

538.945

**МАГНЕТИЗМ И СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ
В СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННОЙ СИСТЕМЕ**

Ю.Л. Изюмов

(Институт физики металлов УрО АН СССР, Екатеринбург)

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение в проблему	2
1.1. Фундаментальные модели в теории сильно коррелированных систем. 1.2. Качественная картина движения дырки в антиферромагнитной матрице. 1.3. Два подхода к проблеме сильно коррелированных систем.	
I. Подход со стороны слабого кулоновского взаимодействия	6
2. Виды неустойчивости в нормальной парамагнитной фазе металла	6
2.1. Неустойчивость относительно образования волны спиновой плотности. 2.2. Неустойчивость в куперовском канале. 2.3. Особенности двумерной модели.	
3. Спаривание электронов через спиновые флуктуации в антиферромагнитной фазе . . .	14
3.1. Концепция спинового мешка. 3.2. Учет продольных флуктуаций намагниченности. 3.3. Учет поперечных спиновых флуктуаций.	
4. Движение дырки в двумерном хаббардовском антиферромагнетике с половинным заполнением	23
4.1. Результаты теории возмущений. 4.2. Численные расчеты квантовым методом Монте-Карло.	
II. Подход со стороны предельно сильного кулоновского взаимодействия	29
5. Исследование $(t - J)$ -модели в обобщенном приближении хаотических фаз	29
5.1. Магнитные состояния в $(t - J)$ -модели. 5.2. Куперовское спаривание через спиновые флуктуации в парамагнитной фазе.	
6. Дырка в $(t - J)$ -модели с антиферромагнитным упорядочением	35
6.1. Качественная картина в изинговском пределе. 6.2. Самосогласованная теория квазичастичного состояния. 6.3. Численные расчеты методом точной диагонализации. 6.4. Связанное состояние дырок.	
7. Заключение	42
Список литературы	44

1. Введение в проблему.

1.1. Фундаментальные модели в теории сильно коррелированных систем. К сильно коррелированным системам относятся вещества, у которых характерная энергия кулоновского взаимодействия электронов больше или порядка ширины зоны. Интерес к ним в последние годы исключительно возрос в связи с поисками нефоновых механизмов в высокотемпературных сверхпроводниках — купратах меди. В настоящее время на основе совокупности экспериментальных данных и расчетов зонного спектра из первых принципов понято, что эти вещества принадлежат классу сильно коррелированных систем. Проявлением этой корреляции является близость сверхпроводящих составов к переходу металл—диэлектрик, к антиферромагнитному переходу, наличие локализованных магнитных моментов в меди. Имеется немало гипотез, связывающих высокие температуры сверхпроводящего перехода с проявлениями сильных электронных корреляций.

Известно, что в сильно коррелированных системах имеются тенденции к магнитному и к сверхпроводящему упорядочению, поэтому проблему сверхпроводимости в них нужно рассматривать в контексте изучения магнитных состояний. Еще до открытия высокотемпературных сверхпроводников было показано, что косвенное взаимодействие электронов вблизи ферромагнитной неустойчивости в металле приводит к отталкиванию в синглетном канале и к притяжению в триплетном [1]. Гораздо позже было показано [2], что вблизи антиферромагнитной неустойчивости потенциал электронов в синглетной паре тоже отталкивательный, хотя при этом может возникнуть сверхпроводимость с анизотропным параметром порядка d-типа. Указанное поведение коллективизированных магнетиков в парамагнитной фазе по отношению к куперовскому спариванию находится в полном соответствии с ранее известными результатами о том, что в магнитоупорядоченном состоянии взаимодействие электронов через магнитные флуктуации (спиновые волны) является отталкивательным в синглетном канале и притягательным в триплетном [3, 4].

Отмеченные результаты [1, 2] были получены для систем со слабым кулоновским взаимодействием. В случае сильно коррелированных систем ситуация много сложнее, поскольку в системе при определенной электронной концентрации могут сформироваться локализованные магнитные моменты, которые приведут к процессам распаривания [5]. Связь магнитного и сверхпроводящего состояний наиболее полно может быть исследована в рамках модели Хаббарда [6].

Гамильтониан модели содержит только два параметра: матричный элемент t перехода между ближайшими узлами и параметр U кулоновского отталкивания электронов на одном узле. В представлении вторичного квантования он выражается через ферми-операторы уничтожения $c_{i\sigma}$ и рождения $c_{i\sigma}^+$ электрона на узле i со спином σ :

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i,j,\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}; \quad (1.1)$$

здесь $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$ — число электронов с заданным спином σ на данном узле.

Система в целом характеризуется еще одним параметром — электронной концентрацией n (число электронов на узле решетки), которая меняется от 0 до 2. Случай половинного заполнения ($n = 1$) является выделенным, поскольку при определенных соотношениях между параметрами t и U здесь может

возникнуть диэлектрическое состояние с дальним магнитным порядком. В качестве параметра, характеризующего первый (зонный) член гамильтониана, удобно брать ширину полосы $W = 2zt$, где z — число ближайших соседей. Наиболее интересной областью параметров, при которой возникает магнитное упорядочение, фазовый переход металл—диэлектрик и т.д., является промежуточная область $U \sim W$, труднодоступная для аналитического исследования, поэтому рассматривают обычно два предельных случая. Случай $U \ll W$ соответствует обычной ферми-жидкости, а противоположный случай $U \gg W$ — сильно коррелированной системе. В каждом из этих пределов может быть использована теория возмущений по соответствующему параметру. Так, в случае слабого кулоновского взаимодействия применяется обычная техника с фермиевскими операторами, а в противоположном пределе теория возмущений не столь тривиальна (см., например, книгу [7]). В этом случае, начиная с работ Хаббарда, одноузельная энергия берется в качестве нулевого приближения, а кинетический член — как возмущение.

Таким образом, в случае $U \ll W$ исходят из базиса коллективизированных (зонных) электронных состояний, а при $U \gg W$ — из базиса локализованных состояний. В промежуточной области в системе проявляются черты обоих базисов, аналогичные обычному квантовомеханическому дуализму микрообъектов волна—частица. Хаббард предложил некоторую интерполяционную схему для описания промежуточной области, которая, однако, слишком груба для описания таких кооперативных явлений, как фазовый переход в магнитное, сверхпроводящее или диэлектрическое состояние. По этой причине регулярная теория возмущений по параметру U/W или W/U предпочтительна, с последующей экстраполяцией результатов на область $U \sim W$. Именно так поступает большинство исследователей, вдохновленных идеей нефононных механизмов высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП).

В случае сильно коррелированной системы ($U \gg W$) удобно работать не с исходным гамильтонианом (1.1), а перейти к эффективному гамильтониану. Исключая состояния с "двойками" (два электрона на одном узле) во втором порядке теории возмущений, можно получить гамильтониан так называемой $(t - J)$ -модели [8, 9]

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i,j,\sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + J \sum_{i,j} (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j); \quad (1.2)$$

здесь \mathbf{S}_i — оператор электронного спина, $n_i = \sum_{\sigma} n_{i\sigma}$ — оператор числа электронов на узле i , а $J = 4t^2/U$ — эффективный обменный интеграл между ближайшими соседями. В кинетическом члене появляются факторы $(1 - n_{i,-\sigma})$, не позволяющие электронам находиться на уже занятых узлах. В случае половинного заполнения кинетический член исчезает, а гамильтониан \mathcal{H} сводится к гамильтониану гейзенберговского антиферромагнетика со спином $S = 1/2$. Ясно, что это состояние диэлектрическое.

Итак, в случае слабого и предельно сильного кулоновского взаимодействия следует исходить из разных моделей, описываемых гамильтонианами (1.1) и (1.2) соответственно. При этом в обоих случаях должна решаться одна и та же задача статистической механики, например построение фазовой диаграммы на плоскости параметров $(t/U, n)$, или, в более полном виде, в объеме $(t/U, n, T)$. Данный обзор посвящен только части этой общей проблемы — изучению магнитной и сверхпроводящей фаз в коллективизированной модели и их взаимосвязи.

Имеются два аспекта проблемы: общий (изучение трехмерной модели в широком интервале электронных концентраций) и частный, ориентированный на исследование известных высокотемпературных сверхпроводников (изучение двумерной модели вблизи половинного заполнения). Мы будем стараться обсудить оба эти спекта, концентрируя основное внимание все же на проблеме двумерной модели Хаббарда вблизи половинного заполнения. Прежде чем переходить к строгому обсуждению этой проблемы, изложим качественные соображения о поведении дырок, внедренных в антиферромагнитную решетку при половинном заполнении [10, 11].

1.2. Качественная картина движения дырки в антиферромагнитной матрице. Возможность образования связанного состояния дырок в антиферромагнитной фазе при заполнении, близком к половинному, видна из простых качественных соображений. На рис. 1 изображены две конфигурации с двумя дырками: в одном случае являющимися ближайшими соседями, а в другом — разнесенными на некоторое расстояние. Из сравнения видно, что разделение дырок порождает цепочку перевернутых по отношению к соседям спинов, на образование которой требуется энергия, пропорциональная длине цепочки, т.е. расстоянию между дырками. Таким образом, из-за наличия магнитного порядка возникает эффективный потенциал взаимодействия дырок, осуществляющий их конфайнмент. В то же время пара дырок как целое может свободно перемещаться по решетке, не затрачивая энергии на деформацию магнитной структуры.

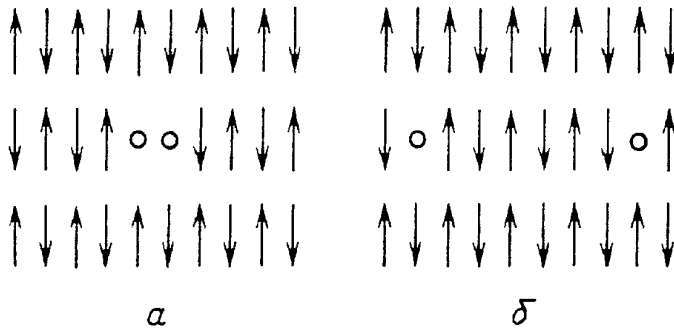


Рис. 1. Спиновые конфигурации с двумя дырками — являющимися ближайшими соседями (а), разнесенными на некоторое расстояние (б)

Для моделирования этого потенциала следует принять во внимание, что в $(t - J)$ -модели существует два масштаба времен — τ_h , характеризующее время пребывания дырки на узле, и τ_m — время существования спиновой флуктуации, причем

$$\tau_h \sim \hbar/t, \quad \tau_m \sim \hbar/4t^2/U. \quad (1.3)$$

При $U \gg t$ $\tau_m \gg \tau_h$, так что движение дырки является быстрым по сравнению со временем релаксации флуктуаций. Это означает, что дырка при своем движении успевает создать цепочку перевернутых спинов на длине $l \sim \tau_m v_F$, где v_F — скорость на поверхности Ферми. Для второй дырки с противоположным спином возникает при этом притягательный потенциал $v(r)$, линейно возрастающий на отрезке порядка l , который можно аппроксимировать выражением

$$v(r) = \begin{cases} \frac{4t^2}{Ua}(r - l), & r < l, \\ 0, & r > l; \end{cases} \quad (1.4)$$

здесь a — параметр решетки. Разумеется, в полный эффективный потенциал следует включить радиальный центростремительный потенциал

$$v_l(r) \sim \frac{l(l+1)}{r^2},$$

где l — величина орбитального момента пары частиц. Полный потенциал $v_{\text{eff}}(r) = v(r) + v_l(r)$ таков, что в нем может образоваться связанное состояние — куперовская пара. Поскольку для синглетного состояния орбитальная часть должна быть четной функцией, l может быть либо s-, либо d-состоянием. Подходит последнее, поскольку только в этом случае волновая функция пары обращается в нуль при $r = 0$, что согласуется с тем фактом, что две дырки не могут занимать один узел.

Несмотря на свою примитивность, предложенный модельный и, скорее, эвристический подход, позволяет обрисовать важные черты формирования сверхпроводящего состояния в $(t - J)$ -модели: необходимость учитывать тесное взаимодействие зарядовых и магнитных степеней свободы, особую роль d-симметрии сверхпроводящего параметра порядка, важность антиферромагнитного упорядочения. Настоящая теория сверхпроводимости в $(t - J)$ -модели должна строиться с учетом перечисленных тенденций, освобождаясь от двух грубых допущений: модельного введения спаривательного потенциала и предположения об изингоподобном антиферромагнитном состоянии. Включение в рассмотрение поперечных компонент спина расширяет базис спиновых конфигураций, которые необходимо привлекать для описания возмущения магнитного порядка движущейся дыркой.

Если иметь ввиду поиск возможных механизмов спаривания в реальных ВТСП-материалах, следует сконцентрироваться на свойствах $(t - J)$ -модели в двух измерениях вблизи половинного заполнения зоны (малая концентрация дырок n_h). В этой ситуации основное состояние системы, взятой в качестве "нулевого приближения", известно: это антиферромагнитный диэлектрик. Отдельная дырка в такой системе локализована (это можно увидеть из рис. 1). Возникает далее несколько теоретических проблем, важнейшие из которых: 1) Как (т.е. при какой концентрации дырок) возникает металлизация системы? 2) Какова динамическая природа дырки как квазичастицы с облаком деформации магнитной структуры (магнитного полярона)? 3) Каково время жизни такой квазичастицы и описывается ли металлизированный дырочный коллектив ферми-жидкостной картиной? Это, собственно, проблемы описания нормального состояния металла. Второй уровень проблем относится к возникновению сверхпроводящего состояния и сводится к проблеме образования связанного состояния дырок и вычислению T_c .

1.3. Два подхода к проблеме сильно коррелированных систем. Итак, к изучению наиболее интересной области параметров $U \sim W$ можно подходить с двух сторон: либо с помощью теории возмущений по малому параметру U/W в модели Хаббарда с гамильтонианом (1.1), либо через $(t - J)$ -модель, в которой уже использован противоположный параметр малости W/U . В соответствии с этим данный обзор состоит из двух частей. Первая часть имеет дело с концепцией коллективизированного магнетика, в которой антиферромагнитное состояние возникает вблизи половинного заполнения зоны благодаря нестингу поверхности Ферми (размерность системы $D = 3$ или 2 не имеет при этом принципиального значения). В рамках приближения хаотических фаз (RPA) исследуется взаимодействие электронов через спиновые флукту-

ации в парамагнитной фазе металла вблизи антиферромагнитной неустойчивости в общем случае и в антиферромагнитной фазе в двумерной системе вблизи половинного заполнения. В рамках RPA-приближения, а также численными методами исследуется время жизни квазичастиц и показывается, что вплоть до значения $U \sim W$ сохраняется ферми-жидкостная картина носителей вблизи половинного заполнения.

Другая часть обзора посвящена противоположному пределу — сильно коррелированным системам в рамках $(t - J)$ -модели. Здесь, как и в разделе I, исследовано взаимодействие электронов через спиновые флуктуации в парамагнитной фазе вблизи антиферромагнитной неустойчивости в рамках обобщенного приближения хаотических фаз (GRPA) [12]. Однако большая часть материала относится к проблеме дырок в двумерной $(t - J)$ -модели вблизи половинного заполнения. Для $(t - J)$ -модели эта проблема много сложнее, чем аналогичная проблема в случае слабого кулоновского взаимодействия. Один из главных вопросов — проблема основного состояния двумерной $(t - J)$ -модели с половинным заполнением. Мы обсуждаем здесь лишь одно направление исследований, связанных с предположением о существовании неелевского антиферромагнитного состояния. Однако имеется альтернативная гипотеза Андерсона [13] о новом типе основного состояния — резонирующих валентных связей (RVB). В настоящее время эта огромная самостоятельная область исследований, куда примыкает проблема анионной сверхпроводимости [14], могла бы быть темой отдельного обзора.

Совершенно отдельная тема — обсуждение электронных механизмов высокотемпературной сверхпроводимости в реальных ВТСП-материалах — меднооксидных купратах. Анализ корреляционных эффектов на основе однозонной невырожденной модели Хаббарда и ее производной — $(t - J)$ -модели имеет лишь концептуальный характер. В реальных ВТСП-материалах используются расширенные модели Хаббарда, учитывающие по крайней мере две электронные зоны (генетически связанные с d-электронами меди и p-электронами кислорода), принимающие во внимание вырождение этих электронных состояний с учетом симметрии решетки, а также включающие кулоновские взаимодействия на соседних узлах. Таким образом, возникает большое число вариантов различных соотношений между многочисленными параметрами, которые определяют физическое содержание моделей. Обсуждение их в контексте с экспериментальными данными по электронному строению купратов меди могло бы также составить тему отдельного обзора.

Несколько лет назад мы опубликовали в "УФН" обзор [15] по магнитному аспекту проблемы ВТСП, включив в него экспериментальные данные и соответствующие теоретические подходы. Спустя три года эти подходы сформировались в три направления: одно из них составляет тему данного обзора; два другие (RVB-состояние и расширенные модели) также нуждаются в систематическом изложении и критическом анализе. В своей совокупности эти три направления составляют современный магнитный аспект проблемы ВТСП-материалов.

I. Подход со стороны слабого кулоновского взаимодействия

2. Виды неустойчивости в нормальной парамагнитной фазе металла.

2.1. Неустойчивость относительно образования волны спиновой плотности. Слабое кулоновское отталкивание на узле ($U \ll W$) в определенных

условиях может привести к формированию магнитно-упорядоченного состояния. Возможные типы магнитного порядка определяются свойствами динамической восприимчивости $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ как функции волнового вектора и частоты. Для парамагнитной фазы металла в приближении хаотических фаз (принятая аббревиатура RPA) $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ выражается следующим образом через динамическую восприимчивость $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ свободных электронов [16]:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - U\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (2.1)$$

при этом

$$\chi_0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{k}}) - f(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\omega + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} + i\delta}, \quad (2.2)$$

где $f(\epsilon_{\mathbf{k}})$ — фермиевская функция распределения.

Из формулы (2.1) в статическом пределе вытекают в определенных условиях два вида неустойчивости системы. Одна — по отношению к образованию однородного ферромагнитного состояния. Действительно, из формулы (2.2) следует, что $\chi_0(\mathbf{q}, 0)$ равна плотности состояний на поверхности Ферми $\rho(\mu)$, поэтому магнитная восприимчивость при $q \rightarrow 0$ расходится, когда стонеровский фактор обращается в нуль: $1 - U\rho(\mu) = 0$.

Другая неустойчивость возникает, если имеется нестинг поверхности Ферми с волновым вектором \mathbf{Q} :

$$\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \mu = -(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu). \quad (2.3)$$

Тогда $\chi_0(\mathbf{Q}, 0) \approx \rho(\mu) \ln(W/T)$, и условие $1 - U\chi_0(\mathbf{Q}, 0) = 0$:

$$T_m \approx W \exp\left(-\frac{1}{U\rho(\mu)}\right), \quad (2.4)$$

определяет температуру магнитного перехода, или значения химпотенциала μ при $T = 0$, при которых возникает состояние волны спиновой плотности (ВСП) с волновым вектором $\mathbf{k}_0 = \mathbf{Q}$.

