

РАСЩЕПЛЕНИЕ НИЖНЕЙ ПОДЗОНЫ ФЕРМИОНОВ ХАББАРДА В МОДЕЛИ ШУБИНА – ВОНСОВСКОГО ПОД ВЛИЯНИЕМ СИЛЬНЫХ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ

В. В. Вальков^{a,b}, М. М. Коровушкин^a*

^a *Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

^b *Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М. Ф. Решетнёва
660014, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 7 мая 2010 г.

Методом диаграммной техники для операторов Хаббарда исследовано влияние межузельного кулоновского взаимодействия на энергетическую структуру и куперовскую неустойчивость сильнокоррелированных фермионов. Показано, что в легированных мотт-хаббардовских диэлектриках учет межузельных корреляций приводит к расщеплению нижней подзоны фермионов Хаббарда и возникновению зоны флуктуационных состояний, как только энергия межузельного взаимодействия становится сравнимой с кинетической энергией или превышает ее. Спектральная интенсивность отщепленной зоны пропорциональна среднеквадратичной флуктуации чисел заполнения и растет по мере увеличения уровня легирования. Предсказанный эффект существенно изменяет структуру плотности электронных состояний. Это приводит к ренормировке полюса амплитуды рассеяния в куперовском канале и проявляется в виде неоднородной по концентрации электронов модификации зависимости критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние.

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из ярких примеров нетривиального проявления многочастичных эффектов в физике конденсированного состояния является переход металл–диэлектрик [1]. Такой переход может реализовываться в системе коллективизированных электронов в случае концентрации электронов $n = 1$ в расчете на одну элементарную ячейку при возрастании энергии кулоновского взаимодействия между электронами до величин, соизмеримых или превышающих среднее значение кинетической энергии. При теоретическом исследовании такого перехода чаще всего используется модель Хаббарда [2]. В рамках этой модели кулоновское взаимодействие учитывается только между электронами, находящимися на одном ионе и обладающими противоположными проекциями спиновых моментов. Для описания таких систем эффективным оказался подход, основанный на использовании атомного представления [3] и раз-

витой в работах [4] диаграммной техники для операторов Хаббарда (ДТХ). В работах [5–7] отмечались ограничения, связанные с использованием модели Хаббарда при описании перехода Мотта в реальных веществах, и была развита теория такого перехода в рамках более реалистичной модели Шубина – Вонсовского [8, 9]. В этой модели, наряду с кулоновским отталкиванием электронов на одном узле, учитывается также межузельное кулоновское взаимодействие, которое вблизи диэлектрической фазы может оказаться существенным из-за ухудшения экранировки. Использование диаграммной формы теории возмущений позволило рассчитать корреляционные эффекты, связанные с включением межузельного взаимодействия и изучить влияние этих эффектов на куперовскую неустойчивость в модели Шубина – Вонсовского [10]. Нетривиальная роль кулоновского взаимодействия в возможности реализации куперовского спаривания с ненулевым суммарным импульсом обсуждалась в работе [11]. Влияние межузельных взаимодействий на энергетическую структуру, механизм формирования псевдоще-

*E-mail: vvv@iph.krasn.ru

левого поведения и сверхпроводящего спаривания сильнокоррелированных электронов изучались в работах [12, 13].

В работе рассматривается эффект, который следует ожидать для узкозонных соединений, когда интеграл перескока соизмерим с параметром межузельного кулоновского отталкивания. В этом случае будет проявляться зависимость одноузельной энергии электрона от конфигурационного окружения. Для пояснения эффекта обратимся к рассмотрению предельного случая, когда интеграл перескока обращается в нуль. В этом случае все одноэлектронные энергии находятся точно. В частности, для простой кубической решетки, когда на каждом из z ближайших соседей находится по одному электрону, «посадочная» энергия электрона на центральный ион будет определяться не просто затравочной одноузельной энергией ε_0 , а ренормированным выражением $\varepsilon_0 + zV$, где V — параметр, определяющий в представлении Ванье кулоновское взаимодействие двух электронов, находящихся на соседних узлах. Если на ионах, входящих в ближайшее окружение рассматриваемого узла, отсутствует один электрон, то посадочная энергия будет иной, а именно: $\varepsilon_0 + (z-1)V$. Эти простые рассуждения показывают, что при отклонении конфигурационного окружения от номинального в спектре фермиевских возбуждений следует ожидать появления состояний с энергиями, различающимися на величину V .

При включении относительно слабого интеграла перескока, когда формируется узкая зона фермиевских состояний, описанный эффект приведет к расщеплению исходной зоны фермиевских состояний. Заметим, что это расщепление не связано с хорошо известным хаббардовским механизмом формирования двух подзон и будет проявляться в виде дополнительного расщепления нижней (или верхней) хаббардовской подзоны. Очевидно, что спектральная интенсивность отщепленной зоны будет тем выше, чем с большей вероятностью будет происходить отклонение электронной конфигурации окружения от номинальной. Количественной мерой такого отклонения будет выступать среднеквадратичная флуктуация чисел заполнения. Имея это в виду, в дальнейшем отщепленную зону будем называть зоной флуктуационных состояний (ЗФС). Для мотт-хаббардовских диэлектриков без легирования электронная конфигурация окружения соответствует номинальной. При легировании будет происходить нарушение номинальности и в спектре появятся ЗФС, спектральная интенсивность которой будет нарастать по мере увеличения степени легирования.

Изложение результатов построено следующим образом. В разд. 2 формулируются основные физические допущения, в рамках которых будет анализироваться проявление межузельных кулоновских взаимодействий в свойствах сильнокоррелированных систем. На основе атомного представления в модели Шубина–Вонсовского демонстрируется физический механизм, приводящий к зависимости посадочной энергии электрона от конфигурационного окружения иона и к индуцированию ЗФС. В разд. 3 вводится параметр малости, позволяющий выполнить отбор главных диаграмм для массового и силового операторов. На основе такого подхода реализуется вычисление одноузельного пропагатора, который из-за отмеченной выше ренормировки посадочной энергии электрона приобретает двухполюсную структуру. Возникновение расщепленной структуры нижней хаббардовской подзоны, индуцированное относительно сильными межузельными кулоновскими корреляциями, обсуждается в разд. 4. Здесь же на основе численных расчетов приводятся данные о перераспределении интегральной спектральной интенсивности. В разд. 5 демонстрируется устойчивость предсказываемого эффекта по отношению к учету процессов рассеяния. В разд. 6 содержатся результаты вычисления амплитуды рассеяния в куперовском канале, полученные при учете вкладов от ЗФС. Демонстрируется неоднородная по концентрации ренормировка критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние. В заключительном разделе обсуждаются полученные результаты.

2. ГАМИЛЬТониАН СИСТЕМЫ В АТОМНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

Для демонстрации эффекта в наиболее простом виде рассмотрим модель Шубина–Вонсовского в режиме сильных одноузельных электронных корреляций ($U \rightarrow \infty$) при концентрациях электронов $n \leq 1$. В этом случае электронные свойства полученной системы в атомном представлении будут определяться нижней хаббардовской подзоной. Принимая во внимание аргументы работ [5, 7], ограничимся рассмотрением кулоновского взаимодействия только между электронами, находящимися на соседних узлах. Полученная система хаббардовских фермионов будет описываться гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_{f\sigma} (\varepsilon_0 - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + \frac{V}{2} \sum_{f\delta} \hat{n}_f \hat{n}_{f+\delta}. \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое отражает ансамбль невзаимодействующих фермионов Хаббарда в представлении Ванье. Появление на узле f фермиона с проекцией спина $\sigma = \pm 1/2$ увеличивает энергию системы на величину ε_0, μ — химический потенциал системы, $X_f^{pq} = |f, p\rangle\langle f, q|$ — операторы Хаббарда [3], описывающие процесс перехода из одноузельного состояния $|q\rangle$ в состояние $|p\rangle$. Второе слагаемое соответствует кинетической энергии хаббардовских фермионов, где матричный элемент t_{fm} определяет интенсивность процесса перескока электрона с узла f на узел m . Последний член гамильтониана учитывает кулоновское взаимодействие электронов, находящихся на соседних узлах f и $f+\delta$, интенсивность которого определяется величиной V . Оператор числа хаббардовских фермионов для узла f определяется выражением

$$\hat{n}_f = \sum_{\sigma} X_f^{\sigma\sigma}.$$

В дальнейшем ограничимся рассмотрением случая, когда число дырок

$$h = \frac{1}{N} \sum_f \langle X_f^{00} \rangle$$

в системе мало, т. е. выполняется неравенство

$$h = 1 - n \ll 1. \quad (2)$$

В этом режиме целесообразно выделить в явном виде эффекты среднего поля, обусловленные межузельными взаимодействиями. Используя условие полноты диагональных X -операторов в усеченном гильбертовом пространстве

$$X_f^{00} + X_f^{\uparrow\uparrow} + X_f^{\downarrow\downarrow} = 1,$$

представим гамильтониан (1) в виде

$$\hat{H} = -E_0 + \sum_{f\sigma} (\varepsilon - 4Vh - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{fm\sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{f\delta} V (X_f^{00} - h) (X_{f+\delta}^{00} - h), \quad (3)$$

