

电荷密度波超导体中的软声子和喇曼散射

雷 啸 霖

(中国科学院上海冶金研究所)

1982年8月31日收到

提 要

基于 Balseiro 和 Falicov 的概念, 我们用一个简单模型计算了电荷密度波 (CDW) 与超导共存系统中被电声子相互作用重整化的 CDW 振幅模式的谱函数 $A(\omega)$. 所得的 $A(\omega)$ 在 $\omega \leq 2G$ (G 为 CDW 带隙) 区域有一个权重相当大的 δ 函数型的峰, 而在 $\omega > 2(G^2 + \Delta^2)^{1/2}$ (Δ 为超导能隙) 区域是比较宽的连续谱. 固定 G , 当 Δ 减少时峰的强度显著降低, 但其位置仅有较小的变化; 与此同时连续谱的权重增加. 这些特点与 Sooryakumar 和 Klein 在电荷密度波超导体 $2H-NbSe_2$ 中发现的喇曼出线的能隙模式的行为是一致的.

一、引 言

最近, Sooryakumar 和 Klein^[1-4] 在电荷密度波 (CDW) 与超导共存的 $2H-NbSe_2$ 系统中发现了新的喇曼出线模式. 他们在温度 $T = 9K$ (低于系统 CDW 转变温度 $T_c \approx 33K$, 但高于超导转变温度 $T_s \approx 7.2K$) 进行的喇曼散射实验在低频率范围看到的主要是 $2H-NbSe_2$ 的 CDW 振幅模式^[5]引起的比较宽的谱, 中心大约在 $40cm^{-1}$. 但在 $T = 2K$ 时则出现相当强的新喇曼峰. 其能量分别在 $18cm^{-1}$ (A 对称性) 和 $15cm^{-1}$ (E 对称性) 附近, 谱形比较尖锐. 这些能量接近 $2H-NbSe_2$ 的超导能隙值 $2\Delta \approx 17.2cm^{-1}$. Sooryakumar 和 Klein 称它们对应的模式为“能隙模式”. 温度升高到 T_c 时能隙模式的峰消失, 因此它们的出现显然与超导电性有关. 另一方面, 存在超导电性但没有 CDW 相变的掺杂质的 $2H-NbSe_2$ 系统却观察不到能隙模式^[6], 表明能隙模式的出现与 CDW 的存在也密切相关. 加磁场以后能隙峰的位置变化很小但强度大为减弱, 同时 CDW 模式的谱增强, 这说明二者有直接的关联.

Balseiro 和 Falicov 对这些现象提出了一个有启发性的解释^[2]. 他们研究 BCS 电子与一个波矢 $q = 0$, 频率为 ω_0 的声子组成的模型系统. 考虑超导电子与这个声子的相互作用, 他们指出: 如果 ω_0 足够低 (低到 2Δ 同一量级), 耦合强度又相当小 ($g^2 N(0) / \hbar \omega_0 \sim 0.1$ 的量级), 则重整化的声子谱密度除了在 $\omega \gtrsim \omega_c$ 范围有一较宽的峰以外, 在 $\omega < 2\Delta$ 区域有一个权重可以观察的 δ 函数型的尖峰. 他们认为, $2H-NbSe_2$ 系统中 CDW 振幅模式正好提供了这样一个低频率的声子. CDW 振幅模式在原来布里渊区中波矢量为 $Q = 2k_F$, CDW 相变以后, 由于超晶格形成, 平移对称性降低, 变成喇曼出线模式——在折迭的布里渊区中相当于一个 $q = 0$ 的光学模. Sooryakumar 和 Klein 根

据 Balseiro-Falicov 理论作了进一步的计算^[3].

从理论上讲,如果在 BCS 超导系统中有一个 $q=0$ 的低频率的光学声子, Balseiro-Falicov 模型无疑能正确预言重整化的声子谱密度. 但是,对 CDW 超导体,振幅模式在原来布里渊区中是 $q \approx 0$ 的声子, CDW 变形后它虽成为喇曼出线的,但与电子相互作用时和一个 $q=0$ 的声子并不等价. 在原来布里渊区看,这个声子的产生和消灭将伴随电子从 $k\sigma$ 态散射到 $k+Q\sigma$ 态,而超导电子的配对则是 $k\uparrow$ 电子与 $-k\downarrow$ 电子或者 $k+Q\uparrow$ 电子与 $-k-Q\downarrow$ 电子. 由于 CDW 形变, k 电子与 $k+Q$ 电子能量是不同的,两组之间不能配对. 在折迭布里渊区看,上述两组电子可能用同一波矢代表,但将属于不同的带. 如果把 CDW 声子与折迭布里渊区中 $q=0$ 的声子等价,就意味着电子也可以跨过带隙而配对. 实际上,由于超导电性和 CDW 都是由电声子相互作用引起的,而 CDW 的形成对超导电子有强烈的影响;因此,对于 CDW-超导共存系统,应当在统一的基础上考虑它们的相互作用.

