

Обобщение теоремы Латтинжера для систем с сильными электронными корреляциями

© М.М. Коршунов, С.Г. Овчинников

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, 660036 Красноярск, Россия

E-mail: mkor@iph.krasn.ru
sgo@iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию 4 октября 2002 г.
В окончательной редакции 16 января 2003 г.)

На основе анализа общей структуры функции Грина сильно коррелированных электронных систем показано, что в режиме сильных корреляций теорему Латтинжера необходимо обобщить следующим образом: объем Ферми-поверхности системы невзаимодействующих частиц равен объему Ферми-поверхности квазичастиц в сильно коррелированной системе с учетом спектрального веса этих квазичастиц. В результате исследования t - J -модели и модели Хаббарда в парамагнитной несверхпроводящей фазе показано, что для этих моделей обобщенная теорема Латтинжера выполняется.

Авторы благодарят за поддержку INTAS (грант N INTAS-01-0654), РФФИ-ККФН „Енисей“ (грант № 02-02-97705), программу РАН „Квантовая макрофизика“ и Сибирское отделение Российской академии наук (Лаврентьевский конкурс молодежных проектов СО РАН).

В настоящее время распространено мнение о том, что теорема Латтинжера [1] не выполняется в системах с сильными электронными корреляциями (СЭК), к которым, в частности, относится широкий класс сверхпроводящих купратов. Эта теорема утверждает, что объем Ферми-поверхности системы частиц с взаимодействием равен объему Ферми-поверхности для невзаимодействующих частиц. Доказательство [1] теоремы Латтинжера справедливо только в том случае, если система представляет собой нормальную Ферми-жидкость. В работе [2] на основе непертурбативного топологического подхода было показано, что данная теорема выполняется для систем с СЭК в предположении, что эти системы являются нормальной Ферми-жидкостью. Поскольку вывод [2] делался с общих позиций, он справедлив для t - J -модели и модели Хаббарда в ферми-жидкостной фазе. Однако в системах с СЭК возможны и другие фазы, в которых имеют место отклонения от ферми-жидкостного поведения. Эти отклонения проявляются, во-первых, в перераспределении спектрального веса квазичастицы между различными хаббардовскими подзонами, а во-вторых, в отличии от нуля мнимой части массового оператора $\text{Im} \Sigma_k(E)$ на поверхности Ферми. Действительно, в Ферми-жидкости вблизи уровня Ферми ε_F должно выполняться соотношение $\text{Im} \Sigma_k(E) \sim (E - \varepsilon_F)^2$.

Как показали расчеты для модели Хаббарда в рамках точной в пределе бесконечной размерности ($d = \infty$) динамической теории среднего поля (DMFT) [3–5], функция распределения квазичастиц вблизи уровня Ферми имеет скачок. Этот скачок непрерывно уменьшается до нуля с ростом параметра кулоновского отталкивания U на одном узле. Но при этом ферми-жидкостная картина сохраняется вплоть до некоторого критического значения U_c , после чего система переходит в диэлектрическое состояние. Однако Эдвардс и Герц [6], используя не

опирающуюся на предел $d = \infty$ интерполяционную схему для модели Хаббарда, показали, что при значениях $U \sim U_c$ и вблизи половинного заполнения ($x \ll 1$, где $n = 1 - x$ — концентрация электронов) мнимая часть массового оператора не равна нулю на поверхности Ферми. Но при отклонении от половинного заполнения свойства Ферми-жидкости в системе достаточно быстро восстанавливаются. То, что в модели Хаббарда с $U = 8t$, где t — интеграл перескока, уже при $x > 0.1$ начинают восстанавливаться ферми-жидкостные свойства, показано и в работе [7] в рамках непертурбативного динамического кластерного приближения (DCA). В настоящее время проблема перехода системы из ферми-жидкостной фазы в металлическое неферми-жидкостное состояние с СЭК (и поведение системы в области перехода) еще только намечена и далека от решения (см., например, [8]).

Наиболее интересной является область $x \ll 1$, так как именно в этой области в реальных веществах наблюдается переход к металлическому состоянию. При очень малых x можно ожидать, что допированные носители будут локализованы вблизи дна зоны и для них $\text{Im} \Sigma_k(\varepsilon_F) \neq 0$, но с дальнейшим ростом x уровень Ферми попадает в область делокализованных состояний, для которых мнимая часть собственно энергетической части равна нулю, а неферми-жидкостные эффекты еще присутствуют из-за перераспределения спектрального веса между хаббардовскими подзонами. В области $\text{Im} \Sigma_k(\varepsilon_F) \neq 0$ отклонения от теоремы Латтинжера для модели Хаббарда обсуждались в [9] в рамках FLEX-приближения. В данной работе мы ограничимся областью концентраций, при которых $\text{Im} \Sigma_k(\varepsilon_F) = 0$.

