

电子关联作用对 Jahn-Teller 效应引起的结构相变的影响

吴 建 斌

浙江大学物理系, 杭州, 310027

1990 年 9 月 7 日收到

本文从考虑集体 Jahn-Teller 效应和电子关联作用的哈密顿量出发, 研究 Jahn-Teller 效应所致的结构相变行为随作用量中各参量的变化情况。根据这些参量的不同选择, 得到三种结果: (1) 体系仅存在对称破缺的一个相变点; (2) 体系在高温时存在对称破缺的相变, 在低温时对称性又回复; (3) 不存在结构相变。

PACC: 6300; 6320K; 6375

一、引 言

Jahn-Teller 效应, 通常被认为是固体材料中发生结构相应的起因之一。在钙钛矿型材料中, 成功地观测到理论上预言的软模行为^[1]。但是, 由于问题的复杂性, Jahn-Teller 电子(即能引起原胞 Jahn-Teller 畸变的电子)的关联作用对 Jahn-Teller 效应影响一直未加以深入的研究。最近, 高温超导材料中各种反常行为的发现, 要求我们在考虑体系的结构相变时, 必须同时考虑电子关联作用的影响。在真实的高 T_c 材料中, 电子同点作用能 U 是很大的, 一般的微扰方法无法使用。我们拟另文研究此问题。本文仅考虑 U 较小, 因而电子关联能用微扰法研究的情况。结果是在一定的情况下, 高温时被破缺的对称性在低温时得以恢复。

二、模 型

假定一个二维固体, 其原胞能发生 Jahn-Teller 畸变。设 Jahn-Teller 坐标为 Q_δ , $\delta \in (\delta_1, \delta_2)$ 。对应的两个简并电子态为 $|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle$ 。 $\{Q_\delta, Q_{\delta'}\}, \{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle\}$ 分别构成某一对称群的不可约表示。一电子在 $|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle$ 之间跃迁, 就能导致 Jahn-Teller 效应, 此电子称为 Jahn-Teller 电子。令 $E_{\alpha_1} = E_{\alpha_2} = 0$, 于是原胞的 Jahn-Teller 哈密顿量为

$$\begin{aligned} H_{JT} &= \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\delta, \delta'} \left(\frac{\partial v}{\partial Q_\delta} \right)_{0, \alpha \alpha'} Q_\delta |\alpha \sigma\rangle \langle \alpha' \sigma| \\ &= \sum_{\substack{\alpha, \alpha' \\ \sigma, \delta}} (\partial v / \partial Q_\delta)_{0, \alpha \alpha'} Q_\delta a_{\alpha \sigma}^\dagger a_{\alpha' \sigma}, \end{aligned} \quad (1)$$

其中 $\alpha \in (\alpha_1, \alpha_2)$, σ 为电子自旋指标, $a_{\alpha\sigma}^+|0\rangle = |\alpha\sigma\rangle$, $\{a_{\alpha\sigma}^+; a_{\alpha'\sigma'}\} = \delta_{\alpha\sigma, \alpha'\sigma'}$. 系统的总 Jahn-Teller 哈密顿量为

$$\mathcal{H}_{\text{JT}} = \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{i, \delta, \sigma} (\partial v^i / \partial Q_\delta^i)_{0, \alpha\sigma} Q_\delta^i a_{\alpha\sigma}^+ a_{\alpha'\sigma'}, \quad (2)$$

其中 i 为原胞指标, v^i 为一个原胞中的电子-晶格作用势.

考虑 Jahn-Teller 电子关联, 取系统总哈密顿量为

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \sum_{\alpha, \alpha', \sigma} t_{\alpha\alpha'}^{ij} a_{\alpha\sigma}^+ a_{\alpha'\sigma} + U \sum_{i, \alpha, \alpha'} a_{\alpha\sigma}^+ a_{\alpha\sigma} a_{\alpha'\sigma}^+ a_{\alpha'\sigma} + \mathcal{H}_{\text{JT}} + H_{\text{ph}}, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} H_{\text{ph}} = & \frac{1}{2} \sum_{i\delta} (P_\delta^2 + \omega_\delta^2 Q_\delta^2) + \sum_{\substack{l, m \\ i, j}} A_{lm}^{ij} Q_i^l Q_j^m \\ & + \sum_{\substack{l, j, k \\ l, m, n}} B_{lmn}^{ijk} Q_i^l Q_j^m Q_n^k + \sum_{\substack{l, j, k, s \\ l, m, n, t}} D_{lmnt}^{ijkl} Q_i^l Q_j^m Q_n^k Q_t^s \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i, l \neq \delta} \sum_i \left(P_i^2 + \frac{1}{2} \omega_i^2 Q_i^2 \right). \end{aligned}$$

在此仅计及晶格作用的 2 次, 3 次, 4 次耦合项, A_{lm}^{ij} , B_{lmn}^{ijk} , D_{lmnt}^{ijkl} 分别为对应的耦合系数. (i, j, k, s) 为原胞指标, (l, m, n, t) 为振动模式指标. $P_i^2 = \dot{Q}_i^2$, $Q_i^2 = \sqrt{M'} q_i^2$, M' 为对应模的折合质量. $t_{\alpha\alpha'}^{ij} = t_{\alpha\alpha'}$, 当 i, j 为最近邻, 其余为零. 作 Fourier 变换

$$\begin{aligned} a_{\alpha\sigma}^+ &= (1/\sqrt{N}) \sum_{\mathbf{k}} a_{\alpha\sigma}^+(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i}; \quad t_{\alpha\alpha'}^{ij} = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} t_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}); \\ Q_i &= (1/\sqrt{N}) \sum_{\mathbf{q}} Q_i(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i}; \quad Q_i(\mathbf{q}) = (b_i(\mathbf{q}) + b_i^*(-\mathbf{q}))/\sqrt{2\omega_i(\mathbf{q})}; \\ P_i &= (1/\sqrt{N}) \sum_{\mathbf{q}} P_i(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i}; \quad P_i(\mathbf{q}) = i \sqrt{\frac{\omega_i(\mathbf{q})}{2}} (b_i(\mathbf{q}) - b_i^*(-\mathbf{q})); \\ (\partial v^i / \partial Q_\delta^i)_{0, \alpha\sigma} &\approx C_{\alpha\sigma}^\delta. \\ \mathcal{H} &= \sum_{\substack{\alpha, \alpha', \sigma \\ \mathbf{k}}} t_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}) a_{\alpha\sigma}^+(\mathbf{k}) a_{\alpha'\sigma}(\mathbf{k}) + \frac{U}{N} \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} a_{\alpha\sigma}^+(\mathbf{k}_1) a_{\alpha\sigma}(\mathbf{k}_2) a_{\alpha'\sigma}^+(\mathbf{k}_3) \\ &\quad \cdot a_{\alpha'\sigma}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2) + \sum_{\substack{\alpha, \alpha' \\ \delta, \sigma}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (C_{\alpha\sigma}^\delta / \sqrt{N}) (Q_\delta(\mathbf{q}) a_{\alpha\sigma}^+(\mathbf{k}) a_{\alpha'\sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q})) \\ &\quad + \sum_{l, \mathbf{q}} \hbar \omega_l(\mathbf{q}) b_l^+(\mathbf{q}) b_l(\mathbf{q}) + \sum_{l, m, n} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} B_{lmn}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) Q_l(\mathbf{k}_1) Q_m(\mathbf{k}_2) Q_n(\mathbf{k}_3) \\ &\quad + \sum_{l, m, n, t} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} D_{lmnt}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) Q_l(\mathbf{k}_1) Q_m(\mathbf{k}_2) Q_n(\mathbf{k}_3) Q_t(\mathbf{k}_4), \quad (4) \end{aligned}$$

