона – Шема):

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right] \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}\lambda} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}). \quad (76)$$

Здесь $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ — эффективный потенциал, определяемый как

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \sum_n V_{\text{ei}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) + V_{\text{H}}(\mathbf{r}) + V_{\text{xc}}(\mathbf{r}), \quad (77)$$

где $V_{\text{H}}(\mathbf{r})$ — хартриевский кулоновский потенциал электронов, определяемый уравнением (64), $V_{\text{xc}}(\mathbf{r})$ — обменно-корреляционный потенциал:

$$V_{\text{xc}}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{\text{xc}}\{n(\mathbf{r})\}}{\delta n(\mathbf{r})}. \quad (78)$$

Точное значение функционала обменно-корреляционной энергии $E_{\text{xc}}\{n(\mathbf{r})\}$, вообще говоря, неизвестно. Обычно при практическом использовании МФП применяется так называемое локальное приближение для $E_{\text{xc}}\{n(\mathbf{r})\}$:

$$E_{\text{xc}}\{n(\mathbf{r})\} = \int n(\mathbf{r}) \epsilon_{\text{xc}}(n(\mathbf{r})) d\mathbf{r}. \quad (79)$$

Здесь $\epsilon_{\text{xc}}(n(\mathbf{r}))$ — значение обменно-корреляционной энергии на одну частицу в однородном электронном газе с данной плотностью $n = n(\mathbf{r})$. Мы не будем здесь обсуждать все достоинства и недостатки локального приближения, о которых можно прочесть в [9, 32].

Формальная методика вычисления матричного элемента ЭФВ в рамках МФП может быть изложена следующим образом. Предположим, что задано смещение \mathbf{u}_n ионов от положения равновесия \mathbf{R}_n^0 . При этом изменится и эффективный потенциал $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ в уравнении Кона – Шема:

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = V_{\text{eff}}^0(\mathbf{r}) + \delta V_{\text{eff}}(\mathbf{r}). \quad (80)$$

При этом $\delta V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ можно представить как

$$\delta V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \sum_n \mathbf{V} V_{\text{ei}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0) \cdot \mathbf{u}_n + \sum_n \frac{\delta V_{\text{H}}(\mathbf{r})}{\delta \mathbf{R}_n} \cdot \mathbf{u}_n + \\ + \sum_n \frac{\delta V_{\text{xc}}(\mathbf{r})}{\delta \mathbf{R}_n} \cdot \mathbf{u}_n. \quad (81)$$

Учитывая, что $V_H(\mathbf{r})$ и $V_{xc}(\mathbf{r})$ зависят от $n(\mathbf{r})$, уравнение (81) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \delta V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = & \sum_n \mathbf{V} V_{\text{ci}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0) \cdot \mathbf{u}_n + \\ & + \sum_n \int d\mathbf{r}' \frac{\delta V_H(\mathbf{r})}{\delta n(\mathbf{r}')} \frac{\delta n(\mathbf{r}')}{\delta \mathbf{R}_n} \cdot \mathbf{u}_n + \\ & + \sum_n \int d\mathbf{r}' \frac{\delta V_{xc}(\mathbf{r})}{\delta n(\mathbf{r}')} \frac{\delta n(\mathbf{r}')}{\delta \mathbf{R}_n} \cdot \mathbf{u}_n. \end{aligned} \quad (82)$$

В рамках теории линейного отклика для величины $\delta n(\mathbf{r})/\delta \mathbf{R}_n$ можно написать выражение, использованное нами уже ранее (см. (66)):

$$\frac{\delta n(\mathbf{r})}{\delta \mathbf{R}_n} = \int d\mathbf{r}' \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{V} V_{\text{ci}}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_n).$$

В рамках МФП существует еще одна возможность для записи $\delta n(\mathbf{r})/\delta \mathbf{R}_n$:

$$\frac{\delta n(\mathbf{r})}{\delta \mathbf{R}_n} = \int d\mathbf{r}' \chi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\delta V_{\text{eff}}(\mathbf{r}')}{\delta \mathbf{R}_n}, \quad (83)$$

где $\chi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — восприимчивость системы невзаимодействующих электронов, определяемых уравнением Кона–Шема (76),

$$\begin{aligned} \chi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = & \sum_{\mathbf{k}\lambda, \mathbf{k}'\lambda'} \frac{(f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \lambda'} - f_{\mathbf{k}\lambda}) \Psi_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}') \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \lambda'}^*(\mathbf{r}') \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \lambda'}(\mathbf{r})}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \lambda'} - \varepsilon_{\mathbf{k}\lambda}}. \end{aligned} \quad (84)$$

Используя приведенные выше формулы, можно легко найти выражение для $\delta V_{\text{eff}}(\mathbf{r})/\delta \mathbf{R}_n$, в значительной мере схожее с полученным в предыдущем разделе для $\delta G^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')/\delta \mathbf{R}_n$ (см. (72)):

$$\frac{\delta V_{\text{eff}}(\mathbf{r})}{\delta \mathbf{R}_n} = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) \epsilon^{-1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, 0) \mathbf{V} V_{\text{ci}}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_n), \quad (85)$$

где вершинная функция $\tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)$ удовлетворяет уравнению

$$\tilde{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) + \int d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \frac{\delta V_{xc}(\mathbf{r})}{\delta n(\mathbf{r}_2)} \chi_0(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \tilde{G}(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_1). \quad (86)$$

Функция $\epsilon^{-1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, 0)$ есть не что иное, как стандартная обратная диэлектрическая проницаемость системы, совпадающая с введенной в предыдущем разделе,

$$\epsilon^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + e^2 \int d\mathbf{r}_1 \frac{\chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}', 0)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|}, \quad (87)$$

а $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)$ — восприимчивость электронной подсистемы. В рамках МФП она определяется уравнением

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0) = & \chi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \\ & + \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \left[\frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} + \frac{\delta V_{xc}(\mathbf{r})}{\delta n(\mathbf{r}_1)} \right] \chi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (88)$$

Выражение для изменения эффективного потенциала, а следовательно, и для матричного элемента ЭФВ в МФП

имеет существенное сходство с полученным ранее в теории ферми-жидкости. Существуют, однако, и весьма значительные различия в этих выражениях. Начнем с приятного. В отличие от теории ферми-жидкости изменение эффективного потенциала в МФП может быть рассчитано до конца. Обратную статическую диэлектрическую проницаемость $\epsilon^{-1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, 0)$ и вершинную функцию $\tilde{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ можно вычислить, решив уравнения (86), (88). Более того, для получения функции $\delta V_{\text{eff}}(\mathbf{r})/\delta \mathbf{R}_n$ нет необходимости вычислять, при этом достаточно сложным образом, функции $\epsilon^{-1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, 0)$ и $\tilde{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Для расчета этой величины можно использовать метод Штернхеймера [33], обобщенный на кристаллы [34, 35]. Суть этого метода заключается в следующем. Рассмотрим уравнение Кона–Шема (76) и зададим смещения ионов \mathbf{u}_n . В этом случае уравнение примет вид

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + V_{\text{eff}}^0(\mathbf{r}) + \sum_n \frac{\delta V_{\text{eff}}(\mathbf{r})}{\delta \mathbf{R}_n} \cdot \mathbf{u}_n \right] \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = \\ = \left(\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda}^0 + \sum_n \frac{\delta \varepsilon_{\mathbf{k}\lambda}}{\delta \mathbf{R}_n} \cdot \mathbf{u}_n \right) \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (89)$$

Будем искать его решение в виде

$$\Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{k}\lambda}^0(\mathbf{r}) + \sum_n \frac{\delta \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})}{\delta \mathbf{R}_n} \cdot \mathbf{u}_n. \quad (90)$$

Подставляя выражение для $\Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})$ в (89) и собирая слагаемые первого порядка по \mathbf{u}_n , будем иметь уравнение для $\Psi_{\mathbf{k}\lambda}^0(\mathbf{r})$ и для изменения волновой функции:

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + V_{\text{eff}}^0(\mathbf{r}) \right] \frac{\delta \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})}{\delta \mathbf{R}_n} = \left[\frac{\delta \varepsilon_{\mathbf{k}\lambda}}{\delta \mathbf{R}_n} - \frac{\delta V_{\text{eff}}(\mathbf{r})}{\delta \mathbf{R}_n} \right] \Psi_{\mathbf{k}\lambda}^0(\mathbf{r}), \quad (91)$$

а $\delta V_{\text{eff}}(\mathbf{r})/\delta \mathbf{R}_n$ выражается с помощью формулы (82). В соответствии со стандартными правилами квантовой механики величина $\delta n(\mathbf{r})/\delta \mathbf{R}_n$ может быть записана как

$$\frac{\delta n(\mathbf{r})}{\delta \mathbf{R}_n} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} f_{\mathbf{k}\lambda} \left[\Psi_{\mathbf{k}\lambda}^{0*}(\mathbf{r}) \frac{\delta \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})}{\delta \mathbf{R}_n} + \Psi_{\mathbf{k}\lambda}^0(\mathbf{r}) \frac{\delta \Psi_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r})}{\delta \mathbf{R}_n} \right]. \quad (92)$$

Решая совместно исходное уравнение Кона–Шема для идеального кристалла и уравнение (91) для изменения волновой функции, мы можем вычислить и величину $\delta V_{\text{eff}}(\mathbf{r})/\delta \mathbf{R}_n$, используя формулы (82) и (92). Более того, в рамках МФП, как это было подробно показано в [10], можно вычислить и динамическую матрицу колебаний. Она имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 E_{\text{tot}}}{\partial \eta_{\mu\mathbf{q}} \partial \eta_{\mu'\mathbf{q}}^*} = & \int d\mathbf{r} \frac{\delta(n + n_{\text{ext}})}{\delta \eta_{\mu\mathbf{q}}} \frac{\delta V_{\text{ext}}}{\delta \eta_{\mu'\mathbf{q}}^*} + \\ & + \int d\mathbf{r} (n + n_{\text{ext}}) \frac{\delta^2 V_{\text{ext}}}{\delta \eta_{\mu\mathbf{q}} \delta \eta_{\mu'\mathbf{q}}^*} \end{aligned} \quad (93)$$

с точностью до множителя, учитывающего массу ядер. Здесь μ — координатный индекс, n_{ext} — точечная зарядовая плотность ядер. Таким образом, в рамках МФП существуют, казалось бы, все необходимые элементы для расчета ЭФВ. Есть электронный спектр, определяемый уравнением Кона–Шема (76). Можно рассчитать фоновый спектр металла, используя выражение (93) для динамической матрицы колебаний. И,

наконец, выражение (82) для изменения эффективного потенциала позволяет далее легко вычислить его матричный элемент по волновым функциям $\Psi_{k\lambda}(\mathbf{r})$ и $\Psi_{k+q\lambda'}(\mathbf{r})$. Имеется, однако, как минимум, одно существенное и малоприятное различие между МФП и теорией ферми-жидкости в подходе к ЭФВ. Предположим, что мы вычислили в рамках МФП изменение эффективного потенциала и нашли соответствующий матричный элемент, но не знаем в рамках этого метода, что же делать с полученным матричным элементом. Дело в том, что МФП в его стандартной форме, использованной нами выше, описывает свойства только основного состояния системы. А электронные переходы, возникающие за счет ЭФВ и описываемые соответствующим матричным элементом, не являются свойством основного состояния, а связаны с возбужденными состояниями системы. Как мы уже отмечали, существует формальное обобщение МФП на неравновесные процессы, однако до настоящего времени отсутствует сколь-нибудь подробно разработанная процедура соответствующих расчетов для связанной электрон-фононной системы.

Стандартный подход к этой проблеме с самых ранних попыток расчета [6, 36, 37] матричного элемента ЭФВ в МФП заключался в следующем. В рамках МФП из уравнения Кона–Шема вычисляется матричный элемент изменения эффективного потенциала, далее полученное значение используется для расчета физических свойств металлов в рамках стандартной теории многих тел, основанной на гамильтониане Фрелиха. Как было показано в предыдущем разделе, подобный подход заведомо оправдан в рамках теории ферми-жидкости. Насколько можно оправдать данный подход с использованием МФП? Ясно, что оба матричных элемента будут совпадать, если совпадают спектры возбуждений одночастичной функции Грина (50) и МФП (76). В том, что эти спектры в общем случае не совпадают, легко убедиться на примере однородного взаимодействующего электронного газа. МФП дает в этом случае спектр вида

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{k^2}{2m} - \mu, \quad (94)$$

где m — масса свободного электрона. В то же время спектр возбуждений одночастичной функции Грина даже вблизи поверхности Ферми имеет вид

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{k^2}{2m^*} - \mu, \quad (95)$$

где $m^* \neq m$. В однородном электронном газе, по крайней мере, совпадают обе поверхности Ферми, возникающие в методе функций Грина и МФП. Но это не так в общем случае металлов со сложной поверхностью Ферми. Здесь могут отличаться не только спектры возбуждений, но и обе поверхности Ферми [32]. Как показывает большое количество экспериментальных данных, возникающие отличия в форме поверхности Ферми от даваемой МФП и даже различия в спектре достаточно малы в большом числе металлов [32]. Эти отличия могут стать существенными в металлах с сильными обменно-корреляционными эффектами [30, 32, 38]. К сожалению, сколь-либо подробные исследования этого вопроса до сих пор не проводились.