Что касается отличия спектрального веса квазичастицы в системе с СЭК от единицы, то в этом случае также имеют место отклонения свойств системы от нормаль-

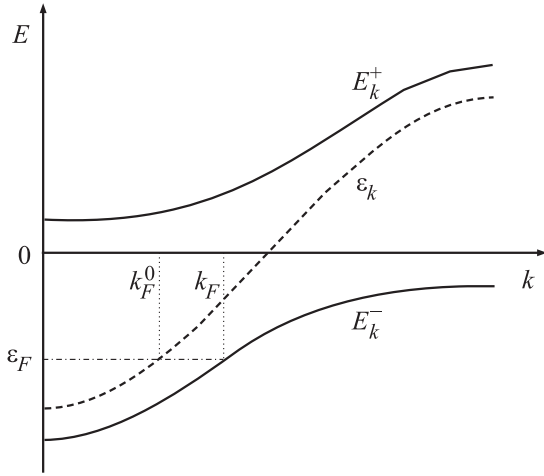


Рис. 1. Дисперсия хаббардовских зон E_k^+ и одночастичного спектра ε_k . ε_F — уровень Ферми, k_F и k_F^0 — импульсы Ферми для хаббардовских зон и для свободных электронов соответственно.

ной Ферми-жидкости, и теорема Латтинжера в ее оригинальной формулировке не выполняется. Действительно, импульс Ферми k_F для хаббардовских зон больше импульса Ферми k_F^0 для свободных электронов при одной и той же энергии Ферми ε_F (рис. 1), т.е. геометрический объем Ферми-поверхности для хаббардовских зон будет больше [10]. Но при этом система находится в металлическом состоянии и, поскольку функция распределения квазичастиц вблизи уровня Ферми имеет скачок, мы можем сформулировать обобщенную на случай квазичастиц теорему Латтинжера в следующем виде: объем Ферми-поверхности системы невзаимодействующих частиц равен объему Ферми-поверхности квазичастиц с взаимодействием с учетом спектрального веса этих квазичастиц. В данной работе на основе анализа общей структуры функции Грина и подробного исследования решения Хаббард-I для t - J -модели и модели Хаббарда [11] показано, что теорема Латтинжера в таком обобщенном виде выполняется для металлических систем с СЭК. Фактически такая металлическая система является уже не нормальной Ферми-жидкостью, а „сжимаемой Ферми-жидкостью“, что обусловлено отличием спектрального веса квазичастиц от единицы и „рыхлостью“ Ферми-поверхности. Эти представления позволяют устранить противоречие между концентрацией допированных носителей в сверхпроводящих купратах и вычисленным в рамках нормальной Ферми-жидкости слишком большим объемом поверхности Ферми.

1. Анализ общей структуры функции Грина

В работе Латтинжера показано, что равенство объемов Ферми-поверхности в импульсном пространстве для взаимодействующих частиц V_{FS} и частиц без взаи-

модействия V_{FS}^0 .

$$V_{FS} = V_{FS}^0 \quad (1)$$

является следствием равенства среднего числа частиц $\langle N \rangle$ для взаимодействующих и невзаимодействующих фермионов. Действительно, для системы без взаимодействия имеем

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \sum_k \theta(\mu_0 - \varepsilon_k) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int dk \theta(\mu_0 - \varepsilon_k) = \frac{V}{(2\pi)^3} V_{FS}^0. \end{aligned} \quad (2)$$

Для ферми-жидкостной системы с взаимодействием [1]

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \sum_k \theta(\mu - \varepsilon_k - \text{Re} \Sigma_k) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int dk \theta(\mu - \varepsilon_k - \text{Re} \Sigma_k) = \frac{V}{(2\pi)^3} V_{FS}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь V — объем системы фермионов, μ и μ_0 — химические потенциалы систем с взаимодействием и в его отсутствие соответственно, ε_k — одночастичные энергии, $\text{Re} \Sigma_k$ — собственно энергетическая часть функции Грина, $\theta(x)$ — тета-функция Хевисайда.

Однако для систем с СЭК определение среднего числа частиц как суммы тета-функций неудовлетворительно, поскольку это определение предполагает единичный спектральный вес каждой квазичастицы в системе. Одной из ключевых особенностей систем с СЭК является отличие спектрального веса от единицы в каждой зоне вследствие его перераспределения при $U \gg W$ (W — полуширина зоны) между хаббардовскими подзонами. Поэтому необходимо заново вывести уравнения (2) и (3) для этого случая.

Далее будем использовать X -операторы Хаббарда [12], определенные следующим образом: $X_f^{pq} \equiv |p\rangle\langle q|$, где $|p\rangle$ и $|q\rangle$ — состояния на узле f . Поскольку число корневых векторов $\alpha(p, q)$ конечно, их можно пронумеровать и тогда

$$X_f^{pq} \leftrightarrow X_f^{\alpha(p,q)} \leftrightarrow X_f^{\alpha_m} \leftrightarrow X_f^m. \quad (4)$$

Здесь индекс $m \leftrightarrow (p, q)$ нумерует квазичастицы с энергиями

$$\omega_m = \omega_{pq} = \varepsilon_p(N+1) - \varepsilon_q(N), \quad (5)$$

где ε_p — уровень энергии с номером p для N -электронной системы.