其中

$$B_{lmn}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = (1/N^{3/2}) \sum_{i, j, k} B_{lmn}^{ijk} \exp(i\mathbf{k}_1 \mathbf{R}_i + i\mathbf{k}_2 \mathbf{R}_j + i\mathbf{k}_3 \mathbf{R}_k);$$

$D_{lmnt}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4)$ 也为 D_{lmnt}^{ijkl} 的 Fourier 分量.

三、电子关联函数的计算

一般情况下,能导致 Jahn-Teller 畸变的电声耦合是较强的,因此普通的微扰方法不能处理此类问题,此处采用与小极子问题相类似的方法^[5]. 由于电子关联 U 较小,采用微扰方法来处理电子关联.

在 $(\partial V^i / \partial Q_\delta^i)_{0,a\sigma} \approx C_{a\sigma}^i$ 近似下,体系的 Jahn-Teller 作用量可表为

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{JT} &= \sum_{\substack{a,a' \\ \delta,\sigma}} C_{a\sigma}^i \sum_i Q_\delta^i \hat{a}_{a\sigma}^{i+} \hat{a}_{a'\sigma}^i \\ &= \sum_{\substack{a,a' \\ \delta,\sigma}} (C_{a\sigma}^i / \sqrt{N}) \sum_{i,q} ((b_i(q) + b_i^*(-q)) / \sqrt{2\omega_\delta(q)}) e^{iq \cdot Ri} \hat{a}_{a\sigma}^{i+} \hat{a}_{a'\sigma}^i. \end{aligned} \quad (5)$$

取正交矩阵 T , 使 $T_{\tau\sigma}^{-1} \hat{C}_{a\sigma}^i T_{\sigma'\tau} = d_{\tau\sigma}^i \delta_{\tau\sigma'}$, 设 $C_{a\sigma}^i = C_{a\sigma}$, 因而 $\hat{C}_{a\sigma}^i = T_{\sigma\tau} T_{\tau\sigma}^{-1} d_{\tau\sigma}^i$, 其中 $\tau \in (\tau_1, \tau_2)$,

$$\begin{aligned} T &= \begin{bmatrix} C_{12}/A_1 & C_{12}/A_2 \\ \frac{d_{\tau_1} - C_{11}}{A_1} & \frac{d_{\tau_2} - C_{11}}{A_2} \end{bmatrix}, \\ A_i &= [(C_{11} - d_{\tau_i})^2 + C_{12}^2]^{1/2} \quad i \in (1, 2), \\ d_{\tau_{1,2}} &= \frac{(C_{11} + C_{22}) \pm \sqrt{(C_{11} - C_{22})^2 + 4|C_{12}|^2}}{2}. \end{aligned}$$

这里取 $C_{12} = C_{21}$. 把上述结果代入(5)式中,取可得

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{JT} &= \sum_\tau \frac{d_\tau}{\sqrt{N}} \sum_{i,q,\delta} ((b_\delta(q) + b_\delta^*(-q)) / \sqrt{2\omega_\delta(q)}) e^{iq \cdot Ri} \cdot \sum_{a,a',\sigma} T_{\tau a}^{-1} T_{a'\sigma} \hat{a}_{a\sigma}^{i+} \hat{a}_{a'\sigma}^i \\ &= \sum_\tau \frac{d_\tau}{\sqrt{N}} \sum_{i,q,\delta} \frac{1}{\sqrt{2\omega_\delta(q)}} (b_\delta(q) + b_\delta^*(-q)) e^{iq \cdot Ri} \hat{A}_{\tau\sigma}^{i+} \hat{A}_{\tau\sigma}^i. \end{aligned} \quad (6)$$

这里 $\hat{A}_{\tau\sigma}^i = T_{\tau\sigma}^{-1} \hat{a}_{a'\sigma}^i$.

由于 $C_{11} \approx C_{22}$, $C_{12} = C_{21}$, $C_{11} \approx C_{12}$, 从而 $d_{\tau_1} \approx 0$. 因此,真正耦合较强的是 $|\tau_1\sigma\rangle$ 态电子与 Jahn-Teller 声子之间的作用. 于是,

$$\mathcal{H}_{JT} \approx \frac{d_{\tau_1}}{\sqrt{N}} \sum_{i,q,\delta} ((b_\delta(q) + b_\delta^*(-q)) / \sqrt{2\omega_\delta(q)}) e^{iq \cdot Ri} \hat{A}_{\tau_1\sigma}^{i+} \hat{A}_{\tau_1\sigma}^i.$$

此作用量等价于小极化子理论中的作用量. 如果取 $M_{q\delta} = d_{\tau_1} / \sqrt{N} / \sqrt{2\omega_\delta(q)}$, 下面作位移振子变换^[6]. 在(3)式中, 作算子变换 $\hat{A}_{\tau\sigma}^i = T_{\tau\sigma}^{-1} \hat{a}_{a'\sigma}^i$ 以后, 考虑到关于(6)式的讨论, 总的哈密顿量可近似表示为

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &\approx \sum_{i,j} \sum_{\substack{\tau,\tau' \\ \sigma,\sigma'}} g_{ij}^{\tau\tau'} \hat{A}_{\tau\sigma}^{i+} \hat{A}_{\tau'\sigma'}^j + U \sum_i \sum_{\substack{\tau,\tau' \\ \sigma,\sigma'}} \hat{A}_{\tau\sigma}^{i+} \hat{A}_{\tau\sigma}^i \hat{A}_{\tau'\sigma'}^{i+} \hat{A}_{\tau'\sigma'}^i \\ &\quad + \frac{d_{\tau_1}}{\sqrt{N}} \sum_{i,q} \sum_{\delta} ((b_\delta(q) + b_\delta^*(-q)) / \sqrt{2\omega_\delta(q)}) e^{iq \cdot Ri} \hat{A}_{\tau_1\sigma}^{i+} \hat{A}_{\tau_1\sigma}^i + H_{ph}, \end{aligned} \quad (7)$$