где величина $E_0 = 2NV(1-h)^2$ в приближении среднего поля определяет энергию кулоновского взаимодействия системы, содержащей h дырок в расчете на один узел. При $h = 0$ величина E_0 отражает энергию кулоновского взаимодействия системы, когда

на каждом узле присутствует ровно один электрон. Ренормированное значение одноэлектронного уровня $\varepsilon = \varepsilon_0 + 4V$ определяется тем, что в условиях нахождения на соседних узлах по одному электрону энергия возбуждения увеличивается на $4V$. Сдвиг этого уровня на величину $-4Vh$ связан с уменьшением энергии кулоновского отталкивания, если среднее число дырок в системе отлично от нуля.

Заметим, что такие среднеполевые ренормировки одноузельных энергий электронов использовались ранее, например, в модели Фаликова–Кимбалла [14] при исследовании переходов с изменением валентности [15]. Смысл выделения очевидных эффектов среднего поля заключается в том, чтобы представить межузельное взаимодействие в форме, содержащей только корреляционные эффекты. Видно, что вклад последнего слагаемого гамильтониана (3) будет иметь место только при наличии заметных флуктуаций чисел заполнения, т. е. при относительно больших межузельных корреляциях.

3. ПАРАМЕТР МАЛОСТИ И ПРИНЦИП ОТБОРА ДИАГРАММ

Для описания энергетической структуры рассматриваемой системы сильнокоррелированных фермионов введем мацубаровскую функцию Грина [4]

$$D(f, \tau; f', \tau') = -\langle T_{\tau} \tilde{X}_f^{0\sigma}(\tau) \tilde{X}_{f'}^{\sigma 0}(\tau') \rangle = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{k}\omega_n} \exp\{i\mathbf{k}(f-f') - i\omega_n(\tau-\tau')\} D(\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (4)$$

и воспользуемся ДТХ. Рассмотрим ситуацию, в которой параметр перескока мал по сравнению с энергией кулоновского отталкивания электронов, находящихся на соседних узлах решетки, т. е. $|t| \ll V$. В этом случае первостепенное значение приобретает учет корреляционных эффектов, обусловленных межузельным кулоновским взаимодействием.

Одна из основных особенностей ДТХ связана с наличием концевых диаграмм [4, 16, 17]. Их полная совокупность называется концевым множителем или силовым оператором $P(\mathbf{k}, i\omega_n)$. Последний термин был предложен в работе [18] при анализе особенностей диаграммной техники для спиновых операторов. Из анализа диаграммного ряда для фурье-образа функции Грина следует, что точное представление, связывающее $D_{0\sigma,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ с силовым оператором, может быть записано в виде [16, 19]

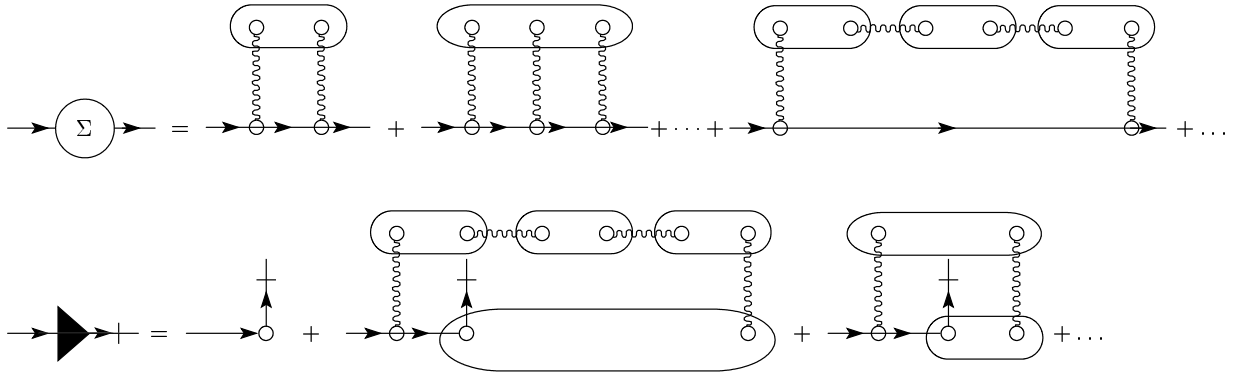


Рис. 1. Диаграммы нулевого порядка по параметру перескока для массового Σ и силового P операторов

$$D_{0\sigma,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{P_{0\sigma,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n)}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon} + \mu - P_{0\sigma,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n)t_{\mathbf{k}} - \Sigma_{0\sigma,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n)}, \quad (5)$$

где $\Sigma_{0\sigma,0\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ — массовый оператор, а $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon - 4Vh$.

Для модели Хаббарда в предельном режиме сильных корреляций и концентрации электронов $n \leq 1$ переход к атомному представлению приводит к тому, что в роли оператора взаимодействия выступает только оператор перескоков для нижней хаббардовской подзоны. При этом массовый оператор всегда содержит параметр перескока.

Иная ситуация реализуется в модели Шубина–Вонсовского. Здесь оператор возмущения складывается из оператора кинетической энергии и оператора, описывающего межузельное взаимодействие. Соответственно этому происходит усложнение структуры массового оператора и функции Грина.

Прежде всего рассмотрим модификацию одноузельного пропагатора, обусловленного межузельными кулоновскими корреляциями. Графики для массового и силового операторов в этом случае формируются из простых линий для одноузельных функций Грина и волнистых линий, отражающих межузельные взаимодействия. Примеры таких диаграмм показаны на рис. 1. На этих диаграммах посредством овалов, содержащих внутри себя два, три и т. д. маленьких кружка, обозначены кумулянты соответственно второго K_2 , третьего K_3 и т. д. порядков. Кумулянт n -го порядка K_n определяется выражением

$$K_n = \langle (X^{00} - h)^n \rangle. \quad (6)$$

Использование алгебры операторов Хаббарда позво-

ляет установить точное рекуррентное соотношение, удобное для вычисления кумулянтов K_n , $n \geq 2$:

$$K_n = (1 - 2h)K_{n-1} + h(1 - h)K_{n-2}, \quad (7)$$

$$K_0 = 1, \quad K_1 = 0.$$

Из этих равенств следует, что в задаче о нахождении аналитического выражения для кумулянта n -го порядка возникает параметр

$$\delta = h(1 - h) \ll 1, \quad (8)$$

являющийся малым при всех значениях h . Для дальнейшего существенно, что в линейном по этому параметру малости приближении явная зависимость кумулянта K_n от номера n определяется выражением

$$K_n = h(1 - h)(1 - 2h)^{n-2} + O(\delta^2), \quad n \geq 2. \quad (9)$$

Видно, что кумулянт произвольного порядка имеет первый порядок малости по параметру δ . Следовательно, графики, содержащие один кумулянт, дают вклад первого порядка малости по параметру δ . Чем больше кумулянтов входит в диаграмму, тем выше порядок малости у такой диаграммы. Эти рассуждения показывают, что в линейном по параметру δ приближении достаточно ограничиться вкладами тех диаграмм, которые содержат только один кумулянт. В нашем случае бесконечная последовательность диаграмм первого порядка по δ для массового оператора имеет вид, показанный на рис. 2.