另一方面,要从 Balseiro-Falicov 模型得出可观察的能隙模式,对参数的要求比较苛刻. 不仅耦合常数必须很小, ω_0 也要小到实验观察到的 CDW 振幅模式的中心频率 Ω 以下. 但在哈密顿量中 ω_0 是裸声子频率,裸声子频率比重整化的 CDW 振幅模式频率是高得多的^[5,6]. 此外,为了解释磁场效应, Sooryakumar 和 Klein^[3] 不得不假设超导能隙是复数,而磁场只改变能隙的虚部,不影响其实部. 这一点也是难理解的.

为了在统一的基础上讨论这些问题,本文中我们按照 Balseiro 和 Falicov 的概念研究一个 CDW 和超导电性共存的模型系统中电子与 CDW 声子的相互作用.

二、哈密顿量

晶态固体中电子-声子系统的哈密顿量一般可写成

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{el} + \mathcal{H}_{ph} + \mathcal{H}_{e-p}, \quad (1)$$

其中

$$\mathcal{H}_{el} = \sum_{k,\sigma} \varepsilon(k) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (2)$$

为电子哈密顿量, $\varepsilon(k)$ 为单电子能带能量,以费密能级作为零点, $c_{k\sigma}^\dagger$ 和 $c_{k\sigma}$ 为电子产生和湮灭算符, σ 为自旋指标. 我们只考虑一个能带.

$$\mathcal{H}_{ph} = \sum_q \hbar \omega_q b_q^\dagger b_q \quad (3)$$

为声子哈密顿量, ω_q 为裸声子频率, $b_q^\dagger$ 和 b_q 为声子产生和湮灭算符, q 代表波矢,必要时也包括其他模式指标.

$$\mathcal{H}_{e-p} = \sum_{k,q,\sigma} g c_{k+q\sigma}^\dagger c_{k\sigma} (b_q + b_q^\dagger) \quad (4)$$

为电子-声子相互作用, g 为耦合参数.

象通常研究超导电性问题所做的那样,从 $\mathcal{H}_{e-p}$ 中可以抽出贡献于超导的 BCS 相互作用. 它在平均场近似下可以写成

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = - \sum_k (\Delta_k c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} + \Delta_k^* c_{-k\downarrow}^+ c_{k\uparrow}^+) + \frac{\Delta^2}{V_s}, \quad (5)$$

其中 V_s 为 BCS 有效相互作用, Δ_k 为能隙参数,

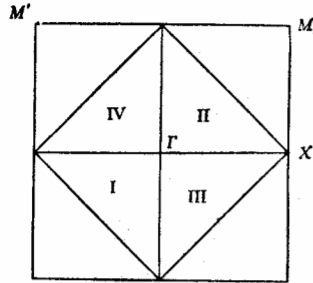


图1 二维简立方系统的布里渊区

$$|\Delta_k| = \begin{cases} \Delta & \text{若 } |\varepsilon(k)| \leq \hbar\omega_d, \\ 0 & \text{若 } |\varepsilon(k)| > \hbar\omega_d, \end{cases} \quad (6)$$

ω_d 为截断频率.

现在, 假设有一个波矢为 Q 的可公度 CDW, 我们考虑哈密顿量中与它有关的部分. 为简单和确定起见, 假定体系是二维简立方结构, 其布里渊区如图 1 所示^[7]. 设波矢 $Q = \Gamma M$, 因此 $2Q$ 是倒格矢, Q 与 $-Q$, $Q' = \Gamma M'$, $-Q'$ 代表同一状态, $k+Q$ 与 $k-Q$ 代表同一状态. 参与 CDW 的声子是波矢为 Q 的一个模式. 设这个模式的裸频率为 ω_Q , 其能量为

$$\mathcal{H}_{\text{ph}}(Q) = \hbar\omega_Q b_Q^+ b_Q, \quad (7)$$

它与电子的相互作用哈密顿量为

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{e-p}}(Q) &= \sum_{k,\sigma} (g c_{k+Q\sigma}^+ c_{k\sigma} b_Q + g^* c_{k\sigma}^+ c_{k+Q\sigma} b_Q^+) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k,\sigma} (g c_{k+Q\sigma}^+ c_{k\sigma} + g^* c_{k\sigma}^+ c_{k+Q\sigma}) (b_Q + b_Q^+). \end{aligned} \quad (8)$$

CDW 转变温度 T_c 以下在 Q 模式有宏观的声子凝聚, 即 b_Q 及 b_Q^+ 的平均值将正比于 $\sqrt{N}$, N 为体系的原胞总数. 设

$$\begin{aligned} \langle b_Q \rangle &= \sqrt{N} \left(\frac{2M\omega_Q}{\hbar} \right)^{1/2} U, \\ \langle b_Q^+ \rangle &= \sqrt{N} \left(\frac{2M\omega_Q}{\hbar} \right)^{1/2} U^*, \end{aligned} \quad (9)$$

