Письма в ЖЭТФ, том 20, вып. 1, стр. 37 – 41 *5 июля 1974 г.*

О ФЛУКТУАЦИОННОЙ ДОБАВКЕ К ПРОВОДИМОСТИ В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ СИСТЕМАХ ВБЛИЗИ СТРУКТУРНОГО ПЕРЕХОДА

Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский

Показано, что вклад в проводимость, связанный с флуктуациями вблизи структурного перехода, определяется кинетикой электронных взаимодействий. Полученное выражение отличается от предыдущих результатов. "Трехмерность" фононов уничтожает флуктуационный рост в проводимости.

В кристаллах TTF-$TCNQ$ [1] вблизи $T_s \approx 60\,^0$K был обнаружен заметный максимум проводимости. В [2] подтверждалось, что в ряде случаев этот максимум имеет характер резкого пика. Согласно объяснению эффекта, данному в [3] в точке максимума проводимости происходит структурный переход. В окрестности перехода флуктуационная щель в энергетическом спектре одномерных электронов подстраивается при наличии тока к их движению так, чтобы затруднить диссипативные процессы. В [4, 5] сделаны попытки получить механизм [3] из микроскопической теории. Результаты [4, 5] не совпадают. Поскольку вычисления [4] не опубликованы[1)], ниже приведены результаты наших расчетов. Результаты не совпадают с [4, 5], хотя в предельном случае одномерных фононов приводят к той же температурной зависимости добавки к проводимости $\Delta\sigma \infty (T - T_s)^{-1/2}$, полученной в [3 – 5]. Более существенным представляется то обстоятельство, что с учетом "трехмерности" фононов структурный переход приводит лишь к особенности в производной от проводимости.

В одномерном металле структурный и куперовский переходы в главном приближении не разделяются [6, 7]. В то же время в одномерном случае фазовый переход невозможен. Предпринятый в [7] анализ роли эффектов трехмерной структуры показал, что в случае, если взаимодействие электронов на разных нитях (без их перескока с нити на нить) достаточно велико, то осуществляется структурный переход. Если преобладает перескок электронов, то в этом случае одномерные особенности переходят в куперовское спаривание. В первом случае мы имеем дело также со смягчением соответствующей фононной моды. Флуктуационная область температур отвечает:

$$(T - T_s)/T_s > g^2, \qquad (1)$$

---

1) Приводится только качественное утверждение, что флуктуации существенны лишь при числе электронов на период, не равном единице.

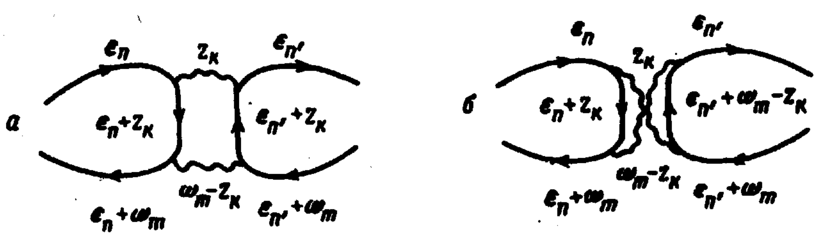
где g^2 – некоторая эффективная константа электрон-электронного взаимодействия. Ниже для простоты рассматривается модель структурного перехода, происходящего при температуре T_s, выше дебаевской. В этом случае в области применимости приближения самосогласованного поля (1) D-функция фононов имеет вид

$$D^R(\omega,k) = \frac{\omega_0^2(k)}{\omega^2 - \omega_0^2 g_{ph}^2 [f - i\beta\omega]}, \tag{2}$$

где

$$f = \frac{T - T_s}{T_s} + \frac{7\zeta(3)}{16\pi^2 T_s^2}(v_F k_\parallel)^2 + B g_{ph}^{-2} S^{-1} k_\perp^2 ; \quad \beta = \pi/8T_s ,$$

и g_{ph}^2 – квадрат электрон-фононного взаимодействия, S – площадь поперечного сечения обратной ячейки, $B \sim 1$ – постоянная, характеризующая дисперсию фононной частоты. Электронный спектр в отсутствие перескоков остается плоским ($v_F \equiv v_{zF}$). Флуктуационные добавки



к проводимости за счет мягкой моды в (2) обязаны диаграммам рисунка (см. [4, 5]), где волнистой линии отвечает D-функция фононов с передачей $k_\parallel = \pm 2p_F$. Для аналитического продолжения по ω_m следует представить все суммы по частотам в матричном элементе этих диаграмм через контурные интегралы. Начиная, как и в [5], с суммы по фононным частотам, легко проверить, что основной вклад в матричный элемент для тока, связанный с малыми k и z в (2), пропорционален

$$T^2 \sum_{n,n'} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{4\pi i} \operatorname{cth}\frac{z}{2T} D^R_{i\omega_m - z}(D^R_z - D^A_z) \times$$

$$\times \{ p_z G_{i\epsilon_n} G_{i\epsilon_n + i\omega_m} [G_{z+i\epsilon_n} + G_{i\epsilon_n + i\omega_m - z}]\} \{[G_{i\epsilon_{n'}+z} + G_{i\epsilon_{n'}+i\omega_m - z}] \times$$