Таким образом, для возникновения магнитного упорядочения в системе нужны либо достаточно большая величина кулоновского отталкивания, либо положение нестинга на поверхности Ферми. Будем предполагать, что нестинг имеет место, так что в некоторой области фазовой плоскости (T, μ) или (T, n) или при $T = 0$ на плоскости параметров системы реализуется ВСП-состояние. Вблизи границы этого состояния сильно возрастают флуктуации магнитного порядка, которые являются переносчиками косвенного взаимодействия электронов и, возможно, приводят к другому виду неустойчивости системы — по отношению к образованию конденсата куперовских пар. Исследуем этот вопрос более детально.

2.2. Неустойчивость в куперовском канале. Чтобы вычислить потенциал спаривательного взаимодействия электронов, напомним сначала графическую интерпретацию результата (2.1) для магнитной восприимчивости. Классическому результату (2.1) соответствует суммирование петлевых диаграмм [17]:

$$\chi(q) = \text{петля} + \text{петля} - \text{петля} + \text{петля} - \text{петля} + \dots; \quad (2.5)$$

здесь сплошная линия с темной или светлой стрелками соответствует элект-

ровной функции Грина (цвет стрелки означает электронный спин), а пунктирная линия соответствует кулоновскому отталкиванию. Электронная функция Грина

$$G_{\sigma}(\mathbf{k}, \tau) = -\langle T c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}(0) \rangle \quad (2.6)$$

является стандартной мацубаровской функцией Грина [18], определенной со мнимым временем τ , и в нулевом приближении

$$G_{\sigma}^0(k) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu}, \quad (2.7)$$

где $k = (\mathbf{k}, i\omega_n)$ — четырехимпульс с мнимой четвертой компонентой.

В нулевом приближении по U магнитная восприимчивость дается выражением

$$\chi_0(q) = \text{loop} = \sum_k G_{\uparrow}^0(k-q) G_{\uparrow}^0(k), \quad (2.8)$$

которое после аналитического продолжения $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$ и приводит к известному выражению (2.2).

Бесконечный ряд (2.5) учитывает динамические магнитные флуктуации в системе, порождаемые электронно-дырочными парами. В этих терминах нетрудно выразить эффективное взаимодействие электронов в синглетном V^s и триплетном V^t каналах, определив их следующим образом [2]:

$$V_{\parallel}^s = \text{diagram 1}, \quad V_{\perp}^s = \text{diagram 2}, \quad V^t = \text{diagram 3}; \quad (2.9)$$

здесь двойные штриховые линии представляют бесконечные ряды с четным и нечетным числом петель:

$$\text{diagram 4} = \text{diagram 5} + \dots, \quad (2.10)$$

$$\text{diagram 6} = \text{diagram 7} + \dots, \quad (2.11)$$

а заштрихованная вершинная часть представляет бесконечный ряд антипараллельных лестниц:

$$\text{diagram 8} = \text{diagram 9} + \dots \quad (2.12)$$

В куперовском канале (импульс входящих частиц k и $-k$, а исходящих k' и $-k'$) матричные элементы взаимодействий частиц $V^s = V_{\parallel}^s + V_{\perp}^s$ и V^t в синглетном и триплетном состоянии, очевидно, равны [2]

$$V^s(k, k') = \frac{U}{1 - U^2 \chi_0^2(k' - k)} + \frac{U^2 \chi_0(k' + k)}{1 - U \chi_0(k' + k)}, \quad (2.13)$$

$$V'(k, k') = - \frac{U^2 \chi_0(k' - k)}{1 - U^2 \chi_0^2(k' - k)}. \quad (2.14)$$

Составим уравнение для вершинной части в куперовском канале. Для синглетного состояния, например, оно имеет стандартный вид [18]

$$\text{Diagram with } \Gamma_c = \text{Diagram with } \Gamma_c^0 + \text{Diagram with } \Gamma_c^0 \text{ and } \Gamma_c; \quad (2.15)$$

здесь Γ_c^0 — эффективное взаимодействие V^* , определяемое графическими рядами (2.10) и (2.12) или аналитическим выражением (2.13). Уравнение (2.15) без неоднородного члена представляет линеаризованное уравнение для сверхпроводящего параметра порядка и служит для определения T_c . В теории сильной связи в качестве промежуточных функций Грина в уравнении (2.15) следует брать перенормированную функцию Грина с собственно энергетической частью

$$\Sigma = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2}; \quad (2.16)$$

она получается замыканием промежуточных линий в графических выражениях (2.9) для V_{\perp}^s и V' .

Уравнения (2.15) и (2.16) представляют замкнутую систему уравнений на Γ_c и Σ . Удобно, как обычно, ввести две величины: $\varphi(k)$ и $Z(k)$. Первая из них определяется вершиной Γ_c при нулевом суммарном импульсе

$$\Gamma_c(k, q - k; q - k', k') \Big|_{q=0} \equiv \varphi(k) = \varphi(k, i\omega_n), \quad (2.17)$$

а вторая — выражением для перенормированной функции Грина

$$G(k) = (i\omega_n Z(k) - E(k))^{-1}, \quad (2.18)$$

где $E(k) = \varepsilon_k - \mu$ — энергия электрона, отсчитанная от химпотенциала. Тогда возникает следующая система связанных уравнений на $\varphi(k)$ и $Z(k)$:

$$i\omega_n(1 - Z(k)) = \frac{T}{N} \sum_{k', n'} V_Z(kk', i\omega_n - i\omega_{n'}) \frac{i\omega_{n'} Z(k')}{(i\omega_{n'} Z(k'))^2 - E^2(k')}, \quad (2.19)$$

$$\varphi(k) = - \frac{T}{N} \sum_{k', n'} V(kk', i\omega_n - i\omega_{n'}) \frac{\varphi(k')}{(i\omega_{n'} Z(k'))^2 - E^2(k')}; \quad (2.20)$$

здесь матричные элементы V_Z и V равны

$$V(kk', i\omega_n - i\omega_{n'}) = - \frac{U}{1 - U^2 \chi_0^2(k' - k)} - \frac{U^2 \chi_0(k' - k)}{1 - U \chi_0(k' - k)}, \quad (2.21)$$

$$V_Z(\mathbf{k}\mathbf{k}', i\omega_n - i\omega_{n'}) = \frac{U^3\chi_0^2(\mathbf{k}' - \mathbf{k})}{1 - U\chi_0(\mathbf{k}' - \mathbf{k})} + \frac{U^2\chi_0(\mathbf{k}' - \mathbf{k})}{1 - U^2\chi_0^2(\mathbf{k}' - \mathbf{k})}. \quad (2.22)$$

Уравнения (2.19) и (2.20) имеют стандартный вид уравнений теории сверхпроводников с сильной связью [19]. Уравнение на $\varphi(\mathbf{k})$ имеет решение для T_c , если матричный элемент V положителен, что соответствует притяжению. Однако из выражения (2.21) нетрудно увидеть, что V отрицательно, поскольку оба члена пропорциональны магнитной восприимчивости, которая должна быть положительна в парамагнитной фазе. Таким образом, взаимодействие электронов через магнитные флуктуации имеет характер отталкивания в синглетном канале, в соответствии с известным ранее результатом о том, что взаимодействие электронов в синглетном канале через спиновые волны в магнитоупорядоченной фазе является отталкивательным [3].

Несмотря на отталкивательный характер эффективного взаимодействия (2.21), возможно, тем не менее, куперовское спаривание при анизотропном характере сверхпроводящего параметра порядка, если система находится в условиях антиферромагнитной неустойчивости [2].

Стандартная обработка уравнений (2.19) и (2.20) в духе приближения промежуточной связи позволяет искать решение уравнения для $\varphi(\mathbf{k})$ в виде

$$\varphi(\mathbf{k}) = \psi_f(\mathbf{k})\Delta_f(\omega), \quad (2.23)$$

где $\psi_f(\mathbf{k})$ — базисная функция неприводимого представления точечной группы кристалла, а $\Delta_f(\omega)$ зависит только от частоты. Уравнение (2.20) приводит тогда к следующей формуле для T_c сверхпроводящего состояния I -типа:

$$T_c = \frac{2\gamma}{\pi}\omega_m \exp\left(-\frac{1+\lambda}{\lambda_I}\right); \quad (2.24)$$

здесь ω_m — предельная частота спиновых флуктуаций, а λ_z и λ_I — полная и парциальная константы связи, которые определяются выражениями

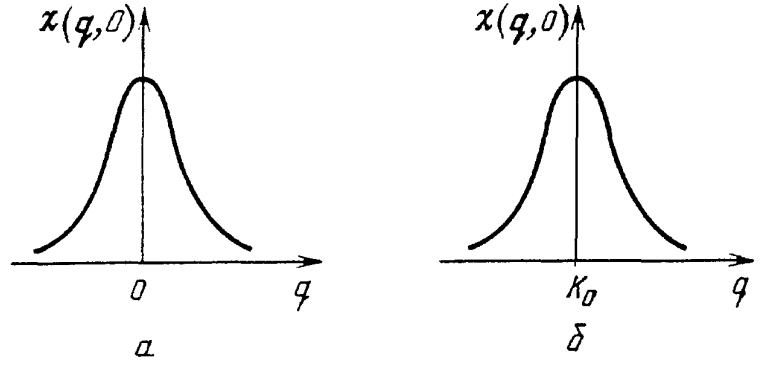
$$\lambda_z = \langle\langle V_Z(\mathbf{k}\mathbf{k}'; 0) \rangle\rangle \rho(\mu), \quad (2.25)$$

$$\lambda_I = \langle\langle \psi_f(\mathbf{k}) V(\mathbf{k}\mathbf{k}'; 0) \psi_f(\mathbf{k}') \rangle\rangle \rho_f(\mu). \quad (2.26)$$

Двойные ломаные скобки означают усреднение по импульсам \mathbf{k} и \mathbf{k}' , лежащим на поверхности Ферми: $\rho(\mu)$ — полная плотность состояний на поверхности Ферми, а $\rho_f(\mu)$ — парциальная плотность состояний на поверхности Ферми. Таким образом, константы связи являются усредненными величинами двух взаимодействий V_z и V , взятых на нулевой частоте, как и в обычной электрон-фононной модели сверхпроводимости [19]. Оба взаимодействия V и V_z пропорциональны магнитной восприимчивости $\chi(q)$, которая имеет пик вблизи волновых векторов 0 или \mathbf{k}_0 в случае ферромагнитной или антиферромагнитной неустойчивости (рис. 2).

Константа связи λ_z положительна. Формула (2.24) для T_c имеет смысл, только если λ_I тоже положительна. Как уже отмечалось, величина V , определяющая λ_I , отрицательна, поэтому λ_I может быть положительной только за счет знакопеременной базисной функции. Для простой кубической решетки,

Рис. 2. Магнитная восприимчивость вблизи ферромагнитной (а) и антиферромагнитной (б) неустойчивости



например, в приближении ближайших соседей $\psi_l(\mathbf{k})$ имеют вид для $l = s, p, d$ -симметрии [2]

$$\begin{aligned}\psi_s(\mathbf{k}) &= \cos k_x + \cos k_y + \cos k_z, \\ \psi_{p1}(\mathbf{k}) &= \sin k_x, \quad \psi_{p2}(\mathbf{k}) = \sin k_y, \quad \psi_{p3}(\mathbf{k}) = \sin k_z, \\ \psi_{d1}(\mathbf{k}) &= \cos k_x - \cos k_y, \quad \psi_{d2}(\mathbf{k}) = 2 \cos k_z - \cos k_x - \cos k_y, \\ \psi_{d'1}(\mathbf{k}) &= \sin k_x \cdot \sin k_y, \quad \psi_{d'2}(\mathbf{k}) = \sin k_x \cdot \sin k_z, \quad \psi_{d'3}(\mathbf{k}) = \sin k_y \cdot \sin k_z.\end{aligned}\tag{2.27}$$

При половинном заполнении в ПК-решетке имеется нестинг на волновом векторе $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$ (постоянная решетки a положена равной единице), поэтому в ней возникают ВСП-состояние с волновым вектором $\mathbf{k}_0 = \mathbf{Q}$. В то же время имеет место следующее свойство базисных функций (2.27):

$$\psi_l(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -\psi_l(\mathbf{k}), \quad l = s, d.\tag{2.28}$$

Таким образом, для состояний d-симметрии выражение (2.25) для λ_l можно переписать в виде

$$\lambda_l = -\langle\langle \psi_l(\mathbf{k}) V(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{Q}; 0) \psi_l(\mathbf{k}') \rangle\rangle \rho(\mu),\tag{2.29}$$

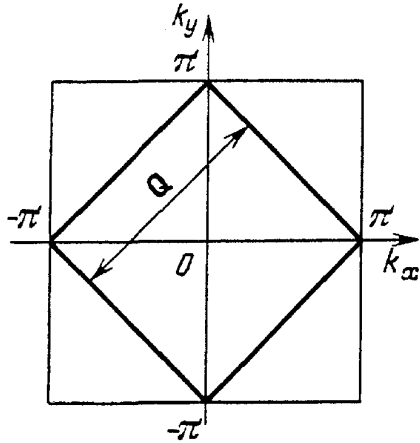
причем интегрирование по \mathbf{k} и \mathbf{k}' ведется по двум поверхностям Ферми, раздвинутым на вектор \mathbf{k}_0 . Поскольку взаимодействие $V(k)$ пропорционально $\chi(k)$, а последняя имеет узкий пик в окрестности $\mathbf{k} = \mathbf{Q}$ в случае ВСП-неустойчивости, величина $|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$ оказывается малой, и интегрирование в (2.29) ведется по некоторой области вблизи линии пересечения двух поверхностей Ферми.

Сравнивая выражение (2.29) с исходным (2.26) и учитывая особенности магнитной восприимчивости вблизи границ магнитного фазового перехода, мы видим, что λ_l имеют разные знаки для случаев ферро- и антиферромагнитной неустойчивости. Структура выражения (2.29) позволяет надеяться, что λ_l будет отрицательно в случае антиферромагнитной неустойчивости. Численный расчет величин λ_l подтвердил это [2]. Оказалось, что при заполнениях, "соответствующих границе существования ВСП-фазы, λ_l положительно и значительно возрастает для d-симметрии параметра порядка, тогда как для s-симметрии оно отрицательно, а для p-симметрии (соответствующей триплетному спариванию) λ_l ничтожно мала. Абсолютная величина λ_l для d-сим-

метрии не превышает 0,1, поэтому T_c , обусловленная механизмом спиновых флуктуаций, не превышает нескольких градусов Кельвина.

2.3. Особенности двумерной модели. Рассмотрим квадратную решетку с законом дисперсии электронов

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y). \quad (2.30)$$



На рис. 3 изображена ее зона Бриллюэна, внутри которой жирная линия представляет изоэнергетическую поверхность $\varepsilon_{\mathbf{k}} = 0$, соответствующую половинному заполнению. При точно половинном заполнении зоны ($n = 1$) имеется идеальный нестинг ферми-поверхности с волновым вектором $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$.

Плотность состояний имеет логарифмическую особенность вблизи $\varepsilon = 0$:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2 t} \ln \frac{16t}{\varepsilon}, \quad (2.31)$$

Рис. 3. Зона Бриллюэна для квадратной решетки

благодаря которой магнитная восприимчивость $\chi_0(\mathbf{q}, \omega)$ имеет особенности как функция температуры и химпотенциала. Так,

при $\mu = 0$ (половинное заполнение) [20]

$$\chi_0(0, 0) \sim \frac{1}{t} \ln \frac{t}{T}, \quad \chi_0(\mathbf{Q}, 0) \sim \frac{1}{t} \ln^2 \frac{t}{T}. \quad (2.32)$$

А в условиях $4t \gg \mu \gg t$

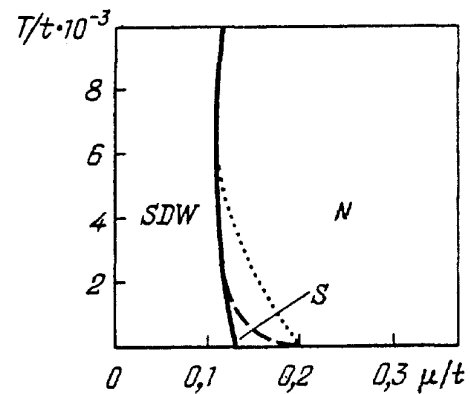
$$\chi_0(0, 0) \sim \frac{1}{t} \ln \frac{t}{\mu}, \quad \chi_0(\mathbf{Q}, 0) \sim \frac{1}{t} \ln^2 \frac{t}{\mu}. \quad (2.33)$$

В силу этих сингулярностей уравнение $1 - U\chi_0(\mathbf{q}, 0) = 0$ всегда имеет решение либо при конечных T (для $\mu = 0$), либо при конечных μ (для $T = 0$). Так, в случае половинного заполнения в системе возникает ВСП-состояние с волновым вектором $\mathbf{k}_0 = \mathbf{Q}$ и температурой магнитного перехода [20]

$$T_m \sim t \exp \left[-2\pi \left(\frac{t}{U} \right)^{1/2} \right]. \quad (2.34)$$

Численное решение уравнений в двумерном случае показывает, что вблизи границы перехода в антиферромагнитное состояние возникает сверхпроводящее состояние в некотором ограниченном интервале концентрации дырок. Типичная фазовая диаграмма показана на рис. 4. Сверхпроводимость усиливается по мере приближения к границе магнитной фазы, однако величина T_c остается чрезвычайно малой. Например, при $U/t = 1,2$ максимальная $T_c \approx 2 \cdot 10^{-3} t$. Если подобрать параметры так, чтобы при $\mu = 0$ (половинное заполнение) $T_m = 250$ К (для этого $4t \approx 6600$ К), то $T_c \lesssim 2,5$ К. С ростом параметра U/t район существования сверхпроводящего состояния расширяется, и T_c увеличивается, но не превышает нескольких градусов Кельвина. Для

Рис. 4. Фазовая диаграмма на (T, μ) плоскости при значении параметра $U/t = 1$ [20]. Сплошная линия — температура магнитного упорядочения T_m , штриховая — температура сверхпроводящего перехода. Точечная линия дает T_c без учета собственно-энергетической поправки к электрону



$U/t \approx 0,6$ сверхпроводимость не возникает вовсе. Отметим также важность собственно-энергетической поправки к спектру, которая очень сильно подавляет T_c , несмотря на то, что потенциал притяжения электронов через спиновые флуктуации расходится при $T = T_m$.

В отличие от электрон-фононной модели сверхпроводимости, где вершинные поправки оказываются малыми в меру адиабатического параметра $(m/M)^{1/2}$ [19], для модели Хаббарда никакой малости вершинных поправок априори не существует, поэтому их вклад в вычисление T_c может оказаться существенным. В работе [21] впервые были учтены вершинные поправки в электрон-спинфлуктуационное взаимодействие и исследована их роль в величине T_c и других характеристик системы.

В сущности, в выражении (2.16) для Σ следовало бы включить поправки, учитывающие процессы рассеяния с сохранением и с переворотом спина. Однако в работе [21] учитывались лишь поправки к вершинной части, не содержащие поперечных спиновых флуктуаций. Поправка к функции Грина для парамагнитного состояния (величина $Z(\mathbf{k}, i\omega_n)$), находилась самосогласованно. В численных расчетах использовались следующие упрощения: частотная и импульсная зависимость величин Z и φ учитывалась не в полной мере, а именно: пренебрегали их зависимостью от ω_n , но сохраняли зависимость от \mathbf{k} .

