

БОЗОН-ФЕРМИОННЫЕ СМЕШАННЫЕ УЗЕЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ

А. И. Агафонов, Э. А. Манькин*

*Институт сверхпроводимости и физики твердого тела
Российского научного центра «Курчатовский Институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 11 августа 2000 г.

Показано, что при изучении поляронов, которые относятся к системам многих частиц, существенным аспектом является корректный выбор пространства Фока из множества унитарно неэквивалентных представлений. С помощью квантовой теории поля исследуется одноузельная поляронная модель с учетом электронных корреляций на узле, при рассмотрении которой наряду с одночастичными фермионными состояниями учитывалось образование узельного заряженного бозонного состояния. Показано, что при начальном половинном заполнении узла имеет место образование бозон-поляронных смешанных узельных состояний. Проведено исследование термодинамики этих состояний.

PACS: 71.38.+i, 74.20.Mn

1. ВВЕДЕНИЕ

Одна из фундаментальных задач физики твердого тела состоит в определении условий, при которых электрон-фононное взаимодействие может качественно изменить собственные состояния носителей заряда в диэлектрике [1–4]. В настоящее время исследование малых поляронов привлекает к себе пристальное внимание. С одной стороны, это связано с тем, что были развиты вычислительные методы для изучения поляронов при больших значениях параметра электрон-фононного взаимодействия [5–8]. С другой стороны, значительный интерес к этому обусловлен возможностью построения теории высокотемпературной сверхпроводимости и описания необычных свойств манганитов [9–14].

Поскольку поляроны относятся к системам многих частиц, существует большое число представлений, которые могут быть унитарно неэквивалентными друг другу. Это приводит к вопросу о правильном выборе одного из представлений пространства Фока [15]. В квантовой теории поля пространство Фока строится путем циклического действия операторов рождения физических частиц (т. е. частиц, которые наблюдаются в эксперименте) на их вакуум-

ное состояние. При этом важной наблюдаемой величиной является энергия квантовой системы, которая равна сумме энергий всех физических частиц в данном состоянии. Сами по себе коммутационные соотношения для операторов не могут однозначно определять это представление, поскольку необходимо еще определить вакуумное состояние.

Ключевую роль при исследовании поляронных и биполяронных зон в многоузельных поляронных моделях [10, 11, 16–21] играет одноузельный гамильтониан. Для полярона Фрелиха он имеет вид

$$H_{site} = \sum_{\sigma} \varepsilon_0 n_{\sigma} + \sum_{\sigma} n_{\sigma} \sum_{\mathbf{q}} \hbar \Omega \xi_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}) + \sum_{\mathbf{q}} \hbar \Omega \left(b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right), \quad (1)$$

где ε_0 — затравочная энергия основного электронного состояния на узле; n_{σ} — оператор числа заполнения состояния с проекцией спина $\sigma = \pm(1/2)(\uparrow, \downarrow)$; $b_{\mathbf{q}}$ — оператор уничтожения фонона с волновым вектором \mathbf{q} и энергией Ω (для простоты рассматриваем бездисперсные фононы); $\xi_{\mathbf{q}}$ — матричный элемент электрон-фононного взаимодействия. При решении (1) следует учитывать условие начального заполнения узла

$$\langle \Psi_i | \sum_{\sigma} n_{\sigma} | \Psi_i \rangle = 2A,$$

*E-mail: aai@issph.kiae.ru

где $n_\sigma = a_\sigma^+ a_\sigma$, а $|\Psi_i\rangle$ — начальное состояние для невозмущенного электронного гамильтониана, заданного первым членом в правой части (1).

Если пренебречь перескоками между узлами в многополярной системе, то к (1) сводится электрон-фононный гамильтониан из [10, 11], который был применен для построения теории ВТСП. Если дополнительно к этому использовать приближение невырожденного по спину одного электронного состояния на узле, то к (1) сводится поляронная модель, которая изучалась в [16].

Широко используемый к изучению многоузельных поляронных моделей подход основан на каноническом преобразовании Ланга–Фирсова для электрон-фононного гамильтониана Фрелиха [16], которое позволяет диагонализировать одноузельный гамильтониан (1). После этого преобразованный гамильтониан для многополяронной модели обычно исследуется по теории возмущений с параметром разложения, предполагаемым малым, $\lambda^{-1} = zt/E_p$, где t — модуль интеграла перескока между ближайшими узлами, число которых z , а E_p — поляронный сдвиг заполненного основного электронного состояния на узле по теории Ланга–Фирсова. Собственно, на таком подходе основана теория сверхпроводимости межузельных биполяронов.

В этом разделе покажем, что существуют унитарно неэквивалентные представления для узельного полярона Фрелиха. Их использование приводит к далеко идущим следствиям, позволяющим сделать корректный выбор пространства Фока для данной задачи.

Каноническим преобразованием Ланга–Фирсова для (1) является [16]

$$\tilde{H}_{site} = \exp(S)H_{site} \exp(-S), \quad (2)$$

где

$$S = \sum_{\sigma} a_{\sigma}^+ a_{\sigma} \sum_{\mathbf{q}} \xi_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} - b_{-\mathbf{q}}^+). \quad (3)$$

Используя (2), (3) и известные коммутационные соотношения для операторов в (1), легко получить, что электронный оператор преобразуется как

$$\tilde{a}_{\sigma} = a_{\sigma} \exp\left(-\sum_{\mathbf{q}} \xi_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} - b_{-\mathbf{q}}^+)\right), \quad (4)$$

а преобразованный фононный оператор есть

$$\tilde{b}_{\mathbf{q}} = b_{\mathbf{q}} + \sum_{\sigma} a_{\sigma}^+ a_{\sigma} \xi_{\mathbf{q}}. \quad (5)$$

При этом преобразованный гамильтониан принимает вид

$$\tilde{H}_{site} = \sum_{\sigma} (\varepsilon_0 - E_p) a_{\sigma}^+ a_{\sigma} - 2E_p n_{\uparrow} n_{\downarrow} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\Omega \left(b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right). \quad (6)$$

Здесь $n_{\sigma} = 0, 1$, а поляронный сдвиг

$$E_p = \sum_{\mathbf{q}} \xi_{\mathbf{q}}^2 \hbar\Omega. \quad (7)$$

Величина E_p является весьма важным параметром в теории биполяронной сверхпроводимости [11]. Поляронный сдвиг рассматривается как мера силы электрон-фононного взаимодействия в ВТСП-материалах и именно относительно этого параметра анализируются другие взаимодействия, например энергия электронных корреляций на узлах.

Собственные состояния \tilde{H}_{site} (6) имеют вид

$$|\tilde{\Psi}\rangle = |n_{\uparrow}, n_{\downarrow}\rangle | \{N_{\mathbf{q}}\} \rangle.$$

Соответственно, используя (3), для собственных состояний H_{site} (1) получаем

$$|\Psi\rangle = |n_{\uparrow}, n_{\downarrow}\rangle \exp(-(n_{\uparrow} + n_{\downarrow})) \times \sum_{\mathbf{q}} \xi_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} - b_{-\mathbf{q}}^+) | \{N_{\mathbf{q}}\} \rangle,$$

т. е. электронное вакуумное состояние в теории Ланга–Фирсова,

$$|0\rangle = |0_{\uparrow}, 0_{\downarrow}\rangle, \quad (8)$$

содержит только два одночастичных электронных состояния в соответствии с электронным вакуумным состоянием невозмущенного электронного гамильтониана $H_{site}^0 = \sum_{\sigma} \varepsilon_0 a_{\sigma}^+ a_{\sigma}$. Собственно, такой выбор вакуумного состояния с двумя одночастичными состояниями для электронной подсистемы изначально заложен в преобразовании (2), (3), поскольку операторы a_{σ} рассматриваются как операторы уничтожения физических частиц. Иными словами, в теории Ланга–Фирсова вакуумное состояние (8) пространства Фока для гамильтониана (1) определяется лишь электронным вакуумным состоянием невозмущенного электронного гамильтониана H_{site}^0 , а собственные векторы этого пространства строятся путем действия операторов a_{σ}^+ на (8).

Полностью обоснованный подход к рассматриваемой одноузельной поляронной модели предполагает решение многочастичной задачи с помощью

методов квантовой теории поля. При этом полярон Фрелиха соответствует пространству одночастичных фермионных состояний. Если расширить это пространство Фока на узельные двухчастичные состояния, то может появиться решение, которое относится к образованию бозон-фермионного смешанного состояния на узле.