M 为原子质量. 这样一个声子凝聚相当于原子沿 $\mathbf{e}_Q$ 方向有一个下式表示的平均位移:

$$\begin{aligned} \langle u_l \rangle &= \left(\frac{\hbar}{2NM\omega_Q} \right)^{1/2} (\langle b_Q \rangle e^{iQR_l} + \langle b^+ \rangle e^{-iQR_l}) \\ &= U e^{iQR_l} + U^* e^{-iQR_l}. \end{aligned} \quad (10)$$

即有一个波矢为 Q 的静态晶格形变. 写出 (9) 式和 (10) 式时, 为了简便, 假设每原胞只有一个原子, 但下面的结果一般并不依赖于这个假定. 令

$$G = -2g\langle b_Q \rangle, \quad (11)$$

(8) 式可写成

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{e-p}}(Q) &= -\frac{1}{2} \sum_{k,\sigma} (G c_{k+Q\sigma}^+ c_{k\sigma} + G^* c_{k\sigma}^+ c_{k+Q\sigma}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{k,\sigma} (g c_{k+Q\sigma}^+ c_{k\sigma} + g^* c_{k\sigma}^+ c_{k+Q\sigma}) (\alpha_Q + \alpha_Q^+), \end{aligned} \quad (12)$$

其中算符

$$\alpha_Q = b_Q - \langle b_Q \rangle, \quad \alpha_Q^+ = b_Q^+ - \langle b_Q^+ \rangle. \quad (13)$$

显然满足玻色子的对易关系. 它们代表围绕形变后的平均位置的模为 Q 的振动:

$$u_l - \langle u_l \rangle = \left(\frac{\hbar}{2NM\omega_Q} \right)^{1/2} (\alpha_Q e^{iQR_l} + \alpha_Q^\dagger e^{-iQR_l}), \quad (14)$$

也就是 CDW 的振幅模式. 在平均场近似下 Q 模式声子能量 (7) 式可写成

$$\mathcal{H}_{ph}(Q) \simeq \frac{\hbar\omega_Q}{4} \frac{|G|^2}{|g|^2} + \hbar\omega_Q \alpha_Q^\dagger \alpha_Q. \quad (15)$$

第一项为凝聚声子能量, 相当于体系的弹性形变能. 一般说来电声子耦合常数 g 及参数 G 除依赖声子模式外, 也依赖于被散射电子的状态. 但为了简单, 我们假设它是常数, 或采用截断形式的相互作用:

$$g = \begin{cases} \text{Const} & \text{若 } |\varepsilon(k)| \text{ 及 } |\varepsilon(k+Q)| \text{ 都在 } \varepsilon_b \text{ 范围,} \\ 0 & \text{其他情况.} \end{cases} \quad (16)$$

下面将直接用 g 及 G 代表相应的常数, ε_b 表示带宽或截断能量. 令

$$V_p = \frac{A|g|^2}{\hbar\omega_Q}, \quad (17)$$

(15) 式可写成

$$\mathcal{H}_{c-p}(Q) = |G|^2/V_p + \hbar\omega_Q \alpha_Q^\dagger \alpha_Q. \quad (18)$$

综合 (2), (5), (12) 和 (18) 式, 有效哈密顿量可表成

$$\mathcal{H}_{eff} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \hbar\omega_Q \alpha_Q^\dagger \alpha_Q, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = & \sum_{k,\sigma} \varepsilon(k) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - \sum_k (\Delta_k c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} + \Delta_k^* c_{-k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}^\dagger) \\ & - \frac{1}{2} \sum_{k,\sigma} (G c_{k+Q\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + G^* c_{k\sigma}^\dagger c_{k+Q\sigma}) + \frac{|\Delta|^2}{V_s} + \frac{|G|^2}{V_p}, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\mathcal{H}_1 = \frac{1}{2} \sum_{k,\sigma} (g c_{k+Q\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + g^* c_{k\sigma}^\dagger c_{k+Q\sigma}) (\alpha_Q + \alpha_Q^\dagger). \quad (21)$$

三、CDW 和超导共存系统

关于 CDW 与超导共存系统, 即 $\mathcal{H}_0$ 的解, 已经有好几位作者进行了研究^[7-9]. 我们不再详细推导, 只列出和补充一些要用到的结果.