Численное решение уравнений для Z и φ показало, что учет поправок к вершинным частям не изменяет качественных выводов о сверхпроводимости в системе за счет спиновых флуктуаций: она сохраняется вблизи перехода в антиферромагнитное состояние, и сверхпроводящий параметр порядка имеет симметрию d-типа. Величина T_c , однако, существенно перенормируется. Вершинные поправки приводят к двум противоположным процессам, влияющим на величину T_c . С одной стороны, они приводят к росту эффективной массы (через увеличение величины Z), что существенно снижает T_c . С другой стороны, вершинные поправки приводят к возрастанию амплитуды рассеяния электронов на спиновых флуктуациях для вектора рассеяния $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, что усиливает ядро спаривательного взаимодействия в уравнении для φ . Результирующий эффект этих двух процессов таков, что T_c возрастает в несколько раз по сравнению с результатами RPA-приближения.

3. Спаривание электронов через спиновые флуктуации в антиферромагнитной фазе.

3.1. Концепция спинового мешка. Мы видели, что взаимодействие электронов через спиновые флуктуации в парамагнитной фазе вблизи фазового перехода в антиферромагнитное состояние может приводить к сверхпроводящему спариванию d-симметрии параметра порядка. В связи с проблемой ВТСП важное значение имеет изучение такого механизма спаривания в системе с имеющимся дальним антиферромагнитным порядком или в условиях, когда существует достаточно протяженный ближний магнитный порядок. Если магнитная корреляционная длина l существенно больше корреляционной длины сверхпроводника ξ , для формирования сверхпроводящего состояния несущественно, имеется ли дальний магнитный порядок или он отсутствует. В этих условиях можно изучать эффекты электронного спаривания через спиновые флуктуации и в двумерной модели Хаббарда, где нет дальнего магнитного порядка, но магнитная корреляционная длина может быть достаточно большой. В этом случае для удобства расчета можно полагать, что в системе как бы имеется дальний магнитный порядок.

Чтобы включить эффекты влияния антиферромагнитного порядка на сверхпроводящее спаривание, необходимо учесть перестройку электронного спектра за счет антиферромагнитного упорядочения. Известно (см., например, [4]), что магнитный порядок расщепляет исходную электронную зону, при этом щель появляется как раз на границе магнитной зоны Бриллюэна. Если поверхность Ферми лежит вблизи этих границ, перестройка спектра становится очень существенной для всех физических свойств системы. Для двумерной модели Хаббарда с половинным заполнением ($n = 1$) это как раз та ситуация. В этом случае на поверхности Ферми, совпадающей с границей магнитной зоны Бриллюэна, открывается щель Δ , так что металл становится антиферромагнитным диэлектриком.

Шриффер с сотрудниками [22] изучил поведение дырок, в нижней (валентной) зоне квазичастиц, включив эффекты взаимодействия их с магнитными флуктуациями. Каждая дырка частично разрушает в непосредственной своей окрестности антиферромагнитный порядок и локализуется в этой деформированной области, перемещая облако деформации во время своего движения. Возникает, таким образом, магнитный полярон, который авторы предпочли назвать "spinbag" — спиновым мешком. Если имеется вторая дырка, образующая вокруг себя такой же спиновый мешок, благодаря перекрытию областей деформации магнитной структуры они взаимодействуют друг с другом и могут образовать общий мешок, понижая при этом суммарную энергию. Так возникает эффективное притяжение дырок, которое может приводить к куперовскому спариванию.

При математической реализации описанного механизма необходимо последовательно решить ряд задач: ввести новые квазичастицы, учитывающие движение электронов в антиферромагнитной решетке; вычислить магнитные восприимчивости системы и выразить через них эффективное взаимодействие квазичастиц, а затем найти эффективное взаимодействие внедренных дырок в куперовском канале. Ниже кратко излагаются все последовательные этапы такой теории [22].

Итак, предположим, что в нашей квадратной решетке при половинном заполнении реализуется неелевское основное состояние с волновым вектором \mathbf{k}_0 , равным вектору нестинга $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Спонтанное нарушение симметрии приводит к перестройке электронного спектра, которую легко установить в

приближении среднего поля. Заменим гамильтониан (1.1) на квадратичную форму

$$\mathcal{H}_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow}) - \Delta \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow}) \quad (3.1)$$

с параметром Δ , который находится из условия самосогласования.

Диагонализация \mathcal{H}_{MF} достигается каноническим преобразованием к новым фермиевским операторам, смешивающим электронные состояния с импульсами \mathbf{k} и $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$:

$$\gamma_{\mathbf{k}\alpha}^c = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\alpha} - v_{\mathbf{k}} \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta}^z c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\beta}, \quad (3.2)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}\alpha}^v = v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\alpha} + u_{\mathbf{k}} \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta}^z c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\beta},$$

где вещественные коэффициенты $u_{\mathbf{k}}$ и $v_{\mathbf{k}}$ удовлетворяют условию $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$, α и β — спиновые индексы, а σ^z — матрица Паули (z — направление спонтанного момента подрешеток). В новых операторах

$$\mathcal{H}_{\text{MF}} = \sum'_{\mathbf{k}, \alpha} E_{\mathbf{k}} (\gamma_{\mathbf{k}\alpha}^{c\dagger} \gamma_{\mathbf{k}\alpha}^c - \gamma_{\mathbf{k}\alpha}^{v\dagger} \gamma_{\mathbf{k}\alpha}^v), \quad (3.3)$$

где

$$E_{\mathbf{k}} = (\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2)^{1/2}. \quad (3.4)$$

В одной из двух зон — зоне проводимости (ей соответствует оператор γ^c) — энергия квазичастицы $E_{\mathbf{k}}$, а в другой зоне — валентной (ей соответствует оператор γ^v) — энергия квазичастицы — $E_{\mathbf{k}}$ (рис. 5). Штрих у суммы по \mathbf{k} означает суммирование по магнитной зоне Бриллюэна, лежащей внутри области

$$-\pi < k_x < \pi, \quad -\pi + k_x < k_y < \pi - k_x, \quad (3.5)$$

занимающей вдвое меньшую площадь, чем исходная зона Бриллюэна (см. рис. 3).

При половинном заполнении исходной зоны ($n = 1$) валентная зона полностью заполнена, а зона проводимости пустая, так что система представляет собой диэлектрик со щелью 2Δ . Как видно из формулы (3.4), Δ есть щель в спектре одночастичного возбужденного состояния, которое представляет либо дырку в валентной полосе, либо частицу в полосе проводимости. Величина щели находится из уравнения самосогласования

$$\frac{1}{N} \sum'_{\mathbf{k}} - \frac{1}{(\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2)^{1/2}} = \frac{1}{U}. \quad (3.6)$$

Коллективные возбуждения системы определяются полюсами магнитной восприимчивости χ . ВРРА-приближении χ находится суммированием тех же петлевых диаграмм, которые возникали при вычислении восприимчивости в парамагнитной фазе (см. (2.5)). Для магнитоупорядоченного состояния возникают два отличия: во-первых, в петлях линии Грина соответствуют уже не электронам, а квазичастицам с энергией $E_{\mathbf{k}}$ и $-E_{\mathbf{k}}$ и, во-вторых, вследствие

потери трансляционной инвариантности χ должно зависеть от двух импульсов \mathbf{q} и \mathbf{q}' .

Чтобы учесть флуктуационные эффекты в намагниченности подрешеток, необходимо вычислить собственно-энергетическую поправку для электрона. Возьмем ее в виде (например, для электрона со спином \uparrow)

$$\Sigma_{\uparrow} = \text{[diagram 1]} + \text{[diagram 2]}; \quad (3.7)$$

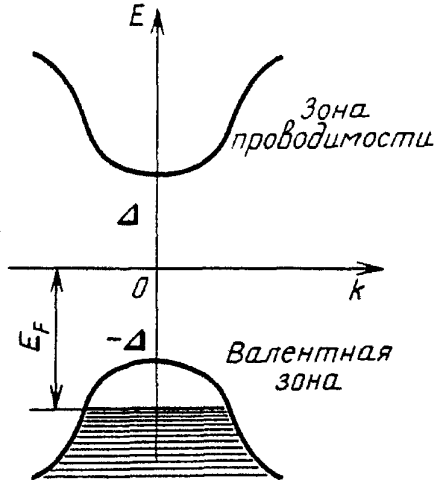


Рис. 5. Энергетический спектр квазичастиц в ВСП-состоянии

здесь двойная штриховая линия представляет эффективное взаимодействие через электронные петли, а двойная заштрихованная линия представляет сумму всех антипараллельных лестничных диаграмм. Таким образом, первый график описывает процессы с сохранением спина, а второй — с переворотом спина за счет взаимодействия с продольными и поперечными (спиновые волны) флуктуациями над ВСП-состоянием. Линиям эффективного взаимодействия отвечают аналитические выражения V^z и V^{+-} . Они, как и восприимчивости χ^{zz} и χ^{+-} , являются функциями двух импульсов \mathbf{q} и \mathbf{q}' , однако χ^{zz} диагонально, а V^{+-} содержит недиагональный вклад за счет члена χ_Q^{+-} , являющегося нечетной функцией ω , малой поэтому при малых $\omega \leq \Delta$. Пре-

небрегая этим вкладом, получим следующие выражения для продольного и поперечного эффективных взаимодействий:

$$V^z(\mathbf{q}, \omega) = \frac{U^2 \chi_0^{zz}(\mathbf{q}, \omega)}{1 - U \chi_0^{zz}(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (3.8)$$

$$V^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{U^2 \chi_0^{+-}(\mathbf{q}, \omega)}{1 - U \chi_0^{+-}(\mathbf{q}, \omega)}; \quad (3.9)$$

здесь

$$\chi_0(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}}' \left(1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \pm \Delta^2}{E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \right) \times \left(\frac{1}{\omega - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} + i\delta} + \frac{1}{-\omega - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} + i\delta} \right), \quad (3.10)$$

причем верхний знак перед Δ^2 берется для компоненты χ_0^{zz} , а нижний — для χ_0^{+-} .

Рассмотрим теперь взаимодействие двух дырок, помещенных в наполовину заполненную полосу. В статическом приближении оно определяется выражениями (3.8) и (3.9) при $\omega = 0$. Гамильтониан эффективного взаимодействия дырок в продольном и поперечном канале определяется соответственно выражениями [23]

$$H_z = -\frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \sum_{\alpha, \alpha', \beta, \beta'} V^z(\mathbf{k} - \mathbf{k}', 0) \sigma_{\alpha' \alpha}^z \sigma_{\beta' \beta}^z \times \\ \times c_{\mathbf{k}' \alpha}^+ c_{-\mathbf{k}' + \mathbf{q} \beta'}^+ c_{-\mathbf{k} + \mathbf{q} \beta} c_{\mathbf{k} \alpha}, \quad (3.11)$$

$$H_{+-} = -\frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \sum_{\alpha, \alpha', \beta, \beta'} V^{+-}(\mathbf{k} - \mathbf{k}', 0) \sigma_{\alpha' \alpha}^+ \sigma_{\beta' \beta}^- \times \\ \times c_{\mathbf{k}' \alpha}^+ c_{-\mathbf{k}' + \mathbf{q} \beta'}^+ c_{-\mathbf{k} + \mathbf{q} \beta} c_{\mathbf{k} \alpha}, \quad (3.12)$$

где $\sigma^\pm = \sigma^x \pm i\sigma^y$. Проведем обратное преобразование в (3.2) от электронных операторов к операторам квазичастиц. Гамильтониан, выраженный в терминах γ^v - и γ^c -операторов, содержит различные вклады включая и межзонные переходы. Поскольку валентная зона и зона проводимости разделены большой щелью 2Δ , межзонами переходами можно пренебречь. Тогда получим следующие выражения для гамильтонианов дырок, описывающих взаимодействия через продольные и поперечные флуктуации в куперовском канале (суммарный импульс пары $q = 0$) [23]:

$$H_z = -\frac{1}{4N} \sum'_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\alpha, \alpha', \beta, \beta'} \left(V^z(\mathbf{k} - \mathbf{k}', 0) l^2(\mathbf{k} \mathbf{k}') \sigma_{\alpha' \alpha}^z \sigma_{\beta' \beta}^z + \right. \\ \left. + V^z(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{Q}, 0) m^2(\mathbf{k} \mathbf{k}') \delta_{\alpha' \alpha} \delta_{\beta' \beta} \right) \gamma_{\mathbf{k}' \alpha}^{+v} \gamma_{-\mathbf{k}' \beta'}^{+v} \gamma_{-\mathbf{k} \beta}^v \gamma_{\mathbf{k} \alpha}^v, \quad (3.13)$$

$$H_{+-} = -\frac{1}{4N} \sum'_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\alpha, \alpha', \beta, \beta'} \left(V^{+-}(\mathbf{k} - \mathbf{k}', 0) n^2(\mathbf{k} \mathbf{k}') - \right. \\ \left. - V^{+-}(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{Q}, 0) \sigma_{\alpha' \alpha}^+ \sigma_{\beta' \beta}^- \gamma_{\mathbf{k}' \alpha}^{+v} \gamma_{-\mathbf{k}' \beta'}^{+v} \gamma_{-\mathbf{k} \beta}^v \gamma_{\mathbf{k} \alpha}^v \right), \quad (3.14)$$

где введены так называемые факторы когерентности

$$m(\mathbf{k} \mathbf{k}') = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'}, \quad p(\mathbf{k} \mathbf{k}') = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} - v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'}, \quad (3.15)$$

$$l(\mathbf{k} \mathbf{k}') = u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'}, \quad n(\mathbf{k} \mathbf{k}') = u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} - v_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'},$$

Выражения в скобках в (3.13) и (3.14) представляют эффективные взаимодействия квазичастиц в валентной зоне через продольные и поперечные флуктуации спина. Наряду с двумя каналами H_z и H_{+-} взаимодействия дырок через спиновые флуктуации имеется еще один канал H_c взаимодействия через флуктуации заряда. Здесь он опущен, поскольку энергии соответствующих коллективных мод лежат значительно выше энергии спиновых мод, и потому данный канал неэффективен в спаривательном взаимодействии дырок [22].

Для очень малой концентрации дырок поверхность Ферми лежит, очевидно, вблизи магнитной зоны Бриллюэна, где $\epsilon_{\mathbf{k}} = 0$, поэтому $u_{\mathbf{k}} \approx v_{\mathbf{k}} \approx 1/\sqrt{2}$. Вследствие этого $p^2(\mathbf{k} \mathbf{k}') \approx n^2(\mathbf{k} \mathbf{k}') \approx 0$. Это не означает, однако, что матричный элемент эффективного взаимодействия через спиновые волны мал (как это было предположено первоначально в [22]). Это не так, поскольку величина V^{+-} имеет сингулярность. Исследуем эффект каждого из членов H_z и H_{+-} в отдельности в спаривательном взаимодействии дырок.

3.2. Учет продольных флуктуаций намагниченности. Начнем со взаимодействия, обусловленного продольными флуктуациями [22]. В выражение (3.13) входит лишь статическое взаимодействие. Чтобы учесть динамический характер взаимодействия, необходимо исследовать его частотную зависимость. Функция $V^z(\mathbf{q}, \omega)$ пропорциональна продольной магнитной восприимчивости $\chi^{zz}(\mathbf{q}, \omega)$. Она не расходится в ВСП-состоянии на импульсе $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$, как это имеет место в парамагнитной фазе, однако на этом волновом векторе $\chi^{zz}(\mathbf{q}, \omega)$, как показывают численные расчеты [22], ограничена в основном частотами, не превышающими 2Δ , поэтому следует ввести соответствующую частоту обрезания $\omega_a \approx 2\Delta$. Обрезанию по частоте соответствует обрезание взаимодействия по импульсам, поэтому в выражении (3.13) в качестве матричного элемента для синглетного канала следует иметь в виду величину

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \left(-m^2(\mathbf{k}\mathbf{k}')U^2\chi^{zz}(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{Q}, 0) + l^2(\mathbf{k}\mathbf{k}')U^2\chi^{zz}(\mathbf{k} - \mathbf{k}', 0) \right) \times \\ \times \theta(\omega_a - |E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{F}}|)\theta(\omega_a - |E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{F}}|), \quad (3.16)$$

где $\theta(x)$ равна 1 для $x > 0$ и равна 0 для $x < 0$. Поскольку $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ ограничено малой поверхностью Ферми (в случае малой концентрации дырок), вторым членом в выражении (3.16) можно пренебречь, после чего видно, что $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ является отрицательным, что соответствует притяжению.

Притяжение между дырками приводит к образованию сверхпроводящей щели $\Delta_{\mathbf{k}}$, которая находится из уравнения теории БКШ:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{[(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{F}})^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2]^{1/2}}. \quad (3.17)$$

Ввиду анизотропного характера спаривательного взаимодействия $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ решение этого уравнения для $\Delta_{\mathbf{k}}$ является также анизотропным. Чтобы установить симметрию решения, т.е. сверхпроводящего параметра порядка, учтем все симметричные свойства спаривательного взаимодействия. Оно антипериодично в обратном пространстве:

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'+\mathbf{Q}} = -V_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \mathbf{k}'}, \quad (3.18)$$

что следует из свойств коэффициентов $u-v$ -преобразования: $u_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = v_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = u_{\mathbf{k}}$. Это условие приводит к антипериодичности самого параметра порядка

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}. \quad (3.19)$$

Последнее условие означает, что $\Delta_{\mathbf{k}}$ должна иметь нули в магнитной зоне Бриллюэна. Однако это не означает, что на поверхности Ферми щель $\Delta_{\mathbf{k}}$ обязательно должна обращаться в нуль. Все зависит от типа поверхности Ферми. При малой концентрации дырок минимум энергии квазичастиц-дырок должен лежать где-нибудь в симметричной точке на границе магнитной зоны Бриллюэна, поэтому наиболее вероятные варианты поверхности Ферми показаны на рис. 6. Различие между ними в том, что в случае *a* все четыре части поверхности Ферми могут быть векторами \mathbf{Q} обратной магнитной решетки со-вмещены друг с другом в одну замкнутую поверхность, которую можно по-

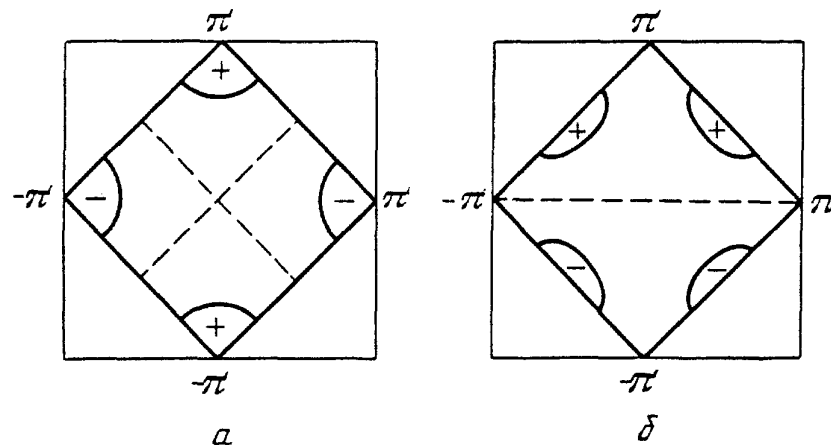


Рис. 6. Два варианта дырочной поверхности Ферми — односвязная, (а), двухсвязная (б), приводящие к d- и p-симметрии сверхпроводящего параметра порядка [22]

местить в центр магнитной зоны пересмотром ее начала. В случае б возможно попарное совмещение, так что поверхность Ферми состоит из двух несвязанных поверхностей.