Тем более интересным представляются прямые и последовательные расчеты эффектов ЭФВ с использова-

нием МФП и сравнение полученных результатов с экспериментом. Многие предыдущие попытки описать ЭФВ в рамках МФП были достаточно непоследовательными. Так, в ряде из них рассчитывались лишь электронные вклады [6], а фононные частоты $\omega_{\mathbf{q}\nu}$ и собственные векторы $\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu}$ определялись из подгонки экспериментальных данных по неупругому рассеянию нейтронов. При этом изменение эффективного потенциала определялось в приближении жесткого сдвига ионов, т.е. фактически вычислялась величина $\nabla V_{\text{eff}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$. Для изотропных металлов с большой плотностью состояний на поверхности Ферми это приближение во многих случаях достаточно справедливо, так как из-за сильной экранировки изменение потенциала происходит лишь вблизи смещенного иона. Однако и в переходных металлах, во многом удовлетворяющих этому критерию, приближение жесткого сдвига иона оказывается в ряде случаев неудовлетворительным [37]. Например, в рамках этого приближения не описывается анизотропия перенормировки электронной массы в Nb.

Недавно был развит подход [39], основанный на теории линейного отклика, в котором для поправки первого порядка к волновой функции $\delta\Psi_{k\lambda}(\mathbf{r})$ используется базисный набор, соответствующий методу линейных МТ-орбиталей (ЛМТО) [40]. Важное преимущество развитого метода состоит в том, что системы с узкими зонами, например с d-зонами, рассматриваются в нем так же, как и широкозонные системы без ухудшения сходимости. Разработанный метод был применен для расчета фононных спектров многих металлов [39, 41] (см. также [10]). Этот же подход был использован и для расчета ЭФВ и его влияния на физические свойства металлов [42, 43]. В следующем разделе мы подробно опишем данный метод и приведем результаты расчетов многих свойств металлов, обусловленных ЭФВ.

5. Теория линейного отклика и расчеты электрон-фононного взаимодействия в конкретных металлах

Центральной проблемой в расчетах матричного элемента электрон-фононного взаимодействия и динамической матрицы является определение величины $\delta V_{\text{eff}}/\delta\eta_{\mathbf{q}}$, где δV_{eff} — изменение электронного гамильтониана, вызванное смещением атома

$$\mathbf{u}_n = \eta_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n) + \eta_{\mathbf{q}}^* \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_n).$$

Как это было подробно объяснено в нашем предыдущем обзоре [10], существенным обстоятельством, позволяющим решить задачу о вычислении $\delta V_{\text{eff}}/\delta\eta_{\mathbf{q}}$, является тот факт, что изменение внешнего потенциала $\delta V_{\text{ext}}/\delta\eta_{\mathbf{q}}$ преобразуется при приращении $\mathbf{r} + \mathbf{R}_n$ как волна блоховского типа. Это означает, что если известно изменение $\delta V_{\text{eff}}/\delta\eta_{\mathbf{q}}$ в одной ячейке, то оно может быть легко найдено и во всем кристалле. Таким образом, уравнение (91) для изменения волновой функции, так же как и исходное уравнение Кона–Шема (76) для невозмущенной волновой функции, должно решаться только в одной элементарной ячейке. Стандартной техникой решения уравнения Кона–Шема (76) с потенциалом $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ произвольной формы является использование вариационного принципа. Строится функционал, минимизация которого при варьировании одноэлектронных функций

приводит к уравнению Шрёдингера. При этом одно-электронная волновая функция представляется в виде разложения по некоторому базису $\chi_n^k(\mathbf{r})$:

$$\Psi_{k\lambda}(\mathbf{r}) = \sum_n A_n^{k\lambda} \chi_n^k(\mathbf{r}), \quad (96)$$

где $A_n^{k\lambda}$ — коэффициенты разложения, которые для зафиксированного базиса $\chi_n^k(\mathbf{r})$ представляют вариационную свободу функционала и находятся из решения матричной задачи на собственные значения:

$$\sum_n \langle \chi_m^k | -\nabla^2 + V_{\text{eff}} - \varepsilon_{k\lambda} | \chi_n^k(\mathbf{r}) \rangle A_n^{k\lambda} = 0. \quad (97)$$

В методе ЛМТО кристаллическое пространство разделяется на неперекрывающиеся сферы, центрированные на каждом атоме (МТ-сферы), и остающуюся межузельную область. В пределах МТ-сфер базисные функции представляют собой линейные комбинации численных решений радиального уравнения Кона – Шема со сферической частью потенциала, умноженные на сферические гармоники. Такое представление обеспечивает быструю сходимость базиса как для делокализованных, так и для локализованных состояний. В межузельной области, где потенциал достаточно гладкий, базисные функции выбираются из решения уравнения Гельмгольца для свободных электронов $(-\nabla^2 - \kappa^2)f(\mathbf{r}) = 0$, где κ^2 — кинетическая энергия электрона в межузельной области. Для расчета ЭФВ и фононных спектров необходимо правильно учесть эффекты несферичности кристаллического потенциала особенно в межузлиях, так как направленные друг к другу колебания атомов существенно искажают электронную плотность в данной области. В работе [41] был предложен подход к решению этой проблемы, в котором используется представление сферических гармоник как в области МТ-сфер, так и в межузлиях. Кристаллическое пространство разделяется на полиэдрические ячейки типа Вигнера – Зейтца, и МТ-орбитали представляются в виде одноцентровых разложений по сферическим гармоникам вплоть до сфер, окружающих полиэдры. Такие одноцентровые разложения будут правильно описывать плотность лишь в областях, принадлежащих атомным ячейкам. Следовательно, проблемы решения уравнения Пуассона и вычисления матричных элементов потенциала от межузельной области состоят в нахождении эффективного метода интегрирования функций по области между сферой и поверхностью полиэдра. Последнее может быть выполнено с помощью сведения объемных интегралов к поверхностным с помощью теоремы Гаусса [41]. Преимущество предложенного подхода заключается в едином представлении всех величин через сферические гармоники для обеих областей пространства, что приводит к методу, вычислительная скорость которого всего лишь в несколько раз меньше скорости стандартного метода ЛМТО.

Рассмотрим более подробно построение линейных МТ-орбиталей. Пространство разделяется некоторым образом на полиэдрические ячейки типа Вигнера – Зейтца, описывающие каждый атом. Для этих атомных ячеек вводятся вписанные МТ-сферы, а также сферы, описывающие полиэдр. Обе сферы центрированы на узлах решетки. Рассмотрим так называемую оболочечную функцию, которой в методе ЛМТО является сингулярная функция Ганкеля $K_L(\mathbf{r}_t - \mathbf{R})$, центрированная на

узле $\mathbf{R} + \mathbf{t}$ и определяющая энергию $\varepsilon = \kappa^2$. (Здесь и далее предполагается, что все радиальные функции с векторными обозначениями в скобках умножены на сферические гармоники, L обозначает комбинированный индекс lm ; нижний индекс t у \mathbf{r} обозначает разность $\mathbf{r} - \mathbf{t}$, где $\{\mathbf{t}\}$ — положения атомов в элементарной ячейке, а $\{\mathbf{R}\}$ — примитивные трансляции.) Внутри собственной сферы, центрированной на $\mathbf{R} + \mathbf{t}$, расходящаяся часть оболочечной функции заменяется на линейную комбинацию численных радиальных функций с условием гладкой сшивки на границе сферы. Радиальными функциями здесь являются решения уравнения Кона – Шема $\phi_{tL}(\mathbf{r}_t - \mathbf{R}, \varepsilon_{vll})$, взятого со сферической частью потенциала и при некоторых энергиях ε_{vll} в интересующей нас области, а также их энергетические производные $\dot{\phi}_{tL}(\mathbf{r}_t - \mathbf{R}, \varepsilon_{vll})$. Внутри каждой другой атомной ячейки, центрированной на $\mathbf{R}' + \mathbf{t}'$, хвост оболочечной функции заменяется своим одноцентровым разложением при помощи функций Бесселя:

$$K_L(\mathbf{r}_t - \mathbf{R}) = \sum_{L'} J_{L'}(\mathbf{r}_{t'} - \mathbf{R}') S_{t'L'L}(\mathbf{R}' - \mathbf{R}), \quad (98)$$

где $J_L(\mathbf{r}_t - \mathbf{R})$ — функция Бесселя, $S_{t'L'L}(\mathbf{R})$ обозначает структурные константы в прямом пространстве. При этом, что функции Ганкеля и Бесселя определяются выражениями

$$K_l(r) = -\frac{i(\kappa w)^{l+1}}{(2l-1)!!} h_l(\kappa r), \quad (99)$$

$$J_l(r) = \frac{1}{2} \frac{(2l-1)!!}{(\kappa w)^l} j_l(\kappa r), \quad (100)$$

где $h_l = j_l - in_l$ — обычные сферические функции Ганкеля, а j_l, n_l — сферические функции Бесселя и Неймана, выражение для структурных констант имеет вид

$$S_{t'L'L}(\mathbf{R}) = \sum_{L''} \frac{8\pi(2L''-1)!!}{(2L'-1)!!(2L-1)!!} C_{LL'}^{L''}(\kappa w)^{L+L'-L''} \times \\ \times K_l(|\mathbf{R} - \mathbf{t}' + \mathbf{t}|)(-i)^{L''} Y_{L''}^*(\mathbf{R} - \mathbf{t}' + \mathbf{t}), \quad (101)$$

где w — средний радиус Вигнера – Зейтца и $C_{LL'}^{L''}$ — коэффициенты Гаунта. Линейные МТ-орбитали в итоге получаются заменой функций Бесселя во всех МТ-сферах на линейные комбинации ϕ_{tL} и $\dot{\phi}_{tL}$, выбранные так, чтобы ЛМТО была везде непрерывна и дифференцируема.

Последним шагом является выполнение суммирования по решетке МТ-орбиталей, центрированных на различных узлах, с фазовым сдвигом $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})$ для того, чтобы базисные функции удовлетворяли теореме Блоха. Это можно сделать достаточно просто, проводя лишь суммирование для структурных констант (101), поскольку сконструированные орбитали уже везде представлены как одноцентровые разложения. В итоге базисные функции получаются следующими:

$$\chi_{tL}^k(\mathbf{r}_{t'}) = \Phi_{tL}^K(\mathbf{r}_t) \delta_{tt'} + \sum_{L'} \Phi_{t'L'}^J(\mathbf{r}_{t'}) S_{t'L'L}^k \text{ при } r_{t'} < s_{t'}, \\ \chi_{tL}^k(\mathbf{r}_{t'}) = K_{tL}(\mathbf{r}_t) \delta_{tt'} + \sum_{L'} J_{t'L'}(\mathbf{r}_{t'}) S_{t'L'L}^k \text{ при } r_{t'} \in \Omega_{t'}^{\text{int}}, \quad (102)$$

где s_t — радиусы МТ-сфер, а $S_{t'L'L}^k$ обозначает фурье-представление для структурных констант (101):

$$S_{l'l'L}^k = \sum_{\mathbf{R}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) S_{l'l'L}(\mathbf{R}). \quad (103)$$

Радиальными функциями $\Phi_{lL}^K(\mathbf{r}_i)$, $\Phi_{lL}^J(\mathbf{r}_i)$ здесь являются такие линейные комбинации решений ϕ_{iL} и $\dot{\phi}_{iL}$, которые гладко сшиваются с функциями Ганкеля и Бесселя на границе сферы.

Вернемся теперь к проблеме реализации линейного подхода в рамках МФП, которую можно охарактеризовать как проблему неполноты базисного набора. Она проявляется в высокой погрешности результатов расчета таких величин, как атомные силы и динамическая матрица, при попытке использовать для их определения выражения, следующие из точной теории МФП, в частности выражения (93) для динамической матрицы. Дело в том, что на практике волновые функции не являются точным решением уравнения Кона–Шема (76), а строятся приближенно с использованием вариационного принципа. Для корректного описания изменения волновой функции и связанных с ней величин при вариации внешних параметров необходимо, чтобы базисный набор был пригоден для построения волновой функции с определенной точностью во всей области изменения внешних параметров. В противном случае производная ошибки может быть большой величиной, что и имеет место на практике. В частности, орбитали метода ЛМТО центрированы на узлах невозмущенной решетки и не пригодны для описания волновых функций при наличии фонона. Их необходимо перестроить для учета специфики атомных смещений. Иными словами, должна быть введена разумная зависимость базисного набора от параметров смещения, и в выражении для производных появятся члены, связанные с изменением базисного набора при сдвиге ядер из позиции $\mathbf{R} + \mathbf{t} = \mathbf{R}_i$, $d\chi_{iL}^k/d\mathbf{R}_i$. В методе ЛМТО такая зависимость базисного набора очевидна в силу построения орбиталей. Рассматривая координаты атомных позиций не как фиксированные величины, а как параметры, мы легко находим, что изменение базисного набора содержит "жесткий" сдвиг орбитали $-\delta\mathbf{R}_i \cdot \nabla \chi_{iL}^k(\mathbf{r}_i)$ в каждой атомной ячейке плюс вклад, связанный с изменением структурных констант. Неучтенным вкладом является мягкая часть $\delta\chi_{iL}^k$, связанная с изменениями $\delta^s\phi$, $\delta^s\dot{\phi}$. Этот вклад является достаточно малым при определенном выборе параметров ε_v [10]. Таким образом, изменение базисного набора ЛМТО сводится к учету явной зависимости орбитали от ядерных координат и легко может быть вычислено дифференцированием формул, определяющих МТ-орбитали (102). При определении атомных сил и динамической матрицы теперь следует иметь в виду, что при зафиксированном базисе вариационная свобода функционала полной энергии предоставлена только коэффициентами $A_n^{k\lambda}$ в разложении (96) и полная энергия обладает свойством экстремальности при варьировании только этих величин, так что при определении производной $dE/d\mathbf{R}$

$$\frac{dE}{d\{A_n^{k\lambda}\}} \frac{d\{A_n^{k\lambda}\}}{d\mathbf{R}} = 0,$$

в то время как вклады типа

$$\frac{dE}{d\chi_{kLi}^k} \frac{d\chi_{kLi}^k}{d\mathbf{R}} \neq 0$$

должны учитываться в качестве так называемых поправок на неполноту базисного набора.