Операторы Хаббарда и одноэлектронные операторы рождения и уничтожения связаны следующим соотношением:

$$a_{f\lambda\sigma}^+ = \sum_m \gamma_{\lambda\sigma}^*(m) X_{f\sigma}^m, \quad a_{f\lambda\sigma} = \sum_m \gamma_{\lambda\sigma}(m) X_{f\sigma}^m, \quad (6)$$

$\gamma_{\lambda\sigma}(m)$ — частичный вес квазичастицы m со спином σ и орбитальным индексом λ .

Среднее число заполнения $\langle n_{k\lambda\sigma} \rangle$ для частиц с импульсом k и спином σ выражается через одноэлектронную функцию Грина в энергетическом представлении $G_{k\lambda\sigma} = \langle \langle a_{k\lambda\sigma} | a_{k\lambda\sigma}^+ \rangle \rangle_{E+i\eta}$ следующим образом:

$$\langle n_{k\lambda\sigma} \rangle = \int dE f_F(E) \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k\lambda\sigma} \right), \quad (7)$$

где $f_F(E)$ — функция Ферми, $\eta \rightarrow 0$, $\eta > 0$. В X -представлении функция Грина имеет вид

$$\langle \langle a_{k\lambda\sigma} | a_{k\lambda\sigma}^+ \rangle \rangle_{E+i\eta} = \sum_{m,p} \gamma_{\lambda\sigma}(m) \gamma_{\lambda\sigma}^*(p) \langle \langle X_{k\sigma}^m | X_{k\sigma}^p \rangle \rangle_{E+i\eta}. \quad (8)$$

Для матричной функции Грина $D_{k\sigma}^{m,p}(E) = \langle \langle X_{k\sigma}^m | X_{k\sigma}^p \rangle \rangle_{E+i\eta}$ можно записать обобщенное уравнение Дайсона [13]

$$\hat{D}_{k\sigma}(E) = \left\{ [\hat{G}_{k\sigma}^{(0)}(E)]^{-1} + \hat{\Sigma}_{k\sigma}(E) \right\}^{-1} \hat{P}_{k\sigma}(E). \quad (9)$$

Здесь $\hat{\Sigma}_{k\sigma}(E)$ и $\hat{P}_{k\sigma}(E)$ — массовый и силовой операторы соответственно. Наличие силового оператора связано с перераспределением спектрального веса и является принципиальным эффектом СЭК. Ранее понятие силового оператора вводилось в диаграммной технике для спиновых систем [14]. Функция Грина $\hat{G}_{k\sigma}^{(0)}(E)$ в (9) определяется соотношением

$$[\hat{G}_{k\sigma}^{(0)}(E)]^{-1} = \hat{G}_0^{-1}(E) - \hat{P}_{k\sigma}(E) \hat{T}_{k\sigma}, \quad (10)$$

где $\hat{T}_{k\sigma}$ — матричный элемент взаимодействия (для модели Хаббарда $T_{k\sigma}^{m,p} = \gamma_{\sigma}(m) \gamma_{\sigma}^*(p) t_k$).

В приближении Хаббард-I при $U \gg W$ сохраняется структура точной функции Грина (9), но массовый оператор полагается равным нулю, а силовой оператор $P_{k\sigma}^{m,p}(E) \rightarrow P_{0\sigma}^{m,p} = \sigma_{m,p} F_{\sigma}^m$, где $F_{\sigma}^m \equiv F(p, q) = \langle X_f^{pp} \rangle + \langle X_f^{qq} \rangle$ — фактор заполнения, названный в диаграммной технике для X -операторов [15] концевым множителем. Используя приближение Хаббард-I, из (9) получаем

$$\hat{D}_{k\sigma}^{(0)} = \{ \hat{G}_0^{-1}(E) - \hat{P}_{0\sigma} \hat{T}_{k\sigma} \}^{-1} \hat{P}_{0\sigma}. \quad (11)$$

Чтобы оценить вклады в выражение (11), которые вносят следующие за Хаббард-I приближения, сравним точное выражение для функции Грина (9) с выражением в приближении Хаббард-I (11). Первое отличие состоит в перенормировке факторов заполнения F_{σ}^m при учете точного выражения для силового оператора $P_{k\sigma}(E)$. Однако учет поправки за счет силового оператора сохраняет структуру хаббардовских зон и поэтому не дает качественного отличия точной функции Грина от функции Грина в приближении Хаббард-I. Второе важное отличие — перенормировка вещественной части массового оператора $\hat{\Sigma}_{k\sigma}(E)$ и появление эффектов затухания квазичастиц. Последнее означает,

что мы имеем дело с неферми-жидкостным поведением и рассматриваем, как это обсуждалось выше, область $\text{Im} \Sigma_k(\epsilon_F) = 0$. В этой области точная функция Грина (9) может быть переписана в виде суммы однополосных вкладов по зонам квазичастиц, нумеруемых индексом ξ (для t - J -модели ξ принимает одно значение $\xi = 1$, а для модели Хаббарда $\xi = 1, 2$). В общем многозонном случае

$$G_{k\lambda\sigma}(E) = \sum_{\xi} \frac{F_{k\lambda\sigma}(\xi)}{E - \Omega_{k\sigma}(\xi) + \mu + i\eta}. \quad (12)$$