Отметим, что использование двух указанных выше подходов к модели (1) приводит к существенно различным результатам, анализ которых позволяет сделать корректный выбор пространства Фока для поляронной модели. Проведем такой анализ модели (1) в двух случаях полностью заполненного узельного состояния. В [16] рассматривались узлы с единственным невырожденным по спину электронным уровнем. В этом случае для полностью заполненного узла, т. е. при начальном условии $\langle \Psi_i | a^\dagger a | \Psi_i \rangle = 1$, преобразование (2), (3) приводит к следующему результату для электронной энергии:

$$E_{el} = \varepsilon_0 - E_p. \quad (9)$$

В [11] рассматривались узлы с двукратно вырожденным по спину основным электронным уровнем. Для электронной энергии было получено

$$E_{el} = (\varepsilon_0 - E_p)(n_\uparrow + n_\downarrow) - 2E_p n_\uparrow n_\downarrow. \quad (10)$$

Для начального условия $A = 1$ (полностью заполненный узел) поляронное понижение энергии составляет $2E_p$ на спин.

Теперь проанализируем изменение электронной энергии в этих случаях с позиции квантовомеханического подхода теории возмущений. Итак, исходно имеется полностью заполненное основное состояние и отсутствуют какие бы то ни было возбужденные электронные состояния. Согласно (1), первая диагональная поправка к электронной энергии, очевидно, равна нулю. Во втором порядке по теории возмущений изменение энергии тоже равно нулю, поскольку отсутствуют незаполненные возбужденные электронные состояния. Легко понять, что в любом порядке теории возмущений поправки к электронной энергии равны нулю в случае полностью заполненного основного уровня. Как будет показано ниже, для рассматриваемых здесь случаев полностью заполненных узельных состояний средняя электронная энергия, полученная с использованием квантовой теории поля, приводит к результату ε_0 на спин без какого бы то ни было поляронного сдвига.

Поляроны являются ферми-частицами. Поляронное состояние можно представить в виде суперпозиции одночастичных состояний. Эти вырожденные

по спину одночастичные состояния образуют своеобразную энергетическую лестницу, обусловленную многофононными процессами. Интуитивно понятно, что из этих двух спиновых подпространств можно выбрать множество пар одночастичных состояний так, чтобы в каждой из двух спиновых пар при электронном рассеянии, в процессе которого между состояниями пары идет обмен одним фононом, изменение электронной энергии было малым по сравнению с фононной энергией. Тогда эффективное электронное взаимодействие будет соответствовать притяжению. Это может привести к образованию бозонного состояния на узле, которое можно представить в виде

$$|\Psi\rangle = (1 - \beta^2)^{1/2} |\Psi_1\rangle + \beta \exp(i\phi) |\Psi_2\rangle, \quad (11)$$

где β — спектральный вес внутриузельного двухчастичного состояния. При $\beta \neq 0$ вакуумное состояние (9) следует расширить с учетом вакуумного состояния для бозонов.

Если $\beta = 0$, то волновая функция (11) инвариантна относительно калибровочного преобразования $\hat{O} = \exp(i\hat{N}\phi')$ (\hat{N} — оператор числа частиц, ϕ' — произвольная фаза), а узельное состояние — это нормальное поляронное состояние. При $\beta \neq 0$ волновая функция (11) не инвариантна относительно этого преобразования и узельное состояние — это суперпозиция состояний с разными $N = 1, 2$. Однако состояние (11), соответствующее этой спонтанно нарушенной симметрии, является решением (1), которое инвариантно относительно калибровочного преобразования. Поэтому исходная инвариантность должна определенным образом сохраниться в решении (11). Это сохранение отражается в учете начального заполнения узла, что позволяет определить химический потенциал в состоянии (11).

Заметим, что образование бозон-фермионного смешанного состояния (11) может иметь место только в том случае, когда начальное узельное заполнение не является полным ($A < 1$). Это очевидно, поскольку при $A = 1$ нет свободных одночастичных состояний для рассеяния квазичастиц.

Однако кулоновские корреляции на узле препятствуют образованию такого узельного бозон-фермионного смешанного состояния. Для малых поляронов эффективный радиус Бора a_{eff} порядка межатомного расстояния. Тогда, используя типичное значение высокочастотной диэлектрической константы $\epsilon_{opt} = 3$ и $a_{eff} = 5 \text{ \AA}$, можно оценить энергию внутрицентрового взаимодействия локализованных электронов:

$$U \approx \frac{e^2}{\epsilon_{opt} a_{eff}} \approx 0.45 \text{ эВ.}$$

Возникает вопрос, при каком соотношении между энергией кулоновских корреляций на узле и электрон-фононным взаимодействием имеет место образование бозон-фермионных смешанных состояний на узле. Следующая часть настоящей работы посвящена изучению условий, при которых образуются такие смешанные бозон-фермионные состояния на узле, и исследованию термодинамики этих состояний. Рассмотрение будет проведено для парамагнитного состояния с использованием функций Грина.

2. МОДЕЛЬ

Дополняя (1) электронными корреляциями на узле, представим гамильтониан одноузельной полярон-ной модели в виде

$$H_{site} = \epsilon_0(\hat{n}_\uparrow + \hat{n}_\downarrow) + U\hat{n}_\uparrow\hat{n}_\downarrow + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\Omega\xi_{\mathbf{q}}(\hat{n}_\uparrow + \hat{n}_\downarrow)(b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+) + H_{ph}, \quad (12)$$

где H_{ph} — фононный гамильтониан, который может включать и ангармоническую часть.

Конечно, в веществе может находиться некоторый ансамбль таких одинаковых узельных (межузельных) состояний. Если пренебречь межузельными перескоками, то эти узельные состояния можно рассматривать как независимые друг от друга, а рассмотрение можно проводить лишь для одного узла (12).

Мы определили начальное заполнение узла:

$$2A = \langle \Psi_i | \sum_{\sigma} n_{\sigma} | \Psi_i \rangle.$$

Волновая функция Ψ_i невозмущенного электронного гамильтониана для частицы со спином 1/2 имеет две компоненты с проекцией спина на ось z , $\sigma = \pm 1/2$ [22]. При $A = 1/2$ частица может находиться в узельном состоянии с определенным значением проекции спина σ , $\Psi_i(\sigma)$, тогда второе узельное состояние с проекцией спина $-\sigma$ будет незаполненным. Поскольку оператор спина коммутирует с полным гамильтонианом (1), такое распределение заселенности в двух спиновых подпространствах будет сохраняться и для решения (1). Как будет следовать из результатов, приведенных ниже в п. 3.1, это решение для узельного состояния характеризуется отсутствием поляронного сдвига. При $A = 1/2$ начальная

волновая функция частицы может также быть приготовлена в состоянии с нормированной волновой функцией $\Psi_i = (\Psi_i(\sigma) + \Psi_i(-\sigma))/\sqrt{2}$ [22]. В моделях многих узлов с перескоками частиц между ними, призванных для описания состояний парамагнитных ВТСП-материалов, именно такое узельное состояние представляется важным. Поэтому ниже будем исследовать (12) для случая начальной электронной волновой функции на узле при его половинном заполнении, $A = 1/2$.

Введем мацубаровские температурные функции Грина [23]:

$$g_{\sigma\sigma_1}(\tau) = -\langle T_{\tau} \tilde{a}_{\sigma}(\tau) \tilde{a}_{\sigma_1}(0) \rangle, \quad (13)$$

$$f_{\sigma\sigma_1}^+(\tau) = \langle T_{\tau} \tilde{a}_{\sigma}(\tau) \tilde{a}_{\sigma_1}(0) \rangle, \quad (14)$$

$$f_{\sigma\sigma_1}(\tau) = \langle T_{\tau} \tilde{a}_{\sigma}(\tau) \tilde{a}_{\sigma_1}(0) \rangle, \quad (15)$$

где $\langle \dots \rangle$ означает гиббсовское усреднение.