Знаки + и — учитывают антипериодичность (3.19) сверхпроводящего параметра порядка. В случае а только малые импульсы \mathbf{k} и \mathbf{k}' участвуют в решении, поэтому парный потенциал $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ может быть аппроксимирован константой. Ввиду ее отрицательности уравнение (3.17) дает однородное в окрестности поверхности Ферми решение. Вдали от нее $\Delta_{\mathbf{k}}$ может обращаться в нуль на линиях, обозначенных пунктиром, но это линии границы магнитной зоны Бриллюэна (после перенесения начала координат из центра в угол). Однако на этой линии имеется большая щель, обусловленная ВСП-состоянием. Таким образом, $\Delta_{\mathbf{k}}$ нигде на поверхности Ферми не обращается в нуль, и, следовательно, в рассматриваемой модели не ожидается степенных по температуре зависимостей величин, относящихся к сверхпроводящему состоянию. Аналогичный вывод можно сделать и для другого варианта поверхности Ферми (см. рис. 6,б). В последнем случае следует иметь в виду возможность вырождения сверхпроводящего параметра порядка. Наряду с состоянием, изображенным на рис. 6,б, возможно и другое состояние, получающееся из него поворотом на 90° . Анализ показывает, что в случае односвязной поверхности Ферми возникает сверхпроводящий параметр p-симметрии, а в случае двухсвязной — d-симметрии [22].

Замечательным при этом является тот факт, что параметр порядка не имеет нулей на поверхности Ферми, хотя функция d- и p-симметрии обязательно обращается в нуль в определенных частях зоны Бриллюэна. В силу сказанного сверхпроводящий параметр порядка в рассматриваемой модели имеет во многом обычные свойства, характерные для s-симметрии.

Заметим также, что параметр порядка $\langle \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^v \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^v \rangle$ соответствует смешанному состоянию, включающему синглет и z-компоненту триплета. Это происходит потому, что волновая функция пары не может быть представлена в виде произведения функций, зависящих только от координат и только от спинов, так как орбитальные функции для спина \uparrow и спина \downarrow различны (электроны с противоположными спинами в ВСП-состоянии принадлежат различным подрешеткам).

Сверхпроводящий параметр d-симметрии был получен независимо в целом ряде работ [24 — 27]. Возможность p-симметрии была показана в работе [28].

Аналогичные вопросы рассматривались в работе [29], а также в ряде последующих работ этого автора. Критика их результатов содержится в статье [22]. По поводу роли смены знака сверхпроводящего параметра порядка в различных областях энергии или \mathbf{k} -пространства см. работы [30, 31].

3.3. Учет поперечных спиновых флуктуаций. Вспомним теперь, что мы приняли в расчет только одну часть эффективного взаимодействия дырок — через продольные спиновые флуктуации. Изложенная на этой основе концепция и есть теория спинового мешка [22]. Учтем теперь вторую часть взаимодействия дырок H_{+-} через спиновые волны.

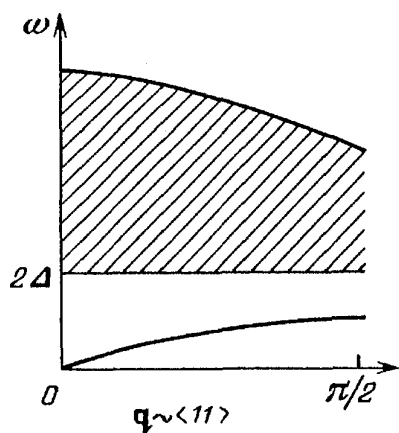


Рис. 7. Спектр двухчастичных возбуждений и спиновых волн для ВСП-состояния при $U/t = 4$ [32]

Спектр спиновых волн определяется полюсами поперечной магнитной восприимчивости. Полюса затравочной восприимчивости (3.10) дают континуум двухчастичных возбуждений (дырка в валентной полосе и частица в полосе проводимости), который, как видно из выражения (3.10), начинается для частот $\omega > 2\Delta$. Коллективная ветвь спектра — спиновая волна — лежит как раз в этой щели (рис. 7) [32]. В пределе $U \gg t$ спектр спиновых волн совпадает со спектром для гейзенберговской модели [33].

Теперь рассмотрим матричный элемент взаимодействия H_{+-} дырок через спиновые волны. При малой концентрации дырок $u_{\mathbf{k}} \approx v_{\mathbf{k}} \approx 1/\sqrt{2}$, а поэтому когерентные факторы $p(\mathbf{k}\mathbf{k}')$ и $n(\mathbf{k}\mathbf{k}')$ стремятся к нулю, однако, как было замечено в [23], матричный элемент

V^{\pm} имеет сингулярность, компенсирующую малость когерентных факторов. Пусть поверхность Ферми для дырок находится вблизи точки $(\pi/2, \pi/2)$ (и эквивалентной ей $(-\pi/2, -\pi/2)$). Тогда для малых отклонений от нее $\delta k_x = k_x - \pi/2$ и $\delta k_y = k_y - \pi/2$

$$p^2(\mathbf{k}\mathbf{k}') \approx \frac{t^2}{\Delta^2}(q_x + q_y)^2, \quad V_{+-}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, 0) \sim \frac{1}{t^2 q^2}, \quad (3.20)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ — малый вектор по сравнению с вектором обратной решетки. При промежуточных значениях параметра U/t оба взаимодействия являются сравнимыми по величине, но при возрастании U/t начинает доминировать взаимодействие через спиновые волны.

Анализ парных потенциалов $H_z(\mathbf{r})$ и $H_{+-}(\mathbf{r})$, соответствующих выражениям (3.13) и (3.14) в реальном пространстве, показывает, что при малых U/t доминирует продольная часть потенциала, приводящая к синглетному куперовскому спариванию внутри неелевского антиферромагнитного упорядочения. С ростом параметра U/t возрастает поперечная часть потенциала, приводящая к спиральному искажению неелевской структуры, причем вращение спинов происходит в плоскости (x, y) . Спаривательный потенциал ослабляется, и с дальнейшим ростом U/t должна устанавливаться нормальная спиральная фаза.

Поскольку в двумерной модели Хаббарда отсутствует дальний магнитный порядок при конечной температуре, изложенную теорию, использующую предположение о существовании дальнего магнитного порядка, следует понимать как предел $l_m \gg \xi_m$, где l_m — корреляционная длина для ВСП-состояния, а

$$\xi_m = \hbar v_F / \Delta \quad (3.21)$$

— длина когерентности, т.е. это размер области в окрестности частицы (дырки), в которой нарушен дальний магнитный порядок и который перемещается вместе с этой частицей.

При условии, когда указанное неравенство между двумя длинами l_m и ξ_m не выполнено, следует подходить к проблеме со стороны парамагнитной фазы, и учесть более детально структуру магнитной восприимчивости, отражающую флуктуации магнитного порядка в системе. В сущности, необходимо учесть факт сильного возрастания $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ на импульсе $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$. Тогда, подсчитывая поправку к Σ в виде графика из (3.7), можно вычислить плотность состояний вблизи поверхности Ферми. Оказалось [34], что выше и ниже по отношению к уровню Ферми для свободных электронов возникают два пика, соответствующие двум типам квазичастиц, но между ними имеется конечная плотность состояний, которая углубляется по мере роста параметра U/t . Таким образом, вместо щели на поверхности Ферми, открывающейся в состоянии с дальним ВСП-порядком, возникает псевдощель. При фиксированном U псевдощель зависит от химпотенциала и углубляется по мере приближения концентрации дырок к нулю. Таким образом, с увеличением параметра U возникает кроссовер от обычного ферми-жидкостного поведения системы (с одним пиком в $\rho(\omega)$ вблизи уровня Ферми) к $\rho(\omega)$ со щелью в ВСП-состоянии через промежуточные состояния с псевдощелью.

Как и в случае ВСП-состояния, в режиме малых корреляционных длин l_m , парный потенциал между двумя спиновыми мешками $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, притягательный для импульса перехода $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$, меньше, чем ξ_m^{-1} , благодаря тому, что две дырки предпочитают создать общий мешок, понижая при этом энергию. Однако при больших $\mathbf{q} \approx \mathbf{Q}$ потенциал $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ отталкивательный, как и в случае ВСП-состояния, поскольку обмен спиновой флуктуацией приводит, как известно, к отталкиванию в синглетном канале. Это означает, что если поверхность Ферми состоит из четырех карманов в углах $(\pm \pi/2, \pm \pi/2)$ магнитной зоны Бриллюэна, то в каждом из них сверхпроводящая щель будет отлична от нуля, но знак ее меняется при переходе от одного кармана к другому, поскольку при этом происходит изменение импульса на вектор \mathbf{Q} . Таким образом, как и в случае с ВСП-состоянием, сверхпроводящая щель не обращается в нуль нигде на поверхности Ферми, но в целом симметрия сверхпроводящего параметра порядка является р-типа. В другом случае, если поверхность Ферми однолистка, возможно ожидать более обычное поведение сверхпроводящей щели d-типа.

В работе [34] были сделаны лишь качественные выводы о характере спаривательного потенциала, однако современный уровень теории пока не позволяет получить оценок для температуры сверхпроводящего перехода. Следует иметь в виду также, что частоты обрезания в продольной и поперечной частях взаимодействия должны быть различными в ВСП-фазе, поскольку различна природа спиновых флуктуаций в ней. В случае H_{+-} -члена это спиновые

волны, хорошо распространяющиеся возбуждения, а в случае H_z -члена это бездисперсные диффузионные моды.

Таким образом, сверхпроводящее спаривание через спиновые флуктуации скорее возможно при малых значениях параметра U/t , где вклад от продольных флуктуаций доминирует. При возрастании U/t начинает доминировать отталкивание в синглетном канале через взаимодействие со спиновыми волнами, как это давно было установлено в рамках s — d -обменной модели металла [4], поэтому возможность существования сверхпроводящего состояния определяется балансом двух противоположных вкладов. Наконец, с дальнейшим ростом U/t должно возникнуть, как было отмечено выше, спиральное магнитное упорядочение. Однако здесь мы входим в "режим сильной связи", где использование РРА-приближения уже не работает. В этой ситуации следует исходить из противоположного предела $U/t \gg 1$, т.е. использовать $(t - J)$ -модель. В рамках этой модели и был впервые сделан вывод о существовании спиральной фазы [35, 36]. Мы вернемся к этому вопросу во второй части обзора.

В рамках подхода со стороны $U \ll W$ появилась серия работ [37 — 44], в которых уточняются магнитные состояния для двумерной модели Хаббарда вблизи половинного заполнения. Фундаментальный анализ основного состояния проведен в работе [37], где было показано, что при малой концентрации дырок нееевское антиферромагнитное состояние с дальним порядком неустойчиво относительно образования антиферромагнитного состояния ближнего порядка со спиральной магнитной структурой. Флуктуации плотности дырок порождают флуктуации спирального порядка, причем корреляции этих магнитных флуктуаций ведут себя экспоненциально на расстояниях порядка среднего расстояния между дырками. Подобное поведение магнитных флуктуаций наблюдалось в ВТСП-материалах (см. обзор [15]). Поверхность Ферми для дырок формируется вокруг точек $(\pm \pi/2, \pm \pi/2)$, поэтому приводит к r -симметрии сверхпроводящего параметра порядка.

Появление спиральной структуры не единственный тип неустойчивости нееевского состояния, обнаруживаемый при внедрении дырок. Вариационными методами и в приближении Хартри—Фока было показано [40 — 42], что антиферромагнитная доменная структура с периодически расположенными доменными стенками (солитонная решетка) обладает более низкой энергией, чем нееевское состояние. Вариационным методом Монте-Карло было показано [40], что это имеет место в интервале значений $U = (4 - 10)t$. В такой структуре распределение дырок не должно быть однородным. Оказалось, что дырки предпочитают находиться в области доменной стенки. Таким образом, возникает одномерная поляризация среды. Оказалось также, что несоизмеримая антиферромагнитная фаза неустойчива по отношению к сверхпроводимости.

Более того, фундаментальное исследование [43] показало, что в двумерной модели Хаббарда вблизи $n = 1$ магнитная структура основного состояния может оказаться значительно сложнее, чем любая несоизмеримая фаза. Оказалось, что решение уравнений Хартри—Фока приводит к богатому набору локализованных состояний, включающих магнитные поляроны, доменные стенки и вихри, мало различающиеся по энергии. Авторы утверждают, что большое число почти вырожденных решений уравнений Хартри—Фока есть специфическое свойство двумерной модели Хаббарда вблизи половинного заполнения. Им соответствуют метастабильные состояния. В режиме промежуточных значений параметров $U \sim W$ система должна описываться как жид-

кость с сильным взаимодействием нелинейных структурных элементов. Вероятнее всего, что в этом режиме она будет неустойчива по отношению к куперовскому спариванию. В режиме больших $U \gg W$ система должна описываться, скорее, в терминах вихрей с малым остовом и низкой подвижностью, обусловленной поперечными флуктуациями спинов. Если учет флуктуаций за пределами приближения Хартри—Фока не снимет отмеченного выше вырождения метастабильных спиновых и зарядовых флуктуаций, система может оказаться исключительно трудной для аналитического и даже численного исследования, аналогично спиновым стеклам.

Таким образом, по мере углубления в теорию двумерной модели Хаббарда вблизи половинного заполнения становится очевидным, насколько сложной оказывается проблема основного состояния даже в режиме малых и умеренных значений кулоновского отталкивания $U \lesssim W$. Это касается не только проблемы сверхпроводящего состояния, но и магнитной структуры. В зависимости от использованного приближения авторы получают различные ответы для структуры магнитного состояния системы. В этой ситуации особенное значение приобретают численные методы исследования, не использующие существенно теорию возмущений по параметру U/W .

4. Движение дырки в двумерном хаббардовском антиферромагнетике с половинным заполнением.

4.1. Результаты теории возмущений. Хотя в предыдущем разделе мы уже исследовали взаимодействие дырок, внедренных в ВСП-состояние системы при половинном заполнении исходной зоны, следует вернуться к проблеме одной дырки и изучить более детально такие характеристики одночастичного состояния, как затухание, эффективную массу и интенсивность когерентного состояния. Последняя характеристика особенно важна в связи с вопросом о существовании ферми-жидкостной картины для внедренных дырок, т.е., по существу, поверхности Ферми. При обсуждении эффектов взаимодействия дырок мы это молчаливо предполагали.

Имеются два подхода к этой проблеме: один основан на теории возмущений по параметру U/t , результаты которой обычно распространяются на область $U \sim t$ без какого-либо на то основания. Другой подход использует методы численного моделирования, и в нем может быть позволительно рассматривать промежуточную область $U \sim t$. Именно эти два подхода мы и обсудим в этом разделе, оставляя обсуждение режима сильной связи $U/t \gg 1$ до второй части обзора. Начнем с теории возмущения.

Необходимо явно исследовать поправки к собственной энергии электронов за счет взаимодействия со спиновыми флуктуациями ВСП-состояния. Магнитный порядок в системе при половинном заполнении зоны был учтен в приближении среднего поля, и функция Грина электрона зависит от двух импульсов ввиду изменения трансляционной симметрии за счет антиферромагнитного порядка. Она представляется двухрядной матрицей [32]

$$G^{0\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = \begin{pmatrix} \omega + \epsilon_{\mathbf{k}} & \sigma\Delta \\ \sigma\Delta & \omega - \epsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \frac{1}{\omega^2 - E_{\mathbf{k}}^2 + i\delta}. \quad (4.1)$$

Первая строка матрицы точно соответствует выражению для $G_{\alpha\beta}^0(\mathbf{k}\mathbf{k}'; \omega)$, а вторая строка — выражению $G_{\alpha\beta}^0(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \mathbf{k}'; \omega)$, при этом учтено, что $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\epsilon_{\mathbf{k}}$. Учтена также диагональность по спиновым индексам α, β . Хотя эта функция определена для реальных электронов, она одновременно описы-

вает и движение квазичастиц с энергией E_k в полосе проводимости и $-E_k$ в валентной полосе. Структура спектра в этом приближении была показана на рис. 5.

Взаимодействие электронов со спиновыми флуктуациями в RPA-приближении приводит к собственно-энергетической поправке $\Sigma^\sigma(\mathbf{k}, \omega)$, представленной графиками (3.7). Уточненную функцию Грина $G^\sigma(\mathbf{k}, \omega)$ найдем из уравнения Дайсона

$$G^{\sigma^{-1}}(\mathbf{k}, \omega) = G^{0\sigma^{-1}}(\mathbf{k}, \omega) - \Sigma^\sigma(\mathbf{k}, \omega), \quad (4.2)$$

где каждый член представляет матрицу 2×2 в обратном пространстве. Нетрудно убедиться, записав аналитическое выражение для $\Sigma^\sigma(\mathbf{k}, \omega)$, что оно не зависит от проекции спина σ . Спектр ϵ_k , затухание Γ_k и интенсивность a_k одночастичного пика выражаются следующим образом через величину $\Sigma_+ = \Sigma_{11} + \Sigma_{12}$, где $\Sigma_{\alpha\beta}$ — матричный элемент собственно-энергетической части:

$$\omega = \Delta + \Sigma_+(\mathbf{k}, \omega), \quad (4.3)$$

$$\Gamma_k = -\text{Im} \Sigma_+(\mathbf{k}, \omega) \cdot \left(1 - \frac{\partial \text{Re} \Sigma_+(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \bigg|_{\omega=\epsilon_k} \right)^{-1}, \quad (4.4)$$

$$a_k \equiv \frac{1}{Z_k} = \left(1 - \frac{\partial \text{Re} \Sigma_+(\mathbf{k}, \omega)}{\partial \omega} \bigg|_{\omega=\epsilon_k} \right)^{-1}. \quad (4.5)$$

Численные расчеты этих величин для ряда точек в магнитной зоне Бриллюэна показывают существование хорошо определенных квазичастиц. Интенсивность квазичастичного пика значительно ослабевает по мере роста параметра U/t за счет вклада некогерентных состояний, которые здесь не учитывались. Так, при $U/t = 10$ оказывается уже $Z_k = 4,5$ (энергия в точке $(\pi/2, \pi/2)$ равна $\epsilon_k = 0,897t$), а при $U/t = 80$ $Z_k = 200$ ($\epsilon_k = 8,487t$ в точке $(\pi/2, \pi/2)$). Что касается затухания, в обоих последних случаях оно также мало и по порядку величины $\Gamma_k \sim 10^{-3}t$.

Таким образом, в широком интервале параметров U/t сохраняются хорошие квазичастичные свойства дырок при малой их концентрации.

