

НЕАДИАБАТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В ФОНОННЫХ СПЕКТРАХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ

А. Е. Каракозов^а, Е. Г. Максимов^{б*}

^а Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина Российской академии наук

^б Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук

Поступила в редакцию 19 ноября 1998 г.

Изучаются неадиабатические поправки к собственно-энергетической части фононной функции Грина $\Sigma_s(\mathbf{q}, \omega)$ для различных значений векторов фононов \mathbf{q} , возникающие за счет электрон-фононного взаимодействия. Показано, что дальнедействующее межэлектронное кулоновское взаимодействие не оказывает на эти эффекты никакого прямого влияния помимо возможной перенормировки соответствующих констант. В рамках приближения Бардина—Купера—Шриффера вычислены электронные функции отклика и $\Sigma_s(\mathbf{q}, \omega)$ для любых векторов \mathbf{q} и энергий ω . Полученные результаты для $q = 0$ совпадают с ранее известными. Показано, что при больших волновых векторах q вершинные поправки незначительны и $\Sigma_s(\mathbf{q}, \omega)$ имеет логарифмическую сингулярность при $\omega = 2\Delta$, где Δ — сверхпроводящая щель. Показано также, что в системах с нестингом $\Sigma_s(\mathbf{Q}, \omega)$, где \mathbf{Q} — вектор нестинга, имеет сингулярность корневого типа при $\omega = 2\Delta$, т. е. точно такого же типа, что и при $q = 0$. Полученные результаты используются для объяснения опубликованных недавно экспериментальных данных о фононных аномалиях при больших q , наблюдавшихся в никелевых борокарбидах в сверхпроводящем состоянии. Показано, в частности, что учет эффектов нестинга в этих системах необходим для описания возникновения при $T < T_c$ узкой дополнительной линии в фононной спектральной функции $S(\mathbf{q}, \omega) \approx -\pi^{-1} \text{Im} D_s(\mathbf{q}, \omega)$, где $D_s(\mathbf{q}, \omega)$ — фононная функция Грина.

1. ВВЕДЕНИЕ

Обычно фононные спектры металлов вычисляются в адиабатическом приближении [1], т. е. перестройка электронной подсистемы при сдвиге ионов считается мгновенной. С формальной точки зрения это означает, что при расчете динамики решетки все вовлеченные в этот процесс функции отклика электронов учитываются в статическом приближении. Поправки, связанные с учетом динамических характеристик электронной системы (т. е. частотной зависимости функций отклика электронов), обычно малы в меру $\sqrt{m/M}$, где m — масса электрона и M — масса иона. Впервые Энгельсберг и Шриффер заметили [2], что неадиабатические эффекты могут быть не малыми для оптических фононов при малых волновых векторах $qv_F < \omega_0$, где v_F — фермиевская скорость электронов и ω_0 — соответствующая фононная частота. В этом случае неадиабатические эффекты могут приводить к большой (не пропорциональной $\sqrt{m/M}$) перенормировке фононных частот, сильной дисперсии фононных частот при малых q и к появлению конечной величины затухания таких фононов [3]. Это явление наблюдали в комбинационном рассеянии света на некоторых металлах [4, 5]. Недавно эта проблема была подробно рассмотрена в работе [6].

*E-mail: maksimov@tp.lpi.ac.ru

Неадиабатические эффекты могут оказаться даже более существенными в сверхпроводящем состоянии для фононных частот $\omega \approx 2\Delta$, где Δ — сверхпроводящая щель. Изменение фононных частот и затуханий при переходе в сверхпроводящее состояние наблюдалось [7] в стандартном сверхпроводящем металле Nb. Теория неадиабатических эффектов в сверхпроводниках для акустических фононов была развита в работе Шустера [8] в приближении Бардина—Купера—Шриффера (БКШ). В этой работе было показано, что при переходе металла в сверхпроводящее состояние происходит изменение фононных частот и ширин фононных линий (т. е. времен затухания). В частности, для фононных частот $\omega_{ph} > 2\Delta$ происходит некоторое увеличение (ужестчение) как самой фононной частоты, так и ширины линии. Для частот $\omega_{ph} < 2\Delta$ неадиабатические эффекты ведут к уменьшению (смягчению) фононных частот и ширин линий. Более того, в этой работе была предсказана возможность появления новой узкой линии в фононной спектральной функции при частотах $\omega \approx 2\Delta$. Возникновение подобных линий, однако, не было обнаружено для акустических фононов [7]. Позднее соответствующее поведение фононной спектральной функции наблюдалось в NbSe₂ для низкочастотного ($q \approx 0$) оптического фонона с $\omega \approx 2\Delta$ [9]. В работе [10] была дана теоретическая интерпретация этого явления, достаточно близкая к той, что предлагалась Шустером [8]. В работах [8, 10] для описания неадиабатических эффектов в фононных спектрах сверхпроводников использовался, фактически, стандартный гамильтониан Фрелиха, в котором отсутствует прямое кулоновское межэлектронное взаимодействие. На этом основании результаты, полученные в работе [10], были подвергнуты критике Литтлвудом и Вармой [11]. В их работе утверждалось, что учет дальнедействующего кулоновского взаимодействия приводит при малых волновых векторах к полной экранировке всех вкладов электрон-фононного взаимодействия (включая и неадиабатические) в фононные частоты. Для объяснения наблюдаемых в эксперименте явлений они привлекали специфику низкочастотной оптической моды в NbSe₂, рассматривая ее как амплитудную моду волны зарядовой плотности, существующей в этой системе. Следует сразу отметить, что никакой особой специфики у данной оптической моды, связанной со структурным переходом в несоизмеримую фазу, нет. Единственной ее особенностью является то, что частота этой моды существенно ниже частот всех остальных оптических фононов в данном металле и сравнима по величине с 2Δ . Есть и еще одно свойство у этой моды, способствующее возникновению наблюдаемых явлений, но мы о нем поговорим несколько позднее. Более того, мы покажем, что учет дальнедействующего кулоновского взаимодействия не приводит ни к каким существенным изменениям в неадиабатических эффектах в отсутствие низкочастотных коллективных возбуждений зарядовой и спиновой плотностей электронов.

В течение последних лет было проведено большое число исследований фононов в высокотемпературных сверхпроводниках [12]. Наблюдались сдвиги фононных частот и изменение ширин линий при переходе в сверхпроводящее состояние. Никаких новых линий в фононных спектральных функциях при этом не наблюдалось. Теория неадиабатических эффектов в сверхпроводящем состоянии металлов с сильным электрон-фононным взаимодействием была предложена Цайером и Цвикнагл [13]. Эта теория позволила объяснить значительную часть экспериментальных данных о сдвиге фононных частот и изменении ширин линий. Имеются, однако, данные об изменениях фононов в сверхпроводящем состоянии [14–16], не укладывающиеся в рамки теории, развитой в работе [13].

Недавно очень интересные наблюдения фононных спектров были проведены с по-

мощью неупругого рассеяния нейтронов [17–19]. Были изучены новые сверхпроводящие соединения $\text{LnNi}_2\text{B}_2\text{C}$, где Ln есть либо Lu, либо Y. Изучалось поведение низкоэнергетических акустической и оптической ветвей колебаний в направлении $(\xi, 0, 0)$ при $\xi \approx 0.55$, т. е. вблизи середины зоны Бриллюэна. Частоты обеих ветвей уменьшались с понижением температуры, что само по себе не характерно для обычных металлов. Ниже температуры сверхпроводящего перехода T_c фононный спектр изменялся радикально. Возникал узкий пик при энергиях ≈ 4 мэВ, что несколько ниже величины 2Δ , и широкий максимум, отвечающий энергии изучаемых фононов. Существуют, по крайней мере, две опубликованные теоретические работы, в которых авторы пытаются объяснить наблюдаемые факты. В одной из них [20] используется обычный БКШ-подход для трехмерной квазиизотропной системы. Фактически, результаты расчетов очень близки к полученным ранее Шустером [8] и, как это следует из работы самого Шустера, могут при соответствующем выборе параметров системы объяснить изменения в фононном спектре при $T < T_c$. Соответствующая модель, однако, не может описать поведение фононных спектров при $T > T_c$. Более того, выбор параметров в этой модели, который необходим для описания ситуации при $T < T_c$, является, на наш взгляд, явно малореалистичным. Авторы работы [21] предположили наличие в электронном спектре изучаемых соединений некоторой доли нестинга при импульсах $\mathbf{Q} = (0.55, 0, 0)$. Подобное предположение подтверждается также результатами детального расчета [22] электронной поляризации исходя из первых принципов электронной зонной структуры этих соединений. Однако аналитические выражения для изменения фононных спектров в сверхпроводящем состоянии, приведенные в работе [21], существенно отличаются от тех, которые могут быть в действительности получены для систем с нестингом. Существуют и некоторые другие работы [23, 24], в которых вычислялись изменения частот фононных мод и ширины линий при $q \neq 0$. До сих пор, однако, отсутствует полная ясность о роли и величине неадиабатических эффектов в сверхпроводящих металлах даже в простой модели БКШ. В этой работе мы подробно обсудим все эти проблемы.