Обратимся теперь к уравнению (91), определяющему изменение эффективного одночастичного потенциала. Матричный аналог этого уравнения получается из рассмотрения матричного уравнения Шрёдингера (97), однако при этом также следует учесть параметрическую зависимость базиса. Выполняя последовательную вариацию всех величин матричного уравнения (97) при наличии фонона \mathbf{u}_q , находим

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha}^N \left\langle \chi_{\beta}^{k+q} \left| -\nabla^2 + V_{\text{eff}} - \varepsilon_{k\lambda} \right| \chi_{\alpha}^{k+q} \right\rangle \delta^q A_{\alpha}^{k\lambda} + \\ & + \sum_{\alpha}^N \left[\left\langle \chi_{\beta}^{k+q} \left| \delta^q V_{\text{eff}} \right| \chi_{\alpha}^k \right\rangle + \left\langle \delta^q \chi_{\beta}^{k-q} \left| -\nabla^2 + V_{\text{eff}} - \varepsilon_{k\lambda} \right| \chi_{\alpha}^k \right\rangle + \right. \\ & \left. + \left\langle \chi_{\beta}^{k+q} \left| -\nabla^2 + V_{\text{eff}} - \varepsilon_{k\lambda} \right| \delta^q \chi_{\alpha}^k \right\rangle \right] A_{\alpha}^{k\lambda} = 0. \end{aligned} \quad (104)$$

Последние два слагаемых связаны с вариацией базисного набора и являются дополнительным возмущением, определяющим изменение волновой функции

$$\delta^q \Psi_{k\lambda}(\mathbf{r}) = \sum_n \{ \delta^q A_n^{k\lambda} \chi_n^k(\mathbf{r}) + A_n^{k\lambda} \delta^q \chi_n^k(\mathbf{r}) \}. \quad (105)$$

В связи с этим возникает вопрос, что следует понимать под матричным элементом электрон-фононного взаимодействия, и как поправки на неполноту базисного набора проявляются в этой величине. Проще всего понять это, рассмотрев определение спектральной функции ЭФВ (24) с помощью ширин фононных линий (23). Ширина фононной линии определяется "золотым правилом" Ферми, описывающим скорость перехода начальной невозмущенной волновой функции $\Psi_{k\lambda}$ в конечное возмущенное состояние $\tilde{\Psi}_{k\lambda}$, и выводится из рассмотрения квадрата интеграла перекрытия

$$|\langle \Psi_{k\lambda} | \tilde{\Psi}_{k\lambda} \rangle|^2.$$

Так как конечное состояние соответствует смещенной решетке, лучшая вариационная оценка будет получена на базисе, орбитали которого центрированы в новых атомных позициях и учитывают особенности возмущающего потенциала. Повторяя стандартный квантово-механический вывод выражения (23) в конечном пространстве пробных функций $\{\chi_n\}$, зависящих от смещений, мы легко находим матричный элемент ЭФВ в виде

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\lambda', \mathbf{k}\lambda}^{\mathbf{q}v} &= \langle \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\lambda'} | \delta^{\mathbf{q}v} V_{\text{eff}} | \Psi_{\mathbf{k}\lambda} \rangle + \\ & + \left\langle \sum_n \delta^{\mathbf{q}v} \chi_n^{k-q} A_n^{k+q\lambda'} \left| -\nabla^2 + V_{\text{eff}} - \varepsilon_{k\lambda} \right| \Psi_{\mathbf{k}\lambda} \right\rangle + \\ & + \left\langle \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\lambda'} \left| -\nabla^2 + V_{\text{eff}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\lambda'} \right| \sum_n \delta^{\mathbf{q}v} \chi_n^k A_n^{k\lambda} \right\rangle. \end{aligned} \quad (106)$$

Таким образом, в матричном элементе ЭФВ должно учитываться полное возмущение, определяющее изменение волновой функции в уравнении (104), в том числе и слагаемые, связанные с вариацией базисного набора.

Перейдем теперь к обзору численных результатов изложенного подхода, реализованного с учетом всех обсуждавшихся выше особенностей.

Расчет зонной структуры металлов ГЦК — Al, Cu, Pb, Pd — и ОЦК — Mb, Nb, Ta, V — в невозмущенной

решетке проводился с использованием 256 \mathbf{k} -точек в зоне Бриллюэна и spd -ЛМТО-базиса при двух различных значениях энергии хвостов волновых функций κ^2 , причем для одноцентрового разложения волновой функции и потенциала использовались сферические гармоники до $l_{\text{max}} = 8$. Такой же набор был использован при расчете фононных частот $\omega_{\mathbf{q}\nu}$ для Al, Nb и Mo по теории линейного отклика. Величина фононных частот оказалась весьма чувствительной к качеству базисного набора, что и обусловило выбор указанных параметров для ЛМТО-базиса. К счастью, величина $\omega_{\mathbf{q}\nu}$ является относительно гладкой функцией \mathbf{q} и может быть рассчитана на довольно грубой \mathbf{q} -сетке. Расчет динамической матрицы проводился в 10 неприводимых \mathbf{q} -точках зоны Бриллюэна, затем использовалась процедура трансформации динамической матрицы в прямое пространство: путем суммирования по \mathbf{q} -точкам с фактором $\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{T})$ строилась динамическая матрица на решетке \mathbf{T} в прямом пространстве. Обратное фурье-преобразование и диагонализация динамической матрицы позволяют получить собственные частоты и векторы фононов в любой точке \mathbf{q} . Первоначально ввиду трудоемкости вычислений динамики решетки для определения фононных частот и векторов в Pb, V, Ta, Pd и Cu использовались экспериментальные данные по силовым константам (см. [44], т. 13а). Впоследствии был выполнен и теоретический расчет динамики решетки этих металлов с использованием улучшенного полнопотенциального метода ЛМТО, основанного на плосковолновом представлении волновой функции в межферминой области [43]. Данные всех расчетов практически совпадают, и в настоящей работе приводятся первоначально полученные результаты. Необходимые комментарии, связанные с возможной коррекцией приводимых здесь данных, будут сделаны ниже.

Скажем несколько слов о параметрах решетки, использованных при расчетах. Известно, что теоретический равновесный объем, получающийся в расчетах по локальной версии МФП, несколько меньше экспериментального значения. Это приводит к смяжению фононных частот, полученных в расчетах с экспериментальным значением параметра решетки, по сравнению с реально наблюдающимися частотами. Часто лучшее согласие фононных спектров получается при использовании в расчете теоретического значения параметра решетки. Это, в принципе, оправданная с теоретической точки

зрения процедура. Однако при этом результаты расчетов ширины фононных линий и спектральных функций ЭФВ имеют не столь хорошее согласие с экспериментом. Причина этого в том, что указанные величины весьма чувствительны к форме поверхности Ферми. Оказывается, что использование ферми-поверхности, полученной в расчете с экспериментальным параметром решетки, значительно улучшает согласие. Таким образом, мы использовали теоретические значения параметров решетки в расчетах динамики решетки и матричного элемента ЭВФ, в то время как электронная зонная структура, входящая в определение ширины фононных линий и спектральных функций ЭФВ, определялась в расчетах при экспериментальном значении параметра решетки.

В отличие от $\omega_{\mathbf{q}\nu}$ самосогласованный экранированный потенциал $\delta V_{\mathbf{q}\nu}$ менее чувствителен к базисному набору, однако для выполнения качественного интегрирования его необходимо знать в значительном количестве точек зоны Бриллюэна. Мы вычисляли значения ширины фононных линий $\gamma_{\mathbf{q}\nu}$ (24) в 47 \mathbf{q} -точках. В каждой точке потенциал $\delta V_{\mathbf{q}\nu}$ вычислялся с использованием более простого набора (47 \mathbf{k} -точек вместо 256 и одной энергии κ^2 для хвоста ЛМТО-базиса), что приводит лишь к небольшому увеличению ошибки на 1–2 %. Интегрирование в (24) по \mathbf{k} -пространству содержит две δ -функции и было выполнено на очень большом количестве \mathbf{k} -точек (752) с помощью полнозонного метода тетраэдров [45]. Рассчитанные значения $\gamma_{\mathbf{q}\nu}$ в Nb и Al вдоль высокосимметричных направлений приведены в табл. 1. Мы получили похожие результаты для Nb в приближении жесткого сдвига МТ-потенциала (RMТА), полностью согласующиеся с расчетами других авторов [46, 47], и подтвердили сделанный ранее вывод [48] о неприменимости подобных приближений в sp -металлах на примере Al. Для сравнения в табл. 1 представлены экспериментальные значения фононных ширины [46] для Nb. Приведенные результаты согласуются между собой в пределах экспериментальных и вычислительных ошибок. К сожалению, экспериментальная погрешность настолько велика, что не позволяет сделать каких-либо решающих выводов из такого согласия. Для Al между нашими результатами и результатами расчета методом "вмороженных" фононов с использованием суперъядер [49] было найдено общее согласие, за исключением того, что результат, полученный нами для продольной моды вдоль направления [110],

Таблица 1. Ширины фононных линий γ_L и γ_T для продольной и поперечной моды в Nb и Al в сравнении с расчетами в приближении жесткого сдвига (RMТА) и экспериментальными данными [46]

Nb($\xi, \xi, 0$)	$\xi = 0,1$	$\xi = 0,2$	$\xi = 0,3$	$\xi = 0,4$	$\xi = 0,5$
γ_L	0,133	0,180	0,279	0,404	0,370
$\gamma_L^{\text{RMТА}}$	0,091	0,138	0,291	0,485	0,444
γ_L^{exp}	0,13±0,05	0,21±0,05	0,31±0,06	0,48±0,09	0,43±0,13
$\gamma_{T1}; \gamma_{T2}$	0,019; 0,021	0,043; 0,032	0,057; 0,043	0,067; 0,068	0,109; 0,122
$\gamma_{T1}^{\text{RMТА}}; \gamma_{T2}^{\text{RMТА}}$	0,014; 0,021	0,037; 0,027	0,053; 0,053	0,070; 0,116	0,127; 0,211
γ_T^{exp}	0,02±0,02	0,06±0,04	0,12±0,04	0,11±0,06	—
Al($\xi, 0, 0$)	$\xi = 0,2$	$\xi = 0,4$	$\xi = 0,6$	$\xi = 0,8$	$\xi = 1,0$
γ_L	0,039	0,072	0,095	0,112	0,071
$\gamma_L^{\text{RMТА}}$	0,012	0,012	0,014	0,018	0,012
γ_T	0,007	0,032	0,021	0,023	0,024
$\gamma_T^{\text{RMТА}}$	0,006	0,020	0,010	0,010	0,011

превышает значения, найденные в работе [49] в два раза. Указанное различие может быть объяснено применением разных способов интегрирования, которое в [49] выполнялось с помощью замены δ -функций в выражении (23) на соответствующие функции Гаусса. Впрочем, относительный вклад указанного значения γ в интегральные величины является очень малым.

Так как фононные ширины очень сильно меняются в зависимости от волнового вектора, суммирование по \mathbf{q} в выражении (24) для $\alpha^2 F(\omega)$ следует выполнять на довольно частой сетке. Как упоминалось выше, мы использовали 47 \mathbf{q} -точек и максимальная численная ошибка в $\alpha^2 F(\omega)$ связана именно с интегрированием в \mathbf{q} -пространстве. Мы оценили величину этой ошибки, проинтегрировав лишь фононные и электронные δ -функции (т.е. положив $\omega_{\mathbf{q}\nu} |g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\nu', \mathbf{k}\lambda'}|^2 = \text{const}$), используя соответственно 47 и 752 \mathbf{q} -точки, и нашли, что она составляет примерно 6 %. Таким образом, общая численная ошибка оценивается нами на уровне 10 %. Полученная функция $\alpha^2 F(\omega)$ в Al представлена на рис. 1а (сплошная линия). Положение максимумов обусловлено формой плотности фононных состояний, причем величина низкоэнергетического пика подавляется функцией взаимодействия α^2 (штриховая линия). Ширина фононного спектра Al характеризуется максимальной частотой $\omega_{\text{max}} \approx 470$ К. Как отмечалось в предыдущем разделе, данные расчета методом "вмороженных" фононов для Al [49] хорошо согласуются с нашими результатами и, несмотря на отдельные различия в величинах ширин фононных линий, оба метода дают практически совпадающие кривые для спектральной плотности ЭФВ.