Подставляя формулу для кумулянта K_n , видим, что ряд для массового оператора

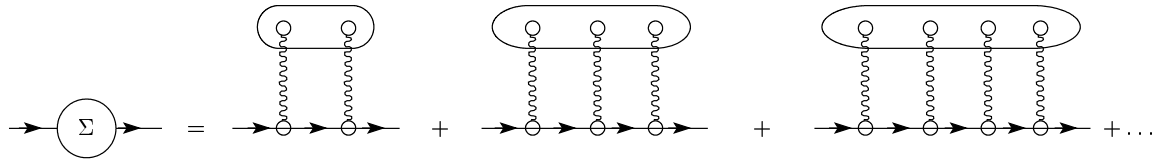


Рис. 2. Последовательность диаграмм для массового оператора Σ

$$\Sigma_{oval}(i\omega_n) = \frac{zh(1-h)V^2}{i\omega_n - (\varepsilon - 4Vh)} - \frac{zh(1-h)V^3(1-2h)}{(i\omega_n - (\varepsilon - 4Vh))^2} + \frac{zh(1-h)V^4(1-2h)^2}{(i\omega_n - (\varepsilon - 4Vh))^3} - \dots$$

представляет собой геометрическую прогрессию. После суммирования получаем зависящий от мацубаровской частоты массовый оператор для одноузельного пропагатора:

$$\Sigma_{oval}(i\omega_n) = \frac{zh(1-h)V^2}{i\omega_n - (\varepsilon - V) + 2hV + \mu}. \quad (10)$$

Нетрудно убедиться, что диаграммы для силового оператора содержат, как минимум, два кумулянта. Поэтому в линейном по δ приближении силовой оператор определяется простым выражением $P = 1 - n/2$. С учетом этих результатов получаем, что выражение для одночастичной функции Грина приобретает двухполюсную структуру

$$D(\mathbf{k}, i\omega_n) = \left(1 - \frac{n}{2}\right) \left(i\omega_n - (\tilde{\varepsilon} - V(1-2h)) + \mu\right) \times \left(\left(i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu\right) \left(i\omega_n - (\tilde{\varepsilon} - V(1-2h)) + \mu\right) - zh(1-h)V^2 \right)^{-1}. \quad (11)$$

Здесь $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \tilde{\varepsilon} + (1 - n/2)t_{\mathbf{k}}$, $t_{\mathbf{k}}$ — фурье-образ интеграла перескока.

Из выражения (11) следует, что спектр фермиевских возбуждений определяется двумя ветвями

$$E_{\mathbf{k}}^{\mp} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} + \zeta}{2} \mp \nu_{\mathbf{k}}, \quad \zeta = \tilde{\varepsilon} - V(1-2h), \quad \nu_{\mathbf{k}} = \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \zeta}{2}\right)^2 + zh(1-h)V^2}. \quad (12)$$

Видно, что результирующая картина энергетического спектра формируется в результате гибридизации состояний из обычной хаббардовской подзоны с энергиями $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ и состояний, индуцированных

флуктуациями конфигурационного окружения. Интенсивность гибридизации определяется величиной, пропорциональной одноузельной среднеквадратичной флуктуации чисел заполнения

$$\overline{(\Delta n)^2} = \langle (X_f^{00} - h)(X_f^{00} - h) \rangle = h(1-h).$$

После аналитического продолжения находим спектральную интенсивность

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{2} \text{Im} D(\mathbf{k}, \omega + i\delta) = \left(1 - \frac{n}{2}\right) \left\{ \left(\frac{1 + \lambda_{\mathbf{k}}}{2}\right) \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}^+ + \mu) + \left(\frac{1 - \lambda_{\mathbf{k}}}{2}\right) \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}^- + \mu) \right\}, \quad (13)$$

где

$$\lambda_{\mathbf{k}} = \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + zh(1-h)V^2}}, \quad \xi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \left(V(1-2h) + \left(1 - \frac{n}{2}\right) t_{\mathbf{k}} \right). \quad (14)$$

Из формулы (13) следует, что спектральная интенсивность отщепленной зоны

$$A^{(-)}(\mathbf{k}, \omega) = \left(1 - \frac{n}{2}\right) \left(\frac{1 - \lambda_{\mathbf{k}}}{2}\right) \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}^- + \mu)$$

в интересующем нас режиме $V \gg |t_{\mathbf{k}}|$ пропорциональна введенной выше среднеквадратичной флуктуации чисел заполнения $\overline{(\Delta n)^2}$:

$$A^{(-)}(\mathbf{k}, \omega) \approx \frac{4(1+h)\overline{(\Delta n)^2}}{1 + 16\overline{(\Delta n)^2} + \sqrt{1 + 16\overline{(\Delta n)^2}}} \times \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}^- + \mu). \quad (15)$$

Имея это в виду, отщепленную зону можно рассматривать как ЗФС. С увеличением h происходит быстрое нарастание спектрального веса ЗФС. Вместе с тем нарастает и вклад этой зоны в интегральную плотность состояний, который при увеличении легирования может достигать 35 % от полной плотности состояний (см. разд. 4).

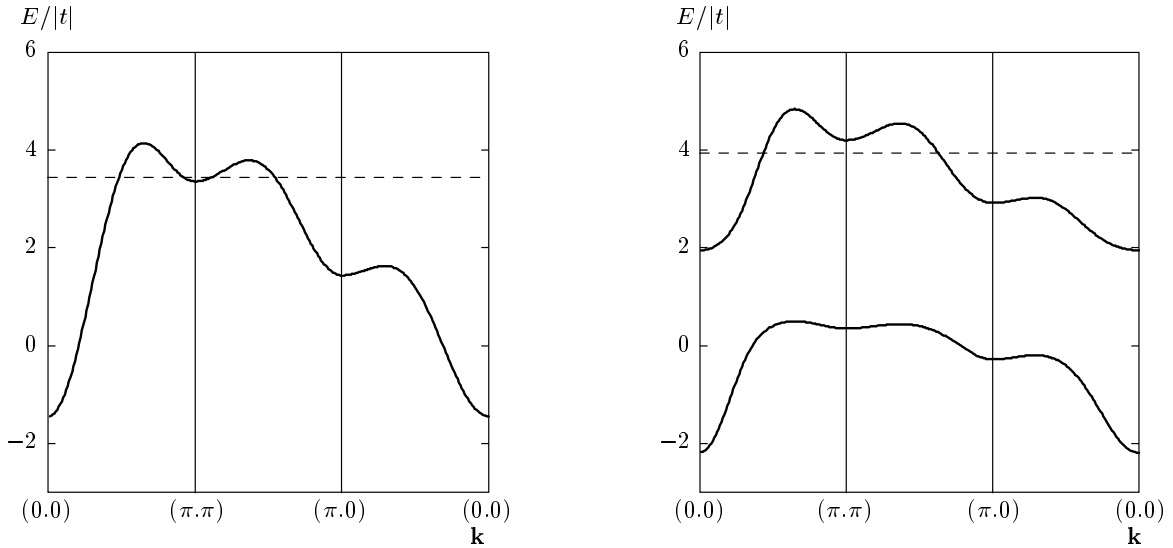


Рис. 3. Спектр фермиевских возбуждений, полученный без учета (слева) и при учете (справа) межузельных корреляций для набора параметров $t' = -0.1$, $t'' = -0.5$, $V = 2$ (в ед. $|t|$) при концентрации дырок $h = 0.2$. Штриховыми линиями показано положение химического потенциала

Уравнение, определяющее связь между химическим потенциалом μ и числом электронов n в расчете на один узел, при учете ЗФС приобретает следующий вид:

$$\frac{n}{2} = \left(1 - \frac{n}{2}\right) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\left(\frac{1 + \lambda_{\mathbf{k}}}{2}\right) n_F(E_{\mathbf{k}}^+) + \left(\frac{1 - \lambda_{\mathbf{k}}}{2}\right) n_F(E_{\mathbf{k}}^-) \right), \quad (16)$$

где $n_F(x) = (e^{(x-\mu)/T} + 1)^{-1}$ — функция Ферми–Дирака.

4. ОСОБЕННОСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ СИЛЬНЫХ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ КОРРЕЛЯЦИЯХ

Воспользуемся полученными выше выражениями для расчета энергетической структуры рассматриваемой системы в случае простой двумерной квадратной решетки ($z = 4$). В этом случае фурье-образ интеграла перескока будет определяться выражением

$$t_{\mathbf{k}} = 2t(\cos k_x + \cos k_y) + R_{\mathbf{k}}, \quad (17)$$

$$R_{\mathbf{k}} = 4t' \cos k_x \cos k_y + 2t''(\cos 2k_x + \cos 2k_y),$$

где t' и t'' интегралы перескока соответственно во вторую и третью координационные сферы. На рис. 3

(справа) представлена зонная картина рассматриваемой модели, рассчитанная с помощью выражений (12). Эта картина сравнивается с расчетом, проведенным в той же модели, при тех же параметрах и для того же уровня легирования, но при учете сильных межузельных корреляций (СМК) в приближении Хаббард-I (слева). Из сравнения двух представленных спектров следует, что корректный учет СМК приводит к качественному различию, которое заключается в появлении в структуре энергетического спектра модели дополнительной зоны.

На рис. 3 (справа) верхняя энергетическая зона соответствует движению электрона по узлам решетки, на соседних узлах с которыми отсутствуют дырки. Характерная «посадочная» энергия такого электрона равняется $\epsilon_0 + 4V$. Нижняя зона описывает движение электрона по таким узлам решетки, на одном из соседних узлов с которыми в результате легирования появилась дырка. Появление в ближайшей окрестности дырки уменьшает «посадочную» энергию такого электрона до характерной величины $\epsilon_0 + 3V$. Именно поэтому энергетические зоны, изображенные на рисунке, разнесены на величину межузельного кулоновского отталкивания V . Очевидно, что учет диаграмм, содержащих более одного овала, привел бы к появлению дополнительных зон с характерными энергиями $\epsilon_0 + 2V$ и $\epsilon_0 + V$. Но такая ситуация нами не рассматривается, поскольку она соответствует случаю сильного легирования и нарушает условия (2) и (8).

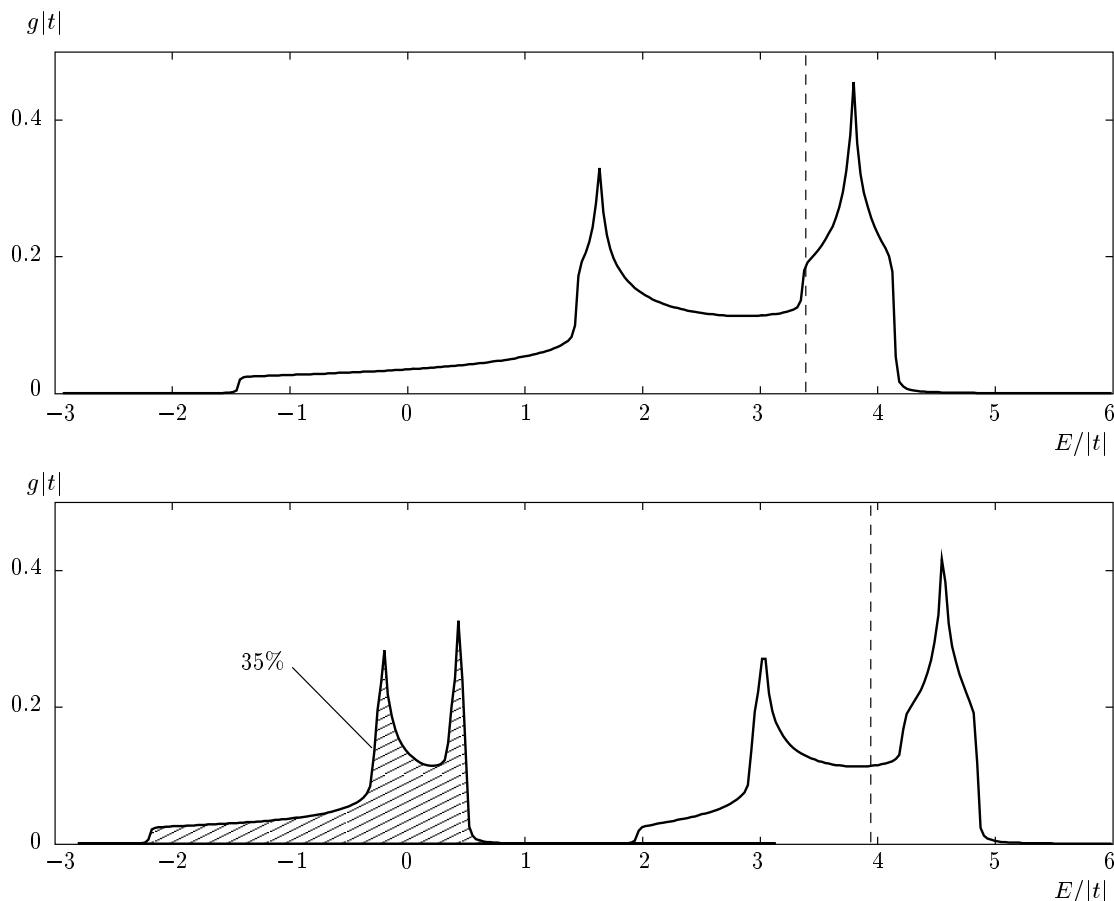


Рис. 4. Плотность электронных состояний, рассчитанная без учета (сверху) и при учете (снизу) межузельных корреляций для набора параметров $t' = -0.1$, $t'' = -0.5$, $V = 2$ (в единицах $|t|$) при концентрации дырок $h = 0.2$. Штриховыми линиями показано положение химического потенциала

Таким образом, формирование дополнительной зоны, ЗФС, обусловлено изменением энергии электрона, находящегося на узле, если вблизи этого узла происходит отклонение электронных конфигураций от номинальных.

Появление ЗФС приводит к качественному изменению вида плотности электронных состояний фермионов Хаббарда. На верхнем графике рис. 4 показана плотность состояний рассматриваемой модели без учета межузельных кулоновских корреляций (МКК). Видно, что игнорирование этих корреляций приводит к тривиальному смещению положения зоны фермионов Хаббарда. На нижнем графике рис. 4 показана зависимость от энергии суммарной плотности электронных состояний модели для того же самого набора параметров, но при учете МКК. Из сравнения с верхним графиком видно, что учет МКК приводит к существенному качественному изменению вида плотности состояний: происходит от-

щепление ЗФС и формирование щели в структуре энергетического спектра. Для наглядности на данном графике плотность состояний ЗФС $g^-(E)$ отражена посредством линии, ограничивающей затененный участок. При этом на долю ЗФС приходится 35% от полного числа состояний системы, тогда как на основную зону с плотностью состояний $g^+(E)$ приходится 65% состояний. Сложение плотностей $g^+(E)$ и $g^-(E)$ и приводит к полной плотности $g(E)$.

Представленные на рис. 4 графики рассчитаны при $h = 0.2$. Если $h = 0$, то вклад СМК обращается в нуль и плотность состояний системы будет такой, как показано на верхнем графике рис. 4. Из этого следует вывод о наличии качественно нового эффекта, связанного с учетом СМК: при легировании происходит не только смещение химического потенциала, но и перестройка вида плотности состояний.