Другим важным выводом, следующим из этих данных, является положение энергетического минимума в точке $(\pi/2, \pi/2)$. Это означает, что при допировании системы поверхность Ферми дырок будет формироваться вокруг точек $(\pm \pi/2, \pm \pi/2)$. Расчет показывает, что вокруг точки $(\pi/2, \pi/2)$ возникает замкнутая поверхность Ферми, сильно вытянутая вдоль границы зоны. Такие же поверхности возникают вокруг других эквивалентных точек. Таким образом, при низкой концентрации дырок топология поверхности Ферми многодолинная. При некоторой энергии ($\epsilon_k = 0,248t$) возникает односвязная поверхность с центром в точке $(0, 0)$. Эта граничная поверхность охватывает примерно 85% площади зоны Бриллюэна, откуда следует, что при концентрации дырок $n_h = 0,15$ должно происходить изменение топологии поверхности Ферми.

Вывод о том, что минимум энергии квазидырок лежит в точке $(\pi/2, \pi/2)$, был получен в работе [32] численными методами, а также подтвержден аналитическими расчетами в пределе $U \rightarrow \infty$. Однако вывод этот находится в противоречии с предсказаниями более ранней работы [44] о положении минимума в точке $(\pi, 0)$. Напомним, что положение минимума в точке $(\pi/2, \pi/2)$ ведет к р-симметрии решения уравнения БКШ для сверхпроводящей щели. Таким образом, вопрос о характере поверхности Ферми дырок в рассматриваемой модели, а значит, и о симметрии сверхпроводящего параметра порядка должен уточняться.

4.2. Численные расчеты квантовым методом Монте-Карло. В промежуточном режиме $U \sim t$ и при больших значениях параметра кулоновского отталкивания более надежную информацию могут дать прямые численные методы. Недавно двумерная модель Хаббарда была детально исследована с помощью специально построенного квантового метода Монте-Карло (КММК) [45, 46]. Одно из общих ограничений этого метода применительно к фермионным системам — температура, которая должна быть достаточно высока. В работах [45, 46] удалось разработать алгоритмы, которые можно использовать только для расчета кластерных систем, порядка 10 — 100 узлов на решетке.

Сравнение расчетов для кластеров различного размера $(6 \times 6, 16 \times 16)$ показывает устойчивость физических результатов при этих размерах кластеров. Расчеты проводились при электронных концентрациях $n = 1; 0,5$, а также при некоторых промежуточных, для температуры $T = t/6$ и при различных значениях параметра U/t . Были изучены важнейшие характеристики электронных состояний: распределение частиц по импульсам, энергетическая щель, затухание, а также магнитная структура. Последняя может быть описана магнитным структурным фактором

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_i e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} \langle m_{i+\mathbf{R}_i}^z m_i^z \rangle, \quad (4.6)$$

где $m_i^z = n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}$ — спиновая плотность на решетке. Результаты оказались следующими.

При половинном заполнении ($n = 1$) $S(\mathbf{q})$, вычисленный на кластере размером 8×8 , имеет выраженный пик на волновом векторе $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ (рис. 8), свидетельствующий о ближнем магнитном порядке неявного типа при конечной температуре. При уменьшении заполнения ($n = 0,83$) пик сдвигается вдоль линии $(\pi, \pi - \Delta q)$, где $\Delta q = 0,3$, или в эквивалентном направлении $(\pi - \Delta q, \pi)$. Интенсивность пика становится в несколько раз меньше. При $n = 0,72$ пик еще больше снижается и размывается, при этом он оказывается сдвинутым в том же направлении на величину $\Delta q = 0,4$. Таким образом, пик структурного фактора сдвигается не по диагонали ячейки обратной решетки, а по ее ре-

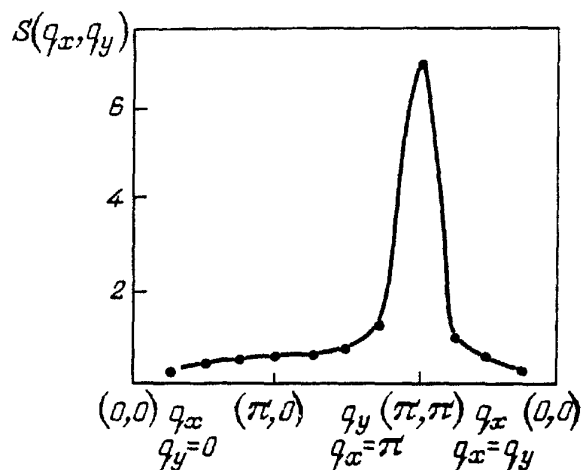


Рис. 8. Магнитный структурный фактор для двумерной модели Хаббарда при $n = 1$, $U/t = 4$, $T = 6/t$ [46]

бру. Это согласуется с предсказаниями RPA-теории и с численными расчетами по другому методу [47]. Конечно, хотелось бы знать, будет ли расходиться этот пик при $n < 1$, если размер кластера устремить к бесконечности, а температуру к нулю, т.е. имеется ли несоизмеримая магнитная ВСП-фаза при заполнении, отличном от половинного. Расчет, однако, не может быть выполнен при низких температурах.

Антиферромагнитный порядок (дальний или ближний) кардинально меняет спектр электронных состояний, различные характеристики которого были вычислены для двух электронных концентраций: $n = 1$ и $n = 0,5$. Одной из характеристик одночастичных состояний является распределение частиц по импульсам n_k . Оно находилось путем прямого вычисления одночастичной температурной функции Грина

$$G_{ij}(\tau) = -\langle T c_i(\tau) c_j^\dagger(0) \rangle \quad (4.7)$$

с помощью известного соотношения [18]

$$n_k = T \sum_n e^{-i\omega_n \tau} G(k, i\omega_n) \quad (\tau \rightarrow 0).$$

Результаты расчета показаны на рис. 9 (точечные линии). Сплошные кривые показывают фермиевскую функцию распределения для невзаимодействующих частиц

$$f(\epsilon_k) = \left(\exp \frac{\epsilon_k - \mu}{T} + 1 \right)^{-1},$$

где химпотенциал μ подбирается из условия, чтобы n равнялось 1 или 0,5. Как видно, распределение имеет ферми-подобный характер, однако значи-

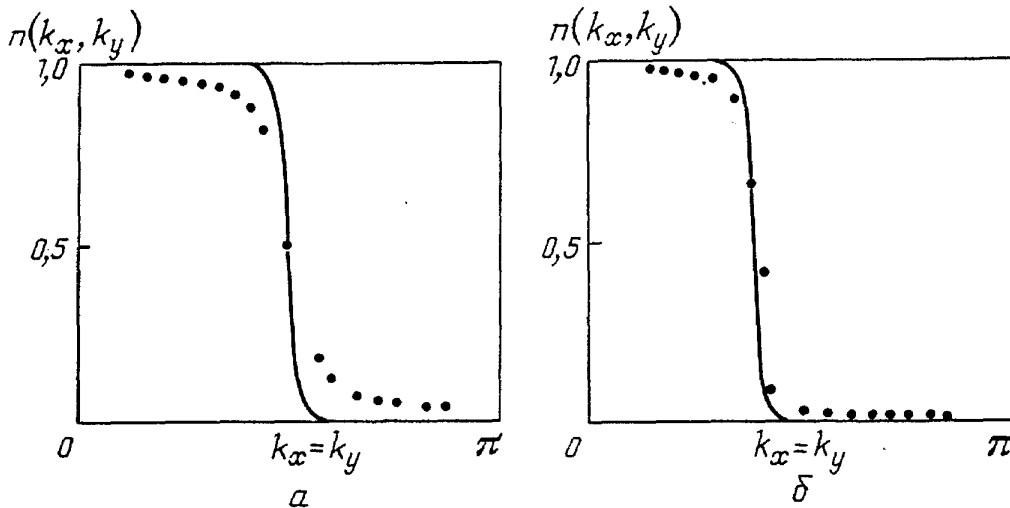


Рис. 9. Распределение частиц по импульсам при заполнении: $n = 1$ (а), $n = 0,5$ (б), $U/t = 4$, $T = t/6$ [46]

тельно отличается от распределения свободных частиц, в особенности для половинного заполнения. Это различие обусловлено возникновением щели на поверхности Ферми за счет магнитного порядка. Действительно, при $n = 1$ в приближении среднего поля для состояния ВСП имеем следующее распределение частиц по импульсам

$$n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right), \quad E_{\mathbf{k}} = \left(\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2 \right)^{1/2}. \quad (4.8)$$

Для параметров, соответствующих рис. 9, из уравнения (3.6) для щели следует значение $\Delta = 1,38t$, при котором формула (4.8) дает распределение n_k , хорошо согласующееся с данными расчетов по КММК.

В то же время при $n = 0,5$ система не имеет выраженного магнитного структурного фактора, поэтому формула (4.8) не может быть применена для этого случая. Распределение n_k можно попытаться получить, рассматривая поправку к собственной энергии электрона за счет кулоновского взаимодействия по теории возмущений. В наинизшем порядке по U поправка

$$\Sigma = \text{[Diagram: A trapezoid with a dashed top edge and a solid bottom edge. Inside, there are two curved lines with arrows pointing right, one above the other, representing a summation over paths.]}$$
 (4.9)

приводит к очень хорошему согласию с данными расчета по КММК, представленными на рис. 9. Это свидетельствует о том, что при заполнениях зоны, далеких от половинного, по-видимому, имеет место состояние ферми-жидкости. Более непосредственную информацию по этому вопросу дает прямое вычисление собственной энергии по формуле

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = G^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) - i\omega_n + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu, \quad (4.10)$$

где функция Грина $G(\mathbf{k}, i\omega_n)$ была найдена численно по методу КММК. Мнимая часть Σ , дающая структурную плотность одночастичных состояний, представлена на рис. 10.

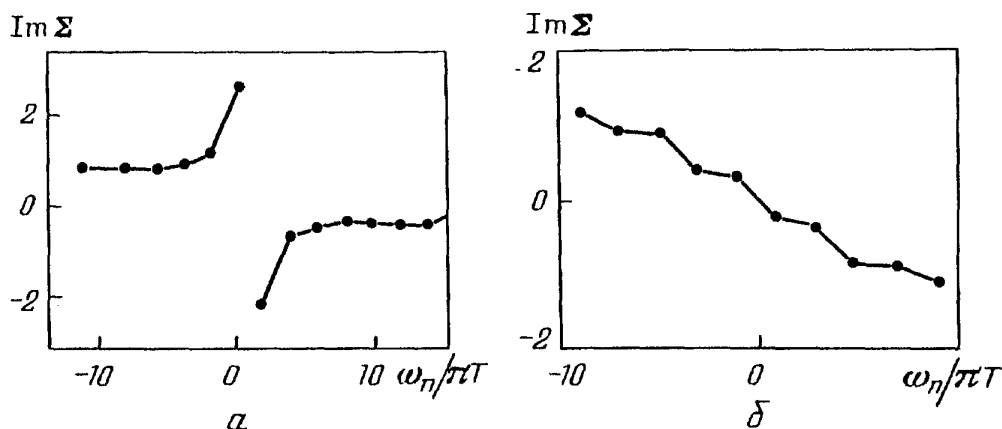


Рис. 10. Мнимая часть собственной энергии как функция частоты для $n = 1$, $\mathbf{k}_F = (\pi/2, \pi/2)$, $\mathbf{k}_F = (0, \pi)$ (а), $n = 0,5$, $k_F = (\pi/4, \pi/2)$ (б). Значения параметров: $U/t = 4$, $T = t/12$ [46]

Видно, что при половинном заполнении имеется щель на поверхности Ферми благодаря антиферромагнитному порядку в основном состоянии. Сравним этот результат с результатами теории возмущений. В приближении среднего поля [22]

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{\Delta^2}{i\omega_n + \epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (4.11)$$

Если положить вектор \mathbf{k} на поверхность Ферми, то $\varepsilon_{\mathbf{k}} = 0$ при $n = 1$, поэтому $\text{Im } \Sigma(\mathbf{k}_F, i\omega_n) = -\Delta^2/\omega_n$. Именно такого рода зависимость и получается из расчетов по методу КММК. С другой стороны, вдали от половинного заполнения поведение соответствует обычной ферми-жидкости: на поверхности Ферми имеется отрицательный наклон в частотной зависимости $\text{Im } \Sigma(\mathbf{k}_F, i\omega_n)$ (см. рис. 10,б). Вычисленная кривая находится в хорошем качественном согласии с результатами расчета по теории возмущений, включающим только поправку (4.9).

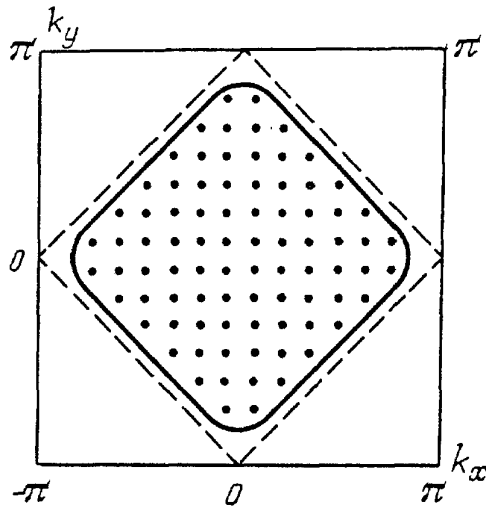


Рис. 11. Распределение частиц по импульсам для решетки размера 16×16 при концентрации $n = 0,87$ и параметрах $U/t = 4$, $T = t/6$. Штриховой линией показана поверхность Ферми для невзаимодействующих электронов при $n = 1$ [46]

Таким образом, расчеты по методу КММК величины $n_{\mathbf{k}}$ и $\text{Im } \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)$ подтверждают представление о существовании щели на поверхности Ферми при половинном заполнении зоны, тогда как вдали от него ($n = 0,5$) система ведет себя как обычная ферми-жидкость и характеризуется ферми-поверхностью. Для заполнения $n = 0,87$ также не было обнаружено следов щели в спектре. Распределение частиц по импульсам показано на рис. 11, где изображена зона Бриллюэна для решетки размера 16×16 . Черными квадратами обозначены \mathbf{k} -точки, для которых $n_{\mathbf{k}} > 0,5$ при параметрах $U/t = 4$, $T = t/6$. Сплошная линия, проходящая через эти точки, представляет ферми-поверхность для невзаимодействующих электронов ($U = 0$) при концентрации $n = 0,87$. Отсюда видно, что при относительно небольшом отклонении от половинного заполнения система ведет себя как ферми-жидкость. К сожалению, приведенные расчеты по методу КММК были выполнены только для умеренных значений параметра $U/t = 4$. Они показывают, что результаты приближения среднего поля для щели и распределения частиц по импульсам, получаемые в теории возмущений по параметру U/t , находятся в удовлетворительном согласии с численными расчетами. Однако для истинно сильно коррелированных систем ($U \gg t$) вопрос остается открытым. Кроме того, представленные расчеты были сделаны для достаточно высоких температур $T = W/48$, поскольку метод КММК трудно реализовать для более низких температур.

В краткой работе [47] сообщено о новом численном методе для исследования двумерной модели Хаббарда. В основе метода лежит вычисление функционала энергии системы с помощью какого-либо приближения, обеспечивающего выполнение микроскопических законов сохранения для числа час-

тиц, энергии, момента и др. и последующем вычислении различных корреляционных функций путем вариационного дифференцирования по внешним потенциалам. Утверждается, что метод может быть применен для расчета кластерных систем большого размера и для низких температур. Используя стандартные результаты для эффективного взаимодействия дырок через спиновые и зарядовые флуктуации при вычислении энергии, авторы смогли построить фазовую диаграмму на плоскости температура—концентрация дырок. Отметим, что вблизи половинного заполнения при концентрации дырок $n_h < 0,06$ реализуется антиферромагнитное состояние, а в интервале $0,6 < n_h < 0,18$ — сверхпроводящее состояние d-симметрии (для параметра $U/t = 4$). Максимум T_c порядка $0,01t$, что для исходной зоны ширины $8t = 1$ эВ составит 15 К. Это тот тип фазовой диаграммы, который имеет место в модельных ВТСП, где сверхпроводимость существует вне области антиферромагнитного упорядочения, но в непосредственной близости к ней.

Другой интересный результат этой работы — вычисление частотной зависимости мнимой части магнитной восприимчивости, из которой найден закон дисперсии спиновых возбуждений — парамагнонов. Скорость их в направлении $\langle 11 \rangle$ порядка $0,35ta$, что составляет $1,4t \text{ \AA}$ для решеточной постоянной $a = 4 \text{ \AA}$.

Аналогичного типа фазовая диаграмма была получена в детальной работе [48]. Там же показано, что учет паркетных диаграмм приводит к количественному совпадению с численными результатами КММК в области промежуточных значений параметра U/t .

II. Подход со стороны предельно сильного кулоновского взаимодействия

5. Исследование $(t - J)$ -модели в обобщенном приближении хаотических фаз.

5.1. *Магнитные состояния в $(t - J)$ -модели.* Одним из главных проявлений электронной корреляции в условиях сильного кулоновского отталкивания ($U \gg t$) является расщепление исходной электронной полосы на две хаббардовские подполосы, причем нижняя подполоса принадлежит одночастичным состояниям, а верхняя — двухчастичным, образованным "двойками" на одном узле. Расстояние между ними порядка U , поэтому в случае половинного или меньшего заполнения ($n < 1$) верхней полосой можно пренебречь. Тогда спектр электронов в нижней полосе (в парамагнитной фазе) в пределе $U \rightarrow \infty$ определяется квазичастичными энергиями $[1 - (n/2)]\epsilon_k$, где фактор $1 - (n/2)$ учитывает корреляционное сужение полосы. Этот результат приближенный и имеет скорее интерполяционный характер. Соответствующее приближение известно в литературе как приближение "Хаббард-1" [6].

В случае сильно коррелированной системы ($U \gg t$) регулярная теория возмущений должна строиться по параметру t/U , т.е. кулоновское взаимодействие на узле должно включаться в гамильтониан нулевого приближения, а кинетическая энергия рассматриваться как возмущение. Наиболее удобными динамическими переменными в этой ситуации являются операторы Хаббарда [6], описывающие переходы между возможными электронными состояниями в пределах одного узла. Например, гамильтониан $(t - J)$ -модели, состоящий из трех членов $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{kin}} + \mathcal{H}_{\text{eff}}$, записывается в этих терминах в виде

$$\mathcal{H}_{\text{kin}} = t \sum_{i, \Delta, \sigma} X_i^{\sigma 0} X_{i+\Delta}^{0 \sigma}, \quad (5.1)$$

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = J \sum_{i \Delta} (X_i^{-+} X_{i+\Delta}^{+-} - X_i^{++} X_{i+\Delta}^{--}), \quad (5.2)$$

а одноузельная энергия \mathcal{H}_0 представляет линейную форму от операторов Хаббарда.