Качественное согласие наших кривых с туннельными данными иллюстрируется на примере Pb (рис. 1б). Небольшое различие в позициях нижнего максимума и появление на теоретической кривой дополнительной структуры в промежутке между максимумами в Pb связано с недостатками нашего расчета фононного спектра, и туннельный результат в данном случае более соответствует наблюдаемой плотности фононных состояний. Погрешности расчета динамики решетки в Pb проявляются в переоценке частот поперечной фононной моды вблизи границы зоны в X-точке. Этот недостаток не может быть отнесен к недостаткам, обсуждавшимся ранее в связи с необходимостью использовать различные равновесные объемы, так как экспериментальное значение параметра решетки в Pb воспроизводится весьма точно. Он также не связан с методикой описания остовных состояний, так как 5d-состояния рассматривались в нашем расчете не как атомные уровни, а как энергетические зоны. К тому же недостатки подобного рода в расчете фононного спектра Pb отмечались ранее в работе [51], основанной на использовании метода псевдопотенциала в расчете по теории линейного отклика. Помимо традиционных ссылок на погрешность локального приближения МФП, в качестве возможной причины расхождения теоретических и экспериментальных данных по динамике решетки в Pb можно указать также эффекты ангармонизма.

Довольно широкий спектр имеют также V и Mo (рис. 1в,е) с $\omega_{\text{max}} \approx 370$ К и 390 К соответственно. Функция взаимодействия α^2 в этих металлах слабо отличается от константы в довольно большой области спектра. Приближение $\alpha^2 = \text{const}$ наиболее справедливо в Nb (рис. 1г) и Ta (рис. 1д). Этот качественный результат

позволяет факторизовать константу электрон-фононного взаимодействия на множители, зависящие только от электронных и только от фононных величин соответственно [52], причем последние характеризуются частотными моментами, определяемыми фактически лишь спектром фононов, которые изучены гораздо лучше, чем электронная система. Рассчитанная величина среднего квадрата фононной частоты в Ta $\langle \omega^2 \rangle^{1/2} = 170$ К примерно на 20 % превышает полученное в туннельных экспериментах значение ~ 145 К [50]. Из-за того, что частотные моменты в основном определяются спектром фононов, такое примерно 20%-ное различие скорее можно связать с недостатками туннельных данных, где возможно занижение пика высокочастотных фононов, чем с ошибками теоретических расчетов. Экспериментальная функция $\alpha^2 F(\omega)$ получается из туннельных спектров из обращения уравнения Элиашберга и сильно зависит от способа обработки туннельной информации. Качественное согласие наших кривых с туннельными данными для переходных металлов хорошо видно на рис. 1в,г,д. Такое согласие не удивительно из-за отмечавшейся близости вида функции $\alpha^2 F(\omega)$ к форме плотности фононных состояний. За исключением самой величины λ , главное различие между теоретическими и экспериментальными кривыми для Nb и Va состоит в соотношении амплитуд пиков. Предполагая, что результат $\alpha^2 = \text{const}$ действительно справедлив в этом случае, можно сделать вывод, что форма теоретической функции ЭФВ более корректна, так как просто воспроизводит наблюдающуюся в эксперименте плотность фононных состояний.

Наиболее важной величиной, характеризующей спектральную плотность ЭФВ и его физические проявления, является обратный частотный момент спектральной функции, или константа электрон-фононного взаимодействия λ (28). Экспериментальные значения этой величины могут быть определены непосредственно по спектральным функциям ЭФВ, восстановленным из туннельных данных. С другой стороны, согласно определению (27), величина константы связи определяет перенормировку электронной массы вследствие ЭФВ. Одним из проявлений этого является изменение величины электронной теплоемкости, определяемое выражением

$$1 + \lambda_{\text{SH}} = \frac{3\gamma}{2\pi^2 k_B N(\varepsilon_F)}, \quad (107)$$

где γ — линейный коэффициент в температурной зависимости электронной теплоемкости. Обозначение λ_{SH} введено для того, чтобы подчеркнуть, что данная величина относится к явлениям, связанным с электронной теплоемкостью. В настоящий момент мы обсудим результаты теоретических расчетов константы электрон-фононного взаимодействия λ в сравнении с оценками λ_{tun} , полученными из туннельных данных, и значениями λ_{SH} , вычисленными по формуле (107) с использованием экспериментальных значений коэффициента γ и результатов наших зонных расчетов плотности состояний $N(\varepsilon_F)$. Все данные приведены в табл. 2.

Туннельные эксперименты в Al дают оценку величины константы связи $\lambda_{\text{tun}} = 0,42$, что очень близко к нашей величине $\lambda = 0,44$. Результаты, полученные в расчетах методом "вмороженных" фононов [49] и в предыдущих реализациях теории линейного отклика

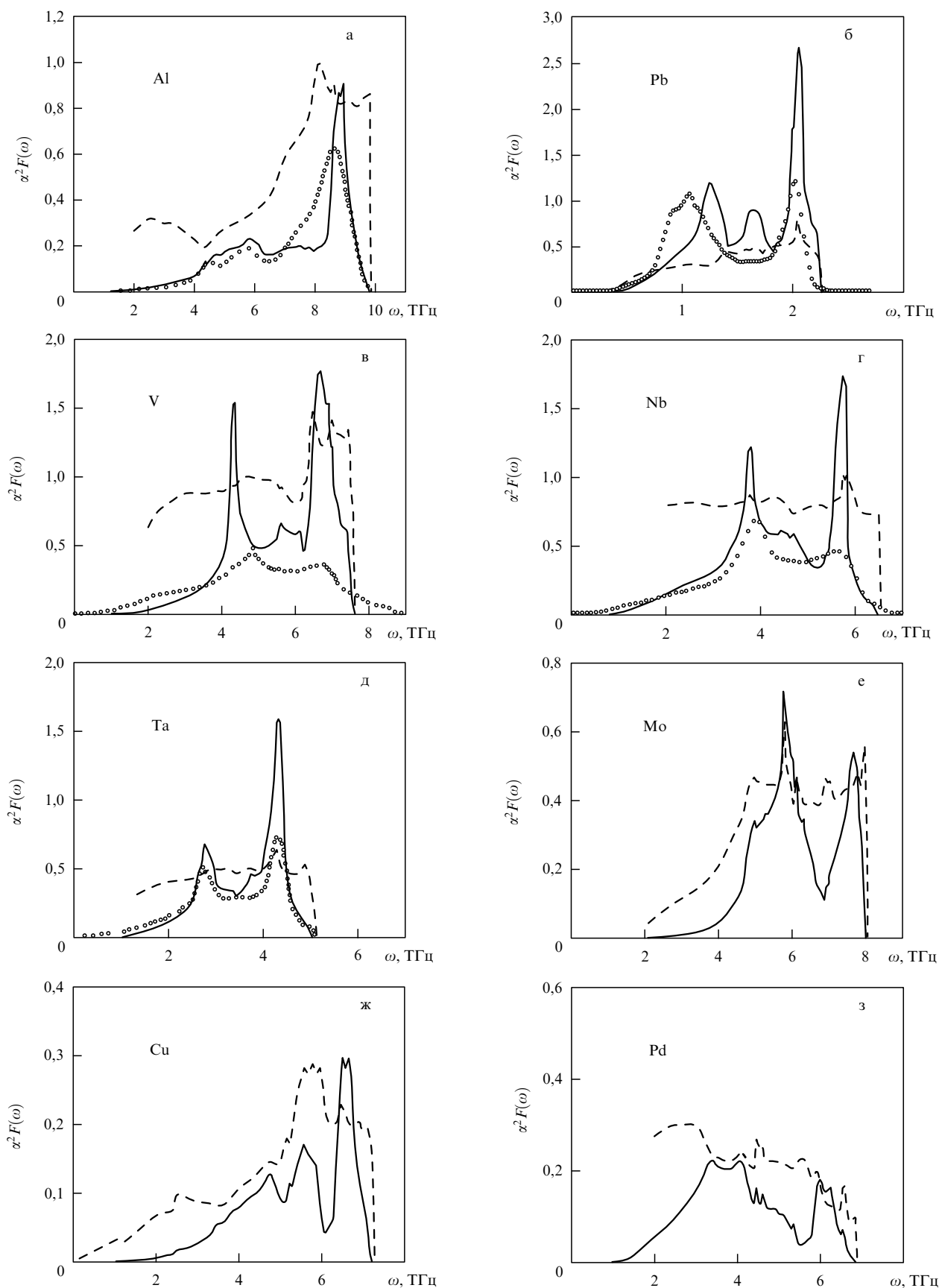


Рис. 1. Рассчитанные спектральные функции электрон-фононного взаимодействия $\alpha^2 F(\omega)$ (сплошная линия) и $\alpha^2(\omega)$ (штриховая линия) в Al (а), Pb (б), V (в), Nb (г), Ta (д), Mo (е), Cu (ж) и Pd (з). Туннельные данные для Pb и Nb [50] показаны точками.

Таблица 2. Рассчитанные значения констант ЭФВ λ_{calc} , значения λ_{tun} из [50, 53–55] и величины λ_{SH} , найденные из измерений линейного коэффициента γ [56, 57] в температурной зависимости электронной теплоемкости с использованием расчетных данных по плотности состояний $N(\epsilon_F)$ (значения $N(\epsilon_F)$ приведены в расчете на один атом с учетом спинового вырождения)

Параметр	Al	Pb	V	Nb	Ta	Mo	Cu	Pd
λ_{calc}	0,44	1,68	1,18	1,24	0,85	0,49	0,19	0,35
λ_{tun}	0,42	1,55	0,82	0,92; 1,22	0,78	—	—	—
λ_{SH}	0,43	1,64	1,17	1,16	0,83	0,45	—	0,69
$N(\epsilon_F)$, Ry^{-1}	5,49	6,87	26,14	20,42	18,38	8,34	4,36	34,14
γ , $\text{мДж}/(\text{K}^2 \text{ моль})$	1,36	3,14	9,82	7,66	5,84	2,10	0,69	10,0

[48], дают соответственно значения $\lambda = 0,45$ и $0,38$. Для того чтобы проверить высказывавшееся ранее утверждение о неприменимости приближений типа RMTA в *sp*-металлах, мы выполнили расчеты с использованием указанного приближения и в самом деле нашли $\lambda_{\text{RMTA}} = 0,14$. Таким образом, эффекты экранировки в формировании эффективного потенциала ЭФВ в *sp*-системах играют существенную роль, и теоретические расчеты, корректно их учитывающие, дают весьма схожие между собой и весьма близкие к эксперименту оценки константы связи. В качестве экспериментальной оценки, помимо λ_{tun} , может служить величина $\lambda_{\text{SH}} = 0,43$, рассчитанная по формуле (107). Экспериментальное значение коэффициента γ и теоретическое значение плотности состояний $N(\epsilon_F)$ приведены в табл. 2. Другим примером, подтверждающим успех описания параметров ЭФВ в *sp*-металлах, является Pb. Выбор этого металла для изучения обусловлен тем, что вследствие достаточно высокой температуры сверхпроводящего перехода $T_c = 7,19$ К он довольно подробно изучался экспериментально. Рассчитанное значение $\lambda = 1,68$ в свинце оказалось на 8 % больше существующей оценки $\lambda_{\text{tun}} = 1,55$ и всего лишь на 2 % больше величины $\lambda_{\text{SH}} = 1,64$, полученной по данным измерений электронной теплоемкости (табл. 2). Таким образом, в пределах численной погрешности наших расчетов мы имеем полное согласие между теоретическими и экспериментальными данными и для Pb.

Перейдем к рассмотрению переходных металлов. Среди них наибольший интерес представляют такие металлы как V, Nb и Ta, довольно давно изучаемые туннельными методами ввиду относительно высокой критической температуры (особенно в Nb — $T_c = 9,25$ К). Основные трудности в изучении методом туннельной спектроскопии Nb и V связаны с процессами окисления в поверхностных слоях. Возникающие оксиды имеют более низкую критическую температуру и вследствие эффекта близости искажают туннельный спектр. Туннельные оценки параметра взаимодействия в Nb лежат в широком интервале от аномально низких значений $0,58–0,68$ [58, 59] до величины $0,9$ [60]. Объяснение такого разнообразия результатов связано с тем, что в ряде выполненных ранее экспериментов не контролировалась роль поверхностных эффектов. Корректный учет эффектов близости приводит к оценке величины $\lambda_{\text{tun}} = 0,92–1,22$ [54]. Как и для Nb, высокая химическая активность ванадия затрудняет его изучение туннельными методами. Рассчитанное значение константы ЭФВ примерно на 40 % превышает существующую туннельную оценку $\lambda_{\text{tun}} = 0,82 \pm 0,05$ для V [55]. Аналогичной

ситуация оказывается и в Nb, если за основу принять традиционную величину $\lambda_{\text{tun}} = 0,9$. В такой ситуации особый интерес представляет Ta. Весьма похожий по сверхпроводящим свойствам на V и Nb он менее подвержен окислению, и на нем получают наиболее воспроизводимые результаты туннельных экспериментов. Имеющиеся результаты дают для λ_{tun} значение $0,78$ [53], которое согласуется с теоретическим результатом в пределах точности наших расчетов 10 %. Еще более хорошим является согласие теоретического значения с величиной $\lambda_{\text{SH}} = 0,83$. Имея такие данные, мы не можем рассматривать рассогласование с туннельными результатами в V и Nb как следствие недостатков методики линейного отклика или локального приближения МФП. Это подтверждается альтернативными оценками констант ЭФВ по данным измерения теплоемкости $\lambda_{\text{SH}} = 1,17$ как для V, так и для Nb, которые вполне укладываются в декларированные 10 %. Более того, перенормировка циклотронной массы, наблюдаемая в экспериментах по эффекту де Гааза–ван Альфена [61], соответствует $\lambda_{\text{dHvA}} = 1,33$ для Nb, что также близко к нашему значению $1,26$. К тому же, наши расчеты воспроизводят анизотропию параметра перенормировки на разных листах поверхности Ферми в Nb: (1) октаэдр, $\lambda^{(1)} = 1,44$, (2) "джунгли", $\lambda^{(2)} = 1,37$, (3) эллипсоид, $\lambda^{(3)} = 1,08$; эти величины можно сравнить с имеющимися [61] $\lambda_{\text{dHvA}}^{(1)} = 1,71$; $\lambda_{\text{dHvA}}^{(2)} = 1,43$; $\lambda_{\text{dHvA}}^{(3)} = 1,10$. (Заметим, что анизотропия параметра перенормировки, получаемая в RMTA-расчетах, значительно отличается от приведенных здесь данных [61].) В дальнейшем будут продемонстрированы и другие факты, подтверждающие корректность использованного описания ЭФВ в Nb и V, но уже сейчас с учетом современного состояния результатов туннельных экспериментов в Nb и V и тенденции повышать туннельную оценку для констант взаимодействия в ходе улучшения процедуры обработки туннельных данных различие между теоретическими и туннельными результатами не представляется определяющим.

