

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ им. Л. В. КИРЕНСКОГО СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи



Сидоров Кирилл Александрович

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ С
СИЛЬНЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ

Специальность 01.04.07. Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

д. ф.-м. н., проф. С. Г. Овчинников

Красноярск-2016

Оглавление

Глава I. Введение	4
1.1. Обзор работ по одномерной модели Хаббарда и краткое введение в используемые в данной работе методы	7
1.2. Электронная структура ВТСП купратов в режиме СЭК	16
1.3. Модель Эмери и эволюция топологии поверхности Ферми в купратах с допированием	25
1.4. Сверхпроводимость в модели Хаббарда и t - J^* -модели	29
1.5. Постановка задачи	34
Глава II. Обоснование связи между статистическими суммами холонов и электронов	36
2.1. Точное решение для электронов при $t=0$ (атомный предел в магнитном поле)	36
2.2. Точное решение для холонов при произвольном значении t	42
2.3. Преобразование матрицы оператора $H_t^{(h)}$ при учете спина электрона	45
2.4. Взаимосвязь между статистическими суммами холонов и электронов	47
2.5. Окончательные выражения для термодинамических характеристик (без магнитного поля)	49
2.6. Окончательные выражения для термодинамических характеристик (в магнитном поле)	51
Основные выводы по главе II	53
Глава III. Концентрационные, температурные и полевые зависимости термодинамических параметров	55
3.1. Основное состояние и низкотемпературные аппроксимации	55
3.2. Концентрационные и температурные зависимости термодинамических характеристик в отсутствие магнитного поля	67

3.3. Концентрационные, температурные и полевые зависимости термодинамических характеристик при наличии магнитного поля	81
Основные выводы по главе III	97
Глава IV. Влияние внешнего давления на нормальные и сверхпроводящие свойства ВТСП купратов на примере соединения $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$	99
4.1. Расчет изменения поверхностей Ферми в системе $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ при приложении к ней давлений различной симметрии	99
4.2. Влияние давлений различной симметрии на температуру сверхпроводящего перехода в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$	106
Основные выводы по главе IV	113
Заключение	114
Список литературы	117

Глава I. Введение

Настоящая работа посвящена двум основным группам вопросов. Первая – это точное решение основной задачи статистической физики (т. е. нахождение термодинамики) одномерной модели Хаббарда в пределе $U \rightarrow \infty$. Ни для кого из профессионалов никогда не было секретом, что точные решения имеют особую привлекательность и «манят» души физиков как истинных ценителей математики. Если бы точные решения существовали всегда или почти всегда, физика, несомненно, развивалась бы стремительно быстрее, чем это, к сожалению, происходит на самом деле. Похоже, однако, что подобный сценарий развития этой науки уже никогда не будет реализован в будущем – найти точно решаемую модель, которая бы адекватно описывала достаточно широкий круг физических явлений, – все равно, что найти иголку в стоге сена. Не секрет для профессионалов и то, что для точного решения обсуждаемой одномерной модели Хаббарда требуется громоздкий и сложный математический аппарат. Что касается точного решения модели Хаббарда в пространствах более высокой размерности, то если они вообще когда-либо будут найдены, то будут еще несравненно более сложными, чем известное решение Либа-Ву, опирающееся на анзац Бете.

Для профессионала, решившего прочитать эту диссертацию, у меня есть и хорошие новости, и плохие. Плохие – в том, что в ней находится точное решение уже давно точно решенной одномерной модели Хаббарда, да еще и всего лишь в частном случае $U \rightarrow \infty$. Хорошие – в том, что предлагаемое решение не опирается на анзац Бете и, кроме того, в гамильтониан добавлен член, описывающий взаимодействие системы с магнитным полем. Оказывается, что для такой модели возможно построение точного решения, использующего элементарные методы линейной алгебры и лишь самые основы статистической физики (т. е. те ее результаты, которые не используют методы, заимствованные из квантовой теории поля).

Вторая группа вопросов, обсуждаемых в работе, связана с исследованием влияния давления на нормальные и сверхпроводящие свойства высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) на примере соединения $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ – хорошо изученного представителя р-типа купратов. Здесь, во-первых, исследуется влияние давлений различной симметрии на форму поверхности Ферми, площадь экстремальных сечений которой, как известно, определяет частоту осцилляций намагниченности в магнитном поле (эффект де Гааза-ван Альфена). Во-вторых, рассматривается, как давления различной симметрии влияют на зависимость температуры сверхпроводящего перехода от концентрации дырок в системе.

И первая, и вторая группа вопросов, как видим, посвящены низкоразмерным моделям и тесно связаны с системами с сильными электронными корреляциями (СЭК). Известно, что операторы Хаббарда (иначе Х-операторы) являются естественным языком для описания таких систем. А потому в данной работе всюду, за исключением одного места в параграфе 1.3, где обсуждается трехзонная р-d-модель Эмери, используется только Х-представление (представление операторов Хаббарда). Вспомним основные свойства этих операторов. Оператор Хаббарда на узле $\mathbf{f}$, как известно, определяется согласно равенству

$$X_{\mathbf{f}}^{pq} = |p\rangle\langle q|, \quad (1)$$

где $|p\rangle, |q\rangle$ – состояния на узле $\mathbf{f}$. Действуя этим оператором на состояние $|r\rangle$ на узле $\mathbf{f}$, получим

$$X_{\mathbf{f}}^{pq}|r\rangle = |p\rangle\langle q|r\rangle = \delta_{qr}|p\rangle. \quad (2)$$

Как видим, оператор Хаббарда является, по существу, оператором перехода из состояния $|q\rangle$ в состояние $|p\rangle$. Правило умножения для операторов Хаббарда непосредственно вытекает из их определения:

$$X_{\mathbf{f}}^{pq}X_{\mathbf{f}}^{rs} = |p\rangle\langle q|r\rangle\langle s| = \delta_{qr}X_{\mathbf{f}}^{ps}. \quad (3)$$

Отметим, наконец, и коммутационное соотношение для X-операторов:

$$X_f^{pq} X_m^{rs} - \eta X_m^{rs} X_f^{pq} = \delta_{mf} (\delta_{qr} X_f^{ps} - \eta \delta_{ps} X_f^{rq}), \quad (4)$$

$$\eta = (-1)^{(n_{fp} \pm n_{fq})(n_{mr} \pm n_{ms})}. \quad (5)$$

Операторы Хаббарда обладают еще одним замечательным свойством – они служат базисом в линейном пространстве операторов, действующих в заданном линейном пространстве, т. е. через них линейно выражается любой линейный оператор, действующий в заданном линейном пространстве:

$$A = \sum_{p,q} \gamma_{pq} X^{pq}, \quad (6)$$

$$\gamma_{pq} = \langle p | A | q \rangle. \quad (7)$$

Теперь кратко о структуре данной работы. Глава I посвящена введению в проблематику работы. В параграфе 1.1 приведен обзор основных достижений по точному решению одномерной модели Хаббарда и кратко обсуждается предлагаемый в настоящей работе способ ее точного решения в предельном случае бесконечного отталкивания при наличии магнитного поля. Следующие три параграфа этой главы посвящены основным свойствам ВТСП купратов, т. е. имеют целью ввести читателя во вторую группу вопросов, обсуждаемых в работе. В параграфе 1.2 приведены основные сведения по электронной структуре этих соединений в режиме СЭК. В параграфе 1.3 обсуждается трехзонная p-d-модель Эмери и вопрос о ее сводимости к модели Хаббарда и t - J^* -модели. В этом параграфе рассматриваются также основные свойства эволюции топологии поверхности Ферми с ростом концентрации дырочного допирования при отсутствии внешнего давления. Наконец, в параграфе 1.4 обсуждаются вопросы сверхпроводимости в модели Хаббарда и t - J^* -модели. В параграфе 1.5 формулируются цели и задачи данной работы.

Глава II полностью посвящена выводу точного решения основной задачи статистической физики для одномерной модели Хаббарда с бесконечным

отталкиванием в магнитном поле. В ней не обсуждаются полученные формулы для термодинамических параметров. Этим вопросам посвящена отдельная глава III, в которой выписаны выражения для термодинамических параметров основного состояния, низкотемпературные разложения этих параметров и обсуждается как случай, когда магнитное поле в веществе равно нулю, так и случай поля, отличного от нуля.

Наконец, в главе IV исследуется вопрос о влиянии давлений различной симметрии на форму поверхности Ферми и температуру сверхпроводящего перехода в ВТСП купратах (на примере соединения $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$).

В заключении формулируются основные достигнутые в работе результаты.

Работа оканчивается списком цитированных источников.

1.1. Обзор работ по одномерной модели Хаббарда и краткое введение в используемые в данной работе методы

Хорошо известно, что в зонной теории при рассмотрении электронной структуры твердых тел исходят, как правило, из одноэлектронной картины, в которой взаимодействие между электронами учитывается самосогласованным способом [1]. В случае необходимости учесть корреляционные поправки, как правило, прибегают к теории возмущений. Однако во многих случаях взаимодействие между электронами играет принципиально важную роль и кардинально меняет физические свойства системы. Так, без его учета невозможно объяснить то, что переходные оксиды 3d-металлов, такие как CoO и NiO, являются диэлектриками. Модель Хаббарда была предложена Дж. Хаббардом в 1963-1965 гг. в серии работ [2-5] как попытка вплотную подойти к этой проблеме. Она также оказалась чрезвычайно полезной при описании фазового перехода

металл-диэлектрик и различных аспектов взаимосвязи магнитных и электрических свойств твердых тел. Гамильтониан модели имеет следующий вид:

$$H = \sum_{\mathbf{f}} \left\{ \sum_{\sigma} \varepsilon X_{\mathbf{f}}^{\sigma\sigma} + (2\varepsilon + U) X_{\mathbf{f}}^{22} \right\} - \sum_{\mathbf{f}, \mathbf{m}, \sigma} t_{\mathbf{fm}} \left(X_{\mathbf{f}}^{\sigma 0} X_{\mathbf{m}}^{0\sigma} + X_{\mathbf{f}}^{2\bar{\sigma}} X_{\mathbf{m}}^{\bar{\sigma} 2} + \sigma \left(X_{\mathbf{f}}^{\sigma 0} X_{\mathbf{m}}^{\bar{\sigma} 2} + X_{\mathbf{m}}^{2\bar{\sigma}} X_{\mathbf{f}}^{0\sigma} \right) \right). \quad (8)$$

Здесь ε – энергия электрона на узле, U – кулоновское отталкивание двух электронов, находящихся на одном узле, $t_{\mathbf{fm}}$ – интеграл перескока с узла $\mathbf{m}$ на узел $\mathbf{f}$. Локальным базисом модели является следующий набор волновых функций: $|0\rangle$ – дырка на узле, $X^{\uparrow 0}|0\rangle = |\uparrow\rangle$ – электрон с проекцией спина $+1/2$ на узле, $X^{\downarrow 0}|0\rangle = |\downarrow\rangle$ – электрон с проекцией спина $-1/2$ на узле, $X^{20}|0\rangle = |2\rangle$ – «двойка» (два электрона с различными проекциями спина) на узле.

Модель Хаббарда отражает все основные свойства систем с СЭК и чрезвычайно полезна при описании ВТСП купратов. Именно этим обусловлен большой объем работ, предлагающих способы решения основной задачи статистической физики для этой модели (см., например, обзоры [6, 7]). Здесь мы остановимся лишь на тех из них, которые наиболее важны в связи с обсуждаемой в данной работе проблематикой. Начнем с обзора работ, посвященных точному решению одномерной модели Хаббарда при произвольном значении U . Отметим уже сейчас, что интегрируемость модели является «хрупким» свойством: добавление лишь одного дополнительного слагаемого к гамильтониану может привести к нарушению указанного свойства, несмотря на то, что физические свойства могут при этом практически не измениться. Еще одной важной особенностью интегрируемости является то, что она практически всегда имеет место лишь в пространстве размерности $d=1$. Отметим также, что еще не опубликовано работ, в которых точная интегрируемость была бы обнаружена при учете перескоков к соседям, более отдаленных друг от друга, чем ближайшие.

История точно решаемых моделей началась в 1931 г., когда Г. Бете опубликовал свою ставшую впоследствии знаменитой работу [8] о гейзенберговской цепочке спинов $1/2$. Им была сконструирована многочастичная волновая функция

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_M) = \sum_P \varphi_P \exp\left(i \sum_{j=1}^M k_{p_j} x_j\right), \quad (9)$$

$$\varphi_P = (-1)^{\eta_P} \varphi_{\{1,2,\dots,M\}} \exp\left(-i \sum \theta(p_j, p_l)\right), \quad (10)$$

где $x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_M$ – координаты узлов решетки, на которых электроны имеют спин вниз, $k_1, k_2, \dots, k_M$ – набор квантовых чисел (волновых векторов), удовлетворяющих определенной системе алгебраических уравнений (см. ниже), P – какая-либо перестановка множества $\{1, 2, \dots, M\}$, суммирование в (9) ведется по всевозможным перестановкам указанного множества (их количество, очевидно, составляет $M!$), η_P – четность перестановки P , суммирование θ -факторов в (10) ведется по всем парам индексов из исходной расстановки индексов у функции φ_P , которые необходимо транспонировать, чтобы прийти к правильной расстановке индексов, т. е. к функции $\varphi_{\{1,2,\dots,M\}}$. Выражение для θ -фактора мы здесь не приводим; его можно найти, например, в [9]. Проблема вычисления спектра гамильтониана была сведена Бете к решению системы алгебраических уравнений (уравнений Бете), которые в случае, например, изотропной ферромагнитной цепочки имеют вид:

$$\left(\frac{\lambda_j + i/2}{\lambda_j - i/2} \right)^N = \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq j}}^M \frac{\lambda_j - \lambda_l + i}{\lambda_j - \lambda_l - i}, \quad (11)$$

где $\lambda_j = \frac{1}{2} \operatorname{ctg}\left(\frac{k_j}{2}\right)$, $j = 1, 2, \dots, M$, N – количество узлов в системе. В работе были вычислены все свойства основного состояния и найден спектр элементарных возбуждений гейзенберговской модели. Во времена Бете его работа рассматривалась как имеющий достаточно большие последствия прорыв: среди прочего были основания считать, что его идеи могут служить шагом на пути решения основной задачи статистической физики для гейзенберговской модели в пространствах двух и трех измерений.

Следующая веха в истории интегрируемых моделей относится к 1944 г., когда Л. Онзагер в работе [10] предложил точное решение двумерной модели Изинга, базирующееся на симметричной алгебре бесконечной размерности (алгебре Онзагера) и приближении квантовой трансфер-матрицы. Решение Онзагера очень громоздко и весьма трудно для понимания, поэтому здесь мы отмечаем лишь сам факт интегрируемости модели, не приводя никаких выкладок и окончательных результатов (хорошая сводка которых содержится, например, в монографии [11]). Работа Онзагера оказала большое влияние на микроскопические основания общей теории фазовых переходов и показала, что сингулярности в свободной энергии могут быть получены прямым вычислением статистической суммы микроскопической модели.

Изотропная модель Гейзенберга явилась в истории точно решаемых моделей одной из немногих систем, точное решение которой достигается применением простого анзаца Бете, т. е. представлением волновой функции в форме (9), (10). Для этой модели приходится рассматривать систему M взаимодействующих частиц (спиновых отклонений), которые не имеют внутренней структуры, и их состояние целиком задается их положением в цепочке (координатой). Взаимодействие таких частиц сводится лишь к обмену импульсами. Обобщение анзаца Бете на модели с внутренними степенями свободы, такими как спин, сталкивалось с большими трудностями. В 1967 г. эта проблема была решена Ц. Н. Янгом [12] и М. Гаудином [13], которые создали концепцию так называемого вложенного анзаца Бете. Волновая функция вложенного анзаца Бете имеет вид:

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_N; \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = \sum_{P \in S_N} \text{sign}(PQ) \varphi_P(\sigma_{Q1}, \dots, \sigma_{QN}) \exp\left(i \sum_{j=1}^N k_{Pj} x_{Qj}\right), \quad (12)$$

$$\varphi_P(\sigma_{Q1}, \dots, \sigma_{QN}) = \sum_{\pi \in S_M} A(\lambda_{\pi 1}, \dots, \lambda_{\pi M}) \prod_{l=1}^M F_P(\lambda_{\pi l}; y_l), \quad (13)$$

$$F_P(\lambda; y) = \frac{1}{\lambda - \sin k_{P_y} + iU/4} \prod_{j=1}^{y-1} \frac{\lambda - \sin k_{P_j} - iU/4}{\lambda - \sin k_{P_j} + iU/4}, \quad (14)$$

$$A(\lambda_1, \dots, \lambda_M) = \prod_{1 \leq m \leq n \leq M} \frac{\lambda_m - \lambda_n - iU/2}{\lambda_m - \lambda_n}, \quad (15)$$

причем для функции $\varphi_P(\sigma_{Q1}, \dots, \sigma_{QN})$ справедливо следующее соотношение:

$$\varphi_P(\dots, \sigma_i, \dots, \sigma_j, \dots) = \sum_{\sigma'_i, \sigma'_j} S_{\sigma_j \sigma'_j}^{\sigma_i \sigma'_i} \varphi_P(\dots, \sigma'_i, \dots, \sigma'_j, \dots), \quad (16)$$

где $S_{\sigma_j \sigma'_j}^{\sigma_i \sigma'_i}$ – так называемая двухчастичная матрица рассеяния. Условие применимости вложенного анзаца Бете – это подходящее разложение многочастичных процессов рассеяния в двухчастичные. Согласованность требует того, чтобы двухчастичные матрицы рассеяния удовлетворяли конечной системе алгебраических уравнений – так называемым уравнениям Янга-Бэкстера:

$$\sum_{\sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3} S_{\sigma_2 \sigma'_2}^{\sigma_1 \sigma'_1}(k_1, k_2) S_{\sigma_3 \sigma'_3}^{\sigma'_1 \sigma'_2}(k_1, k_3) S_{\sigma'_3 \sigma'_2}^{\sigma'_2 \sigma'_1}(k_2, k_3) = \sum_{\sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3} S_{\sigma_3 \sigma'_3}^{\sigma_2 \sigma'_2}(k_2, k_3) S_{\sigma'_3 \sigma'_1}^{\sigma_1 \sigma'_1}(k_1, k_3) S_{\sigma'_2 \sigma'_1}^{\sigma'_2 \sigma'_2}(k_1, k_2). \quad (17)$$

Роль уравнений Янга-Бэкстера как определяющей структуры интегрируемых моделей была подчеркнута Л. Д. Фаддеевым, Е. К. Складным и Л. Тактажаном и другими членами математического института им. Стеклова. Они обосновали ту связь, которая существует между квантовыми многочастичными моделями, решаемыми методом анзаца Бете, и классическими интегрируемыми уравнениями эволюции [14 – 16]. Своими работами они инициировали систематические исследования по решению уравнений Янга-Бэкстера [17, 18] и разработали стратегию для решения интегрируемых моделей, которая сегодня известна как «квантовый метод обратной задачи рассеяния».

Вложенный анзац Бете сыграл ключевую роль при попытках проинтегрировать одномерную модель Хаббарда. Эта история началась в 1968 г.: Л. Х. Либ и Ф. Ву свели задачу об определении спектра гамильтониана одномерной модели Хаббарда к решению системы алгебраических уравнений

¹ Сами числа λ_i и k_j удовлетворяют при этом определенной системе уравнений (уравнениям Бете). В частном случае модели Хаббарда уравнения Бете – это уравнения Либ-Ву (формулы (18), (19)).

Бете (сегодня известных как уравнения Либа-Ву) [19]. Уравнения Либа-Ву записываются в виде:

$$e^{ik_j L} = \prod_{l=1}^M \frac{\lambda_l - \sin k_j - iU/4}{\lambda_l - \sin k_j + iU/4}, \quad j=1, \dots, N, \quad (18)$$

$$\prod_{j=1}^N \frac{\lambda_l - \sin k_j - iU/4}{\lambda_l - \sin k_j + iU/4} = \prod_{\substack{m=1 \\ m \neq l}}^M \frac{\lambda_l - \lambda_m - iU/2}{\lambda_l - \lambda_m + iU/2}, \quad l=1, \dots, M, \quad (19)$$

где k_j и λ_j – так называемые зарядовые импульсы и быстроты, N – количество узлов в системе, M – количество узлов со спином вниз. Им также удалось получить выражение для энергии основного состояния:

$$E_0 = -4N_e |t| \int_0^\infty \frac{d\alpha J_0(\alpha) J_1(\alpha)}{\alpha [1 + \exp(\alpha U / |t|)]}, \quad (20)$$

где $J_0(\alpha)$, $J_1(\alpha)$ – функции Бесселя первого рода нулевого и первого порядков соответственно, и продемонстрировать, что одномерная модель Хаббарда подвержена переходу Мотта металл-диэлектрик при половинном заполнении (один электрон на узел) и взаимодействии $U=0$. Спустя 35 лет после фундаментальной работы Либа-Ву в печати появились сотни публикаций по данной тематике. Здесь мы ограничимся рассмотрением нескольких из них, представляющими наибольший физический интерес.

В 1972 г. М. Такахаши в работе [20] предложил классификацию решений уравнений Либа-Ву. Ему удалось заменить систему уравнений Либа-Ву системой интегральных уравнений (уравнений Такахаши), которые определяют свободную энергию модели Хаббарда. Решая полученную систему в пределе малых температур, Такахаши вычислил теплоемкость [21]. Позднее путем решения этих уравнений была получена и более полная картина термодинамики одномерной модели Хаббарда [22, 23].

Фактически, уравнения Такахаши могут быть использованы для вычисления любой физической величины, которая имеет отношение к энергетическому спектру модели Хаббарда. В частности, дисперсионные кривые всех элементарных возбуждений могут быть получены из этих уравнений в пределе $T \rightarrow 0$ [24]. Ограничения на квантовые числа уравнений Такахаши подразумевают наличие конечного набора правил, которые определяют дозволённые комбинации элементарных возбуждений и поэтому спектр элементарных возбуждений [24]. Исторически сложилось так, что пионерские работы, в которых были вычислены свойства основного состояния [19, 25–27] и спектр элементарных возбуждений [28–34], следовали существенно разным физическим подходам. На сегодняшний день подход, основывающийся на использовании анзаца Бете, признается специалистами как самый систематический подход для изучения основного состояния и спектра возбуждений одномерной модели Хаббарда.

Уравнения Такахаши также могут служить отправной точкой для вычисления матрицы рассеяния элементарных возбуждений. Для наполовину заполненной модели Хаббарда S -матрица была вычислена в [35, 36]. В этих работах было показано, что спектр элементарных возбуждений при половинном заполнении дается рассеивающими состояниями четырех элементарных возбуждений: холоном и антихолоном со спинами 0 и зарядами $\pm e$ и электрически нейтральными спинонами со спинами вверх и вниз соответственно. Примечательно, что вдали от половинного заполнения или при конечном магнитном поле число элементарных возбуждений бесконечно [24].

Одномерная модель Хаббарда также имела огромное концептуальное значение в интерпретации экспериментов в квазиодномерных материалах. Хотя эта модель и не отображает весь комплекс явлений в любом из существующих материалов, многие ее количественные особенности имеют место в реальной природе: существует большое количество материалов, в которых электронные степени свободы описываются гамильтонианами типа гамильтониана модели

Хаббарда. Примерами являются купратные цепочки Sr_2CuO_3 и SrCuO_2 [37, 38], органические проводники, такие как соль Бекгаарда [39, 40] или TTF-TCNQ [41]², и π -связанные полимеры [42, 43], такие как полидицеталин.

Перейдем теперь к рассмотрению работ по одномерной модели Хаббарда в частном случае $U \rightarrow \infty$, а также наметим краткую программу предлагаемого в настоящей работе решения. Отметим, прежде всего, что в пределе $U \gg t$ оказывается чрезвычайно удобным разложение гамильтониана Хаббарда по малому параметру $\frac{t}{U}$. В результате оказывается возможным получить низкоэнергетический аналог модели Хаббарда. Такой аналог был построен в работах [44, 45]. Полученная модель получила название t - J^* -модели. Ее гамильтониан имеет следующий вид:

$$H_{tJ^*} = H_{tJ} + H^{(3)}, \quad (21)$$

$$H_{tJ} = \sum_{\mathbf{f}, \sigma} \varepsilon X_{\mathbf{f}}^{\sigma\sigma} - \sum_{\mathbf{f} \neq \mathbf{m}, \sigma} t_{\mathbf{fm}} X_{\mathbf{f}}^{\sigma 0} X_{\mathbf{m}}^{0\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{f} \neq \mathbf{m}, \sigma} J_{\mathbf{fm}} (X_{\mathbf{f}}^{\sigma\bar{\sigma}} X_{\mathbf{m}}^{\bar{\sigma}\sigma} - X_{\mathbf{f}}^{\sigma\sigma} X_{\mathbf{m}}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}), \quad (22)$$

$$H^{(3)} = \sum_{\mathbf{f} \neq \mathbf{g}, \mathbf{m}, \sigma} \frac{t_{\mathbf{fm}} t_{\mathbf{mg}}}{U} (X_{\mathbf{f}}^{\bar{\sigma} 0} X_{\mathbf{m}}^{\sigma\bar{\sigma}} X_{\mathbf{g}}^{0\sigma} - X_{\mathbf{f}}^{\sigma 0} X_{\mathbf{m}}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_{\mathbf{g}}^{0\sigma}). \quad (23)$$

В выражениях (22) и (23) $t_{\mathbf{fm}}$ – интеграл перескока с узла $\mathbf{m}$ на узел $\mathbf{f}$, $J_{\mathbf{fm}} = 2 \frac{t_{\mathbf{fm}}^2}{U}$ – обменный интеграл, $X_{\mathbf{f}}^{\sigma 0} (X_{\mathbf{f}}^{0\sigma}) = a_{\mathbf{f}\sigma}^+ (a_{\mathbf{f}\sigma}) (1 - n_{\mathbf{f}\bar{\sigma}})$ – фермиевский оператор рождения (уничтожения), действующий в ограниченном гильбертовом пространстве с исключенными двухчастичными состояниями. Вследствие того, что $\frac{t_{\mathbf{fm}}^2}{U} \ll t_{\mathbf{fm}}$, слагаемое $H^{(3)}$ (так называемые трехцентровые взаимодействия) часто отбрасывают. Если же еще и пренебречь гейзенберговским обменом по сравнению с кинетической энергией электронов (что также вполне разумно вследствие указанного неравенства), то приходим к гамильтониану

² TTF – аббревиатура от англ. tetrathiafulvalene, тетратиафульвален, химическая формула $\text{C}_6\text{H}_4\text{S}_4$; TCNQ – аббревиатура от англ. tetracyanoquinodimethane, тетрацианохинодиметан, химическая формула $\text{C}_{12}\text{H}_4\text{N}_4$.

$$H = \varepsilon \sum_{\mathbf{f}, \sigma} X_{\mathbf{f}}^{\sigma\sigma} - \sum_{\mathbf{f}, \mathbf{m}, \sigma} t_{\mathbf{fm}} X_{\mathbf{f}}^{\sigma 0} X_{\mathbf{m}}^{0\sigma}. \quad (24)$$

Модель с гамильтонианом (24) называется в данной работе t -моделью. Ее точное интегрирование и составляет содержание глав II и III данной работы. Сразу отметим, что отбрасывание указанных членов не всегда законно, что было продемонстрировано в работе [46].

Как уже говорилось ранее, интегрирование гамильтониана (24) – существенно более простая задача, чем интегрирование гамильтониана (8). Скорее всего, именно поэтому исторически первые решения были основаны не на анзаце Бете, а на совершенно самостоятельных принципах. В работе [47], применяя теорию возмущений для большого термодинамического потенциала, авторы выводят соотношение, связывающее между собой электронную и бесспиновую статистические суммы. В работе [48] Д. Дж. Клейн находит унитарное преобразование, диагонализующее матрицу оператора (24). Благодаря этому автор точно вычисляет все термодинамические характеристики и приводит численно точные графики их температурных зависимостей. Отметим, наконец, работы [49, 50], использующие для вычисления термодинамических характеристик анзац Бете.

Предложенное в данной работе решение не опирается на анзац Бете. Оказывается, что, применяя непertурбативные методы статистической физики и линейной алгебры, возможно доказать установленное в [47] пертурбативными методами соотношение между статистической суммой электронов во внешнем магнитном поле и статистической суммой холонов (иначе, бесспиновых фермионов). Гамильтониан первой системы (электроны в магнитном поле) записывается в виде

$$H = \varepsilon \sum_{\mathbf{f}, \sigma} X_{\mathbf{f}}^{\sigma\sigma} - \sum_{\mathbf{f}, \mathbf{m}, \sigma} t_{\mathbf{fm}} X_{\mathbf{f}}^{\sigma 0} X_{\mathbf{m}}^{0\sigma} - h \sum_{\mathbf{f}} (X_{\mathbf{f}}^{\uparrow\uparrow} - X_{\mathbf{f}}^{\downarrow\downarrow}), \quad (25)$$

где ε – энергия электрона на узле, $t_{\mathbf{fm}}$ – интеграл перескока с узла $\mathbf{m}$ на узел $\mathbf{f}$, $h = g_s \mu_B B / 2$, g_s – спиновый фактор Ланде, μ_B – магнетон Бора, B – индукция

магнитного поля в веществе. Гамильтониан же холонной t -модели можно записать так:

$$H = \varepsilon \sum_{\mathbf{f}} X_{\mathbf{f}}^{11} - \sum_{\mathbf{f}, \mathbf{m}} t_{\mathbf{fm}} X_{\mathbf{f}}^{10} X_{\mathbf{m}}^{01}, \quad (26)$$

причем локальным базисом такой модели является следующий набор волновых функций: $|0\rangle$ – дырка на узле, $X^{10}|0\rangle = |1\rangle$ – холон на узле. Оказалось, что задача о вычислении термодинамических характеристик холонов, в свою очередь, имеет численно точное решение благодаря наличию фермиевского коммутационного соотношения между операторами рождения X^{10} и уничтожения X^{01} холонов. Благодаря этому получены зависимости термодинамических параметров от концентрации дырок, температуры и индукции магнитного поля.

Таким образом, применяемая методика расчета в своей основе очень проста, но, тем не менее, никогда не была отображена в литературе.

1.2. Электронная структура ВТСП купратов в режиме СЭК

Большинство ВТСП материалов имеют слоистую структуру. Базисным элементом этой структуры являются т. н. CuO_2 - плоскости. Эти плоскости разделены между собой слоем, состав которого может варьироваться в различных соединениях (это могут быть редкоземельные ионы, лантаниды и др.). Число плоскостей в элементарной ячейке также различно в различных соединениях. Допирование такой системы приводит к инжектированию дополнительных носителей в CuO_2 - плоскость. Поэтому по типу носителей ВТСП материалы принято делить на дырочные (р-тип проводимости) и электронные (n-тип, для последнего класса соединений эффект Холла отрицательный). Важной особенностью купратов является квазидвумерность физических свойств. Это свойство обусловлено в первую очередь тем, что величина параметра решетки в направлении, перпендикулярном CuO_2 - плоскостям, существенно превышает

внутриплоскостные линейные размеры [51]. Вследствие малого межплоскостного перекрытия волновых функций основную роль в низкоэнергетической физике всех слоистых ВТСП купратов играют гибридные орбитали меди и кислорода, лежащие в плоскости. Поэтому в дальнейшем, рассматривая свойства, общие для всего класса ВТСП купратов, мы будем говорить только о соединениях с наиболее простой кристаллической структурой. На рис. 1 отображены два семейства ВТСП купратов: $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO, T -структура, хорошо изученный представитель p -типа, рис.1а) и $\text{Ne}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (NCCO, T' -структура, хорошо изученный представитель n -типа, рис. 1б). Отличие T - и T' -структур с тетрагональной симметрией заключается в наличии апикального атома кислорода над CuO_2 -плоскостью в решетке T -типа. Кроме того, при допировании LSCO претерпевает структурный фазовый переход из орторомбической фазы в тетрагональную [52].

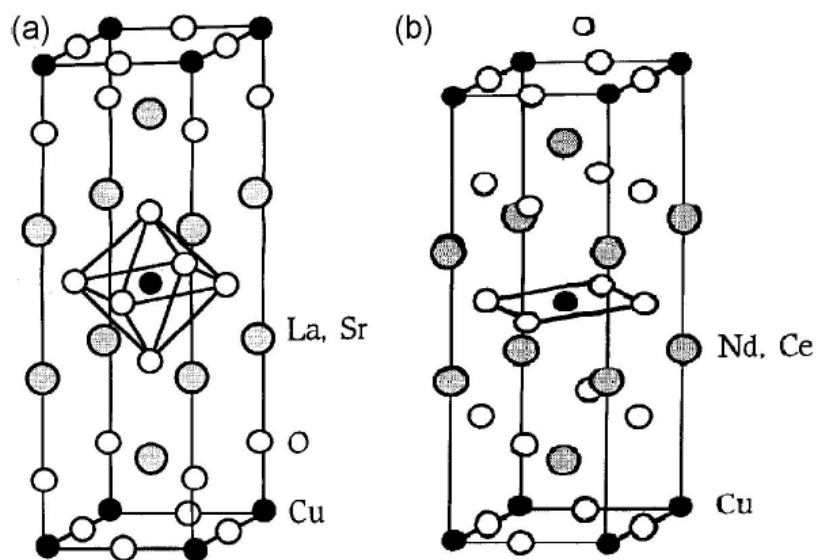


Рис. 1. Слоистая структура ВТСП купратов $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (а) и $\text{Ne}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (б) [52].

Фазовая диаграмма, общая для всех ВТСП купратов, приведена на рис. 2 [53]. В соответствии с классической зонной теорией недопированные оксиды должны быть парамагнитными металлами, поскольку они содержат нечетное число электронов на элементарную ячейку. Однако экспериментально установлено [54], что недопированные купраты являются диэлектриками с антиферромагнитным упорядочением спинов при температуре ниже температуры Нееля. Как показывают данные электронной спектроскопии, кулоновское взаимодействие двух 3d-электронов меди на одном узле в рассматриваемых соединениях много больше ширины зоны ($U \gg W$), что в свою очередь приводит к локализации электронов [51]. По этой причине ВТСП оксиды относят к классу систем с СЭК.

С ростом числа носителей тока дальний магнитный порядок в купратах разрушается, и система переходит в металлическое состояние. Асимметрия магнитных фазовых диаграмм ВТСП оксидов p- и n-типов связана с асимметрией

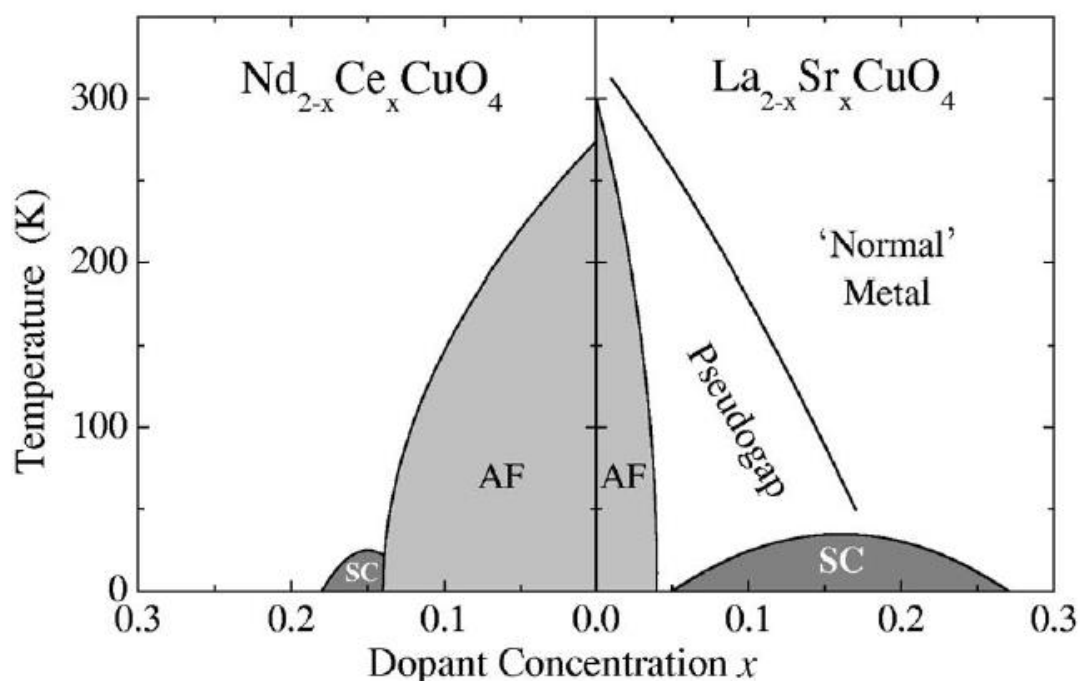


Рис.2. Фазовая диаграмма купратов n- (слева) и p-типов (справа) [53].