2. ВЫВОД ОБЩИХ СООТНОШЕНИЙ В МОДЕЛИ БКШ

Начнем рассмотрение неадиабатических эффектов с простой системы, описываемой гамильтонианом Фрелиха

$$H = H_{ee} + H_{ph} + H_{int}, \quad (1)$$

где H_{ee} — гамильтониан сверхпроводящих электронов, H_{ph} — гамильтониан затравочных фононов и H_{int} описывает электрон-фононное взаимодействие:

$$H_{int} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma, s} g_s(\mathbf{k}, \mathbf{q}) a_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} (b_{\mathbf{q}, s} + b_{-\mathbf{q}, s}). \quad (2)$$

Здесь $a_{\mathbf{q}, \sigma}$ и $b_{\mathbf{q}, s}$ — соответственно электронные и фононные операторы; s характеризует ветви колебаний. Одночастичная функция Грина фононов может быть представлена в форме

$$D_s^{-1}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\omega^2 - \omega_0^2(\mathbf{q}, s)}{\omega_0^2(\mathbf{q}, s)} - \Sigma_s(\mathbf{q}, \omega), \quad (3)$$

здесь $\Sigma_s(\mathbf{q}, \omega)$ — собственно-энергетическая часть фононной функции Грина и $\omega_0(\mathbf{q}, s)$ — затравочная частота фононов. Для функции $\Sigma_s(\mathbf{q}, \omega)$ в представлении Матцубары может быть написано следующее интегральное уравнение [13]:

$$\Sigma_s(\mathbf{q}, i\omega_n) = T \sum_{\mathbf{k}, m} g_s(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \text{Sp} \tau_3 G(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_m + i\omega_n) \Gamma_s(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}, i\omega_m + i\omega_n, i\omega_m) G(\mathbf{k}, i\omega_m), \quad (4)$$

а матричные вершинные функции Γ_s удовлетворяют уравнению Бете—Солпитера:

$$\Gamma_s(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}, i\omega_m + i\omega_n, i\omega_m) = g_s(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \tau_3 - T \sum_{\mathbf{k}', m'} \tau_3 G(\mathbf{k}', i\omega_{m'}) \Gamma_s(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \mathbf{k}', i\omega_{m'} + i\omega_n, i\omega_{m'}) \times \\ \times G(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, i\omega_{m'} + i\omega_n) \tau_3 V(\mathbf{k}', \mathbf{k}), \quad (5)$$

где $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ — межэлектронное взаимодействие, приводящее к сверхпроводимости. В рамках модели Фрелиха, вообще говоря, нет никакой необходимости вводить какое-то особое межэлектронное взаимодействие, приводящее к сверхпроводимости, поскольку это не что иное, как само электрон-фононное взаимодействие. В этом случае функция $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ выражается через фононную функцию Грина и к тому же зависит не только от импульсов \mathbf{k} и \mathbf{k}' , но и от энергии $i\omega_m$. В случае сверхпроводников со слабой связью, как известно, теория Элиашберга [25] для систем с электрон-фононным взаимодействием сводится к модели БКШ. Именно этим приближением мы и ограничимся в данный момент. Влияние эффектов сильной электрон-фононной связи будет рассмотрено позднее. В рамках модели БКШ мы представим электронную функцию Грина:

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{i\omega_n \tau_0 + \Delta_{\mathbf{k}} \tau_1 + \epsilon_{\mathbf{k}} \tau_3}{(i\omega_n)^2 + \epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}. \quad (6)$$

Здесь $\epsilon_{\mathbf{k}}$ — спектр одноэлектронных возбуждений и $\Delta_{\mathbf{k}}$ — сверхпроводящая щель, описываемая уравнением БКШ

$$\tau_2 \Delta_{\mathbf{k}} = -T \sum_{\mathbf{k}', n} \tau_3 G(\mathbf{k}', i\omega_n) \tau_2 \Delta_{\mathbf{k}'} \tau_3 V(\mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (7)$$

Чтобы упростить решение полученных уравнений, мы представим межэлектронное взаимодействие $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ в факторизованной форме:

$$V(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = - \sum_{s, L} g_{sL}^2 \theta(\omega_c - |\epsilon_{\mathbf{k}}|) \theta(\omega_c - |\epsilon'_{\mathbf{k}}|) \Psi_L^*(\mathbf{k}') \Psi_L(\mathbf{k}). \quad (8)$$

Здесь ω_c — энергия обрезания, равная по порядку величины характерным фононным частотам, $\Psi_L(\mathbf{k})$ — некоторый полный набор ортогональных функций. Он может быть выбран, например, в виде ферми-поверхностных гармоник [26]. Конкретный их вид несуществен для наших целей.

Будем искать решение уравнения Бете—Солпитера (5) в виде

$$\Gamma_s = \Gamma_s^{(2)} \tau_2 + \Gamma_s^{(3)} \tau_3, \quad (9)$$

$$\Gamma_s^{(2,3)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \sum_L \Gamma_{s,L}^{(2,3)} \Psi_L^*(\mathbf{k}') \Psi_L(\mathbf{k}). \quad (10)$$

Все остальные функции, входящие в уравнения (3) и (4), также могут быть разложены по гармоникам $\Psi_L(\mathbf{k})$. Мы ограничимся здесь рассмотрением изотропного s -спаривания. Это означает, что энергетическая щель $\Delta_{\mathbf{k}}$ будет иметь лишь одну гармонику с $L = 0$:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \Psi_{L=0}(\mathbf{k})\Delta_{L=0}. \quad (11)$$

После долгих, но простых вычислений, которые мы здесь не будем приводить, для аналитически продолженных вершинных функций получим

$$\Gamma_{sL}^{(2)}(\mathbf{q}, \omega) = g_{sL}(\mathbf{q}) \frac{ig_L^2 I_2^L(\mathbf{q}, \omega)}{[1 + g_L^2 I_3^L(\mathbf{q}, \omega)][1 - g_L^2 I_1^L(\mathbf{q}, \omega)] + [g_L^2 I_2^L(\mathbf{q}, \omega)]^2}, \quad (12)$$

$$\Gamma_{sL}^{(3)}(\mathbf{q}, \omega) = g_{sL}(\mathbf{q}) \left\{ 1 - \frac{g_L^2 I_3^L(\mathbf{q}, \omega) - g_L^4 [I_1^L(\mathbf{q}, \omega)I_3^L(\mathbf{q}, \omega) - (I_2^L(\mathbf{q}, \omega))^2]}{[1 + g_L^2 I_3^L(\mathbf{q}, \omega)][1 - g_L^2 I_1^L(\mathbf{q}, \omega)] + [g_L^2 I_2^L(\mathbf{q}, \omega)]^2} \right\}, \quad (13)$$

где

$$g_L^2 = \sum_s g_{sL}^2 \quad (14)$$

и функции $I_j^L(\mathbf{q}, \omega)$ могут быть представлены с помощью функции $I_{\alpha, \beta, \gamma}^L(\mathbf{q}, \omega)$:

$$\begin{aligned} I_{\alpha, \beta, \gamma}^L(\mathbf{q}, \omega) = & \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} |\Psi_L(\mathbf{k})|^2 \theta(\omega_c - |\epsilon_{\mathbf{k}}|) \text{th} \frac{E_{\mathbf{k}}}{2T} \times \\ & \times \left\{ M_{\alpha, \beta, \gamma}^+ \left(\frac{1}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} + \omega + i\delta} + \frac{1}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} - \omega - i\delta} \right) + \right. \\ & \left. + M_{\alpha, \beta, \gamma}^- \left(\frac{1}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}} + \omega + i\delta} + \frac{1}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}} - \omega - i\delta} \right) \right\}. \quad (15) \end{aligned}$$