В качестве еще двух объектов применения предлагаемого описания ЭФВ рассмотрим Mo и Cu. Туннельная информация по этим металлам отсутствует ввиду слабости электрон-фоонных эффектов и весьма низкой критической температуры. Для Mo наши расчеты, выполненные как по теории линейного отклика, так и в RMTA-приближении, совпадают с выполненными другими авторами [62], и константа взаимодействия оценивается на уровне $\lambda = 0,42$, что может быть сопоставлено с величиной $\lambda_{\text{SH}} = 0,45$, следующей из измерений теплоемкости. Расчетное значение для Cu $\lambda = 0,14$. Экспериментальные оценки для этой величины в Cu практически отсутствуют.

В качестве последнего примера рассмотрим Pd. Палладий известен сильными спиновыми флуктуациями, в связи с чем он не является сверхпроводником, и туннельные данные по нему также отсутствуют. Парамагнетический вклад в перенормировку массы проявляется также в величине электронной теплоемкости $\lambda_{\text{SH}} = \lambda + \lambda_{\text{spin}}$, и возможности провести прямое сравнение данных, относящихся к эффектам ЭФВ, нет. Полученное значение $\lambda_{\text{SH}} = 0,69$. Из сравнения этой величины с рассчитанной константой ЭФВ $\lambda = 0,35$ получается оценка для величины парамагнетических эффектов на уровне $\lambda_{\text{spin}} = 0,34$, что хорошо согласуется с предыдущими оценками $0,31$, основанными на RMTA-расчетах

[63]. Мы вернемся к этому вопросу при обсуждении сверхпроводящего состояния, а сейчас перейдем к изложению результатов применения данного подхода к описанию кинетических явлений в нормальной фазе.

Электрон-фононное рассеяние вносит доминирующий вклад в электро- и термосопротивление металлов, исключая достаточно низкие температуры, при которых становятся важными процессы примесного и электрон-электронного рассеяния. Влияние ЭФВ на транспортные свойства металлов описывается с помощью транспортной спектральной функции, введенной ранее соотношениями (39), (40). В приближении низшего порядка для вариационного решения уравнения Больцмана выражение для электрического и термического сопротивления имеют вид [64]

$$\rho = \frac{\pi \Omega_{\text{cell}} k_B T}{N(\epsilon_F) \langle v_x^2 \rangle} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \frac{x^2}{\sinh^2 x} \alpha_{\text{tr}}^2 F(\omega), \quad (108)$$

$$w = \frac{6 \Omega_{\text{cell}}}{\pi k_B N(\epsilon_F) \langle v_x^2 \rangle} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \frac{x^2}{\sinh^2 x} \times \left[\alpha_{\text{tr}}^2 F(\omega) + \frac{4x^2}{\pi^2} \alpha_{\text{out}}^2 F(\omega) + \frac{2x^2}{\pi^2} \alpha_{\text{in}}^2 F(\omega) \right], \quad (109)$$

где $x = \omega/2k_B T$. Выражение для электросопротивления полностью совпадает с тем, что возникает из обобщенной формулы Друде (35) при $\omega = 0$. Определяя верхнюю границу для электросопротивления как вариационное решение, выражение (108), тем не менее, обладает достаточной точностью в среднем интервале температур, чтобы из сравнения теоретических и экспериментальных кривых можно было сделать вывод о качестве описания электрон-фононного взаимодействия и расчета $\alpha_{\text{tr}}^2 F(\omega)$. Мы вычисляли электро- и термосопротивление, используя формулы (108), (109) и наши теоретические спектры ЭФВ (40). Как следует из выражений (108) и (109), при высоких температурах

$$\rho = \frac{\pi \Omega_{\text{cell}} k_B T}{N(\epsilon_F) \langle v_x^2 \rangle} \lambda_{\text{tr}}, \quad (110)$$

$$w = \frac{6 \Omega_{\text{cell}}}{\pi k_B N(\epsilon_F) \langle v_x^2 \rangle} \lambda_{\text{tr}}, \quad (111)$$

где величина λ_{tr} определяется как

$$\lambda_{\text{tr}} = 2 \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \alpha_{\text{tr}}^2 F(\omega). \quad (112)$$

Выражения для $\alpha_{\text{tr}}^2 F(\omega)$ и $\alpha^2 F(\omega)$ очень похожи и различаются только фактором $1 - \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}')/|\mathbf{v}(\mathbf{k})|^2$, который выделяет процессы обратного рассеяния. Тем не менее может существовать значительная разница между $\alpha_{\text{tr}}^2 F(\omega)$ и $\alpha^2 F(\omega)$ в случаях, когда имеются почти параллельные участки ферми-поверхности ("нестинг") [65]. Несмотря на сложную форму поверхностей Ферми в переходных металлах, полученные нами функции $\alpha_{\text{tr}}^2 F(\omega)$ очень похожи на показанные на рис. 1 и отдельно не приводятся. Значения λ_{tr} представлены в табл. 3. Сравнение приведенных значений с данными для констант ЭФВ (табл. 2) дает разницу между λ_{tr} и λ на уровне 20 % во всех исследованных материалах, что полностью соответствует сделанному ранее для переходных металлов заключению $\lambda_{\text{tr}} \simeq \lambda$ [64]. Кривые температурной зависимости электрического сопротивления $\rho(T)$ и теплопроводности $w^{-1}(T)$ в сравнении с эксперименталь-

Таблица 3. Теоретические транспортные константы λ_{tr} в сравнении с экспериментальными величинами, определенными по данным измерений электросопротивления и зонных расчетов плазменной частоты ω_p , значения средней частоты $\Theta = \sqrt{\langle \omega^2 \rangle_{\text{tr}}}$

Параметр	Al	Pb	V	Nb	Ta	Mo	Cu	Pd
$\lambda_{\text{tr}}^{\text{calc}}$	0,37	1,19	1,15	1,16	0,83	0,35	0,13	0,43
$\lambda_{\text{tr}}^{\text{exp}}$	0,39	1,52	1,15	1,11	0,93	0,40	0,12	0,50
ω_p , эВ	12,29	14,93	7,95	9,47	9,05	8,81	8,75	7,34
Θ , К	330	75	260	200	170	290	230	190

ными данными показаны соответственно на рис. 2 и рис. 3. Основной интерес в нашем случае представляет средний интервал температур $\Theta/5 < T < 2\Theta$, где $\Theta \sim \sqrt{\langle \omega^2 \rangle_{\text{tr}}}$. Ожидаемые поправки к вариационному решению уравнения Больцмана в низшем порядке в этом температурном интервале малы, тогда как при низких температурах поправки, связанные с анизотропией и неупругостью рассеяния, могут давать значительный вклад [64]. Мы не исследовали низкотемпературное поведение $\rho(T)$, так как для получения достоверного значения $\alpha_{\text{tr}}^2 F(\omega)$ при $\omega \rightarrow 0$ необходима высокая точность интегрирования по зоне Бриллюэна, а она ограничена нашими вычислительными возможностями. Описание транспортных свойств при высоких температурах ($T > 2\Theta$) в свою очередь требует учета эффекта ангармонизма и размытия поверхности Ферми. Таким образом, средний интервал температур наиболее подходит для исследования связи транспортных свойств и электрон-фононного взаимодействия. Мы определили экспериментальные значения $\lambda_{\text{tr}}^{\text{exp}}$ путем полиномиальной интерполяции экспериментальных точек, показанных на рис. 2,

$$\rho(T) = \sum_{i=1}^n c_i T^{3-2i} \quad (113)$$

в среднем температурном интервале $\Theta/2 < T < \Theta$, $n = 2$. Увеличение параметра n меняет коэффициент c_1 при линейном члене в пределах 3 %. Экспериментальные значения $\lambda_{\text{tr}}^{\text{exp}}$ определялись затем по найденным коэффициентам c_1 и результатам наших зонных расчетов плазменной частоты $\omega_p^2 = 16\pi N(\epsilon_F) \langle v_x^2 \rangle / \Omega_{\text{cell}}$:

$$\lambda_{\text{tr}}^{\text{exp}} = \frac{c_1 \omega_p^2}{16\pi^2 \Omega_{\text{cell}} k_B}. \quad (114)$$

Использованные значения плазменных частот, полученные $\lambda_{\text{tr}}^{\text{exp}}$ и теоретические транспортные константы взаимодействия λ_{tr} приведены в табл. 3.

Для Al (рис. 2а) экспериментально измеренное сопротивление согласуется с теоретическими расчетами во всем среднем интервале температур. Соответствующие значения транспортных констант равны $\lambda_{\text{tr}}^{\text{exp}} = 0,39$ и $\lambda_{\text{tr}} = 0,37$. Отличие приведенных величин от константы ЭФВ ($\lambda = 0,44$) составляет чуть больше 10 %. Для кривых термической проводимости (рис. 3а) также наблюдается хорошее согласие при температурах выше $\Theta/5 \simeq 60$ К. В отличие от Al для свинца величина транспортной константы связи $\lambda_{\text{tr}} = 1,19$ заметно ниже константы электрон-фононного взаимодействия $\lambda = 1,68$. Такое уменьшение может указывать на наличие эффектов анизотропии, пренебрежение которыми в описании кинетических явлений в Pb, возможно, и объясняет более 20%-ную погрешность в рассчитанной величине транспортной

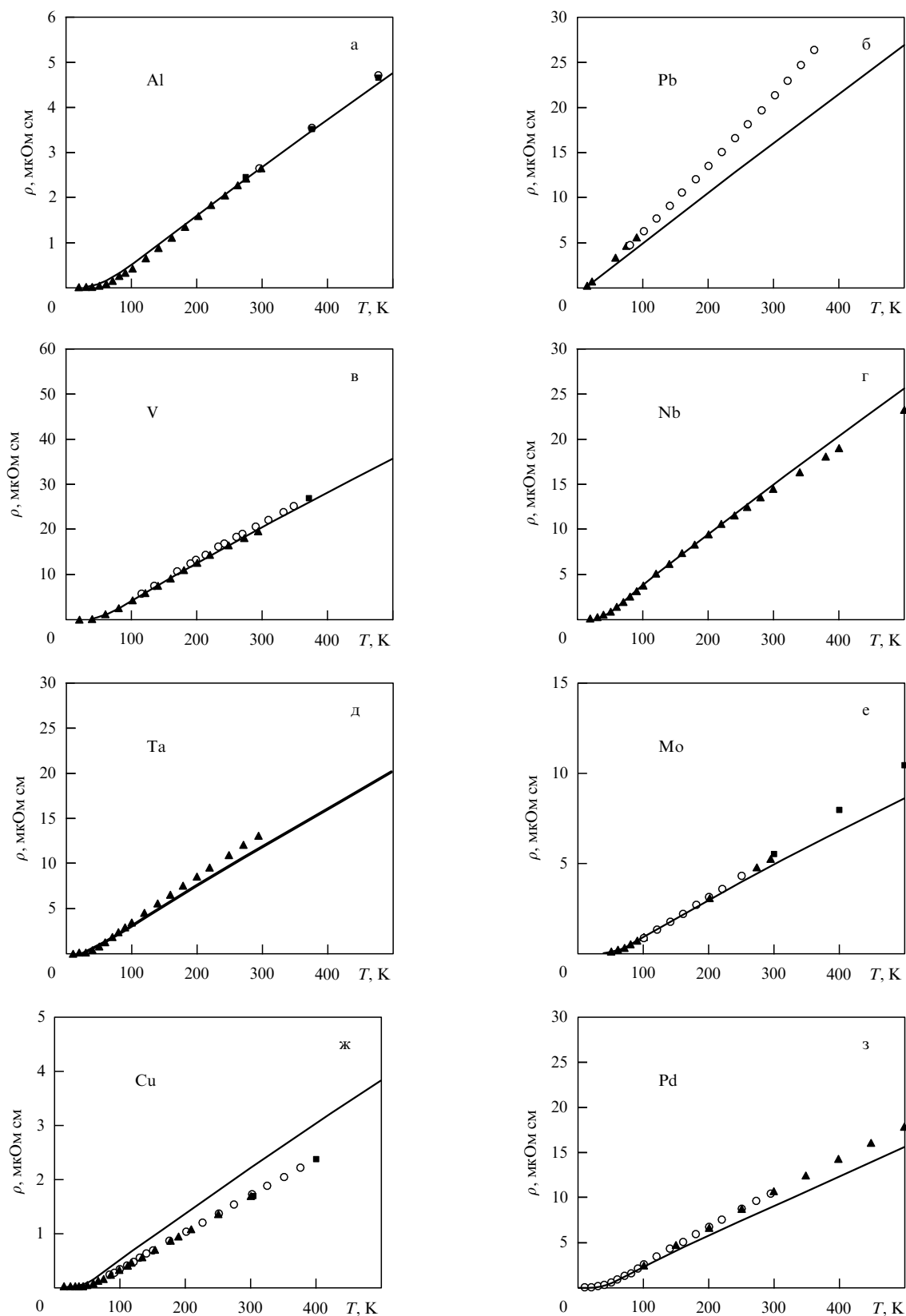


Рис. 2. Температурные зависимости фоновой части электросопротивления, рассчитанные в низшем вариационном приближении к решению уравнения Больцмана в Al (а), Pb (б), V (в), Nb (г), Ta (д), Mo (е), Cu (ж) и Pd (з) (сплошные линии). Экспериментальные данные (см. [44], т. 15а) показаны точками (квадраты, кружки, треугольники).