Поскольку существует теорема Вика для операторов Хаббарда, возможно построение для модели Хаббарда теории возмущений в форме диаграммной техники (наиболее полно она описана в монографии [7]). В случае $(t - J)$ -модели, когда за возмущение берется $\mathcal{H}_{\text{int}} = \mathcal{H}_{\text{kin}} + \mathcal{H}_{\text{eff}}$, эта техника является своеобразной комбинацией диаграммной техники для ферми-систем и для спин-овых операторов [7]. Элементами ее являются фермионные функции Грина $G_\sigma(k)$ (обозначим их сплошными линиями с белыми и черными стрелками, отвечающими проекциям спина) и бозонные $D(k)$, которые обозначаются пунктирными линиями. Волнистые и точечные линии представляют соответственно "взаимодействия"

$$\varepsilon_k = t \sum_{\vec{\Delta}} e^{i\mathbf{k}\vec{\Delta}}, \quad J(\mathbf{k}) = \sum_{\vec{\Delta}} e^{i\mathbf{k}\vec{\Delta}}. \quad (5.3)$$

В стандартной теории возмущений по малому параметру U/t , которая применялась в первой части обзора, широко использовалось RPA-приближение, заключающееся в суммировании петлевых диаграмм. Для $(t - J)$ -модели было предложено GRPA-приближение (обобщенное приближение хаотических фаз) [12]. Оно заключается в том, что, так же как и в случае малого U/t , предлагается суммировать все возможные петлевые диаграммы. Их оказывается четыре типа:

$$\begin{aligned} \Pi &= \text{diagram with two solid lines and one wavy line} , & Q &= \text{diagram with two solid lines and one dotted line} , \\ \Lambda &= \text{diagram with two solid lines and one wavy line} , & \Phi &= \text{diagram with two solid lines and one dotted line} . \end{aligned} \quad (5.4)$$

Здесь фермионные линии отвечают электронным функциям Грина в приближении "Хаббард-1":

$$G_\sigma^0(k) = \frac{1}{i\omega_n - E(\mathbf{k})}, \quad E(\mathbf{k}) = \left(1 - \frac{n}{2}\right) \varepsilon_k - \mu. \quad (5.5)$$

В GRPA-приближении магнитная восприимчивость парамагнитной фазы выражается формулой [12]

$$\chi(k) = \frac{\chi_0(k)}{(1 - \Lambda(k))(1 - Q(k)) + \chi_0(k)(\Phi(k) + J(k))}, \quad (5.6)$$

где "затравочная" восприимчивость содержит локализованный и коллективизированный вклады

$$\chi_0(k) = \frac{nn_0}{T} \delta_{\omega_n, 0} - \Pi(k, i\omega_n). \quad (5.7)$$

Фактор n_0 зависит от отношения μ/T , причем при $T = 0$ $n_0 = 0$ для $n < n_c$ и $n_0 = 1$ для $n > n_c$, где n_c — критическая концентрация, при которой в системе возникают локализованные магнитные моменты. Оказывается, что в этой точке химпотенциал μ меняет знак. Возможно, использованное приближение, приводящее к слишком резкому изменению величины n_0 , является слишком грубым, но результат (5.6) и (5.7) отражает существование некоторого кроссовера в системе от коллективизированного магнетизма к локализованному.

Таким образом, при $n < n_c$ система ведет себя как коллективизированный магнетик, а при $n > n_c$ в ней проявляются одновременно черты коллективизированного и локализованного магнетика. В выражении (5.7) это соответствует двум вкладам в магнитную восприимчивость — кюри-вейссовскому и паулиевскому.

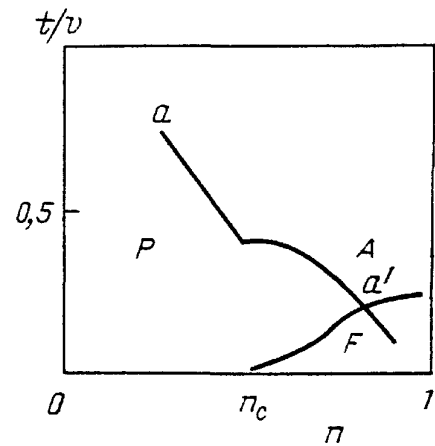


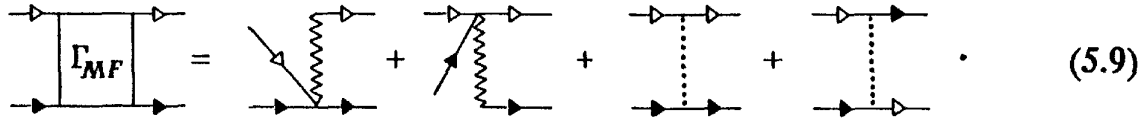
Рис. 12. Магнитная фазовая диаграмма для трехмерной $(t-J)$ -модели на плоскости $(t/U, n)$ при $T = 0$ [12]. Указаны пара(P)-, ферро(F)- и антиферро(A)-фазы

Анализ выражения (5.6) для трехмерного случая приводит к магнитной фазовой диаграмме, показанной на рис. 12. Антиферромагнитная фаза А характеризуется вектором $\mathbf{k}_0 = (\pi, \pi, \pi)$; она реализуется при достаточно больших значениях эффективного обменного интеграла и в концентрационном интервале, примыкающем к краю $n = 1$. Заметим, что в точке пересечения линий ферро- и антиферромагнитных неустойчивостей следовало бы учитывать взаимодействие параметров порядка, которое перестроило бы фазовую диаграмму в окрестности этой точки.

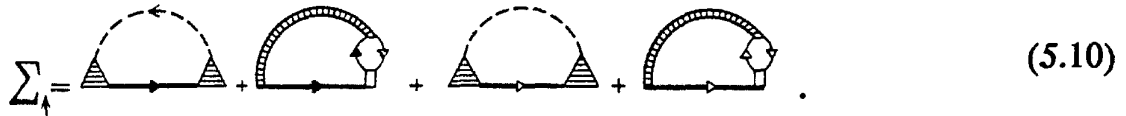
5.2. Куперовское спаривание через спиновые флуктуации в парамагнитной фазе. Эффективное взаимодействие электронов в синглетном канале определяется в GRPA-приближении следующими вкладами:

$$\begin{aligned} & \text{Diagram with } \Gamma_c^0 \text{ box} = \text{Diagram with } \Gamma_{MF} \text{ box} + \\ & + \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} \cdot \end{aligned} \quad (5.8)$$

Четыре последних графика описывают взаимодействие через спиновые флуктуации с переворотом спина (первая пара графиков) и с сохранением спина (вторая пара графиков). Здесь заштрихованные четырехчастичные и трехчастичные вершинные части берутся в GRPA-приближении, т.е. представляются цепочками, составленными из петель (5.4). Пунктирная линия в первом графике и в третьем представляют поперечную и продольную спиновые функции Грина. Наконец, первый график в первой части обозначает затравочное взаимодействие, соответствующее гамильтониану $\mathcal{H}_{\text{kin}} + \mathcal{H}_{\text{eff}}$:



Одновременно следует записать собственно-энергетическую часть, обусловленную взаимодействием со спиновыми флуктуациями. Например, для электрона со спином \uparrow



Имеется определенное соответствие выражений (5.8) и (5.10) для Γ_c^0 и выражений (2.9) и (2.16), описывающих ситуацию с $U \ll t$. В случае сильной корреляции возникает дополнительно два графика в выражениях для Γ_c^0 и для Σ , связанных с возникновением в системе локализованных спиновых состояний (графики первый и третий в (5.8) и (5.10)). Оставшаяся пара графиков (второй и четвертый) учитывает взаимодействие электронов через флуктуации коллективизированных состояний. Именно такого типа графики и присутствуют в теории сверхпроводимости в коллективизированных магнетиках [2]. Спиновые флуктуации в них — парамагноны — осуществляют связь между электронами. Заштрихованные линии во втором и четвертом графиках из (5.8) и (5.10) соответствуют парамагнотному пропагатору. Существенным различием между системами с сильным и слабым кулоновским взаимодействием остается также тип затравочных вершин. Так, в технике с операторами Хаббарда мы видим вершины с тремя фермионными линиями (см. выражение (5.9)), что характерно для всех систем, описываемых операторами, коммутатор или антикоммутатор для которых не есть C -число.

С помощью затравочного четырехполюсника Γ_c^0 составим уравнение для Γ_c в куперовском канале. Оно имеет ту же форму (2.15), которую мы имели в теории со слабым кулоновским взаимодействием.

В графиках (5.8) и (5.10) жирные промежуточные линии соответствуют перенормированной функции Грина (2.18), где $E(\mathbf{k})$ теперь соответствует энергии электрона в нижней хаббардовской зоне (см. выражение (5.5)). Мы приходим, таким образом, к двум связанным уравнениям на $Z(k)$ и $\varphi(k)$ (последняя означает вершинную часть в куперовском канале), которые имеют стандартную форму уравнений теории сверхпроводников с сильной связью (2.19) и (2.20). В данном случае спаривательное взаимодействие V и полное взаимодействие V_z состоят из двух вкладов [50]

$$V_z = V_m + V_c, \quad V = -V_m + V_c,$$

где

$$V_m(\mathbf{k}\mathbf{k}', i\omega_n - i\omega_{n'}) = \frac{3}{2} \frac{\epsilon_k^2 \chi_0 - \epsilon_{k'}(2 - \Lambda - Q) - (\Phi + J)}{(1 - \Lambda)(1 - Q) + \chi_0(\Phi + J)}, \quad (5.11)$$

$$V_c(\mathbf{k}\mathbf{k}', i\omega_n - i\omega_{n'}) = \frac{1}{2} \frac{\epsilon_k^2 \chi_0^c + \epsilon_{k'}(2 + \Lambda + Q) - (\Phi - J)}{(1 + \Lambda)(1 + Q) + \chi_0^c(\Phi - J)}. \quad (5.12)$$

Все величины в (5.11) и (5.12) берутся при аргументе $k - k'$.

Знаменатель в (5.11) совпадает со знаменателем магнитной восприимчивости, и все выражение V_m следует трактовать как вклад в эффективное взаимодействие от магнитных флуктуаций, тогда как V_c представляет вклад от зарядовых флуктуаций в системе. $\chi_0^c(k)$ — затравочная диэлектрическая восприимчивость, V_c в (5.12) совпадает со знаменателем диэлектрической восприимчивости. Вблизи границы фазового перехода в магнитоупорядоченное состояние зарядовым членом можно пренебречь, так что $V_z = V_m$ и $V = -V_m$. Поскольку полное взаимодействие должно быть положительным, мы видим, что "спаривательная" часть взаимодействия через магнитные флуктуации имеет характер отталкивания, как и в случае слабого кулоновского взаимодействия.

Как мы видели в [2], при отталкивательном парном потенциале при $U \ll t$ возможно появление анизотропного сверхпроводящего параметра порядка. Можно показать, что это же имеет место и в случае $U \gg t$, хотя ситуация здесь оказывается гораздо сложнее из-за появления в системе локализованных магнитных моментов.

Аналитическое исследование интегральных уравнений (2.19) и (2.20) с ядрами (5.11) и (5.12) представляет очень трудную задачу, поэтому мы ограничимся простейшей ситуацией, позволяющей установить основные тенденции в структуре решений. Именно: рассмотрим предел слабой связи аналогично тому, как это делается в электрон-фононной модели сверхпроводимости.

Заметим предварительно, что в выражении для $\chi_0(\mathbf{k}, i\omega_n)$ содержится квазистатический член $\sim \delta_{\omega_n, 0}$, связанный с локализованными магнитными моментами. Эффективное взаимодействие поэтому также содержит квазистатический и динамический вклады; обозначим их соответственно V^{st} и V^{dyn} . Последний связан с коллективизированными состояниями. Статический вклад легко отделить в выражениях (5.11) и (5.12). Если предположить, что для нашей системы остается справедливой ферми-жидкостная картина, уравнения для Z и φ можно усреднить по поверхности Ферми. В пределе промежуточной связи тогда имеет место следующее уравнение на T_c :

$$\ln \frac{T_c}{T_{c0}} = \psi\left(\frac{1}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2} + \rho\right), \quad (5.13)$$

где

$$T_{c0} = \frac{2\gamma}{\pi} \omega_m \exp \left[- \frac{1 - (n/2) + \lambda_z}{\lambda_l} \right], \quad (5.14)$$

$$\rho = \frac{1}{2} \frac{\eta_z - \eta_l}{1 - (n/2) + \lambda_z}; \quad (5.15)$$

здесь, как и раньше, ω_m — предельная частота спин-флуктуационного спектра, а $\lambda_z, \lambda_l, \eta_z$ и η_l — усредненные по поверхности Ферми выражения для эффективных взаимодействий на нулевой частоте:

$$\lambda_z = \langle \langle V_z^{\text{dyn}}(\mathbf{k}\mathbf{k}', 0) \rangle \rangle \rho, \quad \lambda_l = \langle \langle \psi_l(\mathbf{k}) V^{\text{dyn}}(\mathbf{k}\mathbf{k}', 0) \psi_l(\mathbf{k}') \rangle \rangle \rho, \quad (5.16)$$

$$\eta_z = \langle \langle V_z^{\text{st}}(\mathbf{k}\mathbf{k}', 0) \rangle \rangle \rho, \quad \eta_l = \langle \langle \psi_l(\mathbf{k}) V^{\text{st}}(\mathbf{k}\mathbf{k}', 0) \psi_l(\mathbf{k}') \rangle \rangle \rho, \quad (5.17)$$

где $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ — символ усреднения по импульсу \mathbf{k} и \mathbf{k}' , а λ_l и η_l — константы связи для сверхпроводящего параметра порядка l -симметрии, когда решение уравнения на $\varphi(\mathbf{k})$ ищется в виде (2.23). Разделение взаимодействий (5.11) и (5.12) на V^{st} и V^{dyn} легко получить, учитывая формулу (5.7) для χ_0 .

Формулы (5.13) и (5.14) имеют смысл, если только $\lambda_l > 0$ (полная константа связи λ всегда положительна). В этом случае λ определяет температуру сверхпроводящего перехода за счет спаривания через динамические спиновые флуктуации. Уравнение (5.13), по форме совпадающее с соответствующим уравнением для сверхпроводников с магнитными примесями [5], описывает распаривательный механизм благодаря появлению локализованных магнитных моментов в режиме $n > n_c$, когда η_z и η_l отличны от нуля. В режиме коллективизированного магнетизма ($n < n_c$) параметры η_z и η_l тождественно равны нулю и T_c определяется формулой (5.14).

Таким образом, наиболее благоприятные условия для существования сверхпроводящего состояния в $(t - J)$ -модели (в парамагнитной фазе металла!) реализуются в режиме коллективизированного магнетизма ($n < n_c$) вблизи линии антиферромагнитной неустойчивости (линия a на рис. 12). Как и в случае $U \ll t$, несмотря на отталкивательный характер электронного взаимодействия через спиновые флуктуации, величина λ_l вблизи этой линии может быть положительной для d -симметрии параметра порядка. Соответствующий концентрационный интервал, однако, далек от половинного заполнения, а именно эта область актуальна для описания реальных ВТСП-материалов. Поскольку при $n > n_c$ в $(t - J)$ -модели возникает антиферромагнитное состояние (это видно уже из фазовой диаграммы на рис. 12, полученной в GRPA-приближении), актуальной задачей является исследование возможности появления сверхпроводящего состояния внутри антиферромагнитной фазы. Мы видели в п. 3, что при слабом кулоновском взаимодействии спаривательный потенциал через спиновые флуктуации существенно возрастает в антиферромагнитной фазе благодаря спин-корреляционному механизму. Ближайшей задачей теории сильно коррелированных систем является решение проблемы дырки (магнитного полярона) в антиферромагнитной матрице в рамках $(t - J)$ -модели, а затем изучение спаривательного взаимодействия дырок через магнитные флуктуации.

Возвращаясь к основному содержанию данного параграфа, отметим, что матричный элемент (5.11) для эффективного взаимодействия электронов через спиновые степени свободы в самом наиминимальном по параметру приближении соответствует так называемому кинематическому механизму спаривания [52, 53] (см. также [54]). Этот механизм возникает, если в выражении (5.8) для эффективного взаимодействия оставить только первый график, выбросив все члены, дающие взаимодействие через флуктуации. Как видно из (5.11), в этом приближении при $n > n_c$ дополнительно возникает спаривательный потенциал; однако флуктуации сильнее всего перенормируют его и подавляют сверхпроводимость за счет параллельного механизма распаривания локализованными магнитными моментами, включающегося как раз при $n > n_c$. Такой же вывод в отношении кинематического взаимодействия сделан в работе [55].

6. Дырка в $(t - J)$ -модели с антиферромагнитным упорядочением.

6.1. Качественная картина в изинговском пределе. Задолго до современных работ, касающихся проблемы движения дырки в антиферромагнитном состоянии сильно коррелированной системы, появились три работы [56 — 58], внесшие фундаментальный вклад в понимание этой проблемы. В этих работах рассматривалось состояние дырки в нееевском антиферромагнетике, описываемом $(t - J)$ -моделью в изинговском приближении гамильтониана обменного взаимодействия. В работе [57] впервые был дан качественный анализ движения дырки, которое было исследовано нами в п. 1 при обсуждении динамики пары дырок в двумерной антиферромагнитной матрице (см. рис. 1). При движении дырки в строго нееевском двухподрешеточном трехмерном антиферромагнетике неизбежно возникает вдоль ее траектории неправильное расположение спинов, требующее затрат энергии $\sim J$, где l — длина траектории. Вследствие этого движение дырки становится энергетически невыгодным, и она автолокализуется. Центром автолокализации дырки (или лишнего электрона) является узел, занятый дыркой, при котором сохраняется идеальное антиферромагнитное расположение спинов. Такое состояние является аналогом трехмерного осциллятора, который формируется частицей, движущейся не в квадратном, как обычно, а в линейном потенциале. В таком потенциале возникает связанное состояние с энергией $\sim (J_z/t)^{2/3}t$, отсчитанной от дна зоны. Квазиосцилляторное состояние существенно отличается от поляронного, в котором деформация антиферромагнитной структуры переносится дыркой (или электроном) по решетке, пусть даже с достаточно большой эффективной массой. В квазиосцилляторном состоянии возникающая локальная деформация магнитной структуры не переносится по решетке, если не включать поперечных компонент спинов гейзенберговского обменного гамильтониана. Последние разрешают процессы спонтанного переворота спинов, позволяющие релаксировать созданной деформации структуры и, следовательно, разрешающие движение дырки.

Поэтому в изинговском пределе трансляционное движение дырки невозможно (эффективная масса равна бесконечности), спектральная плотность дырки $A(\mathbf{k}, \omega)$ с некоторым фиксированным волновым вектором \mathbf{k} не имеет квазичастичного пика, который означал бы когерентное состояние дырки. Соответствующая дырке спектральная плотность имеет некогерентный характер [58]. Точнее, в работе [58] было показано следующее: антиферромагнитное

состояние с точно половинным заполнением ($n = 1$) имеет плотность одночастичных скоррелированных состояний, занимающих полосу энергии от $-w_0 zt$ до $w_0 zt$, где $w_0 \approx 0,75$. Таким образом, имеет место 25 % корреляционное сужение исходной полосы $(-zt, zt)$. Внесение дырки приводит к размытию нижнего края этой полосы — появлению хвоста плотности состояний, характерному для теории примесей в металле [59]. Этот хвост соответствует некогерентному вкладу в величину $A(\mathbf{k}, \omega)$, возникающему из взаимодействия дырки с флуктуациями магнитного порядка.

