

*МАТЕРИАЛЫ МЕЖДУНАРОДНОГО СИМПОЗИУМА*  
*“Нанопизика и наноэлектроника-2011”*  
*(Нижний Новгород, март 2011 г.)*

Сопредседатели Оргкомитета Международного симпозиума  
“Нанопизика и наноэлектроника-2011”  
академик РАН **С.В. Гапонов**, д-р физ.-мат. наук **З.Ф. Красильник**

Материалы Международного симпозиума  
“Нанопизика и наноэлектроника-2011”  
под общей редакцией канд. физ.-мат. наук **М.М. Барышевой**

УДК 537.9

## РАСЩЕПЛЕНИЕ НИЖНЕЙ ПОДЗОНЫ И СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ 2D-ФЕРМИОНОВ ХАББАРДА ПРИ СИЛЬНЫХ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ КОРРЕЛЯЦИЯХ

© 2012 г. В. В. Вальков<sup>1,2</sup>, М. М. Коровушкин<sup>1</sup>

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

При исследовании влияния сильных межузельных кулоновских корреляций на формирование электронной структуры модели Шубина–Вонсовского в режиме сильных одноузельных корреляций получен качественно новый результат, заключающийся в появлении отщепленной зоны фермиевских состояний. Спектральная интенсивность этой зоны растет с увеличением уровня легирования и определяется среднеквадратичной флуктуацией чисел заполнения. В результате происходит качественное изменение структуры плотности электронных состояний.

Активно проводившиеся со второй половины прошлого века исследования по проблеме сильных электронных корреляций (СЭК) ограничивались в основном одноузельными корреляциями (хаббардовскими корреляциями) [1]. На этом фоне относительно слабо изучались проявления кулоновского взаимодействия электронов, находящихся на разных узлах кристаллической решетки. В подавляющем большинстве исследований по данной тематике межузельным кулоновским взаимодействием электронов просто пренебрегали. Такой подход может быть оправдан в случае сильной экранировки кулоновского взаимодействия. Однако для слабо легированных систем, когда радиус экранирования становится большим, пренебрежение межузельным кулоновским взаимодействием может привести к неадекватному описанию физических свойств соединений с СЭК [2].

В [3, 4] было показано, что сильные межузельные корреляции способны приводить к расщеплению исходной зоны фермиевских состояний системы с СЭК. Необходимо отметить, что это расщепление не связано с хорошо известным хаббардовским механизмом формирования двух подзон и проявляется в виде дополнительного расщепления нижней (или верхней) хаббардовской подзоны (рис. 1). Спектральная интенсивность отщепленной зоны тем выше, чем с большей вероятностью происходит отклонение электронной конфигурации окружения от номинальной (см. ниже).

В данной работе исследуется влияние индуцирования отщепленной зоны фермиевских состояний на сверхпроводящие свойства модели Шуби-

на–Вонсовского [5] в режиме сильных одноузельных электронных корреляций ( $U = \infty$ ), гамильтониан которой в атомном представлении имеет вид:

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

Здесь первое слагаемое описывает ансамбль невзаимодействующих хаббардовских фермионов в представлении Ванье, второе слагаемое соответствует кинетической энергии хаббардовских фермионов, последнее слагаемое учитывает кулоновское взаимодействие электронов, находящихся на соседних узлах  $f$  и  $f + \delta$ , интенсивность которого определяется параметром  $V$ . В дальнейшем рассматривается случай, когда число дырок  $h = (1/N) \sum_f \langle X_f^{00} \rangle$  в системе мало:  $h = 1 - n \ll 1$ .

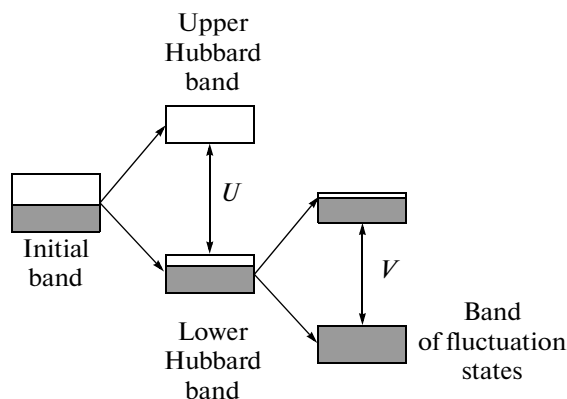
В рамках диаграммной техники для операторов Хаббарда [6] при условии, что параметр перескока мал по сравнению с энергией кулоновского отталкивания электронов, находящихся на соседних узлах решетки,  $|t| \ll V$ , можно получить выражение для одночастичной мацубаровской функции Грина

