

1 028

И 201

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

УДК 530.145, 531.19, 538.1

ИВАНОВ Валерий Александрович

КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ
В УЗКОЗОННЫХ СИСТЕМАХ ЭЛЕКТРОНОВ

Специальность: 01.04.02 - теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Дубна 1991

Работа выполнена в Ордена Ленина Институте общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова АН СССР

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук
академик АН СССР

В. А. МОСКАЛЕНКО

доктор физико-математических наук

И. В. САДОВСКИЙ

доктор физико-математических наук

А. С. ШУМОВСКИЙ

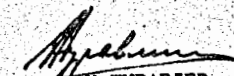
Ведущая организация: Институт металлофизики АН УССР

Защита диссертации состоится "_____" 1991 г.
в "_____" часов на заседании Специализированного Совета
Д 047.01.01 Лаборатории теоретической физики
Объединенного института ядерных исследований
(г. Дубна Московской обл.)

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ

Автореферат разослан "_____" 1991 г.

Ученый секретарь
Специализированного Совета
кандидат физико-математических наук


В. И. ЖУРАВЛЕВ

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Фундаментальные и прикладные аспекты изучения конденсированного состояния вещества все четче выявляют важную роль внутриатомных корреляций электронов в таких реальных материалах как соединения и сплавы переходных металлов, высокотемпературные сверхпроводники, квазиодномерные магнетики, донорно-акцепторные молекулярные кристаллы и др. Малая область локализации волновых функций их электронов обеспечивает сильные внутриатомные корреляции, повышенные значения нормального сопротивления металлических фаз, узость энергетических зон и многие отличия от широкозонных материалов с несущественными электрон-электронными корреляциями. С другой стороны, традиционная модель Хаббарда или версии полярной модели коррелированных электронов рассматривают лишь s-электроны с изотропным туннелированием. В реальных материалах электроны бывших недостроенных оболочек атомов имеют ненулевой орбитальный момент l , их хаббардовское одноорбитальное отталкивание I дополняется межорбитальными кулоновским U и хундовским J взаимодействиями, а угловая симметрия волновых функций электронов обуславливает анизотропию их туннелирования в кристалле. Поэтому возникают задачи построения теории конденсированных сред с коррелированными электронами $I \neq 0$. Актуальность этих задач обусловлена также открытием высокотемпературной сверхпроводимости: состояние ВТСП находится вблизи фазовых переходов металл-диэлектрик и антиферромагнетик-парамагнетик.

Важно подчеркнуть, что корреляционные эффекты не могут быть изучены в классической одноэлектронной теории Блоха-Вильсона, в рамках расчетных схем метода сильной связи типа Слэйтера-Костера

для невзаимодействующих электронов, а иногда их исследование требует точного решения. Традиционное приближение сильносвязанных электронов непоследовательно в том смысле, что оно считается тем более пригодным, чем больше расстояние между ионами в кристалле. В этом случае эффекты туннелирования - малые величины первого порядка, когда как главные члены гамильтонианов, описывающие внутриатомные взаимодействия электронов (корреляции), не принимаются надлежащим образом во внимание и их нельзя учесть приближением среднего поля. Последовательное описание корреляционных эффектов в коллективизированных системах невозможно также и в рамках одноэлектронных операторов, которые являются с-числами. Необходимость введения при этом многоэлектронных операторов с перестановочными соотношениями, линейными по самим операторам, отмечалась еще Н. Н. Боголюбовым (1949) при описании им полярной модели металла. В модели Гайзенберга для ряда задач рассматривалась внутренняя структура спина атома (И. А. Изъмов, 1957; И. П. Ирхин, 1966; Л. А. Максимов, А. Л. Куземский, 1969). В модели Хаббарда учет внутриатомных обменных взаимодействий позволял получать энергетическую выгодность ферромагнитной фазы (Л. А. Максимов, К. А. Никоин, 1969), предпринимались попытки исследования спектра 2-орбитально вырожденной модели Хаббарда с корреляциями I, U, J (Е. В. Кузьмин, 1979). Однако, последовательный квантово-статистический учет корреляционных эффектов в системе электронов с $l \neq 0$ отсутствовал.

Таким образом, насущной представляется актуальная задача построения пертурбативной теории для X -операторов с учетом орбитального вырождения коррелированных электронов, разработка расчетных методов электронной структуры узкозонных систем

электронов, формулировка и развитие различных моделей коррелированных электронов, в том числе интегрируемых, исследование свойств коррелированных ферми-систем, определяющих характеристики широкого класса материалов.

Основная цель работы состоит в теоретическом исследовании корреляционных эффектов в узкозонных системах электронов различной размерности:

- разработка метода сильной связи (квазисвязанных электронов), диаграммной техники и точных решений в случае орбитального вырождения и гетерофазного состояния;

- исследование состояний упорядоченной (соизмеримой волны зарядовой плотности) и смешанной валентности, и построение теории фазовых переходов диэлектрик-металл в системах орбитально-вырожденных электронов;

- изучение фазовых переходов из состояния с волной зарядовой плотности в разупорядоченное состояние;

- выяснение причин диэлектризации систем 3d-электронов с кубической и гексагональной симметрией (задача Р. Пауэрса, 1937);

- рассмотрение возможности металлического ферромагнетизма в однозонной системе электронов (задача Я. И. Френкеля, 1928, Ф. Блоха, 1929) и антиферромагнетизма;

- исследование отклика на внешние электрические и магнитные поля сильнокоррелированных электронов, их сходства и различия со свойствами ферми-жидкости;

- анализ возможности ВТСП в безмедных системах сильнокоррелированных электронов, выяснение влияния кулоновского взаимодействия электронов на свойства сверхпроводящего конденсата.

Научная новизна. Полученные результаты составляют основу

нового научного направления в теоретической физике конденсированных сред: теорию узкозонных систем коррелированных электронов с орбитальным вырождением.