在 $\mathcal{H}_0$ 的表达式 (20) 中 k 的求和是遍及整个布里渊区 (图 1), 但经过适当的组合可以表示成 k 限于 I, II, III, IV 构成的半个布里渊区的求和:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = & \sum_{k \in \frac{1}{2}} H(k, Q) = \sum_{k \in \text{I}} H(k, Q) + \sum_{k \in \text{II}} H(k, -Q) \\ & + \sum_{k \in \text{III}} H(k, Q') + \sum_{k \in \text{IV}} H(k, -Q'), \end{aligned} \quad (22)$$

其中

$$\begin{aligned} H(k, Q) = & \varepsilon(k) (c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow}) + \varepsilon(k+Q) (c_{k+Q\uparrow}^\dagger c_{k+Q\uparrow} \\ & + c_{-k-Q\downarrow}^\dagger c_{-k-Q\downarrow}) - (\Delta_k c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} + \Delta_k^* c_{-k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}^\dagger \\ & + \Delta_{k+Q} c_{k+Q\uparrow} c_{-k-Q\downarrow} + \Delta_{k+Q}^* c_{-k-Q\downarrow}^\dagger c_{k+Q\uparrow}^\dagger) \end{aligned}$$

$$-(Gc_{k+Q\uparrow}^+c_{k\uparrow} + G^*c_{k\uparrow}^+c_{k+Q\uparrow} + G^*c_{-k-Q\downarrow}^+c_{-k\downarrow} + Gc_{-k\downarrow}^+c_{-k-Q\downarrow}). \quad (23)$$

不难看出,在这样写出的表达式中,只有属于同一个 k 的四个算符 $c_{k\uparrow}$, $c_{k\downarrow}^+$, $c_{k+Q\uparrow}$ 和 $c_{-k-Q\downarrow}^+$ 之间互相混杂。因此,只要对 (22) 式中每一个 $H(k, Q)$ 对角化即可。(23) 式这种二次型哈密顿量容易用 Боголюбов 型变换对角化。戴显熹^[10]讨论过费密二次型哈密顿量对角化的问题,其结果可用于现在的情况¹⁾。

为了简化计算过程及所得的表达式,我们设 g , G 和 Δ 都是实数,并认为对任何 k , $\Delta_k = \Delta_{k+Q}$ 都成立。这后一假定一般情况下只能近似满足,但在对称能带下总是成立的。在这种情况下,下述 Боголюбов 变换

$$\begin{aligned} c_{k\uparrow} &= \alpha_1 \xi_1 + \alpha_2 \eta_1 - \beta_1 \xi_2^+ - \beta_2 \eta_2^+, & c_{k\downarrow}^+ &= \beta_1 \xi_1 + \beta_2 \eta_1 + \alpha_1 \xi_2^+ + \alpha_2 \eta_2^+, \\ c_{k+Q\uparrow} &= \nu \alpha_1 \xi_1 - \frac{\alpha_2}{\nu} \eta_1 - \nu \beta_1 \xi_2^+ + \frac{\beta_2}{\nu} \eta_2^+, \\ c_{-k-Q\downarrow} &= \nu \beta_1 \xi_1 - \frac{\beta_2}{\nu} \eta_1 + \nu \alpha_1 \xi_2^+ - \frac{\alpha_2}{\nu} \eta_2^+ \end{aligned} \quad (24)$$

就将 $H(k, Q)$ 对角化为

$$H(k, Q) = E^+(\xi_1^+ \xi_1 + \xi_2^+ \xi_2) + E^-(\eta_1^+ \eta_1 + \eta_2^+ \eta_2) - (E^+ + E^-) + \varepsilon(k) + \varepsilon(k+Q), \quad (25)$$

式中

$$E^+ = \left\{ \Delta^2 + \frac{1}{4} [\varepsilon(k) + \varepsilon(k+Q) + \bar{E}]^2 \right\}^{1/2} = [(\varepsilon(k) - G\nu)^2 + \Delta^2]^{1/2},$$

$$E^- = \left\{ \Delta^2 + \frac{1}{4} [\varepsilon(k) + \varepsilon(k+Q) - \bar{E}]^2 \right\}^{1/2} = [(\varepsilon(k) - G\nu^{-1})^2 + \Delta^2]^{1/2}, \quad (26)$$

$$\bar{E} = [(\varepsilon(k) - \varepsilon(k+Q))^2 + 4G^2]^{1/2}, \quad (27)$$

$$\nu = (\varepsilon(k) - \varepsilon(k+Q) + \bar{E})/2G = -2G/(\varepsilon(k) - \varepsilon(k+Q) - \bar{E}), \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{1}{(1+\nu^2)^{1/2}} \cos \varphi_1, & \beta_1 &= \frac{1}{(1+\nu^2)^{1/2}} \sin \varphi_1, \\ \alpha_2 &= \frac{\nu}{(1+\nu^2)^{1/2}} \cos \varphi_2, & \beta_2 &= \frac{\nu}{(1+\nu^2)^{1/2}} \sin \varphi_2. \end{aligned} \quad (29)$$

