Письма в ЖЭТФ, том 59, вып.6, стр.413 - 417 ©1994 г. 25 марта

# ПЕРЕХОД МОТТА И СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ

*Г.М.Элиашберг, В. фон дер Линден**

*Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау РАН*
*142432 Черноголовка, Московская обл., Россия*

**Физический институт, Университет Вюрцбург,*
*97074 Вюрцбург, Германия*

Поступила в редакцию 24 февраля

Если переход Мотта не сопровождается изменением кристаллической и магнитной симметрии, то состояние с расщепленной зоной проводимости может быть только фазово-когерентным состоянием, где теорема Латтинжера не выполняется. С этой точки зрения сверхпроводящее состояние является реализацией состояния Мотта. Численные данные для одномерной модели Хаббарда иллюстрируют этот вывод.

Несмотря на обширную литературу, посвященную переходу Мотта, природа состояния с расщепленной зоной проводимости [1] остается предметом дискуссий. В этом письме мы обсудим соотношение между этим состоянием и сверхпроводником, используя в качестве инструмента для анализа правило сумм Латтинжера и Уорда (известное, также, как "теорема Латтинжера") [2, 3]. Общие выводы иллюстрируются численными данными для одномерной модели Хаббарда, в которой, как известно, состояние Мотта реализуется в случае зоны, заполненной наполовину [4]. Наши вычисления отличаются от других кластерных расчетов этой модели (см. например, [5, 6]) набором вычисленных величин. Среди них – спектр, в терминах которого формулируется теорема Латтинжера. Будучи точным соотношением для числа частиц, эта теорема не выполняется в сверхтекучих ферми-системах, где вследствие макроскопической фазовой когерентности число частиц флуктуирует в основном состоянии при заданном значении химического потенциала (электрохимического – для электронов) [7]. Поэтому теорема Латтинжера является характеристическим свойством "нормальных систем", и только для таких систем может быть определен соответствующий одночастичный спектр. Для невзаимодействующих частиц (и в приближении Хартри–Фока) он совпадает с обычным спектром, но (в отличие от спектра возбуждений) остается строго определенным и при наличии корреляционных эффектов. Последние особенно существенны в кристаллах с сильно связанными электронами, и упомянутый спектр является здесь единственным хорошо определенным зонным спектром. Поэтому именно этот спектр должен стать объектом микроскопических зонных расчетов для коррелированных систем, и мы надеемся, что наши вычисления для простейшей модели демонстрируют плодотворность такого подхода.

Прежде всего воспроизведем здесь некоторые общие соотношения [9], используя следующие определения функции Грина:

$$\hat{G}_R(\epsilon) = i\int_0^\infty e^{i\epsilon t}\hat{A}(t)dt,$$

$$\hat{G}_A(\epsilon) = -i \int_{-\infty}^{0} e^{i\epsilon t} \hat{A}(t) dt, \tag{1}$$

$$\hat{A}(t) \equiv A(t; x, x') = \langle \{\psi(t, x), \psi^+(0, x')\} \rangle,$$

где $\psi^+$ и $\psi$ – операторы рождения и уничтожения частиц в представлении Гейзенберга с оператором эволюции $\exp[-i(H - \mu N)t]$; $x, x'$ включают пространственные $r, r'$ и спиновые $\sigma, \sigma'$ координаты, $\langle ... \rangle$ – термодинамическое среднее по большому каноническому ансамблю. Химический потенциал $\mu$ как функция температуры при заданном числе частиц $N$ в объеме $V$ определяется из общего выражения для числа частиц:

$$N = \int_{-\infty}^{0} \frac{1}{e^{\epsilon/T} + 1} \mathrm{Tr} \hat{\rho}(\epsilon) d\epsilon. \tag{2}$$

Оператор спектральной плотности

$$\hat{\rho}(\epsilon) = \frac{1}{2\pi i} [\hat{G}_R(\epsilon) - \hat{G}_A(\epsilon)] \tag{3}$$

удовлетворяет интегральному условию

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hat{\rho}(\epsilon) d\epsilon = \delta(r - r') \delta_{\sigma\sigma'}, \tag{4}$$

которое непосредственно следует из определения (1).

Мы можем теперь сформулировать теорему Латтинжера, которая часто понимается как доказательство постулата Ландау о независимости импульса Ферми от взаимодействия [8] и его обобщение для электронов в металле. Фактически же эта теорема содержит два утверждения.