В работе впервые: предложена диаграммная техника атомных X-операторов для узкозонных систем орбитально-вырожденных электронов в базисах соответствующих супералгебр; разработан метод сильной связи (квазисвязанных) коррелированных электронов, решена задача о причинах диэлектризации систем 3d-электронов, в них получены фазовые переходы диэлектрик-металл различных типов, в газовом приближении вычислены характеристики электронной структуры для простых кристаллических решеток; изучены квазичастичные возбуждения в коррелированных моделях реальных соединений различной размерности; найдены точные решения в квадратурах для цепочки Хаббардовских атомов с двукратно вырожденными по орбитальному моменту коррелированными электронами и антиферромагнетика Бете; в моделях Хаббарда и Эмери-Херша вычислены температуры Нееля и построены соответствующие антиферромагнитные фазовые диаграммы; рассмотрена задача о возможности металлического ферромагнетизма в однозонной системе электронов; вычислен поляризационный оператор ферми-возбуждений с учетом сильных корреляций; предсказаны немонотонная зависимость T_c от числа носителей и медных слоев в ВТСП-купратах и возможность существования ВТСП-ванадатов; оценено влияние кулоновского взаимодействия электронов на свойства сверхпроводящего конденсата.

Научная значимость и практическая ценность. Выполненные работы служат более глубокому пониманию физических явлений, обусловленных корреляционными эффектами в неидеальных ферми-системах. Изложенные в диссертации идеи и результаты получили

признание, используются в исследованиях научных центров страны и за рубежом, цитируются в монографиях и обзорах, применяются для интерпретации экспериментальных данных. Развитый теоретический подход позволяет последовательно и систематически учитывать одноорбитальные и меорбитальные внутриатомные корреляции электронов в реальных материалах. Его применение позволило объяснить ряд экспериментальных данных, например: диэлектрическое состояние оксидов переходных металлов с различными кристаллическими структурами и их фазовые переходы диэлектрик-металл Мотта-Хаббарда; электронную структуру магнетита, его состояния упорядоченной и смешанной валентности и высокотемпературный электрон-фононный фазовый переход диэлектрик-металл, электронные фазовые переходы сплавов переходных металлов и влияние немагнитных примесей на время релаксации электронов в ферромагнитных металлах; температуры антиферромагнитного упорядочения нормальных фаз ВТСП; линейную температурную зависимость нормального сопротивления ВТСП и влияние на него малых флюэнсов быстрых нейтронов; кривые Слэйттера-Полинга металлических ферромагнетиков; выявленную универсальную зависимость $T_c/T_c^{\text{макс}}$ в ВТСП-купратах от числа носителей тока; различие сверхпроводящих щелей в La-ВТСП и в ВТСП различных классов.

На защиту выносятся следующие основные положения и результаты:

1. Диаграммный метод для систем сильнокоррелированных электронов, вырожденных по проекции орбитального момента.
2. Метод сильной связи коррелированных электронов в кристаллической решетке, обобщающий расчетную схему Слэйттера-Костера для невзаимодействующих электронов.
3. Точные решения одномерной модели Хаббарда с орбитальным

вырождением и спиновой цепочки Бете.

4. Задачи о причинах диэлектрического и ферромагнитного состояний систем сильнокоррелированных электронов.

5. Теория фазовых переходов металл-диэлектрик в неидеальных ферми-системах с 3d-электронами.

6. Антиферромагнитная фазовая диаграмма модели Хаббарда и системы 2p-3d электронов, моделирующей ВТСП-купраты.

7. Поляризационный оператор систем сильнокоррелированных электронов, обусловленный процессами их неупругого рассеяния.

8. Вычисленные в газовом приближении характеристики коррелированных ферми-систем с различной кристаллической симметрией.

9. Влияние примесей на время релаксации в узкозонных системах электронов с металлической проводимостью.

10. Электронные фазовые переходы в коррелированных ферми-системах.

11. Изучение электрон-дырочной симметрии коррелированных моделей ванадатов и ВТСП-купратов и строения их электронной структуры. Предсказание классов ВТСП-ванадатов.

12. Исследование влияния кулоновского взаимодействия электронов на свойства сверхпроводящего конденсата.

О личном вкладе автора. Изложенные в диссертации результаты получены лично соискателем либо при его непосредственном участии.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 15 глав, объединенных в пять частей, после каждой из которых следуют выводы, общего заключения и содержит 42 рис. и список цитированной литературы из 287 наименований. Объем диссертационной работы составляет 329 стр. машинописного текста. Использована сквозная нумерация глав, формулы нумеруются по

главам.

Апробация работы и публикации. Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на всесоюзных конференциях, симпозиумах и семинарах по физике магнитных явлений (Харьков - 1979, Пермь - 1981, Тула - 1983, Донецк - 1985), по аморфному магнетизму и актуальным вопросам физики и химии соединений на основе РЗЭ (Красноярск - 1978, 1989), по двухэлектронным процессам в неорганических материалах (Черноголовка - 1986, 1989), по современным проблемам статистической физики (Львов - 1987), по проблемам ВТСП (Заречный - 1987, Донецк - 1988, Киев - 1989, Харьков - 1991), по физико-химическим основам технологии сегнетоэлектрических и родственных материалов (Звенигород - 1988), по физике низких температур (Ленинград - 1988), по физико-химии и технологии ВТСП (Москва - 1988), по квантовой химии и спектроскопии твердых тел (Свердловск - 1989), по неоднородным электронным состояниям (Новосибирск - 1989, 1991), на XIV Менделеевском съезде по общей и прикладной химии (Ташкент - 1989), на всесоюзных школах по статистической физике (Владивосток - 1985, 1989), на всесоюзных школах-симпозиумах по теоретической физике "Коуровка XIX" - "Коуровка-XXIII". Результаты диссертации представлялись и докладывались на международных конференциях и симпозиумах по избранным проблемам статистической механики (Дубна - 1987), по органическим материалам в электронике (Ташкент - 1987), по физике переходных металлов и магнетизму (Киев - 1988, Питтсбург - 1991), по ВТСП (Триест - 1988, Интерлакен - 1988, Стэнфорд - 1989, Бангалор - 1990, Канадзава - 1991), по РЭС (Гонолулу - 1989), по тройным и многокомпонентным соединениям (Кипинев - 1990), на межд. семинарах по ВТСП (Дубна - 1988, 1989, 1990, Заречный - 1990, Таллинн - 1989), по эффекту Яна-

Теллера (Кишинев - 1989), на школе-конференции стран НАТО по теории ВТСП (Каржес - 1990). Результаты диссертационной работы обсуждались на научных конференциях и семинарах ИОНХ им. Н. С. Курнакова АН СССР, ЛТФ ОИЯИ, ИФП им. П. Л. Капицы АН СССР, ИАЭ им. И. В. Курчатова, ИХФ им. Н. Н. Семенова АН СССР, ФИ АН СССР, физ. и хим. ф-тах МГУ, ИФМ УрО АН СССР, ИМФ и ИТФ АН УССР, ИФФ АН ССРМ и др.