其中 $g_{\tau\tau'}^{ij} = t_{aa'}^{ij} T_{a'\tau} T_{\tau'a}^{-1}$, 作位移振子变换

$$\bar{H} = e^{-S} \mathcal{H} e^S = \bar{H}_0 + \bar{H}_1, \quad (8)$$

其中

$$\begin{aligned} S &= \sum_{q,\delta} \sum_i (d_{\tau_i} / \sqrt{N \cdot 2\omega_\delta(q)} / \hbar\omega_\delta(q)) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i} \hat{A}_{\tau_i\sigma}^{i+} \hat{A}_{\tau_i\sigma}^i, \\ \bar{H}_0 &= -\Delta \sum_{i,\sigma} \hat{A}_{\tau_i\sigma}^{i+} \hat{A}_{\tau_i\sigma}^i + \sum_{i,j,\sigma} g_{\tau_i\tau_j}^{ij} \hat{A}_{\tau_i\sigma}^{i+} \hat{A}_{\tau_j\sigma}^j X_{\tau_i}^{i+} X_{\tau_j}^j \\ &\quad + \sum_{i,j,\sigma} g_{\tau_i\tau_j}^{ij} \hat{A}_{\tau_i\sigma}^{i+} \hat{A}_{\tau_j\sigma}^j X_{\tau_i}^{i+} + \sum_{i,j,\sigma} g_{\tau_i\tau_j}^{ij} \hat{A}_{\tau_i\sigma}^{i+} \hat{A}_{\tau_j\sigma}^j X_{\tau_j}^j \\ &\quad + \sum_{i,\sigma} g_{\tau_i\tau_i}^{ii} \hat{A}_{\tau_i\sigma}^{i+} \hat{A}_{\tau_i\sigma}^i + U \sum_{i,\tau,\tau'} \hat{A}_{\tau_i\sigma}^{i+} \hat{A}_{\tau_i\sigma}^i \hat{A}_{\tau'\sigma}^{i+} \hat{A}_{\tau'\sigma}^i, \\ \bar{H}_1 &= \mathcal{H}'_{ph} + \sum_{i \neq j} \sum_{\sigma,\sigma'} U(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \hat{A}_{\tau_i\sigma}^{i+} \hat{A}_{\tau_j\sigma'}^j \hat{A}_{\tau_i\sigma}^i \hat{A}_{\tau_j\sigma'}^j, \end{aligned} \quad (9)$$

$\Delta = d_{\tau_i}^2 / N \sum_{q,\delta} 1 / 2\hbar\omega_{q,\delta}^2$; $\mathcal{H}'_{ph}$ 为 H_{ph} 中扣除 δ_1, δ_2 振动部分而余下的声子哈密顿量。

$$X_{\tau_i}^i = \exp \left\{ \sum_{q,\delta} (M_{q,\delta} / \hbar\omega_\delta(q)) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i} (b_\delta(q) - b_\delta^+(-q)) \right\},$$

$$X_{\tau_i}^{i+} X_{\tau_i}^i = 1, \quad M_{q,\delta} = \frac{d_{\tau_i}}{\sqrt{N}} / \sqrt{2\omega_\delta(q)}.$$

若仅考虑单极化子行为, 则 $\bar{H}_1$ 可以不考虑。对 $\bar{H}_0$ 作热平均, 且仅取电子的能带运动, 得到相应的哈密顿量(未考虑电子关联作用)

$$\begin{aligned} \bar{H}_0 &\approx \sum_{\mathbf{k},\sigma} \{ E_{\tau_1}(\mathbf{k}) \hat{A}_{\tau_1\sigma}^+(\mathbf{k}) \hat{A}_{\tau_1\sigma}(\mathbf{k}) + E_{\tau_1\tau_2}(\mathbf{k}) \hat{A}_{\tau_1\sigma}^+(\mathbf{k}) \hat{A}_{\tau_2\sigma}(\mathbf{k}) \\ &\quad + E_{\tau_2\tau_1}(\mathbf{k}) \hat{A}_{\tau_2\sigma}^+(\mathbf{k}) \hat{A}_{\tau_1\sigma}(\mathbf{k}) + E_{\tau_1}(\mathbf{k}) \hat{A}_{\tau_2\sigma}^+(\mathbf{k}) \hat{A}_{\tau_2\sigma}(\mathbf{k}) \} \\ &\quad - \sum_{\mathbf{k},\beta,\sigma} \varepsilon_\beta(\mathbf{k}) \hat{B}_{\beta\sigma}^+(\mathbf{k}) \hat{B}_{\beta\sigma}(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (10)$$

其中

$$E_{\tau_1}(\mathbf{k}) = -\Delta + e^{-S_T} \sum_{\rho} g_{\tau_1\tau_2} e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}},$$

$$E_{\tau_1\tau_2}(\mathbf{k}) = e^{-S'_T} \sum_{\rho} g_{\tau_1\tau_2} e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}}$$

$$E_{\tau_2\tau_1}(\mathbf{k}) = e^{-S'_T} \sum_{\rho} g_{\tau_2\tau_1} e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}},$$

$$E_{\tau_1}(\mathbf{k}) = \sum_{\rho} g_{\tau_2\tau_2} e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}},$$

$$S_T = - \sum_{q,\delta} \frac{d_{\tau_i}^2}{N} \frac{1}{2\hbar^2\omega_\delta^2(q)} \cdot \left| \sum_{\rho} (1 - e^{-i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}}) \right|^2 \left(\langle n_{q,\delta} \rangle_T + \frac{1}{2} \right),$$

$$S'_T = - \sum_{\delta} \frac{d_{\tau_i}^2}{N} \frac{1}{2\hbar^2\omega_\delta^2(0)} \left(\langle n_{0,\delta} \rangle_T + \frac{1}{2} \right),$$

$$\begin{aligned}\hat{B}_{\beta\sigma}(\mathbf{k}) &= \eta_{\beta\tau}(\mathbf{k})\hat{A}_{\tau\sigma}(\mathbf{k}) \quad \beta \in (\beta_1, \beta_2), \\ \hat{\eta}(\mathbf{k}) &= \begin{bmatrix} E_{\tau_1\tau_2}(\mathbf{k})/D_1(\mathbf{k}) & E_{\tau_1\tau_2}(\mathbf{k})/D_2(\mathbf{k}) \\ \frac{\varepsilon_{\beta_1}(\mathbf{k}) - E_{\tau_1}(\mathbf{k})}{D_1(\mathbf{k})} & \frac{\varepsilon_{\beta_2}(\mathbf{k}) - E_{\tau_1}(\mathbf{k})}{D_2(\mathbf{k})} \end{bmatrix}, \\ \varepsilon_{\beta_{1,2}}(\mathbf{k}) &= \frac{E_{\tau_1}(\mathbf{k}) + E_{\tau_2}(\mathbf{k}) \pm \sqrt{(E_{\tau_1}(\mathbf{k}) - E_{\tau_2}(\mathbf{k}))^2 + 4E_{\tau_1\tau_2}E_{\tau_2\tau_1}}}{2}, \\ D_i(\mathbf{k}) &= [(E_{\tau_1}(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\beta_i}(\mathbf{k}))^2 + E_{\tau_1\tau_2}(\mathbf{k})E_{\tau_2\tau_1}(\mathbf{k})]^{1/2} \quad i \in (1, 2).\end{aligned}$$