константы связи по сравнению с экспериментальной $\lambda_{\text{тг}}^{\text{exp}} = 1,52$. Как отмечалось, в Pb могут быть заметны также эффекты ангармонизма. В отсутствие расчетов,

основанных на более точном решении уравнения Больцмана, мы затрудняемся определить главный источник наблюдающихся расхождений.

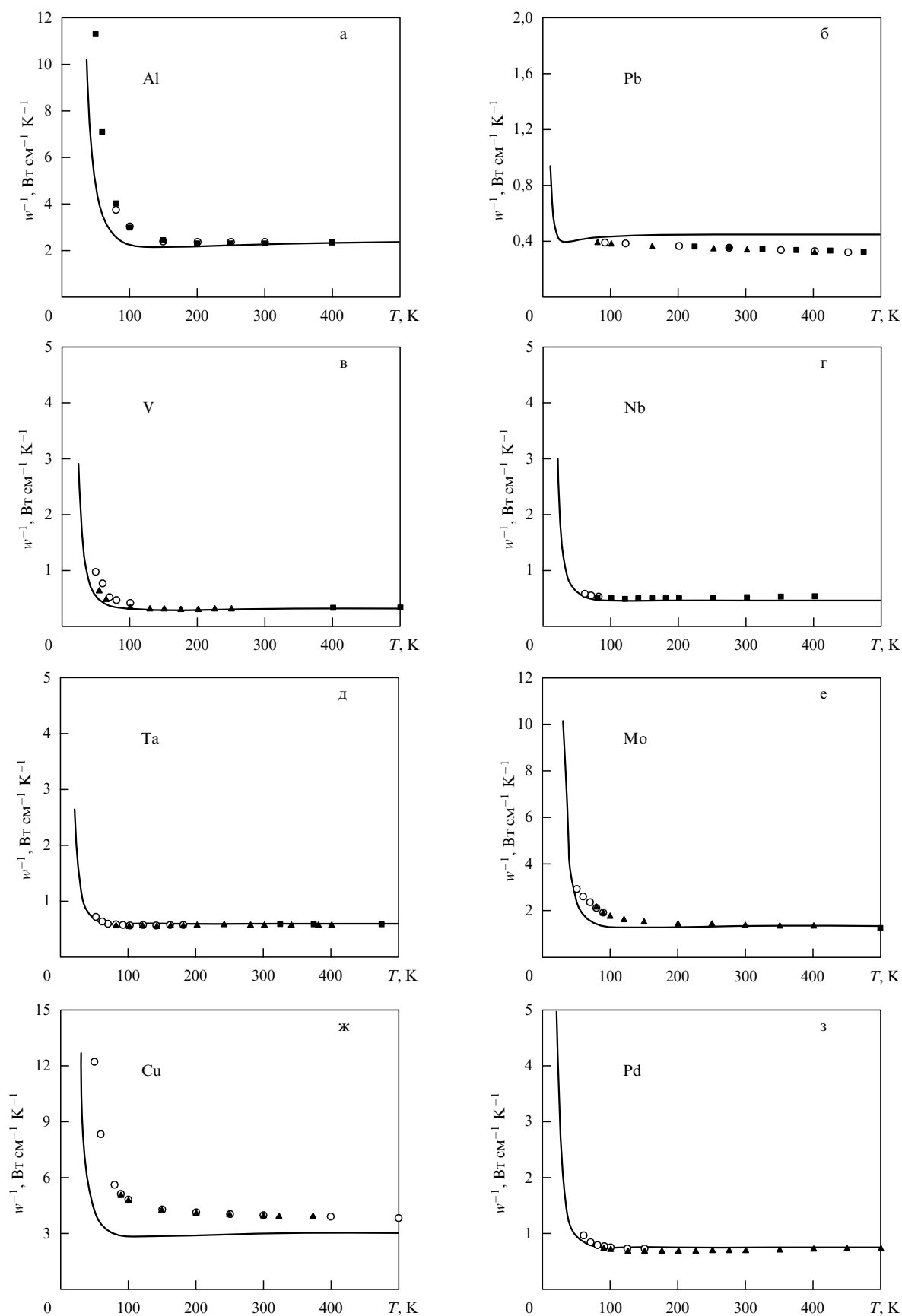


Рис. 3. Температурные зависимости фоновой части теплопроводности, рассчитанные в нижнем вариационном приближении к решению уравнения Больцмана в Al (а), Pb (б), V (в), Nb (г), Ta (д), Mo (е), Cu (ж) и Pd (з) (сплошные линии). Экспериментальные данные (см. [44], т. 15с) показаны точками (квадраты, кружки, треугольники).

Особый интерес представляют результаты описания кинетических свойств в Nb, V и Ta в силу того, что сравнение с данными туннельных экспериментов не дает определенного представления о точности нашего подхода к расчету ЭФВ. Измеряемое сопротивление в Nb демонстрирует насыщение при высоких температурах. Фактически этот эффект заметен (рис. 2г) при температурах выше $2\Theta \simeq 400$ К и не проявляется в среднем интервале температур, где сопротивление слабо отличается от предсказываемого простой Больцмановской теорией. Сравнение рассчитанного значения $\lambda_{tr} = 1,16$ и эмпирической величины $\lambda_{tr}^{exp} = 1,11$ дает количественную характеристику согласия на уровне 5 %. Для V также наблюдается хорошее согласие между экспериментальными и теоретическими данными в среднем температурном интервале (рассчитанное значение $\Theta \simeq 260$ К). Теоретическое значение $\lambda_{tr} = 1,15$ практически совпадает с полученным λ_{tr}^{exp} , несмотря на то, что измеряемое сопротивление в V также демонстрирует эффект насыщения при высоких температурах (на рис. 2в не показано). Применимость формул (108) и (109) с реалистической формой спектральной функции к описанию транспортных свойств как Nb, так и V подтверждается также данными по теплопроводности (рис. 3в, г). Из этих данных получают похожие оценки для λ_{tr}^{exp} и численного согласия между экспериментальными и теоретическими значениями в силу того, что измеряемое число Лоренца приближается к зоммерфельдовскому значению в среднем интервале температур $T \geq \Theta$. Результаты расчета сопротивления и теплопроводности в Ta (рис. 2д и рис. 3д) дают не столь хорошо согласующиеся результаты, как в Nb и V. В отличие от очень хорошего совпадения наблюдаемого поведения термической проводимости с теоретическими предсказаниями наши расчеты недооценивают значения электросопротивления примерно на 10–12 %. Как следствие, полученное значение $\lambda_{tr}^{exp} = 0,93$ превышает теоретическую оценку транспортной константы 0,83 для Ta. Подобное рассогласование может быть объяснено высокотемпературными эффектами, проявляющимися вблизи верхней границы рассматриваемого температурного интервала ($2\Theta \simeq 320$ К). К тому же, полученная оценка λ_{tr}^{exp} , основанная на имеющейся экспериментальной информации, не достаточно надежна, так как качество выделения электрон-фононной части сопротивления зависит от чистоты образца и должно подтверждаться несколькими экспериментами.

По этим причинам мы не рассматривали точки сопротивления при температурах выше 300 К, показанные на рис. 2е для Mo. Интерполяция на интервале $T < 300$ К (рассчитанное значение для Mo $\Theta \simeq 280$ К) дает результат для эмпирической величины транспортной константы $\lambda_{tr}^{exp} = 0,40$, что совпадает с нашим предсказанием. Согласие в данных по теплопроводности вполне удовлетворительно во всем показанном на рис. 3е температурном интервале. Ввиду отсутствия туннельных экспериментов на меди мы не могли ранее непосредственно сравнить данные по константам электрон-фононного взаимодействия в Cu. Согласие значений транспортных констант $\lambda_{tr} = 0,13$ и $\lambda_{tr}^{exp} = 0,12$ может быть признано вполне удовлетворительным.

Полученная точность 10–13 % в описании транспортных свойств Pd (рис. 2з и рис. 3з) и соответствующих констант взаимодействия (см. табл. 3) находится

чуть выше уровня наших численных ошибок. В отличие от Ta здесь наиболее вероятное объяснение имеющихся различий связано с присутствием в Pd дополнительных механизмов сопротивления.

Как следует из представленных данных, наблюдаемое поведение $\rho(T)$ и $w(T)$ соответствует соотношениям (110) и (111) в среднем интервале температур, и рассчитанные с использованием реалистических транспортных функций ЭФВ теоретические кривые в основном хорошо согласуются с экспериментальными данными. Более точно, полученные по экспериментальным точкам на основе зонных расчетов плазменной частоты ω_p величины λ_{tr}^{exp} согласуются с теоретическими оценками транспортных констант с точностью порядка 10 % и, в частности, менее 5 % для Nb, V, Mo и Al. Фактически с экспериментом сравнивается отношение λ_{tr}/ω_p^2 . В рассмотренных металлах, за исключением, может быть, Cu, зонные расчеты дают хорошую оценку плазменной частоты. Таким образом, мы, не отбрасывая возможности сокращения ошибок, считаем, что теоретические величины λ_{tr} действительно согласуются с экспериментальными значениями. Недостатки вариационного решения уравнения Больцмана в низшем порядке, не учитывающего эффекты анизотропии электрон-фононного рассеяния, наряду с явлениями ангармонизма могут служить объяснением наблюдающегося рассогласования для Pb. При анализе данных в Pd мы также не учитывали возможность дополнительного механизма сопротивления. Тем не менее, принимая во внимание согласие по другим параметрам, мы считаем описание электрон-фононного взаимодействия во всех рассмотренных металлах вполне удовлетворительным.

Теперь обсудим результаты расчетов времен релаксации электронов за счет ЭФВ. Один из наиболее распространенных и доступных методов изучения времени релаксации — это оптические измерения в инфракрасной области спектра. До недавнего времени оптические измерения обычно описывались с помощью так называемой формулы Друде для проводимости [66]:

$$\sigma(\omega) = \frac{\omega_p^2}{4\pi} \frac{1}{-i\omega + \tau_{tr}^{-1}}, \quad (115)$$

где τ_{tr}^{-1} — обратное время релаксации. Эта величина обычно рассматривалась как некоторая постоянная. Поскольку измерения обычно проводились при энергиях оптических квантов ω , существенно больших, чем фононные частоты, и при достаточно высоких температурах, то независимость τ_{tr}^{-1} от ω не вызывала сомнений. Это обстоятельство в значительной мере подкреплялось теоретическими расчетами времени релаксации, входящего в одночастичную функцию Грина (см. формулу (26)). Как известно [3], соответствующая функция τ^{-1} резко возрастает с увеличением ω и выходит на постоянное значение при $\omega \simeq \omega_{max}$, где ω_{max} — граничная частота фононов.

В этом отношении достаточно неожиданными оказались измерения оптических времен релаксации в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) [67]. В этих работах было показано, что обратное время релаксации линейно возрастает с ростом энергии ω в широком интервале энергий от 0,02 эВ до 0,4 эВ, хотя ω_{max} в этих соединениях порядка 0,1 эВ. Подобное поведение функции $\tau^{-1}(\omega)$ многими исследователями было воспринято

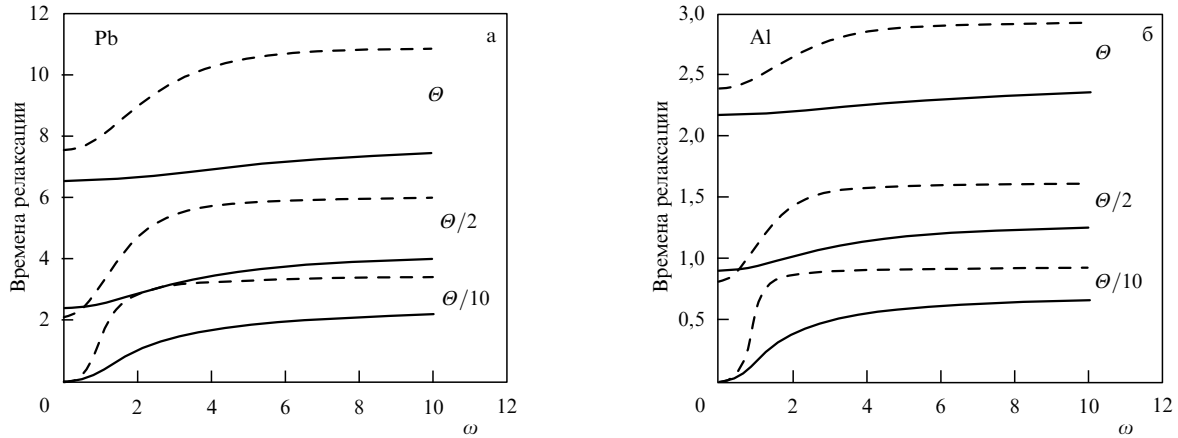


Рис. 4. Рассчитанные с использованием теоретических спектральных функций ЭФВ эффективные квазичастичные $\tilde{\tau}^{-1}(\omega)$ (штриховые кривые) и кинетические $\tau_{tr}^{-1}(\omega)$ (сплошные кривые) обратные времена релаксации в Pb (а) и Al (б) в зависимости от частоты ω при трех значениях температуры T : $\Theta/10$, $\Theta/2$, Θ . Используются приведенные координаты в единицах ω_{\max} .