По материалам диссертации опубликовано более 80 работ, 4 препринта, 2 обзора, некоторые результаты представлены в отчетах по теоретическому проекту N 342 "Хабор" Государственной программы по высокотемпературной сверхпроводимости. Основные результаты диссертации опубликованы в 24 работах, список которых помещен в конце автореферата.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснована актуальность темы, сформулированы цели исследования, новизна и защищаемые положения, кратко изложено содержание диссертации.

В первой части развит общий метод сильной связи в теории конденсированных сред с коррелированными электронами и изучены квазичастичные возбуждения в неидеальных ферми-системах.

В I главе изложен метод выбора базиса атомных операторов для коррелированных электронов, вырожденных по проекции орбитального момента. Показано, что такие X-операторы совпадают с тензор-операторами Окубо, а их базис - базис супералгебры $sp(2m, n)$, где m и n - число одноячеечных термов, заселенных четным и нечетным числом ферми-частиц. Использование принципа электронейтральности Полинга и правила Хунда позволяет понизить ранг используемых для

расчета конкретных соединений супералгебр до числа основных уровней $2k+1$ и полярных $2k^2$, где k - число электронов в основном терме. Обобщаемый диаграммный метод основан на рекуррентной процедуре Вика по образцу (В.Г. Вакс, А.И. Ларкин, С.А. Пикин, 1967). Наряду с законами сохранения энергетического параметра ω_n , импульса p и корней α (Р.О. Зайцев, 1976) базисных векторов супералгебры в вершинах диаграмм, в предлагаемом диаграммном методе концам линий взаимодействия приписываются генеалогические коэффициенты g_α разложения одноэлектронных ферми-операторов по X-операторам. При помощи доказанной теоремы найдено, что ферми-спектр определяется системой уравнений

$$\det ||t^{ab}(p) - \tau \delta_{ab}|| = 0 \quad (1)$$

$$\sum_{\alpha} g_{\alpha}^2 D_{\alpha}^{(0)}(i\omega_n) = -\tau^{-1}$$

где $t^{ab}(p)$ - анизотропный интеграл переноса электронов между орбиталями "a" и "b" ионов кристалла, а $D_{\alpha(r,s)}^{(0)} = (n_r + n_s) / (i\omega + \epsilon_r - \epsilon_s)$ - нулевая функция Грина, описывающая внутриатомные переходы между термами r и s с заселенностями n_r и n_s . Т.е. 1 - мерное секулярное уравнение Слэитера-Костера (1-степень орбитального вырождения) классического метода сильной связи дополняется вторым уравнением в (1), учитывающим корреляционное расщепление энергетических зон. Недиagonальные элементы $t^{ab} \neq 0$ вызывают расщепление зон, обобщающее расщепление Г. Бете для p -электронов. В случае нескольких атомов в элементарной ячейке кристалла происходит расщепление А.С. Давыдова энергетических зон. Доказана теорема о том, что коррелированные электроны в диэлектрической фазе заполняют некоторое число корреляционных энергетических зон полностью. Предложен метод оценки интегралов переноса по

параметру γ_B/a (a -постоянная решетки, γ_B -радиус Бора), по которому амплитуды интегралов в частных случаях e_g^- и t_{2g} -электронов совпадают с ранними ответами Ф. В. Андерсона.

Во II главе рассмотрены поправки к спектру (1), обусловленные процессами следующих порядков по перескоку и эффектами рассеяния магнитного, кондовского и потенциального, кулоновского типов (на спиновых и зарядовых флуктуациях). Рассчитанные в газовом приближении у краев хаббардовской зоны характеристики неидеальной ферми-системы со взаимодействием выражаются согласно газовой идее (С. Т. Беляев, 1963; В. М. Галицкий, 1963) через борновскую амплитуду электрон-электронного рассеяния, которая может менять знак в пределах корреляционной зоны. Заметим, что при помощи неприводимых функций Грина (Н. М. Плакида, 1970) в модели Хаббарда удается получить общее аналитическое представление для массового оператора, справедливое и в отсутствие малого параметра (А. Л. Куземский, 1973). Полученное в простейшем газовом приближении, ферми-жидкостное поведение сильнокоррелированных частиц резко нарушается при учете их флуктуационного рассеяния, для которого рассчитан массовый оператор. Найдено, что соответствующий вклад в спиновую поляризуемость имеет вид

$$\text{Im}P(p, \omega) = -2\text{sign}\omega \text{th} \frac{W}{2T} - 2\text{sign} \omega (T \ll W) \text{ или } \frac{W}{T} (T \gg W) \quad (2)$$

По порядку величины полуширина зоны W равна плазмонной частоте. Поэтому поляризационный оператор (2) совпадает с постулированным Ч. Вармой (1989) для описания нормальных и сверхпроводящих свойств ВТСП.