Здесь $M_{\alpha, \beta, \gamma}^+$ и $M_{\alpha, \beta, \gamma}^-$ — соответствующие факторы когерентности:

$$M_{\alpha, \beta, \gamma}^{\pm} = \alpha \pm \frac{\beta \Delta^2 + \gamma \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} E_{\mathbf{k}}}, \quad (16)$$

$E_{\mathbf{k}}$ — энергия сверхпроводящих квазичастиц:

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}. \quad (17)$$

Функции $I_{j=1,2,3}^L(\mathbf{q}, \omega)$ определяются введенной выше функцией $I_{\alpha, \beta, \gamma}^L(\mathbf{q}, \omega)$ с величинами α, β, γ равными соответственно

$$\alpha = 1, \quad \beta = -1, \quad \gamma = -1, \quad j = 1,$$

$$\alpha = 0, \quad \beta = \omega/\Delta, \quad \gamma = 0, \quad j = 2, \quad (18)$$

$$\alpha = 1, \quad \beta = -1, \quad \gamma = 1, \quad j = 3.$$

Полученные выражения для вершинных функций имеют вид очень сходный с тем, который был получен ранее в работах [27–29] при расчете диэлектрического отклика сверхпроводящих электронов. Имеется лишь одна существенная разница, связанная с матричными элементами межэлектронного взаимодействия. В нашем рассмотрении полностью отсутствует дальнедействующее кулоновское взаимодействие, которое, как мы убедимся, не оказывает никакого непосредственного влияния на изучаемое нами явление.

Запишем теперь выражение для L -ой гармоники фононной собственно-энергетической части:

$$\Sigma_{sL}(\mathbf{q}, \omega) = -2g_{sL}^2 \tilde{I}_3^L(\mathbf{q}, \omega) - 2g_{sL}^2 \frac{I_3^L(\mathbf{q}, \omega)[1 - g_L^2 I_1^L(\mathbf{q}, \omega)] + g_L^2 (I_2^L(\mathbf{q}, \omega))^2}{[1 + g_L^2 I_3^L(\mathbf{q}, \omega)][1 - g_L^2 I_1^L(\mathbf{q}, \omega)] + [g_L^2 I_2^L(\mathbf{q}, \omega)]^2}. \quad (19)$$

Функция $\tilde{I}_3^L(\mathbf{q}, \omega)$ определяется тем же уравнением (15), но с заменой $\theta(\omega_c - |\epsilon_{\mathbf{k}}|)$ на $\theta(|\epsilon_{\mathbf{k}}| - \omega_c)$, и эта функция описывает в рамках модели Фрелиха вклад в фононную собственно-энергетическую часть электрон-фононного взаимодействия, обусловленный областями, далекими от поверхности Ферми. В силу этого функция $I_3^L(\mathbf{q}, \omega)$ совершенно не зависит от параметров сверхпроводимости и при ее расчете Δ может считаться равной нулю.

Полученные выше формулы полностью описывают ситуацию в системах с s -спариванием при любых значениях волновых векторов \mathbf{q} и частот ω . Они пригодны как для квазиизотропных систем, так и для систем с нестингом. В данный момент мы рассмотрим прежде всего случай $q = 0$ и $T = 0$. Функции $I_j^L(\mathbf{q}, \omega)$ имеют при этом вид

$$I_1^L(0, \omega) = \frac{1}{g_0^2} + \left(\frac{\omega}{2\Delta}\right)^2 \frac{N(0)I(\omega)}{2}, \quad (20)$$

$$I_2^L(0, \omega) = -\frac{\omega}{2\Delta} \frac{N(0)I(\omega)}{2}, \quad (21)$$

$$I_3^L(0, \omega) = \frac{N(0)I(\omega)}{2}, \quad (22)$$

$$\tilde{I}_3^L = 0. \quad (23)$$

Здесь $N(0)$ — плотность состояний на поверхности Ферми,

$$I(\omega) = \frac{1}{2} \int_{-\epsilon_F}^{\epsilon_F} d\epsilon_{\mathbf{k}} \frac{\Delta^2}{E_{\mathbf{k}}[E_{\mathbf{k}}^2 - (\omega/2)^2 - i\delta]}. \quad (24)$$

Легко убедиться, используя выражения (20)–(23), что

$$\Sigma_{s,0}(\mathbf{q} = 0, \omega) = 0. \quad (25)$$

Это равенство есть следствие тождества Уорда, существующего в модели Фрелиха, также как и в любых системах с градиентно-инвариантным гамильтонианом [27]. Оно возникает лишь при строгом учете вершинных поправок. Затраченное значение фононной собственно-энергетической части без учета вершинных поправок (т.е. при $\Gamma_s = g_s$)

не удовлетворяет тождеству (25). Как было показано в работах [11, 13], дальнедействующее кулоновское взаимодействие связано непосредственно с компонентой $L = 0$ собственно-энергетической части $\Sigma_{sL}(\mathbf{q}, \omega)$ и обращает последнюю в нуль при $q = 0$. В системах с градиентно-инвариантным гамильтонианом эта величина, как мы убедились, равна нулю и сама по себе. Поэтому фононы с $q = 0$, обладающие представлением с $L = 0$ (или, с точки зрения теории кристаллических групп, единичным представлением с полной симметрией точечной группы), не взаимодействуют с электронами ни в нормальном, ни в сверхпроводящем состояниях и не проявляют никаких неадиабатических эффектов. Этот результат, в противоречии с утверждениями, имеющимися в работах [11, 13], никак не связан с дальнедействующим кулоновским взаимодействием. Конечно, учет кулоновского взаимодействия может приводить, также как и в случае диэлектрического отклика [27–29], к перенормировке соответствующих поляризационных операторов и характеризующих их констант, таких как, например, $N(0)$. Но это обстоятельство совершенно не изменяет физики неадиабатических эффектов до тех пор, пока отсутствуют низкоэнергетические коллективные возбуждения плотности заряда или спина электронов.

Рассмотрим теперь компоненту $L \neq 0$ собственно-энергетической части фононов $\Sigma_{sL}(\omega)$, которая имеет вид

$$\Sigma_{sL}(\omega) = -2\lambda_{sL} \frac{I(\omega)/2}{1 - \lambda_L \beta_L (\omega/2\Delta) I(\omega)/2}, \quad (26)$$

где λ_L — константа связи в L -ой гармонике:

$$\lambda_L = g_L^2 N(0) \quad (27)$$

и

$$\beta_L \left(\frac{\omega}{2\Delta} \right) = \left(\frac{\omega}{2\Delta} \right)^2 \frac{\lambda_0}{\lambda_0 - \lambda_L} - 1. \quad (28)$$

Функция $I(\omega)$ легко вычисляется и имеет вид

$$I(\omega) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{1+x^2} [1+x^2 - (\omega/2\Delta)^2 - i\delta]} = \frac{4\Delta/\omega}{\sqrt{1 - (\omega/2\Delta)^2}} \arcsin \frac{\omega}{2\Delta}, \quad \omega < 2\Delta, \quad (29)$$

$$\frac{-2 \cdot 2\Delta/\omega}{\sqrt{(\omega/2\Delta)^2 - 1}} \left(\operatorname{arcsh} \sqrt{\left(\frac{\omega}{2\Delta} \right)^2 - 1} - \frac{i\pi}{2} \right), \quad \omega > 2\Delta.$$

Выражение (26) для $\Sigma_{sL}(\omega)$ демонстрирует хорошо известную в теории диэлектрического отклика [26] возможность существования полюса в поляризационном операторе сверхпроводящих электронов в канале $L \neq 0$ при условии

$$1 - \lambda_L \frac{I(\omega_b)}{2} \beta_L \left(\frac{\omega_b}{2\Delta} \right) = 0. \quad (30)$$

Для энергии коллективных возбуждений ω_b из этого выражения следует, что

$$\omega_b \approx 2\Delta - \Delta \lambda_L^2 \left(\frac{\lambda_L}{\lambda} \right)^2. \quad (31)$$

Как было показано в давней работе Маки и Цунето [30], учет примесного рассеяния электронов может существенно изменить полученные выше выражения для электронных функций отклика. В частности, это может привести к исчезновению полюса в поляризационном операторе и, следовательно, коллективных электронных возбуждений. Недавно эта проблема подробно обсуждалась в работе [31] при изучении спектров комбинационного рассеяния света в сверхпроводниках. В ней были подтверждены результаты, полученные в [30], и показано, что вершинными поправками можно пренебречь в случае сильнонеупорядоченных систем. Эти результаты легко обобщить и на рассматриваемый нами случай неадиабатических эффектов в фоновых спектрах сверхпроводников. Для оптических фононов с $q = 0$ подобное обобщение было проведено в работе [32], где рассматривались случаи как изотропного s -спаривания, так и анизотропного d -спаривания. В этой работе было показано, в частности, что в приближении слабой связи учет вершинных поправок не приводит к сколь-нибудь существенному изменению фоновых спектральных функций по сравнению с вычисленными в их отсутствие даже для систем без примесей.