их электронной структуры [55]. В купратах р-типа при допировании заполняется конфигурация $3d^9L$, где L – дырка на кислороде, что приводит к фрустрации спинов, и резкому падению температуры Нееля до нуля при $x = 0.02$. В купратах п-типа антиферромагнитное упорядочение более устойчиво и сохраняется вплоть до $x = 0.12$, поскольку заполнение диамагнитной конфигурации $d^{10}p^6$ соответствует диамагнитному разбавлению решетки спинов ионов Cu^{2+} .

При дальнейшем увеличении концентрации носителей тока система переходит в сверхпроводящее состояние. Эксперименты по рассеянию нейтронов показывают, что антиферромагнитные флуктуации существуют не только в слабо допированных образцах, но и в области дырочных концентраций, где возможна сверхпроводимость. Зависимость спиновой корреляционной длины от концентрации носителей приближенно описывается функцией $3.8/\sqrt{x}$ Å, что соответствует среднему расстоянию между допированными дырками [56]. В области оптимального допирования x_{opt} характерные масштабы ближнего магнитного порядка составляют несколько параметров решетки [57]. Таким образом, даже для оптимально допированных составов движение электрона происходит на фоне сильных антиферромагнитных флуктуаций, что приводит к появлению теневых зон [58].

При концентрации носителей тока меньше оптимальной на фазовой диаграмме также наблюдается область так называемого псевдощелевого состояния. В этой области наблюдаются многочисленные аномалии электронных свойств как в нормальном, так и в сверхпроводящем состоянии. Они обусловлены резким падением плотности одночастичных возбуждений в окрестности уровня Ферми [59].

Затухание спиновой корреляционной длины [60] и исследования динамики квазичастиц [61] указывают на то, что в области оптимального допирования свойства системы резко меняются. Методами оптической спектроскопии были обнаружены следующие две основные особенности. Во-первых, в области

концентраций дырочного допирования, близких к оптимальному, наблюдается сильное уменьшение времен жизни возбужденных состояний. Во-вторых, при $x \approx x_{opt}$ изменяется знак коэффициента отражения – отношения отраженного потока излучения к падающему (рис.3). При этом оказалось, что поведение коэффициента отражения в области $x > x_{opt}$ хорошо описывается теорией БКШ. Кроме того оказалось, что свойства систем с концентрацией допированных носителей выше оптимальной возможно объяснить в рамках стандартной зонной теории [62]. По этой причине их принято относить к «нормальным» металлам.

Итак, на фазовой диаграмме область сверхпроводимости расположена «между» антиферромагнитным диэлектриком с одной стороны и «обычным» металлом с другой. Хорошо известно, что родоначальниками высокотемпературных сверхпроводников являются именно антиферромагнитные диэлектрики. Это указывает на важную роль спиновых возбуждений и возможность спаривания через антиферромагнитные спиновые флуктуации. В работах [52, 63] было показано, что сверхпроводящий параметр порядка в случае спин-флуктационного механизма спаривания имеет $d_{x^2-y^2}$ -симметрию. .

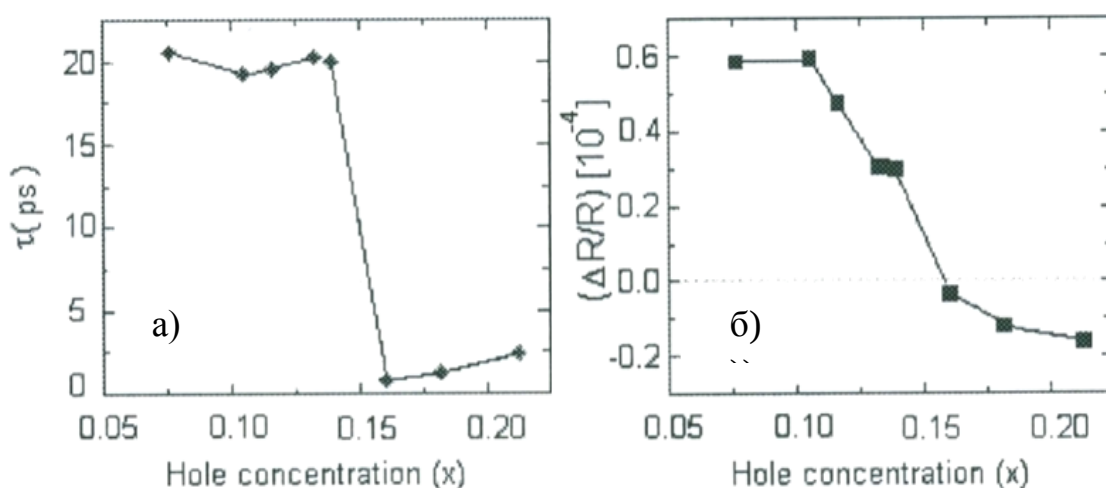


Рис.3. Сильное относительное изменение времен жизни возбужденных состояний (а) и отражательной способности (б) как функции допирования [61].

Энергетическая щель $d_{x^2-y^2}$ -симметрии является знакопеременной функцией волнового вектора и обращается в нуль на диагоналях квадрата первой зоны Бриллюэна. Эти линии нулей в $\mathbf{k}$ -пространстве и делают энергетически выгодным $d_{x^2-y^2}$ -спаривание в случае спин-флуктационного механизма. Действительно, эффективное взаимодействие электронов через флуктуации антиферромагнитного параметра порядка имеет характер отталкивания, если электроны находятся на одном узле, и притяжения, если электроны находятся на ближайших узлах.

Расположение нулей параметра порядка определяется симметрией волновой функции куперовской пары. Последняя, в свою очередь, определяется симметрией кристалла. Для тетрагонального кристалла группы D_{4h} возможная зависимость параметра порядка от волнового вектора определяется базисными функциями следующих неприводимых представлений: одномерными A_1 , A_2 , B_1 , B_2 и двумерным E [64]. В последнее время предложено большое количество экспериментальных методик, позволяющих определить симметрию параметра порядка. Все эти методики можно разделить на три основных группы. Первая группа объединяет измерения разных низкотемпературных характеристик сверхпроводников, таких как сдвиг Найта, скорость релаксации в ЯМР, измерение глубины проникновения в зависимости от температуры и др. Вторая группа экспериментов основана на непосредственном измерении фазы параметра порядка с помощью изучения интерференционных явлений в джозефсоновских контактах в магнитном поле. Наконец, третья группа направлена на прямое измерение величины энергетической щели в спектроскопическом эксперименте. Совокупность имеющихся экспериментальных данных [65, 66] позволяет сделать вывод о том, что сверхпроводящее состояние в ВТСП материалах описывается однокомпонентным нетривиальным параметром порядка, отвечающим синглетному спариванию и зависящему от $\mathbf{k}$ по закону

$\Delta_{d_{x^2-y^2}}(\mathbf{k}) = \Delta_{d_{x^2-y^2}}^0 (\cos(k_x a) - \cos(k_y a)) + \dots$ (многоточие указывает на высшие гармоники параметра порядка).

Теперь проанализируем основные теоретические подходы к описанию ВТСП систем. С этой целью обратимся сначала к результатам расчетов электронной структуры и свойств ВТСП оксидов в рамках стандартной зонной теории, основанной на методе функционала плотности (МФП) [67]. Как известно, этот метод позволяет свести проблему вычисления свойств основного состояния системы электронов, взаимодействующих друг с другом и с внешним потенциалом, к решению одночастичной задачи для электрона в некотором самосогласованном поле. Соответствующее этой задаче одночастичное стационарное уравнение Шредингера имеет вид:

$$\left[-\frac{1}{2m_e} \Delta_{\mathbf{r}} + \sum_n V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) + e^2 \int \frac{\sum_{\mathbf{k}, \lambda} |\psi_{\mathbf{k}, \lambda}(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 \mathbf{r}' + V_{\text{xc}}(\mathbf{r}) \right] \psi_{\mathbf{k}, \lambda}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\mathbf{k}, \lambda} \psi_{\mathbf{k}, \lambda}(\mathbf{r}), \quad (27)$$

где $V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ – электростатический потенциал взаимодействия электрона с n -ым ядром, $V_{\text{xc}}(\mathbf{r})$ – потенциал, обусловленный обменным взаимодействием:

$$V_{\text{xc}}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})}, \quad n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} |\psi_{\mathbf{k}, \lambda}(\mathbf{r})|^2, \quad (28)$$

где $E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]$ – это функционал обменной энергии, зависящий от распределения электронной плотности. Ввиду того, что точное выражение для этого функционала неизвестно, в расчетах обычно используется приближение локальной плотности:

$$E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})] = \int \varepsilon_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})] n(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r}, \quad (29)$$

где функция $\varepsilon_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]$ заменяется ее значением для однородного электронного газа соответствующей плотности n (LDA – Local Density Approximation). Решение

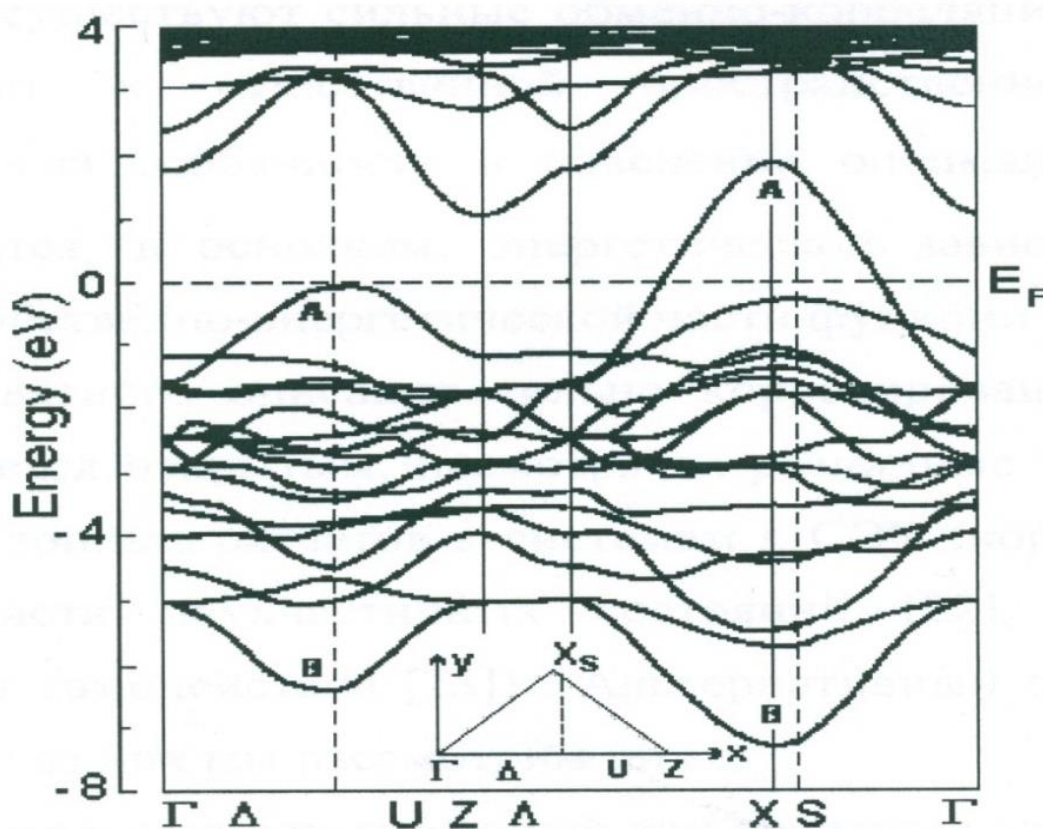


Рис 4. Электронная структура La_2CuO_4 , полученная методом функционала плотности (приближение локальной плотности). Верхняя (нижняя (анти-)) связывающие зоны CuO_2 -плоскостей: В (А), [68].

уравнения (28) определяет электронную зонную структуру кристалла, которая для недопированного La_2CuO_4 показана на рис. 4 [68].

Расчеты, основанные на зонной теории и первопринципных методах (такие, как LDA, LDA+U), учитывают кулоновское взаимодействие двух электронов на одном узле в рамках теории среднего поля. Поэтому они неправильно воспроизводят основное состояние систем с СЭК. Так, согласно LDA-расчетам, недопированный La_2CuO_4 – парамагнитный металл, тогда как на самом деле он является изолятором моттовского типа. Кроме того, реальный энергетический спектр одноэлектронных возбуждений, описываемый одночастичной функцией

Грина, определяется не только нелокальной координатной зависимостью собственно-энергетической части функции Грина $\Sigma_{xc}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$, но также и ее зависимостью от энергии ω , что ведет к дополнительной перенормировке массы квазичастиц и появлению у них затухания. Несмотря на перечисленные недостатки первопринципных зонных расчетов, метод функционала плотности с хорошей степенью точности воспроизводит такие характеристики сильно коррелированных систем, как удельный объем, упругие модули, оптические спектры, фононные частоты. Кроме того, МФП является эффективным инструментом для расчета матричных элементов ЭФВ и параметров электронной зонной структуры [62, 69].

Весьма странным на первый взгляд представляется тот факт, что вычисленные в рамках МФП ферми-поверхности сильно допированных ВТСП металлов оказываются в удивительном согласии с экспериментальными данными [70]. Вопрос о том, почему это происходит, требует отдельного обсуждения. Как было показано Латтинджером [71], поверхность Ферми в металле определяется уравнением вида:

$$\left[-\frac{1}{2m_e} \Delta_{\mathbf{r}} + \sum_n V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) + e^2 \int \frac{\sum_{\mathbf{k}, \lambda} |\psi_{\mathbf{k}, \lambda}(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 \mathbf{r}' \right] \psi_{\mathbf{k}, \lambda}(\mathbf{r}) + \int d^3 \mathbf{r}' \Sigma_{xc}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0) \psi_{\mathbf{k}, \lambda}(\mathbf{r}') = \varepsilon_{\mathbf{k}, \lambda} \psi_{\mathbf{k}, \lambda}(\mathbf{r}). \quad (30)$$

В отличие от выражения (27), где обменно-корреляционный потенциал $V_{xc}(\mathbf{r})$ является локальным оператором, уравнение (30) содержит нелокальный интегральный оператор $\Sigma_{xc}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)$. Отсюда можно предположить, что если в сильно допированных ВТСП системах ближние спиновые корреляционные эффекты подавлены, то они не приводят к существенной пространственной нелокальности $\Sigma_{xc}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0)$. Тогда особенности в поведении оптимально и сильно допированных систем определяются, в основном, энергетической зависимостью обменно-корреляционной собственно-энергетической части функции Грина [62].

Вопрос адекватного описания сильно коррелированных соединений в рамках МФП остается открытым, несмотря на различные попытки адаптации первопринципных зонных расчетов к системам с СЭК (коррекция потенциала плотности в области двухчастичных состояний [72], учет поправок к потенциалу за счет самодействия [73]). Альтернативный подход – модельные теории. Две из них – модель Хаббарда и t - J^* -модель мы уже рассмотрели в 1.1 (правда, в связи с совсем другими проблемами и лишь в одномерном случае). Ниже в 1.3 мы рассмотрим наиболее адекватную для ВТСП купратов модель в низкоэнергетической физике – трехзонную p-d-модель Эмери.

1.3. Модель Эмери и эволюция топологии поверхности Ферми в купратах с допированием

Трехзонная p-d-модель для CuO_2 -слоя была предложена В. Дж. Эмери в работе [74]. Ее гамильтониан имеет вид:

$$H = \sum_{\mathbf{f}, \mathbf{m}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{fm}} a_{\mathbf{f}\sigma}^+ a_{\mathbf{m}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{f}, \mathbf{m}, \sigma, \sigma'} U_{\mathbf{fm}} a_{\mathbf{f}\sigma}^+ a_{\mathbf{m}\sigma} a_{\mathbf{m}\sigma'}^+ a_{\mathbf{f}\sigma'}, \quad (31)$$

где суммирование ведется по узлам меди и кислорода, оператор $a_{\mathbf{f}\sigma}^+$ ($a_{\mathbf{f}\sigma}$) есть оператор рождения (уничтожения) электрона на узле $\mathbf{f}$ со спином σ в состоянии $d_{x^2-y^2}$ на меди или в p_x -, p_y -состояниях на кислороде. В (31) подразумевается, что 1) если $\mathbf{f}$ – узел меди (кислорода), то одночастичная энергия $\varepsilon_{\mathbf{ff}} = \varepsilon_d$ ($\varepsilon_{\mathbf{ff}} = \varepsilon_p$) и хаббардовское отталкивание $U_{\mathbf{ff}} = U_d$ ($U_{\mathbf{ff}} = U_p$), 2) если $\mathbf{f}$ – узел меди, а $\mathbf{m}$ – узел кислорода, то $\varepsilon_{\mathbf{fm}} = t_{\mathbf{fm}}$ – интеграл перескока, а $U_{\mathbf{fm}} = V_{\mathbf{fm}}$ – межатомное кулоновское взаимодействие медь-кислород. Если ограничиваться CuO_2 -слоем и считать влияние апикального кислорода пренебрежимо малым, то в гамильтониане (31) учитываются все взаимодействия, ответственные за

низкоэнергетические возбуждения в системе. Отметим, что более реалистичная модель CuO_2 -слоя, учитывающая высокоэнергетические возбуждения в системе, должна включать в себя также $d_{3z^2-r^2}$ -орбитали меди и p_z -орбитали апикального кислорода (в случае его наличия). Такая модель была предложена в работе [75], и называется многозонной p-d-моделью. В настоящей работе она не рассматривается.

В работе [76] Ф. Ч. Жанг и Т. М. Райс показали, что синглетное состояние, образованное конфигурацией дырка на меди – дырка на кислороде, имеющее суммарный спин, равный нулю, является самым низкоэнергетичным. В рамках модели Эмери триплетное состояние, образованное такой же конфигурацией, лежит выше синглетного на энергию порядка $\varepsilon_T - \varepsilon_S \approx 2 - 4$ эВ. При допировании дырки попадают в это синглетное состояние (так называемый синглет Жанга-Райса ZRS). По существу это означает, что существует принципиальная возможность описания купратов в рамках модели Хаббарда: возможно построение модели Хаббарда, в которой роль нижней хаббардовской зоны будет играть ZRS, а в роли верхней хаббардовской зоны выступает UHV меди. Движение дырки при этом происходит по решетке, узлы которой центрированы на меди и являются кластерами CuO_4 , а состояния на каждом узле образуют локальный базис модели Хаббарда: $|0\rangle$ – нульдырочное состояние, $|\sigma\rangle$ – однодырочное состояние со спином σ , $|ZRS\rangle$ – синглетное состояние. Последовательное сведение модели Эмери к модели Хаббарда и к t - J^* -модели производилось в [77-80], а также с помощью кластерной теории возмущений в [81-84]. При этом в трехцентровые слагаемые (23) принимают вид:

$$H^{(3)} = \sum_{f \neq g, m, \sigma} \frac{\tilde{t}_{fm} \tilde{t}_{mg}}{E_{ct}} (X_f^{\bar{\sigma}0} X_m^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma} - X_f^{\sigma0} X_m^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_g^{0\sigma}), \quad (32)$$

где $\tilde{t}_{fm}$ – матричный элемент межзонного перескока, E_{ct} – энергетическая щель

(типичные значения для нее 2-4 эВ), а определение обменного интеграла в (22) меняется на $J_{\text{fm}} = 2 \frac{\tilde{t}_{\text{fm}}^2}{E_{\text{ct}}}$.

Факт сводимости трехзонной p-d-модели Эмери к модели Хаббарда и t - J^* -модели играет чрезвычайно важную роль при попытках отследить эволюцию топологии поверхности Ферми в купратах с допированием (вторая часть настоящей работы). Авторы работы [85] сначала вычисляют энергетические параметры t - J^* -модели из энергетических параметров p-d-модели, которые в свою очередь были вычислены из первых принципов с помощью метода LDA [80]. Полученные авторами значения для La_2CuO_4 таковы:

$$\begin{aligned} t_1 &= -0.932 \text{ эВ}, t_2 = 0.12 \text{ эВ}, t_3 = -0.152 \text{ эВ}, \\ \tilde{t}_1 &= 0.768 \text{ эВ}, \tilde{t}_2 = -0.076 \text{ эВ}, \tilde{t}_3 = 0.121 \text{ эВ}, \\ J_1 &= 0.590 \text{ эВ}, J_2 = 0.006 \text{ эВ}, J_3 = 0.015 \text{ эВ}. \end{aligned}$$

Далее для нахождения зонного спектра авторы выходят за рамки приближения Хаббард-I и проектируют функции Грина высших порядков на функцию

$$G_{\sigma}(\mathbf{k}, E) = \left\langle \left\langle X_{\mathbf{k}}^{\sigma 0} \mid X_{\mathbf{k}}^{0\sigma} \right\rangle \right\rangle_E. \quad (33)$$

Метод расчета подробно описан в работе [86]. В результате для функции Грина (33) получается следующее выражение:

$$G_{\sigma}(\mathbf{k}, E) = \frac{(1+x)/2}{E - \varepsilon + \mu + \frac{1+x}{2} t(\mathbf{k}) - \frac{1-x^2}{4} \frac{\tilde{t}^2}{E_{\text{ct}}} + \Sigma(\mathbf{k})}, \quad (34)$$

в котором массовый оператор

$$\Sigma(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \frac{2}{1+x} \sum \left\{ Y_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) K(\mathbf{q}) - \frac{3}{2} Y_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) C(\mathbf{q}) \right\}, \quad (35)$$

где

$$Y_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = -t(\mathbf{q}) - \frac{1-x}{2} J(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - x \frac{\tilde{t}^2(\mathbf{q})}{E_{\text{ct}}} - (1+x) \frac{\tilde{t}(\mathbf{k}) \tilde{t}(\mathbf{q})}{E_{\text{ct}}}, \quad (36)$$

$$Y_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = -t(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \frac{1-x}{2} \left(J(\mathbf{q}) - \frac{\tilde{t}^2(\mathbf{k} - \mathbf{q})}{E_{\text{ct}}} \right) - (1+x) \frac{\tilde{t}(\mathbf{k}) \tilde{t}(\mathbf{k} - \mathbf{q})}{E_{\text{ct}}}. \quad (37)$$

В выражениях (34) – (37) ε – синглетная $d_{x^2-y^2}$ -дырочная энергия, μ – химический потенциал, $t(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{f}} t_{0\mathbf{f}} e^{i\mathbf{f}\mathbf{q}}$ – преобразование Фурье междоузельного перескока, $\tilde{t}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{f}} \tilde{t}_{0\mathbf{f}} e^{i\mathbf{f}\mathbf{q}}$ – аналогичная функция для перескока между зонами (прыжок с узла $\mathbf{f}$ на узел $\mathbf{0}$ с верхней хаббардовской зоны на нижнюю через щель E_{ct}), $C(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{f}} \langle X_0^{\sigma\bar{\sigma}} X_{\mathbf{f}}^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle e^{i\mathbf{f}\mathbf{q}}$ – преобразование Фурье спинового коррелятора, $K(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{f}} \langle X_0^{\sigma 0} X_{\mathbf{f}}^{0\sigma} \rangle e^{i\mathbf{f}\mathbf{q}}$ – аналогичная функция для кинематического коррелятора.

Зная зонный спектр, уже можно найти энергию Ферми и построить поверхность Ферми. Полученные авторами изменения топологии поверхности Ферми с допированием отображены на рис. 5. Из этого рисунка нетрудно отследить основные закономерности в эволюции топологии поверхности Ферми с ростом величины дырочного допирования. При малых дырочных концентрациях в системе в первой зоне Бриллюэна присутствуют четыре дырочных кармана, расположенные симметрично относительно точки (π, π) . По мере увеличения

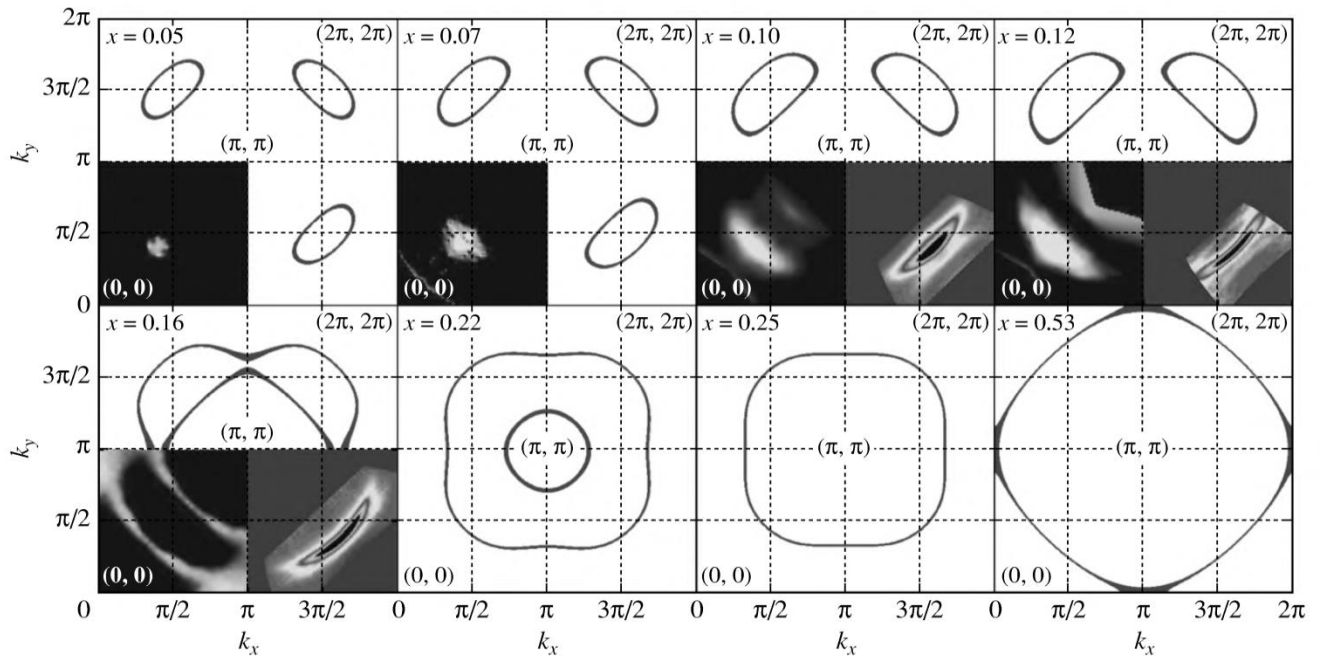


Рис. 5. Эволюция топологии пверхности Ферми в системе $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ при отсутствии внешнего давления [85]. Кардинальные изменения в топологии наблюдаются в точках $x_{c1} \approx 0.15$ и $x_{c2} \approx 0.24$.

допирования эти карманы все более и более вытягиваются, пока, наконец, при некотором значении дырочного допирования $x = x_{c1}$ не происходит кардинальная перестройка топологии поверхности Ферми: четыре дырочных кармана сливаются таким образом, что образуются один внешний дырочный и один внутренний электронный карманы (так называемый первый квантовый фазовый переход Лифшица). Далее по мере увеличения допирования внутренний карман постепенно стягивается в точку (π, π) . При $x = x_{c2}$ его площадь обращается в нуль. Это – второй квантовый фазовый переход Лифшица.

В полной аналогии с методами расчета, использованными в работе [85], в данной работе предпринята попытка отследить эволюцию топологии поверхности Ферми при приложении к системе $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ давлений следующих трех типов:

- гидростатического давления;
- давления в плоскости a - b ;
- давления вдоль оси c .

Отметим уже сейчас, что качественно эволюция топологии поверхности Ферми при наличии в системе давления та же, что и при его отсутствии, чего, впрочем, и следовало ожидать. Тем не менее, вследствие изменения численного значения концентраций дырочного допирования x_{c1} и x_{c2} , в которых происходят первый и второй квантовые фазовые переходы Лифшица соответственно, в некоторых узких интервалах дырочного допирования существует кардинальное различие топологии поверхностей Ферми в системах с давлением и без него. Более подробно указанные эффекты обсуждаются в гл. 4.

1.4. Сверхпроводимость в модели Хаббарда и t - J^* -модели

Сверхпроводимости в моделях Хаббарда и t - J^* -модели, механизмом которой служит спин-флуктуационное спаривание, посвящено большое количество работ.

Многие из них можно найти в обзоре [66]. Остановимся на тех из них, которые наиболее важны для целей данной работы.

Теория сверхпроводимости для t - J -модели (т. е. без учета трехцентровых слагаемых) на основе самосогласованного решения уравнений Элиашберга, полученных путем линеаризации уравнений движения для операторов Хаббарда, была предложена в работе [87]. В этом подходе спиновые корреляционные функции были вычислены не самосогласованно, а моделировались с помощью зависящей от корреляционной длины ξ спиновой восприимчивостью $\chi_s''(\mathbf{q}, \omega) = (-1/\pi) \text{Im} \langle \langle \mathbf{S}_{\mathbf{q}} | \mathbf{S}_{-\mathbf{q}} \rangle \rangle_{\omega}$. Из-за такого непоследовательного подхода некоторые физические выводы, касающиеся зависимости $T_c(x)$ в приближении сильной связи, имеют спорный характер. В пределе слабой связи была получена теория сверхпроводимости типа БКШ. Полученная в этом пределе зависимость $T_c(x)$ представлена на рис. 6. Как видим, величина оптимального допирования оказалась примерно в два раза больше экспериментально наблюдаемой: $\chi_{opt}^{t-J} \approx 0.33$, $\chi_{opt}^{exp} \approx 0.16$.

В работе [88], где сверхпроводимость исследовалась посредством решений уравнений Элиашберга для спин-поляронной формулировки t - t' - J -модели, было показано, что учет перескоков на следующие за ближайшими соседями может существенно изменить зависимость $T_c(x)$. Особенно существенным фактором оказался знак отношения t'/t , что продемонстрировано на рис. 7.

Мы не будем останавливаться здесь на исследованиях сверхпроводимости в модели Хаббарда. Заметим только, что этот вопрос представляет собой существенно более сложную задачу, чем для t - J -модели. Этому есть две основные причины. Первая состоит в том, что в модели Хаббарда присутствуют две энергетические зоны (в отличие от t - J -модели, где такая зона одна). Это в свою очередь ведет к увеличению количества уравнений движения на функции Грина. Вторая причина в том, что в t - J -модели уже выделено взаимодействие, приводящее к спин-флуктуационному механизму спаривания, —

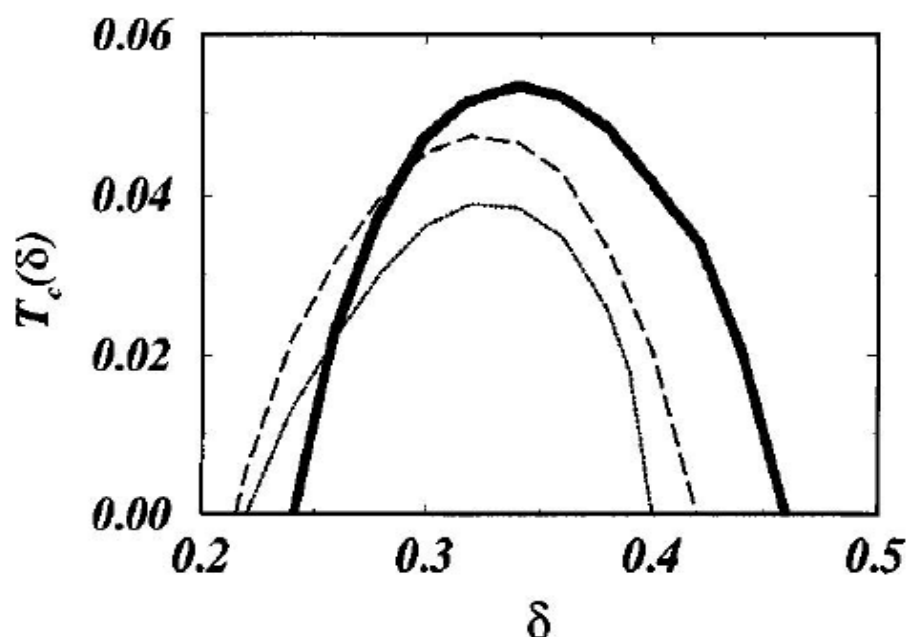


Рис. 6. Зависимость температуры сверхпроводящего перехода в t - J -модели (без учета трехцентровых слагаемых) от величины дырочного допирования. Жирная линия вычислена с учетом вершинных поправок, пунктирная линия – аналогичный расчет при $t'=0$, тонкая сплошная линия вычислена без учета вершинных поправок [87].

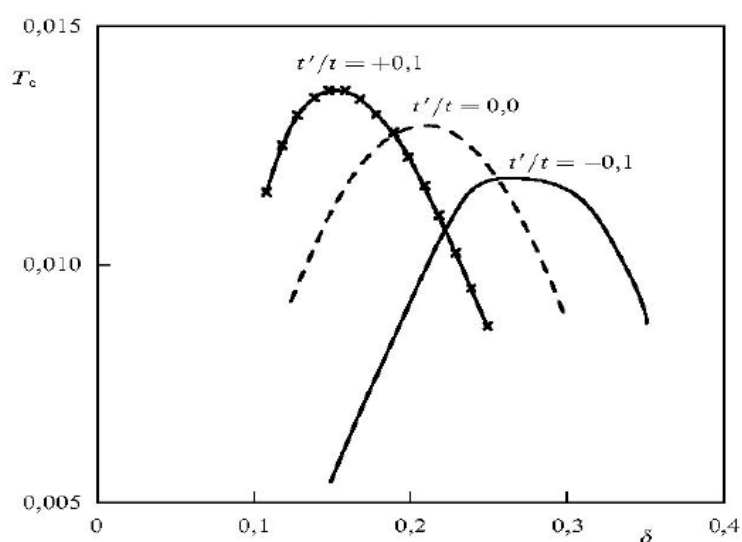


Рис. 7. Температура сверхпроводящего перехода в t - J -модели при учете перескоков ко вторым ближайшим соседям. Величина отношения t'/t играет важную роль [88].

антиферромагнитный обмен, в то время как в модели Хаббарда такое выделение еще предстоит сделать при формулировке теории сверхпроводимости.

Методом неприводимых функций Грина и диаграммной техникой для операторов Хаббарда сверхпроводимость с $d_{x^2-y^2}$ -симметрией параметра порядка исследовалась в работе [89], в которой впервые выявлена важная роль трехцентровых коррелированных перескоков при формировании сверхпроводящей фазы. Полученные уравнения на параметр порядка имеют вид:

$$\frac{1-x}{2} J_1 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\cos(k_x a) - \cos(k_y a))^2}{E^*(\mathbf{k})} \operatorname{th} \left(\frac{E^*(\mathbf{k})}{k_B T} \right) = 1 \quad (38)$$

для t - J^* -модели и

$$J_1 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\cos(k_x a) - \cos(k_y a))^2}{E(\mathbf{k})} \operatorname{th} \left(\frac{E(\mathbf{k})}{k_B T} \right) = 1. \quad (39)$$

для t - J -модели. Здесь $\begin{pmatrix} E^*(\mathbf{k}) \\ E(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\varepsilon^{*2}(\mathbf{k}) + \Delta^2(\mathbf{k})} \\ \sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{k}) + \Delta^2(\mathbf{k})} \end{pmatrix}$, $\varepsilon^*(\mathbf{k})$, $\varepsilon(\mathbf{k})$ – спектры

квазичастиц в несверхпроводящей фазе t - J^* - и t - J -моделей соответственно. Зависимости $T_c(x)$, полученные из уравнений (38) и (39), представлены на рис. 8. Видно, что для t - J -модели значения $T_c(x)$ в окрестности точки максимума более чем на порядок превосходят соответствующие значения для t - J^* -модели. Тем не менее, величина оптимального допирования примерно одинакова для обеих моделей: $x_{\text{opt}}^{t-J} \approx x_{\text{opt}}^{t-J^*} \approx 0.33$. Отметим еще, что теория сверхпроводимости с куперовским спариванием спиновых поляронов в рамках спин-фермионной модели купратов была также исследована в работах [90, 91]. В этих работах также было показано, что трехцентровые взаимодействия существенно повышают температуру сверхпроводящего перехода.