В описанную выше картину квазиосциллятора была внесена поправка [62]. Оказалось, что если дырка совершит петлю, перескакивая по соседним узлам, образующим квадратную ячейку двумерной решетки (см. рис. 1), причем обойдет ее полтора раза, то она окажется на противоположном конце диагонали квадрата, и при этом в антиферромагнитной решетке не произойдет никаких изменений. Это означает, что дырка может передвигаться по магнитной решетке без затраты энергии на ее деформацию. Вклад подобного типа траектории (петля Тругмана) приводит, очевидно, к конечной подвижности дырки даже в изинговском пределе.

Как уже отмечалось, включение поперечных компонент спина приводит к конечной подвижности дырок. Эффективная масса дырки определяется процессом рассеяния на спиновых флуктуациях (спиновых волнах). При низких температурах возможно только испускание спиновых волн с низкими энергиями. Если плотность состояний в спектре низкоэнергетических спинов возбуждений мала, можно ожидать хорошо определенные когерентные состояния дырок как квазичастиц вблизи дна дырочного спектра, которые имеют конечное, но не слишком малое время жизни. При более высоких энергиях рассеяние возрастает и квазичастичный пик должен размываться. Самосогласованная теория квазичастичного состояния дырки была развита в работе [44], где показано, что в двумерной модели существует квазичастичный пик в спектральной плотности $A(\mathbf{k}, \omega)$. Этой работе, которая более детально будет изложена ниже, предшествовали исследования для одномерной модели [60], а также для двумерной [61, 62].

6.2. Самосогласованная теория квазичастичного состояния. Для того чтобы включить в теорию изинговский предел, качественно обсужденный только что, рассмотрим анизотропную модель с двумя обменными параметрами J_z (при члене $S_i^z S_j^z$) и J_\perp (при поперечных компонентах спина). Введем соответствующие изменения в обменную часть гамильтониана (1.2) ($t = J$)-модели и пренебрежем также кулоновским членом. Рассмотрим систему с половинным заполнением (неелевское основное состояние), в которую внесена одна дырка. Чтобы найти основные характеристики дырки, взаимодействующей со спиновыми флуктуациями, построим эффективный гамильтониан системы. Он состоит из двух членов: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}}$, где \mathcal{H}_0 — спин-волновой гамильтониан, а \mathcal{H}_{int} описывает взаимодействие дырки со спиновыми волнами [44]:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{q}} E_{\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{q}}^+ \beta_{\mathbf{q}}, \quad (6.1)$$

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = -zt \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ (u_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{q}} + v_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{q}}^+) + \text{к.с.}; \quad (6.2)$$

где использована дисперсионная связь $\text{Re } \Sigma$ и $\text{Im } \Sigma$, причем $\Gamma(\mathbf{k}, \varepsilon) = 1/\pi \text{Im } \Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon)$.

В изинговском пределе ($\alpha \rightarrow 0$) уравнения (4.4), (4.5) дают $a_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$, т.е. квазичастичных состояний нет — спектр некогерентный [44]. При конечных, но малых α все величины могут быть разложены по степеням $\alpha \ll 1$. Это дает следующие оценки для интенсивности когерентного состояния $a_{\mathbf{k}}$, ширины дырочной зоны δW и эффективной массы m^* для двумерной модели:

$$a_{\mathbf{k}} \approx \frac{J_z}{t}, \quad \delta W \sim J_{\perp}, \quad m^* \approx \frac{t}{J_z} m. \quad (6.9)$$

Таким образом, даже при условии $J_z \ll t$ имеются квазичастичные состояния дырок; они образуют полосу вблизи начала спектра, соответствующую энергиям порядка $-zt$, которая имеет ширину порядка J_{\perp} . Большая часть состояний дырки имеет некогерентный характер; спектр этих состояний простирается на интервал энергии порядка zt , лежащий выше полосы квазичастичных состояний.

Перейдем теперь к изотропному случаю ($\alpha = 1$), когда $J_z = J_{\perp} \equiv J$. В спектре спиновых возбуждений щель отсутствует. Низкоэнергетические возбуждения имеют мнимый закон дисперсии, так что в двумерном случае плотность состояний в спин-волновом спектре есть также мнимая функция энергии, вследствие чего процесс рассеяния дырки на спиновых волнах не разрушает полностью квазичастичного состояния. При больших энергиях дырки ($\omega \gtrsim J$) вследствие большого числа спиновых возбуждений спектр дырки становится некогерентным. Из приведенных соображений становится ясно, что при энергии дырки $\omega \lesssim J$ можно предполагать, что полюсной вклад в функцию Грина дырки (4.6) будет доминировать; тогда можно определить вычет $a_{\mathbf{k}}$, подставив в уравнение (6.3) в качестве $G(\mathbf{k}, \omega)$ выражение (6.4), в котором в качестве Σ берется ее полюсная часть. Таким образом, мы получаем неравенство

$$a_{\mathbf{k}} \leq \frac{1}{1 + t^2 \sum_{\mathbf{q}} f(\mathbf{k}, \mathbf{q}) \frac{a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}{(\omega_{\mathbf{k}} - \omega_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - E_{\mathbf{q}})^2}}, \quad (6.10)$$

откуда следует оценка для размерности $D = 2$:

$$a_{\mathbf{k}} \lesssim \frac{J}{t}, \quad (6.11)$$

подтверждающая существование квазичастичного пика. Вследствие этого пика некогерентная часть спектральной функции постоянна в широкой области энергий порядка t : $A(\mathbf{k}, \omega) \approx 1/t$.

Таким образом, проведенное исследование показывает, что для двумерного гайзенберговского антиферромагнетика, описываемого $(t - J)$ -моделью, дырка является когерентной квазичастицей с интенсивностью пика $\sim J/t$. Этот пик локализован приблизительно у края исходной полосы $-zt$ ($z = 4$) и имеет ширину порядка J . Сразу за пределами этого пика имеется полоса некогерентных состояний с шириной порядка t .

6.3. Численные расчеты методом точной диагонализации. Все эти важ-

здесь $\beta_{\mathbf{q}}$ — бозе-оператор уничтожения магнона, $a f_{\mathbf{k}}$ — ферми-оператор уничтожения дырки; $E_{\mathbf{q}}$ — энергия магнона, а $u_{\mathbf{q}}$ и $v_{\mathbf{q}}$ — коэффициенты преобразования, диагонализующего обменный гамильтониан спин-волнового приближения. Имеем

$$E_q = zJ_z(1 - \alpha^2\gamma_q^2)^{1/2}, \quad \gamma_q = \frac{1}{z} \sum_{\vec{\Delta}} e^{iq\vec{\Delta}},$$

$$u_q^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{1}{(1 - \alpha^2\gamma_q^2)^{1/2}} \right], \quad v_q^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{(1 - \alpha^2\gamma_q^2)^{1/2}} \right],$$

причем $\alpha = J_{\perp} / J_z$ — параметр обменной анизотропии. Эффективный гамильтониан (6.1) — (6.2) возникает из следующего представления исходных ферми-операторов $c_{i\sigma}^+$ — через вспомогательный фермионный оператор f_i и бозонный оператор $b_{i\sigma}^+$: $c_{i\sigma}^+ = f_i b_{i\sigma}^+$.

Исследуем функцию Грина $G(\mathbf{k}, \omega)$ дырки, построенной на операторах f_i и f_i^+ . В духе приближений, использованных здесь уже неоднократно, возьмем собственно-энергетическую часть в виде

$$\Sigma = \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array}, \quad (6.3)$$

где двойная сплошная линия — самосогласованная функция Грина дырки, а двойная пунктирная линия — функция Грина спиновых волн. Таким образом, в приближении (6.3) пренебрегается перенормировкой вершинных частей дырка-магнонного взаимодействия (6.2). Таким образом, функция Грина определяется из следующего самосогласованного интегрального уравнения:

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \sum_{\mathbf{q}} f(\mathbf{k}, \mathbf{q}) G(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - E_{\mathbf{q}})}, \quad (6.4)$$

где $f(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ — квадрат амплитуды электрон-магнонного взаимодействия

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = z^2 t^2 |\gamma_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} + \gamma_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{q}}|^2. \quad (6.5)$$

Квазичастичные свойства дырки определяются величиной полюсного вклада в функцию Грина, которую запишем в виде

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{a_{\mathbf{k}}}{\omega - \omega_{\mathbf{k}}} + G_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega), \quad (6.6)$$

где второй член представляет вклад некогерентных состояний. Полюс $\omega_{\mathbf{k}}$ находится из уравнения

$$\omega_{\mathbf{k}} = \Sigma(\mathbf{k}, \omega_{\mathbf{k}}), \quad (6.7)$$

а вычет в полюсе a_k дается формулой (4.8), которую можно записать в виде

$$a_k = \frac{1}{1 + \int d\varepsilon \frac{\Gamma(k, \varepsilon)}{(\varepsilon - \omega_k)^2}}, \quad (6.8)$$

ные предсказания теории [57, 58, 61, 62] нуждаются в подтверждении численными расчетами, поскольку приближения, использованные в них, недостаточно контролируемы. Однако численное изучение рассматриваемой проблемы также очень трудно. Имеются два основных метода: метод Монте-Карло и метод точной диагонализации гамильтониана. В методе Монте-Карло трудно, однако, рассматривать низкие температуры и достаточно высокие концентрации примесей из-за "проблемы знака" в детерминанте для ферми-частиц. В методе точной диагонализации эти трудности отсутствуют, однако его можно практически реализовать только для малых кластеров, поскольку число переменных, характеризующих состояние кластера, экспоненциально растет с ростом числа частиц в нем (3^N для $(t - J)$ -модели и 4^N для модели Хаббарда). Поэтому полный расчет возможен в случае $(t - J)$ -модели для двумерного кластера размером 4×4 .

Первые работы, выполненные независимо в различных группах [63 — 68] на кластере размером 4×4 с одной дыркой, сразу же подтвердили многие из основных предсказаний теории: существование квазичастичного пика вблизи дна дырочного спектра, а также широкой полосы некогерентного спектра выше этого пика и большой эффективной массы дырки, обусловленной ее взаимодействием с магнитным порядком. Расчеты показали, что квазичастичный пик появляется при не очень малых значениях параметра $J/t > J_c/t = 0,075$ [67], при которых в идеальной системе (в отсутствие дырки) основное состояние антиферромагнитно, а в присутствии дырки суммарный спин состояния $S^z = 1/2$. При меньших значениях J/t основное состояние кластера имеет спин $S^z = 15/2$, что означает появление насыщенного ферромагнетизма в соответствии с теоремой Нагаока [69]. В ферромагнитном состоянии импульс основного состояния (который нужно приписать дырке) $\mathbf{k} = 0$, тогда как в состоянии со спином $S^z = 1/2$ он отличен от нуля:

$$\mathbf{k} = (\pm \frac{\pi}{2}, \pm \frac{\pi}{2}), \quad \mathbf{k} = (\pi, 0), \quad \mathbf{k} = (0, \pi). \quad (6.12)$$

Вырождение связано, по-видимому, с высокой симметрией кластера. Замечательно, что если взять только изинговскую часть взаимодействия в гамильтониане Гейзенберга, то эти результаты меняются: основное состояние со спином $S^z = 1/2$ имеет импульс $\mathbf{k} = 0$. Это означает, что квантовые флуктуации от поперечных спиновых компонент играют существенную роль в поведении дырки. Заметим также, что конечный импульс основного состояния с $S^z = 1/2$ был получен в спин-волновом приближении с помощью вариационного метода [61].

В цитированных работах варьировались также размеры кластера и была показана устойчивость основных физических выводов по отношению к его размеру, так что данные, полученные для малого кластера 4×4 , могут отражать свойства бесконечно большой системы. Причиной этого является высокая степень локализации возмущения антиферромагнитной матрицы, вносимого дыркой.

Наиболее полные результаты были получены в работе [70], где так же исследовался кластер 4×4 с периодическими граничными условиями. Мы приведем некоторые результаты этих расчетов. Прежде всего отметим, что в широкой области изменения параметра J/t вычислена спектральная плотность дырочного состояния $A(\mathbf{k}, \omega)$. Типичный спектр показан на рис. 13. С ростом

параметра J/t главный пик сдвигается вправо, а интенсивность увеличивается; тонкая структура двух разных массивов исчезает и остаются только два пика слабой интенсивности. В интервале $0,2 \leq J/t \leq 1,0$ положение первых трех пиков (I, II, III) меняется с параметром J/t по степенному закону:

$$\begin{aligned} \text{I. } E_h &= -3,17 + 2,83(J/t)^\alpha t, \quad \alpha = 0,73, \\ \text{II. } E_h &= -3,13 + 5,36(J/t)^\alpha t, \quad \alpha = 0,70, \\ \text{III. } E_h &= -3,23 + 6,26(J/t)^\alpha t, \quad \alpha = 0,63. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Для других волновых векторов $\mathbf{k} = (\pi/2, 0)$, $(\pi, \pi/2)$, $(\pi, 0)$ и $(0,0)$ имеет место также степенной закон с близкими значениями $\alpha < 1$.

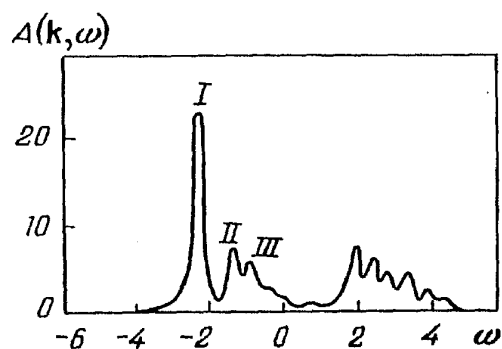


Рис. 13. Спектральная плотность дырки для $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$ при $J/t = 0,2$ [70]

Степенное поведение положения пиков может быть связано с дискретными уровнями дырки в линейном потенциале (модель квазиосциллятора [57]), когда учитывается только изинговская часть обменного взаимодействия. В этом случае возникает дискретная система уровней, отвечающая собственным значениям уравнения Эйри [44, 57, 61]:

$$E_h = -2z^{1/2}t + a_n(J_z/t)^{2/3}t. \quad (6.14)$$

Первые значения a_n (2,33; 4,08; 5,52) находятся в хорошем согласии с коэффициентами при $(J/t)^\alpha$ в выражениях (6.13), равно как и значения $\alpha \approx 2/3$. Этот факт удивителен, поскольку следовало бы ожидать, что поперечная часть гейзенберговского обмена должна размывать потенциальную яму, создаваемую дыркой за счет изинговской части; однако это не происходит, как мы видим из совпадения результатов расчета (6.13) с теоретической формулой (6.14) для $(t - J)$ -модели, по крайней мере для первых уровней квазиосциллятора. Формула (6.14) при $J_z = 0$ дает положение нижнего края спектра квазичастиц — $2z^{1/2}t$, которое было получено в работе [58] как результат корреляционного сужения полосы (как показано в [44], фактор $(z - 1)^{1/2}$ в работе [58] должен быть заменен на фактор $z^{1/2}$).

Ширина Γ квазичастичного состояния (отвечающего первому пику) является практически линейной функцией J/t :

$$\Gamma/t = -0,14 + 1,97(J/t)^{0,98}, \quad 0,1 \leq J/t \leq 0,4, \quad (6.15)$$

в соответствии с теоретическими вычислениями [44, 71]. Интенсивность пика $a_k \sim (J/t)^{0,5}$ отличается от предсказаний работы [44], где $a_k \sim J/t$, но находится в хорошем согласии с предсказаниями недавней работы [71].

Суммируя представленные результаты, можно утверждать, что численные расчеты подтверждают квазичастичные свойства дырки в $(t - J)$ -модели, как было показано в [44]. Однако расчеты не показали некогерентного вклада в $A(\mathbf{k}, \omega)$, хотя они подтвердили изинговский характер квазиосцилляторного состояния. Вместо некогерентного фона присутствует тонкая структура спек-

тра. Этот результат неожидан, поскольку спиновые флуктуации в гейзенберговской модели (спиновые волны), казалось бы, должны размывать все близкие пики и создавать тем самым некогерентный фон. В связи с этим было бы важным проверить расчеты на кластерах большего размера, чем 4×4 .

В заключение представим расчет полной плотности состояний $\rho(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}, \omega)$ в спектре

дырок (рис. 14). Мы видим тонкую структуру спектра. Пики, помеченные разными цифрами, соответствуют вкладам с различными волновыми векторами: I $(\pi/2, \pi/2)$, $(\pi/2, \pi)$, $(\pi/2, 0)$; II $(0, 0)$; III (π, π) . Таким образом, трудно говорить о некогерентности спектра дырок по результатам расчета малого кластера.

В этой же работе методом точной диагонализации изучалась исходная модель Хаббарда. Ввиду большого числа состояний на узел авторы вынуждены были брать кластеры меньшего размера с $N = 8$ и 10. В пределе больших U результаты количественно согласуются с данными численного расчета по $(t - J)$ -модели. При умеренных значениях U также наблюдаются квазичастичные пики вблизи дна полосы дырочных состояний.

Результаты расчета по методу точной диагонализации [70] и по методу Монте-Карло [72] при промежуточных значениях U находятся в удовлетворительном согласии друг с другом. Обращаем также внимание на ряд последних работ [73 — 76].

6.4. Связанное состояние дырок. В ряде работ [64, 77 — 80] были получены свидетельства образования связанных состояний дырок из расчетов кластеров 4×4 , содержащих несколько дырок при различных конфигурациях. Было обнаружено, что дырки предпочитают находиться на ближайших расстояниях друг от друга, образуя связанные состояния. Сам этот факт неудивителен, поскольку дырка разрушает четыре обменные связи в решетке, если она изолирована. Следовательно, на две дырки, являющиеся ближайшими соседями, приходится 7 разрушенных связей вместо 8, если они разнесены на большие расстояния. Эти результаты были подтверждены расчетами на большом кластере 8×8 . Если имеется большая концентрация дырок, минимизация энергии дает такие их распределения, при которых они образуют отдельный дырочный кластер.

В работе [80] исследовалась динамическая парная восприимчивость дырок — спектральная плотность коррелятора $\langle \Delta_l^+(t) \Delta_l(0) \rangle$, где

$$\Delta_l^+ = \sum_{\mathbf{k}} \psi_l(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ c_{\mathbf{Q}-\mathbf{k}\downarrow}^+$$

— оператор рождения куперовской пары l -симметрии. Расчет на кластере 4×4 показал существование острого когерентного низколежащего пика d -симметрии для широкого интервала изменения параметра J/t , где электронная

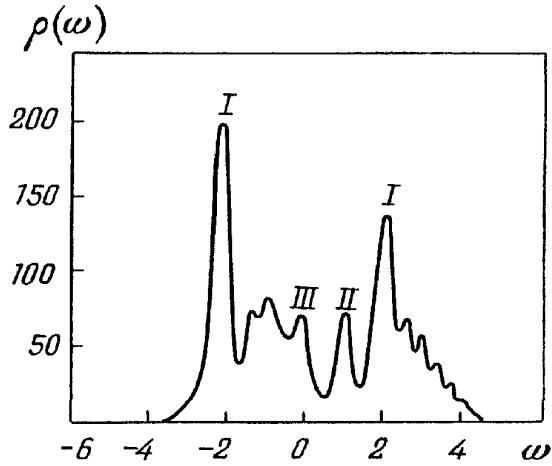


Рис. 14. Плотность состояний в $(t - J)$ -модели с одной дыркой для параметра $J/t = 0,2$ [70]

плотность одночастичного состояния также имеет пик на дне хаббардовской полосы. Для p -симметрии тоже имеется близко расположенный пик меньшей интенсивности. Однако поведение s -состояния куперовской пары иное — без квазичастичного пика. Таким образом, по крайней мере при низких концентрациях дырок сверхпроводимость s -типа сильно подавлена и доминирует d -спаривание.