φ_1 和 φ_2 限于第一象限即可。容易看出,

$$\nu - \frac{1}{\nu} = \frac{\varepsilon(k) - \varepsilon(k+Q)}{G}, \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \sin 2\varphi_1 &= \Delta/E^+, & \sin 2\varphi_2 &= \Delta/E^-, \\ \cos 2\varphi_1 &= \sqrt{1 - (\Delta/E^+)^2}, & \cos 2\varphi_2 &= -\sqrt{1 - (\Delta/E^-)^2}. \end{aligned} \quad (31)$$

准粒子算符 ξ_1^+ , ξ_1 , ξ_2^+ , ξ_2 , η_1^+ , η_1 , η_2^+ , η_2 (它们都包含参数 $k \in \frac{1}{2}$) 之间满足费密子的对

1) 文献 [10] 给出的对角化的哈密顿量表达式 ((3.33) 和 (3.34) 式) 有一些错误。对于费密子情况, 对角化后的哈密顿量应当是

$$H = \sum_{\mu} E_{\mu} \xi_{\mu}^+ \xi_{\mu} - \sum_{l, \mu} E_{\mu} |\nu_{l\mu}|^2,$$

符号与文献 [10] 相同。

易关系.

写出对应于 $\mathcal{H}_0$ 的热力学势 $\mathcal{Q} = -k_B T \ln \{ \text{Tr} [\exp(-\beta \mathcal{H}_0)] \}$, 由极值条件 $\partial \mathcal{Q} / \partial \Delta = 0$ 及 $\partial \mathcal{Q} / \partial G = 0$, 我们得到确定 Δ 及 G 的自洽方程

$$\Delta = \frac{V_s}{2} \sum_{k \in \frac{1}{2}} \left[\frac{1 - 2f(E^+)}{E^+} + \frac{1 - 2f(E^-)}{E^-} \right] \Delta_k, \quad (32)$$

$$G = \frac{V_p}{2} \sum_{k \in \frac{1}{2}} \left[\left(\frac{1 - 2f(E^+)}{E^+} \right) \left(\frac{\varepsilon(k) + \varepsilon(k+Q) + \bar{E}}{\bar{E}} \right) - \left(\frac{1 - 2f(E^-)}{E^-} \right) \left(\frac{\varepsilon(k) + \varepsilon(k+Q) - \bar{E}}{\bar{E}} \right) \right] G, \quad (33)$$

式中 $f(E) = 1/(\exp(\beta E) + 1)$ 为费密分布函数.

对于完全嵌套的对称能带 $\varepsilon(k) = -\varepsilon(k+Q)$, 上述结果可进一步简化为

$$E^+ = E^- = E = \sqrt{\varepsilon^2(k) + \Delta^2 + G^2}, \quad (34)$$

$$v - \frac{1}{v} = \frac{2\varepsilon(k)}{G}, \quad \frac{v^2}{(1+v^2)^2} = \frac{1}{4} \frac{G^2}{\varepsilon^2(k) + G^2}, \quad (35)$$

$$\sin(\varphi_1 + \varphi_2) = 1. \quad (36)$$

能隙方程则变为

$$\Delta = V_s \sum_{k \in \frac{1}{2}}' \frac{1 - 2f(E)}{E} \Delta, \quad (37)$$

$$G = V_p \sum_{k \in \frac{1}{2}} \frac{1 - 2f(E)}{E} G. \quad (38)$$

Levin 等人^[5]对这两个方程能够有共同解, 即 CDW 与超导共存的情况作了详细讨论. 他们指出, 对于完全嵌套的能带, 共存区域只限于 $G-\Delta$ 的小范围. 但是, 如果能带不是完全嵌套, 两个能隙方程的差异变大, CDW 和超导共存的范围可大为增加^[7]. 外界因素, 例如磁场, 对超导电性和对 CDW 的影响完全不同, 因此可以想象, 加外磁场可以大大改变 G 与 Δ 的比例, 而维持 CDW 与超导的共存. 本文中我们不讨论这方面的问题, 而着重研究 CDW 与超导共存情况下电子对 CDW 振幅模式的影响.

四、声子自能和谐函数

有效哈密顿量中电子与 CDW 振幅模式的相互作用部分 $\mathcal{H}_1$ ((21) 式) 也可以表成由 I, II, III, IV 组成的半个布里渊区中 k 的求和:

$$\mathcal{H}_1 = g \Phi_Q \sum_{k \in \frac{1}{2}} h(k, Q), \quad (39)$$

其中

$$h(k, Q) = c_{k+Q}^\dagger c_{k+} + c_{k+}^\dagger c_{k+Q+} + c_{k-Q}^\dagger c_{-k+} + c_{-k+}^\dagger c_{-k-Q+},$$

$$\Phi_Q = \alpha_Q + \alpha_Q^\dagger.$$

按照算符变换 (24) 式, 很容易把 $\mathcal{H}_1$ 用准粒子算符表示出来, 因此不难在准粒子表象中

用微扰论计算声子的格林函数:

$$D(\tau - \tau') = - \langle T \Phi_Q(\tau) \Phi_Q^+(\tau') \rangle.$$

采用泡图近似(见图 2)