В заключение этого раздела мы рассмотрим функцию $\Sigma(\mathbf{q}, \omega)$ для импульсов $q \neq 0$, удовлетворяющих условию

$$k_F > q > \frac{\omega}{v_F}, \frac{2\Delta}{v_F}, \quad (32)$$

где v_F — фермиевская скорость электронов и k_F — импульс Ферми. Легко показать, что функции $I_{j=1,2,3}(\mathbf{q}, \omega)$ сводятся в этом случае к выражениям

$$\tilde{I}_3(\mathbf{q}, \omega) \approx N(0), \quad (33)$$

$$I_1(\mathbf{q}, \omega) \approx I_3(\mathbf{q}, \omega), \quad (34)$$

$$I_2(\mathbf{q}, \omega) \approx -\frac{\omega}{2\Delta} I_3(\mathbf{q}, \omega). \quad (35)$$

Из формул (33)–(35) и (19) следует, что вершинные поправки при больших значениях импульса фононов q не приводят к появлению полюса в вершинных функциях и в рассматриваемом приближении слабой связи ими можно пренебречь. Собственно-энергетическая часть фоновой функции Грина в этом случае имеет вид

$$\Sigma_s(\mathbf{q}, \omega) = -2g_s^2 N(0) - 2g_s^2 I_3(\mathbf{q}, \omega), \quad (36)$$

где

$$I_3(\mathbf{q}, \omega) \approx \frac{\pi\omega N(0)}{2qv_F} \ln \frac{2\Delta}{|2\Delta - \omega|} + i \frac{\pi\omega N(0)}{2qv_F} \theta(\omega - 2\Delta), \quad (37)$$

что в точности совпадает с результатом, полученным ранее в работах [8, 20]. С формальной точки зрения, используя эти формулы, как показано в работе [20], можно объяснить изменение фоновой спектральной плотности, наблюдавшееся в экспериментах [16–18]. Фактически же формулы (36), (37), как мы уже отмечали во Введении и покажем далее, не могут служить объяснением этих данных.

3. СИСТЕМЫ С НЕСТИНГОМ

Теоретические расчеты электронной поляризуемости соединения $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ показывают наличие в электронном спектре так называемого нестинга для достаточно больших участков поверхности Ферми. Под нестингом обычно понимают выполнение соотношения

$$\epsilon_{\mathbf{k}} \approx -\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \quad (38)$$

для одноэлектронных энергий в некотором конечном фазовом объеме вблизи поверхности Ферми. Вектор \mathbf{Q} , для которого имеет место (38), определяется как вектор нестинга. Как известно [33], существование идеального нестинга (т. е. точного выполнения (38)) приводит к расходимости статической поляризуемости электронов $\Pi(\mathbf{q}, 0)$ при волновом векторе $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$. Это обстоятельство, в свою очередь, может привести к возникновению волн спиновой плотности и (или) структурных переходов. В ряде соединений никелевых борокарбидов, например $\text{EuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ и $\text{HoNi}_2\text{B}_2\text{C}$, действительно наблюдается [34] магнитная структура с несоизмеримым периодом, характеризуемым вектором $\mathbf{Q} = (0.55, 0, 0)$. В соединениях $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ и $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$ не наблюдается магнитная структура, но, как это уже отмечалось во Введении, имеет место существенное смягчение акустической и оптической мод для волновых векторов \mathbf{q} , близких к вектору нестинга \mathbf{Q} . Обе фононные линии при этом уширяются. При переходе в сверхпроводящее состояние, т. е. при $T < T_c$, происходит резкое изменение фононной спектральной функции, обсуждавшееся нами во Введении. Все эти обстоятельства указывают, возможно, на важную роль нестинга в изменении фононных линий как в нормальном, так и в сверхпроводящем состояниях.

Переходя к рассмотрению собственно-энергетической части фононной функции Грина для систем с нестингом, напишем, прежде всего, ее выражение в нулевом порядке, т. е. без учета вершинных функций. Используя условие нестинга (38) и формулы для $\Sigma_s(\mathbf{q}, \omega)$, полученные в предыдущем разделе, легко получить, что при $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$

$$\Sigma_0(\mathbf{Q}, \omega) = -\frac{g^2(\mathbf{Q})}{2} \sum_{\mathbf{k}} \text{th} \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2T} \right) \left(\frac{1}{2E_{\mathbf{k}} + \omega + i\delta} + \frac{1}{2E_{\mathbf{k}} - \omega - i\delta} \right). \quad (39)$$

Для нормального состояния, т. е. при $\Delta = 0$, из (39) следует хорошо известное выражение [33] для $\Sigma_0(\mathbf{Q}, \omega)$:

$$\Sigma_0(\mathbf{Q}, \omega) = -2g^2(\mathbf{Q})N(0) \left(\ln \frac{\epsilon_F}{\max\{\omega, T\}} + i \frac{\pi}{4} \text{th} \frac{\omega}{4T} \right). \quad (40)$$

Формула (40) показывает, что при понижении температуры происходит смягчение фононных частот при $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ и уширение фононных линий, обусловленное возрастанием мнимой части $\Sigma_0(\mathbf{Q}, \omega)$. Подобное поведение фононных линий функции достаточно разумно согласуется с наблюдаемым в борокарбидах [17, 19]. Конечно, проводить непосредственное сравнение экспериментальных данных с теоретическими результатами, полученными в нулевом приближении, навряд ли разумно. Ясно, что при расчете функции $\Sigma_0(\mathbf{Q}, \omega)$ даже для нормального состояния необходимо самосогласованным образом учесть вершинные поправки, а также изменения в одночастичных функциях

Грина электронов, обусловленные как электрон-фононным, так и кулоновским межэлектронным взаимодействиями. Соответствующий анализ электронной восприимчивости для металлических систем с нестингом был проведен в работе [35] в рамках полупеноменологического самосогласованного метода, учитывающего лишь кулоновское межэлектронное взаимодействие. Мы здесь не будем рассматривать эту проблему, поскольку основная задача данной работы — это выяснение специфики изменения фононных спектров при переходе в сверхпроводящее состояние.

Выражение (39) для $\Sigma_0(\mathbf{Q}, \omega)$ при $T = 0$ можно представить в виде

$$\Sigma_0(\mathbf{Q}, \omega) = -g^2(\mathbf{Q})N(0) \int_{-\epsilon_F}^{\epsilon_F} \frac{d\epsilon_k}{E_k} - g^2(\mathbf{Q})N(0) \left(\frac{\omega}{2\Delta}\right)^2 \int_{-\epsilon_F}^{\epsilon_F} \frac{d\epsilon_k}{E_k} \frac{\Delta^2}{E_k^2 - (\omega/2)^2}. \quad (41)$$

Первое слагаемое в этой формуле, равное

$$-2g^2(\mathbf{Q})N(0)\ln(\epsilon_F/\Delta), \quad (42)$$

достаточно хорошо известно [33, 36] и описывает устранение сингулярности статических функций отклика в системах с нестингом при переходе системы в сверхпроводящее состояние. Это обстоятельство приводит, в частности, к прекращению смягчения фононных мод в адиабатическом приближении и к отсутствию структурных превращений при $T < T_c$. Второе слагаемое описывает сингулярное поведение функции $\Sigma_0(\mathbf{Q}, \omega)$ при энергиях $\omega \approx 2\Delta$ и обусловлено именно переходом в сверхпроводящее состояние. Сравнивая формулу (41) и выражение (24) для функции $I(\omega)$, видим, что $\Sigma(\mathbf{Q}, \omega)$ при $\omega \approx 2\Delta$ имеет точно такую же сингулярность, как и при $q = 0$, т. е. $\approx [1 - (\omega/2\Delta)^2]^{-1/2}$. Этот результат, также как и само выражение для функции $\Sigma_0(\mathbf{Q}, \omega)$, полностью противоречит опубликованному недавно в работе Ки и Варма [21]. В ней ошибочно была получена логарифмическая сингулярность $\Sigma_0(\mathbf{Q}, \omega)$ при $\omega \approx 2\Delta$, что в действительности, как было показано выше, имеет место в квазиизотропной системе при больших импульсах $qv_F \gg \Delta$.