1. Для определенного класса ферми-систем антиэрмитова часть оператора $\hat{G}_R^{-1}(\epsilon)$ в основном состоянии обращается в нуль при $\epsilon = 0$. Поэтому существует одночастичный спектр (для краткости, $\xi$-спектр), определяемый эрмитовым оператором $\hat{\xi}$:

$$\hat{G}_R^{-1}(0) = \hat{G}_A^{-1}(0) = \xi. \tag{5}$$

2. Число отрицательных собственных значений оператора $\hat{\xi}$, $\xi_\alpha < 0$, равно числу частиц $N$, если химический потенциал определен из уравнения (2) при $T = 0$:

$$N = \sum_{\xi_\alpha < 0} 1. \tag{6}$$

Вывод этой теоремы, проведенный для изотропной системы (ферми-жидкости) [2], а затем без существенных изменений повторенный для электронов в немагнитном кристалле [3], в действительности не ограничен какими-либо предположениями о кристаллической и магнитной симметрии основного состояния: в каждом случае может быть определен одноэлектронный "гамильтониан" $\hat{\xi}$, имеющий соответствующую симметрию, и его спектр удовлетворяет правилу сумм (6). Для электронов в идеальном кристалле оператор $\hat{\xi}$ диагонален в представлении спиноров Блоха $\varphi_{n,k}(x)$ ($x = r, \sigma$, $n$ – зонный индекс, $k$ –

волновой вектор в зоне Бриллюэна). В отсутствие магнетизма или в случае простого антиферромагнитного порядка зоны двукратно вырождены, и можно выделить индекс $\nu = 1, 2$. Мы будем иметь в виду далее именно эти случаи, поскольку они имеют отношение к проблеме, анонсированной в заглавии этой статьи.

В терминах $\xi$-спектра остается в силе существенная часть зонной феноменологии. В частности, мы можем, как и в приближении самосогласованного поля, различать металлы и диэлектрики по заполнению зон, которое в силу теоремы Латтинжера связано с электронной стехиометрией. Здесь важно подчеркнуть, что в случае металла $\xi$-спектр определяет не только поверхность Ферми, $\xi_{nk\nu} = 0$, но и плотность состояний электронов на этой поверхности: из уравнений (3) и (5) следует, что $\langle\alpha|\hat{\rho}(0)|\alpha\rangle = \delta(\xi_\alpha)$, и полная плотность состояний на $S_F$ равна

$$\rho_F = V \cdot 2 \int \frac{dS_F}{|v|}, \tag{7}$$

$v = d\xi_k/dk_\perp$ – производная по нормали к $S_F$. Отметим, что $\rho_F$ – это плотность состояний, которая тестируется в экспериментах, связанных с удалением электрона из металла или с его инжекцией в металл. Этот параметр отсутствует в феноменологии ферми-жидкости и всегда меньше, чем плотность состояний квазичастиц (возбуждений). Обе величины совпадают только в приближении Хартри–Фока (более подробно о связи с теорией ферми-жидкости см. [9]).

С самого начала, после того как Мотт выдвинул свою знаменитую гипотезу, было ясно, что состояние с расщепленной зоной проводимости в кристалле с нечетным числом электронов на элементарную ячейку является следствием корреляционных эффектов и несовместимо с зонной теорией, основанной на приближении самосогласованного поля. Но теперь мы видим, что по тем же соображениям оно несовместимо с существованием $\xi$-спектра, и для этого состояния нет места и среди коррелированных нормальных систем, которые управляются теоремой Латтинжера. Как уже отмечалось [7, 9], аномальной системой (и пока единственной среди известных электронных систем), про которую можно сказать, что теорема Латтинженра определенно не работает, является сверхпроводник. В этом смысле сверхпроводящее состояние является реализацией состояния Мотта.

Поучительную иллюстрацию описанного выше подхода дает вычисление $\xi$-спектра для 1-мерной модели Хаббарда. Был рассчитан кластер из 10 узлов на кольце, и точная диагонализация проводилась методом, близким к использованному другими авторами [5, 6]. Расчет был выполнен для различного числа частиц $N \leq 10$ и для значений $U = 1, 4, 8, 16$ (в единицах $t$). Из-за малого объема статьи на рис.1, 2 показаны лишь некоторые из полученных данных. Прежде чем обсудить их, отметим существенные свойства модели. Как и для всякой однозонной модели, оператор $\hat{G}(\epsilon)$ диагонален в $k$-представлении, и из определений (1) и (3) следует:

$$G_R(\epsilon, k) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_k(E)}{E - \epsilon - i\delta} dE. \tag{8}$$

В случае полузаполненной зоны полная спектральная плотность $\rho(E)$ имеет щель, симметричную относительно $E = 0$ ($\mu_+ - \mu_-$ в обозначениях Либа и Ву

[4]), которая при $U \ll t$ экспоненциально мала. Из определения $\xi_k$

$$\frac{1}{\xi_k} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_k(E)}{E} dE \tag{9}$$

и вследствие известной симметрии частица – дырка

$$\rho_k(E) = \rho_{\pi-k}(-E); \qquad \xi_K = -\xi_{\pi-k}. \tag{10}$$

Нетрудно видеть, что $\xi_k$ меняет знак при $|k| = k_F = \pi/2$ (длина ячейки $a = 1$), но не проходит через ноль: в спектре $\xi_k$ также имеется щель. Возможны два случая, соответствующие совершенно различным физическим ситуациям.