Неожиданный результат был получен на кластерах с числом частиц $N = 18$ и 20 при умеренных концентрациях дырок [75]. Две дырки в таком кластере соответствуют концентрации $n_h = 10 - 15\%$. Оказалось, что ферми-поверхность (разделяющая точки в k -пространстве с числом заполнений n_k , большим и меньшим $1/2$) не имеет характер дырочных карманов в окрестности точек $(\pi/2, \pi/2)$ или $(\pi/2, 0)$. Вместо этого поверхность Ферми является поверхностью электронного типа, причем ее размер и форма совпадают с таковыми для невзаимодействующих электронов (теорема Латинжера). Эти результаты находятся в согласии с вычислениями по методу Монте-Карло для модели Хаббарда с малыми U [46]. Конечно, невозможно исключить дырочные поверхности Ферми при малых концентрациях дырок ввиду конечных размеров кластеров. Невозможно по этой же причине разрешить вопрос: имеется ли скачок в n_k на поверхности Ферми или система является маргинальной ферми-жидкостью.

Вычисления показали также, что возбужденные состояния кластера укладываются в схему возбуждения ферми-жидкости, т.е. имеются дырочноподобные и частицеподобные состояния с шириной зоны порядка J и эффективной массой $m^*/m \approx 1,5t/J$. Конечно, эти результаты не доказывают, что в системе существуют ферми-жидкостные возбужденные состояния, поскольку для этого требовалось бы показать, что в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) ширина одночастичных пиков стремится к нулю как ω^2 (или, по крайней мере, как $\omega \ln \omega$ для маргинальной ферми-жидкости) при $\omega \rightarrow 0$. Тем не менее это дает надежду на то, что сильно коррелированная система может при определенных условиях (для умеренных концентраций дырок) описываться ферми-жидкостной картиной. В частности, это оправдало бы ее использование при рассмотрении проблем сверхпроводимости, сделанное в п. 5.

7. Заключение. Главный вывод, к которому мы приходим, заключается в том, что в настоящее время проблема взаимодействия магнитного и сверхпроводящего состояний в модели Хаббарда далека от завершения, несмотря на большие усилия исследователей (за последние два года было опубликовано около сотни теоретических работ на эту тему). Эта проблема оказалась намного сложнее, чем представлялось с самого начала, ввиду отсутствия малого параметра в наиболее интересной области $U \sim W$ либо ввиду принципиально многочастичного характера основного состояния вблизи половинного заполнения зоны, хотя в этом случае и имеется малый параметр — концентрация дырок. Тем не менее рассмотрение двух предельных случаев — $U \ll W$ и $U \gg W$ — позволяет сделать ряд общих выводов, обрисовывающих контуры основной проблемы.

I) В режиме и коллективизированного ($U \ll W$), и локализованного ($U \gg W$) магнетизма удастся описать антиферромагнитное состояние системы вблизи половинного заполнения зоны. Механизмами магнитной неустойчивости являются: нестинг поверхности Ферми, приводящий к дальнему порядку типа волны спиновой плотности в случае $U \ll W$, и косвенный анти-

ферромагнитный обмен, формирующий нееевское состояние в случае $U \gg W$. В обоих случаях с ростом концентрации дырок спиновые корреляции ослабляются, причем особенно драматично это происходит в системах с сильной корреляцией. В спектре электронных состояний в обоих случаях возникает щель за счет понижения трансляционной симметрии системы, причем вблизи половинного заполнения эта щель попадает на уровень Ферми, приводя к диэлектрическому основному состоянию.

Эти результаты соответствуют приближению самосогласованного поля. Учет спиновых флуктуаций вносит коррективы в эту простую картину. В состоянии с нарушенной симметрией флуктуации продольных и поперечных компонент спинов приводят к различным эффективным взаимодействиям спинов. Результатом этих дополнительных взаимодействий является искажение ВСП- или нееевского состояния. В обоих предельных случаях возникает спиральная фаза при отклонении от половинного заполнения. Кроме того, обсуждается вопрос о расслоении магнитной системы на фазы [81 — 83] при конечной концентрации дырок.

Численные расчеты малых кластеров для двумерной модели показывают существование магнитного структурного пика, свидетельствующего по крайней мере о выраженном ближнем магнитном порядке или о дальнем. Подобные расчеты приводят также к возможности существования периодической доменной структуры и других нелинейных структур — типа вихрей. Таким образом, магнитная фазовая диаграмма модели Хаббарда вблизи половинного заполнения не является еще установленной. Определенно можно сказать только, что при половинном заполнении структура антиферромагнитна, но при конечной концентрации дырок она искажается. По-видимому, существует много близких по энергии магнитных фаз, сменяющих друг друга с ростом концентрации дырок.

2) Косвенное взаимодействие электронов через спиновые флуктуации может привести к куперовскому спариванию. В парамагнитной фазе флуктуации приводят к отталкиванию в синглетном канале. Несмотря на этот факт, возможно существование сверхпроводимости с анизотропным параметром порядка. Действительно, в случае кубической (квадратной) решетки вблизи антиферромагнитной неустойчивости флуктуации приводят к куперовскому спариванию d-симметрии, причем в обоих случаях — $U \ll W$ и $U \gg W$. В последнем случае, однако, в системе возникают локализованные магнитные моменты, которые приводят к процессам распаривания. В результате трудно надеяться на высокие T_c через механизм спиновых флуктуаций в парамагнитной фазе.

Внутри антиферромагнитной фазы вблизи половинного заполнения продольные спиновые флуктуации приводят к куперовской неустойчивости в синглетном канале, однако поперечные спиновые флуктуации (спиновые волны) приводят к отталкиванию в этом канале. С ростом параметра U/W вклад от поперечных флуктуаций начинает доминировать и сверхпроводящее состояние внутри нееевской антиферромагнитной фазы должно смениться нормальным состоянием со спиральной магнитной структурой. Таким образом, при определенных условиях в магнитоупорядоченной фазе возможно существование сверхпроводящего состояния (наиболее последовательная теория основана на суммировании паркетных диаграмм [84]), однако теории самой сверхпроводящей фазы, позволяющей вычислить T_c , пока не существует. Наиболее вероятно появление высоких T_c за счет магнитно-флуктуационного механизма в областях с сильной корреляцией ($U \gg W$), где существует магнитный по-

рядок. Магнитоупорядоченное состояние (хотя бы с ближним порядком) необходимо для того, чтобы отключить механизм распаривания на локализованных магнитных моментах.

Численные расчеты на малых кластерах дают пока противоречивые результаты о куперовском спаривании дырок.

3) Важнейшей составной частью проблемы магнетизма и сверхпроводимости в модели Хаббарда вблизи половинного заполнения является теория одночастичного дырочного состояния. В случае слабого кулоновского отталкивания $U \lesssim W$ аналитические исследования и численные кластерные расчеты показывают, что дырка является хорошо определенной квазичастицей с выраженным когерентным пиком в спектральной плотности. Таким образом, сохраняется ферми-жидкостная картина для конечной концентрации дырок.

Для сильно коррелированных систем ($U \gg W$) дырка в антиферромагнитной матрице описывается в терминах квазиосциллятора — частицы, автолокализованной в линейном потенциале, производимом деформацией магнитной структуры. Такая квазичастица является подвижной, хотя и имеет большую эффективную массу. Ее конечная подвижность обусловлена поперечными компонентами спина в обменном гамильтониане (а также вкладом состояний, описывающихся петлями Тругмана). Численные расчеты на кластерах подтверждают эту картину, показывая существование узкого когерентного пика на фоне широкого некогерентного вклада в спектральной плотности одночастичного состояния для широкого интервала значений параметра $U/W > 1$. Очень трудным является вопрос о поведении коллектива дырок при конечной их концентрации. Кластерные расчеты показывают, что при не очень больших значениях параметра U/W как будто бы сохраняется ферми-жидкостная картина поведения дырок. Однако трудно надеяться, что она сохранится для сильно коррелированных систем ($U \gg W$). Это и делает теорию очень трудной в данном пределе.

Построению удовлетворительной теории сверхпроводимости для модели Хаббарда вблизи половинного заполнения должно предшествовать более детальное изучение проблемы дырки и взаимодействия дырок между собой, а также надежное построение магнитной фазовой диаграммы на плоскости $(W/U, n)$. Этим мы и завершаем обзор данной "горячей" области теории конденсированного состояния. Подчеркнем еще раз, что мы рассмотрели аспекты, связанные с предположением о неелевском основном состоянии двумерного коллективизированного антиферромагнетика и полностью опустили альтернативную возможность — основное состояние типа RVB.

В заключение приведем ряд новейших ссылок по обсуждаемой проблеме [86 — 97].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Berk N.F., Schrieffer J.R.//Phys. Rev. Lett. 1966. V. 17. P. 433.
2. Scalapino D.J., Loh E., Hirsch J.E.// Phys. Rev. B. 1987. V. 35. P. 6694.
3. Вонсовский С.В., Свирский М.С.//ЖЭТФ. 1964. Т. 46. С. 1619.
4. Изюмов Ю.А., Лептев В.М.//Intern. J. Mod. Phys. B. 1991. V. 5. P. 563.
5. Абрикосов А.А., Горьков Л.П.// ЖЭТФ. 1960. Т. 39. С. 1781.
6. Hubbard J.//Proc. Roy. Soc. A. 1963. V. 276. P. 238; 1964. V. 277. P. 237; V. 281. P. 401.
7. Изюмов Ю.А., Скрябин Ю.Н. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. — М.: Наука, 1987.
8. Harris A.V., Lange R.V.// Phys. Rev. 1967. V. 157. P. 295.
9. Hirsch J.E.//Phys. Rev. Lett. 1985. V. 54. P. 1317.
10. Хомский Д.И. Доклад на Совещании по проблемам статистической физики. — Дубна, 1988.

- [11] *Mohan M.M., Kumar H.*// J. Phys. C. 1987. V. 20. P. 527.
12. *Izyumov Yu.A., Letfulov B.M.*// J. Phys.: Condens Matter. 1990. V. 2. P. 8905.
13. *Anderson P. W.*// Science. 1987. V. 235. P. 1196.
14. *Chen Y.H., Halperin B.I., Wilczek P., Witten E.*// Intern. J. Mod. Phys. B. 1989. V. 3. P. 1001.
15. *Изыумов Ю.А., Плакида Н.М., Скрябин Ю.Н.*// УФН. 1989. Т. 159. С. 621.
16. *Izuyama T., Kim D., Kubo R.*// J Phys. Soc. Japan. 1963. V. 18. P. 1025.
17. *Moriya T.* Spin Fluctuations in itinerant electron magnetism. — Berlin a.o.: Springer-Verlag, 1985.
18. *Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике. — М.: Наука, 1962.
19. Проблемы высокотемпературной сверхпроводимости/Под ред. В.Л. Гинзбурга, Д.А. Киржница. — М.: Наука, 1977.
20. *Shimahava H., Takada S.*// J. Phys. Soc. Japan. 1988. V. 57. P. 1044.
- [21] *Yonemitsu K.*// Ibidem. 1989. V. 58. P. 4576.
22. *Schrieffer J.R., Wen X.G., Zhang S.C.*//Phys. Rev. B. 1989. V. 39. P. 11663.
23. *Frenkel D.M., Hanke W.*//Ibidem. 1990. V. 42. P. 6711.
24. *Chou H.Y., Mele E.J.*// Ibidem. 1988. V. 38. P. 4540.
25. *Weng Z.Y., Lee T.K., Ting C.S.*// Ibidem. P. 6561.
26. *Vignale G., Singwi K.S.*// Ibidem. 1989. V. 39. P. 2956.
27. *Popov V.N.* On the type of Cooper pairing in the **high- T_c** -superconductivity. — CERN-TH-5653, 1990
28. *Su Z.B.*// J. Phys. B. 1988. V. 70. P. 131.
29. *Fenton E.W.*// Phys. Rev. B. 1989. V. 40. P. 10796.
30. *Конаев Ю.В., Горбацевич А.А.*//Письма ЖЭТФ. 1990. Т. 51. С. 327.
- [31] *Горбацевич А.А.*//Ibidem. С. 39.
32. *Vignale G., Heday M.R.*//Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 786.
33. *Anderson P.W.*//Phys. Rev. 1952. V. 86. P. 694.
34. *Kampf A., Schrieffer J.R.*// Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 6399; V. 42. P. 7967.
35. *Shraiman B.I., Siggia E.D.*//Ibidem. 1982. V. 40. P. 9162; Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62. P. 1564.
36. *Jayaprakash C., Krishnamurthy H.R., Sorter S.*//Phys. Rev. B. 1989. V. 40. P. 2610.
37. *Weng Z.Y., Ting C.S.*//Ibidem. 1990. V. 42. P. 803.
38. *Weng Z.Y.*//Phys. Rev. Lett. 1991. V. 66. P. 2156.
39. *Weng Z.Y., Ting C.S., Lee T.K.*//Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 1990.
40. *Giamarchi T., Lhuillier C.*// Ibidem. V. 42. P. 10641.
- [41] *Schuls H.J.*//Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64. P. 1445.
42. *Poiblanc D., Rice T.M.*//Phys. Rev. B. 1989. V. 39. P. 9749.
43. *Verges J.A., Louis E., Lomdahl P.S., Guinea F., Bishop A.R.*//Ibidem. 1991. V. 43. P. 6099.
44. *Kane C.L., Lee P.A., Read N.*//Ibidem. 1989. V. 39. P. 6880.
45. *White S.R., Scalapino D.J., Sugar R.L., Loh E.Y., Guberratis J.E., Scalettar R.T.*//Ibidem. V. 40. P. 506.
46. *Moreo A., Scalapino D.J., Sugar R.L., White S.R., Bickers N.E.*// Ibidem. 1990. V. 41. P. 2313.
47. *Bickers N.E., Scalapino D.J., White S.R.*// Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62. P. 961.
48. *Bickers N.E., White S.R.*//Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 8044.
49. *Moreo A., Scalapino D.J.*// Ibidem. P. 8211.
50. *Izyumov Yu.A., Letfulov B.M.*// Europhys. Lett. 1991 (in press).
- [51] *Izyumov Yu.A., Letfulov B.M.*// J. Phys.: Condens Matter. 1991. V. 3. P. 5373.
52. *Зайцев Р.О., Иванов В.А.*// ФТТ. 1987. Т. 29. С. 2554.
53. *Zaitsev R.O., Ivanov V.A.*//Physica. C. 1988. V. 153 — 155. P. 1295.
54. *Plakida N.M., Yushankhai V.Yu., Stasyuk I.V.*// Ibidem. 1989. V. 160. P. 80.
55. *Белиничер В.И.*//ЖЭТФ. 1990. Т. 98. С. 931.
56. *Булаевский Л.Н., Хомский Д.И.*//ЖЭТФ. 1967. Т. 52. С. 1603.
57. *Булаевский Л.Н., Нагаев Э.Л., Хомский Д.И.*// ЖЭТФ. 1968. Т. 54. С. 1562.
58. *Brinkman W.F., Rice T.M.*// Phys. Rev. B. 1970. V. 2. P. 1324.
59. *Lifshitz I.M.*// Adv. Phys. 1969. V. 13. P. 483.
60. *Schmitt-Rink S., Varma C.M., Ruckenstein A.E.*// Phys. Rev. Lett. 1988. V. 60. P. 2793.
- [61] *Shraiman B.I., Siggia E.D.*//Ibidem. P. 740.
62. *Trugman S.A.*//Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 1597.
63. *Bonca J., Prelovsek P., Sega I.*//Ibidem. 1989. V. 39. P. 7074.
64. *Bonca J., Prelovsek P., Sega I.*// Europhys. Lett. 1989. V. 10. P. 87.
65. *Sega I., Prelovsek P.*// Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 892.
66. *Hasegawa Y., Poiblanc D.*// Ibidem. 1989. V. 40. P. 9035.
67. *Dagotto E., Moreo A., Barnes T.*// Ibidem. P. 6721.
68. *Dagotto E., Moreo A., Joynt R., Bacci S., Gagliano E.*// Ibidem. 1990. V. 41. P. 2585.

69. Nagaoka Y.// Phys. Rev. 1966. V. 147. P. 392.
70. Dagotto E., Joynt R., Moreo A., Bacci S., Gagliano E.//Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 9049.
[71] Tmgman S.A.//Ibidem. P. 892.
72. White S., Scalapino D., Sugar R., Bickers N.// Phys. Rev. Lett. 1989. V. 63. P. 1523.
73. Chen C.X., Schuttler H.B.// Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 8702.
74. Poilblanc D., Dagotto E., Riera J.//Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 7899.
75. Stephan W., Horsch P.// Phys. Rev. Lett. 1991. V. 66. P. 2258.
76. Gunn J.M.F., Simons B.D.//Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 4370.
77. Kaxirax E., Manousakis E.//Ibidem. 1988. V. 38. P. 866.
78. Riera J., Young A.// Ibidem. 1989. V. 39. P. 9697.
79. Luk K.H., Cox D.// Ibidem. 1990. V. 41. P. 4456.
80. Dagotto E., Riera J., Young A.P.//Ibidem. V. 42. P. 2347.
[81] Фейтельман М.В.//Письма ЖЭТФ. 1978. Т. 27. С. 462.
82. Ioffe L.B., Larkin A.I.// Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 5730.
83. Emery V., Kiveison S., Lui H.Q.// Phys. Rev. Lett. 1989. V. 64. P. 475.
84. Дзялошинский И.Е.//ЖЭТФ. 1987. Т. 93. С. 1487.
85. Ruckenstein A.E., Schmltt-Rink S.// Intem. J. Mod. Phys. B. 1989. V. 1. P. 1809.
86. Parola A., Sorella S., Parrinello M., Tosatti E.//Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 6190.
87. Chen L., Bourbonnais C., Li T., Tremblay A.M.S.// Phys. Rev. Lett. V. 66. P. 369.
88. Psaltakis G.C., Papanicolaou N.// Ibidem. 1990. V. 42. P. 10952.
89. Carmelo J., Dzierzawa M., Zotos X., Baeriswyl D.//Ibidem. 1991. V. 43. P. 598.
90. Georges A., Yedidia J.S.//Ibidem. P. 3475.
[91] Barford W, Lu J.P.//Ibidem. P. 3540.
92. Kumar N.// Ibidem. 1990. V. 42. P. 2320.
93. Auerbach A., Larson B.E.// Phys. Rev. Lett. 1991. V. 66. P. 2262.
94. Weng Z.Y., Ting C.S., Lee T.K.//Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 3790.
95. Uchinami M.//Ibidem. 1990. V. 42. P. 10178.
96. Auerbach A., Larson B.E.//Ibidem. 1991. V. 43. P. 7800.
97. Ogata H., Luchini M.U., Sorella S., Assaad F.F.// Phys. Rev. Lett. 1991. V. 66. P. 2388.

Статья поступила 17.07.91 г.