Используя выражения (15)–(18) для функции $I_{j=1,2,3}(\mathbf{Q}, \omega)$, легко показать, что

$$I_1(\mathbf{Q}, \omega) = N(0)I(\omega), \quad (43)$$

$$I_2(\mathbf{Q}, \omega) = -(\omega/2\Delta)N(0)I(\omega), \quad (44)$$

$$I_3(\mathbf{Q}, \omega) = 1/\lambda + (\omega/2\Delta)^2 N(0)I(\omega), \quad (45)$$

$$\tilde{I}_3(\mathbf{Q}, \omega) = N(0)\ln(\epsilon_F/\omega_c). \quad (46)$$

Соответственно, $\Sigma_s(\mathbf{Q}, \omega)$ может быть записана при $T = 0$ в виде

$$\Sigma_s(\mathbf{Q}, \omega) = -2\lambda_Q \ln \frac{\epsilon_F}{\Delta} - 2\lambda_Q \frac{I(\omega)/2 - 1/\lambda}{2 - \lambda I(\omega)/2 [2 - (\omega/2\Delta)^2]}. \quad (47)$$

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

$$1 = \lambda \ln(2\omega_c/\Delta). \quad (48)$$

Из выражения (46) видно, что $\Sigma_s(\mathbf{Q}, \omega)$ имеет полюс, отвечающий коллективным возбуждениям, определяемый вторым слагаемым в (47):

$$2 - \frac{\lambda I(\omega_p)}{2} \left[2 - \left(\frac{\omega_p}{2\Delta} \right)^2 \right] = 0. \quad (49)$$

Отсюда следует, что

$$(\omega_p)^2 = (2\Delta)^2 \left[1 - \left(\frac{\lambda}{2} \right)^2 \right]. \quad (50)$$

Соответствующий вычет r имеет вид

$$r = \lambda_Q \lambda \Delta^2. \quad (51)$$

Используя полученные выражения для $\Sigma_s(\mathbf{Q}, \omega)$ и формулу (3), выражение для $D_s^{-1}(\mathbf{Q}, \omega)$ можно переписать в виде

$$D_s^{-1}(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{\omega^2 - \tilde{\omega}_0^2(\mathbf{Q}, s)}{\omega_0^2(\mathbf{Q}, s)} - \tilde{\Sigma}_s(\mathbf{Q}, \omega), \quad (52)$$

где $\tilde{\Sigma}_s(\mathbf{Q}, \omega)$ — второе слагаемое в формуле (47). Введено также обозначение для частоты фононов, перенормированных за счет первого слагаемого в (47):

$$\tilde{\omega}_0^2(\mathbf{Q}, s) = \omega_0^2(\mathbf{Q}, s) \left(1 - 2\lambda_Q \ln \frac{\epsilon_F}{\Delta} \right). \quad (53)$$

Используя полученные выше формулы (49)–(51), можно переписать (52) в виде

$$D_s^{-1}(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{\omega^2 - \tilde{\omega}_0^2(\mathbf{Q}, s)}{\omega_0^2(\mathbf{Q}, s)} - \frac{r}{\omega^2 - \omega_p^2}. \quad (54)$$

Легко убедиться, что для любых $\tilde{\omega}_0(\mathbf{Q}, s) > 2\Delta$ существуют два решения уравнения

$$D_s^{-1}(\mathbf{Q}, \omega) = 0. \quad (55)$$

Одно из них отвечает фонону с энергией

$$\omega_{ph}^2 \approx \omega_0^2 + \frac{r\omega_0^2(\mathbf{Q}, s)}{\tilde{\omega}_0^2(\mathbf{Q}, s) - \omega_p^2} > (2\Delta)^2. \quad (56)$$

Другое решение существует для $\omega < 2\Delta$ и описывает наличие в системе неоднократно обсуждавшейся в этой работе дополнительной моды с энергией

$$\omega_b^2 \approx \omega_p^2 - \frac{r\omega_0^2(\mathbf{Q}, s)}{\tilde{\omega}_0^2(\mathbf{Q}, s) - \omega_p^2} < (2\Delta)^2. \quad (57)$$

Легко рассчитать также спектральную плотность этой моды:

$$S_s(\mathbf{Q}, \omega) = -\frac{2}{\pi\omega_0^2} \text{Im} D_s(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{r\omega_0^2(\mathbf{Q}, s)}{[\tilde{\omega}_0^2(\mathbf{Q}, s) - \omega_p^2]^2 + r\omega_0^2(\mathbf{Q}, s)} \frac{\delta(\omega - \omega_b)}{\pi\omega_b}. \quad (58)$$

Хотя два решения уравнения (55) существуют при любом значении энергии фононов $\omega \approx \tilde{\omega}_0(\mathbf{q}, s)$, интенсивность дополнительной моды оказывается весьма малой при $\tilde{\omega}_0(\mathbf{q}, s) \gg 2\Delta$. Лишь для энергий фононов $\tilde{\omega}_0(\mathbf{q}, s) \gtrsim 2\Delta$ интенсивности дополнительной моды и фонона оказываются сопоставимыми по амплитуде.

Формально полученные нами решения для энергии ω_p коллективных возбуждений и энергии ω_b дополнительной моды и ее интенсивности весьма близки к полученным ранее в работе [21]. Имеются, однако, существенные количественные различия. Прежде всего, это связано с тем, что отличие энергии коллективных возбуждений ω_p от 2Δ и величина вычета τ , полученные в работе [21], имеют экспоненциальную малость типа

$$\frac{2\Delta - \omega_p}{2\Delta} \approx e^{-\epsilon_F/\lambda\Delta},$$

где ϵ_F — энергия Ферми. Такого же типа экспоненциальная малость,

$$\frac{2\Delta - \omega_b}{2\Delta} \approx e^{-qv_F/\lambda\Delta},$$

для отличия энергии ω_b дополнительной моды от 2Δ возникает и в квазиизотропной системе, как это следует из формул (36) и (37). Из полученных нами выражений (50), (51) и (57) видно, что никакой экспоненциальной малости по Δ/ϵ_F и Δ/qv_F не существует для систем с нестингом. Это обстоятельство существенно облегчает условие появления дополнительной моды в таких системах. Из экспериментальных данных [18], показывающих, что величина ω_b меняется от 4 до 6 мэВ, и особенно из зависимости энергии дополнительной моды от волнового вектора явно следует, что отличие этой энергии от величины 2Δ не имеет никакой специальной экспоненциальной малости. Мы не будем здесь обсуждать подробно экспериментальные данные с использованием выражений, полученных выше, поскольку наличие идеального нестинга в реальных физических системах маловероятно. Вместо этого приведем ниже результаты численных расчетов $\text{Im}D_s(\mathbf{q}, \omega)$ с использованием модели, в которой возможно изменение нестинга от идеального до его полного отсутствия.

Мы использовали для этой цели двумерную модель квадратной решетки сильно-связанных электронов с перекрытием ближайших соседей. Электронный спектр такой системы может быть записан в виде

$$\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu, \tag{59}$$

где μ — химический потенциал системы, характеризующий степень заполнения зоны, и t — интеграл перекрытия. При половинном заполнении зоны ($\mu = 0$) поверхность Ферми представляет собой квадрат, т. е. систему с идеальным нестингом. При малом заполнении поверхность Ферми близка к окружности, т. е. представляет собой стандартную квазиизотропную систему. Меняя степень заполнения зоны, можно исследовать всю переходную область от идеального нестинга к изотропной системе. Ранее эта модель использовалась в работе [24] для расчета собственно-энергетических частей фоновых функций Грина в сверхпроводниках в нулевом приближении, т. е. без учета вершинных поправок. Сами фоновые функции Грина, а также величины $S_s(\mathbf{q}, \omega)$ в этой работе, однако, не вычислялись.