Используя (12)–(15) и учитывая только диаграммы с не пересекающимися друг с другом фононными функциями Грина для собственно-энергетических частей (см. п. 3.1), после перехода к спектральному представлению по дискретным значениям $\omega_n = (2n + 1)\pi T$ получаем следующую систему уравнений (без ограничения общности положено $\epsilon_0 = 0$):

$$g_{ll}^{-1} g_{\uparrow\uparrow}(\omega_n) + [U g_{\uparrow\downarrow}(0^+) - \Sigma_{\uparrow\downarrow}^s] g_{\downarrow\uparrow}(\omega_n) - [U f_{\uparrow\downarrow}(0^+) - \Sigma_{\uparrow\downarrow}^a] f_{\downarrow\uparrow}^+(\omega_n) = 1, \quad (16)$$

$$[U g_{\downarrow\uparrow}(0^+) - \Sigma_{\downarrow\uparrow}^s(\omega_n)] g_{\uparrow\uparrow}(\omega_n) + g_{ll}^{-1} g_{\downarrow\uparrow}(\omega_n) = 0, \quad (17)$$

$$[U f_{\downarrow\uparrow}^+(0^+) - \Sigma_{\downarrow\uparrow}^{+a}(\omega_n)] g_{\uparrow\uparrow}(\omega_n) - f_{ll}^{-1} f_{\downarrow\uparrow}^+(\omega_n) = 0, \quad (18)$$

где μ — химический потенциал,

$$g_{ll} = \left(i\omega_n - UA - \Sigma_{\uparrow\uparrow}^s(\omega_n) + \mu \right)^{-1}, \quad (19)$$

$$f_{ll} = \left(i\omega_n + UA + \bar{\Sigma}_{\uparrow\uparrow}^s(\omega_n) - \mu \right)^{-1}, \quad (20)$$

а собственно-энергетические части имеют вид

$$\Sigma_{\uparrow\uparrow}^s(\omega_n) = -T(\hbar\Omega)^2 \sum_{n_1, \mathbf{q}} \xi_{\mathbf{q}}^2 d_{\mathbf{q}} (i\omega_n - i\omega_{n_1}) g_{\uparrow\uparrow}(\omega_{n_1}), \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \bar{\Sigma}_{\uparrow\uparrow}^s(\omega_n) &= \\ &= -T(\hbar\Omega)^2 \sum_{n_1, \mathbf{q}} \xi_{\mathbf{q}}^2 d_{\mathbf{q}}(i\omega_n + i\omega_{n_1}) g_{\uparrow\uparrow}(\omega_{n_1}), \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{\downarrow\uparrow}^s(\omega_n) &= \\ &= -T(\hbar\Omega)^2 \sum_{n_1, \mathbf{q}} \xi_{\mathbf{q}}^2 d_{\mathbf{q}}(i\omega_n - i\omega_{n_1}) g_{\downarrow\uparrow}(\omega_{n_1}), \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{\downarrow\uparrow}^{+a}(\omega_n) &= \\ &= -T(\hbar\Omega)^2 \sum_{n_1, \mathbf{q}} \xi_{\mathbf{q}}^2 d_{\mathbf{q}}(i\omega_n - i\omega_{n_1}) f_{\downarrow\uparrow}^+(\omega_{n_1}), \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{\downarrow\downarrow}^a(\omega_n) &= \\ &= -T(\hbar\Omega)^2 \sum_{n_1, \mathbf{q}} \xi_{\mathbf{q}}^2 d_{\mathbf{q}}(i\omega_n - i\omega_{n_1}) f_{\downarrow\downarrow}(\omega_{n_1}). \end{aligned} \quad (25)$$

Здесь $d_{\mathbf{q}}(i\omega_n - i\omega_{n_1})$ — фононный пропагатор.

Функцию $g_{\uparrow\uparrow}(\omega_n)$ можно представить в виде [23]

$$g_{\uparrow\uparrow}(\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{\uparrow\uparrow}(x) dx}{x - i\omega_n}, \quad (26)$$

где $\rho_{\uparrow\uparrow}(x)$ — мнимая часть запаздывающей временной гриновской функции при конечных температурах $G_{\uparrow\uparrow}^{(R)}(\omega)$:

$$\rho_{\uparrow\uparrow}(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\uparrow\uparrow}^{(R)}(\omega) \leq 0. \quad (27)$$

Отметим, что для немагнитного состояния

$$\rho_{\uparrow\uparrow}(\omega) = \rho_{\downarrow\downarrow}(\omega) = -\rho(\omega),$$

где действительная функция $\rho(\omega)$ определяет спектральную плотность на спин для фермионной квазичастицы на узле и имеет нормировку

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) d\omega = 1.$$

Используя (26) и правило суммы по ω_n [23], из определения для узельного заполнения на спин A получаем

$$A = \lim_{\tau \rightarrow 0^+} g_{\sigma\sigma}(-\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x) n(x - \mu), \quad (28)$$

где $n(t) = 1/\{\exp(t/T) + 1\}$.

Величина A определяется начальным заполнением узла и, по существу, (28) — это уравнение для нахождения химического потенциала μ .

Аналитическое продолжение собственно-энергетических частей (21) и (22) с дискретного множества точек на всю верхнюю полуплоскость ω имеет вид

$$\begin{aligned} \Sigma_{\uparrow\uparrow}^s(\omega) &= (\hbar\Omega)^2 \xi^2 \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx \times \\ &\times \left[\frac{n(\mu - x) + N}{\omega - x - \Omega + i\gamma} + \frac{n(x - \mu) + N}{\omega - x + \Omega + i\gamma} \right], \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \bar{\Sigma}_{\uparrow\uparrow}^s &= -(\hbar\Omega)^2 \xi^2 \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx \times \\ &\times \left[\frac{n(\mu - x) + N}{\omega + x + \Omega - 2\mu + i\gamma} + \frac{n(x - \mu) + N}{\omega + x - \Omega - 2\mu + i\gamma} \right]. \end{aligned} \quad (30)$$

Здесь $N = 1/\{\exp(\Omega/T) - 1\}$, ξ — безразмерный параметр электрон-фононного взаимодействия:

$$\xi^2 = \int \frac{\xi_{\mathbf{q}}^2 d\mathbf{q}}{(2\pi)^3},$$

а положительная константа $\gamma \ll \Omega$ описывает затухание фононов.

Для парамагнитного состояния $g_{\downarrow\uparrow} = g_{\uparrow\downarrow}$ и $\Sigma_{\downarrow\uparrow}^s(\omega_n) = \Sigma_{\uparrow\downarrow}^s(\omega_n)$. В представлении

$$g_{\downarrow\uparrow}(\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{sf}(x) dx}{x - i\omega_n} \quad (31)$$

действительная спектральная функция $\rho_{sf}(x)$ является мнимой частью запаздывающей временной гриновской функции $G_{\downarrow\uparrow}^{(R)}(\omega)$ при конечных температурах:

$$\rho_{sf}(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\downarrow\uparrow}^{(R)}(\omega). \quad (32)$$

Эта функция удовлетворяет условию

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_{sf}(\omega) d\omega = 0.$$

Аналогично, в представлении

$$f_{\downarrow\uparrow}^+(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho^+(x) dx}{x - i\omega_n} \quad (33)$$

спектральная функция $\rho^+(x)$ — мнимая часть запаздывающей временной аномальной функции Грина $F_{\downarrow\uparrow}^{+(R)}(\omega)$ при конечных температурах:

$$\rho^+(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} F_{\downarrow\uparrow}^{+(R)}(\omega), \quad (34)$$

удовлетворяющая условию

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho^+(\omega) d\omega = 0.$$

Аналитическое продолжение собственно-энергетических частей $\Sigma_{\downarrow\uparrow}^s(\omega_n)$ (23) и $\Sigma_{\downarrow\uparrow}^{+a}(\omega_n)$ (24) на всю верхнюю полуплоскость ω имеет вид

$$\begin{aligned} \Sigma_{\downarrow\uparrow}^s(\omega) &= -(\hbar\Omega)^2 \xi^2 \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{sf}(x) dx \times \\ &\times \left[\frac{n(\mu-x) + N}{\omega-x-\Omega+i\gamma} + \frac{n(x-\mu) + N}{\omega-x+\Omega+i\gamma} \right], \quad (35) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{\downarrow\uparrow}^{+a}(\omega) &= -(\hbar\Omega)^2 \xi^2 \int_{-\infty}^{\infty} \rho^+(x) dx \times \\ &\times \left[\frac{n(\mu-x) + N}{\omega-x-\Omega+i\gamma} + \frac{n(x-\mu) + N}{\omega-x+\Omega+i\gamma} \right]. \quad (36) \end{aligned}$$

Система уравнений (16)–(18) содержит два спин-флуктуационных параметра для парамагнитного состояния. Первый параметр — это $\lambda = g_{\downarrow\uparrow}(0^+) = g_{\uparrow\downarrow}(0^+)$. Используя (31) и правило суммы по ω_n [23], которое приводит к выражению

$$\lambda = 2T \sum_{n>0} \text{Re} g_{\downarrow\uparrow}(\omega_n),$$

получаем

$$\begin{aligned} \lambda &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho_{sf}(x) n(\mu-x) = \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho_{sf}(x) n(x-\mu). \quad (37) \end{aligned}$$

Вторым параметром является

$$\beta = \lim_{\tau \rightarrow +0} f_{\downarrow\uparrow}^+(\tau) = 2T \sum_{n>0} \text{Re} f_{\downarrow\uparrow}^+(\omega_n).$$

С учетом (33) выражение для параметра β приводится к виду

$$\begin{aligned} \beta &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho^+(x) n(\mu-x) = \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho^+(x) n(x-\mu). \quad (38) \end{aligned}$$

Величиной β определяется вес бозонного состояния в смешанном узельном состоянии.