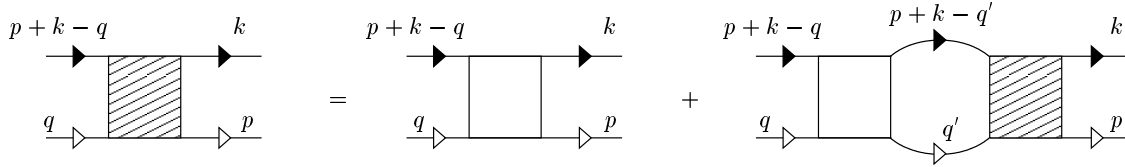


Рис. 5. Уравнение для полной амплитуды рассеяния

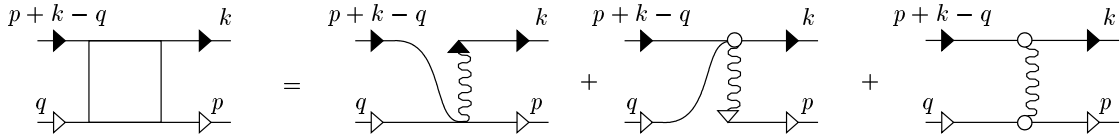


Рис. 6. Уравнение для затравочной амплитуды рассеяния

5. ЛЕСТНИЧНОЕ И БОРНОВСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ ДЛЯ АМПЛИТУДЫ РАССЕЯНИЯ

При появлении дырок в системе модификация энергетической структуры будет происходить также и за счет процессов рассеяния, обусловленных кинематическим взаимодействием между хаббардовскими квазичастицами [4]. Кроме этого необходимо учесть вклады от рассеяния на кулоновском потенциале [7]. В результате амплитуда рассеяния $\Gamma(q, p + k - q|p, k)$ в лестничном приближении удовлетворяет графическому уравнению [4, 7, 16, 20], изображенному на рис. 5, в котором $p \equiv (\mathbf{p}, i\omega_n)$, $k \equiv (\mathbf{k}, i\omega_m)$, $q \equiv (\mathbf{q}, i\omega_l)$, $q' \equiv (\mathbf{q}', i\omega_{l'})$, а затравочная амплитуда (рис. 6) не зависит от мацубаровской частоты и определяется выражением

$$\Gamma_0(\mathbf{q}, \mathbf{p} + \mathbf{k} - \mathbf{q}|p, k) = V_{\mathbf{q}-\mathbf{p}} - t_{\mathbf{p}} - t_{\mathbf{k}}. \quad (18)$$

Соответственно этому амплитуда $\Gamma(q, p + k - q|p, k)$ не зависит от мацубаровской частоты ω_l [20] и ее нахождение сводится к решению интегрального уравнения

$$\begin{aligned} \Gamma(q, p + k - q|p, k) &= V_{\mathbf{q}-\mathbf{p}} - t_{\mathbf{p}} - t_{\mathbf{k}} + \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}'} (t_{\mathbf{q}'} + t_{\mathbf{p}+\mathbf{k}-\mathbf{q}'} - V_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'}) \times \\ &\times L_{\mathbf{q}'}(p + k) \Gamma_0(q', p + k - q'|p, k) \quad (19) \end{aligned}$$

только в отношении зависимости от квазиимпульса \mathbf{q} . Здесь используется введенная в работе [20] функция $L_{\mathbf{q}}(p + k)$, определяемая выражением

$$L_{\mathbf{q}}(p + k) = \frac{n_{\mathbf{q}} + n_{\mathbf{p}+\mathbf{k}-\mathbf{q}} - 1}{i\omega_n + i\omega_m - \varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}-\mathbf{q}} + 2\mu}. \quad (20)$$

В приближении ближайших соседей решение интегрального уравнения (19) может быть записано в виде

$$\begin{aligned} \Gamma(q, p + k - q|p, k) &= V_{\mathbf{q}-\mathbf{p}} - t_{\mathbf{p}} - t_{\mathbf{k}} + \\ &+ \sum_{\alpha} \left(2t(1 + \cos Q_{\alpha}) - 2V \cos q_{\alpha} \right) C_{\alpha}(Q|p, k) + \\ &+ \sum_{\alpha} \left(2t \sin Q_{\alpha} - 2V \sin q_{\alpha} \right) S_{\alpha}(Q|p, k), \quad (21) \end{aligned}$$

где $Q = p + k$, а неизвестные функции $C_x, C_y, \dots, S_x, S_y, \dots$ удовлетворяют простой системе алгебраических уравнений ($\alpha, \beta = x, y, \dots$):

$$\begin{aligned} &\sum_{\beta} \left(\delta_{\alpha\beta} - 2t(1 + \cos Q_{\beta}) A_{\alpha} + 2V B_{\alpha\beta} \right) \times \\ &\times C_{\beta}(Q|p, k) - \sum_{\beta} \left(2t \sin Q_{\beta} A_{\alpha} - 2V P_{\alpha\beta} \right) \times \\ &\times S_{\beta}(Q|p, k) = 2V \times \\ &\times \sum_{\beta} \left(B_{\alpha\beta} \cos p_{\beta} - P_{\alpha\beta} \sin p_{\beta} \right) - (t_{\mathbf{p}} + t_{\mathbf{k}}) A_{\alpha}, \\ &\sum_{\beta} \left(\delta_{\alpha\beta} - 2t \sin Q_{\beta} R_{\alpha} + 2V W_{\alpha\beta} \right) S_{\beta}(Q|p, k) - \\ &- \sum_{\beta} \left(2t(1 + \cos Q_{\beta}) R_{\alpha} - 2V P_{\beta\alpha} \right) \times \\ &\times C_{\beta}(Q|p, k) = 2V \times \\ &\times \sum_{\beta} \left(P_{\beta\alpha} \cos p_{\beta} + W_{\alpha\beta} \sin p_{\beta} \right) - (t_{\mathbf{p}} + t_{\mathbf{k}}) R_{\alpha}. \quad (22) \end{aligned}$$

В этих уравнениях использованы следующие обозначения:

$$\begin{aligned}
 A_\alpha &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \cos q_\alpha L_{\mathbf{q}}(Q), \\
 R_\alpha &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \sin q_\alpha L_{\mathbf{q}}(Q), \\
 B_{\alpha\beta} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \cos q_\alpha \cos q_\beta L_{\mathbf{q}}(Q), \\
 P_{\alpha\beta} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \cos q_\alpha \sin q_\beta L_{\mathbf{q}}(Q), \\
 W_{\alpha\beta} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \sin q_\alpha \sin q_\beta L_{\mathbf{q}}(Q).
 \end{aligned}
 \tag{23}$$

В двумерном случае возникает система из четырех уравнений. Как известно, массовый оператор выражается через амплитуду рассеяния вперед $\Gamma(p, k|p, k)$. При использовании полной амплитуды рассеяния промежуточное суммирование по мацубаровским частотам провести в явном виде не удается, а применение компьютерных методов требует большого времени (если учесть, что необходимо проводить интегрирование по квазиимпульсу \mathbf{k} , а при нахождении плотности состояний еще и по квазиимпульсу \mathbf{p}).

Выход из этой ситуации видится в применении подходящего приближения. Для обоснования используемого ниже приближения будем апеллировать к точному решению для амплитуды рассеяния. Численное решение системы (22) после подстановки в (21) позволяет провести сравнение квазиимпульсной зависимости лестничной амплитуды рассеяния вперед $\Gamma(p, k|p, k)$ при различных значениях мацубаровских частот с соответствующими зависимостями, полученными на основе приближенного решения для этой величины. В качестве такого приближения ниже будет использоваться борновское приближение. Амплитуда рассеяния вперед в борновском приближении далее будет обозначаться посредством $\Gamma^{(2)}(p, k|p, k)$.

На рис. 7 показаны зависимости от квазиимпульса \mathbf{p} в направлении $p_y = p_x$ для реальной и мнимой частей выражений для величин Γ и $\Gamma^{(2)}$. При расчетах принималось, что $V = 1.5$, $n = 0.8$. Графическое представление для этих величин имеет вид, изображенный на рис. 8. Как видно, борновское приближение для величины Γ (без учета неоднородной части интегрального уравнения (19)) получается посредством подстановки вместо правого заштрихованного квадрата (полной амплитуды) затравочной амплитуды рассеяния. Из рис. 7 следует, что борновское приближение не только качественно, но и количественно воспроизводит особенности квазиимпульсной за-

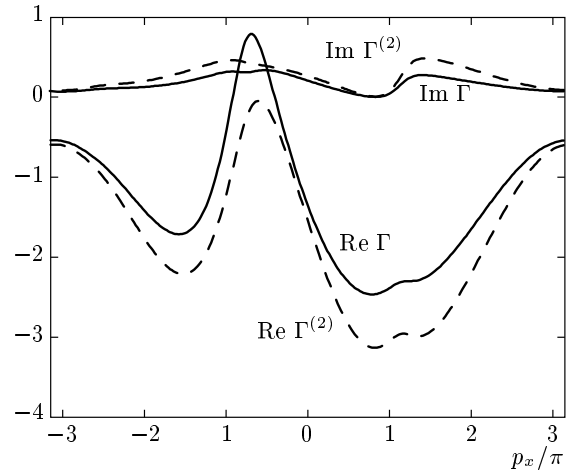


Рис. 7. Реальные и мнимые части полной и борновской амплитуд рассеяния вперед

висимости амплитуды рассеяния вперед. Аналогичная ситуация имеет место и при других значениях параметров системы.