图 2

声子自能可表为

$$\begin{aligned} \Pi(i\omega_n) = & -2g^2 \sum_{k \in \frac{1}{2}} \frac{v^2}{(1+v^2)^2} \left\{ 2 \sin^2 2\varphi_1 [f(-E^+) - f(E^+)] \left(\frac{1}{i\omega_n - 2E^+} \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{i\omega_n + 2E^+} \right) + 2 \sin^2 2\varphi_2 [f(-E^-) - f(E^-)] \right. \\ & \times \left(\frac{1}{i\omega_n - 2E^-} - \frac{1}{i\omega_n + 2E^-} \right) \\ & + \left(v - \frac{1}{v} \right)^2 \sin^2(\varphi_1 + \varphi_2) [f(-E^-) - f(E^+)] \\ & \times \left(\frac{1}{i\omega_n - E^+ - E^-} - \frac{1}{i\omega_n + E^+ + E^-} \right) \\ & + \left(v - \frac{1}{v} \right)^2 \cos^2(\varphi_1 + \varphi_2) [f(E^+) - f(E^-)] \\ & \left. \times \left(\frac{1}{i\omega_n + E^+ - E^-} - \frac{1}{i\omega_n - E^+ + E^-} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (40)$$

其中

$$\omega_n = 2n\pi k_B T \quad (n = \pm 1, \pm 2, \dots).$$

对完全嵌套的对称能带,利用(34)–(36)式,声子自能的表达式简化为

$$\Pi(i\omega_n) = -2g^2 \sum_{k \in \frac{1}{2}} \left(1 - \frac{G^2}{E^2} \right) (f(-E) - f(E)) \left(\frac{1}{i\omega_n - 2E} - \frac{1}{i\omega_n + 2E} \right), \quad (41)$$

由声子格林函数的表达式

$$D(i\omega_n) = \frac{2\omega_Q}{(i\omega_n)^2 - \omega_Q^2 + 2\omega_Q \Pi(i\omega_n)} \quad (42)$$

立即得到谱密度函数

$$A(\omega) = -4\omega_Q I_m \left[\frac{1}{R(\omega) + iI(\omega) + i\delta} \right], \quad (43)$$

其中

$$R(\omega) = \omega^2 - \lambda\omega_Q^2 (4G^2 - \omega^2) \int_{(\omega^2 - \Delta^2)^{1/2}}^{\epsilon_F} \frac{dE}{(4E^2 - \omega^2)} \frac{1}{(E^2 - G^2 - \Delta^2)^{1/2}} \operatorname{th} \frac{\beta E}{2}, \quad (44)$$

$$I(\omega) = \begin{cases} 0 & \text{当 } \omega < 2(G^2 + \Delta^2)^{1/2}, \\ \frac{\pi}{2} \lambda \omega_D^2 \frac{\omega^2 - 4G^2}{\omega(\omega^2 - 4G^2 - 4\Delta^2)^{1/2}} \operatorname{th} \frac{\beta\omega}{4} & \text{当 } \omega > 2(G^2 + \Delta^2)^{1/2}. \end{cases} \quad (45)$$

这里 $\lambda = N(0)V_p$, $N(0)$ 为裸电子单自旋态密度. 得到 (44) 式时我们用了能隙方程 (38).

五、能隙模式

$T = 0\text{K}$ 时, 算出 (44) 式中的积分, 谱函数可表为

$$A(\omega) = \begin{cases} 4\omega_D \pi \delta(R_{01}(\omega)) & \text{当 } \omega < 2(G^2 + \Delta^2)^{1/2}, \\ 4\omega_D \frac{I_0(\omega)}{(R_{02}(\omega))^2 + (I_0(\omega))^2} & \text{当 } \omega > 2(G^2 + \Delta^2)^{1/2}. \end{cases} \quad (46)$$

这里

$$R_{01}(\omega) = \omega^2 - \lambda \omega_D^2 \frac{4G^2 - \omega^2}{\omega[4(G^2 + \Delta^2) - \omega^2]^{1/2}} \tan^{-1} \frac{\omega}{[4(G^2 + \Delta^2) - \omega^2]^{1/2}}, \quad (47)$$

$$R_{02}(\omega) = \omega^2 - \lambda \omega_D^2 \frac{\omega^2 - 4G^2}{\omega[\omega^2 - 4(G^2 + \Delta^2)]^{1/2}} \operatorname{th}^{-1} \frac{[\omega^2 - 4(G^2 + \Delta^2)]^{1/2}}{\omega}, \quad (48)$$

$$I_0(\omega) = \frac{\pi}{2} \lambda \omega_D^2 \frac{\omega^2 - 4G^2}{\omega[\omega^2 - 4(G^2 + \Delta^2)]^{1/2}}. \quad (49)$$