Здесь вклад от вещественной части массового оператора входит не только в перенормировку закона дисперсии, но и в перенормировку спектрального веса. Такое же представление для электронной функции Грина было получено ранее в модели Хаббарда в рамках SDA (Spectral Density Approach) [16]. Этот подход является непертурбативным и предполагает лишь отсутствие затухания квазичастиц. Спектральные веса $F_{k\lambda\sigma}(\xi)$ и зонные энергии $\Omega_{k\sigma}(\xi)$ вычисляются в SDA методом моментов (см. обзор и сравнение с другими методами в [17]).

Что касается перенормировки вещественной части массового оператора, то этот эффект дает поправки к энергетическому спектру $\Omega_{k\sigma}(\xi)$ и качественно не меняет дальнейших рассуждений. Тот факт, что даже в приближении Хаббард-I правильно отражена структура функции Грина (а именно структура функции Грина важна для дальнейшего вывода теоремы Латтинжера), следует из сравнения решения Хаббард-I с точным решением в пределе бесконечной размерности методом динамической теории среднего поля [4,5], а также с решением численно точным квантовым методом Монте-Карло для модели Хаббарда (QMC) [18], где путем сравнения спектральных плотностей, полученных в приближении Хаббард-I при $U \gg W$ и в расчетах QMC, показано численное совпадение в той области фазовой диаграммы, где отсутствует дальний магнитный порядок. В рамках диаграммной техники для X -операторов также продемонстрировано, что в этом приближении получаются простые и наглядные соотношения, правильно отражающие физику явлений при $U \gg t$ [13,19].

Далее, пользуясь спектральной теоремой, из (12) и (7) получаем

$$\begin{aligned} \langle n_{k\lambda\sigma} \rangle &= \int dE f_F(E) \sum_{\xi} F_{k\lambda\sigma}(\xi) \delta(E - \Omega_{k\sigma}(\xi) + \mu) \\ &= \sum_{\xi} F_{k\lambda\sigma}(\xi) f_F(\Omega_{k\sigma}(\xi) - \mu). \end{aligned} \quad (13)$$

Учитывая, что в парамагнитной фазе величины, входящие в (13), не зависят от спина, можно записать выражение для $\langle N \rangle$ при нулевой температуре в достаточно

компактном виде

$$\langle N \rangle = \sum_{k,\lambda} \langle n_{k\lambda\sigma} \rangle = \sum_{k,\xi} F_k(\xi) \theta(\mu - \Omega_k(\xi)), \quad (14)$$

$$F_k(\xi) = 2 \sum_{\lambda} F_{k\lambda\sigma}(\xi). \quad (15)$$

Для системы невзаимодействующих частиц $F_k(\xi) = 1$, и выражение для $\langle N \rangle$ в этом случае полностью совпадает с (2). Далее из (14) для системы взаимодействующих квазичастиц получаем

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\xi} \int dk F_k(\xi) \theta(\mu - \Omega_k(\xi)) \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\xi} V_{FS}^{\xi}. \end{aligned} \quad (16)$$

Сравнивая (2) и (16), находим

$$V_{FS}^0 = \sum_{\xi} V_{FS}^{\xi}, \quad (17)$$

где V_{FS}^{ξ} — объем энергетической подзоны ξ с учетом спектрального веса $F_k(\xi)$ этой подзоны,

$$V_{FS}^{\xi} = \int dk F_k(\xi) \theta(\mu - \Omega_k(\xi)). \quad (18)$$

Выражение (17) и представляет собой обобщенную теорему Латтинжера: в правой части равенства вместо объема V_{FS} стоит суперпозиция объема V_{FS}^{ξ} для разных энергетических подзон ξ , причем каждое состояние $|k, \sigma\rangle$ для зоны ξ входит с уменьшенным спектральным весом.

Фактически это означает, что k -пространство под Ферми-поверхностью стало „менее плотным“. Действительно, воспользуемся соотношением $m_{FS} = \rho_{FS} V_{FS}$, где m_{FS} — „масса“ Ферми-поверхности, ρ_{FS} — ее „плотность“, V_{FS} — объем. Очевидно, что „масса“ m_{FS} пропорциональна среднему числу частиц $\langle N \rangle$, а ρ_{FS} является спектральным весом квазичастиц под поверхностью Ферми. Для системы без взаимодействия имеем $m_{FS}^0 = \rho_{FS}^0 V_{FS}^0$. Далее (поскольку $m_{FS} = m_{FS}^0$) $\rho_{FS} V_{FS} = \rho_{FS}^0 V_{FS}^0$ и

$$V_{FS} = \frac{1}{\rho_{FS}} V_{FS}^0, \quad (19)$$

так как для системы в отсутствие взаимодействия $\rho_{FS}^0 = 1$. Видно, что $V_{FS} \neq V_{FS}^0$, если квазичастицы имеют спектральный вес, отличный от единицы. Именно этот случай ($\rho_{FS} \leq 1$) реализуется в системах с СЭК. С другой стороны, величина (19) является инвариантной относительно наличия взаимодействия в системе, и поэтому обобщение теоремы Латтинжера на случай квазичастиц имеет следующий вид: объем Ферми-поверхности системы невзаимодействующих частиц равен объему Ферми-поверхности квазичастиц с взаимодействием

с учетом спектрального веса этих квазичастиц. Именно в таком виде эта теорема выполняется как для зонных электронов, так и для квазичастиц в металлических системах с СЭК в пределе $U \gg W$.