Во второй части изучены причины диэлектрического состояния неидеальных ферми-систем, моделирующих конкретные соединения переходных металлов M_n и построена теория их перехода в металлическую фазу в рамках развитого метода сильной связи и

диаграммной техники. Рассмотрены модели материалов типа MO , M_3O_4 и M_2O_3 , кристаллизующихся в соединения основных кубической (III и V главы) и гексагональной (IV глава) симметрий. Вычислены явно энергетические спектры и согласующиеся с экспериментальными диэлектрические щели корреляционной или связанной с корреляциями димерной природы. Рассчитанные квазичастичные спектры выражены через инварианты соответствующих кристаллических структур. Установлено, что за решение проблемы Р. Пайерлса ответственны внутриатомные корреляции электронов: одноорбитальные хаббардовские и межорбитальные кулоновские и хундовские. На основе анализа экспериментальных данных предложена схема электронных термов магнетита Fe_3O_4 ниже точки Вервея T_V , отличная от ранее существовавших (Д. Л. Кампхаузен, Дж. М. Д. Коу, Б. В. Чакраверти, 1972; А. А. Бугаев, Б. П. Захарченя, Ф. А. Чудновский, 1979) учетом корреляционного расщепления. В полярной модели бесспиновых фермионов получен фазовый переход Fe_3O_4 из зарядовоупорядоченного состояния $Fe_A^{3+}Fe_B^{2+/3+}O_4$ в состояние смешанной валентности (ССВ) $Fe_A^{3+}Fe_B^{2.5+}O_4$ с параметром порядка, подчиняющимся условию БКШ: $2\Delta/T_V = 3,53$. Заметим, что такие переходы изучались (С. Г. Овчинников, 1987) в модели экситонного диэлектрика с учетом нестинга (Н. В. Копаев, 1975). В V главе найдено, что внутриатомные корреляции d_{xy} -электронов и анизотропия Δ их интегралов переноса обеспечивает диэлектризацию квазичастичного спектра в феррите Fe_3O_4 выше T_V ; а в частном изотропном случае вычисленный спектр совпадает с результатами (Дж. Р. Куллен, Е. Р. Каллен, 1973), означающими металлизацию ССВ в точке T_V вопреки эксперименту. Рассеяние ферми-возбуждений на флуктуациях орбитальной и спиновой плотностей: обобщение поправок рассеяния и резонансного уширения по терминологии Дж. Хаббарда (1964), - ведет

х. заклопыванию диэлектрических щелей Δ в системах орбитально вырожденных электронов. Точка фазового перехода Мотта металл-диэлектрик определяется формулой (глава VI)

$$g(S)\Delta^2 = \frac{S+1}{S} \quad (3)$$

и зависит от полного спина S основного состояния иона переходного металла в конкретном соединении ($g(e_g^2) = 8/3t^2, g(t_{2g}^3) = 4/9t^2, g(s^1) = 1/4t^2$). В (3) содержится и известный результат для невырожденной модели коррелированных электронов ($S=1/2$, Дж. Хаббард, 1964).

В заключительном параграфе VI главы в гамильтониан сильнокоррелированных бесспиновых фермионов включено электрон-фононное взаимодействие, при помощи которого рассмотрена температурно возрастающая роль рассеяния электронов на колебаниях решетки, существенная в ССВ в соединениях типа магнетита. Температура фазового перехода в металлическое состояние определена из условия появления особенности 2-частичной вершинной части при нулевом передаваемом импульсе:

$$T_t = \frac{\frac{\Delta|t|}{2}^{1/2}}{2(3\lambda_1 + \lambda_2)} \quad (4)$$

Безразмерные величины имеют смысл электрон-фононных констант БКШ. Для характерных значений параметров (4) совпадает с наблюдаемой температурой фазового перехода магнетита в металл.

В третьей части диссертации рассчитаны спектры квазичастиц реалистических систем коррелированных электронов с металлической проводимостью. В каждом случае заполнение зоны определяется химпотенциалом из самосогласованного уравнения на число частиц.

В VII главе рассмотрена обобщенная модель Хаббарда с

туннельными интегралами t и коррелированным $c = \langle i|1/r|j \rangle = 0,5$ эВ (Дж. Хаббард, 1963; Дж. Хаббард, Д. Е. Ример, Ф. Р. А. Хопгуд, 1966; Л. Д. Дидух, И. В. Стасюк, 1968). В беспетельном приближении зоны нормальной разупорядоченной фазы сформированы одночастичными энергиями

$$\xi_p^+ = 1/2 \left(t_p \left(1 + 2q \frac{f_2}{t} \right) + 1 - 2\mu \pm \left(\left(1 + t \left(f_2 \left(1 + \frac{2q}{t} \right) - f_1 \right) \right)^2 + 4f_1 f_2 \left(1 + \frac{q}{t} \right)^2 t_p^2 \right)^{1/2} \right) \quad (5)$$

где $f_1 = n/2, f_2 = 1 - n/2$, а химпотенциал μ задается уравнением на число частиц n :

$$n/2 = \sum_p \frac{(\xi_p^+ - f_1 I + \mu) n_F(\xi_p^+) - (\xi_p^- - f_1 I + \mu) n_F(\xi_p^-)}{\xi_p^+ - \xi_p^-} \quad (6)$$

Физические свойства многокомпонентных соединений переходных металлов определены электронной структурой, сформированной из бывших электронов незастроенных оболочек атомов разных родов, кристаллизованных в подрешетки. В связи с этим здесь рассчитана электронная структура двух хаббардовских подсистем электронов "а" и "в", локализованных на подрешетках с конечными энергиями Хаббарда $I_{a,v}$ и раздвижкой $E_a - E_b$ между одночастичными энергиями. Некоррелированный вариант этой модели широко используется в теории сверхпроводимости, начиная с работ (В. А. Москаленко, 1959; Х. Сул, 1959; Б. Т. Гейликман, 1966).

Адекватные модели оксидов переходных металлов, в частности материалов ВТСП, явно учитывают 2p-электроны кислорода. На основе

развитого подхода в VII главе изучена электронная структура гамильтониана с подсистемой орбитально-невыврожденных $3d(x^2-y^2)$ -электронов меди, отщепленных тетрагональной компонентой кристаллического поля и гибридованных с подсистемой орбитально-вырожденных $2p_{x,y}$ -электронов кислорода (В. Эмери, Х. Херш, Ю. В. Гайдидей, В. М. Локтев, 1987); в выполненных расчетах роль вакуумного состояния выполняют замкнутые оболочки $3d^{10}(Cu^+)$ и $2p^6(O^{2-})$. Аналогичным образом получено аналитическое описание электронной структуры 3-мерных систем на примере кубических перовскитов $A_x^+Ba_{1-x}B^{10}_3$, где роль вакуума играет состояние $4s^2(Bi^{3+}), 2p^6(O^{2-})$.