Естественно здесь поставить вопрос о применимости метода слабой связи в системе с СЭК. Действительно, уравнения (38) и (39) получены в режиме слабой связи, и сама теория сверхпроводимости по построению является теорией типа БКШ, а не Элиашберга. Доказательство применимости использованных подходов

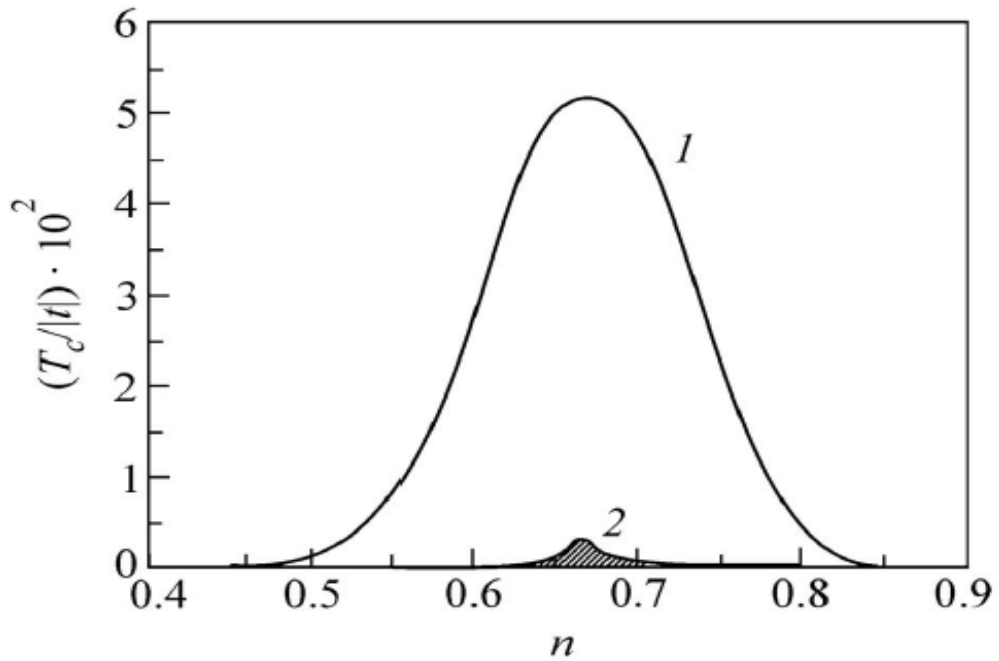


Рис. 8. Зависимость температуры сверхпроводящего перехода от концентрации электронов $n=1-x$ в t - J -модели (кривая 1) и в t - J^* -модели (кривая 2) [89].

приведено в работе [92], где в результате расчетов в рамках модели Хаббарда показано, что при спаривании двух частиц за счет антиферромагнитного обменного взаимодействия эффекты запаздывания (конечное время жизни квазичастиц) не важны. Поэтому для оценок температуры сверхпроводящего перехода можно использовать эффективную однозонную модель (t - J , t - J^* и подобные) с мгновенным обменным взаимодействием, как и в теории типа БКШ.

Известно, что в t - J^* -модели следует учитывать интегралы перескока вплоть до третьей координационной сферы. Учет отличности от нуля всех трех величин t_1 , t_2 , t_3 в t - J^* -модели при исследовании зависимости $T_c(x)$ был произведен в работе [93]. В ней был применен тот же метод, что и в [89] при получении уравнений (38), (39). Оказалось, что при учете перескоков вплоть до третьей координационной сферы параметр порядка должен быть записан в виде:

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_1 \varphi_1(\mathbf{k}) + \Delta_2 \varphi_2(\mathbf{k}), \quad (40)$$

$$\varphi_l(\mathbf{k}) = \cos(lk_x a) - \cos(lk_y a), \quad l = 1, 2, \quad (41)$$

причем Δ_1 и Δ_2 удовлетворяют следующей системе алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} \left(\frac{1-x}{2} J_1 \Phi_{11} - 1 \right) \Delta_1 + \frac{1-x}{2} J_1 \Phi_{12} \Delta_2 = 0, \\ \frac{1-x}{2} J_3 \Phi_{21} \Delta_1 + \left(\frac{1-x}{2} J_3 \Phi_{22} - 1 \right) \Delta_2 = 0, \end{cases} \quad (42)$$

где

$$\Phi_{ik} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \varphi_i(\mathbf{k}) \varphi_k(\mathbf{k}) \text{th} \left(\frac{E^*(\mathbf{k})}{2k_B T} \right), i=1, 2. \quad (43)$$

Уравнение на T_c имеет следующий вид:

$$\left(\frac{1-x}{2} J_1 \Phi_{11} - 1 \right) \left(\frac{1-x}{2} J_3 \Phi_{22} - 1 \right) = \frac{(1-x)^2}{4} J_1 J_3 \Phi_{12}^2. \quad (44)$$

Указанные в параграфе 1.3 на стр. 27 численные значения параметров t - J^* -модели, тем не менее, позволяют сделать вывод, что $J_3 \ll J_1$. Деля обе части уравнения (44) на J_1^2 , убеждаемся, что при выполнении указанного условия уравнение (44) на T_c упрощается и принимает форму уравнения (38), в котором предполагается $\Delta_1 = 0$. По этой причине это уравнение (при $\Delta_1 = 0$) и используется в настоящей работе для отыскания концентрационной зависимости температуры сверхпроводящего перехода при приложении к системе $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ давлений различной симметрии. Отметим, наконец, что вследствие неравенства $J_3 \ll J_1$ верно также неравенство $\Delta_2 \ll \Delta_1$, что было доказано прямыми расчетами в работе [93].

1.5. Постановка задачи

Обобщая сказанное в предыдущих параграфах, сформулируем решаемые в данной работе задачи.

1. При учете перескоков только между ближайшими соседями доказать точное соотношение между статистическими суммами одномерных холонной t -модели и электронной t -модели в магнитном поле.

2. Получить численно точные зависимости основных термодинамических параметров одномерной электронной t -модели в магнитном поле от концентрации дырочного допирования, температуры и индукции магнитного поля в веществе.
3. Выявить наиболее важные особенности в поведении термодинамических характеристик (в зависимости от дырочной концентрации, температуры и индукции магнитного поля).
4. Исследовать эволюцию топологии поверхности Ферми в системе $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ под давлениями различных симметрий (гидростатического давления, давления в плоскости a - b , давления вдоль оси c). Выявить диапазоны концентрации дырочного допирования, в которых наблюдается большая величина относительного изменения площади экстремальных сечений поверхности Ферми относительно случая нулевого давления.
5. Рассчитать зависимости $T_c(x)$ для всех изучаемых типов симметрий давления и сравнить величины логарифмических производных $\frac{d \ln T_c}{dp}$ с приводимыми в экспериментальных работах.

Глава II. Обоснование связи между статистическими суммами холонов и электронов

Настоящая глава посвящена выводу соотношения между статистическими суммами холонов (гамильтониан (26)) и электронов в магнитном поле (гамильтониан (25)). Как будет видно из последующего изложения, для этого будут привлечены только непертурбативные методы, а именно простейшие теоремы линейной алгебры и основы статистической физики. Все излагаемые в главах II и III оригинальные результаты были получены в работах [94, 95].

2.1. Точное решение для электронов при $t = 0$ (атомный предел в магнитном поле)

Анализ общего решения основной задачи статистической физики для системы с гамильтонианом (25) начнем с простейшего случая, когда второе слагаемое в указанном гамильтониане отсутствует (так называемый атомный предел). В этом случае оказывается возможным получить точное решение в пространстве произвольной размерности. Для статистической суммы имеем следующее выражение:

$$Z_{t=0} = \text{Sp} \left(\exp \left(-\frac{H}{k_B T} \right) \right) = \text{Sp} \left(\exp \left(-\frac{H_0 + H_m}{k_B T} \right) \right), \quad (45)$$

где

$$H_0 = \varepsilon \sum_{\mathbf{f}, \sigma} X_{\mathbf{f}}^{\sigma\sigma}, \quad (46)$$

$$H_m = -h \sum_f (X_f^{\uparrow\uparrow} - X_f^{\downarrow\downarrow}) \quad (47)$$

Непосредственным вычислением убеждаемся в том, что коммутатор этих операторов равен нулю:

$$[H_0, H_m] = 0. \quad (48)$$

Равенство (48) позволяет переписать выражение (45) следующим образом:

$$Z_{t=0} = \text{Sp} \left(\exp \left(-\frac{H_0}{k_B T} \right) \exp \left(-\frac{H_m}{k_B T} \right) \right). \quad (49)$$

Кроме того, заметим, что матрица оператора H_0 диагональна в любом базисе, причем все диагональные матричные элементы одинаковы и равны $N_e \varepsilon$ (N_e – количество электронов в системе). Благодаря этому обстоятельству выражение (49) принимает следующую форму:

$$Z_{t=0} = \exp \left(-\frac{N_e \varepsilon}{k_B T} \right) \text{Sp} \left(\exp \left(-\frac{H_m}{k_B T} \right) \right). \quad (50)$$

Дальнейшие рассуждения будем вести в конкретно обозначенном базисе волновых функций. Именно, в качестве базисных волновых функций возьмем функции вида:

$$\psi = \psi_1 \psi_2 \dots \psi_N = \prod_{i=1}^N \psi_i, \quad (51)$$

где

$$\psi_i = \begin{cases} |0\rangle_i, & \text{если узел } i \text{ не оккупирован электроном,} \\ |\uparrow\rangle_i, & \text{если узел оккупирован электроном со спином } +\frac{1}{2}, \\ |\downarrow\rangle_i, & \text{если узел оккупирован электроном со спином } -\frac{1}{2}. \end{cases} \quad (52)$$

Теперь проанализируем общий вид матрицы $\exp\left(-\frac{H_m}{k_B T}\right)$ в базисе (51), (52).

Заметим в первую очередь, что матрица оператора H_m , а потому и матричная экспонента $\exp\left(-\frac{H_m}{k_B T}\right)$, являются квадратными матрицами с размерами $2^{N_e} C_N^{N_e} \times 2^{N_e} C_N^{N_e}$ каждая³. Будем представлять себе каждую из этих матриц как блочную размерами $C_N^{N_e} \times C_N^{N_e}$, причем размер каждого отдельно взятого блока есть $2^{N_e} \times 2^{N_e}$. Очевидно, что такое разбиение матрицы на блоки при заданном упорядочении всех $2^{N_e} C_N^{N_e}$ состояний типа (51), (52) может быть осуществлено единственным способом. Всякий раз употребляя в дальнейшем слово «блок», мы имеем в виду именно один из блоков размерами $2^{N_e} \times 2^{N_e}$ таким (единственно возможным) образом разбитой на блоки рассматриваемой в контексте матрицы. При этом остается в силе одно важное правило. Если через $\left\{ \left| \psi \right|_i^{k_1 k_2 \dots k_{N_e}} \right\}$ и $\left\{ \left| \psi \right\rangle_j^{k_1 k_2 \dots k_{N_e}} \right\}$ обозначить набор бра- и кет-векторов, на которых образуется ij -ый блок рассматриваемой матрицы, то все бра-состояния $\left\{ \left| \psi \right|_i^{k_1 k_2 \dots k_{N_e}} \right\}$ выбираются так, что они не отличаются друг от друга номерами узлов, на которых находятся электроны, а отличаются лишь направлениями спинов в некоторых из позиций, в которых находятся электроны. То же замечание справедливо и для кет-состояний $\left\{ \left| \psi \right\rangle_j^{k_1 k_2 \dots k_{N_e}} \right\}$ ⁴.

Во вторую очередь заметим, что матрица оператора H_m в базисе функций (51), (52) диагональна. Это утверждение непосредственно следует из анализа

³ Действительно, существует ровно $C_N^{N_e}$ способов распределения N_e электронов по N узлам. Каждому такому способу отвечает 2^{N_e} способов распределения спинов электронов. Всего, соответственно, существует $2^{N_e} C_N^{N_e}$ состояний типа (51), (52). Этому же равны размерность пространства и размерность матриц линейных операторов в этом пространстве.

⁴ Здесь подразумевается, что каждый индекс k_r , $r=1,2,\dots,N_e$, может принимать два значения: $\uparrow$ или $\downarrow$. Нижний индекс у набора волновых функций по существу обозначает, в каких именно N_e узлах из N возможных находятся электроны. Данный (нижний) индекс может принимать, очевидно, $C_N^{N_e}$ значений.

действия оператора H_m на состояния типа (51), в котором каждая из функций ψ_i определяется равенством (52). Диагональность матрицы оператора H_m в указанном базисе влечет за собой диагональность матрицы оператора $\exp\left(-\frac{H_m}{k_B T}\right)$ в этом же базисе.

Наконец, в-третьих, обратим внимание на то, что операторы $X_f^{\uparrow\uparrow}$ и $X_f^{\downarrow\downarrow}$ представляют собой просто операторы числа частиц со спином вверх и вниз соответственно. Их воздействие на состояния типа (51), (52) никак не зависит от взаимного расположения узлов, на которых находятся электроны со спином вверх и вниз и на которых находятся дырки, а зависит только от количества электронов со спином вверх и количества электронов со спином вниз. В совокупности же кет-(бра-) состояний, на которых строится данный конкретный блок матрицы оператора H_m , состоящей из 2^{N_e} штук (состояний), взаимное расположение узлов, на которых находятся электроны со спином вверх и вниз и на которых находятся дырки, не изменяется. Это означает, что если упорядочивать в рамках каждой из совокупностей все состояния по одному и тому же принципу, то все $C_N^{N_e}$ диагональных блоков матрицы оператора H_m равны между собой как матрицы. Уже отсюда нетрудно заключить, что и все $C_N^{N_e}$ диагональных блоков матричной экспоненты $\exp\left(-\frac{H_m}{k_B T}\right)$ тоже равны между собой как матрицы.

Обозначим через Σ сумму всех диагональных элементов одного диагонального блока матрицы $\exp\left(-\frac{H_m}{k_B T}\right)$. Обобщая вышесказанное в этом параграфе, нетрудно заключить, что статистическая сумма в случае $t = 0$ может быть записана следующим образом:

$$Z_{t=0} = \exp\left(-\frac{N_e \mathcal{E}}{k_B T}\right) C_N^{N_e} \Sigma. \quad (53)$$

Таким образом, для вычисления статистической суммы остается лишь вычислить величину Σ . Для расчета величины Σ удобно с самого начала указать способ упорядочения 2^{N_e} состояний, не отличающихся друг от друга месторасположением спинов, а отличающимися только направлениями спинов в некоторых из фиксированных позиций, в которых находятся электроны. Этот способ по существу представляет собой способ упорядочения чисел в двоичной системе счисления. Взяв в качестве 0 спин $\downarrow$, а в качестве 1 – $\uparrow$, для системы из трех спинов будем, например, иметь

$$1) \downarrow\downarrow\downarrow; 2) \downarrow\downarrow\uparrow; 3) \downarrow\uparrow\downarrow; 4) \downarrow\uparrow\uparrow; 5) \uparrow\downarrow\downarrow; 6) \uparrow\downarrow\uparrow; 7) \uparrow\uparrow\downarrow; 8) \uparrow\uparrow\uparrow. \quad (54)$$

Обозначим через Σ_k сумму первых 2^k диагональных элементов диагонального блока матрицы $\exp\left(-\frac{H_m}{k_B T}\right)$. Воздействием оператора H_m на состояния типа (51), (52) легко убедиться в том, что

$$\Sigma_1 = \exp\left(-\frac{h}{k_B T} N_e\right) \left(1 + \exp\left(\frac{2h}{k_B T}\right)\right),$$

$$\Sigma_2 = \exp\left(-\frac{h}{k_B T} N_e\right) \left(1 + \exp\left(\frac{2h}{k_B T}\right)\right)^2.$$

Общая формула:

$$\Sigma_k = \exp\left(-\frac{h}{k_B T} N_e\right) \left(1 + \exp\left(\frac{2h}{k_B T}\right)\right)^k \quad (55)$$

легко доказывается методом математической индукции. Действительно, из указанного выше правила образования упорядоченных состояний следует, что последние 2^k из первых 2^{k+1} диагональных элементов блока получаются путем

умножения первых 2^k элементов на множитель $\exp\left(\frac{2h}{k_B T}\right)$. Тогда из этого факта и индуктивного предположения (55) вытекает справедливость равенства

$$\Sigma_{k+1} = \Sigma_k + \exp\left(\frac{2h}{k_B T}\right) \Sigma_k = \exp\left(-\frac{h}{k_B T} N_e\right) \left(1 + \exp\left(\frac{2h}{k_B T}\right)\right)^{k+1},$$

чем доказана общая формула (55).

Очевидно, далее, что

$$\Sigma = \Sigma_{N_e}.$$

Путем элементарных преобразований (55) при $k = N_e$ получаем окончательный ответ:

$$\Sigma = \left(2 \operatorname{ch}\left(\frac{h}{k_B T}\right)\right)^{N_e}. \quad (56)$$

Таким образом, для статистической суммы получаем следующий окончательный ответ:

$$Z_{t=0} = \left(2 \operatorname{ch}\left(\frac{h}{k_B T}\right)\right)^{N_e} C_N^{N_e} \exp\left(-\frac{N_e \varepsilon}{k_B T}\right). \quad (57)$$

Вводя обозначение $x = 1 - \frac{N_e}{N}$ для концентрации дырок, из (57) с использованием асимптотической формулы Стирлинга $n! \approx \left(\frac{n}{e}\right)^n$ и хорошо известных тождеств статистической физики и термодинамики последовательно получаем все термодинамические характеристики:

$$f = \varepsilon(1-x) + k_B T \left(x \ln x + (1-x) \ln(1-x) - (1-x) \ln \left(2 \operatorname{ch}\left(\frac{h}{k_B T}\right) \right) \right) - \quad (58)$$

свободную энергию,

$$s = -k_B \left(x \ln x + (1-x) \ln(1-x) - (1-x) \ln \left(2 \operatorname{ch} \left(\frac{h}{k_B T} \right) \right) \right) - (1-x) \frac{h}{T} \operatorname{th} \left(\frac{h}{k_B T} \right) - \quad (59)$$

энтропию,

$$u = (1-x) \left(\varepsilon - h \operatorname{th} \left(\frac{h}{k_B T} \right) \right) - \quad (60)$$

внутреннюю энергию,

$$c = (1-x) \frac{h^2}{k_B T^2} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \left(\frac{h}{k_B T} \right)} - \quad (61)$$

теплоемкость,

$$\mu = \varepsilon - k_B T \ln \frac{2 \operatorname{ch} \left(\frac{h}{k_B T} \right) x}{1-x} - \quad (62)$$

химический потенциал, и, наконец,

$$\chi = \frac{1}{V} \frac{g_s^2 \mu_B^2 N_e}{4 k_B T} - \quad (63)$$

магнитную восприимчивость (закон Кюри).

2.2. Точное решение для холонов при произвольном значении t

Обсудим другой предельный случай рассматриваемой задачи о точном вычислении термодинамических характеристик t -модели в магнитном поле.

Предположим, что магнитное поле равно нулю ($h = 0$) и, кроме того, что частицы не имеют спина. Подобные бесспиновые аналоги частиц, обладающих ненулевым зарядом и спином, получили специальное название – холоны. В случае холонов в отсутствие магнитного поля исходный гамильтониан видоизменяется и принимает вид (26). Холонная t -модель также точно интегрируема, и притом в пространстве произвольной размерности, что и будет продемонстрировано в этом параграфе. Отметим, кроме того, что во всех дальнейших рассуждениях данного параграфа не предполагается, что перескоки осуществляются лишь между ближайшими соседями – предлагаемое решение верно при учете сколь угодно большого числа соседей.

Для холонов справедлива статистика свободных фермионов Ферми-Дирака, что с очевидностью вытекает из условия полноты для операторов Хаббарда:

$$[X_f^{10}, X_m^{01}] = X_f^{10} X_m^{01} + X_m^{01} X_f^{10} = \delta_{fm}. \quad (64)$$

Соотношением (64) статистика определяется однозначно. Точное выражение для спектральной функции $\langle X_k^{10} X_k^{01} \rangle$ имеет вид:

$$\langle X_k^{10} X_k^{01} \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\xi(\mathbf{k}) - \mu^{(h)}}{k_B T}\right) + 1} = f_{FD}(\xi(\mathbf{k})), \quad (65)$$

где

$$\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon - t(\mathbf{k}) - \quad (66)$$

зонный спектр, в котором $t(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{r}} t_{0\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ – преобразование Фурье интеграла перескока. Условие (65) позволяет легко рассчитать все термодинамические характеристики холонов по стандартной методике, в которой сперва решается уравнение на химический потенциал:

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\exp\left(\frac{\xi(\mathbf{k}) - \mu^{(h)}}{k_B T}\right) + 1} = N_h, \quad (67)$$

где N_h – число холонов в системе, затем рассчитывается внутренняя энергия:

$$u^{(h)} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) f_{FD}(\xi(\mathbf{k})), \quad (68)$$

далее теплоемкость:

$$c^{(h)} = \frac{\partial u^{(h)}}{\partial T}, \quad (69)$$

энтропия:

$$s^{(h)} = s^{(h)}(T=0) + \int_0^T \frac{c^{(h)}}{T} dT^5, \quad (70)$$

свободная энергия:

$$f^{(h)} = u^{(h)} - Ts^{(h)} \quad (71)$$

и, наконец, восприимчивость, которая в случае холонов, конечно, равна нулю:

$$\chi^{(h)} = 0. \quad (72)$$

В результате получаются хорошо известные зависимости, отражающие поведение идеального ферми-газа [96] и которые поэтому здесь не обсуждаются.

Выпишем здесь также точные выражения для термодинамических параметров в отсутствие перескоков, когда оператор $H_t^{(h)} = -\sum_{\mathbf{f}, \mathbf{m}} t_{\mathbf{fm}} X_{\mathbf{f}}^{10} X_{\mathbf{m}}^{01} = 0$.

Вводя обозначение $x = 1 - \frac{N_h}{N}$ для концентрации дырок, решая уравнение (67) и следуя формулам (68) – (71), получаем следующие ответы:

$$\mu^{(h)} = \varepsilon - k_B T \ln \frac{x}{1-x} - \quad (73)$$

для химического потенциала,

$$u^{(h)} = (1-x)\varepsilon - \quad (74)$$

для внутренней энергии,

$$c^{(h)} = 0 - \quad (75)$$

для теплоемкости,

$$s^{(h)} = -k_B (x \ln x + (1-x) \ln(1-x)) - \quad (76)$$

для энтропии, и, наконец,

⁵ В параграфе 3.1 мы строго докажем, что для холонной t -модели энтропия при $T=0$ равна нулю: $s^{(h)}(T=0)=0$.

$$f^{(h)} = (1-x)\varepsilon + k_B T(x \ln x + (1-x) \ln(1-x)) - \quad (77)$$

для свободной энергии.

2.3. Преобразование матрицы оператора $H_t^{(h)}$ при учете спина электрона

В этом параграфе мы докажем используемую в дальнейшем теорему о взаимосвязи матриц операторов

$$H_t^{(h)} = - \sum_{f,m} t_{fm} X_f^{10} X_m^{01} \quad (78)$$

и

$$H_t = - \sum_{f,m,\sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} \quad (79)$$

в строго обозначенных базисах.

Рассмотрим матрицы этих операторов в базисе (51), где каждая из функций ψ_i имеет вид:

$$\psi_i = \begin{cases} |0\rangle_i, & \text{если узел } i \text{ не оккупирован холоном} \\ |1\rangle_i, & \text{если узел } i \text{ оккупирован холоном} \end{cases} \quad (80)$$

в случае холонов и (52) в случае электронов. Для уяснения вида матрицы оператора $H_t^{(h)}$ рассмотрим воздействие этого оператора на состояния (51), в котором ψ_i определяется выражением (80):

$$H_t^{(h)} \left| \underset{\mathbf{f}_1 \mathbf{f}_2 \dots \mathbf{f}_{N_e}}{11\dots 1} \right\rangle = \sum_{\mathbf{m} \in \{\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{N_e}\}} \sum_{\mathbf{g} \in h \setminus \{\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{N_e}\}} (-1)^{\Delta N_{\mathbf{gm}} + 1} t_{\mathbf{gm}} \left| \underset{\mathbf{f}_1 \mathbf{f}_2 \dots \mathbf{f}_{N_e}}{11\dots 0\dots 1\dots 1} \right\rangle, \quad (81)$$

где в левой части оператор $H_t^{(h)}$ действует на кет-вектор, символизирующий состояние, у которого на узлах $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{N_e}$ находятся холоны, на остальных узлах – дырки, фигурные скобки $\{\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{N_e}\}$ обозначают множество, состоящее из узлов $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{N_e}$, h – множество всех узлов системы, $\setminus$ – разность множеств,

$\Delta N_{\mathbf{g}\mathbf{m}}$ – количество холонов, находящихся строго между узлами $\mathbf{g}$ и $\mathbf{m}$. Понятно, что все векторы, стоящие в левой части последнего равенства, различны между собой. Различны также и коэффициенты при них. Скалярно умножая это равенство на какой-либо бра-вектор из $C_N^{N_e}$ возможных, мы получим матричный элемент либо равный нулю, либо равный $(-1)^{\Delta N_{\mathbf{ij}}+1} t_{\mathbf{ij}}$, где $\mathbf{i} \in \{\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{N_e}\}$, $\mathbf{j} \in h \setminus \{\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_{N_e}\}$, $\Delta N_{\mathbf{ij}}$ – количество холонов, находящихся строго между узлами $\mathbf{i}$ и $\mathbf{j}$. Очевидно, причем, что матричный элемент $\langle \psi_i | H_t^{(h)} | \psi_j \rangle$ отличен от нуля тогда и только тогда, когда один из векторов ψ_i , ψ_j получается из другого посредством перескока только одного холона из какой-либо одной позиции в другую.

Аналогично можно рассмотреть и воздействие оператора H_t на состояния типа (51), где ψ_i определяются на этот раз равенством (52). При этом остается в силе утверждение предыдущего абзаца: матричный элемент $\langle \psi_i | H_t^{(h)} | \psi_j \rangle$ отличен от нуля тогда и только тогда, когда возможно перейти от состояния ψ_i к состоянию ψ_j посредством перескока лишь одного электрона из одной позиции в другую. Отличие только в том, что на этот раз требуется еще сохранение спина электрона пре перескоке.

Теперь рассмотрим алгоритм, по которому из матрицы оператора $H_t^{(h)}$ получается матрица оператора H_t (в приближении ближайших соседей). Очевидно, в первую очередь, что каждый матричный элемент трансформируется в блок размерами $2^{N_e} \times 2^{N_e}$. Нетрудно видеть, что каждый равный нулю элемент преобразуется в нулевой же блок. Действительно, если невозможно перейти от одного из состояний, на котором строится рассматриваемый матричный элемент, к другому посредством перескока только одного холона из одной позиции в другую, то и при наличии спина это, очевидно, будет невозможно сделать при любой мыслимой ориентации спинов. Если же матричный элемент равен минус параметру перескока между ближайшими соседями, то диагональные элементы

блока равны трансформируемому матричному элементу, т. е. минус параметру перескока между ближайшими соседями, а недиагональные элементы равны нулю. Действительно, для пары базисных векторов, порождающей⁶ диагональный элемент, существует переход от одного вектора пары к другому посредством перескока только одного электрона с сохранением его спина. Направления же остальных спинов для пары векторов, порождающей диагональный элемент, совпадают (вследствие того, что рассматривается именно диагональный элемент). Для недиагональных же элементов направления спинов хотя бы одной пары электронов, находящихся в двух векторах, порождающих рассматриваемый матричный элемент, в одной и той же позиции, обязательно различаются (вследствие того, что сам элемент недиагональный). Таким образом, в приближении ближайших соседей матрица оператора H_t получается из матрицы оператора $H_t^{(h)}$ преобразованием каждого матричного элемента в блок размерами $2^{N_e} \times 2^{N_e}$, на диагонали которого стоят числа, равные трансформируемому матричному элементу, а недиагональные элементы равны нулю.

Это утверждение, вообще говоря, перестает быть справедливым в приближении соседей, более удаленных друг от друга, чем ближайшие. Чуть более подробный анализ показывает, что матричный элемент трансформируется в диагональный блок тогда и только тогда, когда перескок электрона осуществляется с узла на узел, между которыми отсутствуют узлы с числом заполнения $n_e = 1$. Понятно, что указанное условие всегда выполняется для близлежащих узлов.

2.4. Взаимосвязь между статистическими суммами холонов и электронов

Принимая во внимание результаты предыдущего параграфа, оказывается возможным установить соотношение между статистическими суммами холонов и

⁶ Будем называть векторы $|\psi_i\rangle$ и $|\psi_j\rangle$ порождающими матричный элемент $\langle\psi_i|H_t^{(h)}|\psi_j\rangle$.

электронов. Заметим для этого следующее. Нетрудно видеть, что при любом натуральном ⁷ значении n матрица оператора H_t^n получается из матрицы оператора $(H_t^{(h)})^n$ по указанному в предыдущем параграфе алгоритму: каждый матричный элемент трансформируется в блок, на диагонали которого стоят числа, равные трансформируемому матричному элементу, а все недиагональные элементы равны нулю. Это утверждение сразу же вытекает из известной теоремы алгебры о произведении блочных матриц. Теперь, учитывая определение матричной экспоненты как ряда из степеней матрицы (с определенными коэффициентами), можно заключить, что и матричная экспонента $\exp\left(-\frac{H_t}{k_B T}\right)$ получается из экспоненты $\exp\left(-\frac{H_t^{(h)}}{k_B T}\right)$ по этому же алгоритму.

Далее, статистическая сумма для системы, описываемой гамильтонианом (25), по определению, есть

$$Z = \text{Sp}\left(\exp\left(-\frac{H}{k_B T}\right)\right) = \text{Sp}\left(\exp\left(-\frac{H_0 + H_t + H_m}{k_B T}\right)\right). \quad (82)$$

Заметим в первую очередь, что коммутаторы всех слагаемых гамильтониана (25) попарно равны нулю:

$$[H_0, H_t] = [H_t, H_m] = [H_m, H_0] = 0. \quad (83)$$

Кроме того, поскольку матрица оператора H_0 , очевидно, является диагональной в любом базисе, причем на диагонали стоят числа $N_e \varepsilon$, выражение для статистической суммы может быть переписано следующим образом:

$$Z = \exp\left(-\frac{N_e \varepsilon}{k_B T}\right) \text{Sp}\left(\exp\left(-\frac{H_t}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{H_m}{k_B T}\right)\right). \quad (84)$$

⁷ На самом деле высказываемое утверждение остается справедливым не только при натуральном, но любом целом или даже рациональном значении n и даже при любом вещественном его значении.

Обозначим ii -й матричный элемент матрицы $\exp\left(-\frac{H_t^{(h)}}{k_B T}\right)$ через σ_i . Учитывая указанное в начале параграфа правило образования матрицы $\exp\left(-\frac{H_t}{k_B T}\right)$ (из матрицы $\exp\left(-\frac{H_t^{(h)}}{k_B T}\right)$) и определение числа Σ (см. 2.1), нетрудно видеть, что выражение (84) для статистической суммы можно записать следующим образом:

$$Z = \exp\left(-\frac{N_e \varepsilon}{k_B T}\right) \cdot \Sigma \cdot \sum_{i=1}^{C_N^{N_e}} \sigma_i. \quad (85)$$

Но произведение $\exp\left(-\frac{N_e \varepsilon}{k_B T}\right) \sum_{i=1}^{C_N^{N_e}} \sigma_i$, очевидно, представляет собой статистическую сумму системы холонов:

$$Z^{(h)} = \exp\left(-\frac{N_e \varepsilon}{k_B T}\right) \sum_{i=1}^{C_N^{N_e}} \sigma_i. \quad (86)$$

Поэтому, учитывая выражение (56) для Σ , для статистической суммы электронов имеем следующее окончательное выражение:

$$Z = \left(2 \operatorname{ch} \left(\frac{h}{k_B T} \right) \right)^{N_e} Z^{(h)}. \quad (87)$$

2.5. Окончательные выражения для термодинамических характеристик (без магнитного поля)

Сначала получим выражения для термодинамических характеристик в отсутствие магнитного поля:

$$h = 0. \quad (88)$$

При выполнении условия (88) выражение (87) для статистической суммы принимает следующую форму:

$$Z = 2^{N_e} Z^{(h)}. \quad (89)$$

Из (89) по стандартным формулам статистической физики и термодинамики получаем выражения для термодинамических характеристик:

$$f^{(e)} = f^{(h)} - k_B T (1-x) \ln 2 - \quad (90)$$

свободной энергии,

$$s^{(e)} = s^{(h)} + k_B (1-x) \ln 2 - \quad (91)$$

энтропии,

$$u^{(e)} = u^{(h)} - \quad (92)$$

внутренней энергии,

$$c^{(e)} = c^{(h)} - \quad (93)$$

теплоемкости,

$$\mu^{(e)} = \mu^{(h)} - k_B T \ln 2 - \quad (94)$$

химического потенциала.

Отметим, что каждая из формул (90) – (94) имеет следующий общий вид:

$$a^{(e)} = a^{(h)} + a^{(s)}, \quad (95)$$

где $a^{(h)}$ – вклад в величину a , возникающий от множителя $Z^{(h)}$ в равенстве (89) (холонный вклад), $a^{(s)}$ – вклад от множителя 2^{N_e} в том же равенстве (спинонный вклад). Получаемые посредством равенств (90) – (94) точные графические зависимости соответствующих термодинамических величин от дырочной концентрации и температуры обсуждаются в параграфе 3.2 главы III.

2.6. Окончательные выражения для термодинамических характеристик (в магнитном поле)

В ненулевом магнитном поле

$$h \neq 0 \quad (96)$$

из выражения (87) для статистической суммы, используя стандартные тождества статистической физики и термодинамики, получаем выражения для термодинамических характеристик:

$$f = f^{(h)} - k_B T (1-x) \ln \left(2 \operatorname{ch} \left(\frac{h}{k_B T} \right) \right) = f^{(e)} - k_B T (1-x) \ln \left(\operatorname{ch} \left(\frac{h}{k_B T} \right) \right) - \quad (97)$$

свободной энергии,

$$\begin{aligned} s &= s^{(h)} + k_B (1-x) \ln \left(2 \operatorname{ch} \left(\frac{h}{k_B T} \right) \right) - (1-x) \frac{h}{T} \operatorname{th} \left(\frac{h}{k_B T} \right) = \\ &= s^{(e)} + k_B (1-x) \ln \left(\operatorname{ch} \left(\frac{h}{k_B T} \right) \right) - (1-x) \frac{h}{T} \operatorname{th} \left(\frac{h}{k_B T} \right) - \end{aligned} \quad (98)$$

энтропии,

$$u = u^{(h)} - (1-x) h \operatorname{th} \left(\frac{h}{k_B T} \right) = u^{(e)} - (1-x) h \operatorname{th} \left(\frac{h}{k_B T} \right) - \quad (99)$$

внутренней энергии,

$$c = c^{(h)} + (1-x) \frac{h^2}{k_B T^2} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \left(\frac{h}{k_B T} \right)} = c^{(e)} + (1-x) \frac{h^2}{k_B T^2} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \left(\frac{h}{k_B T} \right)} - \quad (100)$$

теплоемкости,

$$\mu = \mu^{(h)} - k_B T \ln \left(2 \operatorname{ch} \left(\frac{h}{k_B T} \right) \right) = \mu^{(e)} - k_B T \ln \left(\operatorname{ch} \left(\frac{h}{k_B T} \right) \right) - \quad (101)$$

химического потенциала, и, наконец, магнитной восприимчивости, которая по-прежнему описывается законом Кюри (63). Как видим, восприимчивость Паули не возникает при любой концентрации электронов в системе. Это происходит благодаря факторизации статистической суммы в виде произведения статистических сумм спинов и холонов. Заметим, кроме того, что в

приближении ближайших соседей магнитная восприимчивость не зависит от величины параметра перескока t между ближайшими соседями. Этот факт также является следствием упомянутой факторизации. Действительно, как видно из выражения (87), зависимость статистической суммы от величины индукции магнитного поля полностью определяется множителем $\Sigma = \left(2 \operatorname{ch} \left(\frac{h}{k_B T} \right) \right)^{N_e}$, не зависящим от t . Отметим, что при обсуждении поведения термодинамических характеристик в параграфе 3.2 вследствие тривиальности мы опускаем обсуждение поведения восприимчивости.