Отличие спектрального веса от единицы можно рассматривать как переход к пространству с другой метрикой. Это продемонстрировано в разделе 4, где показано, что при таком подходе инвариантом является как раз (19), а не (1).

2. t - J -модель

В X -представлении гамильтониан модели Хаббарда [11] имеет вид

$$\begin{aligned} H &= \sum_{f,\sigma} \left((\varepsilon - \mu) (X_f^{\sigma\sigma} + X_f^{SS}) + \frac{U}{2} X_f^{SS} \right) \\ &+ \sum_{f \neq g, \sigma} t_{fg} (X_f^{\sigma 0} + 2\sigma X_f^{S\bar{\sigma}}) (X_g^{0\sigma} + 2\sigma X_g^{\bar{\sigma} S}). \end{aligned} \quad (20)$$

Гамильтониан t - J -модели получается из модели Хаббарда (20) в пределе сильного кулоновского взаимодействия $U \gg t$,

$$\begin{aligned} H_{t-J} &= \sum_{f,\sigma} (\varepsilon - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{f \neq g, \sigma} t_{fg} X_f^{\sigma 0} X_g^{0\sigma} \\ &+ J \sum_{f \neq g} \left(\mathbf{S}_f \mathbf{S}_g - \frac{1}{4} n_f n_g \right), \end{aligned} \quad (21)$$

где t_{fg} — интеграл перескока, J — обменный интеграл, \mathbf{S}_f и n_f — операторы спина и числа частиц соответственно. Поскольку здесь присутствует только один фермиевский корневой вектор — $\{X_f^{0\sigma}\} \leftrightarrow \{X_f^1\}$, функция Грина в области $\text{Im } \Sigma_k(E) = 0$ имеет вид

$$D_{k\sigma}(E) = \frac{F(1)}{E - E_k + \mu}, \quad (22)$$

где $F(1)/2 = (1-x)/2$ — спектральный вес единственной зоны $\xi = 1$, E_k — спектр системы в приближении Хаббарда-1,

$$E_k = \varepsilon + t_k \left(\frac{1-x}{2} \right) - \frac{J}{2} \left(\frac{1+x}{2} \right). \quad (23)$$

Здесь $t_k = 2t(\cos k_x + \cos k_y)$ — Фурье-образ интеграла перескока в случае квадратной решетки. Число частиц равно

$$\langle N \rangle = \sum_{k,\sigma} \langle X_k^{\sigma 0} X_k^{0\sigma} \rangle = \sum_k (1-x) f_F(E_k - \mu). \quad (24)$$

При нулевой температуре

$$\langle N \rangle = \sum_k (1-x) \theta(\mu - E_k). \quad (25)$$

Это выражение совпадает с (14). Отсюда для объема Ферми-поверхности $V_{FS}^0 = F(1)V^- = (1-x)V^-$, где

$V^- = \int dk \theta(\mu - E_k)$. Для многозонных моделей, таких как модель Хаббарда, из-за сильных корреляций спектральный вес квазичастиц перераспределяется между зонами. Здесь же мы имеем всего лишь одну зону, но ее спектральный вес меньше единицы (см. (25)) поскольку часть спектрального веса уходит в верхнюю хаббардовскую зону, которая была учтена только в рамках теории возмущений по параметру $t/U \ll 1$ при выводе t - J -модели из модели Хаббарда и в явном виде не присутствует в гамильтониане (21) из-за условия запрета (constraint) двухчастичных возбуждений $\langle X_f^{SS} \rangle \rightarrow 0$.

3. Модель Хаббарда

Базисными фермиевскими операторами для модели Хаббарда (20) являются $\{X_f^{0\sigma}, X_f^{\bar{\sigma}S}\} \leftrightarrow \{X_f^1, X_f^2\}$, где $|S\rangle = |\uparrow, \downarrow\rangle$ — двухчастичный синглет, $|0\rangle$ — вакуумное состояние, $|\sigma\rangle, |\bar{\sigma}\rangle$ — одночастичный синглет. Функция Грина имеет вид

$$\hat{D}_{k\sigma}(E) = \frac{1}{\det} \times \begin{pmatrix} \frac{F(1)}{2} (E - \varepsilon + \mu - U - t_k \frac{1+x}{2}) & 2\sigma t_k (\frac{F(2)}{2})^2 \\ 2\sigma t_k (\frac{F(1)}{2})^2 & \frac{F(2)}{2} (E - \varepsilon + \mu - t_k \frac{1-x}{2}) \end{pmatrix}, \quad (26)$$