$$D(k, i\omega_n) = \frac{(1 - n/2)(i\omega_n - \zeta + \mu)}{(i\omega_n - \varepsilon_k + \mu)(i\omega_n - \zeta + \mu) - 4h(1 - h)V^2}, \quad (2)$$

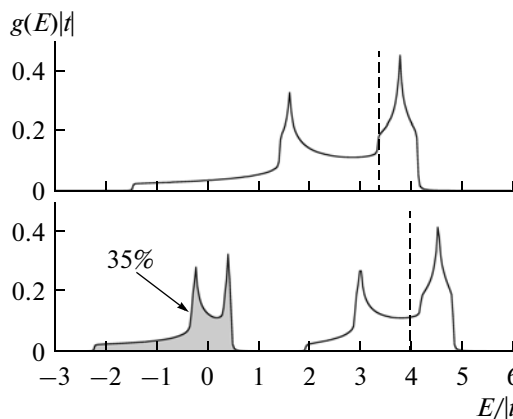
которая, как видно, имеет двухполюсную структуру. Здесь  $\varepsilon_k = \tilde{\varepsilon} + (1 - n/2)t_k$ ,  $\zeta = \tilde{\varepsilon} - V(1 - 2h)$ ,  $t_k$  – фурье-образ интеграла перескока,  $\mu$  – химический

<sup>1</sup> Учреждение Российской академии наук Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск.

<sup>2</sup> Сибирский государственный аэрокосмический университет имени М.Ф. Решетнева, Красноярск.



**Рис. 1.** Схема расщепления энергетических зон сильно коррелированной системы под влиянием одноузельного и межузельного кулоновского взаимодействия электронов.



**Рис. 2.** Плотность электронных состояний, рассчитанная без учета межузельных корреляций (сверху) и при их учете (снизу) при уровне легирования  $P = 0.2$ . Пунктирными линиями показано положение химпотенциала.

потенциал. Отсюда следует, что спектр фермиевских возбуждений определяется выражениями:

$$E_k^\mp = \frac{\varepsilon_k + \zeta}{2} \mp v_k, \quad (3)$$

$$v_k = \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_k - \zeta}{2}\right)^2 + 4h(1-h)V^2}.$$

Верхняя энергетическая зона рассматриваемой модели соответствует движению электрона по узлам решетки, на соседних узлах с которыми отсутствуют дырки. Характерная “посадочная” энергия такого электрона равняется  $\varepsilon + 4V$ . Нижняя зона описывает движение электрона по таким узлам решетки, на одном из соседних узлов с которыми в результате легирования появилась дырка. Появление в ближайшей окрестности дырки уменьшает “посадочную” энергию такого электрона до характерной величины  $\varepsilon_0 + 3V$ . Таким образом, формирование дополнительной зоны обусловлено изменением энергии электрона, находящегося на узле, если вблизи этого узла происходит отклонение электронных конфигураций от номинальных. Именно поэтому отщепленная зона была названа зоной флуктуационных состояний (ЗФС) [4].

Появление ЗФС приводит к качественному изменению вида плотности электронных состояний фермионов Хаббарда. На верхнем графике рис. 2 показана плотность состояний рассматриваемой модели без учета межузельных корреляций. Видно, что игнорирование этих корреляций приводит к тривиальному смещению положения зоны фермионов Хаббарда. На нижнем графике рис. 2 показана плотность состояний модели для того же самого набора параметров, но при учете межузельных корреляций. Из сравнения с верхним графиком видно, что учет этих корреляций приводит к существенному качественному измене-

нию вида плотности состояний: происходит отщепление ЗФС и формирование щели в структуре энергетического спектра. Для наглядности на рис. 2 плотность состояний ЗФС  $g^-(E)$  отражена посредством линии, ограничивающей затененный участок. При этом на долю ЗФС приходится 35% от полного числа состояний системы, тогда как на основную зону с плотностью состояний  $g^+(E)$  приходится 65% состояний.