Формулы (97) – (101) являются обобщением формул (90) – (94) соответственно на случай ненулевого магнитного поля. Обе серии формул, как видим, находятся в полном согласии с парами формул ((58), (77)) для свободной энергии, ((59), (76)) для энтропии, ((60), (74)) для внутренней энергии, ((61), (75)) для теплоемкости, ((62), (73)) для химического потенциала при $H_t^{(h)} = - \sum_{f,m} t_{fm} X_f^{10} X_m^{01} = 0$. Как и в параграфе 2.5, отметим, что каждая из формул (97) – (101) имеет следующий общий вид:

$$a = a^{(h)} + a^{(s)} = a^{(e)} + a^{(B)}, \quad (102)$$

где $a^{(h)}$ – вклад от множителя $Z^{(h)}$ в (87) (холонный вклад), $a^{(s)}$ – вклад от множителя $\Sigma = \left(2 \operatorname{ch} \left(\frac{h}{k_B T} \right) \right)^{N_e}$ в (87) (спионный вклад), $a^{(e)}$ – вклад от множителя

$$2^{N_e} Z^{(h)} \text{ в (87) (электронный вклад), } a^{(B)} \text{ – вклад от множителя } Z^{(B)} = \operatorname{ch}^{N_e} \left(\frac{h}{k_B T} \right) \text{ в}$$

(87) (вклад магнитного поля). Точные графические зависимости термодинамических величин от концентрации дырок, температуры и индукции магнитного поля, следующие из формул (97) – (101), будут обсуждаться в параграфе 3.3 главы III.

Основные выводы по главе II

1. Если записывать матрицу оператора $H_m = -h \sum_{\mathbf{f}} (X_{\mathbf{f}}^{\uparrow\uparrow} - X_{\mathbf{f}}^{\downarrow\downarrow})$ в базисе, в котором каждая базисная волновая функция определяется равенством (51), в котором при любом $i \in \{1, 2, \dots, N\}$ волновая функция ψ_i определяется равенством (52), причем базисные волновые функции упорядочивать так, чтобы наборы из первых 2^{N_e} , вторых 2^{N_e} , ..., $C_N^{N_e}$ -х 2^{N_e} функций не различались внутри себя расположением спинов, а отличались лишь направлениями спинов в некоторых из фиксированных позиций, в которых находятся электроны, и, кроме того, все упорядочивались внутри себя по одинаковой схеме, то все $C_N^{N_e}$ диагональных блоков матрицы $\exp\left(-\frac{H_m}{k_B T}\right)$ равны друг другу и след каждого равен $\Sigma = \left(2 \operatorname{ch}\left(\frac{h}{k_B T}\right)\right)^{N_e}$.
2. В пространстве произвольной размерности получено точное решение основной задачи статистической физики для t -модели в магнитном поле при $H_t = 0$ (атомный предел в магнитном поле).
3. Продемонстрирована точная интегрируемость холонной t -модели в пространстве произвольной размерности при учете перескоков между произвольно большим количеством ближайших соседей.
4. Будем записывать матрицу оператора $H_t = - \sum_{\mathbf{f}, \mathbf{m}, \sigma} t_{\mathbf{f}\mathbf{m}} X_{\mathbf{f}}^{\sigma 0} X_{\mathbf{m}}^{0\sigma}$ в базисе, в котором каждая базисная волновая функция имеет вид (50), в котором для любого $i \in \{1, 2, \dots, N\}$ функция ψ_i определяется равенством (51), причем базисные волновые функции упорядочены так, что наборы из первых 2^{N_e} , вторых 2^{N_e} , ..., $C_N^{N_e}$ -х 2^{N_e} функций не различаются внутри себя расположением спинов, а отличаются лишь направлениями спинов в некоторых из фиксированных

позиций, в которых находятся электроны, и, кроме того, все упорядочены внутри себя по одинаковой схеме. Пусть далее переход от первой группы из 2^{N_e} состояний ко второй (из 2^{N_e} состояний), от второй (из 2^{N_e} состояний) к третьей (из 2^{N_e} состояний), ..., от $C_N^{N_e} - 1$ -ой (из 2^{N_e} состояний) к $C_N^{N_e}$ -ой (из 2^{N_e} состояний) осуществляется по определенному правилу (R). Будем записывать матрицу оператора $H_t^{(h)} = -\sum_{f,m} t_{fm} X_f^{10} X_m^{01}$ в базисе, в котором каждая базисная функция имеет вид (51), где на этот раз при любом возможном i волновая функция ψ_i определяется равенством (80), причем упорядочение базисных функций осуществляется по правилу (R). Тогда, если ограничиваться учетом перескоков только между ближайшими соседями, матрица оператора H_t получается из матрицы оператора $H_t^{(h)}$ преобразованием каждого матричного элемента в блок размерами $2^{N_e} \times 2^{N_e}$, на диагонали которого стоят числа, равные преобразуемому матричному элементу, а все недиагональные элементы равны нулю. Операторная экспонента $\exp\left(-\frac{H_t}{k_B T}\right)$ получается из операторной экспоненты $\exp\left(-\frac{H_t^{(h)}}{k_B T}\right)$ по этому же алгоритму.

5. Непертурбативными методами при учете перескоков только между ближайшими соседями доказано точное соотношение

$$Z = \left(2 \operatorname{ch} \left(\frac{h}{k_B T} \right) \right)^{N_e} Z^{(h)}$$

между статистическими суммами одномерных холонной t -модели и электронной t -модели в магнитном поле.

Глава III. Концентрационные, температурные и полевые зависимости термодинамических параметров

Полученные в главе II связи между термодинамическими характеристиками холонов и электронов и факт интегрируемости холонной t -модели позволяют получить графически точные зависимости этих характеристик для электронной t -модели как при отсутствии магнитного поля, так и при его наличии. В данной главе сначала исследуются свойства основного состояния и низкотемпературные аппроксимации для всех рассматриваемых t -моделей (холонной, электронной без магнитного поля и электронной в магнитном поле). Далее получаемые посредством формул (90) – (94), (97) – (101) зависимости термодинамических параметров обсуждаются сначала в отсутствие магнитного поля, а затем в отличном от нуля поле.

3.1. Основное состояние и низкотемпературные аппроксимации

Вычисление термодинамических характеристик основного состояния для рассматриваемой одномерной t -модели не представляет никаких трудностей. В первую очередь легко найти радиус одномерной сферы Ферми:

$$k_F = k_F^{(e)} = k_F^{(h)} = \begin{cases} x \frac{\pi}{a}, & t < 0, \\ (1-x) \frac{\pi}{a}, & t > 0, \end{cases} \quad (103)$$

где $x = 1 - \frac{N_{e(h)}}{N}$ – концентрация дырок (в электронной или холонной системах),

a – параметр решетки, t – интеграл перескока (между ближайшими соседями). В

(103) мы отметили, что радиусы сфер Ферми для холонной t -модели, электронной t -модели без магнитного поля и электронной t -модели в магнитном поле совпадают. Отметим, что при $t < 0$ поверхность Ферми является дырочной, при $t > 0$ – электронной в случае электронной t -модели (вне зависимости от величины индукции магнитного поля) и холонной в случае холонной t -модели.

Из (103) и выражения (66) для энергетического спектра, в котором

$$t(\mathbf{k}) = 2t \cos(ka), \quad (104)$$

справедливого для холонной t -модели и электронной t -модели без магнитного поля, непосредственно вычисляются энергии Ферми этих моделей:

$$\xi_F^{(h)} = \varepsilon - 2t \cos(k_F^{(h)} a) = \varepsilon + 2|t| \cos(\pi x) - \quad (105)$$

для холонной t -модели и

$$\xi_F^{(e)} = \varepsilon - 2t \cos(k_F^{(e)} a) = \xi_F^{(h)} = \varepsilon + 2|t| \cos(\pi x) - \quad (106)$$

для электронной t -модели без магнитного поля. Для нахождения энергии Ферми электронной t -модели в магнитном поле заметим, что включение магнитного поля приводит к тому, что в системе появляются две энергетические зоны вместо одной:

$$\xi_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \varepsilon + h - t(\mathbf{k}), \quad (107)$$

$$\xi_{\downarrow}(\mathbf{k}) = \varepsilon - h - t(\mathbf{k}), \quad (108)$$

причем при заданном $\mathbf{k}$ электрон может занимать лишь один энергетический уровень: либо $\xi_{\uparrow}(\mathbf{k})$, либо $\xi_{\downarrow}(\mathbf{k})$. Понятно, что в таком случае энергия Ферми уменьшается на h по сравнению со случаем $h = 0$:

$$\xi_F = \xi_F^{(e)} - h = 2|t| \cos(\pi x) - h. \quad (109)$$

Выпишем далее выражения для термодинамических характеристик в основном состоянии. Для холонной t -модели имеем следующие выражения:

$$\mu^{(h)}(T=0) = \xi_F^{(h)} = \varepsilon + 2|t|\cos(\pi x) - \quad (110)$$

для химического потенциала,

$$u^{(h)}(T=0) = \begin{cases} \frac{1}{N} \left\{ \sum_{k=-\frac{\pi}{a}}^{-k_F} (\varepsilon - 2t \cos(ka)) + \sum_{k=k_F}^{\frac{\pi}{a}} (\varepsilon - 2t \cos(ka)) \right\}, t < 0 \\ \frac{1}{N} \sum_{k=-k_F}^{k_F} (\varepsilon - 2t \cos(ka)), t > 0 \end{cases} =$$

$$= \begin{cases} \frac{\varepsilon}{2} - \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{-x\frac{\pi}{a}} 2t \cos(ka) dk + \frac{\varepsilon}{2} - \frac{a}{2\pi} \int_{x\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} 2t \cos(ka) dk, t < 0 \\ \varepsilon - \frac{a}{2\pi} \int_{-(1-x)\frac{\pi}{a}}^{(1-x)\frac{\pi}{a}} 2t \cos(ka) dk, t > 0 \end{cases} = \quad (111)$$

$$= \varepsilon - \frac{2|t|}{\pi} \sin(\pi x) -$$

для внутренней энергии. Для нахождения теплоемкости при $T=0$ ⁸ получим для нее сперва выражение в общем виде:

$$c^{(h)} = \frac{\partial u^{(h)}}{\partial T} = \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{1}{\exp\left(\frac{\xi(\mathbf{k}) - \mu^{(h)}}{k_B T}\right) + 1} \right) =$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) \frac{(\xi(\mathbf{k}) - \mu^{(h)}) + T \frac{d\mu^{(h)}}{dT}}{k_B T^2} \varphi(\mathbf{k}, T),$$

где

⁸ Нулевая теплоемкость при $T=0$, как известно, есть одно из следствий третьего начала термодинамики [97]. Нельзя, тем не менее, по этой причине считать, что для рассматриваемой здесь модели теплоемкость непременно равна нулю при $T=0$. Это связано с тем, что любая конкретная модель физики применима к определенному ограниченному кругу явлений и не должна поэтому непременно удовлетворять всем законам природы.

$$\varphi(\mathbf{k}, T) = \frac{\exp\left(\frac{\xi(\mathbf{k}) - \mu^{(h)}}{k_B T}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\xi(\mathbf{k}) - \mu^{(h)}}{k_B T}\right) + 1\right)^2}. \quad (112)$$

Дифференцируя равенство (67) по T и разрешая полученное равенство относительно $\frac{d\mu^{(h)}}{dT}$, получаем:

$$\frac{d\mu^{(h)}}{dT} = -\frac{1}{T} \frac{\sum_{\mathbf{p}} (\xi(\mathbf{p}) - \mu^{(h)}) \varphi(\mathbf{p}, T)}{\sum_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}, T)}. \quad (113)$$

Подставляя (113) в выражения для $c^{(h)}$, получаем искомое общее выражение для теплоемкости:

$$c^{(h)} = \frac{1}{k_B T^2} \left(\sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) \varphi(\mathbf{k}, T) \left(\xi(\mathbf{k}) - \mu^{(h)} - \frac{\sum_{\mathbf{p}} (\xi(\mathbf{p}) - \mu^{(h)}) \varphi(\mathbf{p}, T)}{\sum_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}, T)} \right) \right). \quad (114)$$

В этом равенстве легко осуществить переход к пределу $T \rightarrow 0$. Для этого заметим, что

$$\sum_{\mathbf{p}} (\xi(\mathbf{p}) - \mu^{(h)}) \varphi(\mathbf{p}, T) = \tilde{\xi} \sum_{\mathbf{p}} \varphi(\mathbf{p}, T),$$

где $\tilde{\xi}$ – среднее значение функции $\zeta(\mathbf{p}) = \xi(\mathbf{p}) - \mu^{(h)}$ в первой зоне Бриллюэна. В частности, при $T = 0$

$$\tilde{\xi} = \varepsilon - \xi_F^{(h)}.$$

Поэтому, упрощая (114) при $T = 0$, для теплоемкости имеем:

$$c^{(h)}(T = 0) = \lim_{T \rightarrow 0} c^{(h)} = \frac{1}{k_B} \left(\sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) (\xi(\mathbf{k}) - \varepsilon) \lim_{T \rightarrow 0} \frac{\varphi(\mathbf{k}, T)}{T^2} \right).$$

Легко далее видеть, что независимо от знака разности $\xi(\mathbf{k}) - \mu^{(h)}$ предел

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{\varphi(\mathbf{k}, T)}{T^2} = 0.$$

Поэтому для теплоемкости холонной t -модели при $T = 0$ окончательно получаем:

$$c^{(h)}(T = 0) = 0. \quad (115)$$

Для отыскания энтропии при $T = 0$ ⁹ найдем приращение энтропии при изменении температуры от 0 до ∞ :

$$\Delta s^{(h)} = \int_0^\infty \frac{c^{(h)}}{T} dT.$$

Последний интеграл, как можно показать, равен

$$\Delta s^{(h)} = \int_0^\infty \frac{c^{(h)}}{T} dT = -k_B (x \ln x + (1-x) \ln(1-x)). \quad (116)$$

Левая часть равенства (116), как можно видеть, совпадает с холонной энтропией в атомном пределе (формула (76)), когда $t = 0$. Но поскольку энтропия зависит, очевидно, лишь от отношения $\frac{k_B T}{|t|}$, предел $t \rightarrow 0$ равносильен пределу $T \rightarrow \infty$.

Поэтому имеем равенство:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} s^{(h)} = -k_B (x \ln x + (1-x) \ln(1-x)). \quad (117)$$

Наконец, переходя в равенстве

$$s^{(h)}(T) = s^{(h)}(T = 0) + \Delta s^{(h)}$$

к пределу $T \rightarrow \infty$, получаем:

$$s^{(h)}(T = 0) = 0. \quad (118)$$

Наконец, для свободной энергии $f^{(h)} = u^{(h)} - Ts^{(h)}$ при $T = 0$ имеем:

⁹ Снова подчеркнем, что третье начало термодинамики не может служить основанием для вывода о верности равенства $s^{(h)}(T = 0) = 0$.

$$f^{(h)}(T=0)=u^{(h)}(T=0)=\varepsilon-\frac{2|t|}{\pi}\sin(\pi x). \quad (119)$$

Для электронной t -модели при $h=0$ на основании формул (90) – (94), (110), (111), (115), (118), (119) получаем следующие ответы:

$$\mu^{(e)}(T=0)=\xi_F^{(e)}=\mu^{(h)}(T=0)=\xi_F^{(h)}=\varepsilon+2|t|\cos(\pi x)- \quad (120)$$

для химического потенциала,

$$u^{(e)}(T=0)=u^{(h)}(T=0)=\varepsilon-\frac{2|t|}{\pi}\sin(\pi x)- \quad (121)$$

для внутренней энергии,

$$c^{(e)}(T=0)=c^{(h)}(T=0)=0- \quad (122)$$

для теплоемкости,

$$s^{(e)}(T=0)=k_B(1-x)\ln 2- \quad (123)$$

для энтропии,

$$f^{(e)}(T=0)=f^{(h)}(T=0)=\varepsilon-\frac{2|t|}{\pi}\sin(\pi x)- \quad (124)$$

для свободной энергии.

Выпишем, наконец, выражения для термодинамических характеристик при $T=0$ для электронной t -модели при $h \neq 0$:

$$\mu(T=0)=\mu^{(e)}(T=0)-h=\varepsilon+2|t|\cos(\pi x)-h- \quad (125)$$

химический потенциал,

$$u(T=0)=u^{(e)}(T=0)-(1-x)h=\varepsilon-\frac{2|t|}{\pi}\sin(\pi x)-h- \quad (126)$$

внутренняя энергия,

$$c(T=0)=0 - \quad (127)$$

теплоемкость,

$$s(T=0)=0^{10} - \quad (128)$$

энтропия,

$$f(T=0)=u(T=0)=-\frac{2|t|}{\pi}\sin(\pi x)-h - \quad (129)$$

свободная энергия.

Займемся теперь нахождением низкотемпературных аппроксимаций для всех трех обсуждаемых моделей: холонной t -модели, электронной t -модели без магнитного поля ($h=0$) и электронной t -модели в магнитном поле ($h \neq 0$). Для нахождения разложений холонных химического потенциала и внутренней энергии (см. формулы (67) и (68)) воспользуемся разложением Зоммерфельда:

$$\begin{aligned} & \int_{-w/2}^{w/2} H(\xi) f_{FD}(\xi) d\xi = \\ & = \int_{-w/2}^{\mu} H(\xi) d\xi + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{d^{2n-1}}{d\xi^{2n-1}} H(\xi) \right) \bigg|_{\xi=\mu} \int_{-w/2}^{w/2} \frac{(\xi-\mu)^{2n}}{(2n)!} \left(-\frac{\partial f_{FD}}{\partial \xi} \right) d\xi = \quad (130) \\ & = \int_{-w/2}^{\mu} H(\xi) d\xi + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \left(\frac{d^{2n-1}}{d\xi^{2n-1}} H(\xi) \right) \bigg|_{\xi=\mu} (k_B T)^{2n}, \end{aligned}$$

где

$$a_n = \int_{\frac{-w}{2} - \frac{\mu}{k_B T}}^{\frac{w}{2} - \frac{\mu}{k_B T}} \frac{x^{2n}}{(2n)!} \left(-\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{e^x + 1} \right) \right) dx, \quad (131)$$

¹⁰ Скачкообразное уменьшение энтропии при $T=0$ на $k_B(1-x)\ln 2$ при включении сколь угодно малого магнитного поля будет обсуждаться в параграфе 3.3.

где w – ширина зоны, $f_{FD}(\xi)$ – функция распределения Ферми-Дирака, функция $H(\xi)$, если и стремится к ∞ при $\xi \rightarrow \pm \frac{w}{2}$, то так, что интеграл $\int_{-w/2}^{w/2} H(\xi) d\xi$ сходится. Разложение Зоммерфельда (130) справедливо лишь при выполнении условия:

$$-\frac{w}{2} < \mu < \frac{w}{2}, \quad (132)$$

т. е. когда химический потенциал находится «внутри» энергетической зоны.

Поскольку холонная t -модель по существу идентична модели идеального ферми-газа, низкотемпературные разложения термодинамических параметров в этой модели, выраженные через плотность состояний, совпадают с соответствующими разложениями для идеального ферми-газа. Прежде чем их выписать, отметим, что плотности состояний в холонной t -модели и электронной t -модели без магнитного поля совпадают и равны

$$\rho(\xi) = g^{(h)}(\xi) = g^{(e)}(\xi) = \frac{1}{\pi} (4t^2 - (\xi - \varepsilon)^2)^{\frac{1}{2}} \quad (133)$$

Заменяя в первом приближении нижний и верхний пределы интегрирования в (131) на $-\infty$ и $+\infty$ соответственно, получаем эти известные ответы:

$$\mu^{(h)} = \xi_F^{(h)} - \frac{\pi^2}{6} \frac{\rho'(\xi_F^{(h)})}{\rho(\xi_F^{(h)})} (k_B T)^2 - \quad (134)$$

для химического потенциала,

$$u^{(h)} = -\frac{1}{\pi^2 \rho(\xi_F^{(h)})} + \frac{\pi^2}{6} \rho(\xi_F^{(h)}) (k_B T)^2 - \quad (135)$$

для внутренней энергии,

¹¹ Отметим, что в (133) мы специально используем обозначение $\rho(\xi)$ (а не $g(\xi)$) лишь для введения общего обозначения для равных между собой плотностей состояний в холонной t -модели и электронной t -модели без магнитного поля. Это обозначение не имеет никакого отношения к плотности состояний в электронной t -модели с магнитным полем.

$$c^{(h)} = \gamma^{(h)} T = \frac{\pi^2}{3} \rho(\xi_F^{(h)}) k_B^2 T - \quad (136)$$

для теплоемкости,

$$s^{(h)} = \gamma^{(h)} T = \frac{\pi^2}{3} \rho(\xi_F^{(h)}) k_B^2 T - \quad (137)$$

для энтропии,

$$f^{(h)} = -\frac{1}{\pi^2 \rho(\xi_F^{(h)})} - \frac{\pi^2}{6} \rho(\xi_F^{(h)}) (k_B T)^2 - \quad (138)$$

для свободной энергии. Важно заметить, что вследствие ограничения (132) разложения (134) – (138) не справедливы в окрестностях точек $x=0$ и $x=1$, потому что, как легко видеть, анализируя уравнение (67), химический потенциал в этих точках обращается в $+\infty$ и $-\infty$ соответственно. Действительно, при $x=0$ в левой части уравнения (67) стоит сумма N слагаемых, каждое из которых не превосходит единицы. Такая сумма может быть равна N (правая часть) тогда и только тогда, когда каждое слагаемое в отдельности в точности равно единице. При $T \neq 0$ это возможно лишь при условии $\mu^{(h)} = +\infty$. Аналогично, при $x=1$ правая часть уравнения (67) обращается, очевидно, в нуль. Для суммы неотрицательных слагаемых (левая часть) это возможно тогда и только тогда, когда равно нулю каждое отдельное слагаемое. Указанная же ситуация при $T \neq 0$ реализуется в том и только в том случае, когда $\mu^{(h)} = -\infty$. Таким образом, существуют окрестности точек $x=0$ и $x=1$ такие, что в них химический потенциал не лежит в интервале (132), и потому разложение Зоммерфельда в этих окрестностях дает неверные аппроксимации термодинамических параметров.

Равенства (90) – (94), связывающие термодинамические характеристики электронной t -модели без магнитного поля и холонной t -модели, и холонные разложения (134) – (138) позволяют сразу записать низкотемпературные разложения для электронной t -модели при $h=0$:

$$\mu^{(e)} = \xi_F^{(e)} - k_B T \ln 2 - \frac{\pi^2}{6} \frac{\rho'(\xi_F^{(h)})}{\rho(\xi_F^{(h)})} (k_B T)^2 - \quad (139)$$

для химического потенциала,

$$u^{(e)} = -\frac{1}{\pi^2 \rho(\xi_F^{(e)})} + \frac{\pi^2}{6} \rho(\xi_F^{(e)}) (k_B T)^2 - \quad (140)$$

для внутренней энергии,

$$c^{(e)} = \gamma^{(e)} T = \frac{\pi^2}{3} \rho(\xi_F^{(e)}) k_B^2 T \quad (141)$$

для теплоемкости,

$$s^{(e)} = k_B (1-x) \ln 2 + \gamma^{(e)} T = k_B (1-x) \ln 2 + \frac{\pi^2}{3} \rho(\xi_F^{(e)}) k_B^2 T - \quad (142)$$

для энтропии,

$$f^{(e)} = -\frac{1}{\pi^2 \rho(\xi_F^{(e)})} - k_B T (1-x) \ln 2 - \frac{\pi^2}{6} \rho(\xi_F^{(e)}) (k_B T)^2 - \quad (143)$$

для свободной энергии. Как видим, для электронной t -модели без магнитного поля в разложениях некоторых величин (химический потенциал и свободная энергия) характерно появление линейных по T поправок. Интересно заметить, что при всех имеющих место в реальной природе значениях интеграла перескока t ($t \sim 0.1$ эВ) и температуры ($T \sim 10^2$ К) в разложениях этих величин (139), (143) правомерно пренебрежение квадратичными по T поправками. Заметим еще, что, как это следует из формул (141) и (142), теплоемкость и энтропия при малых T линейны по T , причем коэффициент пропорциональности равен

$$\gamma^{(h)} = \gamma^{(e)} = \frac{\pi^2}{3} \rho(\xi_F^{(e)}) k_B^2. \quad (144)$$

В (144) мы специально отмечаем, что коэффициенты пропорциональности для холонной t -модели (для нее, как это следует из формул (136), (137), также выполняется закон линейной зависимости параметров $c^{(h)}$, $s^{(h)}$ от T) и электронной t -модели без магнитного поля равны между собой. Важно отметить, что, как и для холонной t -модели, разложения термодинамических параметров (139) – (143) электронной t -модели без магнитного поля не справедливы в малых окрестностях точек $x=0$ и $x=1$.

Наконец, выпишем низкотемпературные аппроксимации для t -модели в ненулевом магнитном поле:

$$\mu = \xi_F - k_B T \ln 2 - \frac{\pi^2}{6} \frac{\rho'(\xi_F^{(h)})}{\rho(\xi_F^{(h)})} (k_B T)^2 - k_B T \exp\left(-\frac{2h}{k_B T}\right) - \quad (145)$$

химический потенциал,

$$u = \left(-\frac{1}{\pi^2 \rho(\xi_F^{(e)})} - (1-x)h \right) + \frac{\pi^2}{6} \rho(\xi_F^{(e)}) (k_B T)^2 + 2(1-x)h \exp\left(-\frac{2h}{k_B T}\right) - \quad (146)$$

внутренняя энергия,

$$c = \frac{\pi^2}{3} \rho(\xi_F^{(e)}) k_B^2 T + (1-x) \frac{h^2}{k_B T^2} \exp\left(-\frac{2h}{k_B T}\right) - \quad (147)$$

теплоемкость,

$$s = \frac{\pi^2}{3} \rho(\xi_F^{(h)}) k_B^2 T + 2(1-x) \frac{h}{T} \exp\left(-\frac{2h}{k_B T}\right) - \quad (148)$$

энтропия,

$$f = \left\{ -\frac{1}{\pi^2 \rho(\xi_F^{(e)})} - (1-x)h \right\} - k_B T (1-x) \ln 2 - \quad (149)$$

$$- \frac{\pi^2}{6} \rho(\xi_F^{(e)}) (k_B T)^2 - k_B T (1-x) \exp\left(-\frac{2h}{k_B T}\right) -$$

свободная энергия. В данном случае, как видим, характерно появление поправок в виде функций, которые не разлагаются в ряд Тейлора в точке $T = 0$ ¹². Отметим, что при всех типичных значениях интеграла перескока и температуры в разложениях химического потенциала и свободной энергии (формулы (145), (149)), относящихся к электронной t -модели с магнитным полем, правомерно пренебрежение квадратичными по T членами. Впрочем, как мы видели ранее, это утверждение справедливо и для электронной t -модели без магнитного поля. Для внутренней энергии пренебрежение членом, квадратичным по T , вообще говоря, неправомерно: непосредственная проверка показывает, что при имеющих место в эксперименте значениях интеграла перескока, температуры (см. выше текст после формулы (143)) и индукции магнитного поля ($B \sim 10^4$ Гс) предпоследний и последний члены в (146) имеют примерно одинаковый порядок ($\sim 10^{-5}$ эВ). Отметим еще, что при наличии магнитного поля теплоемкость и энтропия зависят от T уже нелинейно (пренебрежение последними слагаемыми в (147), (148) при физических значениях параметров t , T , h неправомерно). Тем не менее, численные значения производных $\left. \frac{\partial c}{\partial T} \right|_{T=0}$, $\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{T=0}$ остаются теми же, что и для электронной t -модели без магнитного поля и холонной t -модели:

$$\gamma = \gamma^{(e)} = \gamma^{(h)} = \frac{\pi^2}{3} \rho(\xi_F^{(e)}) k_B^2. \quad (150)$$

Укажем, наконец, что разложения (145) – (149) не имеют место в малых окрестностях точек $x=0$ и $x=1$, поскольку, как указывалось ранее, холонный химический потенциал в этих точках обращается в $+\infty$ и $-\infty$ соответственно и

¹² Для функции

$$f(x) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{1}{x}\right), & x \neq 0, \\ 0, & x = 0, \end{cases}$$

как легко видеть, в точке $x_0 = 0$ существуют правосторонние производные произвольного порядка, причем все они равны нулю: $f^{(n)}(0) = 0$, $n \in \mathbf{N}$. Тем не менее, ряд из нулей нигде не сходится к исходной функции, за исключением точки $x_0 = 0$. Причина неразложимости функции $f(x)$ в ряд Тейлора по степеням x наиболее глубоко вскрывается в комплексном анализе и состоит в том, что $z_0 = 0$ – существенно особая точка аналитической в $\mathbf{C} \setminus \{0\}$ функции $f(z) = \exp\left(-\frac{1}{z}\right)$.

поэтому не лежит в интервале (132), в котором применимо разложение Зоммерфельда.

3.2. Концентрационные и температурные зависимости термодинамических характеристик в отсутствие магнитного поля

Используя формулы (90) – (94), получим зависимости термодинамических параметров от дырочной концентрации и температуры и обсудим наиболее характерные их особенности.

Наиболее целесообразно начать обсуждение с результатов для внутренней энергии и теплоемкости (рис. 9 и 10), поскольку, согласно формулам (92) и (93), указанные величины для холонов и электронов совпадают. Начнем с обсуждения наиболее легко объяснимой температурной зависимости внутренней энергии. При $T = 0$ все электроны находятся на «дне» косинусной энергетической зоны, и внутренняя энергия определяется равенством (121). По мере увеличения температуры числа заполнения высокоэнергетических уровней увеличиваются, что ведет к возрастанию внутренней энергии. При $T \rightarrow \infty$ заполнения всех состояний становятся равновероятными, и внутренняя энергия становится равной, очевидно, $n_e \varepsilon$:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} u^{(e)} = (1 - x) \varepsilon. \quad (151)$$

Этот результат, как нетрудно видеть, совпадает с формулой (60), в которой предполагается $h = 0$, для внутренней энергии в атомном пределе. Этого

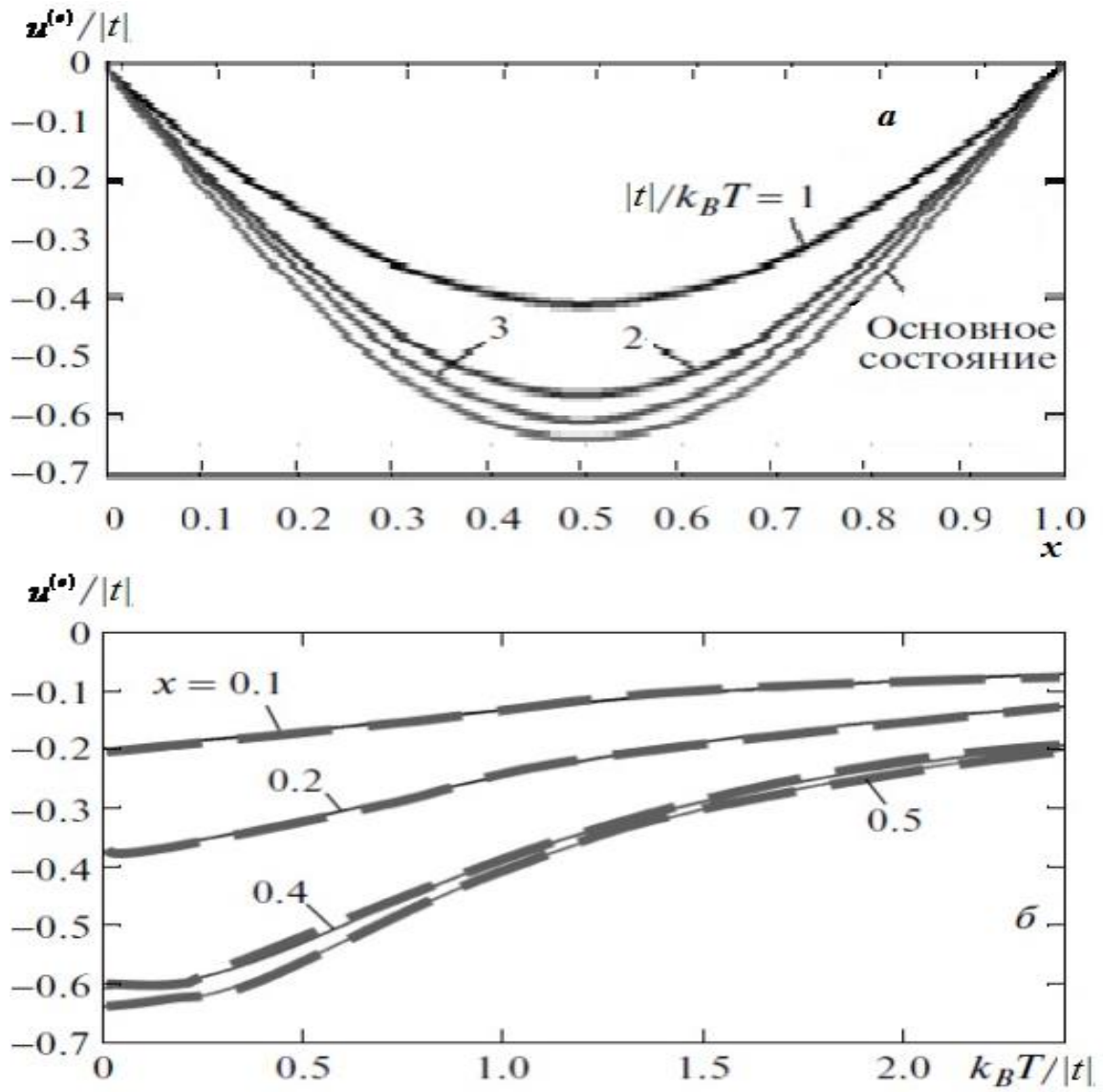


Рис. 9. Концентрационные (а) и температурные (б) зависимости электронной внутренней энергии. Для простоты предполагается, что $\varepsilon = 0$. На рис. (б) жирные штриховые линии – данные работы [48].

совпадения, впрочем, следовало ожидать. Действительно, отношение $\frac{u^{(e)}}{|t|}$, как нетрудно видеть, зависит от интеграла перескока t и температуры T лишь как от отношения $\frac{k_B T}{|t|}$. По этой причине переход к пределу $T \rightarrow \infty$ в отношении $\frac{u^{(e)}}{|t|}$

равносилен переходу в нем к пределу $t \rightarrow 0$. Итак, внутренняя энергия монотонно возрастает от значения (121) при $T = 0$, асимптотически приближаясь к значению (151) при $T \rightarrow \infty$.