Нами были проведены численные расчеты функции $S_s(\mathbf{q}, \omega)$ в рамках модели с изотропным спариванием с полным учетом вершинных поправок. С этой целью были вычислены функции $I_{\alpha,\beta,\gamma}(\mathbf{q}, \omega)$ для различных значений заполнения зоны, т. е. величины

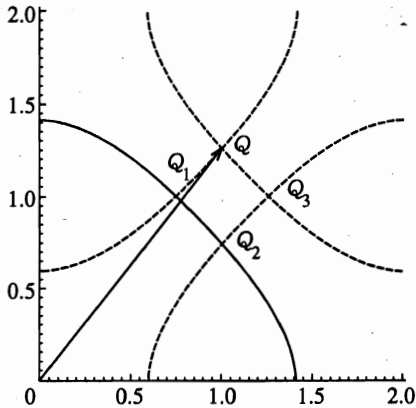


Рис. 1. Векторы и линии нестинга квадратной решетки ($\mu = -0.8$) в координатах π/a . «Поверхность» $2\mathbf{k}_F$ (сплошная кривая) и эквивалентные ей (штрихи)

μ , и для волновых векторов \mathbf{q} , равных и близких к вектору нестинга. В случае идеального нестинга выбор вектора нестинга однозначен и определяется геометрией поверхности Ферми. В выбранной нами модели при $\mu = 0$ вектор нестинга \mathbf{Q}_0 направлен по диагоналям квадратной зоны Бриллюэна и равен по величине половине соответствующего вектора обратной решетки. При изменении заполнения зоны вектор «нестинга» \mathbf{Q} может быть определен, например, по положению максимума статической функции отклика в нормальном состоянии, т. е. функции $\epsilon_0(\mathbf{q}, 0)$. В рассматриваемом нами простом случае вектор «нестинга» можно найти и из следующих соображений. В геометрическом смысле вектор \mathbf{Q} соединяет «вкладывающиеся» (конгруэнтные) участки поверхности Ферми. Для односвязной поверхности Ферми, как в нашем случае, это «почти плоские» участки, взаимное расположение которых определяется симметрией решетки, поэтому можно предположить, что «поверхность нестинга», т. е. «поверхность» локальных максимумов статической функции отклика электронов, образована концами векторов $2\mathbf{k}_F$ и эквивалентных им векторов \mathbf{q} , полученных преобразованиями симметрии квадратной решетки из векторов $2\mathbf{k}_F$ (рис. 1). Векторы \mathbf{Q} определяются положением особых «линий» на «поверхности нестинга», являющихся «линиями» самопересечения этой «поверхности» (и, естественно, «линиями» ее пересечения с гранями зоны Бриллюэна, поэтому одна из координат векторов нестинга точно равна $\pm\pi/a$). На рис. 1 показано соответствующее построение для $\mu = -0.8t$ (в дальнейшем μ рассматривается как безразмерная величина в единицах интеграла перекрытия t). Линии нестинга совпадают с результатами численных расчетов Марсиглио [24]. Изображены также векторы «нестинга», отвечающие максимумам статической функции отклика электронов. Таким образом, при изменении заполнения происходит расщепление максимума, соответствующего при $\mu = 0$ вектору нестинга \mathbf{Q}_0 , на четыре эквивалентных максимума. Параметр $\mu = -0.8$, выбранный нами для наглядности рис. 1, довольно далек от параметра идеального нестинга, поэтому эффект нестинга проявляется здесь довольно слабо. Ниже будут рассмотрены более подходящие примеры для заполнения зоны, соответствующего 1.11 электрона на центр ($\mu = 0.2$), и для заполнения 0.89 электрона на центр ($\mu = -0.2$).

На рис. 2 показано поведение спектральной функции двух фононных мод 1 и 2 для четырех различных температур. Предполагалось, что затравочные частоты этих мод, $\omega_0^{(1)}(\mathbf{q})$ и $\omega_0^{(2)}(\mathbf{q})$, вырождены, т. е. $\omega_0^{(1)}(\mathbf{q}, s) = \omega_0^{(2)}(\mathbf{q}, s)$. Константы электрон-фононной

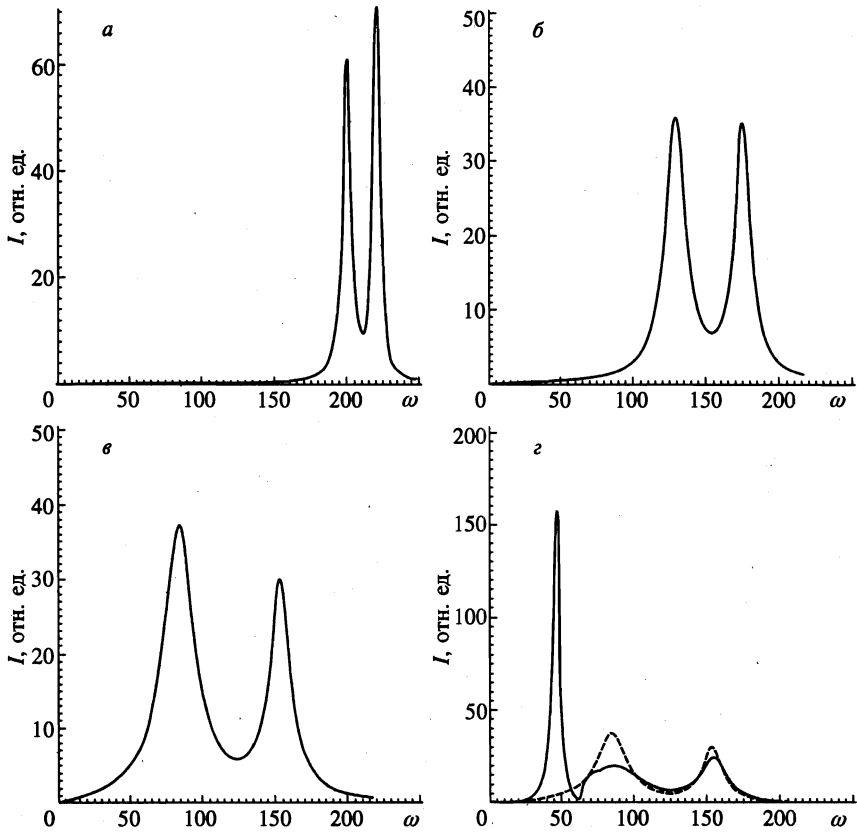


Рис. 2. Интенсивности фоновых мод 1 и 2 в зависимости от частоты ω , выраженной в К, при $T = 500$ К (а), $T = 120$ К (б), $T = T_c$ (в) и $T = 0$ (сплошная кривая), $T = T_c$ (штрихи) (г)

связи этих мод были выбраны соответственно равными $\lambda_1 = 0.1$ и $\lambda_2 = 0.085$, так что $\lambda_1 > \lambda_2$. Полная константа связи $\lambda = 0.372$ находилась из условия (48) так, чтобы $\Delta \approx 3$ мэВ при $\omega_c \approx 30$ мэВ. Такой выбор Δ и ω_c примерно соответствует наблюдаемым в борокарбидах величинам. Результаты, показанные на рис. 2, получены при расчете с $\mu = 0.2$, т. е. для зоны, заполненной больше чем наполовину. Для $\mu = -0.2$ получаются такие же результаты. Из рис. 2 видно, что при $T > T_c$ с уменьшением температуры фоновые частоты смягчаются и происходит уширение фоновых линий, как это имеет место и для идеального нестинга. С первого взгляда может показаться, что происходит перенос интенсивности от пика с большей энергией $\omega^{(2)}(\mathbf{q})$ на пик с $\omega^{(1)}(\mathbf{q})$. Конечно, в используемом нами подходе никакого переноса интенсивности от одного пика к другому не может быть, поскольку не учитывается взаимодействие мод. В действительности происходит увеличение амплитуды спектральной плотности для всех мод, энергия которых уменьшается при уменьшении температуры. В этом легко убедиться, записывая функцию $S_s(\mathbf{q}, \omega)$ в виде

$$S_s(\mathbf{q}, \omega) \approx \frac{\delta(\omega - \tilde{\omega}(\mathbf{q}, s))}{\tilde{\omega}(\mathbf{q}, s)}. \tag{60}$$