Приведенное сравнение показывает, что для учета главных эффектов, связанных с рассеянием за счет кинематического и кулоновского взаимодействий можно использовать борновское приближение. В этом случае в выражении для Σ_B суммирование по промежуточной мацубаровской частоте ω_m можно провести в явном виде. При получении окончательной формулы, в которую входят только фермиевские функции, применялась методика, развитая в работе [21]. В результате получаем

$$\begin{aligned}
 \Sigma_B(\mathbf{p}, i\omega_n) &= \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}} \Gamma_0(\mathbf{p}, \mathbf{k}|\mathbf{q}, \mathbf{p} + \mathbf{k} - \mathbf{q}) \times \\
 &\quad \times \Gamma_0(\mathbf{q}, \mathbf{p} + \mathbf{k} - \mathbf{q}|\mathbf{p}, \mathbf{k}) \times \\
 &\quad \times \left\{ \frac{n_{\mathbf{k}}(1 - n_{\mathbf{q}} - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}}) + n_{\mathbf{q}}n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}}}{i\omega_n + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}} + \mu} - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{2n_{\xi}(1 - n_{\xi})}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{q}} + \mu} \right\}, \tag{24}
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 \Gamma_0(\mathbf{q}, \mathbf{p} + \mathbf{k} - \mathbf{q}|\mathbf{p}, \mathbf{k}) &= V_{\mathbf{q}-\mathbf{p}} - t_{\mathbf{p}} - t_{\mathbf{k}}, \\
 n_{\mathbf{q}} &= n_F\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{q}} - \mu}{T}\right), \quad n_{\xi} = n_F\left(\frac{\tilde{\varepsilon} - \mu}{T}\right).
 \end{aligned}$$

Таким образом полный массовый оператор формируется из двух слагаемых:

$$\Sigma(\mathbf{p}, i\omega_n) = \Sigma_{oval}(i\omega_n) + \Sigma_B(\mathbf{p}, i\omega_n). \tag{25}$$

Используя полученное выражение для массового оператора, после аналитического продолжения



Рис. 8. Графическое представление полной и борновской амплитуд без однородных частей

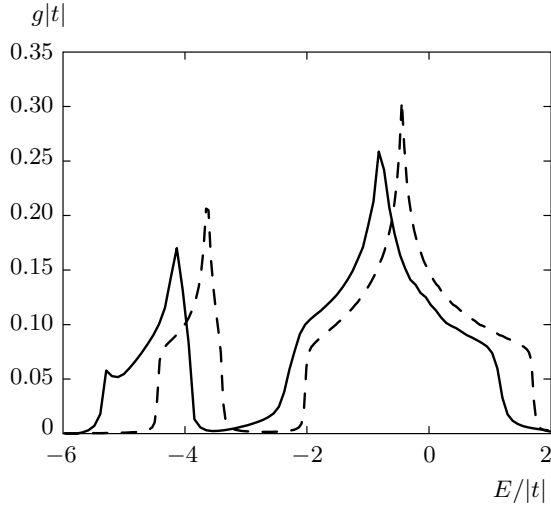


Рис. 9. Плотности состояний, рассчитанные на основе полного массового оператора (сплошная линия) и на основе массового оператора в одноовальном приближении (штриховая линия)

нетрудно вычислить плотность состояний. На рис. 9 показаны результаты численного расчета для полной плотности состояний (сплошная линия) при тех же значениях параметров, что и на рис. 7. Для выяснения относительного вклада $\Sigma_B(\mathbf{p}, i\omega_n)$ на этом же рисунке штриховой линией для того же набора параметров показана плотность состояний, полученная в одноовальном приближении, т. е. когда $\Sigma(\mathbf{p}, i\omega_n) = \Sigma_{oval}(i\omega_n)$. Из сравнения представленных зависимостей видно, что 1) выход за рамки одноовального приближения приводит к небольшому смещению по энергии плотности состояний. Верхняя зона испытывает изменения вблизи потолка; 2) происходит уширение нижней зоны (ЗФС); 3) возникновение мнимой части массового оператора приводит к частичному замыканию щели между ЗФС и основной зоной. Вместе с тем, следует подчеркнуть, что главная особенность, связанная с формированием отщепленной ЗФС сохраняется и описывается, в основном, массовым оператором, полученным в одноовальном приближении.

6. ВЛИЯНИЕ ЗОНЫ ФЛУКТУАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ НА КОНЦЕНТРАЦИОННУЮ ЗАВИСИМОСТЬ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЕРЕХОДА В СВЕРХПРОВОДЯЩУЮ ФАЗУ

В разд. 4 было показано, что индуцирование ЗФС приводит к перераспределению спектральной интенсивности электронной корреляционной функции. Этот эффект нарастает по мере увеличения уровня легирования и поэтому может оказать влияние на концентрационную зависимость критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние. Исследование этого вопроса проведем в рамках метода, развитого в работе [7].

Поведение критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние при изменении параметров модели (например, концентрации электронов) может быть изучено на основе анализа полюса амплитуды рассеяния в куперовском канале. В графическом виде эта амплитуда $\Gamma(p, -p|k, -k) \equiv \Delta(p|k)$ удовлетворяет лестничному уравнению, изображенному на рис. 10, где светлый квадрат соответствует затравочной амплитуде рассеяния $\Gamma_0(p, -p|k, -k) \equiv \Delta_0(p|k)$. Здесь принято, что $p \equiv (\mathbf{p}, i\omega_n), k \equiv (\mathbf{k}, i\omega_m)$.

Конкретный вид решения интегрального уравнения для $\Delta(p|k)$ зависит как от структуры затравочной амплитуды $\Delta_0(p|k)$ (имеется в виду характер зависимостей от квазиимпульсов и от мацубаровских частот), так и от входящих в это уравнение функций Грина $G(\mathbf{q}, i\omega_l)$ и $G(-\mathbf{q}, -i\omega_l)$. В случае, когда эти функции брались без учета эффектов, обусловленных формированием ЗФС, решения для однородной части интегрального уравнения для амплитуды рассеяния были подробно исследованы в работе [7].

Описание эффектов, обусловленных индуцированием ЗФС, в формальном отношении сводится к использованию в качестве функции Грина функции

$$G(\mathbf{q}, i\omega_n) = \frac{i\omega_n - \zeta + \mu}{(i\omega_n - E_{\mathbf{q}}^+ + \mu)(i\omega_n - E_{\mathbf{q}}^- + \mu)}, \quad (26)$$

получаемой из выражения (11), с учетом того,

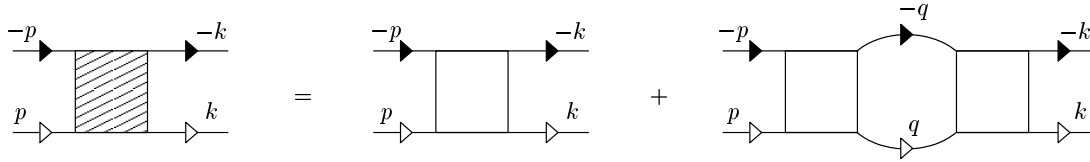


Рис. 10. Уравнение для куперовской амплитуды рассеяния

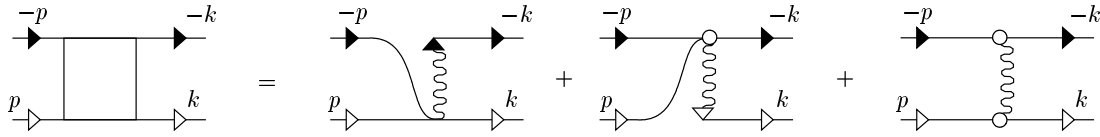


Рис. 11. Графическое представление для затравочной куперовской вершины

что в рассматриваемом приближении $D(\mathbf{q}, i\omega_l) = (1 - n/2)G(\mathbf{q}, i\omega_l)$.