Изменение структуры плотности состояний приводит к ренормировке полюса амплитуды рассеяния в куперовском канале и проявляется в виде неоднородной по концентрации электронов модификации зависимости критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние. На рис. 3 посредством сплошных линий изображены зависимости  $T_c(n)$ , полученные при учете ЗФС. Для сравнения на этом же рисунке посредством штриховых линий показаны зависимости  $T_c(n)$ , полученные в случае, когда не учитывается эффект индуцирования ЗФС. Видно, что в области концентраций электронов  $n$ , близких к единице, влияние ЗФС незначительно (сплошные и штриховые линии совпадают). Это естественно, поскольку спектральная интенсивность ЗФС при  $n \rightarrow 1$  обращается в нуль. Если концентрация увеличивается, то растет и среднеквадратичная флуктуация чисел заполнения. В этом случае спектральная интенсивность для ЗФС становится большой и вклад ЗФС проявляется достаточно сильно. Из рисунка видно, что в наиболее интересной области концентраций электронов  $n \approx 0.8-0.9$  ренормировка критической температуры сравнима и даже превосходит саму величину  $T_c$ , вычисленную без учета вкладов от ЗФС. Таким образом, влияние эффектов, связанных с индуцированием ЗФС, существенно сказывается на фа-

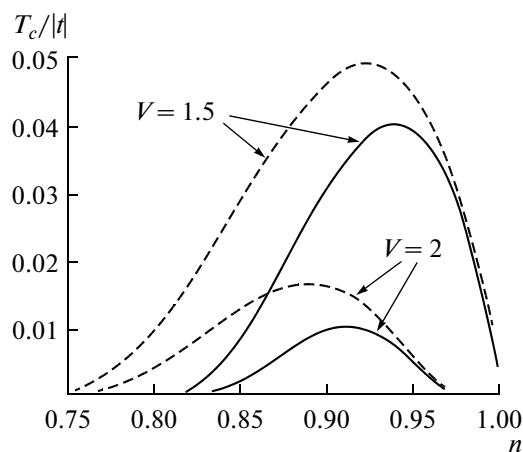


Рис. 3. Зависимость температуры перехода в сверхпроводящую фазу от концентрации электронов.

зовой диаграмме системы в области концентраций, где реализуется сверхпроводящее состояние.

Представленные результаты по исследованию влияния межузельных корреляций на энергетическую структуру и спектральные характеристики узкозонных мотт-хаббардовских диэлектриков при низком уровне легирования демонстрируют наличие двух качественно новых эффектов. Первый из них связан с возникновением новой энергетической зоны, обусловленной зарядовыми флуктуациями. Второй эффект связан с перераспределением спектральной интенсивности между основной зоной и ЗФС в пользу последней при легировании. Это обуславливает модификацию плотности состояний и отмеченную выше неод-

нородную по концентрации электронов ренормировку температуры перехода в сверхпроводящее состояние.

Отметим также, что рассмотренная модификация энергетической структуры за счет сильных межузельных корреляций имеет общий характер и не ограничивается лишь моделью Шубина–Вонсовского. Следует ожидать, что вскрытые в данной работе эффекты будут особенно актуальны в системах с переменной валентностью.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН “Квантовая физика конденсированных сред”, РФФИ № 10-02-00251, Федеральной целевой программы “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы”, а также Интеграционного проекта СО РАН № 53. Один из авторов (М.К.) благодарит грант Президента РФ МК-1300.2011.2 и Лаврентьевский конкурс молодежных проектов СО РАН.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hubbard J.C. // Proc. Roy. Soc. A. 1963. V. 276. P. 238.
2. Зайцев P.O. // ЖЭТФ. 2004. Т. 125. С. 891.
3. Вальков В.В., Коровушкин М.М. // Письма в ЖЭТФ. 2008. Т. 87. P. 234.
4. Val'kov V.V., Korovushkin M.M. // J. Phys. Soc. Jpn. 2011. V. 80. 014703.
5. Shubin S., Vonsowsky S. // Proc. Roy. Soc. A. 1934. V. 145. P. 159.
6. Зайцев P.O. // Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма. М.: Едиториал УРСС, 2004. С. 176.