可见, 在 $\omega < 2(G^2 + \Delta^2)^{1/2}$ 区域, $A(\omega)$ 是一个 δ 函数形的峰, 峰位置 $\omega_p < 2G$, 峰的

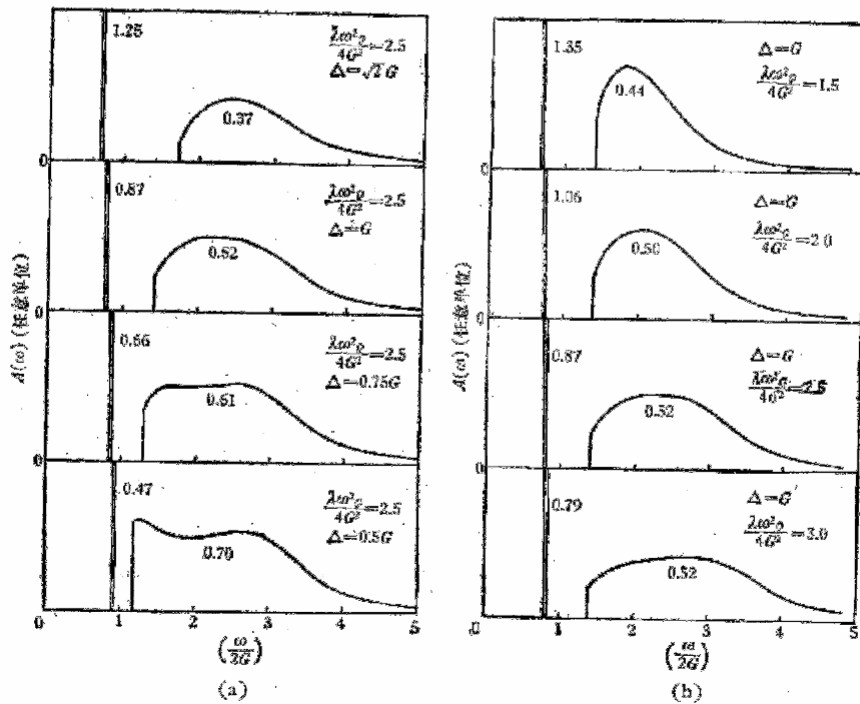


图3 不同参数下谱函数的形状 曲线旁标的数字是 $A(\omega)$ 的 δ 峰及连续谱部分的权重(未归一化)

权重正比于 $\pi/|R'_{01}(\omega_p)|$; 在 $\omega > 2(G^2 + \Delta^2)^{1/2}$ 区域, $A(\omega)$ 是一个连续分布.

设 $\Delta = G$, 对 $(\lambda\omega_0^2/4G^2) = 1.5; 2.0; 2.5$ 和 3.0 , 谱函数的形式画于图 3(a). δ 峰在整个参数范围都有相当大的权重. 随 $\lambda\omega_0^2$ 的增加 δ 峰的位置只有轻微变化, 但其权重减少. 连续部分的重心随 $\lambda\omega_0^2$ 增加移向较高频率. 如果认为 $A(\omega)$ 连续部分的重心相应于 Sooryakumar-Klein 实验中的 CDW 峰, 而 δ 函数位置相应于能隙模式, 则取 $2G = 23\text{cm}^{-1}$, $(\lambda\omega_0^2/4G^2) = 2.5$ 的 $A(\omega)$ 曲线完全能说明实验结果. 如果假设裸声子频率 $\omega_0 = 85\text{cm}^{-1}$, 上述参数要求 $\lambda = 0.18$. 这与 Tsang 等人^[5]的估值一致. 而按 Balseiro-Falicov 理论, 为了得到符合实验的 CDW 峰位置及实验上可观察的能隙峰的权重, 需要选取相当小的 ω_0 , 例如 $\omega_0 \sim 36\text{cm}^{-1}$ ^[3]. 这作为 Q 模式的裸频率似乎太小了.