Проанализируем изменения концентрационной зависимости критической температуры, связанные с возникновением ЗФС при возрастании легирования. Для наглядности демонстрации ограничимся решением задачи без учета рассеяния на спиновых флуктуациях. В этом случае затравочная амплитуда отражает хорошо известные процессы [7] и имеет графическое представление, показанное на рис. 11. В аналитической записи эта амплитуда определяется выражением

$$\Delta_0(p|k) = V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} - 2t_{\mathbf{k}}. \quad (27)$$

После приведения в соответствие диаграммам рис. 10 аналитических выражений и учета независимости затравочной амплитуды рассеяния от мацубаровской частоты для $\Delta(\mathbf{p}|\mathbf{k})$ получаем интегральное уравнение

$$\Delta(\mathbf{p}|\mathbf{k}) = V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} - 2t_{\mathbf{k}} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (V_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} - 2t_{\mathbf{q}}) \tilde{L}(\mathbf{q}) \Delta(\mathbf{q}|\mathbf{k}), \quad (28)$$

в котором, как и в работе [20]

$$\tilde{L}(\mathbf{q}) = T \sum_{\omega_l} G(\mathbf{q}, i\omega_l) G(-\mathbf{q}, -i\omega_l). \quad (29)$$

Проводя суммирование по мацубаровским частотам, находим явный вид функции (29):

$$\begin{aligned} \tilde{L}(\mathbf{q}, T_c) &= \\ &= \frac{(E_{\mathbf{q}}^+ - \zeta)(E_{\mathbf{q}}^+ + \zeta - 2\mu)}{4\nu_{\mathbf{q}}(E_{\mathbf{q}}^+ + E_{\mathbf{q}}^- - 2\mu)(E_{\mathbf{q}}^+ - \mu)} \text{th}\left(\frac{E_{\mathbf{q}}^+ - \mu}{2T_c}\right) - \\ &- \frac{(E_{\mathbf{q}}^- - \zeta)(E_{\mathbf{q}}^- + \zeta - 2\mu)}{4\nu_{\mathbf{q}}(E_{\mathbf{q}}^+ + E_{\mathbf{q}}^- - 2\mu)(E_{\mathbf{q}}^- - \mu)} \text{th}\left(\frac{E_{\mathbf{q}}^- - \mu}{2T_c}\right). \quad (30) \end{aligned}$$

Видно, что учет ЗФС приводит к модификации однородной части интегрального уравнения, заключающейся в замене функции

$$L(\mathbf{q}) = \frac{1}{2(\varepsilon_{\mathbf{q}} - \mu)} \text{th}\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{q}} - \mu}{2T}\right) \quad (31)$$

на функцию $\tilde{L}(\mathbf{q})$.

Применяя методику решения уравнения (28), изложенную в работе [7], получаем, что для рассматриваемого класса решений амплитуда $\Delta(\mathbf{p}|\mathbf{k})$ выражается через две неизвестные функции (d — размерность системы):

$$\begin{aligned} X_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left(\sum_{i=1}^d \cos q_i \right) \tilde{L}(\mathbf{q}) \Delta(\mathbf{q}|\mathbf{k}), \\ Y_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} R_{\mathbf{q}} \tilde{L}(\mathbf{q}) \Delta(\mathbf{q}|\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (32)$$

посредством уравнения

$$\Delta(\mathbf{p}|\mathbf{k}) = V_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} - 2t_{\mathbf{k}} + \left(4t - \frac{V_{\mathbf{p}}}{d}\right) X_{\mathbf{k}} + 2Y_{\mathbf{k}}. \quad (33)$$

Для вычисления этих функций можно получить систему из двух алгебраических уравнений

$$\begin{aligned}
\left(1 - 4tA_1 + \frac{2V}{d}A_2\right)X_{\mathbf{k}} - 2A_1Y_{\mathbf{k}} &= \\
&= \frac{V_{\mathbf{k}}}{d}A_2 - 2t_{\mathbf{k}}A_1, \\
(VB_R - 4tA_R)X_{\mathbf{k}} + (1 - 2A_R)Y_{\mathbf{k}} &= \\
&= \frac{V_{\mathbf{k}}}{d}B_R - 2t_{\mathbf{k}}A_R.
\end{aligned} \quad (34)$$

В системе (34) использованы обозначения

$$\begin{aligned}
A_1(T) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left(\sum_{i=1}^d \cos q_i \right) \tilde{L}(\mathbf{q}), \\
A_2(T) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left(\sum_{i=1}^d \cos q_i \right)^2 \tilde{L}(\mathbf{q}), \\
A_R(T) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} R_{\mathbf{q}} \tilde{L}(\mathbf{q}), \\
B_R(T) &= \frac{2}{dN} \sum_{\mathbf{q}} \left(\sum_{i=1}^d \cos q_i \right) R_{\mathbf{q}} \tilde{L}(\mathbf{q}).
\end{aligned} \quad (35)$$

Появление величин $A_R(T)$ и $B_R(T)$ связано с учетом перескоков в дальние координационные сферы. При этом полный фурье-образ интеграла перескока $t_{\mathbf{k}}$ имеет вид (17).

Из условия обращения в нуль детерминанта системы (34) получаем уравнение для критической температуры:

$$\begin{aligned}
1 + \frac{2V}{d}A_2(T_c) + 2VA_1(T_c)B_R(T_c) &= \\
= 4tA_1(T_c) + 2A_R(T_c) \left(1 + \frac{2V}{d}A_2(T_c) \right). & \quad (36)
\end{aligned}$$

В приближении ближайших соседей $A_R = B_R = 0$, и в результате получается более простое уравнение

$$\begin{aligned}
1 + V \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (\cos q_x + \cos q_y)^2 \tilde{L}(\mathbf{q}) &= \\
= 4t \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (\cos q_x + \cos q_y) \tilde{L}(\mathbf{q}). & \quad (37)
\end{aligned}$$

Без учета ЗФС выполняется равенство $\tilde{L}(\mathbf{q}) = L(\mathbf{q})$. В этом предельном случае уравнение (37) полностью соответствует уравнению (23) работы [7].

Результаты численных расчетов по определению концентрационных зависимостей химического потенциала и критической температуры T_c представлены на рис. 12. Сплошными линиями изображены зависимости $T_c(n)$, полученные в результате решения уравнения (37). Для сравнения на этом же рисунке штриховыми линиями показаны зависимости $T_c(n)$,

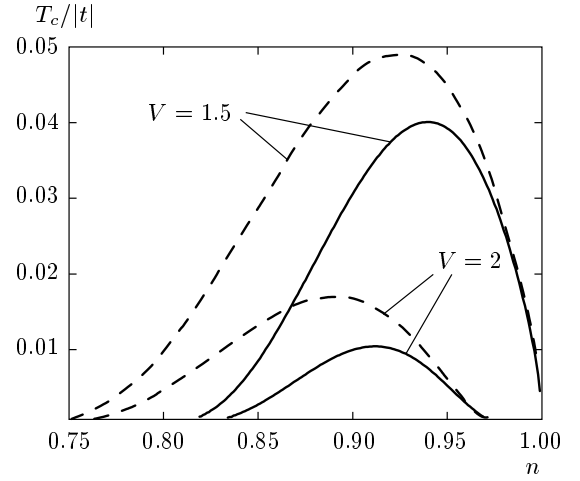


Рис. 12. Зависимость температуры перехода в сверхпроводящую фазу от концентрации электронов

полученные в результате решения этого же уравнения, но при $\tilde{L}(\mathbf{q}) = L(\mathbf{q})$, т. е. когда не учитывается эффект индуцирования ЗФС. Видно, что в области концентраций электронов n , близких к единице, влияние ЗФС незначительно (сплошные и штриховые линии совпадают). Это естественно, поскольку спектральная интенсивность ЗФС при $n \rightarrow 1$ обращается в нуль. Если концентрация увеличивается, то растет и среднеквадратичная флуктуация чисел заполнения. В этом случае спектральная интенсивность для ЗФС становится большой и вклад ЗФС проявляется достаточно сильно. На рисунке видно, что в наиболее интересной области концентраций электронов $n \approx 0.8-0.9$ ренормировка критической температуры сравнима и даже превышает саму величину T_c , вычисленную без учета вкладов от ЗФС. Таким образом, влияние эффектов, связанных с индуцированием ЗФС, существенно сказывается на фазовой диаграмме системы в области концентраций, где реализуется сверхпроводящее состояние.