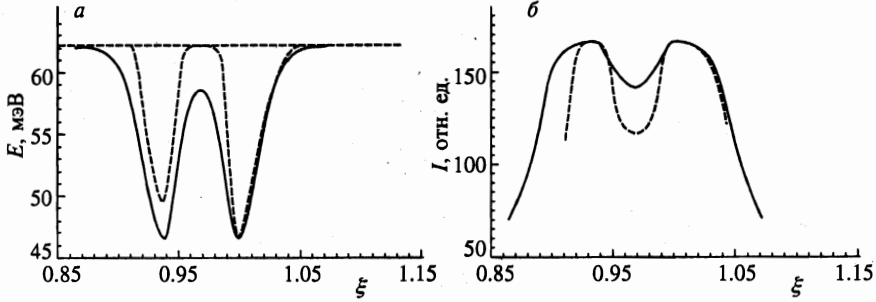


Рис. 3. Изменения энергии (а) и интенсивности (б) дополнительной фононной моды как функции отклонения волнового вектора фонона \mathbf{q} от вектора нестинга \mathbf{Q} на линии нестинга (сплошная кривая) и в направлении вектора \mathbf{Q} (штрихи); $\xi = |\mathbf{q}|/|\mathbf{Q}|$

Подобное возрастание $S_s(\mathbf{q}, \omega)$, естественно, не сказывается на правиле сумм для функции Грина $D_s(\mathbf{q}, \omega)$, обеспечивающем сохранение полного числа фононных состояний:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega S_s(\mathbf{q}, \omega) = 1. \quad (61)$$

Этот пример демонстрирует, что при интерпретации экспериментальных данных [19] необходимо соблюдать осторожность при определении параметров модели связанных мод и возникающего в ней переноса интенсивности от одной моды к другой при $T > T_c$. На рис. 2г показана фононная спектральная плотность при $T \ll T_c$. На нем ясно видно существование узкой дополнительной моды, видно также, по сравнению с рис. 2в, что существует значительный перенос интенсивности от моды 1 к дополнительной моде.

Нами было изучены изменения энергии и интенсивности дополнительной моды как функции отклонения волнового вектора фонона от вектора «нестинга». На рис. 3 приведены результаты расчетов, выполненных для векторов $\mathbf{q} = \mathbf{Q} \pm \delta\mathbf{q}$, изменяющихся по абсолютной величине в интервале $1 - \xi \equiv 1 - |\mathbf{q}|/|\mathbf{Q}| \approx \pm 0.15$ как на линиях «нестинга», т. е. на линиях локальных максимумов статической функции отклика электронов, так и в направлении \mathbf{Q} . Приведенные зависимости от ξ энергии и интенсивности дополнительной моды в некоторой мере совпадают с экспериментальными данными [19], несмотря на наличие и явных расхождений. Так, экспериментальные данные демонстрируют лишь наличие существенной анизотропии по отношению к увеличению или уменьшению вектора \mathbf{q} . Как ясно из рис. 1, при приближении заполнения зоны к половинному, эквивалентные векторы нестинга сближаются, что создает эффект большого фазового объема нестинга и делает возможность практического обнаружения дополнительной моды более вероятной. В зависимости от степени заполнения зоны пики, связанные с волновыми векторами \mathbf{Q} и \mathbf{Q}_1 , обуславливаются или прямыми процессами рассеяния на фононе, или процессами переброса. Так, при заполнении меньше половины зоны ($\mu < 0$) пик на волновом векторе \mathbf{Q}_1 связан с прямым рассеянием, а пик на большем векторе \mathbf{Q} обусловлен процессом переброса. В этом легко убедиться из рис. 1, из которого ясно, что разность векторов $-\mathbf{Q}_2$ и \mathbf{Q} есть как раз вектор обратной решетки, направленный по диагонали зоны Бриллюэна. Противоположная ситуация осуществляется при заполнении больше половины ($\mu > 0$). Это обстоятельство, вообще говоря, может приводить к существенному различию матричных элементов электрон-

фононного взаимодействия, отвечающих соответствующим процессам. В частности, матричный элемент электрон-фононного взаимодействия для прямого процесса рассеяния может быть очень малым для поперечного фонона. В наших расчетах мы не принимали во внимание это обстоятельство, поскольку для его учета необходимо проведение прямых микроскопических расчетов соответствующих матричных элементов, что выходит за рамки данной работы.

Последняя проблема, которую мы хотели бы обсудить здесь кратко, — это температурная зависимость характеристик дополнительной моды. В рамках рассмотренной ранее модели БКШ температурные зависимости энергии и интенсивности этой моды определяются зависимостью от T величины 2Δ . Экспериментальные данные [17–19] показывают заведомое отклонение от такого поведения. Так, энергия дополнительной моды практически не зависит от температуры, а ее интенсивность убывает с ростом температуры значительно быстрее чем $2\Delta(T)$. Это обстоятельство, как мы покажем ниже, может быть вполне естественно объяснено в рамках теории сильной связи, основанной на уравнениях Элиашберга [37].

Сам факт, например, резкого уменьшения интенсивности дополнительной моды при приближении к T_c можно легко понять и без проведения каких-либо численных расчетов. Действительно, как хорошо известно для случая $q = 0$ [30], примеси резко понижают интенсивность коллективных возбуждений в сверхпроводниках. Это происходит из-за появления у электронов конечного времени жизни $1/\gamma_{imp}$ (γ_{imp} — скорость релаксации электронов на примесях), что приводит как к уменьшению за счет этого факта амплитуды функций отклика вблизи сингулярностей, так и к изменению (ослаблению) самого типа сингулярностей с корневого на логарифмический при $\Delta/\gamma_{imp} > 1$. Динамическое электрон-фононное взаимодействие также приводит к появлению у электронов даже в сверхпроводящем состоянии конечного времени жизни, к тому же зависящего от энергии и температуры, и устранению сингулярностей в функциях отклика и в плотности электронных состояний [38]. Время релаксации электронов (обратное время жизни) резко возрастает при приближении к T_c , что и приводит резкому уменьшению интенсивности дополнительной моды.

Численные расчеты этих эффектов были нами проведены для модели идеального нестинга ($\mu = 0$) в нулевом приближении, т. е. без учета вершинных поправок. Ранее аналогичные расчеты для систем без нестинга при $q = 0$ были выполнены в работе [13] для температуры близкой к нулю. Опуская длинные, но простые вычисления, можно написать выражение фононной собственно-энергетической части $\Sigma_{0s}(\mathbf{Q}, \omega)$ в виде

$$\begin{aligned} \frac{\Sigma_{0s}(\mathbf{Q}, \omega)}{2\lambda_s N(0)} = & \int_0^\omega d\omega' \operatorname{th} \frac{\omega'}{2T} \left\{ \frac{-1 + n(\omega - \omega')n(\omega') + a(\omega - \omega')a(\omega')}{\varepsilon(\omega - \omega') + \varepsilon(\omega') + 2i\gamma_{imp}} - \right. \\ & \left. \frac{-1 - n(\omega - \omega')n^*(\omega') - a(\omega - \omega')a^*(\omega')}{\varepsilon(\omega - \omega') - \varepsilon^*(\omega') + 2i\gamma_{imp}} \right\} - \int_0^\infty d\omega' \left(\operatorname{th} \frac{\omega + \omega'}{2T} - \operatorname{th} \frac{\omega'}{2T} \right) \times \\ & \times \left\{ \frac{-1 - n(\omega + \omega')n(\omega') + a(\omega + \omega')a(\omega')}{\varepsilon(\omega + \omega') + \varepsilon(\omega') + 2i\gamma_{imp}} - \frac{-1 + n(\omega + \omega')n^*(\omega') - a(\omega + \omega')a^*(\omega')}{\varepsilon(\omega + \omega') - \varepsilon^*(\omega') + 2i\gamma_{imp}} \right\} + \\ & + 2\operatorname{Re} \left\{ \int_0^{\omega_c} d\omega' \operatorname{th} \frac{\omega + \omega'}{2T} \frac{-1 - n(\omega + \omega')n(\omega') + a(\omega + \omega')a(\omega')}{\varepsilon(\omega + \omega') + \varepsilon(\omega') + 2i\gamma_{imp}} \right\} - \ln \frac{\varepsilon_F}{\omega_c}. \end{aligned} \quad (62)$$