При обсуждении концентрационной зависимости внутренней энергии обратим, в первую очередь, внимание на холонно-дырочную симметрию вообще всех термодинамических параметров (за исключением химического потенциала). Она заключается в термодинамической эквивалентности холонов и дырок и приводит к равенству:

$$a^{(h)}(x) = a^{(h)}(1-x) \quad (152)$$

где $a^{(h)}$ – любая из величин $f^{(h)}$, $s^{(h)}$, $u^{(h)}$ или $c^{(h)}$. И только для химического потенциала имеет место антисимметричность:

$$\mu^{(h)}(x) = -\mu^{(h)}(1-x). \quad (153)$$

Эта антисимметричность очевидна из равенства $x = 1 - n_h$ (n_h – концентрация холонов) и следующей цепочки равенств: $\mu^{(h)} = \frac{\partial f^{(h)}}{\partial n_h} = \frac{\partial f^{(h)}}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial n_h} = -\frac{\partial f^{(h)}}{\partial x}$, а также

из известного утверждения математического анализа о том, что производная дифференцируемой симметричной (антисимметричной) относительно некоторой точки функции сама антисимметрична (симметрична). В связи с обсуждаемой здесь концентрационной зависимостью электронной внутренней энергии отметим, что в соответствии с формулой (92) электронная внутренняя энергия совпадает с холонной и поэтому графики $u^{(e)}(x, T = \text{const})$ симметричны относительно точки $x = 0.5$.

Еще одна представляющая интерес особенность в поведении таких термодинамических параметров, как внутренняя энергия, теплоемкость и энтропия, как функции от концентрации дырочного допирования состоит в значительной зависимости этого поведения от температуры системы. При малых температурах воображаемый газ холонов практически полностью вырожден,

вследствие чего холонные добавки, обусловленные увеличением температуры, к этим величинам при $T = 0$ очень малы. Малость добавок приводит к малости концентрационных производных $\left. \frac{\partial \Delta b^{(h)}}{\partial x} \right|_{x \approx 0.1}$, где $\Delta b^{(h)} = b^{(h)}(T) - b^{(h)}(T = 0)$ – любая из величин $\Delta u^{(h)}$, $\Delta c^{(h)}$, $\Delta s^{(h)}$. По мере увеличения температуры каждая из концентрационных производных $\left. \frac{\partial \Delta b^{(h)}}{\partial x} \right|_{x \approx 0.1}$ растет и может достигать очень больших значений ($\sim |t|$ для внутренней энергии и $\sim k_B$ для теплоемкости и энтропии). Однако, по достижении температуры, определяемой условием

$$\frac{\partial^2 u^{(h)}}{\partial T^2} = 0, \quad (154)$$

теплоемкость при дальнейшем увеличении температуры убывает; внутренняя энергия и энтропия же при более высоких температурах, чем та, что определена условием (154), по-прежнему возрастают. Таким образом, мы видим, что уменьшение степени вырожденности холонного газа приводит к сильной концентрационной зависимости величин $\Delta u^{(h)}$, $\Delta c^{(h)}$, $\Delta s^{(h)}$. Сильная концентрационная зависимость указанных величин, в свою очередь, приводит к ослаблению концентрационной зависимости электронной внутренней энергии (которая, как легко показать, определяется равенством $u^{(e)} = -\frac{2|t|}{\pi} \sin(\pi x) + \Delta u^{(h)}$),

при $T \lesssim \frac{|t|}{k_B}$ к усилению концентрационной зависимости электронной

теплоемкости, при $T \gtrsim \frac{|t|}{k_B}$, наоборот, к ослаблению этой

зависимости ($c^{(e)} = \Delta c^{(h)}$) и при всех температурах к увеличению численного значения концентрационной производной $\frac{\partial s}{\partial x}$ энтропии при $x \approx 0.1$

($s^{(e)} = k_B(1-x) \ln 2 + \Delta s^{(h)}$). Заметим еще, что при всех имеющих место в реальном эксперименте значения интеграла перескока ($t \sim 0.1 \text{ эВ}$), температуры

($T \sim 10^2$ К) и индукции магнитного поля ($B \sim 10^4$ Гс) газ холонов является вырожденным. Поэтому в эксперименте следует ожидать сильное убывание внутренней энергии с ростом дырочной концентрации $\left(\frac{\partial u^{(e)}}{\partial x} \sim -|t| \text{ при } x \approx 0.1 \right)$, малую величину концентрационной производной теплоемкости $\frac{\partial c^{(e)}}{\partial x}$ и большую отрицательную величину концентрационной производной энтропии $\left(\frac{\partial s^{(e)}}{\partial x} \sim -k_B \text{ при } x \approx 0.1 \right)$.

Остальные особенности поведения зависимости внутренней энергии от дырочной концентрации нетрудно уяснить из уже обсуждавшейся температурной зависимости внутренней энергии. Все кривые $u^{(e)}(x, T = \text{const})$ располагаются «между» двумя кривыми: кривой (121), соответствующей нулевой температуре, и соответствующей пределу $T \rightarrow \infty$ прямой $u^{(e)}(T \rightarrow \infty) = (1 - x)\varepsilon$. Иначе говоря, по мере увеличения температуры кривая $u^{(e)}(x, T = \text{const})$ плавно уходит из своего начального положения (121), стремясь при $T \rightarrow \infty$ к конечному положению (151).

Поведение теплоемкости является прямым следствием поведения внутренней энергии. Сначала при увеличении температуры теплоемкость монотонно возрастает от нуля (см. формулу (122)) и в точке перегиба функции $u^{(e)} = u^{(e)}(T)$, определяемой условием

$$\frac{\partial^2 u^{(e)}}{\partial T^2} = 0, \quad (155)$$

которое в силу равенства (92) равносильно условию (154), достигает максимума. Далее она монотонно уменьшается до нуля:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} c^{(e)} = 0, \quad (156)$$

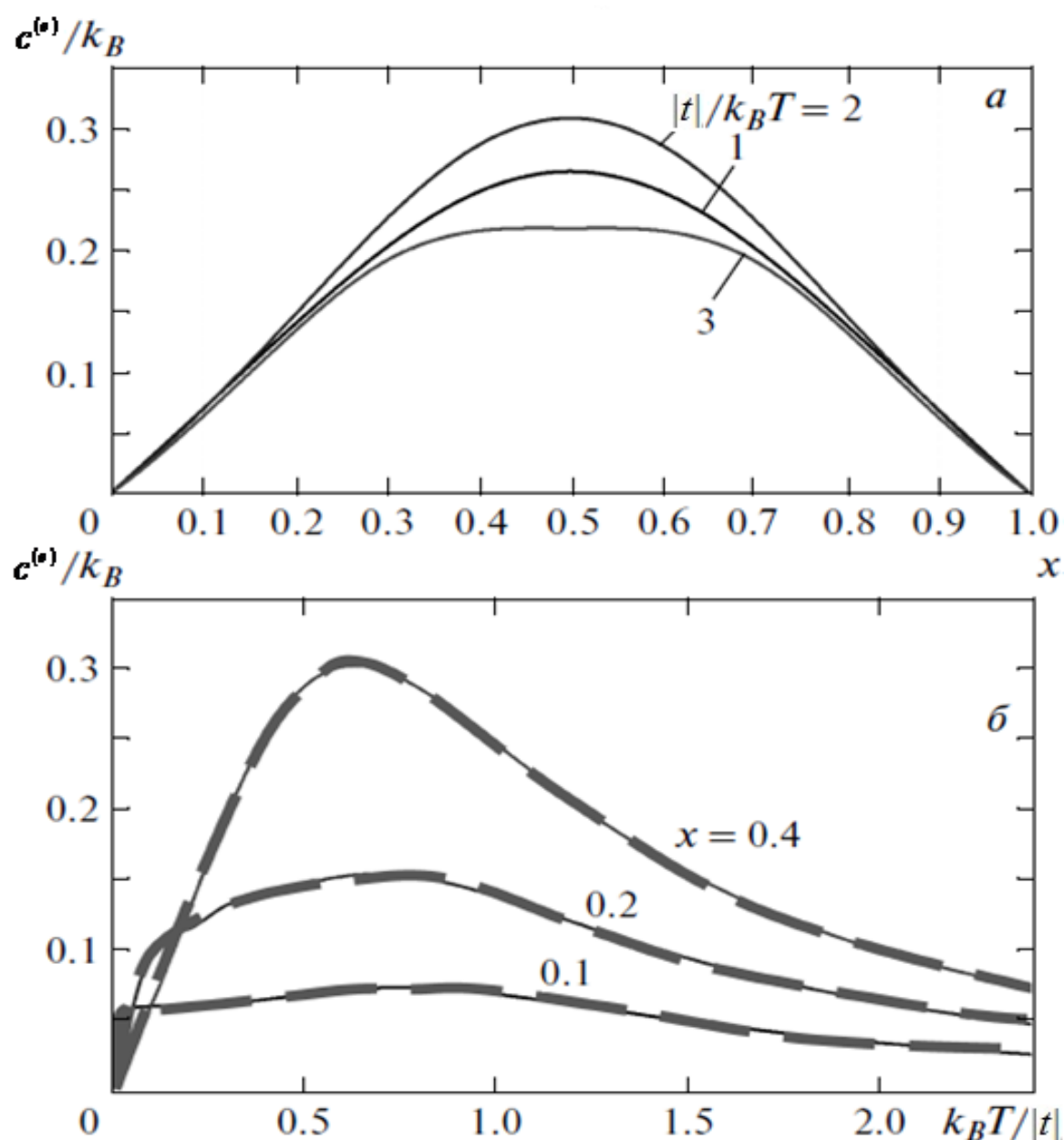


Рис. 10. Концентрационные (а) и температурные (б) зависимости электронной теплоемкости. На рис. (б) жирные штриховые линии – данные работы [48].

как и должно быть при асимптотическом стремлении внутренней энергии к постоянной величине. Этот результат, впрочем, следует и из выражения (61) для теплоемкости в атомном пределе, в котором в связи с контекстом рассматриваемой проблемы следует положить $h = 0$. Действительно, поскольку

теплоемкость зависит от интеграла перескока t и температуры T лишь через отношение $\frac{k_B T}{|t|}$, предел $\lim_{T \rightarrow \infty} c^{(e)}$ равен, очевидно, пределу $\lim_{t \rightarrow 0} c^{(e)}$, который, в свою очередь, в силу непрерывности функции $c^{(e)}(t)$, равен ее значению при $t = 0$:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} c^{(e)} = \lim_{t \rightarrow 0} c^{(e)} = c^{(e)}(t = 0).$$

Все указанные особенности поведения теплоемкости как функции температуры можно наблюдать и на графиках, отражающих концентрационную ее зависимость: кривая $c^{(e)}(x, T = \text{const})$ по мере увеличения температуры «поднимается» из своего первоначального положения $c^{(e)} = 0$ при $T = 0$, «проходит» через ряд метаморфоз при температурах, являющихся корнями уравнения (155) при различных значениях x , и далее «опускается», «стремясь» при $T \rightarrow \infty$ к предельной прямой $c^{(e)} = 0$. Наконец, отметим, что вследствие обсуждавшейся выше холонно-дырочной симметрии и равенства (93) кривые $c^{(e)}(x, T = \text{const})$ симметричны относительно точки $x = 0.5$.

Далее рассмотрим концентрационные и температурные зависимости энтропии (рис. 11). Начнем, как и прежде, с температурных зависимостей. При $T = 0$ энтропия полностью определяется спиновым вкладом (формула (123)), вклад холонов же равен нулю. По мере увеличения температуры энтропия, как и должно быть, монотонно возрастает (убывание энтропии с ростом температуры в принципе невозможно, так как приводило бы к отрицательной теплоемкости¹³). Нетрудно видеть, что предел $\lim_{T \rightarrow \infty} s^{(e)}$ существует и конечен. Для его нахождения вспомним, что энтропия $s^{(e)}$ зависит от интеграла перескока t и температуры T лишь как от отношения $\frac{k_B T}{|t|}$. Это означает, что переход к пределу $T \rightarrow \infty$

¹³ Неотрицательность теплоемкости является одним из следствий основных принципов статистической физики. Именно, выражение

$$c_y = \frac{\partial Q}{\partial T} \Big|_{y=\text{const}} = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_y = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_y = -T \left(\frac{\partial^2}{\partial T^2} \left(-k_B T \ln \sum_n \exp \left(-\frac{\varepsilon_n}{k_B T} \right) \right) \right)_y = \frac{\overline{\varepsilon^2} - \bar{\varepsilon}^2}{k_B T^2} = \frac{\overline{(\varepsilon - \bar{\varepsilon})^2}}{k_B T^2} \geq 0.$$

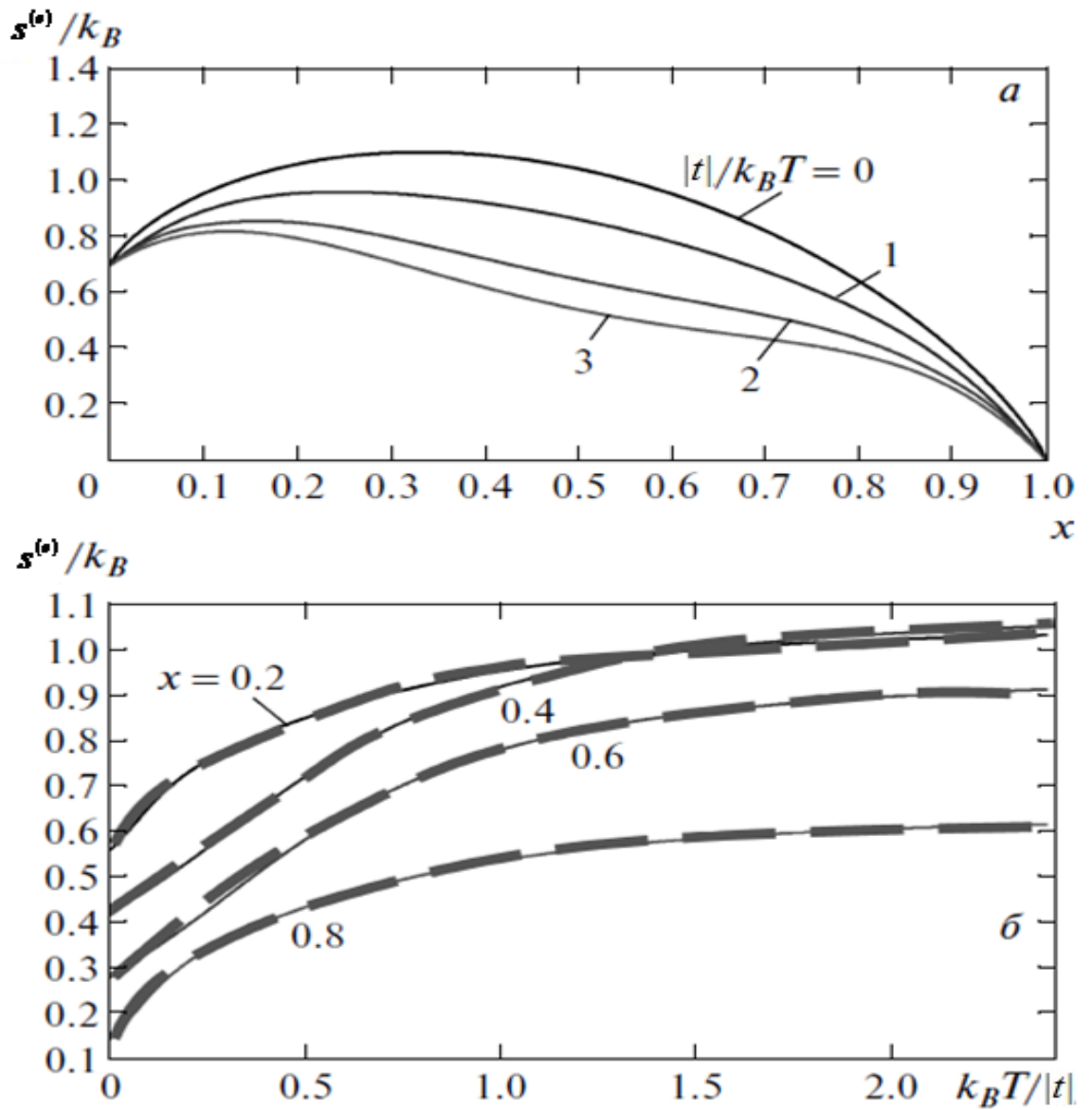


Рис. 11. Концентрационные (а) и температурные (б) зависимости электронной энтропии. На рис. (б) жирные штриховые линии – данные работы [48].

равносилен переходу к пределу $t \rightarrow 0$. При $t = 0$ же энтропия определяется формулой (59), в которой следует считать $h = 0$. Кроме того, в силу непрерывности функции $s^{(e)}(t)$ имеем:

$$\lim_{t \rightarrow 0} s^{(e)} = s^{(e)}(t = 0).$$

Итак,

$$\lim_{T \rightarrow \infty} s^{(e)} = k_B ((1-x) \ln 2 - x \ln x - (1-x) \ln(1-x)). \quad (157)$$

Помимо тех особенностей концентрационной зависимости энтропии, что уже были обсуждены выше, отметим еще одну, которая, впрочем, является прямым следствием только что обсуждавшейся температурной ее зависимости. Именно, по мере увеличения температуры кривая $s^{(e)}(x, T = \text{const})$ постепенно «поднимается» из начального положения (123) при $T = 0$, когда вклад в энтропию дают лишь спиноны, «стремясь» при $T \rightarrow \infty$ к конечному положению (157), где холонный вклад, обусловленный перескоками, достигает максимального значения, определяемого формулой (76) (атомный предел). Отметим еще, что формула для энтропии (76) при $h = 0$ находится в полном согласии с формулой Больцмана, согласно которой

$$s = -k_B \sum_k w_k \ln w_k,$$

где w_k – вероятность нахождения квантовой системы в k -м квантовом состоянии.

Переходим к обсуждению зависимостей для свободной энергии (рис. 12). При $T = 0$ свободная энергия попросту совпадает с внутренней:

$$f^{(e)}(T = 0) = u^{(e)}(T = 0) \quad (158)$$

(см., кроме того, формулы (121), (124)). Кривые $f^{(e)}(T, x = \text{const})$, таким образом,

«выходят» из точки $\left(0, -\frac{2|t|}{\pi} \sin(\pi x)\right)$, и, как и должно быть, монотонно убывают с

ростом температуры (вспомним, что $\frac{\partial f^{(e)}}{\partial T} = -s^{(e)} \leq 0$). При $T \rightarrow \infty$ эти кривые

асимптотически приближаются к наклонным прямым, уравнение которых несложно найти в аналитическом виде:

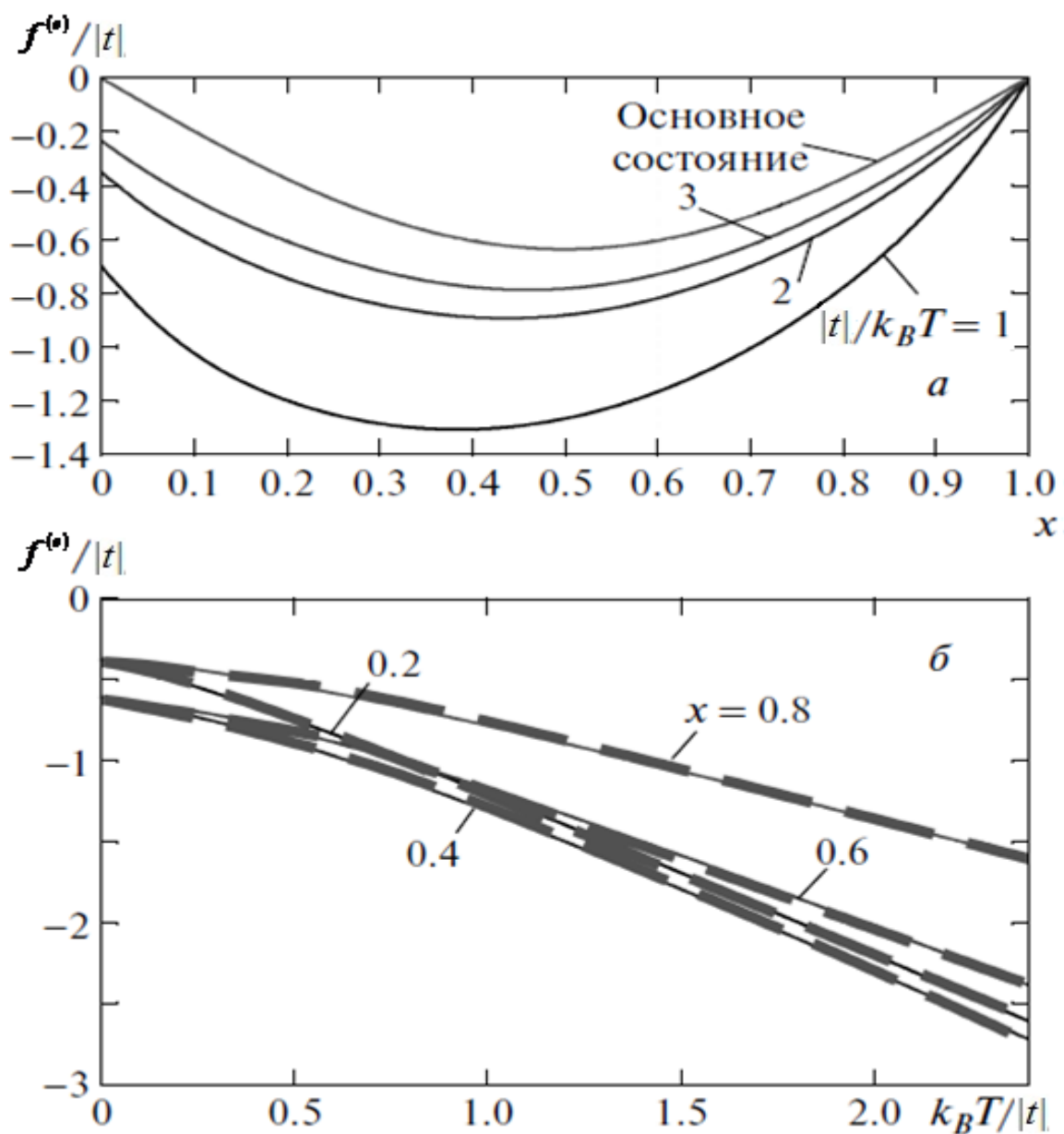


Рис. 12. Концентрационные (а) и температурные (б) зависимости электронной свободной энергии. Для простоты предполагается, что $\varepsilon = 0$. На рис. (б) жирные штриховые линии – данные работы [48].

$$\begin{aligned}
 f^{(e)}(T \rightarrow \infty) &= u^{(e)}(T \rightarrow \infty) - T s^{(e)}(T \rightarrow \infty) = \\
 &= (1-x)\varepsilon - k_B T ((1-x) \ln 2 - x \ln x - (1-x) \ln(1-x)).
 \end{aligned}
 \tag{159}$$

Этот результат, как и следовало ожидать, совпадает с формулой (58), в которой предполагается $h=0$, для свободной энергии в атомном пределе, когда $t=0$.

Действительно, отношение $\frac{f^{(e)}}{|t|}$, как легко понять, зависит лишь от отношения

$\frac{k_B T}{|t|}$, и поэтому переход в первом отношении к пределу $T \rightarrow \infty$ равносильен

переходу в нем к пределу $t \rightarrow 0$.

Концентрационные зависимости свободной энергии $f^{(e)}(x, T = \text{const})$ имеют следующую характерную особенность, следующую, впрочем, из температурных ее зависимостей $f^{(e)}(T, x = \text{const})$. Именно, по мере уменьшения температуры эти кривые ($f^{(e)}(x, T = \text{const})$) «поднимаются» из минус бесконечности (как и должно быть в соответствии с (159)) и в пределе $T \rightarrow 0$ стремятся к кривой, описываемой уравнением (124).

Обсудим, наконец, поведение химического потенциала (рис. 13). При $T=0$ химический потенциал попросту совпадает с энергией Ферми, которая была ранее вычислена в параграфе 3.1 (см. текст перед формулами (105) и (106) и формулу (120)). Однако даже при сколь угодно малой температуре химический потенциал обращается при $x=0$ и $x=1$ соответственно в $+\infty$ и $-\infty$. Действительно, как мы видели в параграфе 3.1 (см. текст после формулы (138)), для холонного химического потенциала это утверждение справедливо. Но в соответствии с формулой (94) электронный химический потенциал отличается от холонного лишь на конечную величину $k_B T \ln 2$. Далее, вследствие того, что величина $\frac{\mu^{(e)}}{|t|}$

зависит лишь от отношения $\frac{k_B T}{|t|}$, асимптотика химического потенциала при

$T \rightarrow \infty$, очевидно, совпадает с точным выражением для него при $t=0$:

$$\mu^{(e)}(T \rightarrow \infty) = -k_B T \ln \frac{2x}{1-x}. \quad (160)$$

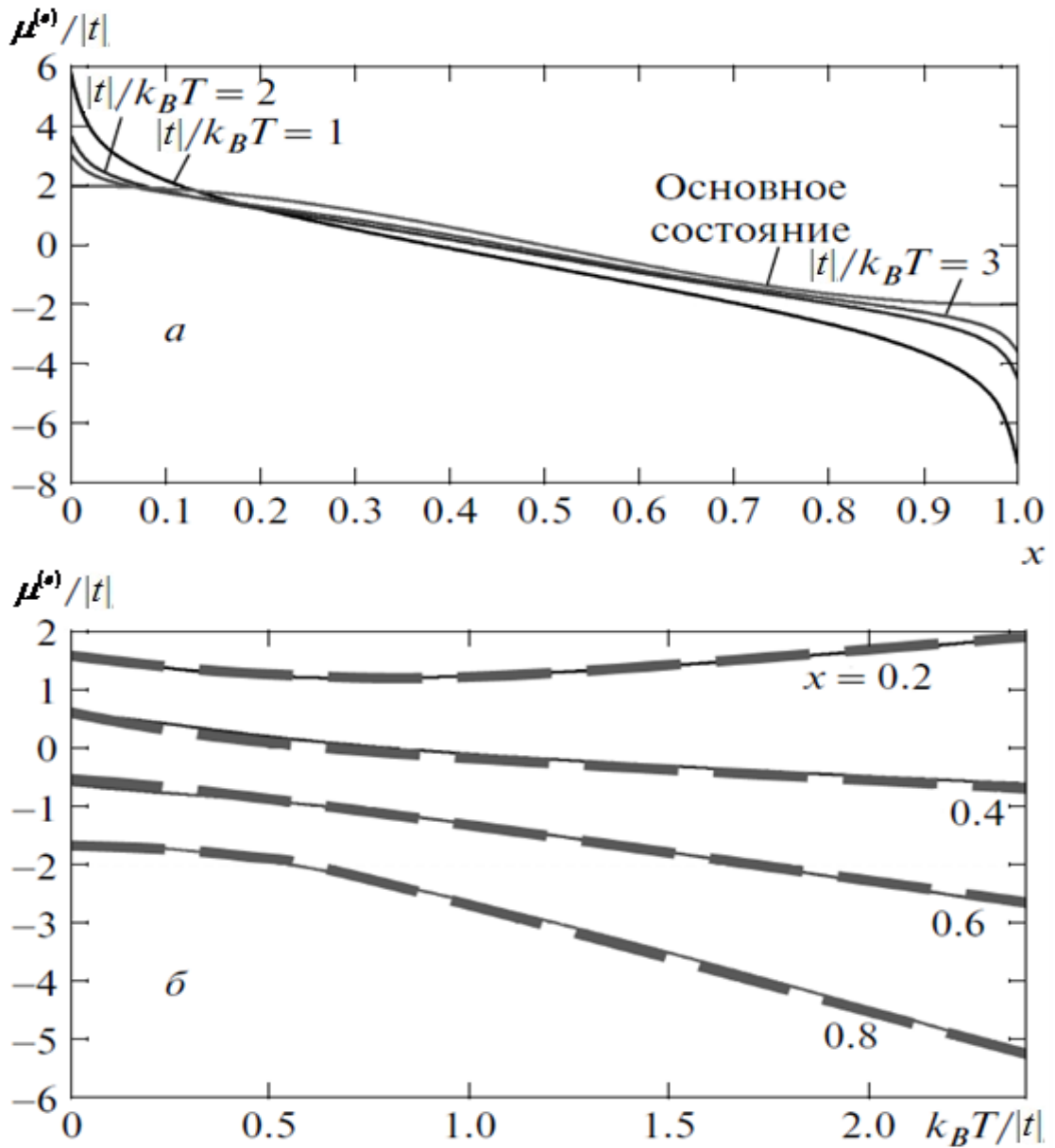


Рис. 13. Концентрационные (а) и температурные (б) зависимости электронного химического потенциала. Для простоты предполагается, что $\varepsilon = 0$. На рис. (б) жирные штриховые линии – данные работы [48].

Несмотря на то, что этот результат заранее очевиден, отметим, что его можно получить и дифференцированием асимптотической формулы (159) в соответствии с определением: $\mu^{(h)} = -\frac{\partial f^{(h)}}{\partial x}$. Отметим еще, что, как и следовало ожидать, кривые

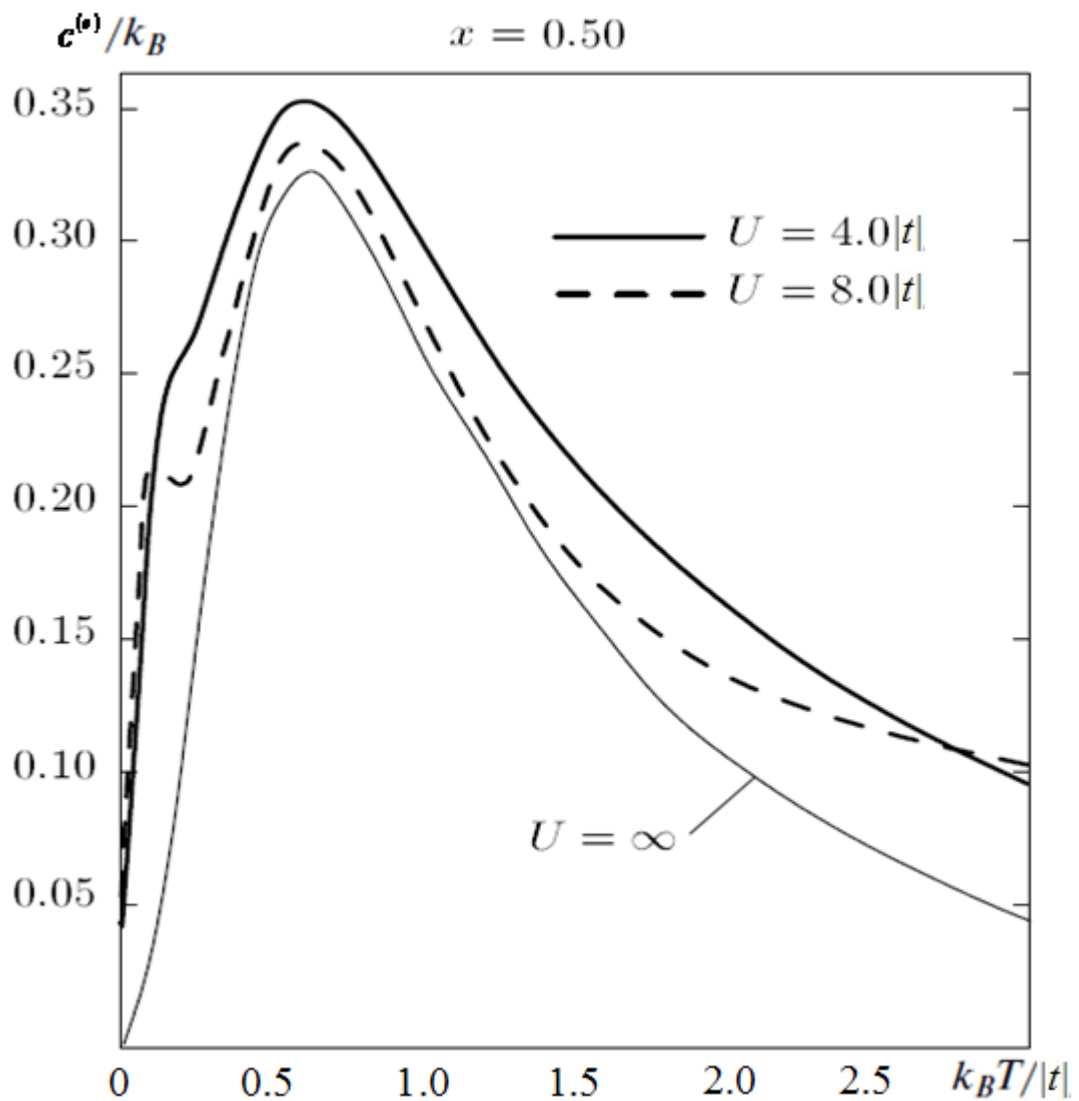


Рис. 14. Сравнение температурных зависимостей теплоемкости из работы [98], вычисленных для $U/|t| = 4$ и $U/|t| = 8$, с полученной нами кривой для $U/|t| = \infty$.

концентрационной зависимости для химического потенциала представляют собой монотонно убывающие зависимости.

Как видно из представленных результатов, полученные температурные зависимости полностью совпадают с данными, представленными в работе [48]. В то же время нам не удалось найти работ, в которых были бы представлены концентрационные зависимости термодинамических параметров.

В заключение параграфа отметим еще один представляющий самостоятельный интерес результат. Ранее термодинамика одномерной модели Хаббарда при конечных значениях параметра U исследовалась на основе метода анзаца Бете в работах [22, 98]. Представленные в [22] зависимости теплоемкости от температуры при малых x имеют два максимума. Низкотемпературный узкий максимум связан со спиновыми возбуждениями. Этот максимум достигается при температуре $T \sim \frac{J}{k_B}$ и исчезает в пределе $U \rightarrow \infty$. Более широкий высокотемпературный максимум обусловлен зарядовыми возбуждениями и достигается при $T \sim \frac{|t|}{k_B}$. Поскольку, как указано в [98], величина и положение этого максимума слабо зависят от величины U , имеет смысл сравнение температурных зависимостей теплоемкости в указанной и настоящей работах. Как видно из рис. 14, очень близки к данным в [98] и положение, и величина теплоемкости $c^{(e)} \approx 0.3k_B$ в точке максимума.

3.3. Концентрационные, температурные и полевые зависимости термодинамических характеристик при наличии магнитного поля

Перейдем теперь к обсуждению результатов для одномерной t -модели в магнитном поле, полученных с помощью формул (97) – (101). Еще раз отметим, что наличие магнитного поля ведет к появлению двух энергетических зон (107), (108) вместо одной (66).