где $\det = (E - E_k^+ + \mu)(E - E_k^- + \mu)$, $F(1)/2 = (1 - x)/2$ и $F(2)/2 = (1 + x)/2$ — факторы заполнения нижней и верхней хаббардовских зон соответственно. Энергетический спектр системы есть

$$E_k^\pm = (t_k + U \pm \sqrt{t_k^2 + U^2 + 2t_k U x})/2. \quad (27)$$

С помощью функции Грина (26) легко получить выражение для числа частиц

$$\langle N \rangle = \sum_k \left(\left(1 + \frac{x(U + t_k x)}{E_k^+ - E_k^-} \right) f_F(E_k^+ - \mu) + \left(1 - \frac{x(U + t_k x)}{E_k^+ - E_k^-} \right) f_F(E_k^- - \mu) \right). \quad (28)$$

Это выражение совпадает с (14). Выражения в скобках, стоящие перед фермиевскими функциями, представляют собой спектральные веса верхней и нижней хаббардовских зон соответственно. Их сумма (с учетом спина), как и должно быть, равна спектральному весу невзаимодействующих электронов. Теперь исследуем (28) в режиме сильного кулоновского отталкивания $U \gg t$. В этом случае можно разложить знаменатель $E_k^+ - E_k^-$ по малому параметру $t/U \ll 1$. Пренебрегая членами второго порядка малости, получаем

$$\langle N \rangle = \sum_k ((1 + x)f_F(E_k^+ - \mu) + (1 - x)f_F(E_k^- - \mu)). \quad (29)$$

При нулевой температуре

$$\langle N \rangle = \sum_k ((1 + x)\theta(\mu - E_k^+) + (1 - x)\theta(\mu - E_k^-)). \quad (30)$$

Соотношение для объемов Ферми-поверхностей имеет вид

$$V_{FS}^0 = F(2)V^+ + F(1)V^- = (1 + x)V^+ + (1 - x)V^-, \quad (31)$$

где $V^\pm = \int dk \theta(\mu - E_k^\pm)$. Хорошо видно, что за счет сильного кулоновского взаимодействия происходит перераспределение спектрального веса между нижней и верхней подзонами. Это именно тот эффект, который приводит к необходимости обобщения теоремы Латтинжера для систем с СЭК.

Из (29)–(31) видно явное расщепление на две хаббардовские зоны. Поэтому можно легко перейти от модели Хаббарда к t - J -модели: достаточно просто пренебречь влиянием верхней (или нижней) зоны, поскольку зоны

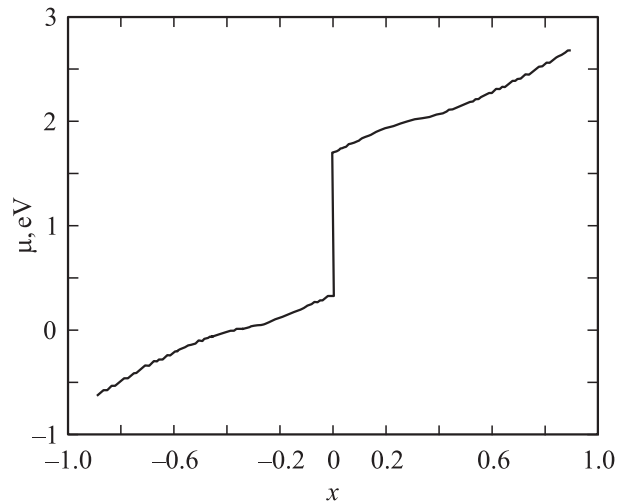


Рис. 2. Зависимость химического потенциала μ от x .

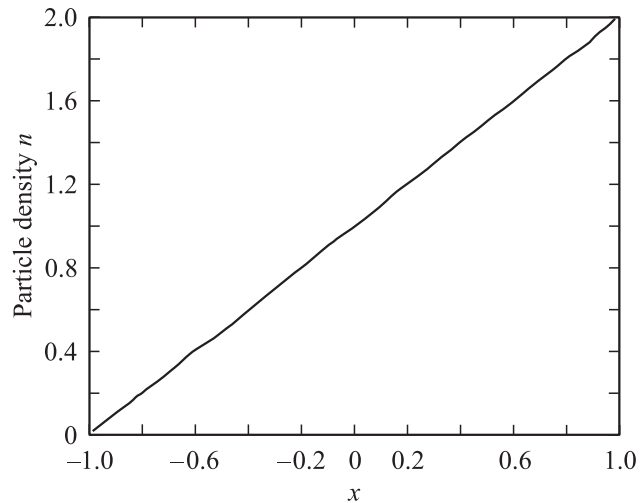


Рис. 3. Зависимость плотности частиц $n = \langle N \rangle / N$ (N — число векторов в импульсном пространстве) от x .