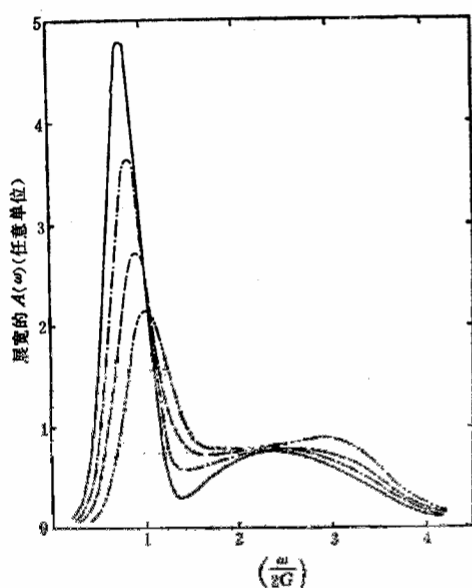


图 4 $\lambda\omega_0^2/4G^2 = 2.5$

——为 $\Delta = G$; ---为 $\Delta = 0.75G$; - · - 为 $\Delta = 0.5G$; · · · 为 $\Delta = 0.142G$

我们的 $A(\omega)$ 表达式的另一个特点是: 耦合强度 λ 的改变对 δ 峰位置的影响并不大; 而且不论 $\lambda\omega_0^2$ 多大, $R_{01}(\omega) = 0$ 总有小于 $2G$ 的实数解 ω_p , 不会出现晶格不稳定的情况. 这个结果看来是比较合理的: 电声子相互作用已经造成了晶格不稳定, 在 T_p 以下发生 CDW 形变; 现在是围绕形变的平均位置的振荡——振幅模式与电子发生作用, 不应再造成新的晶格不稳定性.

固定 G 和 $(\lambda\omega_0^2/4G^2) = 2.5$, 让 Δ 取不同值时谱函数的变化如图 3(b) 所示. 随 Δ/G 减少, 能隙峰的强度大为降低但其位置只略向高频方向移动; 而连续谱则向低频方向延伸, 权重增加. 可以想象外加磁场时 CDW 基本不受影响, 而超导能隙被磁场压缩. 只要二者仍然共存, 则加磁场后能隙峰位置变化不大, 高度大大降低, 而 CDW 峰强度增加的现象就容易理解. 因此我们的结果很自然

地定性说明了磁场效应, 不需要象 Sooryakumar 和 Klein 所做的那样, 引入复能隙, 假定磁场只改变其虚部不改变实部.

实际观察到的谱当然是由各种原因展宽了的. 我们把图 3(b) 的几个曲线按高斯分布 (方差 $= 0.16G^2$) 均匀展宽的图形画于图 4. 可以看出, 当 Δ 大时, 能隙峰权重较大, 与连续谱分得较开, 因而有可能明显地观察到突出的能隙峰及分开的 CDW 谱. 当 Δ 小时, 能隙峰权重变小, 连续谱权重增大, 而且二者又靠近, 基本上融合在一起. 虽然靠近 $2G$ 处的峰并不消失, 但考虑到喇曼散射中电子部分贡献会在 $2G$ 附近造成较陡的边, 实验上恐怕只有非常突出的能隙峰才能被察觉.

感谢 J. L. Birman 教授引导作者注意文献 [1] 和 [2] 的工作.

参 考 文 献

- [1] R. Sooryakumar and M. V. Klein, *Phys. Rev. Lett.*, **45**(1980), 660.
- [2] C. A. Balseiro and L. M. Falicov, *Phys. Rev. Lett.*, **45**(1980), 662.
- [3] R. Sooryakumar and M. V. Klein, *Phys. Rev. B.*, **23**(1981), 3213.
- [4] R. Sooryakumar, M. V. Klein and R. F. Frindt, *Phys. Rev. B.*, **23**(1981), 3222.
- [5] J. C. Teang, J. E. Smith and M. W. Shafer, *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1976), 1407.
- [6] M. J. Rice and S. Strässler, *Solid State Commun.*, **13**(1973), 1931.
- [7] C. A. Balseiro and L. M. Falicov, *Phys. Rev. B.*, **20**(1979), 4457.
- [8] K. Levin, D. L. Mills and S. L. Cunningham, *Phys. Rev. B.*, **10**(1974), 3821.
- [9] G. Bilbro and W. L. Memillan, *Phys. Rev. B.*, **14**(1976), 1887.
- [10] 戴显燕, 低温物理, **1**(1979), 273.

SOFT PHONON AND ITS RAMAN SCATTERING IN A CHARGE-DENSITY-WAVE SUPERCONDUCTOR

LEI XIAO-LIN

(Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica)

ABSTRACT

Following the idea put forward by Balseiro and Falicov, we have calculated the renormalized spectral function $A(\omega)$ of the amplitude mode of Charge-Density-wave (CDW) phonon by electron-phonon interaction in a model system with coexisting CDW and superconductivity. The $A(\omega)$ obtained shows a heavily weighted peak of delta-function type at the frequency $\omega \lesssim 2G$, where G is the CDW band gap, and a relatively broad continuous spectrum in the region $\omega > 2(G^2 + \Delta^2)^{1/2}$, where Δ is the superconducting energy gap. Under the condition of fixed G , as Δ decreases the intensity of the peak decreases considerably with only a small shift in its position, while the weight of the continuous spectrum raises. These characteristics are in agreement with the behavior of the Raman-active gap modes found by Sooryakumar and Klein in CDW superconductor $2H-NbSe_2$.