Начнем, как и в параграфе 3.2, с результатов для внутренней энергии (рис. 15). В соответствии с (99) при включении магнитного поля внутренняя энергия

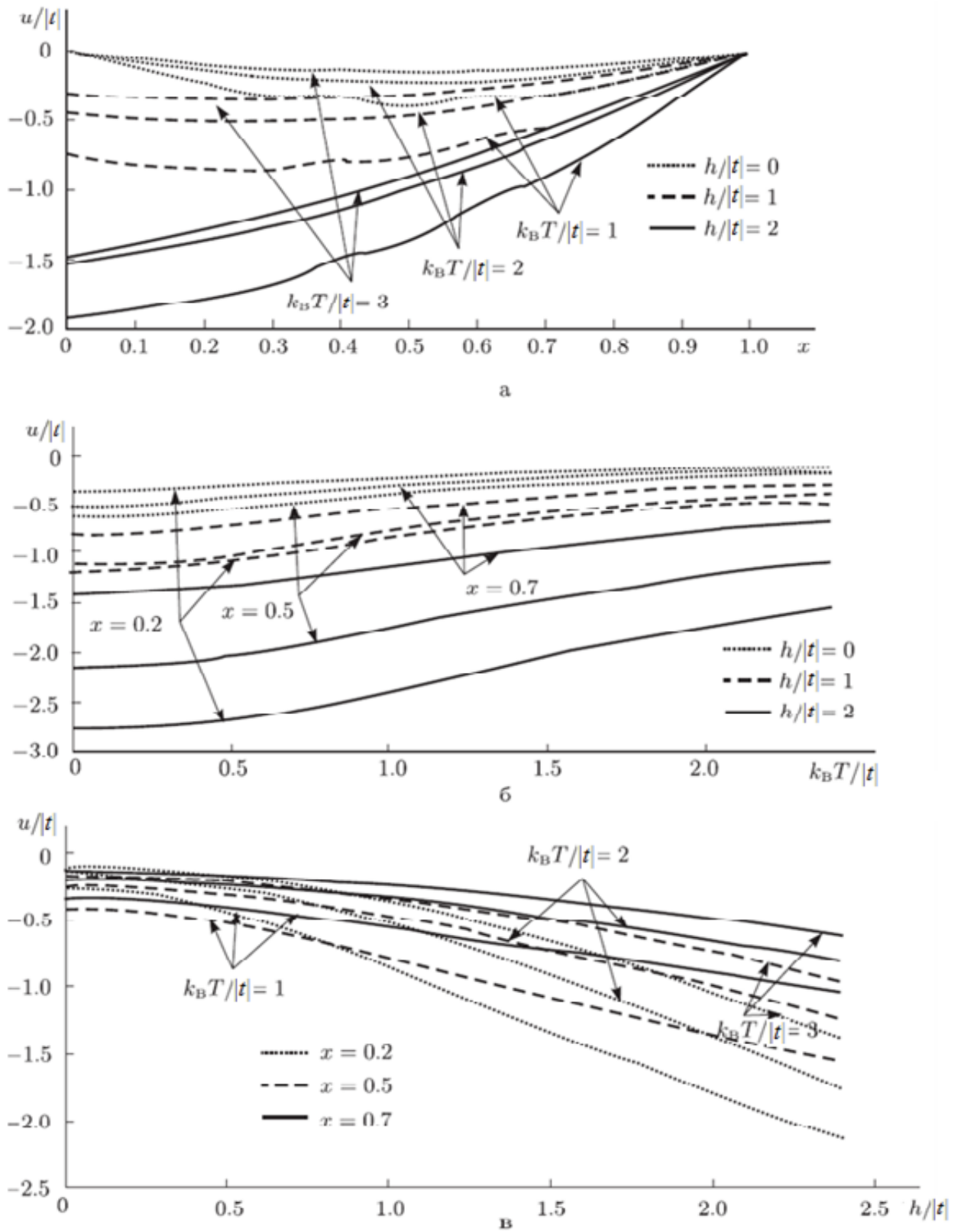


Рис. 15. Зависимости внутренней энергии от концентрации дырок (а), температуры (б) и индукции магнитного поля (в). Для простоты предполагается, что $\varepsilon = 0$.

убывает на $(1-x)h \ln\left(\frac{h}{k_B T}\right)$. Убывание внутренней энергии при включении поля есть прямое следствие заполнения преимущественно нижележащей энергетической зоны. Теперь при $T = 0$ внутренняя энергия равна:

$$u(T = 0) = \varepsilon - \frac{2|t|}{\pi} \sin(\pi x) - (1-x)h, \quad (161)$$

т. е. уменьшается ровно на $n_e h$ ($n_e = 1-x$ – концентрация электронов) – все электроны «перескочили» на нижние энергетические зеемановские уровни. По мере увеличения температуры внутренняя энергия возрастает и при $T \rightarrow \infty$ асимптотически стремится к значению, которое можно определить из (99), переходя в этой формуле к пределу $\lim_{T \rightarrow \infty} u$. В результате получается то же значение, что и в нулевом магнитном поле:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} u = \varepsilon(1-x). \quad (162)$$

Этот результат имеет простую интерпретацию. При $T \rightarrow \infty$ вероятность заполнения одного из двух энергетических уровней, отвечающих какому-то конкретному значению квазиволнового вектора $\mathbf{k}$, равна n_e и не зависит от $\mathbf{k}$ (вероятность заполнения какого-то конкретного энергетического уровня, отвечающего данному значению $\mathbf{k}$, равна, очевидно, $n_e/2$). Очевидно, что при случайном распределении N_e электронов на N уровней двух энергетических зон (107), (108) для внутренней энергии и получается значение (162).

Переходя к обсуждению концентрационной зависимости внутренней энергии, сделаем следующее замечание. В параграфе 3.2 мы уже говорили о существенной зависимости концентрационных производных электронных внутренней энергии, теплоемкости и энтропии в одномерной t -модели без магнитного поля от того, вырожденный или невырожденный газ холонов соответствует рассматриваемой температуре T . Несложный анализ формул (98),

(99) и (100) показывает, что магнитное поле приводит к увеличению численного значения концентрационной производной $\frac{\partial u}{\partial x}$ и убыванию абсолютного значения

$\left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|$, уменьшению производной $\frac{\partial c}{\partial x}$ и увеличению производной $\frac{\partial s}{\partial x}$

(предполагается, что все производные рассматриваются при $x \approx 0.1$). Важно заметить, что при всех имеющих место в реальном эксперименте значения интеграла перескока ($t \sim 0.1$ эВ), температуры ($T \sim 10^2$ К) и индукции магнитного

поля ($B \sim 10^4$ Гс) будем иметь: $\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x \approx 0.1} \approx -|t|$, $\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x \approx 0.1} \approx -0.1k_B$, $\left. \frac{\partial s}{\partial x} \right|_{x \approx 0.1} \approx -k_B$.

Относительно концентрационной зависимости внутренней энергии добавим еще, что все кривые $u(x, T = \text{const}, h = \text{const})$, описывающие концентрационную зависимость внутренней энергии, располагаются, очевидно, между кривыми (161) и (162).

Зависимости $u(h, x = \text{const}, T = \text{const})$ представляют собой монотонно убывающие кривые, как это и должно быть в соответствии с (99) (в данном случае даже нет необходимости брать производную $\frac{\partial u}{\partial h}$ – убывание очевидно вследствие вида вычитаемой функции от h из независимой от h функции $u^{(e)}$). Отметим, что при $h = 0$, как и должно быть,

$$u(h = 0, x, T) = u^{(e)}(x, T), \quad (163)$$

а при $h \rightarrow \infty$ уравнение наклонных асимптот имеет следующий вид (легко находится из (99)):

$$u(h \rightarrow \infty) = u^{(e)} - (1 - x)h, \quad (164)$$

Физическая причина убывания u при возрастании h состоит, очевидно, в том, что электроны во все большем количестве заполняют все более (с ростом h) низкоэнергетические состояния, образующиеся при зеемановском расщеплении.

При очень больших полях практически все электроны находятся в нижней энергетической зоне, что и отражает равенство (164).

Переходим теперь к обсуждению поведения теплоемкости (рис. 16). Наибольший интерес здесь представляют температурные зависимости теплоемкости. Нетрудно видеть, что оба слагаемых в (100) как функции температуры представляют собой кривые, имеющие одну точку максимума. Максимум кривой $c^{(e)}(T, x = \text{const}) = c^{(h)}(T, x = \text{const})$ имеет холонную природу и не связан со спиновыми возбуждениями. Максимум же кривой

$$c^{(s)} = (1-x) \frac{h^2}{k_B T^2} \frac{1}{\text{ch}^2\left(\frac{h}{k_B T}\right)}$$

связан с наличием магнитного поля и, таким образом,

напротив, обусловлен спиновыми возбуждениями. Нетрудно найти, что он достигается при температуре

$$T^* = \frac{1}{z_0} \frac{h}{k_B},$$

где z_0 – корень трансцендентного уравнения $z = \text{cthz}$. Приближенное решение этого уравнения $z_0 \approx 1.2^{14}$, так что

$$T^* \approx 0.83 \frac{h}{k_B}. \quad (165)$$

Таким образом, положение холонного максимума не зависит от h , а положение спинонного линейно по h . Значение спинонного вклада в точке максимума несложно найти прямым вычислением:

$$c^{(s)}(T^*) \approx 0.44 k_B (1-x). \quad (166)$$

¹⁴ Второй отрицательный корень $z'_0 = -z_0$ этого уравнения соответствует изменению направления поля и здесь не рассматривается (хотя может быть рассмотрен в полной аналогии с корнем z_0 и, кроме того, приведет, очевидно, к тем же физическим результатам).

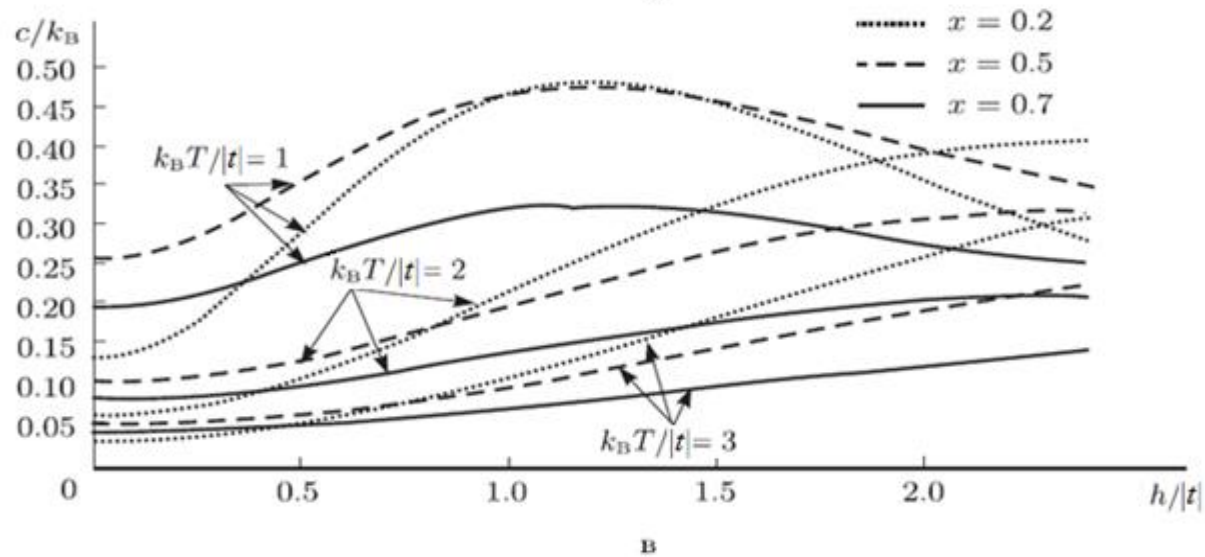
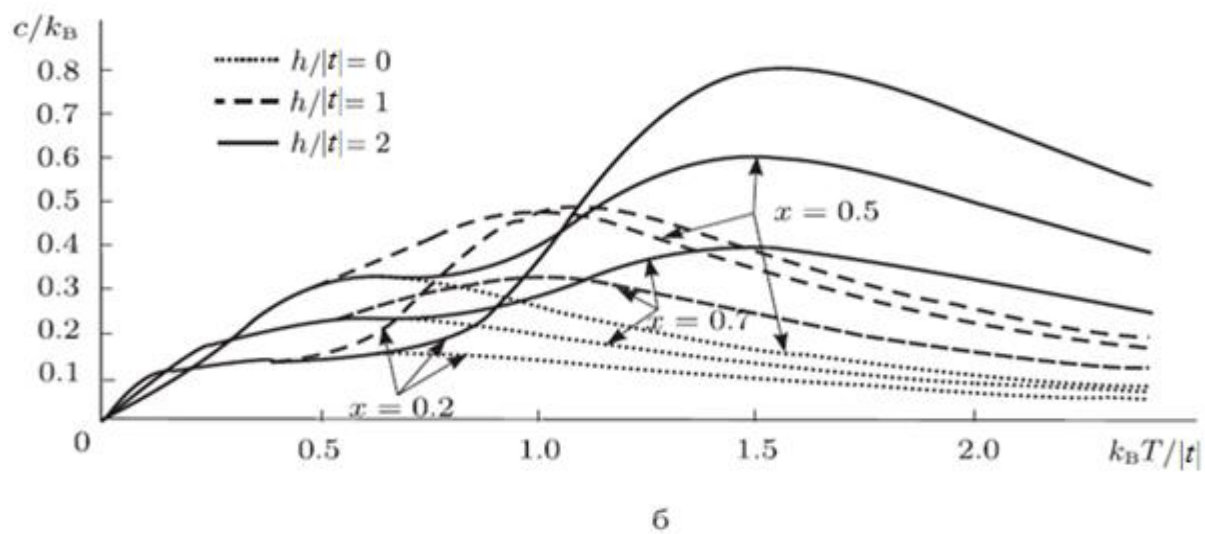
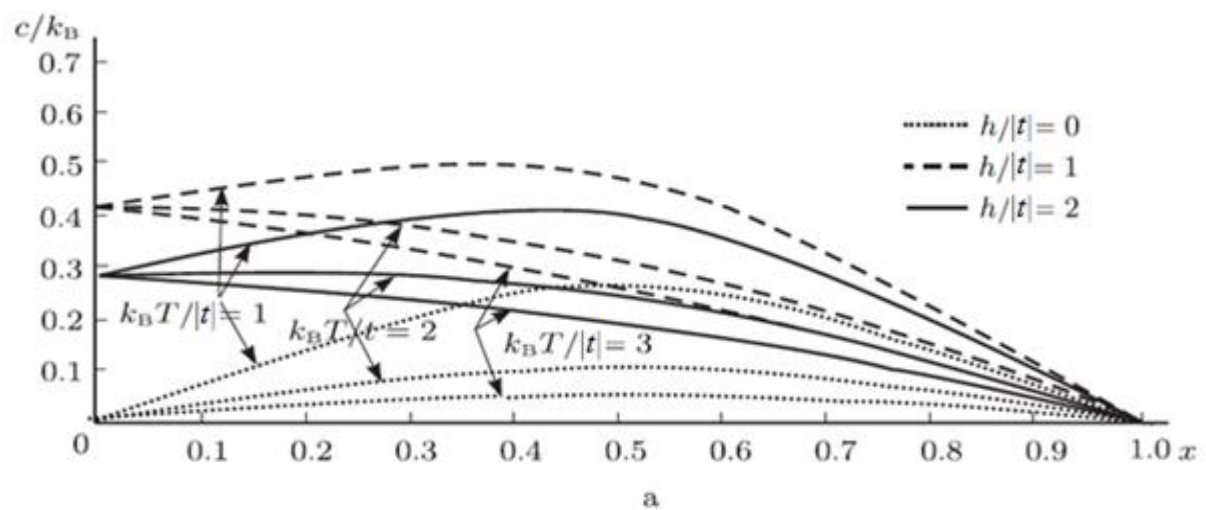


Рис. 16. Зависимости теплоемкости от концентрации дырок (а), температуры (б) и индукции магнитного поля (в).

Как видно из рис. 10 и результата (166), значения холонного и спинонного вкладов в точках их максимумов совпадают по порядку величины. По этой причине в полях $h \approx (0.1-4)|t|$ существует интервал температур, в которой величины $c^{(h)} = c^{(e)}$ и $c^{(s)}$ имеют одинаковый порядок, и вследствие этого на кривой $c(T)$ различается лишь один максимум¹⁵. В полях $h < 0.1|t|$ спинонный максимум достигается при температуре, определяемой (165), и имеет величину, определяемую из (166), которая явно превосходит значение $c^{(h)}(T^*)$. По этой причине в этой области полей на кривой $c(T)$ отчетливо различаются два максимума, причем спинонный лежит левее холонного. В полях $h > 4|t|$ при температуре T^* величина $c^{(s)}$ спинонной теплоемкости снова явно превосходит значение холонной теплоемкости $c^{(h)}$, и, таким образом, на кривой $c(T)$ опять различаются два максимума, но на сей раз спинонный лежит правее холонного. Кривые $c(T, x = \text{const}, h = \text{const})$ при различных значениях h показаны на рис. 17.

Отметим здесь некоторую аналогию температурной зависимости теплоемкости в одномерной t -модели в магнитном поле с обсуждавшимся в конце параграфа 3.2 поведением теплоемкости в одномерной модели Хаббарда с конечным U без магнитного поля. В последней модели низкотемпературный максимум связан со спиновыми возбуждениями и достигается при температуре $T \sim \frac{J}{k_B}$. Высокотемпературный же максимум обусловлен зарядовыми

возбуждениями и достигается при температуре $T \sim \frac{|t|}{k_B}$. В рассматриваемой нами

модели $J = \frac{2t^2}{U} = 0$, так что спинонный максимум, казалось бы, должен отсутствовать (и отсутствует при $h = 0$). Тем не менее, включение магнитного поля приводит к ненулевой энергии спиновых возбуждений, и этот максимум вновь появляется.

¹⁵ Указанный интервал был найден при помощи пакета Matlab и носит исключительно оценочный характер, поскольку на самом деле, конечно, зависит еще от x .

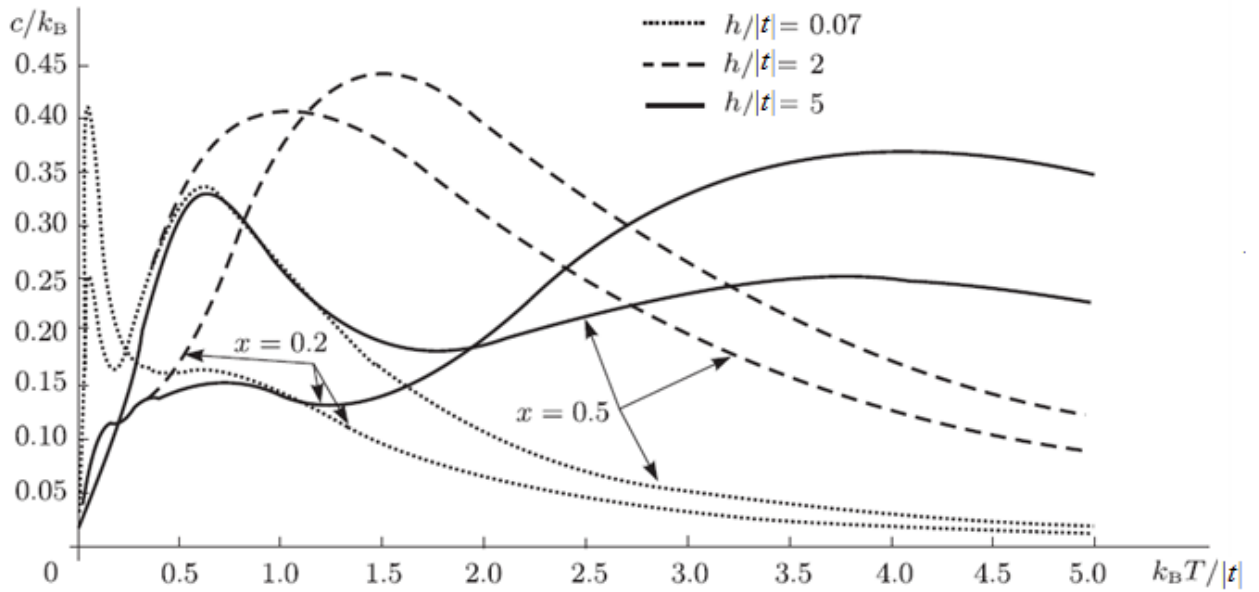


Рис. 17. Зависимости теплоемкости от температуры, имеющие при различных значениях индукции магнитного поля то одну, то две точки максимума.

Из только что сказанного нетрудно теперь понять поведение теплоемкости при изменении концентрации дырок в системе (при постоянных температуре и индукции магнитного поля). При постоянном $0.1|t| < h < 4|t|$ по мере увеличения температуры графики $c(x)$ «поднимаются» из своего первоначального положения $c(x) = 0$ при $T = 0$ (которое находим из условий $c^{(e)}(x, T = 0) = 0$ и $\lim_{T \rightarrow 0} c^{(s)} = 0$), «проходят» через ряд метаморфоз при температурах, являющихся корнями уравнения $\frac{\partial^2 u}{\partial T^2} = 0$ при различных значениях x , и далее вновь сплюсчиваются к нулю при $T \rightarrow \infty$ (поскольку $\lim_{T \rightarrow \infty} c^{(h)} = \lim_{T \rightarrow \infty} c^{(e)} = \lim_{T \rightarrow \infty} c^{(s)} = \lim_{T \rightarrow \infty} c = 0$). При $h < 0.1|t|$ по мере увеличения температуры кривая $c(x)$ «поднимается» вверх, «проходит» через ряд метаморфоз, обусловленных спиновыми возбуждениями, затем «опускается» вниз и вновь «проходит» через ряд метаморфоз, соответствующих минимуму зависимости $c(x)$ при различных значениях x , далее вновь

«поднимается» вверх и «проходит» через ряд метаморфоз, обусловленных зарядовыми возбуждениями, и, наконец, «опускается» к прямой $c(x)=0$. При $h > 4|t|$, наоборот, сначала достигаются холонные метаморфозы, а затем – спинонные.

Обсудим, наконец, поведение теплоемкости в зависимости от индукции магнитного поля в веществе. Отметим три следующие особенности этой зависимости. Во-первых, очевидно, что при $h=0$ теплоемкость попросту совпадает с холонной:

$$c(h=0, x, T) = c^{(e)}(x, T) = c^{(h)}(x, T). \quad (167)$$

Во-вторых, при $h \rightarrow \infty$ верхняя энергетическая зона «замораживается»: электроны могут занимать квантовые состояния лишь в нижней энергетической зоне. Понятно, что в этом случае, по существу, мы имеем систему холонов. Поэтому

$$c(h \rightarrow \infty, x, T) = c^{(h)}(x, T) = c^{(e)}(x, T). \quad (168)$$

В-третьих, спинонный вклад в теплоемкость $c^{(s)} = (1-x) \frac{h^2}{k_B T^2} \frac{1}{\text{ch}^2\left(\frac{h}{k_B T}\right)}$, как

вообще всякая теплоемкость, неотрицателен. Уже из этих соображений можно заключить, что кривая $c(h, x = \text{const}, T = \text{const})$ может иметь не более чем счетное количество максимумов. Далее, как это следует из точного выражения для спинонной теплоемкости, эта кривая имеет ровно один максимум. Его положение нетрудно определить:

$$h^* = z_0 k_B T \approx 1.2 k_B T, \quad (169)$$

где z_0 – ранее упомянутый положительный корень уравнения $z = \text{cth} z$.

Обсудим теперь зависимости, полученные для энтропии (рис. 18). Наибольший интерес и здесь представляет температурная зависимость. Как уже обсуждалось в параграфе 3.2, в отсутствие магнитного поля при $T=0$ вклад в

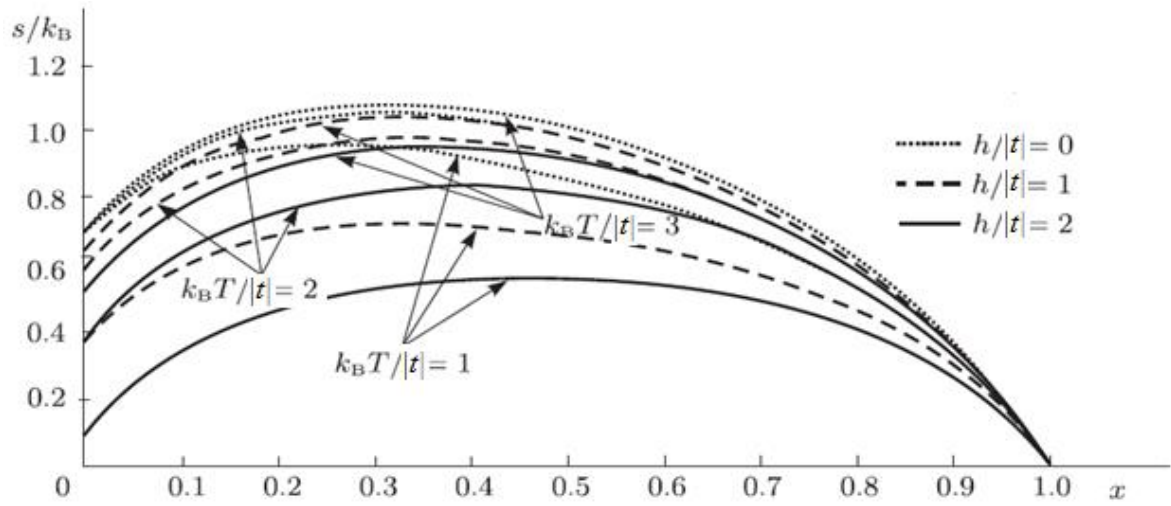
энтропию дают лишь спиноны (формула (123)). Однако, перейдя в формуле для энтропии (98) к пределу $T \rightarrow 0$ при $h \neq 0$ получим несовпадающее с (123) не зависящее от h значение (128) (см. также сноску 10 на стр. 61). Таким образом, при $T = 0$ включение даже сколь угодно малого магнитного поля приводит к скачкообразному уменьшению энтропии на $k_B(1-x)\ln 2$. Причину этого скачка легко понять. При $T = 0$, $h \neq 0$ электроны не занимают квантовые состояния в верхней энергетической зоне. «Работает» только нижняя зона, на которой z -проекция спина электрона может принимать единственное значение $-1/2$ – по существу получается система холонов при $T = 0$.

В остальном температурное поведение энтропии совпадает с уже описанным в параграфе 3.2 при $h = 0$: зависимости $s(T, x = \text{const}, h = \text{const})$ представляют собой монотонно возрастающие функции, и при $T \rightarrow \infty$ стремятся к горизонтальной асимптоте, уравнение которой несложно найти из общей формулы (98):

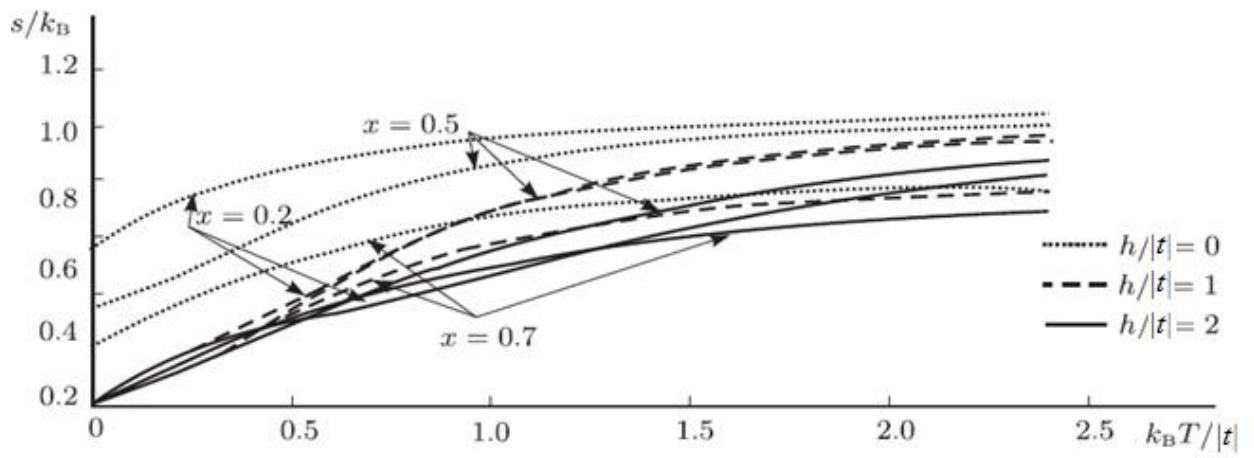
$$\lim_{T \rightarrow \infty} s = k_B((1-x)\ln 2 - x \ln x - (1-x)\ln(1-x)), \quad (170)$$

Иначе говоря, магнитное поле «не работает» для энтропии при больших температурах. Этот результат понятен: при $T \rightarrow \infty$ вероятности заполнения каждой пары квантовых состояний, отвечающих различным значениям квазиволнового вектора $\mathbf{k}$, независимо от величины индукции магнитного поля и значения $\mathbf{k}$ одинаковы и равны $n_e = 1-x$ (при этом два электрона не могут занимать состояния с заданным $\mathbf{k}$). Этого уже достаточно для совпадения всех энтропий при различных значениях h вследствие однозначного определения энтропии через вероятности возможных квантовых состояний системы (формула Больцмана).

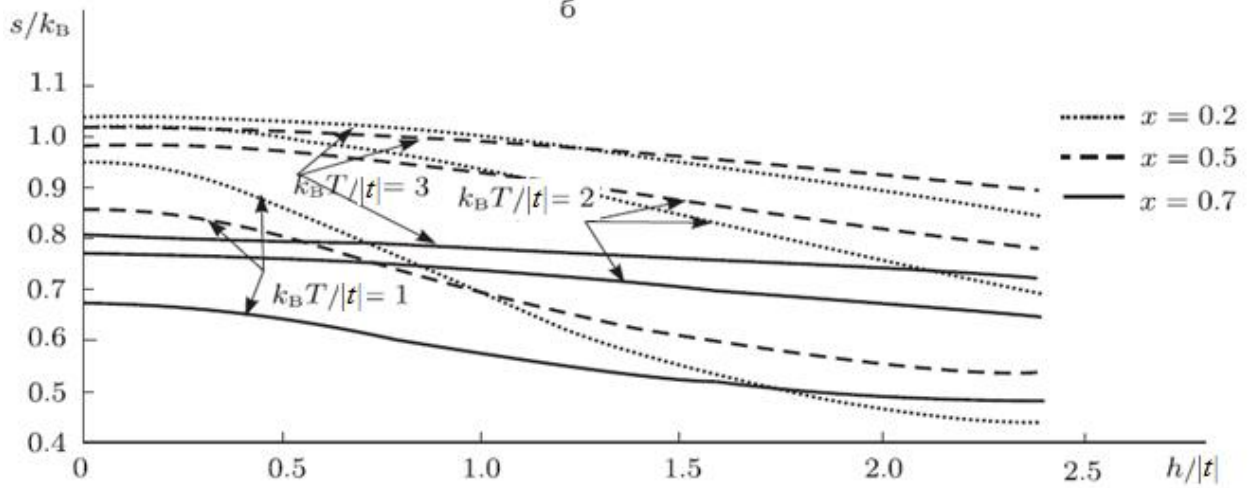
Только что сказанное позволяет легко понять концентрационные зависимости энтропии. При $T = 0$ кривая $s(x)$ просто ложится на ось абсцисс. По



a



б



в

Рис. 18. Зависимости энтропии от концентрации дырок (а), температуры (б) и индукции магнитного поля (в).

мере увеличения температуры она постепенно «поднимается» из своего первоначального положения, и при $T \rightarrow \infty$ приближается к предельному положению (170).

Что касается зависимости энтропии от величины индукции магнитного поля, то, как видно из графиков, представленных на рис. 18 в, эти зависимости представляют собой монотонно убывающие кривые, как и должно быть в соответствии с (98). Действительно, производная

$$\frac{\partial s}{\partial h} = -(1-x) \frac{h}{k_B T^2} \frac{1}{\operatorname{ch}^2\left(\frac{h}{k_B T}\right)} \leq 0,$$

причем равенство имеет место только при $h = 0$. Физическая причина убывания энтропии с ростом поля понятна: электроны во все большем количестве «проваливаются» в нижележащую энергетическую зону и, таким образом, спинонный вклад в энтропию уменьшается. При $h \rightarrow \infty$ остается только холонный вклад:

$$\lim_{h \rightarrow \infty} s(h, x, T) = s^{(h)}(x, T). \quad (171)$$

Завершая обсуждение поведения зависимостей для энтропии, добавим, что формула (59) для энтропии при $t = 0$ находится в полном согласии с формулой Больцмана $s = -k_B \overline{\ln w} = -k_B \sum_k w_k \ln w_k$. Действительно, записывая при $t = 0$ большое каноническое распределение Гиббса и решая уравнение на химический потенциал, получим следующие значения для вероятностей состояний электрона с проекциями спина $+1/2$ и $-1/2$ и нульдырочного состояния:

$$w_{k\uparrow} = \frac{1-x}{2\operatorname{ch}\left(\frac{h}{k_B T}\right)} \exp\left(-\frac{h}{k_B T}\right), \quad (172)$$

$$w_{k\downarrow} = \frac{1-x}{2\operatorname{ch}\left(\frac{h}{k_B T}\right)} \exp\left(\frac{h}{k_B T}\right), \quad (173)$$

$$w_{k0} = x. \quad (174)$$

Подставляя выражения (172), (173) и (174) в формулу Больцмана, получим формулу (59).

Обсудим теперь зависимости, полученные для свободной энергии (рис. 19). Как и должно быть, зависимости $f(T, x = \text{const}, h = \text{const})$ являются монотонно убывающими (еще раз вспомним, что $\frac{\partial f}{\partial T} = -s \leq 0$). При $T = 0$ свободная энергия, естественно, совпадает с внутренней:

$$f(T = 0) = u(T = 0) = -\frac{2|t|}{\pi} \sin(\pi x) - h. \quad (175)$$

Вследствие асимптотических равенств (162) и (170) для внутренней энергии и энтропии асимптотика свободной энергии при больших температурах не изменяется по сравнению со случаем $h = 0$ и, таким образом, по-прежнему описывается формулой (159). Иначе говоря,

$$\begin{aligned} f(T \rightarrow \infty) &= f^{(e)}(T \rightarrow \infty) = \\ &= (1-x)\varepsilon - k_B T((1-x)\ln 2 - x\ln x - (1-x)\ln(1-x)). \end{aligned} \quad (176)$$

Впрочем, ответ (176) следует и из того, что, как указывалось выше, при $T \rightarrow \infty$ вероятности заполнения пар квантовых состояний, отвечающих данному значению квазиволнового вектора $\mathbf{k}$, независимо от величины индукции магнитного поля и значения $\mathbf{k}$ одинаковы и равны $n_e = 1 - x$. Таково же положение вещей и при $h = 0$. Таким образом, вероятности заполнения квантовых состояний, отвечающих какому-то конкретному значению квазиволнового вектора $\mathbf{k}$, в обоих

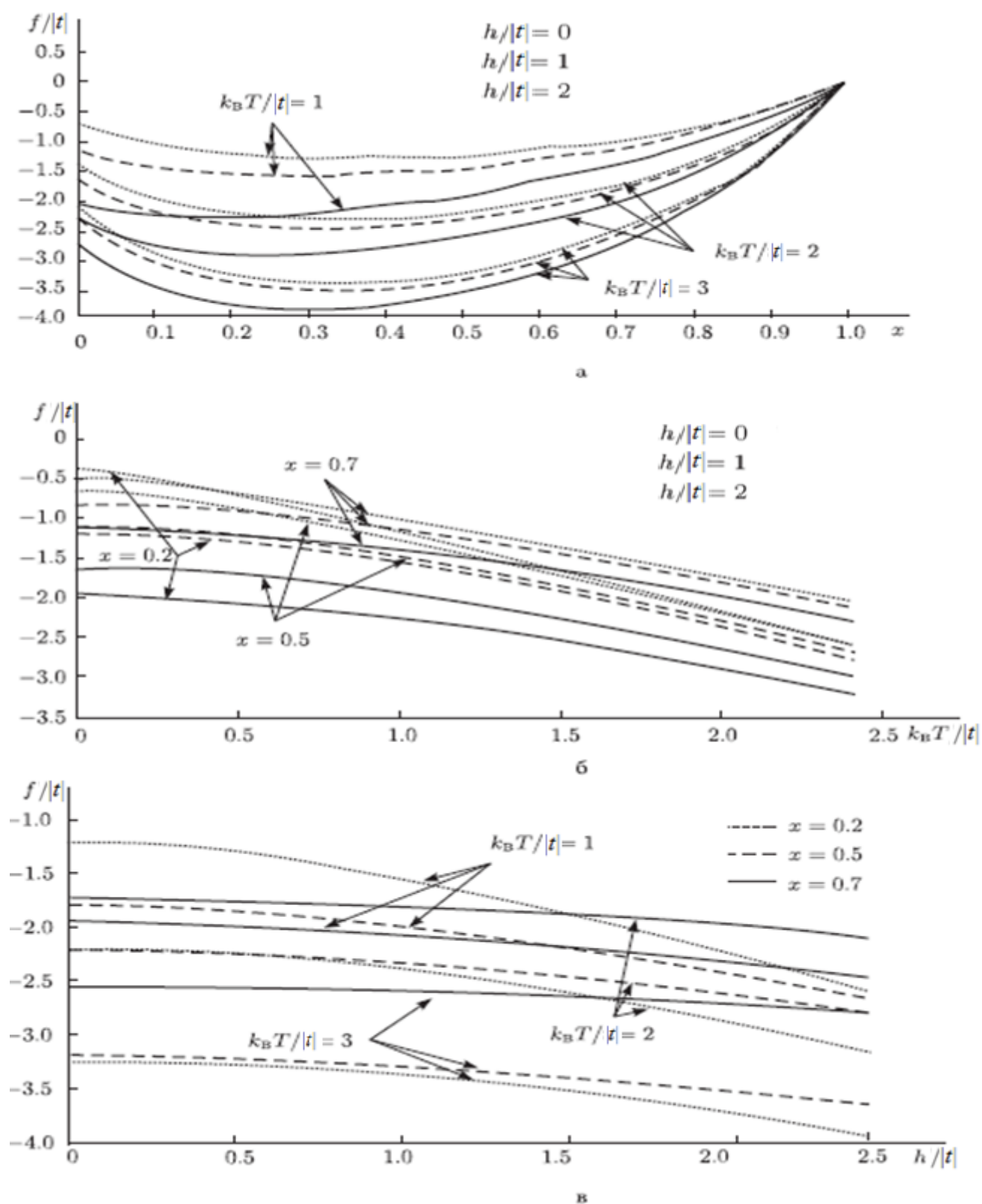


Рис. 19. Зависимости энтропии от концентрации дырок (а), температуры (б) и индукции магнитного поля (в).