计及电子关联项,作 Fourier 变换得

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}' &= \sum_{\beta,\sigma} \varepsilon_{\beta}(\mathbf{k})\hat{B}_{\beta\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k})\hat{B}_{\beta\sigma}(\mathbf{k}) \\ &+ \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} \sum_{\substack{\beta', \beta'', \beta''', \\ \sigma, \sigma'}} \hat{V}_{\beta\beta', \beta''\beta'''}^{(\sigma\sigma')(\sigma'\sigma'')}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) \hat{B}_{\beta\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) \hat{B}_{\beta'\sigma'}(\mathbf{k}_2) \hat{B}_{\beta''\sigma''}^{\dagger}(\mathbf{k}_3) \\ &\cdot \hat{B}_{\beta'''\sigma'''}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2),\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}\hat{V}_{\beta\beta', \beta''\beta'''}^{(\sigma\sigma')(\sigma'\sigma'')}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) &= \frac{U}{N} \sum_{\gamma\gamma'} \eta_{\gamma\beta}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) \eta_{\gamma\beta'}^{\dagger}(\mathbf{k}_3) \eta_{\gamma\beta''}(\mathbf{k}_2) \eta_{\gamma\beta'''}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2) \\ &\cdot \delta_{\sigma\gamma} \delta_{\sigma'\gamma'}.\end{aligned}$$

在单圈近似下,算得相应的关联函数为

$$\begin{aligned}G_{\beta\beta', \sigma\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) &= \delta_{\beta\beta'} / (i\omega_n - \varepsilon_{\beta}(\mathbf{k}) + \mu - U\phi), \\ \phi &= \frac{1}{(2\pi)^2} \cdot \frac{1}{N} \int d^2\mathbf{p} \left[\frac{1}{e^{(\varepsilon_{\beta_1}(\mathbf{p}) - \mu)/k_B T} + 1} + \frac{1}{e^{(\varepsilon_{\beta_2}(\mathbf{p}) - \mu)/k_B T} + 1} \right], \\ G_{\beta\beta', \sigma\sigma}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\beta} \sum_n G_{\beta\beta', \sigma\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{\delta_{\beta\beta'}}{e^{(\varepsilon_{\beta_1}(\mathbf{k}) + U\phi - \mu)/k_B T} + 1}, \\ \langle\langle \hat{B}_{\beta\sigma}^{\dagger} \hat{B}_{\beta'\sigma} \rangle\rangle_T &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} \langle\langle \hat{B}_{\beta\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}') \hat{B}_{\beta'\sigma}(\mathbf{k}) \rangle\rangle_T, \\ \langle\langle \hat{B}_{\beta\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \hat{B}_{\beta'\sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle\rangle_T &= \delta_{\beta\beta'} \delta_{\sigma\sigma'} / [e^{(\varepsilon_{\beta}(\mathbf{k}) + U\phi - \mu)/k_B T} + 1].\end{aligned}\tag{11}$$

四、振动的有效哈密顿量和软模

在(4)式中对电子态求热平均。得有效声子哈密顿量

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{ph}} &= \sum_{\mathbf{q}, l} \hbar\omega_l(\mathbf{q}) \hat{b}_l^{\dagger}(\mathbf{q}) \hat{b}_l(\mathbf{q}) + \sum_{\substack{\gamma, \delta, \sigma, \mathbf{k}_1}} \frac{d_{\gamma}}{\sqrt{N(2\omega_{\delta}(\mathbf{q}))^{1/2}}} (b_{\delta}(\mathbf{q}) + b_{\delta}^{\dagger}(-\mathbf{q})) \\ &\cdot \langle\langle \hat{A}_{\gamma\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) \hat{A}_{\tau\sigma}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}) \rangle\rangle \\ &+ \sum_{l, m, n} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} B_{lmn}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) Q_l(\mathbf{k}_1) Q_m(\mathbf{k}_2) Q_n(\mathbf{k}_3) \\ &+ \sum_{l, m, n, i} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} D_{lmni}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) Q_l(\mathbf{k}_1) Q_m(\mathbf{k}_2) Q_n(\mathbf{k}_3) Q_i(\mathbf{k}_4).\end{aligned}\tag{13}$$

现在假定 δ_1 模在布里渊区中心被软化,取

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{ph}, \delta_1} \approx & \hbar \omega_{\delta_1}(0) b_{\delta_1}^+(0) b_{\delta_1}(0) + \sum_{\gamma, a} d_{\gamma} Q_{\delta_1}(0) \langle \langle \hat{A}_{\gamma a}^+(\mathbf{k}_1) \hat{A}_{\gamma a}(\mathbf{k}_1) \rangle \rangle \\
& + \sum_{\mathbf{k}, a} B_{aa, \delta_1}(\mathbf{k}, 0, 0) \hat{Q}_a(\mathbf{k}) Q_{\delta_1}^2(0) + B_{\delta_1, \delta_1, \delta_1}(0) Q_{\delta_1}^3(0) \\
& + \sum_{a, a'} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} B_{aa', \delta_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) Q_a(\mathbf{k}_1) Q_{a'}(\mathbf{k}_2) Q_{\delta_1}(0) \\
& + D_{\delta_1, \delta_1, \delta_1, \delta_1}(0) Q_{\delta_1}^4(0) + \sum_{a, a'} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} D_{aa', \delta_1, \delta_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) Q_a(\mathbf{k}_1) Q_{a'}(\mathbf{k}_2) Q_{\delta_1}^2(0) \\
& + \sum_{a, a', a''} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} D_{aa'a'', \delta_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, 0) Q_a(\mathbf{k}_1) Q_{a'}(\mathbf{k}_2) Q_{a''}(\mathbf{k}_3) Q_{\delta_1}(0). \quad (14)
\end{aligned}$$