Теперь приведем решение системы (16)–(18), аналитически продолженное на всю верхнюю полуплоскость:

$$\begin{aligned} G_{\uparrow\uparrow}^{(R)}(\omega) &= \\ &= \frac{G_{ll}^{-1}}{G_{ll}^{-2} - [\lambda U - \Sigma_{\downarrow\uparrow}^s(\omega)]^2 - F_{ll} G_{ll}^{-1} [\beta U - \Sigma_{\downarrow\uparrow}^{+a}(\omega)]^2}, \quad (39) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_{\downarrow\uparrow}^{(R)}(\omega) &= \\ &= \frac{\Sigma_{\downarrow\uparrow}^s(\omega) - \lambda U}{G_{ll}^{-2} - [\lambda U - \Sigma_{\downarrow\uparrow}^s(\omega)]^2 - F_{ll} G_{ll}^{-1} [\beta U - \Sigma_{\downarrow\uparrow}^{+a}(\omega)]^2}, \quad (40) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_{\downarrow\uparrow}^{+(R)}(\omega) &= \\ &= \frac{F_{ll} G_{ll}^{-1} [\beta U - \Sigma_{\downarrow\uparrow}^{+a}(\omega)]}{G_{ll}^{-2} - [\lambda U - \Sigma_{\downarrow\uparrow}^s(\omega)]^2 - F_{ll} G_{ll}^{-1} [\beta U - \Sigma_{\downarrow\uparrow}^{+a}(\omega)]^2}. \quad (41) \end{aligned}$$

Здесь $G_{ll}^{-1} = \omega - AU - \Sigma_{\uparrow\uparrow}^s(\omega)$ и $F_{ll}^{-1} = \omega + AU + \bar{\Sigma}_{\uparrow\uparrow}^s(\omega) - 2\mu$.

В случае половинного начального узельного заполнения ($A = 1/2$) в результате простого анализа полученного решения приходим к заключению, что химический потенциал постоянен, $\mu = U/2$, спектральная плотность $\rho(x)$ — четная функция относительно μ :

$$\rho(x-\mu) = \rho(\mu-x),$$

а $\rho_{sf}(x)$ и $\rho^+(x)$ — нечетные:

$$\rho^+(x-\mu) = -\rho^+(\mu-x), \quad \rho_{sf}(x-\mu) = -\rho_{sf}(\mu-x).$$

Таким образом, мы получили решение (12) для бозон-фермионного смешанного состояния

(39)–(41). Это решение определяет спектральные плотности ρ (27), ρ_{sf} (32) и ρ^+ (34). Они задают собственно-энергетические части (29), (30), (35) и (36). В свою очередь, последние определяют решение (39)–(41).

Решение этой замкнутой системы осуществлялось итерационной процедурой. Требовалось до 100 итераций, после которых максимальное относительное изменение в пиках спектральных плотностей не превышало 10^{-3} , изменение вычисленных величин λ и β не превышало $3 \cdot 10^{-5}$ для двух последних итераций.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Полученное решение (39)–(41) проанализируем в четырех отдельных случаях. Можно рассмотреть внутриузельные электронные корреляции лишь в рамках приближения Хартри–Фока, в котором пренебрегается спиновыми флуктуациями ($\lambda = 0$), и исследовать полученное решение, как в пространстве одночастичных электронных состояний при $\beta = 0$ (нормальное полярное состояние), так и в пространстве бозон-полярных смешанных состояний при $\beta \neq 0$. Далее, рассмотреть случай с учетом спиновых флуктуаций ($\lambda \neq 0$) и исследовать решение как в пространстве одночастичных электронных состояний при $\beta = 0$ (спин-флуктуационное полярное состояние), так и в пространстве спин-флуктуационных бозон-полярных смешанных состояний при $\beta \neq 0$.

В представленных ниже результатах для случая $A = 1/2$ энергетическая переменная ω отсчитывалась от величины $\epsilon_0 + UA$. В общем случае средняя электронная энергия состояния вычислялась как

$$\tilde{E} = -\tilde{E}_p - U(A^2 - \lambda^2 + \beta^2), \quad (42)$$

где

$$\tilde{E}_p = - \int_{-\infty}^{\infty} \omega \rho(\omega) n(\omega - \mu) d\omega \quad (43)$$

— поляронный сдвиг для нормального полярного состояния.

Ниже мы приведем спектральные плотности для этих состояний при различных начальных заполнениях узла и для половинного начального заполнения обсудим фазовую диаграмму состояний в зависимости от температуры.

3.1. Влияние диаграмм с пересекающимися фоннными пропагаторами в случае полного узельного заполнения

В решении (39)–(41) мы пренебрегли диаграммами более высокого порядка $n \geq 4$ с пересекающимися друг с другом фоннными функциями Грина для неприводимых собственно-энергетических частей. Поэтому выбор параметров в этом решении определяется тем, что эти диаграммы не должны приводить к существенному изменению спектральных плотностей. В этом разделе вычислим при $T = 0$ неприводимые собственно-энергетические части второго и четвертого порядков для нормального полярного состояния ($U = 0$ и $\beta = 0$) и приведем спектральную плотность для этого состояния в случае полного начального заполнения $A = 1$. Эти собственно-энергетические части имеют вид

$$\Sigma^{(2)}(\omega) = i(\hbar\Omega)^2 \xi^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} D(\omega - \omega_1) G(\omega_1), \quad (44)$$

$$\Sigma^{(4)}(\omega) = -(\hbar\Omega)^4 \xi^4 \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \int \frac{d\omega_2}{2\pi} D(\omega - \omega_1) \times \\ \times G(\omega_1) G(\omega_2) D(\omega_1 - \omega_2) G(\omega - \omega_1 + \omega_2). \quad (45)$$

Здесь

$$D(\omega) = \frac{1}{\omega - \Omega + i\gamma} - \frac{1}{\omega + \Omega - i\gamma}, \quad (46)$$

а полная электронная функция Грина при $A = 1$ имеет спектральное представление ($\delta \rightarrow +0$)

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(x) dx}{\omega - x - i\delta}. \quad (47)$$

Подставляя (46) и (47) в (44) и (45), получаем

$$\Sigma^{(2)}(\omega) = (\hbar\Omega)^2 \xi^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(x) dx}{\omega - x + \Omega - i\gamma}, \quad (48)$$

$$\Sigma^{(4)}(\omega) = \left(\Sigma^{(2)}(\omega)\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(x) dx}{\omega - x + 2\Omega - 2i\gamma}. \quad (49)$$

Спектральная плотность полярных состояний в случае полностью заполненного узельного состояния $A = 1$ и в приближении для собственно-энергетической части $\Sigma(\omega) = \Sigma^{(2)}$ (48) представлена на рис. 1 сплошной кривой. Химический потенциал лежит выше всей спектральной плотности

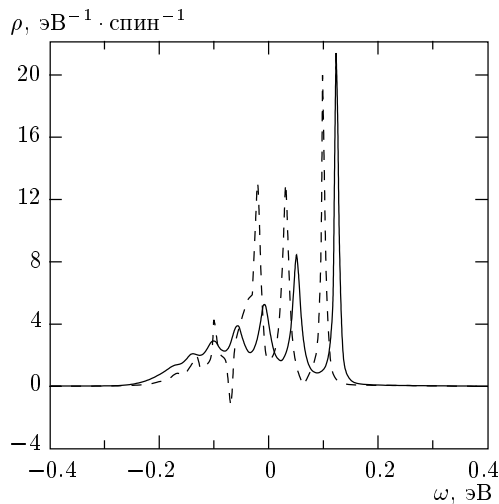


Рис. 1. Спектральная плотность полярного состояния при полном начальном узельном заполнении $A = 1$ и $T = 0$. Сплошная кривая соответствует приближению для собственно-энергетической части $\Sigma(\omega) = \Sigma^{(2)}$, штриховая кривая — $\Sigma(\omega) = \Sigma^{(2)} + \Sigma^{(4)}$. Параметры модели: $\xi = 10/3$, $\Omega = 30$ мэВ и $\gamma = 0.1\Omega$

полярного состояния. Отчетливо видны семь пиков в структуре $\rho(\omega)$, которые соответствуют многофононным процессам в образовании полярного состояния. Следует обратить внимание на то, что эти пики не являются эквидистантными. Сдвиг пиков обусловлен реальной частью (48). Для более низкоэнергетических пиков расстояние между соседними пиками уменьшается, приближаясь к энергии фонона $\Omega = 30$ мэВ.