случаях совпадают. Этого, понятно, достаточно для совпадения в пределе $T \rightarrow \infty$ всех физических величин.

Кривые $f(x, T = \text{const}, h = \text{const})$, как это следует из только что сказанного, при постоянном h по мере уменьшения температуры «поднимаются» из минус бесконечности к кривой (175) при $T \rightarrow 0$.

Зависимость свободной энергии $f = u - Ts$ от индукции магнитного поля определяется конкуренцией двух противоположных эффектов. Внутренняя энергия u , как указывалось ранее, убывает с ростом поля, но слагаемое $-Ts$ (минус связанная энергия) возрастает с ним. Как это следует из формулы (97), первый из указанных эффектов всегда превалирует: свободная энергия f убывает с ростом h . При $h = 0$ свободная энергия определяется выражением (90), или, иначе говоря,

$$f(h = 0, T, x) = f^{(e)}(T, x). \quad (177)$$

При $h \rightarrow \infty$ в соответствии с асимптотическими формулами (164) и (171) имеем:

$$f(h \rightarrow \infty, x, T) = f^{(h)}(x, T) - (1 - x)h, \quad (178)$$

т. е. свободная энергия совпадает с холонной (все электроны находятся в нижней энергетической зоне, где z -проекция спина электрона может принимать единственное значение $-1/2$) с тем лишь отличием, что теперь она сдвинута вниз на $n_e h$.

Наконец, обсудим поведение химического потенциала. Соответствующие зависимости представлены на рис. 20. В первую очередь, еще раз отметим, что включение магнитного поля понижает уровень Ферми (численно равный химическому потенциалу при $T = 0$) на h (формула (120)). Особенности концентрационных зависимостей остаются теми же, что и уже обсуждавшиеся в параграфе 3.2 при $h = 0$. Именно, во-первых, химический потенциал при $x = 0$ и $x = 1$ обращается в $+\infty$ и $-\infty$ соответственно, поскольку, как это следует из формулы (101), он отличается от холонного химического потенциала лишь на

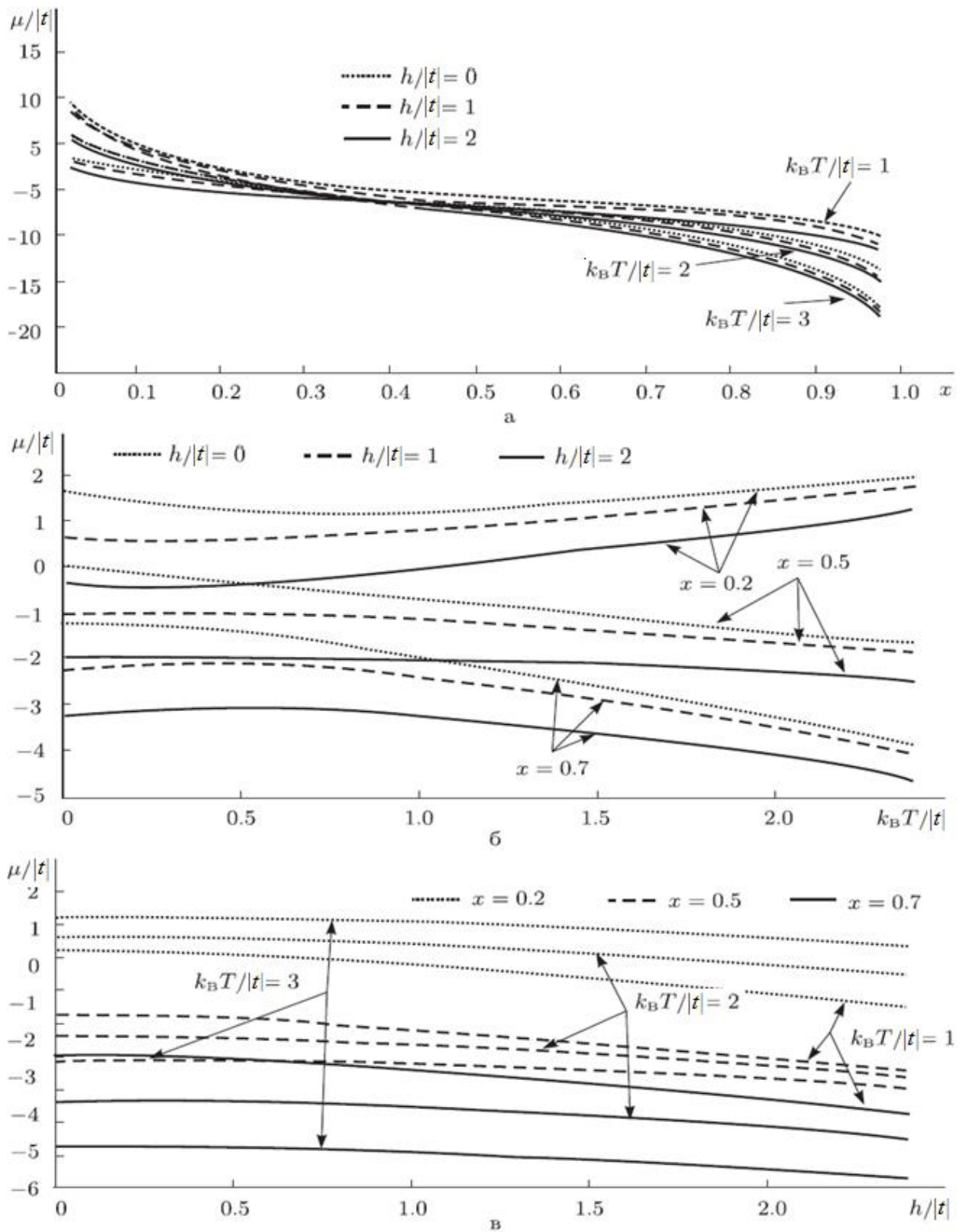


Рис. 20. Зависимости химического потенциала от концентрации дырок (а), температуры (б) и индукции магнитного поля (в). Для простоты предполагается, что $\varepsilon = 0$.

конечную величину (напомним, что в параграфе 3.1 мы доказали, что холонный химический потенциал обращается при $x=0$ и $x=1$ обращается в $+\infty$ и $-\infty$ соответственно). Во-вторых, химический потенциал является монотонно убывающей функцией концентрации дырочного допирования. Отметим еще связь зависимостей $\mu(x, T = \text{const}, h = \text{const})$ с концентрационными зависимостями для свободной энергии, вытекающими из равенства $\mu = -\frac{\partial f}{\partial x}$.

В соответствии с вышесказанным, кривые $\mu(T)$ «выходят» из точки $(0, 2|t|\cos(\pi x) - h)$. Их поведение при $T \rightarrow \infty$ несложно найти, замечая, что отношение $\frac{\mu}{|t|}$ зависит от интеграла перескока t и температуры T лишь как от отношения $\frac{k_B T}{|t|}$, а поэтому предельный переход $T \rightarrow \infty$ в отношении $\frac{\mu}{|t|}$ равносильен переходу в этом отношении к пределу $t \rightarrow 0$. В результате обнаруживаем, что химический потенциал при $T \rightarrow \infty$ имеет ту же асимптотику, что и при $h=0$:

$$\mu(T \rightarrow \infty) = \mu^{(e)}(T \rightarrow \infty) = -k_B T \ln \frac{2x}{1-x}. \quad (179)$$

Теперь, опираясь на результаты исследования асимптотического поведения при $T \rightarrow \infty$ всех термодинамических характеристик, мы можем сделать следующий интересный вывод: асимптотическое поведение при $T \rightarrow \infty$ любой термодинамической величины не зависит от величины индукции магнитного поля. Впрочем, если учесть, что величины $\frac{u}{|t|}$, c , s , $\frac{f}{|t|}$ и $\frac{\mu}{|t|}$ зависят от интеграла перескока лишь через отношение $\frac{k_B T}{|t|}$, этот вывод представляется очевидным.

Наконец, исследуем зависимость химического потенциала от индукции магнитного поля. При $h=0$, как и должно быть, имеем:

$$\mu(h=0, x, T) = \mu^{(e)}(x, T). \quad (180)$$

По мере возрастания h электроны во все большем количестве «проваливаются» в нижнюю энергетическую зону. Поэтому в пределе $h \rightarrow \infty$ разумно ожидать совпадения химического потенциала с холонным химическим потенциалом (формула (73), в которой ε следует заменить на разность $\varepsilon - h$). Как показывает несложный анализ точного выражения (101), эти соображения полностью верны:

$$\mu(h \rightarrow \infty) = \varepsilon - h - k_B T \ln \frac{x}{1-x}. \quad (181)$$

Основные выводы по главе III

1. а) Точно вычислены термодинамические параметры основного состояния (свободная энергия, энтропия, внутренняя энергия, теплоемкость и химический потенциал) для одномерных холонной, электронной без магнитного поля и электронной в магнитном поле t -моделей.
- б) Найдены низкотемпературные аппроксимации термодинамических параметров для всех трех рассматриваемых в работе t -моделей.
2. а) Получены точные концентрационные зависимости термодинамических параметров при постоянной температуре в отсутствие магнитного поля, ранее не приводившиеся в литературе.
- б) Воспроизведены точные зависимости термодинамических параметров от температуры при постоянной дырочной концентрации в отсутствие магнитного поля, полученные в других работах иными методами. Результаты, представленные в настоящей диссертации, полностью совпадают с представленными в этих работах.

3. а) Получены концентрационные зависимости термодинамических параметров в ненулевом магнитном поле при постоянных температуре и индукции магнитного поля, ранее не приводившиеся в литературе.
- б) Впервые получены точные зависимости термодинамических параметров от температуры в ненулевом магнитном поле при постоянных дырочной концентрации и индукции магнитного поля. Доказано, что в пределе $T \rightarrow \infty$ асимптотическое поведение всех термодинамических параметров не зависит от величины индукции магнитного поля.
- в) Впервые получены зависимости термодинамических параметров от индукции магнитного поля при постоянных дырочной концентрации и температуре. Для всех представленных в работе параметров, за исключением теплоемкости, эти зависимости представляют собой монотонно убывающие кривые, что связано с увеличивающейся с ростом поля электронной заселенностью нижней энергетической зоны.

Глава IV. Влияние внешнего давления на нормальные и сверхпроводящие свойства ВТСП купратов на примере соединения $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$

В данной главе рассматриваются две основные группы вопросов. Первая – это исследование влияния внешнего давления на динамику эволюции топологии поверхности Ферми в соединении $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Этому посвящен параграф 4.1. Основным выявленным здесь эффектом являются гигантские скачкообразные изменения площади экстремальных сечений, которые могут быть измерены в экспериментах по осцилляциям намагниченности в магнитном поле (эффект де Гааза – ван Альфена). Вторая группа вопросов (параграф 4.2) посвящена исследованию влияния внешнего давления на температуру сверхпроводящего перехода в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Полученные результаты в случае гидростатического давления хорошо согласуются с экспериментом в окрестности точки оптимального допирования. Для давлений в плоскости a - b и вдоль оси c есть, как минимум, качественное согласие с результатами экспериментальных работ. Отметим, что все полученные в этой главе результаты были изложены в работе [99].

4.1. Расчет изменения поверхностей Ферми в системе $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ при приложении к ней давлений различной симметрии

Прежде всего, обсудим способы симуляции давлений различной симметрии в системе. То или иное давление симулируется соответствующим изменением линейных размеров CuO_6 -октаэдра. На рис. 21 схематично отображены изменения соответствующих линейных размеров. Опишем конкретно эти

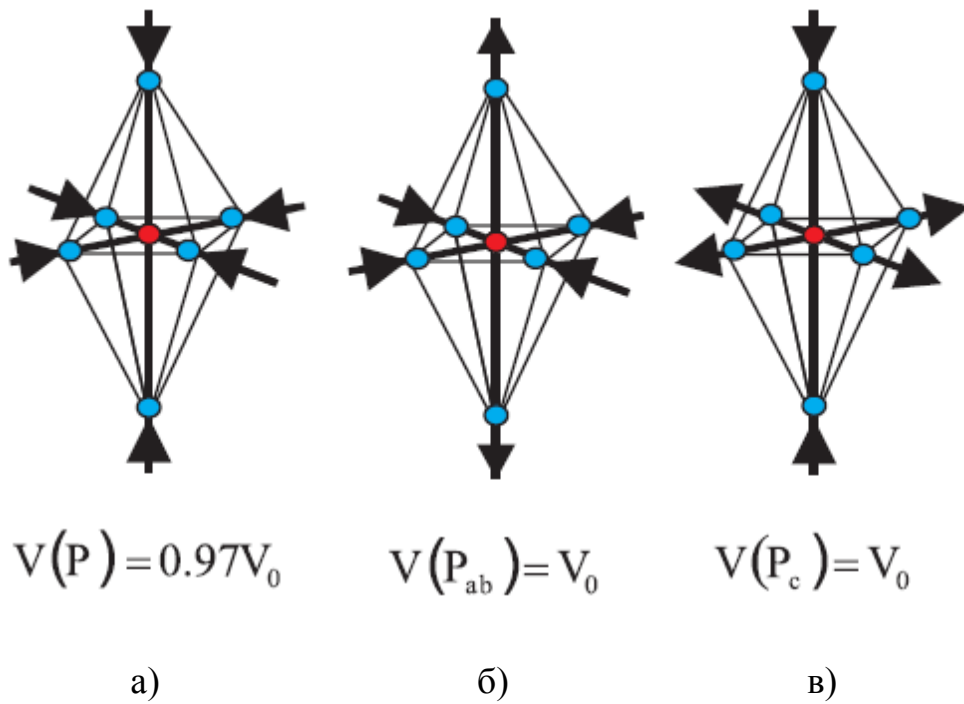


Рис. 21. Способы симуляции гидростатического давления (а), давления в плоскости a - b (б) и давления вдоль оси c (в).

изменения при каждом типе симметрии давления. Гидростатическое давление симулируется посредством 1%-ного уменьшения каждого из линейных размеров a , b , c . Относительное изменение объема CuO_6 -ячейки при этом составляет $\frac{\Delta v}{v} = 0.99^3 - 1 \approx -0.03$ (–3%). Давление в плоскости a - b симулируется 1%-ным уменьшением каждого из параметров a и b , причем объем ячейки при этом остается неизменным (за счет увеличения линейного размера c). Наконец, давление вдоль оси c симулируется 3%-ным уменьшением линейного размера c при постоянном объеме ячейки.

Как это уже указывалось в параграфе 1.3, для расчета энергетических параметров эффективной t - J^* -модели в данной работе используется факт сводимости трехзонной p - d -модели Эмери к этой модели. Самые энергетические

параметры p-d-модели для всех трех типов симметрии давления были вычислены методом проектирования функций Ванье для низкотемпературной орторомбической фазы La_2CuO_4 З. В. Пчелкиной из Института Физики Металлов УрО РАН. Численные значения этих параметров представлены в таблице 1. Отметим, что формулы пересчета от энергетических параметров p-d-модели к энергетическим параметрам t - J^* -модели были получены в работе [100].

Таблица 1. Структурные параметры a, b, c (в $\text{\AA}$), синглетные электронные энергии, параметры перескока, $J(P)$ и δ_s для орторомбической фазы La214 (все значения за исключением связывающих векторов приведены в эВ). Здесь x^2, z^2, p_x, p_y, p_z обозначают $\text{Cu}-d_{x^2-y^2}, \text{Cu}-d_{3z^2-r^2}, \text{O}-p_x, \text{O}-p_y, \text{O}_{ap}-p_z$ орбитали соответственно.

Parameters	Connecting vectors	3% compression along c axis	Undeformed material	3% hydrostatic compression	in-plane compression
a		5.416	5.335	5.281	5.281
b		5.498	5.415	5.360	5.360
c		12.724	13.117	12.985	13.386
ε_{x^2}		-2.031	-1.849	-2.174	-2.456
$\varepsilon_{x^2} - \varepsilon_{z^2}$		0.119	0.225	0.191	0.215
$\varepsilon_{x^2} - \varepsilon_{p_x}$		0.983	0.957	0.965	0.952
$\varepsilon_{x^2} - \varepsilon_{p_y}$		0.983	0.957	0.965	0.952
$\varepsilon_{x^2} - \varepsilon_{p_z}$		-0.503	-0.173	-0.659	-0.614
$t(x^2, x^2)$	(-0.493, -0.5)	-0.173	-0.188	-0.187	-0.188
$t(z^2, z^2)$	(-0.493, -0.5)	0.050	0.054	0.054	0.052
$t(x^2, p_x)$	(0.246, 0.25, -0.02)	1.302	1.355	1.424	1.422
$t(z^2, p_x)$	(0.246, 0.25, -0.02)	-0.547	-0.556	-0.571	-0.548
$t(z^2, p_z)$	(0, 0.04, 0.445)	0.851	0.773	0.811	0.748
$t(p_x, p_y)$	(0.493, 0.0)	-0.854	-0.858	-0.882	-0.889
$t'(p_x, p_y)$	(0, 0.5, 0.041)	0.757	0.793	0.818	0.821
$t(p_x, p_z)$	(-0.246, -0.21, 0.465)	-0.447	-0.391	-0.409	-0.370
$t'(p_x, p_z)$	(0.246, 0.29, -0.425)	-0.424	-0.377	-0.401	-0.379
$J(\Delta J\%)$		0.14(-5.7%)	0.15	0.16(+7.4%)	0.16(+8.9%)
J_B/J_A		0.048	0.044	0.044	0.042
δ_s		0.82	1.33	1.10	1.20

Изменение численного значения энергетических параметров электронной структуры в соединении $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ при приложении к данной системе внешнего давления приводит к изменению закона дисперсии квазичастиц. Изменение этого закона влечет в свою очередь изменение численного значения энергии Ферми и формы поверхности Ферми. Соответственно изменяется и площадь S экстремальных сечений поверхности Ферми. Известно, что частота осцилляций намагниченности в магнитном поле (эффект де Гааза-ван Альфена)

$\omega = \left(\Delta \left(\frac{1}{H} \right) \right)^{-1}$ пропорциональна этой площади S [96]:

$$\omega = \frac{cS}{2\pi e\hbar}, \quad (182)$$

где c – скорость света, S – площадь экстремального сечения поверхности Ферми, e – величина элементарного заряда. Из (182) следует, что относительное изменение частоты осцилляций равно относительному изменению площади экстремального сечения поверхности Ферми:

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{\Delta S}{S}. \quad (183)$$

Как уже говорилось в параграфе 1.3, качественно эволюция топологии поверхности Ферми с увеличением дырочного допирования для системы, на которую действует внешнее давление, остается той же, что и в случае нулевого внешнего давления. Как и в случае нулевого внешнего давления, для каждого типа симметрии давления существуют две такие величины допирования (точки квантовых фазовых переходов Лифшица) $x_1^{\text{symmetry of the pressure}}$ и $x_2^{\text{symmetry of the pressure}}$, что в этих точках происходит радикальная перестройка топологии поверхности Ферми. Характер изменения топологии тот же, что и случае нулевого давления, и уже обсуждался в параграфе 1.3.

Мы обнаружили, что в промежутках

$$x \leq \min\{x_1^{p=0}, x_1^{\text{symmetry of the pressure}}\}, \quad (184)$$

$$\max\{x_1^{p=0}, x_1^{\text{symmetry of the pressure}}\} < x \leq \min\{x_2^{p=0}, x_2^{\text{symmetry of the pressure}}\}, \quad (185)$$

и

$$x > \max\{x_2^{p=0}, x_2^{\text{symmetry of the pressure}}\} \quad (186)$$

величина относительного изменения площади экстремальных сечений поверхности Ферми $\delta = \frac{\Delta S}{S} < 10^{-3}$ (0.1%). Подобные изменения частоты осцилляций не могут быть измерены даже в современном эксперименте [101]. На рисунке столь мало отличающиеся поверхности неразличимы для глаза, и поэтому мы их не приводим.

Тем не менее, в узких промежутках

$$\min\{x_1^{p=0}, x_1^{\text{symmetry of the pressure}}\} < x \leq \max\{x_1^{p=0}, x_1^{\text{symmetry of the pressure}}\}, \quad (187)$$

$$\min\{x_2^{p=0}, x_2^{\text{symmetry of the pressure}}\} < x \leq \max\{x_2^{p=0}, x_2^{\text{symmetry of the pressure}}\} \quad (188)$$

наблюдаются скачкообразные гигантские изменения площади экстремальных сечений, которые могут быть измерены в современном эксперименте.

Численные значения точек квантовых фазовых переходов Лифшица для системы $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ при нулевом внешнем давлении и трех указанных выше типах симметрии давления, полученные нами в рамках используемого приближения, приведены в табл. 2.

На рис. 22 отображены поверхности Ферми в точках $\min\{x_1^{p=0}, x_1^{\text{hydrostatic}}\} = x_1^{\text{hydrostatic}}$, $\min\{x_1^{p=0}, x_1^{\text{in-plane}}\} = x_1^{\text{in-plane}}$, $\min\{x_1^{p=0}, x_1^{\text{c-axis}}\} = x_1^{p=0}$ и $\min\{x_2^{p=0}, x_2^{\text{c-axis}}\} = x_2^{\text{c-axis}}$. Заметим, что вследствие приближенных (с точностью до 10^{-3}) равенств (см. табл. 2):

Таблица 2. Точки квантовых фазовых переходов Лифшица

тип давления	x_{c1}	x_{c2}
недеформированный материал ($p=0$)	0.151	0.243
гидростатическое давление	0.145	0.243
давление в плоскости $a-b$	0.15	0.243
давление вдоль плоскости c	0.152	0.241

$$x_2^{p=0} \approx x_2^{\text{hydrostat}} \approx x_2^{\text{in-plane}} \approx 0.241,$$

мы указываем на рис. 22 б лишь один рисунок (в отличие от рис. 22 а, где таких рисунков три).

Отметим, что несущественные изменения топологии поверхности Ферми при приложении к системе давления (при постоянной концентрации дырок) легко объяснить, если учесть, что величина давления в наших расчетах составляет всего 3%. В этом случае в целом перестройка закона дисперсии происходит незначительно. Более заметные изменения наблюдаются лишь в точках в окрестности особой точки (π, π) . При концентрациях, определяемых по (184), все изменения происходят в высокоэнергетической области спектра и заметного влияния на положение уровня Ферми не оказывают, поэтому мы получаем одинаковый вид поверхности Ферми (карман в нодальном направлении) при любом из трех типов симметрии давления. В области же концентраций (185) основные изменения в спектре происходят уже выше уровня Ферми, что также не оказывает существенного влияния на его положение при наличии давления. Таким образом, наибольшая чувствительность формы поверхности Ферми к наличию любого типа давления наблюдается только в промежутках типа (187), (188), где уровень Ферми лежит вблизи двух особенностей Ван Хова.

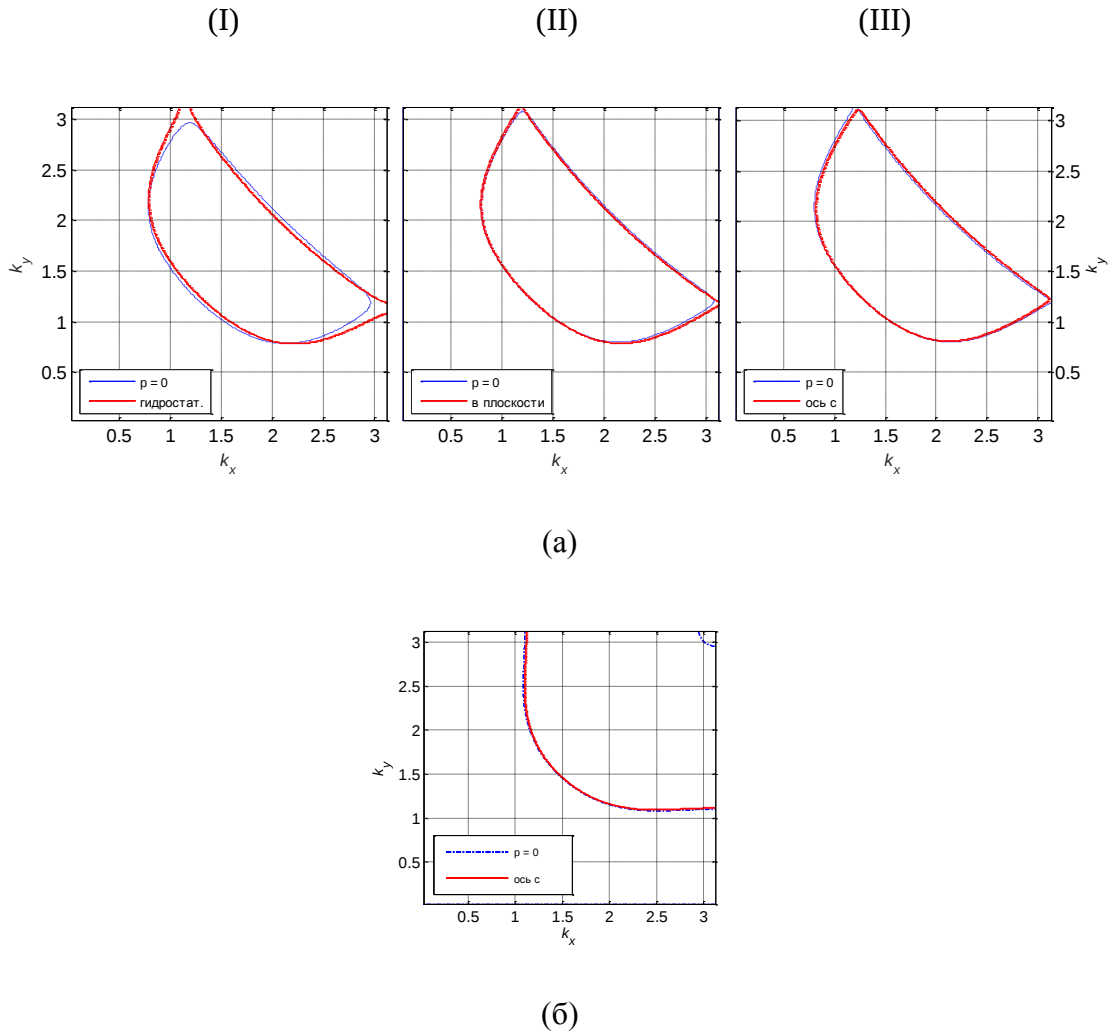


Рис. 22. (а) – первый квантовый фазовый переход Лифшица; (I) – расщепление поверхности Ферми для гидростатического давления при $x = 0.145$ (относительное изменение составляет $\delta_s = -0.71$ для малого кармана и $\delta_l = 0.93$ для большого кармана); (II) – расщепление поверхности Ферми для давления в плоскости a - b при $x = 0.15$ ($\delta_s = -0.14$, $\delta_l = 0.86$); (III) – расщепление поверхности Ферми для недеформированного материала при $x = 0.151$ ($\delta_s = -0.14$, $\delta_l = -0.83$). Обозначения: $\delta_{s(l)} = (S_{s(l)}^{(p)} - S^{(0)}) / S^{(0)}$ для (I) и (II) и $\delta_{s(l)} = (S^{(p)} - S_{s(l)}^{(0)}) / S^{(p)}$ для (III), где верхние индексы (p) и (0) обозначают тип прикладываемого давления и случай, когда давление отсутствует, соответственно, нижний индекс $s(l)$ обозначает малый (большой) карман. (б) – второй квантовый фазовый переход Лифшица (исчезновение малого внутреннего кармана поверхности Ферми при давлении вдоль оси c при $x = 0.241$).

4.2. Влияние давлений различной симметрии на температуру сверхпроводящего перехода в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$

В рамках LDA+ГТВ-подхода антиферромагнитный обмен приводит к d -типу сверхпроводящего спаривания, похожему на тот, что имеет место в модели Хаббарда в пределе СЭК. Теория среднего поля для d -типа сверхпроводимости в пределе СЭК приводит к системе уравнений (42) для параметров Δ_1 и Δ_2 сверхпроводящей щели (см. выражения (40), (41)). Как уже указывалось в параграфе 1.4, вследствие неравенства $J_3 \ll J_1$ правомерно пренебрежение гармоникой второго порядка в зависимости $\Delta(\mathbf{k})$. При этом уравнение на параметр порядка Δ_1 принимает форму (38). Полагая в этом уравнении $\Delta_1 = 0$, получаем уравнение на T_c :

$$\frac{1-x}{2} J_1 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\cos(k_x a) - \cos(k_y a))^2}{\xi(\mathbf{k}) - \mu} \text{th} \left(\frac{\xi(\mathbf{k}) - \mu}{2k_B T_c} \right) = 1, \quad (189)$$

где $\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon - \frac{1+x}{2} t(\mathbf{k}) + \frac{1-x^2}{4} \frac{\tilde{t}^2(\mathbf{k})}{E_{ct}} - \Sigma(\mathbf{k})$ – закон дисперсии квазичастиц в несверхпроводящей фазе в рамках обобщенного приближения Хартри-Фока (см. выражение (34) для функции Грина). Это уравнение в совокупности с уравнением на химический потенциал

$$\frac{F_{0\sigma}}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\exp \left(\frac{\xi(\mathbf{k}) - \mu}{k_B T} \right) + 1} = \langle X_f^{\sigma\sigma} \rangle = \frac{1-x}{2}, \quad (190)$$

где $F_{0\sigma} = \langle X_f^{00} + X_f^{\sigma\sigma} \rangle = x + \frac{1-x}{2} = \frac{1+x}{2}$, позволяют рассчитать зависимости $T_c(x)$

для этой модели для случая без давления и для всех возможных симметрий давления¹⁶.

На рис. 23 отображены зависимости $T_c(x)$ в отсутствие внешнего давления и в трех случаях давлений различной симметрии. Нетрудно видеть, что представленные на этом рисунке значения T_c больше экспериментальных в 2-3 раза. Слишком большие значения T_c при использовании теории среднего поля являются известным недостатком этой теории, которая, как известно, не может претендовать на то, чтобы давать корректные значения критической температуры для фазовых переходов.

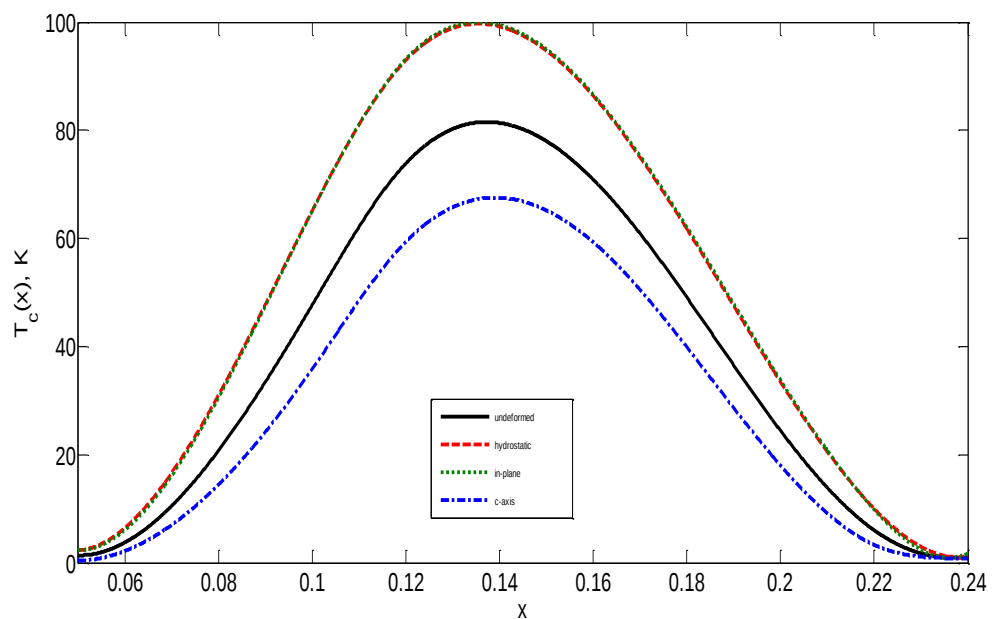


Рис. 23. Зависимости температуры сверхпроводящего перехода от концентрации дырочного допирования при отсутствии давления и давлениях различной симметрии.

¹⁶ В данной работе мы пренебрегаем зависимостью кинематических и спиновых корреляторов (входящих в закон дисперсии $\xi(\mathbf{k})$) от температуры.

В связи с указанным недостатком метода расчета T_c для сравнения с экспериментом мы пользуемся значениями логарифмической производной $\frac{d \ln T_c}{dp} = \frac{1}{T_c} \frac{dT_c}{dp}$ (а не обычной производной $\frac{dT_c}{dp}$). Тем самым мы предполагаем сокращение на величину $\alpha = \frac{T_c^{\text{теор}}}{T_c^{\text{эксп}}}$, показывающую, во сколько раз найденное посредством уравнений (189), (190) значение T_c больше экспериментального¹⁷.

Заметим, что в ВТСП купратах зависимость T_c от p линейная (см. хотя бы экспериментальные работы [102, 103]). Таким образом, для расчета производной достаточно знать лишь величину внешнего давления в системе. Производная в этом случае находится из равенства

$$\frac{dT_c}{dp} = \frac{\Delta T_c(p)}{p}, \quad (191)$$

где $\Delta T_c(p)$ – изменение температуры сверхпроводящего перехода T_c при приложении к системе внешнего давления величины p .

Зависимости линейных размеров a , b , c от величины гидростатического внешнего давления для системы La_2CuO_4 были экспериментально получены в работе [104]. Графики зависимостей $a(p)$, $b(p)$ и $c(p)$, приведенные в указанной работе, представлены на рис. 24. В нашем случае гидростатическое давление симулируется 3%-ным уменьшением объема CuO_6 -ячейки, так что

$$\frac{\Delta v}{v} = (1 + \varepsilon_a)(1 + \varepsilon_b)(1 + \varepsilon_c) - 1 \cong \varepsilon_a + \varepsilon_b + \varepsilon_c,$$

¹⁷ Разумеется, что в рамках данного подхода мы пренебрегаем зависимостью α от p , т. е. полагаем, что в равенстве $\frac{d \ln T_c^{\text{теор}}}{dp} = \frac{1}{T_c^{\text{теор}}} \frac{dT_c^{\text{теор}}}{dp} = \frac{1}{\alpha T_c^{\text{эксп}}} \frac{d(\alpha T_c^{\text{эксп}})}{dp} = \frac{1}{\alpha T_c^{\text{эксп}}} \left(\frac{d\alpha}{dp} T_c^{\text{эксп}} + \alpha \frac{dT_c^{\text{эксп}}}{dp} \right)$ производная $\frac{d\alpha}{dp} = 0$.