разделены щелью U ; межзонные перескоки уже были исключены разложением по t/U . Для чисел заполнения сразу получаем

$$\lim_{U \rightarrow \infty} \langle N \rangle = \sum_k (1-x) f_F(E_k^- - \mu). \quad (32)$$

Это совпадает с выражением, полученным нами для числа частиц в t - J -модели (24). Таким образом, „утекание“ спектрального веса в t - J -модели является лишь следствием использованных приближений ($t/U \ll 1$), а не спонтанным его исчезновением.

На рис. 2, 3 приведены результаты расчетов для нулевой температуры при $U = 10|t|$, $t = -0.2$ eV. Для случая конечных температур также были проведены расчеты, но качественного отличия от случая нулевых температур не обнаружено. Результат самосогласованного расчета химического потенциала μ по уравнению (28) приведен на рис. 2. На рис. 3 представлена зависимость плотности частиц $n = \langle N \rangle / N$, рассчитанная по уравнению (29), от x . Хорошо видно, что эта зависимость имеет линейный характер и, более того, $n = 1 + x$. Фактически такое равенство означает, что обобщенная теорема Латтинжера выполняется. Действительно, слева в (29) стоит число частиц, вычисленное с учетом взаимодействия в системе, а справа — число невзаимодействующих частиц. А равенство этих двух величин как раз и является исходной посылкой для выполнения равенства объемов Ферми-поверхностей, умноженных на соответствующие спектральные веса (31).

4. Подход к квазичастичному описанию как к преобразованию метрического пространства

Пусть \mathbf{e}_μ — естественный репер, ассоциированный с криволинейной (в общем случае) системой координат x^μ . В дальнейшем верхние индексы обозначают контравариантные величины, а нижние — ковариантные. Метрический тензор определяется следующим образом:

$$g_{\mu\nu} = (\mathbf{e}_\mu \cdot \mathbf{e}_\nu). \quad (33)$$

При переходе к новым координатам y^μ имеем

$$\mathbf{e}_\mu = a_\mu^\nu \mathbf{e}'_\nu,$$

$$g_{\mu\nu} = (\mathbf{e}_\mu \cdot \mathbf{e}_\nu) = a_\mu^\rho a_\nu^\eta (\mathbf{e}_\rho \cdot \mathbf{e}_\eta) = a_\mu^\rho a_\nu^\eta g'_{\rho\eta},$$

где $a_\mu^\nu = \frac{\partial y^\nu}{\partial x^\mu}$ — коэффициенты преобразования осей.

Элемент объема n -мерного пространства по определению равен

$$d\tau = dx^1 dx^2 \dots dx^n. \quad (34)$$

При этом инвариантным относительно перехода к другой системе координат является не элемент объема $d\tau$, а величина $\sqrt{-g} d\tau$, где $g = \det g_{\mu\nu}$ — детерминант, образованный из компонент метрического тензора, т. е.

$$\sqrt{-g'} d\tau' = \sqrt{-g} d\tau. \quad (35)$$

Теперь рассмотрим два n -мерных пространства: одно для квазичастиц со спектральным весом ρ' (величины, относящиеся к этому пространству, в дальнейшем будем обозначать штрихами), другое для квазичастиц со спектральным весом ρ . Очевидно, переход между этими двумя системами координат возможен при простом изменении масштаба осей, т. е. $a'_\mu^\nu = \sqrt{\rho/\rho'}$. Соответствующее преобразование метрического тензора имеет вид

$$g_{\mu\nu} = \left(\frac{\rho}{\rho'}\right)^{2/n} g'_{\mu\nu}. \quad (36)$$

Отсюда и из (35) получаем соотношение для элементов объемов

$$d\tau = \frac{\rho'}{\rho} d\tau', \quad (37)$$

которое (при $\rho' = 1$) совпадает с (19). Аналогичное соотношение имеет место в гидродинамической теории для сжимаемой жидкости. Таким образом, в случае квазичастиц со спектральным весом меньше единицы мы имеем дело не с нормальной Ферми-жидкостью, а с ее разновидностью, которую можно по аналогии с гидродинамикой назвать сжимаемой Ферми-жидкостью. Теорема Латтинжера в ее оригинальной форме выполняется только для квазичастиц со спектральным весом, равным единице, что определяет ограниченность ее применения. В системах с различными спектральными весами сохраняющейся величиной является (35), а не объем Ферми-поверхности, т. е. скалярная плотность $\sqrt{-g'} d\tau'$ системы невзаимодействующих квазичастиц равна скалярной плотности квазичастиц с взаимодействием $\sqrt{-g} d\tau$. Легко видеть, что теорема Латтинжера [1] является частным случаем этого утверждения.