как доказательство существования в ВТСП механизма релаксации электронов, отличного от ЭФВ. В частности, была предложена модель маргинальной ферми-жидкости [68], поведение которой при низких энергиях весьма существенно отличается от поведения стандартной ферми-жидкости Ландау. В действительности, как это было показано в работе [69], подобное поведение времени релаксации вполне может быть объяснено и в рамках стандартного ЭФВ. Главная причина этого явления связана со значительным отличием одночастичного времени релаксации, определяемого формулами (21), (25), от кинетического времени релаксации, существующего в обобщенной формуле Друде (35) и определяемого соотношениями (36), (37).

Как легко убедиться, оба обратных времени релаксации ведут себя сходным образом при высоких температурах $T > \omega_{\max}$ и энергиях $\omega \gg \omega_{\max}$:

$$\frac{1}{\tau_{tr}} = 2\pi\lambda_{tr}T, \quad T > \omega_{\max}, \quad (116)$$

$$\frac{1}{\tau_{tr}(\omega)} = \pi\lambda_{tr}\langle\omega\rangle_{tr}, \quad \omega \gg \omega_{\max}. \quad (117)$$

Здесь $\langle\omega\rangle$ и $\langle\omega\rangle_{tr}$ — соответствующие средние фоновые частоты, определяемые как

$$\langle\omega\rangle_{tr} = \frac{2}{\lambda_{tr}} \int d\omega \alpha_{tr}^2(\omega) F(\omega). \quad (118)$$

Как мы уже отмечали ранее, обычно в металлах $\lambda \simeq \lambda_{tr}$, хотя вполне возможно в ряде случаев и значительное отличие этих величин друг от друга. Поведение функций $\tau^{-1}(\omega)$ и $\tau_{tr}^{-1}(\omega)$ может сильно различаться в пределе $T \rightarrow 0$ и $\omega \rightarrow 0$, но обе они обращаются в нуль в данном пределе. Наиболее же существенное различие этих функций наблюдается в промежуточной области энергий и температур. Используя описанные выше результаты расчетов функций $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ и $\alpha_{tr}^2(\omega)F(\omega)$, мы вычислили функции $\tau^{-1}(\omega)$ и $\tau_{tr}^{-1}(\omega)$ для Pb, Nb и Al [70]. На рис. 4а изображены зависимости обратных времен релаксации от частоты в Pb при значениях температуры $T = \Theta/10, \Theta/2, \Theta$. Мы не представляем графики для Nb,

поскольку в приведенных координатах, используемых нами, разница между результатами для Nb и Pb практически неразличима. На рисунке приводятся данные для величин $\tilde{\tau}^{-1}(\omega)$, определяемые как

$$\frac{1}{\tilde{\tau}(\omega)} = \frac{m}{m^*(\omega)} \frac{1}{\tau(\omega)}. \quad (119)$$

Согласно анализу, проведенному в разделе 2, во-первых, они более соответствуют понятию обратного времени релаксации, а во-вторых, именно эти величины обычно фигурируют в экспериментальных данных [67].

Как видно из графика, поведение функций $\tilde{\tau}^{-1}(\omega)$ и $\tau_{tr}^{-1}(\omega)$ действительно серьезно отличается в области промежуточных энергий. Так, например, $\tilde{\tau}_{tr}^{-1}(\omega)$ не достигает своего максимального значения $\pi\lambda_{tr}\langle\omega\rangle_{tr}$ даже при энергиях $\omega \simeq 10\Theta$. Более того, в области энергий $\Theta/5 \leq \omega \leq 3\Theta$ функция $\tilde{\tau}_{tr}^{-1}(\omega)$ демонстрирует квазилинейное возрастание с увеличением ω . Подобное же поведение этих функций заметно и на графике рис. 4б для Al, хотя константа ЭФВ для этого металла существенно меньше, чем для Pb. Единственное, что следует отметить здесь, это то, что область квазилинейного поведения функции $\tilde{\tau}_{tr}^{-1}(\omega)$ в этом случае несколько уже. Как было показано в работе [69], в ВТСП, где константа ЭФВ λ может быть порядка 2, область квазилинейной зависимости $\tilde{\tau}_{tr}^{-1}(\omega)$ может распространяться и до $\omega \simeq 4\Theta$. Таким образом, квазилинейная зависимость $\tilde{\tau}_{tr}^{-1}(\omega)$ есть общее свойство всех металлов, обусловленное ЭФВ. Различие между металлами связано лишь с разницей энергетических масштабов, определяемых константой ЭФВ и граничной энергией фононов.

В заключение этого раздела обсудим результаты численного решения уравнений Элиашберга с теоретическими спектральными функциями ЭФВ $\alpha^2 F(\omega)$. Прежде всего отметим, что для линейаризованного уравнения Элиашберга для критической температуры T_c давно известна интерполяционная формула Макмиллана, полученная в расчетах с модельной спектральной функцией:

$$T_c = \frac{\langle\omega_{\log}\rangle}{1,2} \exp \left[-\frac{1,04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^*(1+0,62\lambda)} \right]. \quad (120)$$

Как видно, наиболее важное влияние на значение T_c оказывает первый обратный момент спектральной функции λ и величина μ^* . Как уже отмечалось, величина кулоновского псевдопотенциала μ^* известна плохо и фактически может использоваться как подгоночный параметр. Мы определили величину μ^* из условия равенства критической температуры экспериментально наблюдаемой величине. При этом использовалась техника численного решения уравнения Элиашберга для T_c , а точнее, для μ^* . Параметр ω_c был выбран равным $10\omega_{\max}$. Найденная величина параметра кулоновского отталкивания относится, таким образом, к этому же значению частоты, т.е. $\mu^*(\omega_c)$. Для того чтобы рассматривать параметр кулоновского псевдопотенциала в контексте выражения (120), необходимо реально использованный при решении уравнения Элиашберга параметр $\mu^*(\omega_c)$ привести к $\mu^* = \mu^*(\langle\omega_{\log}\rangle)$ согласно формуле

$$\frac{1}{\mu^*} = \frac{1}{\mu^*(\omega_c)} + \ln \frac{\omega_c}{\langle\omega_{\log}\rangle}. \quad (121)$$

Результаты нашего расчета приведены в табл. 4. Там также приводятся вычисленные значения величины T_c^M , полученные по формуле (120). В качестве параметра, непосредственно сравниваемого с экспериментом, мы взяли величину энергетической щели Δ_0 при $T = 0$, полученную численно из уравнения Элиашберга для щели. При этом параметр μ^* был уже фиксирован правильным значением T_c .

Таблица 4. Рассчитанные значения μ^* , обеспечивающие экспериментальную величину T_c при численном решении уравнения Элиашберга с теоретическими спектральными функциями $\alpha^2F(\omega)$; значения T_c^M , определенные по формуле Макмиллана для контроля отклонения точного численного решения от интерполяционной формулы, и рассчитанные и экспериментальные [50] величины параметра сверхпроводящей щели Δ_0

Параметр	Al	Pb	V	Nb	Ta	Mo	Cu	Pd
μ^*	0,12	0,17	0,30	0,21	0,17	0,16	0,11	—
$T_c^{\text{exp}}, \text{ K}$	1,18	7,19	5,40	9,25	4,47	0,92	> 0	—
$T_c^M, \text{ K}$	1,40	6,90	6,68	10,12	4,91	1,07	> 0	—
$\Delta_0^{\text{calc}}, \text{ мэВ}$	0,18	1,35	0,84	1,53	0,70	0,14	—	—
$\Delta_0^{\text{exp}}, \text{ мэВ}$	0,18	1,33	0,81	1,56	0,71	—	—	—

Имеющиеся туннельные данные для Al дают совпадающее с нашим значение $\Delta_0 = 0,18$ мэВ. Соответствующее значение $2\Delta_0/T_c = 3,54$ фактически совпадает с даваемым теорией БКШ. К тому же, значение $\mu^* = 0,12$ вполне соответствует общепринятым представлениям об этой величине в простых металлах. Отличие точного решения $T_c = 1,18$ К от предсказываемого по формуле Макмиллана $T_c^M = 1,22$ К составляет менее 5 %, что неудивительно — простой спектр алюминия (рис. 1а) хорошо аппроксимируется модельными функциями. Более интересен результат, полученный нами для Pb, в котором спектр уже имеет выраженный двухпиковый характер (рис. 1б). Тем не менее формула (120) по-прежнему имеет точность около 5 %, давая $T_c^M = 6,81$ К, притом, что $T_c = 7,19$ К. Хорошо известный как система с сильной электрон-фононной связью Pb среди всех изучаемых здесь металлов обладает максимальным отношением $2\Delta_0/T_c \simeq 4,3$. Численное решение уравнения Элиашберга дает величину энергетической щели

$\Delta_0 = 1,35$ мэВ, что фактически совпадает с туннельными оценками этой величины $\Delta_0^{\text{exp}} = 1,33$ мэВ. Однако полученная нами величина $\mu^* = 0,17$ может быть признана несколько завышенной. Такая же ситуация сложилась и для переходных металлов.

Для Ta мы использовали значение $\mu^* = 0,17$ и получили величину $\Delta_0 = 0,70$ мэВ, которая может быть сопоставлена с экспериментальным значением 0,71 мэВ. В рассмотренных переходных металлах, имеющих ярко выраженный двухпиковый характер спектров ЭВФ (см. рис. 1) с довольно большой амплитудой, формула Макмиллана имеет погрешность более 10 %, что обосновывает необходимость нахождения точного решения уравнения Элиашберга для T_c . Для Ta ($T_c = 4,47$ К), V ($T_c = 5,40$ К) и Nb ($T_c = 9,25$ К) соответствующие значения T_c^M равны 5,11; 6,68 и 10,5 К. Несмотря на трудности в проведении туннельных экспериментов на Nb и V и связанное с ними разнообразие результатов, о чем говорилось при обсуждении результатов, относящихся к оценке констант связи λ , туннельные данные по величине энергетической щели примерно одинаковы во всех экспериментах. Так, для V $\Delta_0^{\text{exp}} = 0,81$ мэВ. Расчетное значение имеет величину 0,84 мэВ, что всего лишь на 4 % превышает экспериментальное значение. В Nb эти величины имеют соответственно экспериментальное и теоретическое значения 1,56 мэВ и 1,53 мэВ, т.е. практически совпадают. Основную проблему в этих материалах представляет величина μ^* . Согласно нашей схеме, мы использовали для параметра кулоновского псевдопотенциала в V и Nb значения 0,29 и 0,21 соответственно. Надо сказать, что завышение параметров μ^* , представление о величине которых связано с практикой обработки туннельных данных, обусловлено тем, что теоретические оценки констант связи λ превышают соответствующие туннельные оценки. Как следствие, необходимы более высокие значения μ^* , чтобы дать правильное значение критической температуры. Эта проблема обсуждалась в литературе (см., например, [71]), в частности, в связи с возможностью спиновых флуктуаций в Nb и V. Так как парамагниты подавляют критическую температуру, существует возможность объяснить наблюдаемые значения T_c при высоких значениях констант ЭФВ, даваемых теоретическими расчетами, не предполагая больших значений μ^* . Но в таком случае должен также наблюдаться вклад λ_{spin} в перенормировку электронной массы вследствие электрон-парамагнитного взаимодействия. Как видно из приведенных ранее (табл. 2) данных, экспериментальные значения λ_{SH} весьма точно совпадают с рассчитанными λ для фононов, не оставляя возможности для включения парамагнитного вклада λ_{spin} (исключая Pd). С другой стороны, значения $\mu^* < 0,3$ все еще могут считаться приемлемыми.

В заключение обсудим результаты для Mo, Cu и Pd. Для Mo ввиду малости критической температуры туннельные результаты отсутствуют. Рассчитанное значение составляет $\Delta_0 = 0,14$ мэВ, что с точки зрения близости сверхпроводимости в Mo к модели БКШ вполне обосновано, соответственно, $2\Delta_0/T_c = 3,53$. Оценка 0,14 для величины μ^* также имеет общепринятое значение. В Cu найденное значение параметра кулоновского отталкивания, достаточное для фактического подавления сверхпроводимости, равняется $\mu^* = 0,11$. Что касается палладия, то найденное ранее значение $\lambda_{\text{spin}} = 0,34$ фактически совпадает с величиной электрон-фононной связи

$\lambda = 0,35$, что хорошо укладывается в имеющиеся представления о механизме подавления сверхпроводимости в этом металле.