这里仅考虑 $Q_{\delta_1}(0)$ 模与自身及与声学振动模的耦合. a, a', a'' 等为声学模指标. 已知

$$\begin{aligned}
\langle \langle \hat{A}_{\gamma a}^+(\mathbf{k}_1) \hat{A}_{\gamma a}(\mathbf{k}_1) \rangle \rangle_T &= \langle \langle \hat{B}_{\beta a}^+(\mathbf{k}_1) \hat{B}_{\beta' a}(\mathbf{k}_1) \rangle \rangle_T \cdot \eta_{\gamma \beta'}(\mathbf{k}_1) \eta_{\beta \gamma}^{-1}(\mathbf{k}_1) \\
&= \langle \langle \hat{B}_{\beta a}^+(\mathbf{k}_1) \hat{B}_{\beta a}(\mathbf{k}_1) \rangle \rangle_T \eta_{\gamma \beta}(\mathbf{k}_1) \eta_{\beta \gamma}^{-1}(\mathbf{k}_1) \\
&= \sum_{\beta} \eta_{\gamma \beta}(\mathbf{k}_1) \eta_{\beta \gamma}^{-1}(\mathbf{k}_1) / \{ \exp[(\varepsilon_{\beta}(\mathbf{k}_1) + U\phi - \mu)/k_B T] + 1 \}. \quad (15)
\end{aligned}$$

$$\text{令 } \hat{S} = i\xi_1(\delta_{\delta_1}(0) - \delta_{\delta_1}^+(0)),$$

$$\xi_1 = - \left(\sum_{\gamma, a} d_{\gamma} \langle \langle \hat{A}_{\gamma a}^+(\mathbf{k}_1) \hat{A}_{\gamma a}(\mathbf{k}_1) \rangle \rangle_T + \sum_{\mathbf{k}} B_{aa, \delta_1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \langle \langle Q_a^2(\mathbf{k}) \rangle \rangle_T \right) / \omega_{\delta_1}(0),$$

$$\begin{aligned}
(\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{ph}, \delta_1})_T &= e^{-i\hat{S}} \mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{ph}, \delta_1} e^{i\hat{S}} \approx \mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{ph}, \delta_1} + [\hat{S}, \mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{ph}, \delta_1}] \\
&- \frac{1}{2} (P_{\delta_1}^2(0) + \omega_{\delta_1}^2(0) Q_{\delta_1}^2(0)) + B_{\delta_1, \delta_1, \delta_1}(0) Q_{\delta_1}^3(0) \\
&+ D_{\delta_1, \delta_1, \delta_1, \delta_1}(0) Q_{\delta_1}^4(0) + \sum_{\mathbf{k}, a} B_{aa, \delta_1}(\mathbf{k}, 0, 0) Q_a(\mathbf{k}) Q_{\delta_1}^2(0) \\
&+ \sum_{aa'} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} D_{aa'a'', \delta_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, 0) Q_a(\mathbf{k}_1) Q_{a'}(\mathbf{k}_2) Q_{a''}(\mathbf{k}_3) Q_{\delta_1}(0) \\
&+ \sum_{aa'} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} D_{aa', \delta_1, \delta_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, 0, 0) Q_a(\mathbf{k}_1) Q_{a'}(\mathbf{k}_2) Q_{\delta_1}^2(0) \\
&- 6 \left(\sum_{\gamma, \mathbf{k}} d_{\gamma} \langle \langle \hat{A}_{\gamma a}^+(\mathbf{k}) \hat{A}_{\gamma a}(\mathbf{k}) \rangle \rangle_T + \sum_{a, \mathbf{k}} B_{aa, \delta_1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \langle \langle Q_a^2(\mathbf{k}) \rangle \rangle_T \right) / \sqrt{2} \omega_{\delta_1}^{3/2}(0) \\
&\cdot B_{\delta_1, \delta_1, \delta_1}(0) Q_{\delta_1}^2(0) + \dots \\
&\approx \frac{1}{2} \left[P_{\delta_1}^2(0) + \left(\omega_{\delta_1}^2(0) - \frac{12\varphi(T)}{\sqrt{2} \omega_{\delta_1}^{3/2}(0)} \right) Q_{\delta_1}^2(0) \right] \\
&+ \sum_{a, \mathbf{k}} D_{aa, \delta_1}(\mathbf{k}) \langle \langle Q_a^2(\mathbf{k}) \rangle \rangle_T Q_{\delta_1}^2(0) \\
&- \frac{1}{2} (P_{\delta_1}^2(0) + \omega_{\text{eff}}^2(0) Q_{\delta_1}^2(0)), \quad (16)
\end{aligned}$$

$$Q_{\delta_1}(0) = \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\delta_1}(0)}} (b_{\delta_1}(0) + b_{\delta_1}^+(0)), \quad P_{\delta_1}(0) = \frac{i\sqrt{\omega_{\delta_1}(0)}}{2} (b_{\delta_1}(0) - b_{\delta_1}^+(0)),$$

其中

$$\begin{aligned}\varphi(T) &= B_{\delta_1\delta_1\delta_1}(0) \left(\sum_{\gamma, k} d_\gamma \langle \hat{A}_{\gamma\sigma}^\dagger(k) \hat{A}_{\gamma\sigma}(k) \rangle_T + \sum_{a, k} B_{aa\delta_1}(k, k) \langle \langle Q_a^2(k) \rangle \rangle_T \right), \\ D_{aa\delta_1\delta_1}(k, k, 0, 0) &= D_{a\delta_1}(k), \quad B_{aa\delta_1}(k, k) = B_{aa\delta_1}(k, k, 0), \\ \omega_{\text{eff}}^2(0) &= \omega_{\delta_1}^2(0) - \frac{12\varphi(T)}{\sqrt{2} \omega_{\delta_1}^{3/2}(0)} + \sum_{a, k} D_{aa\delta_1}(k) \langle \langle Q_a^2(k) \rangle \rangle_T.\end{aligned}\quad (17)$$

在上面的计算中, 忽略 $\langle \langle Q_{\delta_1}^2(0) \rangle \rangle_T$, $\langle \langle Q_a(k) Q_{\delta_1}(0) \rangle \rangle_T$ 和 $\langle \langle Q_a^2(k) \rangle \rangle_T Q_a(k) Q_{\delta_1}(0)$ 项. 这在温度不高时成立. 将 $\langle \langle Q_a^2(k) \rangle \rangle_T = k_B T / \omega_a^2(k)$ 和

$$\sum_{\gamma, k} d_\gamma \langle \langle \hat{A}_{\gamma\sigma}^\dagger(k) \hat{A}_{\gamma\sigma}(k) \rangle \rangle_T = \sum_{\gamma, k, \beta} d_\gamma \eta_{\gamma\beta}(k) \eta_{\beta\gamma}^{-1}(k) \{ e^{(\varepsilon_\beta(k) + U\phi - \mu)/k_B T} + 1 \}^{-1}$$

代入 $\omega_{\text{eff}}^2(0)$ 中, 得

$$\begin{aligned}\omega_{\text{eff}}^2(0) &= \omega_{\delta_1}^2(0) - 12 B_{\delta_1\delta_1\delta_1}(0) \left[\sum_{\gamma, k, \beta} d_\gamma \eta_{\gamma\beta}(k) \eta_{\beta\gamma}^{-1}(k) \{ e^{(\varepsilon_\beta(k) + U\phi - \mu)/k_B T} + 1 \}^{-1} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{a, k} B_{aa\delta_1}(k, k) \frac{k_B T}{\omega_a^2(k)} \right] / (\sqrt{2} \cdot \omega_{\delta_1}^{3/2}(0)) + \sum_{a, k} D_{aa\delta_1}(k) \frac{k_B T}{\omega_a^2(k)}.\end{aligned}\quad (18)$$

如果在某一温度下 $Q_{\delta_1}(0)$ 模彻底软化, 则 $\omega_{\text{eff}}^2(0) = 0$.