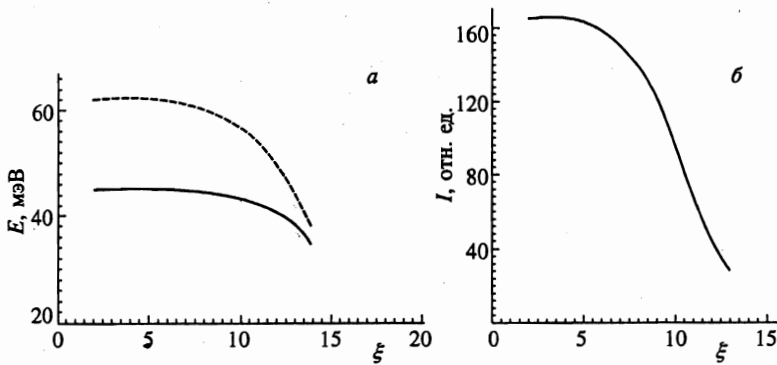


Рис. 4. Изменения энергии (а) и интенсивности (б) дополнительной фононной моды в сверхпроводящем состоянии как функции температуры. Штрихами показана зависимость $2\Delta(T)$

Здесь

$$n(\omega) = \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}}, \quad a(\omega) = \frac{\Delta(\omega)}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}}, \quad (63)$$

$$\varepsilon(\omega) = Z(\omega)\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}, \quad (64)$$

функции $\Delta(\omega)$ и $Z(\omega)$ определяются уравнениями Элиашберга. Основной величиной, определяющей решения уравнений Элиашберга, является спектральная плотность электрон-фононного взаимодействия $\alpha^2(\omega)F(\omega)$. Эта функция была выбрана нами в соответствии с получаемой из туннельных экспериментов [39]. При этом мы отнормировали ее так, чтобы полная константа связи

$$\lambda = 2 \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2(\omega)F(\omega) \quad (65)$$

равнялась ≈ 0.7 . Это значение λ позволяет получить величины T_c и Δ в хорошем согласии с экспериментом. (Перенормированная константа связи $\lambda/(1 + \lambda) \approx 0.4$ также хорошо совпадает с использованной нами в расчетах выше константой связи в модели БКШ.)

Результаты наших расчетов для энергии дополнительной моды и ее интенсивности показаны на рис. 4. Из рис. 4а видно, что энергия моды в значительном интервале температур очень слабо зависит от T . Естественно, что и в рамках теории сильной связи энергия моды начинает сильно уменьшаться при $T \rightarrow T_c$, но, как это следует из рис. 4б, это уменьшение происходит в основном в той области температур, где мала интенсивность этой моды и где она фактически ненаблюдаема.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, проведенные нами как аналитические, так и численные расчеты демонстрируют, что наблюдаемое в эксперименте поведение фононной спектральной

плотности в сверхпроводящих никелевых борокарбидах может быть разумно объяснено качественно в рамках модели, учитывающей наличие значительной доли «нестинга» в электронном спектре этих соединений. Эта модель позволяет объяснить одновременно как изменение фононного спектра (его смягчение) в нормальном состоянии, так появление и свойства дополнительной моды в сверхпроводящем состоянии. Количественное сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными на данный момент представляется преждевременным. Оно требует более детальных экспериментальных данных, а также численных расчетов электронных функций отклика, учитывающих конкретное кристаллическое и электронное строение борокарбидных соединений.

Данная работа была частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (гранты 96-02-16134 и 98-02-17187), а также программой по высокотемпературной сверхпроводимости ВТСП-64.

Литература

1. Е. Г. Бровман, Ю. М. Каган УФН **112**, 112 (1979).
2. S. Engelsberg and J. R. Schriffer, Phys. Rev. **131**, 953 (1963).
3. M. Cardona and I. P. Ipatova, in *Elementary Excitation in Solids*, ed. by L. J. Birman, C. Sebenal, and R. F. Wallis, Elsevier Science Publ., Amsterdam (1992).
4. Ю. С. Поносов, Г. А. Болотин ФТТ **27**, 2636 (1985).
5. Yu. S. Ponomov, G. A. Bolotin, C. Thomsen et al., submitted to Phys. Stat. Sol.
6. E. G. Maksimov and S. V. Shulga, Sol. St. Comm. **97**, 553 (1996).
7. J. D. Axe and G. Shirane, Phys. Rev. B **11**, 1965 (1972).
8. H. G. Schuster, Sol. St. Comm. **13**, 1559 (1973).
9. S. Sooryakumar and M. V. Klein, Phys. Rev. Lett. **45**, 660 (1980).
10. C. A. Balsiero and L. M. Falikov, Phys. Rev. Lett. **45**, 662 (1980).
11. P. B. Littlewood and C. M. Varma, Phys. Rev. B **26**, 4883 (1982).
12. C. Thomsen, in *Light Scattering in Solids*, Vol. 6, ed. by M. Cardona and G. Guntherodt, Schpringer Verlag, Heidelberg (1995), p. 285.
13. R. Zeyher and G. Zwignagl, Z. Phys. B **78**, 175 (1990).
14. H. S. Obhi and E. K. H. Salje, Physica C **171**, 547 (1990).
15. Y. Yagil and E. K. H. Salje, Physica C **229**, 152 (1994).
16. N. N. Zhigadlo, M. Zhang, and E. K. H. Salje, Supercond. Sci. Techn. **10**, 209 (1997).
17. C. Stassis, M. Bullock, P. Canfield, A. I. Goldman, G. Shirane, and S. M. Shapiro, Phys. Rev. B **55**, R8678 (1997).
18. H. Kawano, H. Yoshizawa, H. Takeya, and K. Kadowaki, Phys. Rev. Lett. **77**, 4628 (1996).
19. M. Bullock, J. Zarestky, C. Stassis, A. I. Goldman, P. Canfield, G. Shirane, and S. M. Shapiro, Phys. Rev. B **57**, 7916 (1998).
20. P. B. Allen, V. N. Kostur, N. Takesue, and G. Shirane, Phys. Rev. B **56**, 5552 (1997).
21. H.-Y. Kee and C. M. Varma, Phys. Rev. Lett. **79**, 4250 (1997).
22. J. Y. Rhee, X. Wang, and B. N. Harmon, Phys. Rev. B **51**, 15585 (1995).
23. R. Zeyher, Phys. Rev. B **44**, 9596 (1991).
24. F. Marsiglio, Phys. Rev. B **47**, 5419 (1993).
25. Г. М. Элиашберг, ЖЭТФ **38**, 966 (1960).
26. P. B. Allen, Phys. Rev. B **13**, 1416 (1976).
27. Дж. Шриффер, *Теория сверхпроводимости*, Москва, Наука (1970).

28. R. E. Prange, Phys. Rev. **129**, 2495 (1963).
29. В. Г. Вакс, В. М. Галицкий, А. И. Ларкин, ЖЭТФ **41**, 1655 (1961).
30. K. Maki and T. Tsuneto, Prog. Theor. Phys. **28**, 163 (1962).
31. T. P. Devereaux, Phys. Rev. B **47**, 5230 (1993).
32. T. P. Devereaux, Phys. Rev. B **50**, 10277 (1994).
33. Ю. В. Копаев, Труды ФИАН **86**, 3 (1975).
34. J. Zarestky, C. Stassis, A. I. Goldman et al., Phys. Rev. B **51**, 678 (1995).
35. A. Virosztek and J. Ruvalds, Phys. Rev. B **42**, 4064 (1990).
36. T. V. Ramakrishnan and C. M. Varma, Phys. Rev. B **24**, 137 (1981).
37. Г. М. Элиашберг, ЖЭТФ **39**, 1437 (1960).
38. А. Е. Каракозов, Е. Г. Максимов, and А. А. Михайловский, Sol. St. Comm. **79**, 329 (1991); А. Е. Каракозов, Е. Г. Максимов, А. А. Михайловский, ЖЭТФ **102**, 132 (1992).
39. I. K. Yanson, V. V. Fizun, A. G. M. Jansen et al., Phys. Rev. Lett. **78**, 935 (1997).