При учете перескоков в дальние координационные сферы критическая температура определяется из решения уравнения (36). Наличие таких перескоков приводит к изменению вида кривой $T_c(n)$. Демонстрация совместного влияния дальних перескоков и ЗФС на зависимость $T_c(n)$ показана на рис. 13. Штриховой линией отображена зависимость $T_c(n)$, рассчитанная без учета ЗФС для набора параметров $t' = -0.1$, $t'' = 0.05$ и $V = 2$. Из сравнения со штриховой кривой рис. 12, рассчитанной для $V = 2$, следует, что учет дальних перескоков значительно деформирует зависимость $T_c(n)$ в области малых

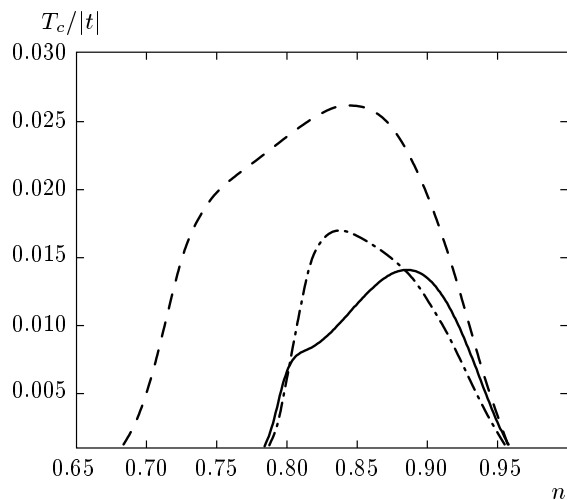


Рис. 13. Модификация концентрационной зависимости критической температуры перехода в сверхпроводящую фазу при учете дальних перескоков ($V = 2$)

электронных концентраций. Учет ЗФС (сплошная линия) приводит к неоднородному подавлению критической температуры и дальнейшей деформации кривой $T_c(n)$. Увеличение параметра перескока t'' при учете ЗФС приводит к сдвигу максимума кривой $T_c(n)$ в сторону меньших электронных концентраций ($t'' = 0.1$, штрихпунктирная линия).

Подводя итог этой части исследования следует отметить, что влияние межузельного кулоновского взаимодействия проявляется двояким образом. Прежде всего, межузельное кулоновское взаимодействие, как было показано в работе [7], вызывает сильное подавление области реализации сверхпроводящей фазы. Второй эффект, связанный с флуктуацией посадочной одноионной одноэлектронной энергии при учете межузельного взаимодействия, приводит к неоднородному по концентрации уменьшению критической температуры. Эта неоднородная ренормировка и составляет главное содержание эффекта, обусловленного учетом ЗФС в модели Шубина–Вонсовского.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные результаты по исследованию влияния сильных межузельных корреляций на энергетическую структуру и спектральные характеристики узкозонных мотт-халлардовских диэлектриков при низком уровне легирования демонстрируют наличие двух качественно новых эффектов.

Первый из них связан с возникновением новой энергетической зоны, обусловленной зарядовыми флуктуациями. Эти флуктуации, как уже отмечалось выше, приводят к изменению эффективной одноузельной энергии. Поэтому в условиях относительно слабой величины интеграла перескока (узкая зона) это изменение становится соизмеримым или превышающим ширину зоны. Именно эти факторы лежат в основе физической природы возникновения отщепленной зоны флуктуационных состояний. Следует особо подчеркнуть, что обсуждаемый эффект обусловлен именно корреляционными вкладами, а не просто сильным межузельным взаимодействием. Действительно, из-за двухузельного характера рассматриваемого взаимодействия значительный вклад его сводится к среднеполевым ренормировкам, не приводящим к индуцированию зоны флуктуационных состояний. При этом появление дополнительной зоны инициировалось двухполюсной структурой одноэлектронной функции Грина, получаемой после подстановки массового оператора. Этот оператор вычислен при учете бесконечной последовательности диаграмм, которые отражают главные вклады от межузельных корреляций.

Второй эффект связан с перераспределением спектральной интенсивности между основной зоной и зоной флуктуационных состояний. Без легирования спектральная интенсивность дополнительной зоны равна нулю. Физическая причина этого заключается в том, что конфигурационное окружение каждого иона соответствует номинальному. Математически это отражается посредством нулевого значения среднеквадратичной флуктуации чисел заполнения. По мере увеличения легирования спектральная интенсивность основной зоны уменьшается, тогда как спектральная интенсивность флуктуационной зоны увеличивается. В результате такого эффекта происходит отмеченная в предыдущем разделе неоднородная по концентрации электронов ренормировка температуры перехода в сверхпроводящее состояние.

Еще одно проявление перераспределения спектральной интенсивности связано с падением плотности состояний на уровне Ферми и увеличением числа точек зоны Бриллюэна, находящихся под поверхностью (или под контуром) Ферми. Этот эффект будет существенно влиять на квантовые фазовые переходы, связанные с изменением топологии контура Ферми при легировании [22]. Из модификации плотности электронных состояний и смещении химического потенциала следует, что межузельные корреляции могут инициировать

также уменьшение коэффициента Зоммерфельда в электронной части теплоемкости и ренормировать частоту осцилляций магнитной восприимчивости в эффекте де Гааза – ван Альфена.

Авторы выражают глубокую благодарность Р. О. Зайцеву за многочисленные замечания и дискуссии. Авторы благодарны А. А. Головне, А. А. Шкляеву и В. А. Мицкану за конкретные советы по численным расчетам массового оператора.

Работа выполнена при финансовой поддержке в рамках Программы Президиума РАН «Квантовая физика конденсированных сред», РФФИ (грант № 10-02-00251), Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 гг.», а также Междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН № 53. Один из авторов (М. К.) благодарит Лаврентьевский конкурс молодежных проектов СО РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Ф. Мотт, *Переходы металл–изолятор*, Наука, Москва (1979).
2. J. C. Hubbard, Proc. R. Soc. London A **276**, 238 (1963).
3. J. C. Hubbard, Proc. R. Soc. London A **285**, 542 (1965).
4. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975); **70**, 1100 (1976).
5. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **78**, 1132 (1980).
6. Р. О. Зайцев, Препринт Института атомной энергии им. И. В. Курчатова № ИАЭ-3927/1 (1984).
7. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **125**, 891 (2004).
8. S. Shubin and S. Vonsowsky, Proc. Roy. Soc. A **145**, 159 (1934).
9. S. Shubin and S. Vonsowsky, Phys. Zs. UdSSR **7**, 292 (1935); **10**, 348 (1936).
10. Р. О. Зайцев, В. А. Иванов, Ю. В. Михайлова, ФММ **65**, 1032 (1988); ФММ **68**, 1108 (1989).
11. В. И. Белявский, Ю. В. Копаев, УФН **176**, 457 (2006).
12. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, Е. А. Плеханов, ЖЭТФ **115**, 649 (1999).
13. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, ЖЭТФ **118**, 1434 (2000).
14. L. M. Falicov and J. C. Kimball, Phys. Rev. Lett. **22**, 997 (1969).
15. Д. И. Хомский, УФН **129**, 443 (1979).
16. Р. О. Зайцев, *Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и магнетизма*, Едиториал УРСС, Москва (2004).
17. Yu. A. Izyumov and V. M. Letfulov, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 8905 (1990).
18. В. Г. Барьяхтар, В. Е. Криворучко, Д. А. Яблонский, *Функции Грина в теории магнетизма*, Наукова Думка, Киев (1984).
19. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильнокоррелированных системах*, Изд-во СО РАН, Новосибирск (2001).
20. Р. О. Зайцев, Письма в ЖЭТФ **86**, 54 (2007).
21. В. М. Галицкий, ЖЭТФ **34**, 151 (1958).
22. С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов, Е. И. Шнейдер, ЖЭТФ **136**, 898 (2009).