若方程 $\omega_{\text{eff}}^2(0) = 0$ 存在两个温度解, 则可以认为较大的一个对应于对称破缺, 而较小者则对应于对称的恢复. 从(18)式可知, 在 $B_{\delta_1\delta_1\delta_1}(0) d_\gamma > 0$, $D_{aa\delta_1}(k) > 0$ 时, 只要 U 足够大, 就能出现两个解的情况. 为说明之, 取 $\varepsilon_{\alpha_1\alpha_1} = \varepsilon_{\alpha_2\alpha_2}$, $\varepsilon_{\alpha_1\alpha_2} = \varepsilon_{\alpha_2\alpha_1}$, 则

$$\varepsilon_{\beta_1, 2}(k) = \lambda_1(k) \pm \lambda_2(k),$$

$$\lambda_1(k) = -\frac{\Delta}{2} + \frac{1}{2}(e^{-s_T} + e^{-s'_T}) g_{\tau_1\tau_1} \sum_{\rho} e^{-ik \cdot \rho},$$

$$\lambda_2(k) = \left\{ \left[-\Delta + (e^{-s_T} - e^{-s'_T}) g_{\tau_1\tau_1} \sum_{\rho} e^{-ik \cdot \rho} \right]^2 + 4e^{-s'_T} |g_{\tau_1\tau_2}|^2 \sum_{\rho} e^{-ik \cdot \rho} \right\}^{\frac{1}{2}}.$$

由于 $d_{\tau_1} \gg d_{\tau_2}$, 取 $d_{\tau_2} \approx 0$, 则

$$\begin{aligned}& \sum_{\beta, \gamma, k} d_\gamma \eta_{\gamma\beta}(k) \eta_{\beta\gamma}^{-1}(k) [\exp(\varepsilon_\beta(k) + U\phi - \mu)/k_B T + 1]^{-1} \\ & \approx \sum_{k, \beta} d_{\tau_1} \eta_{\tau_1\beta} \eta_{\beta\tau_1}^{-1}(k) [\exp((\varepsilon_\beta(k) + U\phi - \mu)/k_B T) + 1]^{-1} \\ & = \sum_k \left[\frac{d_{\tau_1} \eta_{\tau_1\beta_1} \eta_{\beta_1\tau_1}^{-1}(k)}{\exp[(\varepsilon_{\beta_1}(k) + U\phi - \mu)/k_B T] + 1} \right. \\ & \quad \left. + \frac{d_{\tau_1} \eta_{\tau_1\beta_2} \eta_{\beta_2\tau_1}^{-1}(k)}{\exp[(\varepsilon_{\beta_2}(k) + U\phi - \mu)/k_B T] + 1} \right].\end{aligned}$$

在温度不高时, 可以认为上式等号右端第一项的贡献不大, 可略去不计. 而且

$$\eta_{\tau_1\beta_2} \eta_{\beta_2\tau_1}^{-1} = e^{-2s_T} |g_{\tau_1\tau_2}|^2 \sum_{\rho} e^{-ik \cdot \rho} / |D_2(k)|^2,$$

$$|D_2(k)|^2 = \left[-\frac{\Delta}{2} + \frac{(e^{-s_T} - e^{-s'_T})}{2} \sum_{\rho} e^{-ik \cdot \rho} + \lambda_2(k) \right]^2$$

$$+ e^{-S'_T} |g_{\tau_1 \tau_2}|^2 \left| \sum_{\rho} e^{-i\mathbf{k} \cdot \rho} \right|^2.$$

所以

$$\begin{aligned} & \sum_{\beta, \gamma, \mathbf{k}} d_{\gamma} \eta_{\alpha\beta} \eta_{\beta\gamma}^{-1} [\exp((\varepsilon_{\beta}(\mathbf{k}) + U\phi - \mu)/k_B T) + 1]^{-1} \\ & \approx d_{\tau_1} e^{-2S_T} |g_{\tau_1 \tau_2}|^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{\left| \sum_{\rho} e^{-i\mathbf{k} \cdot \rho} \right|^2}{|D_2(\mathbf{k})|^2} \cdot \frac{1}{\exp[(\varepsilon_{\beta_2}(\mathbf{k}) + U\phi - \mu)/k_B T] + 1}. \end{aligned} \quad (19)$$

取近似

$$\varepsilon_{\beta_2}(\mathbf{k}) \approx -\frac{\Delta}{2} + 2(e^{-S_T} + e^{-S'_T}) g_{\tau_1 \tau_2} - \sqrt{\Delta^2 + 16e^{-S'_T} |g_{\tau_1 \tau_2}|^2} = \mathcal{Q}.$$

于是, (19) 式简化成 $\gamma / [\exp(\mathcal{Q} + U\phi - \mu)/k_B T + 1]$,

$$\gamma = d_{\tau_1} e^{-2S_T} |g_{\tau_1 \tau_2}|^2 \sum_{\mathbf{k}} \left| \sum_{\rho} e^{-i\mathbf{k} \cdot \rho} \right|^2 / |D_2(\mathbf{k})|^2.$$

方程 $\omega_{\delta_1}^2(0) = 0$ 化成

$$\begin{aligned} \omega_{\delta_1}^2(0) + \rho/x &= \gamma M / [\exp[(\mathcal{Q} + U\phi - \mu)/k_B T] + 1], \\ x &= 1/k_B T. \end{aligned} \quad (20)$$

其中

$$M = \frac{12}{\sqrt{2}} B_{\delta_1 \delta_1 \delta_1}(0) / \omega_{\delta_1}^{3/2}(0), \quad \rho = \sum_{\alpha, \mathbf{k}} D_{\alpha \delta_1}(\mathbf{k}) / \omega_{\alpha}^2(\mathbf{k}) - \frac{12}{\sqrt{2} \omega_{\delta_1}^{3/2}(0)} \sum_{\alpha, \mathbf{k}} \frac{B_{\alpha \alpha \delta_1}(\mathbf{k})}{\omega_{\alpha}^2(\mathbf{k})}.$$

令

$$y_1(x) = \omega_{\delta_1}^2(0) + \rho/x, \quad y_2(x) = \gamma M / [e^{Gx} + 1], \quad G = \mathcal{Q} + U\phi - \mu.$$

根据它们的相交行为随变量 $\rho, \gamma M, G$ 的变化情况, 定性地画图见图 1.