В VIII главе развиты метод сильной связи и диаграммная техника применены к обобщенным моделям Хаббарда и Эмери-Херша с орбитально-вырожденными e_g^2 -электронами. В беспотельном приближении получены зонные спектры, которые могут моделировать, например, электронные структуры квазидвумерных и трехмерных систем типа $La_{2-x}M_xNiO_4$ и $La_{1-x}MCuO_3$. Так, предположение об орбитальном вырождении электронных уровней в $Ni^{2+}(3d^8)$ означает высокоспиновое по правилу Хунда состояние Ni^{2+} в $La_{2-x}Sr_xNiO_4$ и диэлектризацию спектра правещества La_2NiO_4 , которое в таком случае является диэлектриком Мотта-Хаббарда с наполовину заполненной вырожденной зоной e_g^2 . Эти факты подтверждаются магнитными и резистивными экспериментальными данными (Г. А. Смоленский, В. М. Юдин, В. С. Шер, 1962; Дж. В. Гудинаф, 1982; Ц. Н. Р. Рао, 1980).

В четвертой части диссертации установлена ведущая роль внутриатомных корреляций для характеристик спектров элементарных возбуждений и фазовых переходов в квазиодномерных ферми-системах.

В IX главе для одномерных хаббардовских атомов с четверть

заполненной зоной и альтернированными межатомными связями изучено влияние димеризации и корреляций на квазичастичные спектры. В масштабе энергий $t > t_0$ (внутридимерный интеграл переноса) t междимерный интеграл переноса) строится теория возмущений фактически по параметру t/t_0 , причем генеалогические коэффициенты разложения одноэлектронных операторов по базису X -операторов оказываются функциями энергетических параметров I, t_0 . Полученные спектры квазичастиц могут описывать, например, электронную структуру солей TCNQ. Диаграммный метод позволяет выписывать уравнение Дайсона для димерных гамильтонианов с любым числом электронов $0 \leq k \leq 4$ в димере.

В X главе изучена цепочка сильнокоррелированных электронов, двукратно вырожденных по проекции орбитального момента с интегралами переноса $t_a = t_b$. Найдено, что соответствующее уравнение Шредингера допускает решение в квадратурах на классе волновых функций Бете, симметричных по спину. В этом случае матрица рассеяния удовлетворяет уравнению Янга-Бакстера. В отличие от невырожденной модели Хаббарда моттовский переход возможен здесь при ненулевых внутриатомных корреляциях. При J (Хунд) $\rightarrow 2U$ (Кулон) асимптотика корреляционной щели имеет сходство с результатом (А. А. Овчинников, 1969) для решения Лифа-Ву интегрируемой невырожденной модели Хаббарда:

$$\Delta \rightarrow \frac{8}{\pi} (t(2U-J))^{1/2} \exp\left(-\frac{2\pi t}{2U-J}\right) \quad (7)$$

В XI главе получено точное решение уравнения Шредингера для цепочки спинов, в которой наряду с упорядочивающим обменным взаимодействием J имеется разупорядочивающее кулоновское взаимодействие V соседних электронов (антиферромагнетик

Г. А. Бете, 1931). При наличии конкурирующих взаимодействий в статистической механике на основе общего метода квазисредних (Н. Н. Боголюбов, 1971) развит микроскопический метод описания гетерофазных состояний (В. И. Юкалов, 1977; А. С. Шумовский, В. И. Юкалов, 1985; В. И. Юкалов, 1989). С его помощью выписаны эффективный гамильтониан и уравнение Шредингера задачи, которое проинтегрировано подстановкой Бете. Получено, что для кулоновского взаимодействия V , не превышающего

$$V_0 = -J(2 \ln 2 - 1/2), \quad (8)$$

антиферромагнетик Бете находится в состоянии, описываемом функцией Бете-Хольтена. При $V > V_0$ рассматриваемая цепочка спинов имеет гетерофазное состояние и с ростом V доля упорядоченной фазы увеличивается до $1/2$. Для случая $J > 0$ в области малых V реализуется упорядоченное ферромагнитное состояние, а переход в гетерофазное осуществляется в точке $V = J/2$.

В пятой части диссертации исследованы магнитные и электрические свойства систем коррелированных электронов.

В XII главе рассмотрен отклик систем коррелированных электронов, описываемых моделями Хаббарда и двухзонной моделью сплавов переходных металлов, на внешние электрические и магнитные поля.

В самосогласованном приближении Тябликова-Боголюбова получена статическая спиновая восприимчивость в модели Хаббарда при конечных температурах:

$$\chi(T) = -2 \frac{\sum_p \delta [n_p(\xi_+) + n_p(\xi_-)] / \delta t_p}{1 - \sum_p \delta (t_p \cdot [n_p(\xi_-) - n_p(\xi_+)] / ((1-t_p)^2 + \text{Int}_p)^{1/2}) / \delta t_p} \quad (9)$$

В частном случае $T=0$ она совпадает с результатом (Дж. Хаббард, К. П. Джейн, 1968). Расчетные формулы спиновой и зарядовой восприимчивости используются при учете эффектов рассеяния электронов на спиновых и зарядовых флуктуациях.

В рамках однозонной модели Хаббарда с примесями оценено влияние слабого рассеяния $\delta = E_0^A - E_0^R \ll t$ электронов и немагнитных примесей на металлическую проводимость. В отсутствие примесей получен результат, аналогичный $s-d(f)$ модели (В. В. Ирхин, М. И. Кацнельсон, 1983): определенная 2-магнонными процессами мнимая часть массового оператора $\sim T^{7/2}$ для квазимпульсов $p_0^2 < T/D$ (D -жесткость магнона). Электрон-примесное рассеяние учтено во втором порядке по интегралу перескока t с помощью "крестовой" техники (А. А. Абрикосов, 1958) в рамках диаграммного метода для X -операторов и газовом приближении по малому параметру ap_0 (p_0 -дырочный импульс Ферми, a -параметр решетки). При помощи метода когерентного потенциала найдено, что примесное рассеяние понижает степень температурной зависимости обратного времени электрон-магнонной релаксации в двухмагнонных процессах до $\tau^{-1} \sim Jm \Sigma \sim T^{5/2}$ в области $p_0^2 < T/D < x(1-x)\delta^2 W/t$ (W -интеграл Ватсона).