Для плотности, представленной сплошной кривой на рис. 1, уравнение (43) приводит к результату $\tilde{E}_p = 0$. Таким образом, для полярона Фрелиха с $A = 1$ отсутствует какой-либо поляронный сдвиг по энергии, что и должно быть с точки зрения квантовомеханического подхода (см. разд. 1). Подчеркнем, что мы получали результат $\tilde{E}_p = 0$ при $A = 1$ при любых значениях модельных параметров.

Штриховая кривая на рис. 1 представляет спектральную плотность полярного состояния в случае $A = 1$ и в приближении для собственно-энергетической части $\Sigma(\omega) = \Sigma^{(2)} + \Sigma^{(4)}$. Из сравнения с результатом, показанным сплошной кривой на рис. 1, видно, что в спектральной плотности имеется качественно похожая структура пиков. Эти пики несколько сдвинуты по энергии за счет действительной части $\Sigma^{(4)}$ (49). Вместе с тем учет вклада от низшей диаграммы с пересекающимися

фононными функциями Грина приводит к возникновению отрицательной спектральной плотности в узкой энергетической области для использованных значений модельных параметров (рис. 1). С ростом параметра электрон-фононного взаимодействия ξ эта область нефизической плотности состояний увеличивается и, наряду с этим, появляются новые области отрицательной плотности, зарождающиеся между пиками, где $\text{Im} \Sigma^{(2)}$ является малой. При этом наблюдалось существенное ухудшение сходимости итерационной процедуры. Тем не менее для плотности, представленной штриховой кривой на рис. 1, уравнение (43) также приводит к результату $\tilde{E}_p = 0$.

В теории сверхпроводимости [11], основанной на формировании межузельных биполяронов, очень важным параметром является поляронный сдвиг, или, другими словами, понижение электронной энергии на узле, вызванное поляронным эффектом. Мы получили, что в случае $A = 1$ средняя энергия полярного состояния Фрелиха, которая и есть поляронный сдвиг при использованном нами отсчете энергии, $\tilde{E}_p = 0$ с точностью ξ^4 по параметру электрон-фононного взаимодействия. В то же время, если воспользоваться выражением второго порядка по ξ (7) (формула (11) в [11]) для поляронного сдвига, можно получить $E_p = 1/3$ эВ для полярона Фрелиха при $A = 1$. Последний результат является следствием выбора некорректного представления пространства Фока для поляронов.

В случае незаполненного узельного состояния, $A = 0$, в (47) следует сделать замену $-i\delta \rightarrow +i\delta$. Это приводит к замене в (48) и (49) $\Omega - i\gamma \rightarrow -\Omega + i\gamma$. В результате $\rho(\omega)$ для полярного состояния при $A = 0$ есть плотность состояний при $A = 1$, зеркально отраженная относительно оси $\omega = 0$.

Если начальная электронная волновая функция на узле такова, что электрон находится в состоянии с определенным значением проекции спина, допустим, $\sigma = 1/2$, а второе узельное состояние с проекцией спина $-\sigma$ является незаполненным, то поскольку оператор спина коммутирует с полным гамильтонианом (1), распределение заселенности в двух спиновых подпространствах будет сохраняться и для решения (1). В результате, $\rho_{\sigma\sigma}$ — это плотность, приведенная на рис. 1, а $\rho_{-\sigma,-\sigma}(\omega - \mu) = \rho_{\sigma\sigma}(\mu - \omega)$. В этом случае, очевидно, поляронный сдвиг отсутствует.

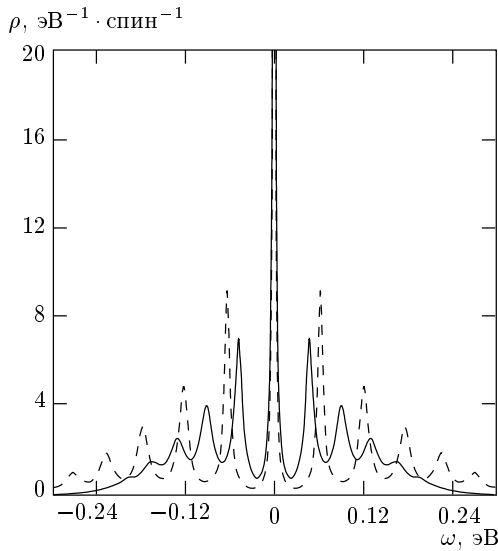


Рис. 2. Спектральная плотность полярного состояния при половинном начальном узельном заполнении $A = 1/2$ и $T = 20$ К. Для сплошной кривой параметры модели те же, что и на рис. 1, а максимальная плотность равна $35.54 \text{ эВ}^{-1} \cdot \text{спин}^{-1}$ при $\omega = 0$. Для штриховой кривой параметры модели: $\xi = 3.7$, $\Omega = 40 \text{ мэВ}$ и $\gamma = 0.05\Omega$. Максимальная плотность равна $45.47 \text{ эВ}^{-1} \cdot \text{спин}^{-1}$

3.2. Полярное состояние при половинном заполнении и конечных температурах

Спектральные плотности полярного состояния $\rho(\omega)$ при $A = 1/2$ и $T = 20$ К показаны на рис. 2 для двух указанных наборов модельных параметров. Видно, что при $\omega = 0$ имеется центральный пик, справа и слева от которого симметрично расположены пики спектральной плотности, отвечающие многофононным процессам. Эти пики, число которых растет с увеличением параметра электрон-фононного взаимодействия (рис. 2), не являются эквидистантными. Сдвиг пиков обусловлен действительной частью собственной-энергетической составляющей (29). С ростом номеров пиков расстояние между соседними пиками уменьшается, приближаясь к энергии фонона.

В случае половинного заполнения узла, $A = 1/2$, химический потенциал расположен на центральном пике, $\mu = 0$, а понижение электронной энергии, вызванное полярным эффектом (43), приводит к результату $\tilde{E}_p = 38.84 \text{ мэВ}$ на спин для сплошной кривой и $\tilde{E}_p = 58.15 \text{ мэВ}$ на спин для штриховой кривой на рис. 2. В то же время, если воспользоваться (6), (7) для понижения электронной энергии,

вызванного полярным сдвигом, можно получить $E_p = \hbar\Omega\xi^2 A = 1/6 \text{ эВ}$ на спин для параметров, которым соответствует сплошная кривая на рис. 2, и $E_p = 273.8 \text{ мэВ}$ на спин для параметров, которым соответствует штриховая кривая на рис. 2. Эти последние значения полярного сдвига являются существенно завышенными по сравнению со значениями \tilde{E}_p , представленными выше.

3.3. Бозон-полярное смешанное состояние

При пренебрежении спиновыми флуктуациями на узле ($\lambda = 0$) полярное состояние при $A = 1/2$ (рис. 2) соответствует решению (12) в пространстве одночастичных электронных состояний, т. е. в предположении, что $\beta = 0$. В действительности, эта ситуация реализуется в случае полностью заполненного узельного состояния. При половинном заполнении, $A = 1/2$, и при температурах меньше некоторой критической, $T < T_\beta$, меньшей энергией, по сравнению с полярным состоянием, обладает бозон-полярное смешанное состояние. Оно определяется плотностью одночастичных состояний $\rho(\omega)$ и спектральной плотностью внутриузельного бозонного состояния $\rho^+(\omega)$. Для двух различных температур бозон-полярные смешанные состояния представлены на рис. 3. При $A = 1/2$ мы получили, что химический потенциал не зависит от температуры, $\mu = 0$.

Сплошные кривые на рис. 3а, б соответствуют этому состоянию при $T = 20$ К. Понижение электронной энергии составляет $-\tilde{E} = 73.2 \text{ мэВ}$. Образование бозон-полярного состояния приводит к расщеплению центрального пика, показанного на рис. 2, на два пика, разделенных щелью $\Delta = 92.2 \text{ мэВ}$ (рис. 3а). Причем химический потенциал расположен в середине щели, в области которой $\rho(\omega)$ почти равна нулю. Справа и слева от μ имеются по четыре симметрично расположенных пика, положение которых не является эквидистантным.