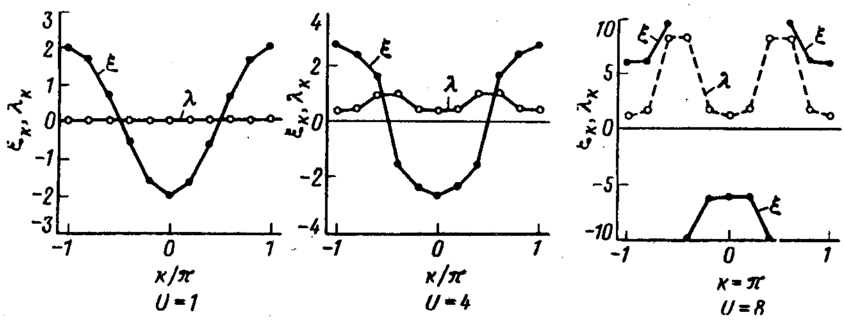


Рис.1.

1. Разрыв $\xi_k$ при $|k| = \pi/2$ имеет конечную величину. В этом случае мы имеем обычный диэлектрик, спектр можно привести к вдвое меньшей зоне Бриллюэна. Такое состояние можно назвать маргинальным антиферромагнетиком.

2. Парциальная плотность $\rho_k(E)$ непрерывно изменяется при переходе через границу Ферми, и в этом случае $G(0, k_F) = 0$. Поэтому $\xi$-спектр расходится. В таком состоянии теорема Латтинжера не выполняется в макроскопическом пределе, то есть мы имеем дело с маргинальным сверхпроводником. Для сравнения приведем выражение для $G_R^{-1}(0, k)$ в однозонной модели БКШ, которое непосредственно следует из работы Горькова [10]:

$$G_R^{-1}(0, k) = v(k - k_F) + \frac{\Delta^2}{v(k - k_F) + i\delta}. \tag{11}$$

Как видно, в этом случае происходит такая же драматическая трансформация $\xi$-спектра, и условие (5) не выполняется.

Результаты, показанные на рис.1, не позволяют сделать достаточно определенного выбора между двумя рассмотренными случаями, хотя при $U = 8$ видна тенденция к расходимости спектра. На это указывает и аномально сильная дисперсия $\lambda(k)$, определенного следующим образом:

$$1 + \lambda(k) = -\frac{\partial}{\partial \epsilon}[G_R^{-1}(\epsilon, k)]_{\epsilon=0}.$$

Физический смысл этой величины подробно обсуждался ранее [7, 9]. Разумеется, однозначный ответ должен быть получен из точного решения Либа и Ву, и это является весьма интересной задачей. На рис.2 показана полная спектральная плотность для $U = 8$, которая имеет типичный для состояния Мотта вид. Вторая кривая – интеграл от спектральной плотности – контролирует выполнение условия полноты (4). Отметим, что этот и другие, не показанные здесь данные для спектральной плотности, совпадают с вычислениями другой группы авторов [5].

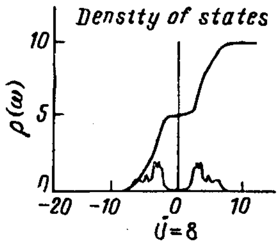


Рис.2.

В заключение подчеркнем, что проведенный в этой статье анализ приводит не только к новому аспекту в проблеме перехода Мотта, но и позволяет понять, что более общая по сравнению с теорией БКШ формулировка теории сверхпроводимости не должна базироваться на исходно нормальном металлическом состоянии: зонная теория даже в терминах $\xi$-спектра неприменима к сверхпроводнику, и соответствующий формализм не должен "помнить" о таких понятиях, как поверхность Ферми и плотность состояний на ней.

Авторы благодарны В.Ханке, который инициировал их сотрудничество. Пребывание в ФРГ одного из авторов было обеспечено Фондом А.фон Гумбольдта.

---

1. N.F.Mott, Phil. Mag. **6**, 287 (1961).
2. J.M.Luttinger and J.C.Ward, Phys. Rev. **118**, 1417 (1960).
3. J.M.Luttinger, Phys. Rev. **119**, 1153 (1960).
4. E.H.Lieb and F.Y.Wu, Phys. Rev. Lett. **25**, 1445 (1968).
5. M.B.J.Meinders, H.Eskes, G.A.Sawatzky, Phys. Rev. B **48**, 3916 (1993).
6. E.Dagotto et al., Phys. Rev. B **41**, 9049 (1990).
7. Г.М.Элиашберг, в Properties of High-Tc superconductors, H.Kuzmany, M.Mehring, J.Fink (Eds.) Springer Series in Solid State Physics **113**, 385 (1993).
8. Л.Д.Ландау, ЖЭТФ **30**, 1058 (1956).
9. Г.М.Элиашберг, J. of Superconduct., в печати.
10. Л.П.Горьков, ЖЭТФ **34**, 735 (1958).