Метод когерентного потенциала применен также в XII главе для расчета статической спиновой восприимчивости разупорядоченной по узлам решетки системы коррелированных электронов, гибридных с системой не взаимодействующих электронов. Из полюса восприимчивости получен критерий ферромагнетизма такой 2-зонной модели, который в случае чистого металла совпадает с критерием ферромагнетизма Стонера-Вольфарта, а в частном случае малых концентраций одной из компонент совпадает с критерием Фриделя-Андерсона-Вольфа образования локального магнитного момента на примеси. Результаты численного счета согласуются с наблюдаемыми

электронными фазовыми переходами в бинарных сплавах переходных металлов. Учетная гибридизация вызывает различие локальных спиновых восприимчивостей невзаимодействующих электронов на разных атомах, что объясняет ряд экспериментальных данных по сдвигу Найта. В заключительном разделе XII главы получена взаимосвязь спиновой восприимчивости и проводимости в неидеальной ферми-системе за счет процессов релаксации электронов с переворотом спина. Рассчитанная зависимость проводимости узкозонных систем от дефектности образца согласуется с экспериментами по экспоненциальной зависимости нормального сопротивления ВТСП от малых флюэнсов быстрых нейтронов. Последний эффект вычислялся в рамках теории локализации (Л. Н. Булаевский, М. В. Садовский, 1985; М. В. Садовский, 1989).

В XIII главе рассмотрены антиферромагнитные фазы коррелированных зонных электронов на примерах моделей Хаббарда и Эмери-Херша. Антиферромагнитная нестабильность парамагнитной фазы найдена из условия сингулярности вершинной части рассеяния электрона и дырки с противоположными проекциями спинов, или двух разноспиновых электронов на противонаправленных гриновских линиях: "неелевский" канал рассеяния. В модели Хаббарда критический допирующий параметр, ниже которого возникает антиферромагнитный порядок, составляет $x_c = 1 - n_c = t/8I$ в прямоугольной плотности состояний (2-мерие) или $t/8I$ в полуэллиптической плотности состояний (3-мерие). Ниже x_c монотонное возрастание температуры Нееля достигает наивысшего значения в диэлектрической фазе при половинном заполнении энергетической зоны:

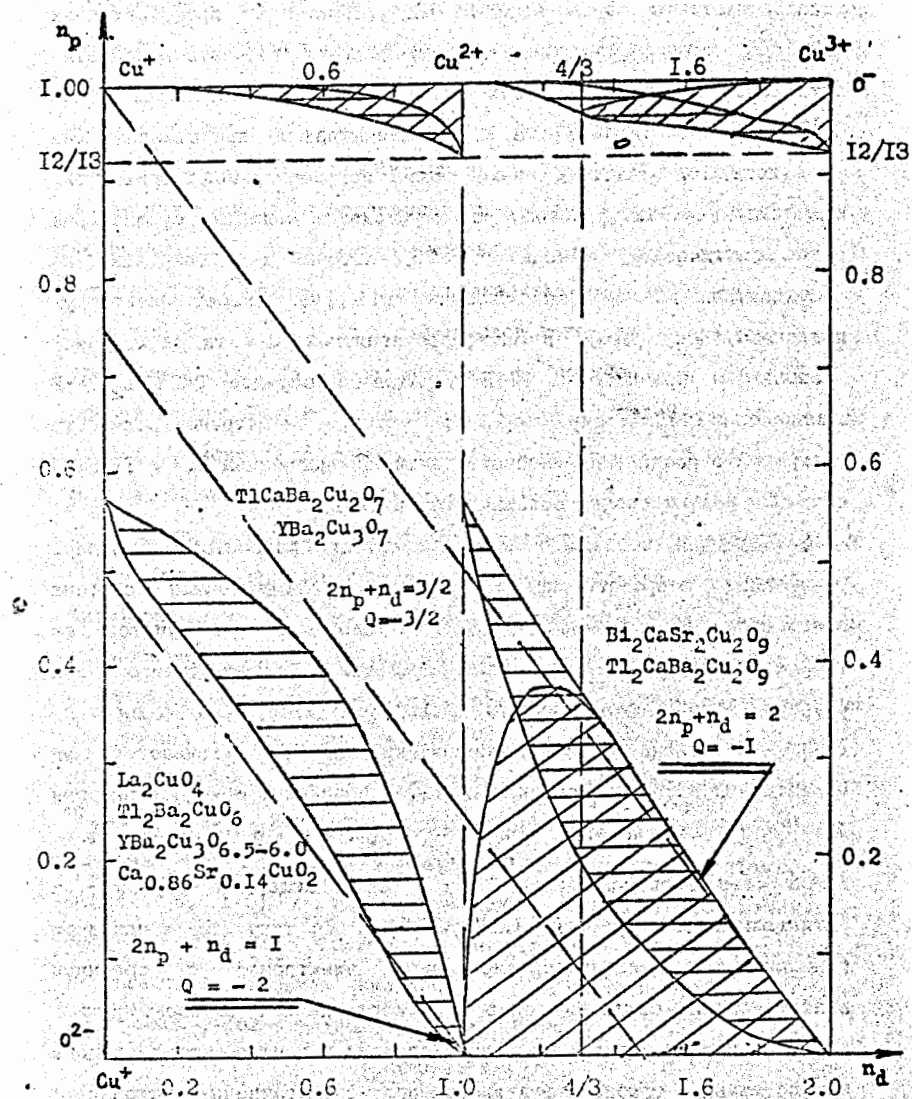
$$T_N(x=0) = 2tx_c \quad (10)$$

Для характерных параметров электронной структуры ВТСП-купратов получено согласие с экспериментом и аналогичными оценками.