Спектральная плотность узельного бозонного состояния $\rho^+(\omega)$ является нечетной функцией ω (рис. 3б). При половинном заполнении узла $\mu = 0$ и, соответственно, величина β , определяемая из (38), является конечной, $\beta = 0.1606$. Штриховые кривые на рис. 3а, б соответствуют этому состоянию при $T = 120$ К, т. е. вблизи T_β . Понижение электронной энергии есть $-\tilde{E} = 65.0 \text{ мэВ}$, а $\beta = 0.0967$.

Отметим, что в случае полностью заполненного узла $A = 1$ химический потенциал будет распола-

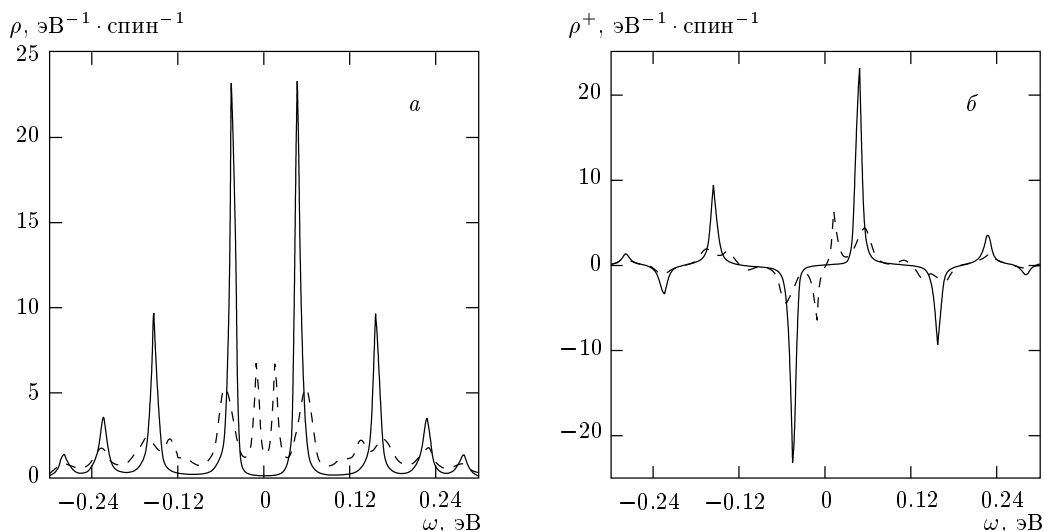


Рис. 3. Бозон-поляронные смешанные состояния для двух температур, $T = 20$ К (сплошные кривые) и $T = 120$ К (штриховые кривые), при начальном половинном заполнении $A = 1/2$: плотность одночастичных состояний (а) и спектральная плотность узельного бозонного состояния (б). Параметры модели: $\xi = 3.7$, $\Omega = 40$ мэВ и $\gamma = 0.05\Omega$

гаться справа от энергетической области распределения спектральной плотности $\rho(\omega)$. Поскольку

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho^+(\omega) d\omega = 0,$$

в этом случае $\beta = 0$ всегда и, следовательно, состоянием системы является нормальное поляронное состояние (рис. 1).

На рисунке 4 представлен переход из бозон-поляронного в поляронное состояние, вызванный изменением температуры, для двух наборов параметров. Этот переход определяется температурной зависимостью спектрального веса узельного бозонного состояния $\beta(T)$. Видно, что имеется критическая температура T_β , при которой β обращается в нуль. Эта температура соответствует переходу из бозон-поляронного в поляронное состояние. При $T \rightarrow T_\beta$ энергетическая щель $\Delta \rightarrow 0$. При этом два пика спектральной плотности $\rho(\omega)$ вблизи μ сливаются в один, а амплитуды пиков $\rho^+(\omega)$ стремятся к нулю (см. штриховые кривые на рис. 3а, б). При $T \geq T_\beta$ имеется решение, соответствующее только нормальному поляронному состоянию (см. рис. 2).

Было получено, что вблизи T_β температурная зависимость β имеет вид $\beta = \beta_0 \sqrt{1 - T/T_\beta}$. Для параметров, которым соответствует сплошная линия на рис. 4, было найдено $\beta_0 = 0.4336$ и $T_\beta = 129.85$ К. Для зависимости, представленной штриховой кри-

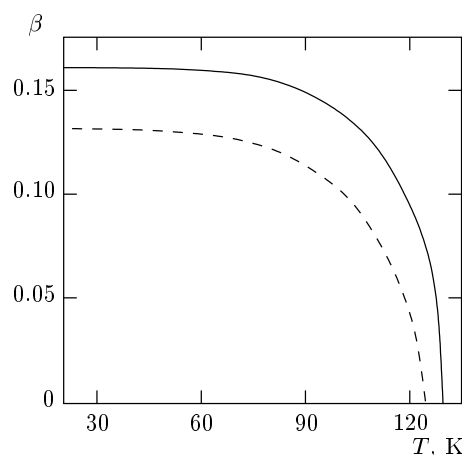


Рис. 4. Температурная зависимость спектрального веса двухчастичного узельного состояния $\beta(T)$ при $A = 1/2$. Для сплошной кривой параметры модели те же, что и на рис. 3; для штриховой кривой параметры модели $\xi = 5.774$, $\Omega = 30$ мэВ и $\gamma = 0.033\Omega$

вой на рис. 4, $\beta_0 = 0.2354$ и $T_\beta = 124.63$ К. Отметим, что для сплошной кривой параметр электрон-фононного взаимодействия меньше, а энергия фонона больше, чем их значения для штриховой кривой. Однако критические температуры являются близкими в обоих случаях.

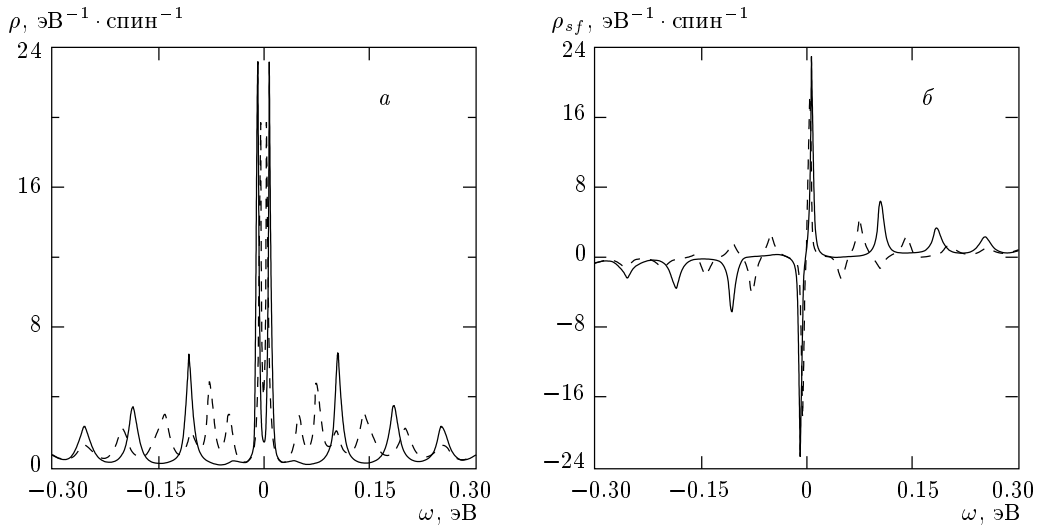


Рис. 5. Спин-флуктуационные поляронные состояния при $T = 20$ К (сплошные кривые) и $T = 87$ К (штриховые кривые) и $A = 1/2$: плотность одночастичных состояний (а) и спектральная плотность спиновых флуктуаций (б). Параметры модели те же, что и на рис. 3; $U = 0.4$ эВ

3.4. Спин-флуктуационное поляронное состояние

Теперь рассмотрим поляронные узельные состояния с учетом спиновых флуктуаций на узле при половинном заполнении, $A = 1/2$. В предположении $\beta = 0$ спин-флуктуационное поляронное состояние возникает при температурах меньше некоторой критической, $T < T_\lambda$, и характеризуется спин-флуктуационным параметром $\lambda \leq 1/2$. Спин-флуктуационное поляронное состояние определяется одночастичной плотностью состояний $\rho(\omega)$ и спектральной плотностью спиновых флуктуаций $\rho_{sf}(\omega)$. Спин-флуктуационное поляронное состояние при $A = 1/2$ для двух различных температур представлены на рис. 5. Получено, что химический потенциал не зависит от температуры, $\mu = 0$.