Одним из вопросов в теории СЭК является выполнимость теоремы Латтинжера. Этот вопрос наиболее остро встает при описании высокотемпературных сверхпроводников, поскольку они принадлежат к классу систем с СЭК. В работах [9,10,18] в рамках модели Хаббарда показано, что для недодопированных образцов ($x < x_{\text{opt}}$) теорема Латтинжера [1] не выполняется. Это является следствием наличия в недодопированном режиме ближнего магнитного порядка и связанных с ним спиновых флуктуаций. Однако для передопированной области ($x > x_{\text{opt}}$), где имеет место парамагнитное металлическое состояние, нарушения теоремы Латтинжера не происходит. Действительно, теорема Латтинжера в ее оригинальной формулировке (1) не выполняется для систем с СЭК. Но дело в том, что само доказательство теоремы (1) непригодно для таких систем: при доказательстве не учитывается отличие спектрального веса квазичастиц от единицы, а такое отличие как раз и является одной из замечательных особенностей систем с СЭК [13]. Вследствие этого в данной работе в рамках приближения Хаббард-I сформулирована обобщенная на случай квазичастичного описания теорема Латтинжера (17). Качественный анализ (19) такого обобщения, а также аналитически точный вывод

соотношения для скалярных плотностей (37) показал и, что при квазичастичном описании k -пространство под Ферми-поверхностью становится более „рыхлым“ (или, другими словами, „менее плотным“): вклад каждого состояния перенормируется уменьшенным спектральным весом соответствующей квазичастицы.

При переходе в импульсное пространство имеется набор квантовых ячеек, в каждой из которых может находиться один электрон или (с учетом принципа Паули) два электрона с противоположными спинами. Из всего набора квантовых состояний в ячейке за счет СЭК часть состояний удалится по энергии на бесконечность. Из-за этого оставшиеся состояния имеют спектральный вес F меньше единицы, поэтому квазичастичные возбуждения в такой системе оказываются перенормированными и несут спектральный вес $F < 1$. Именно этим обусловлена „рыхлость“ k -пространства.

Из соотношения для скалярных плотностей (37) видно, что мы имеем дело со сжимаемой Ферми-жидкостью. При этом нормальная Ферми-жидкость является подклассом сжимаемой Ферми-жидкости, и этот подкласс реализуется только при равенстве спектральных весов квазичастиц единице. Именно для случая сжимаемой Ферми-жидкости сформулирована обобщенная теорема Латтинжера, а эффекты СЭК приводят к необходимости отступления от описания системы как нормальной Ферми-жидкости.

В настоящей работе рассмотрены такие базовые модели СЭК, как t - J -модель и модель Хаббарда. Показано, что в несверхпроводящей парамагнитной фазе эти модели удовлетворяют обобщенной теореме Латтинжера. В модели Хаббарда спектральный вес перераспределяется между хаббардовскими подзонами; в t - J -модели происходит „утекание“ спектрального веса, поскольку часть состояний удалена на бесконечность за счет СЭК (верхняя хаббардовская подзона отделена от нижней зоны щелью $U \gg t$).

Авторы выражают благодарность В.В. Валькову за ценные замечания.

Список литературы

- [1] J.M. Luttinger. Phys. Rev. **119**, 4, 1153 (1960).
- [2] M. Oshikawa. Phys. Rev. Lett. **84**, 15, 3370 (2000).
- [3] W. Metzner, D. Vollhardt. Phys. Rev. Lett. **62**, 3, 324 (1989).
- [4] X.Y. Zhang, M.J. Rozenberg, G. Kotliar. Phys. Rev. Lett. **70**, 1666 (1993).
- [5] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M.J. Rozenberg. Rev. Mod. Phys. **68**, 1, 13 (1996).
- [6] D.M. Edwards, J.A. Hertz. Physica B **163**, 527 (1990).
- [7] Th.A. Maier, Th. Pruschke, M. Jarrell. Phys. Rev. B **66**, 7, 075 102 (2002).
- [8] Ю.А. Изюмов. УФН **165**, 4, 403 (1995).
- [9] J. Schmalian, M. Langer, S. Grabowski, K.N. Bennemann. Phys. Rev. B **54**, 6, 4336 (1996).
- [10] J. Beenen, D.M. Edwards. Phys. Rev. B **52**, 18, 13 636 (1995).
- [11] J.C. Hubbard. Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963).
- [12] J.C. Hubbard. Proc. Roy. Soc. A **277**, 237 (1964).
- [13] В.В. Вальков, С.Г. Овчинников. Квазичастицы в сильно коррелированных системах. Изд-во СО РАН, Новосибирск (2001). 277 с.
- [14] В.Г. Барьяхтар, В.Н. Криворучко, Д.А. Яблонский. Функции Грина в теории магнетизма. Наук. думка, Киев (1984). 336 с.
- [15] Р.О. Зайцев. ЖЭТФ **70**, 3, 1100 (1976).
- [16] W. Nolting. Z. Phys. B: Cond. Matter. **255**, 25 (1972).
- [17] T. Herrmann, W. Nolting, J. Magn. Mater. **170**, 253 (1997).
- [18] C. Grober, R. Eder, W. Hanke. Phys. Rev. B **62**, 7, 4336 (2000).
- [19] Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрыбин. Базовые модели в квантовой теории магнетизма. Изд-во УрО РАН, Екатеринбург (2002). 260 с.