выполненными в t - J модели (Ю. Лу, 1989) в представлениях Ф. В. Андерсона о резонирующей валентной связи. Результаты расчета антиферромагнитных фаз для гамильтониана Эмери-Херша слоя $Cu^{1+n}d_0^{2-2+n}p(3d^{10-n}d_2p^{6-n}p)$ в ВТСП-материалах представлены на рис. четырьмя областями, выделенными горизонтальной штриховкой. Косыми линиями заштрихованы сверхпроводящие области, возникающие по кинематическому механизму ВТСП, который в диссертации не обсуждается. Полученная фазовая диаграмма имеет некоторую предсказательную силу. В антиферромагнитной области слева-вниз оказывается правешества ВТСП-купратов с зарядом $Q = 2n_p + n_d - 3 = -2$ комплекса CuO_2 , получаемым из условия электронейтральности конкретного соединения; возможен антиферромагнетизм Vi - и Tl -ВТСП с числом медных слоев, большим двух и $Q = -1$.

В XIV главе последней части диссертации рассмотрена проблема реализации ферромагнитного состояния в однозонной системе электронов (Я. И. Френкель, 1928; Ф. Блох, 1929) с учетом их межузельного обменного взаимодействия, существенного для ферромагнитной неустойчивости (К. Херринг, 1966; Е. И. Кондорский, 1976). В отличие от антиферромагнитной она развивается при нулевом импульсе передачи и наибольшее понижение обменной энергии $J \sum e^{i(p_1 - p_2) \delta}$ достигается при $p = 0$, $p_2 = \pi$ или $p_1 = \pi$, $p_2 = 0$, т.е. когда один электрон оказывается в связывающем, а другой - в антисвязывающем состоянии (Х. Херш, 1989). По типу БКШ в исходном гамильтониане сильнокоррелированных электронов с обменным взаимодействием выделен вклад пар, составленных из электронов с параллельными и антипараллельными спинами в центре и у краев зоны метода сильной связи. В результате получено уравнение состояния:

$$\frac{t}{J} = 1 + (1-n) \left(\frac{n+m}{2-n+m} + \frac{n-m}{2-n-m} \right) \quad (11)$$



В такой идеологии гайзенберговского обмена спонтанная намагниченность $m = n_+ - n_-$ возникает из-за различного заполнения связывающей и антисвязывающей зон с противоположными проекциями спинов. Промежуточные интегрирования для вывода (11) выполнены в прямоугольной плотности электронных состояний, т.е. без учета особенностей плотностей на уровне Ферми, которым зачастую приписывалось усиление фактора Блоха-Стонера в зонной теории магнетизма. Найдены фазовые границы слабой, ненасыщенной ($m < n$) и сильной, насыщенной ($m = n$) магнитной поляризации коррелированной подзоны Хаббарда, в которой получено немонотонное поведение намагниченности $m(n)$ от концентрации электронов $0 \leq n \leq 1$. Рассчитанные зависимости $m(n)$ согласуются с кривыми Слэйтера-Полинга в ферромагнитных сплавах переходных металлов М, ферромагнитных боридов MB, M_2B , фосфидах M_3P и, возможно, в металлических ферромагнитных соединениях РЗЭ с переходными металлами. В рамках предложенной однозонной модели качественно объясняется ферромагнетизм последних элементов группы железа и РЗЭ и немагнитные свойства Sc, Ti, V и Pd, Pt. В этом же однозонном гамильтониане коррелированных электронов вычислены температура Кюри, магнитный момент насыщения и исследован ряд термодинамических характеристик. В последнем разделе XIV главы рассмотрено влияние электрон-магнитного рассеяния на стабильность сильной магнитной поляризации коррелированной зоны. В паркетном приближении получена неустойчивость магнитного спектра при некоторых концентрации электронов и параметре обменного взаимодействия, выше которого электрон-магнитное рассеяние оказывается существенным, что ведет к сужению фазовой области сильного ферромагнетизма.

В XV главе на основе развитого метода сильной связи для

коррелированных электронов и электрон-дырочной симметрии предложены соединения ванадия двух семейств как электронные аналоги ВТСП-купратов. В рамках 2- и 3-мерной моделей Хаббарда для невырожденных и орбитально вырожденных электронов вблизи точки перехода металл-диэлектрик предсказана возможность высокотемпературной сверхпроводимости в составах $La_{2-x}AVO_4$ и $La_{1-x}A_{1+x}VO_{2.5}$. В полярной модели (С. П. Шубин, С. В. Вонсовский, 1934; Н. Н. Боголюбов, 1949) проанализированы экспериментальные данные о T_c в ВТСП со структурой слоистого перовскита и на основе кинематического механизма ВТСП получена универсальная зависимость $T_c/T_c^{\text{макс}}$ от числа дырочных носителей, выявленная из экспериментальных данных. Безотносительно к механизму ВТСП рассчитано влияние кулоновского взаимодействия электронов на свойства сверхпроводящего конденсата. Получено, что сверхпроводящая щель в логарифмическом приближении задается следующим выражением:

$$\frac{2\Delta}{T_c} / \left(\frac{2\Delta}{T_c}\right)_0 = \frac{1 - \frac{V}{2t} \frac{1-3x}{1+x}}{\left(1 + \frac{\Delta_0}{1+x} \left(\frac{V}{4t^2}\right)^2\right)^{1/2}} \quad (12)$$

где индекс "0" обозначает величины в случае сильной экранировки кулоновского взаимодействия $V = e^2 e^{-kr} / \Gamma$ (обратный квадрат дебаевского радиуса экранирования $k^2 = 2\pi e^2 x / t$ для прямоугольной плотности электронных состояний). Формула (12) согласуется с экспериментальными данными о монотонном возрастании $2\Delta/T_c$ в La-ВТСП с ростом концентрации x доданта, а также с пониженными $2\Delta/T_c$ в Bi-ВТСП по сравнению со значением 3,53 теории БКШ. В последнем разделе изучена сверхпроводимость в реалистическом однозонном гамильтониане с 4-фермионным туннельным слагаемым кулоновской природы (нормальный квазичастичный спектр

гамильтониана вычислялся в VII главе); в области некоторых значений параметров расчетная формула для T_c совпадает с полученной по электронному механизму ВТСП (Х. Херш, Ф. Марсиглио, 1989).