Используя (39)–(41) при $\beta = 0$, можем показать, что спиновые флуктуации приводят к удвоению спектральных особенностей $\rho(\omega)$. В результате центральный пик для поляронного состояния (см. рис. 2) расщепляется на два пика, между которыми возникает энергетическая щель Δ . Сплошные кривые на рис. 5а, б соответствуют спин-флуктуационному поляронному состоянию при $T = 20$ К. Здесь параметр $\lambda = 0.4552$ и щель $\Delta = 16.32$ мэВ, в середине которой «расположен» химический потенциал. Штриховые кривые на рис. 5а, б соответствуют этому состоянию при $T = 87$ К. Здесь $\lambda = 0.1585$ и $\Delta = 10.88$ мэВ.

Отметим, что при начальном условии $A = 1/2$ функция $\rho(\omega)$ — четная (рис. 5а), а $\rho_{sf}(\omega)$ — нечетная (рис. 5б) относительно $\mu = 0$. Это приводит к конечному значению λ при $T < T_\lambda$. В случае начального условия $A = 1$ химический потенциал будет располагаться справа от энергетической области распределения спектральной плотности $\rho(\omega)$. Тогда имеется только тривиальное решение (37) $\lambda = 0$ и при $A = 1$ система всегда находится в нормальном поляронном состоянии (рис. 1).

Спиновые флуктуации затухают (рис. 5), а λ уменьшается с ростом температуры. Температурная зависимость $\lambda(T)$ для спин-флуктуационного поляронного состояния при $A = 1/2$ представлена на рис. 6 для двух наборов параметров. Этой зависимостью определяется переход из спин-флуктуационного поляронного в поляронное состояние с ростом температуры. Видно, что имеется критическая температура T_λ , при которой λ обращается в нуль. Эта температура соответствует данному переходу. При $T \rightarrow T_\lambda$ энергетическая щель $\Delta \rightarrow 0$. При этом два пика спектральной плотности $\rho(\omega)$ вблизи μ сливаются в один, а амплитуды пиков $\rho_{sf}(\omega)$ стремятся к нулю (см. штриховые кривые на рис. 5а, б). При $T \geq T_\lambda$ имеется только решение, соответствующее нормальному поляронному состоянию (см. рис. 2).

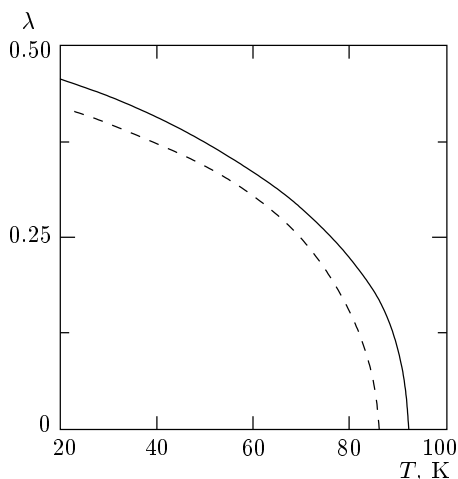


Рис. 6. Температурная зависимость параметра спиновых флуктуаций $\lambda(T)$ для спин-флуктуационного поляронного состояния при $A = 1/2$. Для сплошной кривой параметры модели те же, что и на рис. 5; для штриховой кривой параметры модели $\xi = 5.774$, $\Omega = 30$ мэВ, $\gamma = 0.033\Omega$ и $U = 0.5$ эВ

3.5. Спин-флуктуационное бозон-поляронное смешанное состояние

Возникновение щели Δ в спектре одночастичных состояний $\rho(\omega)$ обусловлено как образованием внутриузельного бозонного состояния (рис. 3), так и спиновыми флуктуациями, приводящими к удвоению спектральных особенностей (рис. 5). Было показано, что может существовать область температур, в которой конечен параметр λ для спин-флуктуационного поляронного состояния и β отлично от нуля для бозон-поляронного состояния. Мы получили, что при температурах, когда параметр спиновых флуктуаций отличен от нуля, меньшей энергией, по сравнению со спин-флуктуационным поляронным состоянием, обладает спин-флуктуационное бозон-поляронное смешанное состояние, при образовании которого оба фактора, λ и β , сильно влияют друг на друга. Спин-флуктуационное бозон-поляронное смешанное состояние характеризуется плотностью одночастичных состояний $\rho(\omega)$, спектральной плотностью спиновых флуктуаций $\rho_{sf}(\omega)$ и спектральной плотностью узельного двухчастичного состояния $\rho^+(\omega)$.

При $A = 1/2$ спектральные плотности спин-флуктуационного бозон-поляронного состояния представлены на рис. 7 для двух различных температур, $T = 20$ и 70 К. При $T = 20$ К средняя

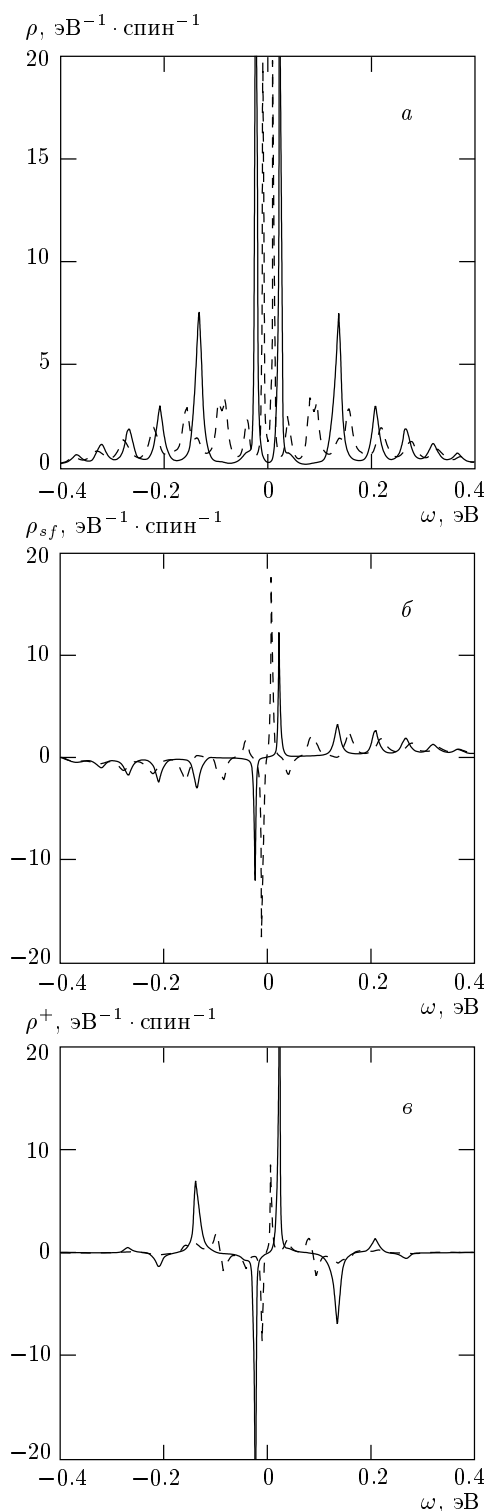


Рис. 7. Спин-флуктуационное бозон-фермионное смешанное состояние при $T = 20$ К (сплошные кривые) и $T = 70$ (штриховые кривые): плотность одночастичных состояний (а), спектральная плотность спиновых флуктуаций (б) и спектральная плотность узельного двухчастичного состояния (в). Параметры модели те же, что и на рис. 5

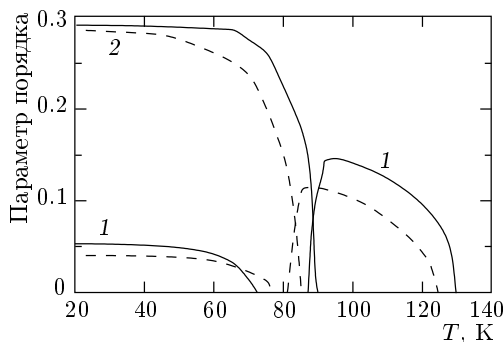


Рис. 8. Фазовая диаграмма состояний в зависимости от температуры. Кривая 1 — $\beta(T)$; кривая 2 — $\lambda(T)$. Для сплошной кривой параметры модели те же, что и для для сплошной кривой на рис. 5; для штриховой кривой параметры модели те же, что и для штриховой кривой на рис. 6

энергия спин-флуктуационного поляронного состояния $\tilde{E} = -110.52$ мэВ, тогда как при этой температуре для спин-флуктуационного бозон-поляронного состояния $\tilde{E} = -141.83$ мэВ. С ростом температуры энергия этого состояния увеличивается и при $T = 70$ К равна $\tilde{E} = -140.4$ мэВ.