$$\times G_{i\epsilon_{n'}} G_{i\epsilon_{n'}+i\omega_m} p'_z \} . \tag{3}$$

Опущены члены, где D-функция содержит электронные частоты, имеющие порядок либо T, либо $1/\tau$. Здесь $1/\tau$ – частота столкновения электронов с фононами). Дальнейшие вычисления сводятся к определению вершин в (3), состоящих из произведений трех электронных функций Грина. Поскольку D-функция (2) имеет особенность при передаче продольного импульса $\pm 2p_F$, то две части диаграмм на рисунке не являются независимыми. Если, скажем, в левой электронной петле диаграммы (a) интегрирование по импульсу электронов происходит вблизи $+p_F$, то и в ее правой петле дает вклад точка $+p_F$. В диаграмме ($б$) вносят вклад противоположные концы поверхности Ферми. Особым является случай, если $4p_F = 2\pi/a$, где a – период вдоль оси нити. При этом возникают новые возможности, связанные с процессами переброса. Нетрудно убедиться, что в этом случае матричный элемент должен быть умножен на фактор $[1 - g^{*2}_{ph} / g^2_{ph}]^2$, где g^*_{ph} отвечает взаимодействию электрона с фононом с процессом переброса. Вообще говоря, нет причин считать этот фактор равным нулю, как делалось в [4].

Для аналитического продолжения (3) надо вычислить соответствующие суммы по электронным частотам. Переходя к интегралам

$$\left(T\sum_n \ldots \to \frac{1}{4\pi i}\int \mathrm{th}(z/2T)\, dz \ldots\right),$$

обратим внимание на члены вида

$$\frac{\omega}{2T}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{ch}^{-2}\frac{\epsilon}{2T}\, G^R_\epsilon G^A_{\epsilon+\omega} G^R_{x+\epsilon}\, d\epsilon,$$

которые имеют кинетическую природу и поэтому существенно зависят от соотношения между ω и $1/\tau$. Эти члены были пропущены в [5], поскольку произведение электронных петель (обозначенное в [5] через A^2) разлагалось по *мацубаровским* частотам (видимо, та же процедура делалась в [4]). На самом деле выражение [5] для $A^2(z) \leftrightarrow z^2 + 2\omega z$ заменяется при $\omega\tau \ll 1$ на

$$z^2 + \frac{2\pi^3}{7\zeta(3)}(\tau T_s)\,\omega z.$$

Окончательно, имеем

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = \frac{v_F 7\zeta(3)}{\pi T_s S(2\pi)^3}\int d^3k \left\{\frac{T - T_s}{T_s} + \frac{7\zeta(3)(v_F k_\parallel)^2}{16\pi^2 T_s^2} + B\frac{k_\perp^2}{g^2_{ph} S}\right\}^{-1}. \quad (4)$$

Это выражение в одномерном случае не содержит константы взаимодействия, т.е. не зависит от пробега (ср. с [4, 5]). В интеграл (4) основной вклад вносят большие k, где D-функция не имеет вида (2), и вклад от флуктуаций представляет малую добавку к основной проводимости. Таким образом, с учетом трехмерности фононов корневая особенность существует лишь для производной:

$$(1/\sigma_0)\frac{d\sigma}{dT} \sim \frac{1}{\sqrt{T - T_c}}$$

Одномерный случай формально отвечает $B = 0$, однако, в этом случае фазового перехода нет, и (2), и (4) перестают быть справедливыми в области сильного взаимодействия [6], где в принципе, $\Delta\sigma/\sigma_0$ может стать порядка единицы. Малость B означала бы отсутствие дисперсии соответствующих оптических частот, для чего не видно специальных причин.

Нам представляется, что полученный результат не ограничивается рассмотренной фононной моделью структурного перехода, а имеет более общий характер. Возвращаясь поэтому к экспериментам [3], укажем, что слабые максимумы $\sigma(T_s)/\sigma(300) \sim 10 \div 20$ в принципе могут быть поняты в соответствии с замечанием авторов [9], что времена релаксации за счет электрон-электронных процессов растут как $T^{-1}f(\ln T)$. Объяснить возрастание проводимости на два порядка на этом пути нельзя.

Институт теоретической физики
им. Л.Д. Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
27 мая 1974 г.

Литература

[1] L.B.Coleman, M.J.Cohen, D.J.Sandman, F.G.Yamagishi, A.F.Garito, A.J.Heeger. Sol. St. Comm., 12, 1125, 1973.

[2] M.J.Cohen, L.B.Coleman, A.F.Garito, A.J.Heeger. "The Electrical Conductivity of TTF-TCNQ". Preprint

[3] J.W.Bray, J.Bardeen, D.Allender. Phys. Rev., 9B, 119, 1974.

[4] B.R.Patton, L.J.Sham. Phys. Rev. Lett., 31, 631, 1973; Phys. Lett. 47A, 133, 1974.

[5] S.Strässler, G.A.Toombs. Phys. Lett., 46A, 321, 1974.

[6] Ю.А.Бычков, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский. ЖЭТФ, 50, 738, 1966.
[7] И.Е.Дзялошинский, А.И.Ларкин. ЖЭТФ, 61, 791, 1971.
[8] Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский. ЖЭТФ, 67, 397, 1974.
[9] Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский. Письма в ЖЭТФ, 18, 686, 1973.