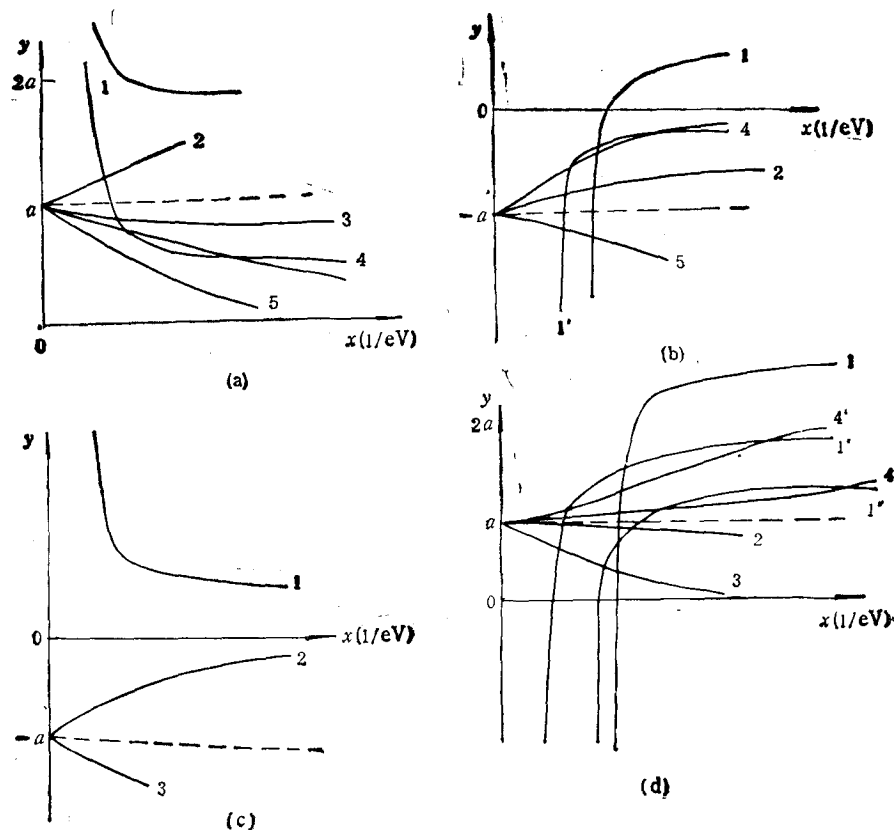
1) 图 1(a) 表示 $\rho < 0, \gamma M > 0$ 的情况. 发现当 $G < 0$ 时, 两线只有一个交点. 但当 $G > 0$ 时, 随着 G 的增加, 两曲线从只有一个交点变成两个交点, 两交点相向靠近, 直至无交点. $\omega_{\delta_1}^2(0)$ 太大, 无交点.

2) 图 1(b) 表示 $\rho < 0, \gamma M < 0$ 的情况. 此时若 $\omega_{\delta_1}^2(0)$ 足够大, 或者 $|\rho|$ 足够小, 则不管 $G > 0$ 还是 $G < 0$, 两曲线只有一个交点. 但若 $\omega_{\delta_1}^2(0)$ 较小或 $|\rho|$ 较大, 则 $G < 0$ 时两曲线只有一个交点. $G > 0$ 时, 随着 G 的增加, 两曲线可从有一个交点变成有两个交点, 两交点靠近, 直至没有交点. $\omega_{\delta_1}^2(0)$ 太大, 无交点.

3) 图 1(c) 表示 $\rho > 0, \gamma M < 0$ 的情况, 此时, 两线无交点.

4) 图 1(d) 表示 $\rho < 0, \gamma M > 0$ 的情况. 结果发现, 当 $\omega_{\delta_1}^2(0)$ 足够大, 或 $|\rho|$ 足够小时 (如曲线 1), 则不管 G 如何, 两曲线总有一个交点, 而且只有一个交点. 但当 $\omega_{\delta_1}^2(0)$ 降低或 $|\rho|$ 升高到一定程度, 使 $y_1(x)$ 从曲线 1 变到曲线 1' 或曲线 1'', 发现 $G > 0$ 时, $y_1(x)$ 与 $y_2(x)$ 只有一个交点, 但 $G < 0$ 时, 随着 $|G|$ 的增加, $y_1(x)$ 与 $y_2(x)$ 从只有一个交点变成有两个交点, 直至无交点. $\omega_{\delta_1}^2(0)$ 太小或 $|\rho|$ 太大时, 无交点.

综上所述, 除了 $\rho > 0, \gamma M < 0$ 时方程 (18) 无解外, 其余情况均存在有两个解、一个



(a) 曲线 2 表示 $G < 0$ 的 $y_2(x)$; 曲线 3, 曲线 4 和曲线 5 表示 $G > 0$, 且依次递增的 $y_2(x)$; $\rho > 0$, $rM > 0$ (b) 曲线 2 和曲线 4 指 $G > 0$, 且递增的 $y_2(x)$; 曲线 5 为 $G < 0$ 的 $y_2(x)$; $\rho < 0$; $rM < 0$ (c) 曲线 2 指 $G > 0$ 的 $y_2(x)$; 曲线 3 为 $G < 0$ 的 $y_2(x)$; $\rho > 0$; $rM < 0$ (d) 曲线 1, 曲线 1' 和曲线 1'' 指 $\omega_{\delta_1}^2(0)$ 依次增长, $|\rho|$ 依次减少的 $y_1(x)$; 曲线 2, 曲线 3 为 $G > 0$, 且依次增长的 $y_2(x)$; 曲线 4, 曲线 4' 则为 $G < 0$, 且 $|G|$ 递增的 $y_2(x)$; $\rho < 0$; $rM > 0$

图 1 表示曲线 $y_1(x) = \omega_{\delta_1}^2(0) + \rho/x$, $y_2(x) = rM / [\exp((Q + U\phi - \mu)x) + 1]$ 的相交情况 $x = 1/k_B T$; $G = Q + U\phi - \mu$; 虚线表示 $G = 0$. 曲线 1 表示 $y_1(x)$ (包括曲线 1', 曲线 1'')

解或无解三种结果(根据取不同的 $\omega_{\delta_1}^2(0)$, $|\rho|$, G). 尤其是, 当 $\omega_{\delta_1}^2(0)$ 不太大时, 1), 2) 两种情况中, 在 $G > 0$ 时, $y_1(x)$ 与 $y_2(x)$ 均有两交点的情况. 在 4) 中, 当 $\omega_{\delta_1}^2(0)$ 不太大, 亦不太小, 或者 $|\rho|$ 适中的情况下(见图 1(d)), 若 $G < 0$, 则亦存在 $y_1(x)$ 与 $y_2(x)$ 有双交点的情况. 根据前面讨论, $y_1(x)$ 与 $y_2(x)$ 的交点为相变点.