6. Заключение

В данном обзоре показано, что в стандартных металлах, обладающих малым параметром адиабатичности $(\omega_D/\varepsilon_F)^{1/2}$, проблема ЭФВ в рамках многочастичной теории Мигдала–Элиашберга может быть решена практически точно как для нормального, так и для сверхпроводящего состояния. В самом этом факте нет, конечно, ничего нового. Это обстоятельство известно, фактически, из самых ранних работ Мигдала [13] и Элиашберга [14].

Как неоднократно подчеркивалось в недавних работах Райнера [2, 72], в рамках теории ферми-жидкости Ландау ЭФВ и его вклад в физические свойства металлов полностью выражается с помощью нескольких спектральных плотностей, в частности, функции Элиашберга $\alpha^2(\omega)F(\omega)$. В рамках самой теории ферми-жидкости эти плотности остаются неопределенными материальными параметрами (точнее функциями) данного конкретного металла. Развитые недавно [39, 41–43] методы расчета ЭФВ в рамках МФП, как это показано в обзоре, позволяють с достаточно хорошей степенью точности рассчитать и сами спектральные плотности. Нами показано также, что развитые гибридные методы расчета, основанные на подстановке величины матричного элемента ЭФВ, полученного в рамках МФП, в формулы многочастичной теории, применимы именно для стандартных металлов. Возникает вопрос, как установить стандартность того или иного металла, и что представляют собой нестандартные металлы. Прежде всего стандартными металлами, в некотором смысле по определению, можно считать металлы, в которых заведомо выполнен критерий адиабатичности. Возможны достаточно тривиальные причины нарушения адиабатичности. Например, в случае вырожденных полупроводников энергия Ферми электронов проводимости может оказаться сравнимой с характерными фоновыми частотами. Это может привести к появлению различного рода гибридных электрон-фононных возбуждений и целому ряду других неадиабатических явлений. Другой, также достаточно тривиальной, причиной неадиабатичности может явиться наличие интенсивных межзонных переходов с энергиями, сравнимыми с фоновыми частотами. Ясно, что количественный расчет из первых принципов явлений, возникающих даже в этих простых случаях, в данный момент невозможен. Более того, представляется не вполне ясной возможность использования гамильтониана Фрелиха с некоторыми заданными значениями матричного элемента ЭФВ даже для качественного изучения этих неадиабатических явлений.

Еще более неопределенной с точки зрения изучения ЭФВ является ситуация в системах с сильными обменно-корреляционными эффектами. Имеющиеся к настоящему времени работы в этом направлении [73–76] выполнены в рамках полуфеноменологического подхода, использующего для описания межэлектронных взаимодействий модель Хаббарда. В этих условиях достаточно затруднительно установить взаимосвязь между результатами зонного подхода в рамках МФП и

результатами модельных расчетов. Затруднительно также установить реальное отличие между результатами расчетов ЭФВ в рамках МФП и экспериментом в таких системах, поскольку описанные в этом обзоре методы были до сих пор применены лишь для расчета одной системы CaCuO_2 [77], подозреваемой в наличии сильных обменно-корреляционных эффектов. В ней, однако, достаточно плохо известны экспериментальные данные о кинетических и оптических свойствах.

В заключение авторы выражают благодарность многим коллегам за обсуждение материалов обзора. В первую очередь это относится к О.В. Долгову, К.А. Киоину, М. Куличу, Д. Райнеру. Работа была поддержана грантами INTAS (93-2154) и РФФИ (96-02-16134а).

Список литературы

- Scalapino D J, in *Superconductivity* Vol. 1 (Ed. R D Parks) (New York: Dekker, 1969) p. 449
- Rainer D, in *Progress in Low Temperature Physics* (Ed. D F Brewer) (Amsterdam: Elsevier, 1986) p. 371
- Allen P B, Mitrovic B, in *Solid State Physics* Vol. 37 (Eds F Zeitz, D Turnbull, H Ehrenreich) (New York: Acad. Press, 1982) p. 1
- Долгов О В, Максимов Е Г *Труды ФИАН* **148** 3 (1983)
- McMillan W L, Rowell J M, in *Superconductivity* Vol. 1 (Ed. R D Parks) (New York: Dekker, 1969) p. 561
- Gaspari G D, Gyoffy B L *Phys. Rev. Lett.* **28** 801 (1972)
- Hohenberg P, Kohn W *Phys. Rev.* **136** B864 (1964)
- Kohn W, Sham L J *Phys. Rev.* **140** A1133 (1965)
- Lundqvist S, March S N (Eds) *Theory of the Inhomogeneous Electron Gas* (New York: Plenum, 1983) [Перевод на русский язык (Под ред. Д.А. Киржница, Е.Г. Максимова) (М.: Мир, 1987)]
- Максимов Е Г, Саврасов С Ю *УФН* **165** 773 (1995)
- Gross E K U, Dobson J F, Petersilka M, in *Density Functional Theory* (Ed. R F Nalewaiski) (Berlin: Springer Series, Topics in Current Chemistry, 1996) p. 71
- Абрикосов А А, Горьков Л П, Дзялошинский И Е *Методы квантовой теории поля* (М.: Физматгиз, 1962)
- Мигдал А Б *ЖЭТФ* **34** 1438 (1958)
- Элиашберг Г М *ЖЭТФ* **38** 966 (1960); **39** 1437 (1960)
- Allen P B, in *Dynamical Properties of Solids* Vol. 3 (Eds G K Horton, A A Maradudin) (Amsterdam: North-Holland, 1980) p. 95
- Allen P B *Phys. Rev. B* **6** 2577 (1972)
- Максимов Е Г, Саврасов С Ю *УФН* **160** 155 (1990)
- Mahan G D *Phys. Rep.* **145** 251 (1987)
- Allen P B *Phys. Rev. B* **3** 305 (1971)
- Allen P B *Commun. Cond. Math. Phys.* **15** 327 (1992)
- Dolgov O V, Shulga S V *J. Supercond.* **8** 613 (1995)
- Максимов Е Г *ЖЭТФ* **69** 2236 (1975)
- Ландау Л Д *ЖЭТФ* **34** 262 (1958); **35** 97 (1958)
- Силин В Г *ЖЭТФ* **38** 977 (1960)
- Канторович В *ЖЭТФ* **45** 1638 (1963)
- Luttinger J M, Ward J C *Phys. Rev.* **118** 1417 (1960)
- Luttinger J M *Phys. Rev.* **119** 1153 (1960)
- Yasuhara H, Ousaka Y *Int. J. Mod. Phys. B* **6** 3089 (1992)
- Eliashberg G M *Physica A* **200** 95 (1993)
- Элиашберг Г М, фон дер Линден *Письма в ЖЭТФ* **59** 413 (1994)
- Nozieres P *Theory of Interacting Fermi Systems* (New York: W A Benjamin Inc., 1964)
- Jones R O, Gunnarsson O *Rev. Mod. Phys.* **61** 689 (1989)
- Sternheimer R M *Phys. Rev.* **96** 951 (1954); **107** 1565 (1957)
- Зейн Н Е *ФТТ* **26** 3028 (1984)
- Baroni S, Giannozzi P, Testa A *Phys. Rev. Lett.* **58** 1861 (1987)
- Klein B M, Pickett W F, in *Superconductivity in d- and f-Band Metals* (Eds W Buckel, W Weber) (Karlsruhe: Kernforschungszentrum, 1982) p. 447
- Butler W H, in *Physics of Transition Metals* (New York: AIP, 1980) p. 505
- Schönhammer K, Gunnarsson O *Phys. Rev. B* **37** 3128 (1988)
- Savrasov S Yu *Phys. Rev. Lett.* **69** 2819 (1992)

40. Andersen O K *Phys. Rev. B* **12** 3060 (1975)
41. Savrasov S Yu, Savrasov D Yu *Phys. Rev. B* **46** 12181 (1992)
42. Savrasov S Yu, Savrasov D Yu, Andersen O K *Phys. Rev. Lett.* **72** 372 (1994)
43. Savrasov S Yu, Savrasov D Yu *Phys. Rev. B* (in press)
44. *Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology, Landolt-Bornstein New Series, Group III, Crystal and Solid State Physics* Vol. 13a (Ed. K-H Hellwege) (Berlin, New York: Springer-Verlag, 1981); Vol. 15a (Ed. K-H Hellwege) (1982), Vol. 15c (Ed. O Madelung) (1982)
45. Jepsen O, Andersen O K *Phys. Rev. B* **29** 5965 (1984)
46. Butler W H, Smith H G, Wakabayashi N *Phys. Rev. Lett.* **39** 1004 (1977); Butler W H, Pinski F J, Allen P B *Phys. Rev. B* **19** 3708 (1979)
47. Harmon B N, Sinha S K *Phys. Rev. B* **16** 3919 (1977); Gloetzel B, Rainer D, Schober H R Z. *Phys. B* **35** 317 (1979); Peter M et al., in *Superconductivity in d- and f-Band Metals* (Eds W Buckel, W Weber) (Karlsruhe: Kernforschungszentrum, 1982) p. 515
48. Winter H J. *Phys. F* **11** 2283 (1981)
49. Dacorogna M M, Cohen M L, Lam P K *Phys. Rev. Lett.* **55** 837 (1985)
50. Wolf E L *Principles of Electronic Tunneling Spectroscopy* (Oxford: Oxford University Press, 1985)
51. Gironcoli S *Phys. Rev. B* **51** 6773 (1995)
52. McMillan W L *Phys. Rev.* **167** 331 (1968)
53. Shen L Y *Phys. Rev. Lett.* **24** 1104 (1970)
54. Arnold G B, Zasadzinski J, Wolf E L *Phys. Lett. A* **69** 136 (1978); Wolf E L et al. *J. Low Temp. Phys.* **40** 19 (1980)
55. Zasadzinski J et al. *Phys. Rev. B* **25** 1622 (1982)
56. Geschneidner K A, in *Solid State Physics* Vol. 16 (Eds H Ehrenreich, F Seitz, D Turnbull) (New York: Academic Press, 1964) p. 275
57. Radebaugh R, Keesom P H *Phys. Rev.* **149** 217 (1966)
58. Bostock J et al. *Phys. Rev. Lett.* **36** 603 (1976)
59. Gärtner K, Hahn A Z. *Naturforsch. a* **31** 361 (1976)
60. Robinson B, Geballe T H, Rowel J W, in *Superconductivity in d- and f-Band Metals* (New York: AIP Conf. 1972) p. 381
61. Crabtree G W et al. *Phys. Rev. Lett.* **42** 390 (1979)
62. Wolf E L *Principles of Electronic Tunneling Spectroscopy* (Oxford: Oxford University Press, 1985) p. 263
63. Pinski F J, Butler W H *Phys. Rev. B* **19** 6010 (1979)
64. Pinski F J, Allen P B, Butler W H *Phys. Rev. B* **23** 5080 (1981)
65. Grespi V H, Cohen M L *Solid State Comm.* **81** 187 (1992)
66. Мотулевич Г П *УФН* **97** 211 (1969)
67. Kotter L D et al. *Phys. Rev. Lett.* **67** 2741 (1991); Cooper S L et al. *Phys. Rev. B* **4** 2549 (1992)
68. Schmitt-Rink S, Varma C M, Ruckenstein A E *Phys. Rev. Lett.* **60** 2793 (1988)
69. Shulga S V, Dolgov O V, Maksimov E G *Physica C* **178** 317 (1990)
70. Maksimov E G et al. (in press)
71. Rietschel H, Winter H *Phys. Rev. Lett.* **43** 1256 (1979)
72. Rainer D, in *Progress in Low Temperature Physics* Vol. X (Ed. D E Brewer) (Amsterdam: Elsevier Sci. Publ., 1986) p. 371
73. Kim J H et al. *Phys. Rev. B* **44** 5148 (1991)
74. Kim J H, Tesanovic Z *Phys. Rev. Lett.* **71** 4218 (1993)
75. Grilli M, Catelani C *Phys. Rev. B* **50** 16880 (1994)
76. Kulic M, Zeyher C *Phys. Rev. B* **49** 4395 (1994)
77. Savrasov S Yu, Andersen O K *Phys. Rev. Lett.* (in press)

Electron-phonon interaction and the physical properties of metals

E.G. Maksimov, D Yu Savrasov

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

Leninskii prosp. 53, 117924 Moscow, Russia

Tel. (7-095) 135-75 11

Fax (7-095) 135-85 33

E-mail: maksimov@lpi.ac.ru, savrasov@lpi.ac.ru

S Yu Savrasov

Max-Planck Institut, 70569 Stuttgart, Germany

Theoretical work dealing with the electron-photon interaction (EPI) and its effects on the physical properties of metals is reviewed. The multi-particle approach and that using Landau's Fermi liquid theory are briefly described and their adequacy is demonstrated for low values of the adiabaticity parameter $(\omega_D/\varepsilon_F)^{1/2}$, where ω_D is the characteristic photon frequency, and ε_F the Fermi energy. Density functional methods for EPI calculations are outlined and, for a number of simple and transition metals, the results of calculations for EPI spectral densities and EPI-dependent physical properties are presented. The potential and the range of validity of EPI applications of the density functional method are discussed.

PACS numbers: 63.20.Kr, **71.10. + x**, 71.20.Cf, **71.38. + i**

Bibliography — 77 references

Received 18 December 1996