В заключении суммируются основные результаты и выводы диссертационной работы. Диаграммный метод X -операторов сильнокоррелированных электронов с орбитальным вырождением дает способ квантово-статистического описания характеристик неидеальных ферми-систем, фазовых переходов в них и метод последовательного учета корреляционных эффектов в системах различной размерности. Интегрируемость реалистической одномерной модели Хаббарда с орбитальным вырождением и спиновой цепочки Бете позволяет провести точный анализ их свойств. Разработанная теория возмущений и метод сильной связи коррелированных электронов являются эффективным теоретическим подходом как для решения фундаментальных задач теории конденсированного состояния вещества, так и для описания реальных материалов с существенными внутриатомными корреляциями электронов. Получаемые в рамках разработанного формализма теоретические результаты допускают непосредственное сравнение с сериями экспериментальных данных.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Иванов В. А. Статическая магнитная восприимчивость сплавов переходных металлов // ФММ. 1977. Т. 43. №6. С. 1148-1155.
2. Ведяев А. В., Иванов В. А. Элементарные возбуждения в модели Андерсона-Хаббарда // ТМФ. 1981. Т. 47. №3. С. 425-430.
3. Ведяев А. В., Иванов В. А. Внутриатомные корреляции электронов и s-d гибридизация в модели Андерсона // ФТТ. 1982. Т. 24. №8.

- С. 2407-2410.
4. Ведяев А. В., Иванов В. А., Шилов В. Е. Об одной возможности использования обобщенных операторов Окубо для учета корреляций в модели Хаббарда с вырождением // ТМФ. 1985. Т. 64. N. 1. С. 163-170.
 5. Зайцев Р. О., Иванов В. А. Переход Мотта в системе 3d-электронов с наполовину заполненной зоной // ФТТ. 1985. Т. 27. N. 12. С. 3561-3570.
 6. Ведяев А. В., Иванов В. А., Журавлев М. Е. О фазовых переходах в одномерной модели Хаббарда с вырождением // ТМФ. 1986. Т. 67. N3. С. 470-473.
 7. Зайцев Р. О., Иванов В. А. Сверхпроводимость в модели Хаббарда // ФТТ. 1987. Т. 29. N10. С. 3111-3119.
 8. Ведяев А. В., Иванов В. А., Журавлев М. Е. Элементарные возбуждения в димеризованной модели Хаббарда // ТМФ. 1987. Т. 71. N3. С. 457-463.
 9. Зайцев Р. О., Иванов В. А. Состояние смешанной валентности и переход диэлектрик-металл в соединениях типа магнетита // ФТТ. 1987. Т. 29. N. 4. С. 1211-1213.
 10. Зайцев Р. О., Иванов В. А. Парамагнитные свойства электронов в модели Хаббарда и бозе-конденсация электронных пар // Дубна, ОИЯИ, Д17-88-95, С. 146-153.
 11. Ivanov V. A., Zaitsev R. O. Antiferromagnetic order in the Hubbard model (Антиферромагнитный порядок в модели Хаббарда) // Physica C. 1989. V. 162-164. P. 763-764.
 12. Иванов В. А., Журавлев М. Е. Эффекты корреляции в низкоразмерных хаббардовских системах // Тр. IV Всесоюзного совещ. по ДПМ. Черногоровка. 1989. С. 63-64.
 13. Ivanov V. A., Zaitsev R. O. Electron correlations and mixed-valence state in transition metal compounds (Электронные корреляции и состояние смешанной валентности в соединениях пере-

- ходных металлов). // J. Magnetism Magn. Mater. 1989. V. 81. P. 331-340.
14. Иванов В. А. О высокотемпературной сверхпроводимости в системе $La_{2-x}Sr_xNiO_4$ // ЖНХ. 1989. Т. 34. N. 12. С. 3201-3203.
 15. Ivanov V. A., Zaitsev R. O. Nonphonon mechanism of superconductivity in transition metals compounds (Нефононный механизм сверхпроводимости в соединениях переходных металлов) // Intern. J. Modern Phys. B. 1989. V. 3. N. 9. P. 1403-1423.
 16. Зайцев Р. О., Иванов В. А., Михайлова Д. В. Сверхпроводимость в модели Шубина-Вонсовского (конечная энергия Хаббарда) // ФММ. 1989. Т. 68. N. 6. С. 1108-1116.
 17. Иванов В. А., Журавлев М. Е. T_c и ромбические искажения в модели Хаббарда высокотемпературных сверхпроводников // ФНТ 1990. Т. 16. N7. С. 872-877.
 18. Иванов В. А., Журавлев М. Е. Об аномальном поведении нормального сопротивления и дефектности ВТСП // ЖНХ. 1990. Т. 35. N. 9. С. 2179-2180.
 19. Иванов В. А. Сверхпроводимость и сверхпроводники: основные понятия и свойства // ЖНХ. 1990. Т. 35. N4. С. 1024-1067.
 20. Иванов В. А. Ванадаты как соединения, родственные ВТСП-купратам // СФХТ. 1990. Т. 3. N12. С. 2696-2700.
 21. Иванов В. А. О возможности ферромагнетизма в однозонной системе сильнокоррелированных электронов // УФЖ. 1991. Т. 36. N2. С. 261-263.
 22. Журавлев М. Е., Иванов В. А. Сверхпроводимость в системе электронов с 4-фермионным туннельным гамильтонианом. // ТМФ. 1991. Т. 86. N2. С. 312-317.
 23. Иванов В. А. Метод сильной связи и корреляционные эффекты в узкозонных системах электронов. // Тр. 4Всес. совещ. "Неоднородные электронные состояния". Новосибирск (СОАН СССР), 1991. С. 5-6.
 24. Иванов В. А. Ферромагнетизм в системе однозонных электронов с сильными корреляциями. // УФЖ. 1991. Т. 36. N5. С. 751-757.