Видно, что в спектре одночастичных состояний имеется энергетическая щель (рис. 7а) вблизи $\mu = 0$. При $T = 20$ К величина $\Delta = 45.34$ мэВ, тогда как при $T = 70$ К имеем $\Delta = 18.13$ мэВ. Спектральная плотность спиновых флуктуаций показана на рис. 7б. При $T = 20$ К получим $\lambda = 0.2904$ для спин-флуктуационного бозон-поляронного состояния, что меньше $\lambda = 0.4552$ для спин-флуктуационного поляронного состояния. С ростом T спиновые флуктуации затухают. При $T = 70$ К изменение λ еще относительно небольшое, $\lambda = 0.2741$, что меньше $\lambda = 0.2881$ для спин-флуктуационного поляронного состояния (рис. 6). Спектральная плотность узельного двухчастичного состояния показана на рис. 7в. При $T = 20$ К для спектрального веса бозонного состояния величина $\beta = 0.0526$, в то время как $\beta = 0.1606$ в бозон-поляронном состоянии (рис. 3). Вплоть до некоторой температуры величина β монотонно уменьшается в спин-флуктуационном бозон-поляронном состоянии и при $T = 70$ К достигает значения $\beta = 0.01527$, тогда как в бозон-поляронном состоянии $\beta = 0.1582$ (рис. 4).

При использованных параметрах критическая температура T_β для перехода из бозон-поляронного в поляронное состояние (рис. 4) больше T_λ для перехода из спин-флуктуационного поляронного в поляронное состояние (рис. 6). Это приводит к необыч-

ной фазовой диаграмме, представленной на рис. 8. В спин-флуктуационном бозон-поляронном состоянии влияние друг на друга спиновых флуктуаций и канала образования бозонного узельного состояния приводит как к уменьшению λ по сравнению с его значением в спин-флуктуационном поляронном состоянии, так и к уменьшению β по сравнению с его значением в бозон-поляронном состоянии. Электронные корреляции полностью подавляют бозонный канал при некоторой температуре ($T \approx 73$ К для сплошной кривой 1 и $T \approx 77$ К для штриховой кривой 1 на рис. 8). Здесь $\beta = 0$ и имеет место переход из спин-флуктуационного бозон-поляронного в спин-флуктуационное поляронное состояние. Далее с ростом температуры спиновые флуктуации затухают и, соответственно, λ уменьшается (рис. 8). Еще до того как λ обратится в нуль, спиновые флуктуации становятся слабыми, для того чтобы подавить бозонный канал, и появляются конечные значения β . Таким образом, при определенной температуре ($T \approx 87$ К для сплошной кривой 1 и $T \approx 83$ К для штриховой кривой 1 на рис. 8) возникает переход из спин-флуктуационного поляронного в спин-флуктуационное бозон-поляронное состояние. Критическая температура для спиновых флуктуаций, при которой $\lambda \rightarrow 0$ (сплошная и штриховая кривые 2 на рис. 8) в спин-флуктуационном бозон-поляронном состоянии, несколько меньше по сравнению с T_λ для перехода из спин-флуктуационного поляронного в поляронное состояние (рис. 6). При этой температуре имеет место переход из спин-флуктуационного бозон-поляронного в бозон-поляронное состояние (рис. 8). Выше этой температуры $\beta(T)$ увеличивается, приближаясь к зависимости $\beta(T)$ для бозон-поляронного состояния (рис. 4). При $T \rightarrow T_\beta$ величина $\beta \rightarrow 0$, $\Delta \rightarrow 0$ и имеет место переход из бозон-поляронного в поляронное состояние.

В заключение отметим следующее. Для возникновения сверхпроводящего состояния в многоузельных поляронных моделях, применяемых для описания фазовой диаграммы ВТСП-материалов, необходимо образование распространенных заряженных бозонов. Своеобразным предвестником такого сверхпроводящего состояния могло бы служить образование внутриузельных бозон-поляронных смешанных состояний. Если ввести в рассмотрение некоторый ансамбль таких узельных состояний и учесть перескоки частиц по ансамблю узлов, то одночастичные переходы по узлам приведут к образованию распространенных фермионных состояний (переход диэлектрик–металл при достижении некоторого порогового значения уровня

легирования), а двухчастичные переходы исходно локализованных заряженных бозонов по узельным состояниям могут привести к образованию распространённых заряженных бозонов [24]. При таком подходе к изучению ВТСП представляется важным учесть именно гибридизацию между исходными локализованными узельными одночастичными состояниями и зонными состояниями диэлектрика, которая уже во втором порядке по матричному элементу гибридизации приводит к перескокам частиц по ансамблю узлов [25]. Это обусловлено тем, что, во-первых, в отличие от туннельного (или прыжкового) механизма, не возникает экспоненциальная малость, связанная с перекрытием волновых функций поляронов малого радиуса на соседних узлах. Во-вторых, известные данные по фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением показывают, что симметрия волновых функций распространённых одночастичных состояний вблизи поверхности Ферми в легированных ВТСП-материалах близка к $d_{x^2-y^2}$ -симметрии волновых функций исходных купратов вблизи диэлектрической щели [26]. Гибридизация между исходными локализованными узельными состояниями и зонными состояниями купратных слоев дает простую возможность объяснить симметрию волновых функций распространённых состояний в узких поляронных зонах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 99-02-16292), Соросовской программы высшего образования (грант № НВА 802 и ММЦ-ФПИ, грант № 9 1998).

ЛИТЕРАТУРА

1. H. Frolich, S. Machlup, and T. K. Mitra, *Phys. Condes. Mat.* **1**, 359 (1963).
2. *Полярны*, под ред. Ю. А. Фирсова, Наука, Москва (1975).
3. D. Emin and T. Holstein, *Phys. Rev. Lett.* **36**, 323 (1976).
4. B. K. Chakraverty, M. J. Sienko, and J. Bonnerot, *Phys. Rev. B* **17**, 3781 (1978).
5. H. de Raedt and Ad. Lagendijk, *Phys. Rev. B* **27**, 6097 (1983).
6. H. Fehske, H. Roder, G. Wellein, and A. Mistriotis, *Phys. Rev. B* **51**, 16582 (1995).
7. A. S. Mishchenko, N. V. Prokof'ev, A. Sakamoto, and B. V. Svistunov, submitted to *Phys. Rev. B* (2000).
8. P. E. Kornilovitch and E. R. Pike, *Phys. Rev. B* **55**, 8634 (1997).
9. K. A. Muller, *J. Supercond.* **12**, 3 (1999).
10. A. S. Alexandrov and N. F. Mott, *Rep. Prog. Phys.* **57**, 1197 (1994).
11. A. S. Alexandrov, *Phys. Rev. B* **61**, 12315 (2000).
12. E. V. L. de Mello and J. Ranninger, *Phys. Rev. B* **55**, 14872 (1997).
13. B. K. Chakraverty, J. Ranninger, and D. Feinberg, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2621 (1999).
14. Z.-X. Shen and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1771 (1997).
15. Х. Умэдзава, Х. Мацумото, М. Татики, *Термополяровая динамика и конденсированные состояния*, Мир, Москва (1985).
16. И. Г. Ланг, Ю. А. Фирсов, *ЖЭТФ* **43**, 1843 (1962).
17. Ю. А. Фирсов, Е. К. Кудинов, *ФТТ* **39**, 2159 (1997).
18. M. Capone, W. Stephan, and M. Grilli, *Phys. Rev. B* **56**, 4484 (1997).
19. E. V. L. de Mello and J. Ranninger, *Phys. Rev. B* **58**, 9098 (1998).
20. M. Zoli, *Phys. Rev. B* **61**, 14523 (2000).
21. S. Ciuchi, F. de Pasquale, S. Fratini, and D. Feinberg, *Phys. Rev. B* **56**, 4494 (1997).
22. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Физматгиз, Москва (1962).
23. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва (1962).
24. А. И. Агафонов, Э. А. Манькин, *ЖЭТФ* **117**, 182 (2000).
25. A. I. Agafonov and E. A. Manykin, *Phys. Rev. B* **52**, 14571 (1995).
26. Z.-X. Shen and D. S. Dessau, *Phys. Rep.* **253**, 1 (1995).