我们知道, $G = Q + U\phi - \mu$,

$$Q = -\frac{\Delta}{2} + 2(e^{-s_T} + e^{-s'_T})g_{r_1 r_1} - \sqrt{\Delta^2 + 16e^{-s'_T} |g_{r_1 r_2}|^2} < 0.$$

由于 s_T , s'_T 随 T 升高而增大, 因此, $|Q|$ 随温度升高而降低.

$$\phi = \frac{1}{(\partial \pi)^2} \frac{1}{N} \int d^3 k \left[\frac{1}{\exp[(\varepsilon_{\beta_1}(k) - \mu)/k_B T] + 1} + \frac{1}{\exp[(\varepsilon_{\beta_2}(k) - \mu)/k_B T] + 1} \right] \approx 1.$$

所以

$$G \approx -\frac{\Delta}{2} + 2(e^{-s_T} + e^{-s'_T})g_{\tau_1\tau_1} - \sqrt{\Delta^2 + 16e^{-s'_T}|g_{\tau_1\tau_2}|^2} + U - \mu$$

只要 U 足够大, 从而使 $G > 0$, 则随 G 增大, 在 1), 2) 两种情况下 $y_1(x)$ 与 $y_2(x)$ 就会出现双交点情况。但是, 如果电声耦合很强, 为使 $G > 0$, U 亦须很大, 此时电子关联的微扰处理不再成立。在此情况下, 前面的讨论不再有效。但若 $\gamma M \propto d_{\tau_1} B_{\delta_1\delta_1}(0) < 0$,

$$\rho = \sum_{\mathbf{k}} D_{\delta_1\delta_1}(\mathbf{k})/\omega_{\delta_1}^2(\mathbf{k}) - \frac{12}{\sqrt{2}\omega_{\delta_1}^{3/2}(0)} \sum_{\mathbf{k}} B_{\delta_1\delta_1}(\mathbf{k})/\omega_{\delta_1}^2(\mathbf{k}) < 0,$$

则在 $|\rho|$, $\omega_{\delta_1}^2(0)$ 取值合适的情况下, 只要满足 $G < 0$, 在 $|G|$ 下降过程中, 亦即 U 的增加过程中, 会出现 $y_1(x)$ 与 $y_2(x)$ 从无交点到有两个交点, 直至一个交点的变化。这一情况与强电声耦合、弱电子关联的情况相一致, 从而说明在本文的处理方法下, 尽管电声耦合很强, 也能得到 $y_1(x)$ 与 $y_2(x)$ 的双交点情况, 即存在高温时的破缺对称性在低温时恢复的现象。更有甚者, 当 $G < 0$, $|G|$ 足够大时, 也可能无交点, 即无结构相变。因此, 强 Jahn-Teller 效应能否导致结构相变, 还取决于 $\omega_{\delta_1}^2(0)$, 晶格振动的 3 次, 4 次耦合项系数。后者则完全为晶格中的电荷分布所决定。

五、讨论与结果

1. 在本文中把电子态取为小极化子的能带态。事实上, 小极化子体系在一定温度下存在从能带态到跳跃态的相变。这一相变如何影响本文的结果, 有待进一步研究。

2. 本文在处理电子关联效应时, 仅取单圈近似。但在前面的分析 1), 2) 两种情况知道, 为使体系有对称性“破缺, 再恢复”的二个相变点, 在强电声耦合系统中, U 亦须很大, 故单圈近似不能再行。这问题将另文发表。

3. 传统的观念是, 强的 Jahn-Teller 效应, 势必引起体系的结构相变 (U 较小时)。我们通过深入分析, 发现结构相变同时也取决于晶格的离子势。从本文中可以看出, 当 $\rho < 0$, $\gamma M > 0$ 时, 只要 $\omega_{\delta_1}^2(0)$, $|\rho|$ 适中, 足够强的电声耦合反而能稳定晶体的高对称性, 或者能把高温时破缺的对称性在低温时恢复过来。最近发现的高温超导材料 $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$, 当 $x = 0$ 时, 在 530K 左右存在从四方到正交的结构相变。随着 Ba 的掺入, 发现 $x < 0.15$ 时, 材料在高温破缺的对称性能够恢复。 $x > 0.15$ 时, 材料不再有四方 $\leftrightarrow$ 正交结构相变。关于这一相变的机理, 目前众说纷纭^[3-5]。然而, 了解这一相变点的实质, 对了解高温超导机理具有重要意义。如果此相变是由电声耦合作用导致的, 则根据本文的分析, 在假定“掺杂能增强电子的跳跃”下, 本文 4) 的结果与实验相符。关于此方面的工作有待进一步研究。

总之, 我们研究了二维固体中 Jahn-Teller 效应导致的结构相变受电子并联作用的影响情况, 结果是: 在一定情况下, 1) 体系不发生相变; 2) 体系只发生对称破缺的一个相变; 3) 体系在高温时发生对称破缺相变, 在低温时又使此对称性恢复。

[1] G. D. Mahan, Many Particle Physics, Plenum Press New York, (1981).

[2] 吴建斌、王志成, 物理学报, 40(1991), 1303.

- [3] 吴建斌、李文铸、唐景昌,第一届全国高临界温度超导理论研讨会论文集,苏州,(1987).
[4] P. W. Anderson, G. Baskaran, Z. Zou and T. Hsu, *Phys. Rev. Lett.*, **58**, (1987), 2790.
[5] R. E. Cohen, W. E. Pickett, H. Krakauer and L. L. Boyer, *Phys. Rev. Lett.*, **60**, (1988), 817.
[6] 李正中国体理论,高等教育出版社,北京,(1985).

INFLUENCE OF ELECTRON-ELECTRON CORRELATION ON THE JAHN-TELLER-TYPE STRUCTURAL PHASE TRANSITIONS

WU JIAN-BIN

Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou, 310027

(Received 7 September 1990)

ABSTRACT

Starting from the Hamiltonian of Jahn-Teller effects and electron-electron correlation, we have studied the influence of electron correlation on the structural phase transitions due to the Jahn-Teller effects. By choosing different values of the parameters in the Hamiltonian, we concluded that there exist three possibilities as follows: (1) The system possesses only one structural phase transition, which corresponds to the symmetry breaking. (2) The system has a symmetry-breaking phase transition at high temperature, while the broken symmetry will be revived by decreasing the temperature. (3) The system has no phase transition throughout the whole temperature range.

PACC: 6300; 6320K; 6375