где $\varepsilon_x = \frac{\Delta x}{x_0}$, $x = a, b, c$ – относительные изменения линейных размеров. Далее, производная по давлению от любого из линейных размеров равна

$$\dot{x} = \frac{\Delta x}{p} = \frac{\varepsilon_x x_0}{p}$$

Окончательно получаем систему из четырех уравнений на четыре неизвестных p , ε_a , ε_b , ε_c :

$$\begin{cases} \varepsilon = \varepsilon_a + \varepsilon_b + \varepsilon_c, \\ \dot{x} = \frac{\Delta x}{p} = \frac{\varepsilon_x x_0}{p}, \quad x = a, b, c. \end{cases} \quad (192)$$

Ее решение имеет вид:

$$\begin{cases} p = \frac{\varepsilon}{\dot{a}/a_0 + \dot{b}/b_0 + \dot{c}/c_0}, \\ \varepsilon_x = \frac{\dot{x}/x_0}{\dot{a}/a_0 + \dot{b}/b_0 + \dot{c}/c_0} \cdot \varepsilon, \quad x = a, b, c. \end{cases} \quad (193)$$

Подставляя в это решение $\varepsilon = -0.03$ и значения, получаемые из рис. 24, $a_0 \approx 5.322 \text{ \AA}$, $b_0 \approx 5.415 \text{ \AA}$, $c_0 \approx 13.148 \text{ \AA}$, $\dot{a} \approx -7.78 \cdot 10^{-4} \text{ \AA/кбар}$, $\dot{b} \approx -15 \cdot 10^{-4} \text{ \AA/кбар}$, $\dot{c} \approx -19 \cdot 10^{-4} \text{ \AA/кбар}$, получим следующие значения для искомых параметров: $p \approx 52.84 \text{ кбар}$, $\varepsilon_a \approx -0.0077$, $\varepsilon_b \approx -0.0146$, $\varepsilon_c \approx -0.0076$. Заметим, что наша изначальная модель симуляции гидростатического давления – 3%-ное уменьшение объема за счет 1%-ного уменьшения каждого из линейных размеров – оказалась в небольшом противоречии с экспериментальными данными, что, тем не менее, ввиду грубости уже положенных в основу расчета физических принципов, вполне допустимо.

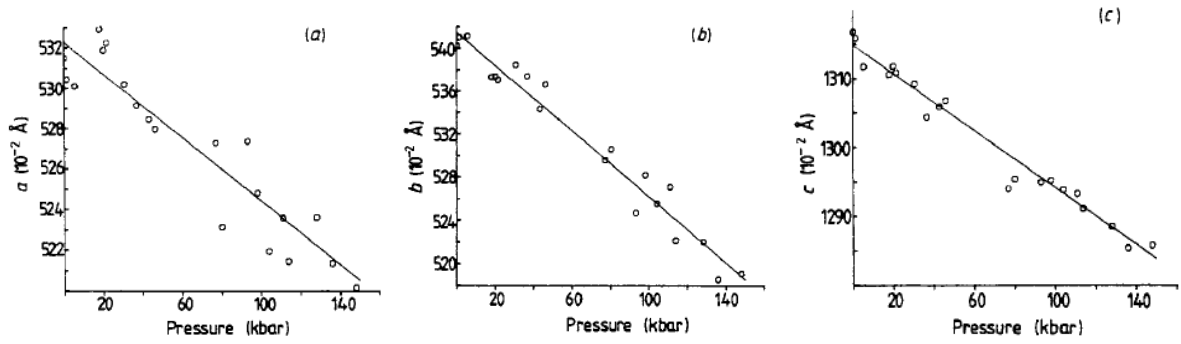


Рис. 24. Зависимость линейных размеров a , b и c SiO_6 -октаэдра от величины внешнего гидростатического давления для недотированного образца La_2CuO_4 (данные работы [104]).

Зависимость от допирования интересующей нас логарифмической производной $\frac{d \ln T_c(x)}{dp} = \frac{1}{T_c(x)} \frac{dT_c(x)}{dp}$, полученная под гидростатическим давлением $p \approx 52.84 \text{ кбар} \approx 5.3 \text{ ГПа}$, показана на рис. 25 а. Из приведенного на этом рисунке графика можно видеть, что величина $\frac{1}{T_c} \frac{dT_c}{dp}$ при $x=0.15$ очень хорошо совпадает с экспериментально найденным и приведенным в работе [102] значением $\left(\frac{1}{T_c} \frac{dT_c}{dp} \right)_{x=0.15}^{\text{experiment}} = 0.04 \text{ ГПа}^{-1}$.

Нам не удалось найти экспериментальных работ, в которых бы исследовалась зависимость $\frac{dT_c}{dp}$ в случае давления в плоскости a - b . Как правило, интересы экспериментаторов ограничиваются измерением (прямым или косвенным) производных $\frac{dT_c}{dp}$ только в случаях одноосных и изотропного гидростатического давлений. По этой причине, понятно, отсутствуют в экспериментальных работах и исследования по коэффициенту сжимаемости

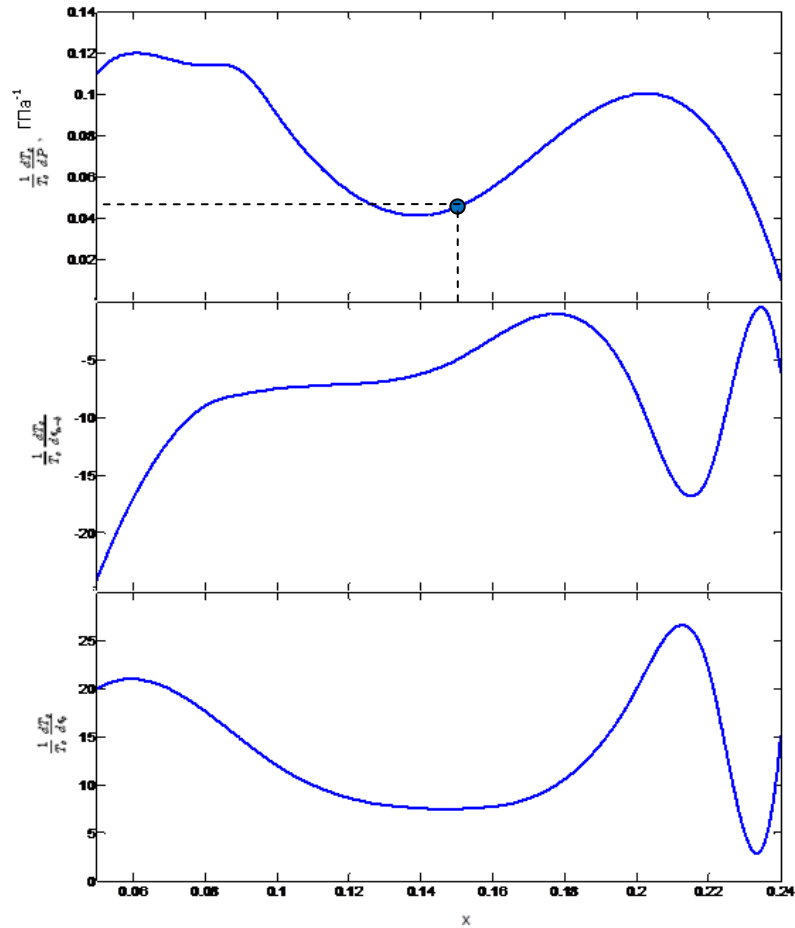


Рис. 25. Зависимости логарифмических производных $d \ln T_c / dp$ от концентрации дырочного допирования x для гидростатического давления (а), давления в плоскости a - b (б) и давления вдоль оси c (в). Точка на рис. (а) приведена для сравнения с экспериментальными данными работы [102].

относительно давления в плоскости. В связи с указанными обстоятельствами мы вынуждены на рис. 25 б ограничиться приведением лишь зависимости

$$\frac{d \ln T_c(x)}{d \varepsilon_{a-b}} = \frac{1}{T_c(x)} \frac{dT_c(x)}{d \varepsilon_{a-b}}, \text{ не приводя зависимости } \frac{d \ln T_c(x)}{dp_{a-b}} = \frac{1}{T_c(x)} \frac{dT_c(x)}{dp_{a-b}}. \text{ Отметим,}$$

что, к сожалению, мы не можем изучать в рамках данного исследования эффекты от одноосных давлений вдоль осей a и b , поскольку такие давления приводят к изменению симметрии функций Ванье. Важно, тем не менее, заметить, что

эффекты химического сжатия в монослойных пленках $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ имеют ту же симметрию, что и при обсуждаемом здесь давлении в плоскости a - b . Поэтому в таких опытах следует ожидать (в соответствии с рис. 25 б) увеличения температуры сверхпроводящего перехода. Авторы работы [105] наблюдали умеренное возрастание T_c в LSCO-пленке до значения 51.5 К.

Обсудим, наконец, результаты в случае давления вдоль оси c . Для отдельных значений x ($x = 0.1, 0.15, 0.2$) температуры сверхпроводящего перехода и производные $\frac{dT_c}{d\varepsilon_i}$, $i = a, b, c$, для системы $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ приведены в таблице 1

экспериментальной работы [103]. Как можно проверить прямым вычислением, значения логарифмической производной $\frac{d \ln T_c(x)}{d\varepsilon_c} = \frac{1}{T_c(x)} \frac{dT_c(x)}{d\varepsilon_c}$ косвенно

вычисленные из таблицы 1 упомянутой работы и представленные на рис. 25 (в) настоящей в указанных точках отличаются не более, чем в 10 раз. Количественное различие в данном случае, по-видимому, связано с пренебрежением зависимостью $\alpha = \frac{T_c^{\text{теор}}}{T_c^{\text{эксп}}}$ от p (см. сноску на стр. 108) и с

грубостью моделирования изменений линейных размеров ячейки при нагрузке. При этом значения, вычисленные из работы [103], по абсолютной величине всегда превосходят приведенные в настоящей работе и всегда совпадают с ними по знаку. Отметим еще, что отрицательный знак производной $\frac{dT_c}{dp_c}$ был особо

отмечен в упомянутой работе [103] в связи с большим значением абсолютной величины $\left| \frac{dT_c}{dp_c} \right|$. Как видим, теоретический расчет тоже приводит к большим значениям $\left| \frac{dT_c}{d\varepsilon_c} \right|$.

Для всех трех рассмотренных случаев изменение температуры сверхпроводящего перехода с деформациями качественно понятно. При

гидростатическом давлении и давлении в плоскости уменьшается расстояние между соседними ионами меди в CuO_2 -слое, за счет чего увеличивается значение обменного интеграла J_1 . В случае же одноосного сжатия вдоль оси c расстояние между соседними ионами меди в CuO_2 -слое увеличивается, и обменный интеграл J_1 уменьшается. Поскольку обменное взаимодействие и приводит к сверхпроводимости, то его изменения, как видим, коррелируют с изменениями температуры сверхпроводящего перехода.

Основные выводы по главе IV

1. На примере системы $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ в рамках t - J^* -модели, параметры которой вычислены в рамках LDA+GTB-приближения, изучено влияние

- гидростатического,
- в плоскости a - b ,
- вдоль оси c

давлений на эволюцию топологии поверхности Ферми. Показано, что существенные отличия в топологии по сравнению со случаем недеформированной системы имеют место только в узких окрестностях точек квантовых фазовых переходов Лифшица. Этому поведению дано теоретическое обоснование.

2. Исследовано влияние давлений различной симметрии на температуру сверхпроводящего перехода. Для всех рассмотренных типов давления получено хорошее согласие с экспериментальными данными и предложено теоретическое обоснование полученных результатов.

Заключение

Теперь кратко резюмируем наиболее важные результаты, полученные в данной работе.

1. Непертурбативными методами доказано точное соотношение между статистическими суммами одномерных с перескоками только между ближайшими соседями холонной t -модели и электронной t -модели в магнитном поле.
2. Для магнитной восприимчивости получено точное выражение в виде закона Кюри и доказано, что восприимчивость при учете перескоков только между ближайшими соседями не зависит от величины параметра перескока.
3. В пределе бесконечного кулоновского отталкивания получены точные концентрационные, температурные и полевые зависимости термодинамических параметров (свободной энергии, энтропии, внутренней энергии, теплоемкости и химического потенциала) в ненулевом магнитном поле, ранее не приводившиеся в литературе. Температурные зависимости указанных термодинамических параметров в отсутствие магнитного поля совпадают с полученными ранее иными методами.
4. Показано, что температурная зависимость теплоемкости имеет широкий максимум при $T_h \approx \frac{t}{k_B}$, обусловленный зарядовыми возбуждениями.

Сравнение положения и величины этого максимума с литературными данными при конечных значениях кулоновского отталкивания U показывает, что они слабо зависят от величины U . При этом спиновый максимум при

$T_s \approx \frac{J}{k_B}$ исчезает в пределе бесконечного кулоновского отталкивания ($U \rightarrow \infty$). Включение магнитного поля приводит к ненулевой энергии

спиновых возбуждений, что формирует спионный максимум в температурной зависимости теплоемкости при $T_s \approx \frac{h}{k_B}$.

5. Магнитное поле приводит к изменению зависимости энтропии от температуры. В то время как в отсутствие магнитного поля спионы дают конечный вклад в энтропию при нулевой температуре, наличие магнитного поля приводит к снятию вырождения по проекции спина и приводит к сильному подавлению этой величины при низких температурах.
6. На примере соединения $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ в рамках t - J^* -модели, параметры которой вычислены методом LDA+GTB, изучено влияние давлений различной симметрии (гидростатическое, в плоскости a - b , вдоль оси c) на эволюцию топологии поверхности Ферми. Выявлено, что существенные отличия в топологии по сравнению со случаем недеформированной системы имеют место только в узких окрестностях точек квантовых фазовых переходов Лифшица.
7. Теоретически исследовано влияние давлений различной симметрии на температуру сверхпроводящего перехода. Полученные результаты для барической производной $\frac{d \ln T_c}{dp}$ в случае гидростатического давления находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными в окрестности оптимального допирования. Для давления в плоскости a - b есть качественное согласие с результатами экспериментов по химическому сжатию в монослойных пленках $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. В случае давления вдоль оси c результаты проведенных расчетов согласуются с экспериментально наблюдаемым сильным убыванием температуры сверхпроводящего перехода при росте величины внешнего давления.

Благодарности

В первую очередь хочу выразить искреннюю человеческую признательность своему научному руководителю С. Г. Овчинникову за постоянное внимание к моей научной деятельности и жизни вообще.

Во-вторых, я в огромном долгу перед моим другом Н. В. Тихоновым и доцентом кафедры теоретической физики и волновых явлений СФУ С. В. Николаевым, которые постоянно оказывали мне помощь в написании компьютерных программ.

Отдельное спасибо хочу сказать сотруднику лаборатории ФМЯ и профессору кафедры теоретической физики и волновых явлений СФУ М. М. Коршунову за его безукоризненно компетентные ответы на мои вопросы, возникавшие у меня по ходу работы.

Наконец, я очень признателен В. А. Гавричкову, В. В. Валькову, Д. М. Дзебисашвили, И. С. Сандалову, Е. И. Шнейдер и С. Ф. Тегаю за чрезвычайно плодотворные дискуссии на протяжении всей моей деятельности.

Список литературы

1. Ф. Зейтц. Современная теория твердого тела, М. – Л., 1949, С. 721.
2. J. Hubbard, Electron correlations in narrow energy bands, Proc. R. Soc. Lond. A, 1963, V. **276**, P. 238 - 257.
3. J. Hubbard, Electron correlations in narrow energy bands. II. The Degenerate Band Case, Proc. R. Soc. Lond. A, 1964, V. **277**, P. 237 - 259.
4. J. Hubbard, Electron correlations in narrow energy bands. III. An Improved Solution, Proc. R. Soc. Lond. A, 1964, V. **281**, P. 401 - 419.
5. J. Hubbard, Electron correlations in narrow energy bands. IV. The Atomic Representation, Proc. R. Soc. Lond. A, 1965, V. **285**, P. 542 - 560.
6. Ю. А. Изюмов. Магнетизм и сверхпроводимость в сильно коррелированной системе. УФН, 1991, Т. **161**, В. 11, С.1 - 46.
7. Ю. А. Изюмов. Модель Хаббарда в режиме сильных корреляций. УФН, 1995, Т. **165**, В. 4., С. 403 - 427.
8. H. Bethe, Zur theorie der metalle. I. Eigenwerte und eigenfunktionen der linearen atomkette, Z. Phys., 1931, V. **71**, P. 205.
9. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрыбин. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем, М.: Наука, 1987, С. 265.
10. L. Onsager, Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition, Phys. Rev., 1944, V. **65**, P. 117.
11. Ф. Дайсон, Э. Монтролл, М. Кац, М. Фишер. Устойчивость и фазовые переходы. М.: Наука, 1973. С. 327.
12. C. N. Yang, Some exact results for the many-body problem in one dimension with repulsive delta-function interaction, Phys. Rev. Lett., 1967, V. **19**, P. 1312.
13. M. Gaudin, Un systeme a une dimension de fermions en interaction, Phys. Lett. A, 1967, V. **24**, P. 55.

14. E. K. Sklyanin, Quantum version of the method of inverse scattering problem, *Zap. Nauchn. Sem. LOMI*, 1980, V. **95**, P. 55.
15. E. K. Sklyanin and L. D. Faddeev, Method of the inverse scattering problem and quantum nonlinear Schrodinger equation, *Dokl. Acad. Nauk SSSR*, 1978, V. **244**, P. 1337.
16. E. K. Sklyanin and L. D. Faddeev, Quantum mechanical approach to completely integrable models of field theory, *Dokl. Acad. Nauk SSSR*, 1978, V. **243**, P. 1430.
17. P. P. Kulish, N. Yu. Reshetikhin and E. K. Sklyanin, Yang-Baxter equation and representation theory: I, *Lett. Math. Phys.*, 1981, V. **5**, P. 393.
18. P. P. Kulish, N. Yu. Reshetikhin and E. K. Sklyanin, Solutions of the Yang-Baxter equation, *Zap. Nauchn. Sem. LOMI*, 1980, P. **95**, P. 129.
19. E. H. Lieb and F. Y. Wu, Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension, *Phys. Rev. Lett.*, 1968, V. **20**, P. 1445. Erratum: *ibid.* 1968, V. **21**, P. 192.
20. M. Takahashi, One-dimensional Hubbard model at finite temperature, *Prog. Theor. Phys.*, 1972, V. **47**, P. 69.
21. M. Takahashi, Low-temperature specific heat of one-dimensional Hubbard model, *Prog. Theor. Phys.*, 1974, V. **52**, P. 103.
22. N. Kawakami, T. Usuki and A. Okiji, Thermodynamic properties of the onedimensional Hubbard model, *Phys. Lett. A*, 1989, V. **137**, P. 287.
23. T. Usuki, N. Kawakami and A. Okiji, Thermodynamic quantities of the one-dimensional Hubbard model at finite temperatures, *J. Phys. Soc. Japan*, 1990, V. **59**, P. 1357.
24. T. Deguchi, F. H. L. Essler, F. Göhmann, A. Klümper, V. E. Korepin and K. Kusakabe, Thermodynamics and excitations of the one-dimensional Hubbard model, *Phys. Rep.*, 2000, V. **331**, P. 197.
25. K. Penc and F. Woynarovich, Novel magnetic properties of the Hubbard chain with an attractive interaction, *Z. Phys. B*, 1991, V. **85**, P. 269.
26. H. Shiba, Magnetic susceptibility at zero temperature for the one-dimensional Hubbard model, *Phys. Rev. B*, 1972, V. **6**, P. 930.

27. M. Takahashi, Magnetization curve of the half-filled Hubbard model, *Prog. Theor. Phys.*, 1969, V. **42**, P. 1098.
28. C. F. Coll, Excitation spectrum of the one-dimensional Hubbard model, *Phys. Rev. B*, 1974, V. **9**, P. 2150.
29. A. Klümper, A. Schadschneider and J. Zittartz, A new method for the excitations of the one-dimensional Hubbard model, *Z. Phys. B*, 1990, V. **78**, P. 99.
30. A. A. Ovchinnikov, Excitation spectrum of the one-dimensional Hubbard model, *Sov. Phys. JETP*, 1970, V. **30**, P. 1160.
31. F. Woynarovich, Excitations with complex wavenumbers in a Hubbard chain: I. States with one pair of complex wavenumbers, *J. Phys. C*, 1982, V. **15**, P. 85.
32. F. Woynarovich, Excitations with complex wavenumbers in a Hubbard chain: II. States with several pairs of complex wavenumbers, *J. Phys. C*, 1982, V. **15**, P. 97.
33. F. Woynarovich, Low-energy excited states in a Hubbard chain with on-site attraction, *J. Phys. C*, 1983, V. **16**, P. 6593.
34. F. Woynarovich, Spin excitations in a Hubbard chain, *J. Phys. C*, 1983, V. **16**, P. 5293.
35. F. H. L. Essler and V. E. Korepin, Scattering matrix and excitation spectrum of the Hubbard model, *Phys. Rev. Lett.*, 1994, V. **72**, P. 908.
36. F. H. L. Essler and V. E. Korepin, $SU(2) \times SU(2)$ invariant scattering matrix of the Hubbard model, *Nucl. Phys. B*, 1994, V. **426**, P. 505.
37. C. Kim, A. Y. Matsuura, Z. X. Shen, N. Montoyama, H. Eisaki, S. Uchida, T. Tohyama and S. Maekawa, Observation of spin-charge separation in onedimensional $SrCuO_2$, *Phys. Rev. Lett.*, 1996, V. **77**, P. 4054.
38. C. Kim, Z. X. Shen, N. Montoyama, H. Eisaki, S. Uchida, T. Tohyama and S. Maekawa, Separation of spin and charge excitations in one-dimensional $SrCuO_2$, *Phys. Rev. B*, 1997, V. **56**, P. 15589.
39. C. Bourbonnais and D. Jerome, in *Advances in synthetic metals, Twenty years of progress in science and technology*, eds. P. Bernier, S. Lefrant and G. Bidan (Elsevier, New York, 1999). Preprint cond-mat/9903101.

40. A. Schwartz, M. Dressel, G. Gruner, V. Vescoli, L. Degiorgi and T. Giamarchi, On-chain electrodynamics of metallic $(\text{TMTSF})_2\text{X}$ salts: observation of Tomonaga-Luttinger liquid response, *Phys. Rev. B*, 1998, V. **58**, P. 1261.
41. R. Claessen, M. Sing, U. Schwingenschloegl, P. Blaha, M. Dressel and C. S. Jacobsen, Spectroscopic signatures of spin-charge separation in the quasi-one-dimensional organic conductor TTF-TCNQ, *Phys. Rev. Lett.*, 2002, V. **88**, P. 096402.
42. D. Baeriswyl, D. K. Campbell and S. Mazumdar, In conjugated conducting polymers, ed. H. Kiess (Springer, Berlin, 1992).
43. J.-P. Farges, ed., Organic conductors (Marcel Dekker, New York, 1994).
44. Л.Н. Булаевский, Э. Л. Нагаев, Д. И. Хомский. Новый тип автолокализованного состояния электрона проводимости в антиферромагнитном полупроводнике. *ЖЭТФ*, 1968, Т.**54**, В.5, С.1562 - 1567.
45. K. A. Chao, J. Spalek, A. M. Oleś, Kinetic exchange interaction in a narrow band. *J. Phys. C: Sol. State Phys.*, 1977, V. **10**, L271 - L276.
46. H. Eskes, R. Eder, Hubbard model versus t-J model: The one-particle spectrum, *Phys. Rev. B*, 1996, V.**54**, N20, P. 14226 - 14229.
47. G. Beni, T. Holstein, and P. Pincus, Strong-coupling Hubbard chain, *Phys. Rev. B*, 1973, V. **8**, P. 312.
48. D. J. Klein, Atomic limit and projected Hubbard models for a linear chain, *Phys. Rev. B*, 1973, V. **8**, P. 3452.
49. F. Göhmann and S. Murakami, Fermionic representations of integrable lattice systems, *J. Phys. A*, 1998, V. **31**, P. 7729.
50. A. G. Izergin, A. G. Pronko and N. I. Abarenkova, Temperature correlators in the one-dimensional Hubbard model in the strong coupling limit, *Phys. Lett. A*, 1998, V. **245**, P. 537.
51. W. Brenig, Aspects of electron correlations in the cuprate superconductors, *Physics Reports*, 1995, V. **251**, P. 153 - 266.

52. E. Dagotto, Correlated electrons in high-temperature superconductors, *Rev. Mod. Phys.*, 1994, V. **66**, N 3, P. 763 - 840.
53. A. Damascelli, D. H. Lu, Z.-X. Shen, From Mott insulator to overdoped superconductor: evolution of the electronic structure of cuprates studied by ARPES, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 2001, V. **117-118**, P. 165 - 187.
54. M. Matsuda, K. Yamada, K. Kakurai et al., Three-dimensional magnetic structures and rare-earth magnetic ordering in Nd_2CuO_4 and Pr_2CuO_4 . *Phys. Rev. B*, 1990, V. **42**, N 16, P. 10098 - 10107.
55. W. Zhang, K. H. Bennemann, Antiferromagnetism in electron- and hole-doped high- T_c superconductors. *Phys. Rev. B*, 1992, V. **45**, N 21, P. 12487 -12491.
56. M. A. Kastner, R. G. Birgeneau, G. Shirane et al., Magnetic, transport, and optical properties of monolayer copper oxides, *Rev. Mod. Phys.*, 1998, V. **70**, P. 897 - 928.
57. J. M. Tranquada, P. M. Gehring, G. Shirane et al., Neutron-scattering study of the dynamical spin susceptibility in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$, *Phys. Rev. B*, 1992, V. **46**, P. 5561 - 5575.
58. A. P. Kampf and J. R. Schrieffer, Spectral function and photoemission spectra in antiferromagnetically correlated metals, *Phys. Rev. B*, 1990, V. **42**, P. 7967 - 7974.
59. М. В. Садовский. Псевдощель в высокотемпературных сверхпроводниках. *УФН*, 2001, Т. **171**, N 5, С. 540 - 564.
60. T. Imai, C. P. Slichter, A. P. Paulikas et al., Measurement of the q-dependent static spin susceptibility $\chi'(q)$ in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.9}$, *Phys. Rev. B*, 1993, V. **47**, P. 9158 - 9974.
61. N. Gedik, M. Langner, and J. Orenstein, Abrupt transition in quasiparticle dynamics at optimal doping in a cuprate superconductor system, *Phys. Rev. Lett.*, 2005, V. **95**, P. 117005-1 - 117005-4.
62. Е. Г. Максимов. Проблема высокотемпературной сверхпроводимости. Современное состояние. *УФН*, 2000, Т. **170**, N 10, С. 1033 - 1061.

63. D. J. Scalapino, E. Loh, and J. E. Hirsch, Fermi-surface instabilities and superconducting d-wave pairing, *Phys. Rev. B*, 1987, V. **35**, P. 6694 - 6698.
64. В. П. Минеев, К. В. Самохин. Введение в теорию необычной сверхпроводимости. Москва: Издательство МФТИ, 1998, С. 143.
65. C. C. Tsuei and J. R. Kirtley, Pairing symmetry in cuprate superconductors, *Rev. Mod. Phys.*, 2000, V. **72**, N 4, P. 969 - 1016.
66. Ю. А. Изюмов. Спин-флуктуационный механизм высокотемпературной сверхпроводимости и симметрия параметра порядка. *УФН*, 1999, Т. **169**, N 3, С. 225 - 254.
67. W. Kohn and L. J. Sham, Self-consistent equations including exchange and correlation effects, *Phys. Rev.*, 1965, V. **140**, P. A1133 - A1138.
68. L. F. Mattheiss, Electronic band properties and superconductivity in $\text{La}_{2-y}\text{X}_y\text{CuO}_4$, *Phys. Rev. Lett.*, 1987, V. **58**, P. 1028 - 1030.
69. W. E. Pickett, Electronic structure of the high-temperature oxide superconductors, *Rev. Mod. Phys.*, 1989, V. **61**, N 2, P. 433 - 512.
70. I. I. Mazin, O. Jepsen, O. K. Andersen, Fermi-surface and low-energy excitation spectrum of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_3$: Role of the Ba-O plane, *Phys. Rev.*, 1992, V. **45**, P. 5103 - 5106.
71. J. M. Luttinger, Fermi surface and some simple equilibrium properties of a system of interacting fermions, *Phys. Rev.*, 1960, V. **119**, P. 1153 - 1163.
72. V. I. Anisimov, M. A. Korotin, I. V. Afanasyev, Band-structure description of Mott insulators (NiO , MnO , FeO , CoO), *J. Phys.: Condens. Matter*, 1990, V. **2**, P. 3973 - 3987.
73. A. Svane, Electronic structure of La_2CuO_4 in the self-interaction-corrected density-functional formalism, *Phys. Rev. Lett.*, 1992, V. **68**, P. 1900 - 1903.

74. V. J. Emery, Theory of high- T_c superconductivity in oxides, Phys. Rev. Lett., 1987, V. **58**, N 26, P. 2794 - 2797.
75. Yu. B. Gaididei, V. M. Loktev, On a theory of the electronic spectrum and magnetic properties of high- T_c superconductors, Phys. Status Solidi B, 1988, V. **147**, P. 307 - 319.
76. F. C. Zhang, T. M. Rice, Effective Hamiltonian for the superconducting Cu oxides, Phys. Rev. B, 1988, V. **37**, N 7, P. 3759 - 3761.
77. T. M. Rice, Validity of the t-J model, Phys. Rev. B, 1990, V. **41**, N 10, P. 7243 - 7246.
78. V. J. Emery, G. Reiter, Reply to "Validity of the t-J model", Phys. Rev. B, 1990, V. **41**, N 10, P. 7247 - 7249.
79. S. V. Lovtsov, V. Yu. Yushankhai, Effective singlet-triplet model for CuO_2 - plane in oxide superconductors: the charge fluctuation regime, Physica C, 1991, V. **179**, P. 159 - 166.
80. H.- B. Schüttler, A. J. Fedro, Copper-oxygen charge excitations and the effective-single-band theory of cuprate superconductors, Phys. Rev. B, 1992, V. **45**, N 13, P. 7588 - 7591.
81. V. I. Belinicher, A. L. Chernyshev, Reduction of the three-band model for copper oxides to a single-band generalized t-J model, Phys. Rev. B, 1993, V. **47**, N1, P. 390 - 399.
82. R. Hayn, V. Yushankhai, S. Lovtsov, Analysis of the singlet-triplet model for the copper oxide plane within the paramagnetic state, Phys. Rev. B, 1993, V. **47**, N9, P. 5253 - 5262.
83. V. I. Belinicher, A. L. Chernyshev, Consistent low-energy reduction of the three-band model for copper oxides with O-O hopping to the effective t-J model, Phys. Rev. B, 1994, V. **49**, N 14, P. 9746 - 9756.

84. L. F. Feiner, J. H. Jefferson, R. Raimondi, Effective single-band models for the high- T_c cuprates. I. Coulomb interactions, Phys. Rev., B, 1996, V. 53, N 13, P. 8751 - 8773.
85. С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов, Е. И. Шнейдер. Квантовые фазовые переходы Лифшица и перестройка ферми-поверхности с изменением концентрации дырок в высокотемпературных сверхпроводниках. ЖЭТФ, 2009, Т. 136, С. 898 - 909.
86. M. M. Korshunov and S. G. Ovchinnikov, Doping-dependent evolution of low-energy excitations and quantum phase transitions within an effective model for high- T_c copper oxides, Eur. Phys. J. B, 2007, V. 57, P. 271.
87. N. M. Plakida, V. S. Oudovenko, Electron spectrum and superconductivity in the t-J model at moderate doping, Phys. Rev. B, 1999, V. 59, N 18, P. 11949 - 11961.
88. N. M. Plakida, V. S. Oudovenko, P. Horsch, A. Liechtenstein, Superconducting pairing of spin polarons in the t-J model, Phys. Rev. B, 1997, V. 55, N 18, P. R11997 - R12000.
89. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, Д. М. Дзедзисашвили, С. Г. Овчинников. Сильное влияние трехцентровых взаимодействий на формирование сверхпроводимости $d_{x^2-y^2}$ – симметрии в t-J*-модели. Письма в ЖЭТФ, 2002, Т. 75, В. 8, С. 450 - 454.
90. В. В. Вальков, М. М. Коровушкин, А. Ф. Барабанов. Эффективные взаимодействия и природа куперовской неустойчивости спиновых поляронов на 2D решетке Кондо. Письма в ЖЭТФ, 2008, Т. 88, В. 6, С. 426 - 430.
91. В. В. Вальков, А.А. Шкляев, М.М. Коровушкин, А.Ф. Барабанов. Влияние триплетных состояний на спектр коллективных спин-поляронных возбуждений в 2D решетке Кондо. ФТТ, 2011, Т. 53, В. 10, С. 1895 - 1898.
92. Н. М. Плакида. Антиферромагнитный обменный механизм сверхпроводимости в купратах. Письма в ЖЭТФ, 2001, Т. 74, С. 38 - 42.

93. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили. Модификация сверхпроводящего параметра порядка $\Delta(k)$ дальними взаимодействиями. Письма в ЖЭТФ, 2003, Т. **77**, В. 7, С. 450 - 454.
94. К. А. Сидоров, С. Г. Овчинников, Н. В. Тихонов. Простой способ точного расчета термодинамических свойств модели Хаббарда с бесконечным отталкиванием. ЖЭТФ, 2013, Т. **143**, В. 2., С. 379 - 387.
95. К. А. Сидоров, Н. В. Тихонов, С. Г. Овчинников. Точный расчет термодинамики одномерной модели Хаббарда с бесконечным отталкиванием в магнитном поле. ТМФ, 2014, Т. **180**, N 1, С. 94 - 111.
96. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, Электронная теория металлов, М.: Наука, 1971, С. 416.
97. И. П. Базаров, Термодинамика, Изд-во «Лань», 2010, С. 384.
98. G. Jütter, A. Clümper, and J. Suzuki, The Hubbard chain at finite temperatures: ab initio calculations of Tomonaga-Luttinger liquid properties, 1998, Nucl. Phys. B, V. **522**, P. 471 - 502.
99. K. A. Sidorov, V. A. Gavrichkov, S. V. Nikolaev, Z. V. Pchelkina, and S. G. Ovchinnikov, Effect of external pressure on the normal and superconducting properties of high- T_c cuprates, Phys. Status Solidi B, 2016, V. **253**, P. 486 - 493.
100. M. M. Korshunov, V. A. Gavrichkov, S. G. Ovchinnikov et al., Effective parameters of the band dispersion in n-type high- T_c superconductors, Physica C, 2004, V. **402**, P. 365 - 370.
101. N. Doiron-Leyraud, C. Proust, D. LeBoeuf, J. Levallois, J. B. Bonnemaïson, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy and L. Taillefer, Quantum oscillations and the Fermi surface in an underdoped high- T_c superconductor, Nature, 2007, V. **447**, P. 565.
102. F. Hardy, N. J. Hillier, C. Meingast, D. Colson, Y. Li, N. Barisic, G. Yu, X. Zhao, M. Greven, and J. S. Schilling, Enhancement of the critical temperature of $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ by applying uniaxial and hydrostatic pressure: implications for a universal trend in cuprate superconductors, Phys. Rev. Lett., 2010, V. **105**, P. 167002.

103. F. Gugenberger et al., Uniaxial pressure dependence of T_c , from high-resolution dilatometry of untwined $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ single crystals, Phys. Rev. B 49, 1994, V. **49**, N 18, P. 13137.
104. M. J. Akhtar, C. R. A. Catlow, S. M. Clark and W. M. Temmerman, The pressure dependence of the crystal structure of La_2CuO_4 , J. Phys. C: Solid State Phys., 1988, V. **21**, L917 - L920.
105. I. Bozovic, G. Logvenov, I. Belca, B. Narimbetov, and I. Sveklo, Epitaxial strain and superconductivity in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ thin films, Phys. Rev. Lett., 2002, V. **89**, P. 107001.