

РОССИЙСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР  
"КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ"

На правах рукописи  
УДК : 538.945

КИСЕЛЕВ МИХАИЛ НИКОЛАЕВИЧ

СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННЫЕ  
СПИНОВЫЕ И ЗАРЯДОВЫЕ СИСТЕМЫ  
В УСЛОВИЯХ БЛИЗОСТИ К ФАЗОВОМУ  
ПЕРЕХОДУ

01.04.02 - теоретическая физика

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научные руководители  
кандидат физико-математических  
наук Бабиченко В.С.,  
доктор физико-математических  
наук Кикоин К.А.

МОСКВА - 1995

## Содержание

<b>Введение</b>	<b>4</b>
<b>Глава 1. Экситонная неустойчивость в полупроводниках</b>	<b>9</b>
1.1. Постановка задачи . . . . .	9
1.2. Локальное и бислокальное расщепления . . . . .	13
1.3. Уравнение Бете-Солпитера . . . . .	15
1.4. Длинноволновые флуктуации зарядовой плотности электронов	18
1.5. Эффективное взаимодействие бозонов . . . . .	19
1.6. Эффективное фермион-бозонное взаимодействие . . . . .	23
1.7. Экситонный переход в трехзонной модели . . . . .	27
<b>Глава 2. Экситонный механизм сверхпроводимости</b>	<b>33</b>
2.1. Экситонный переход, индуцированный легированием . . . . .	33
2.2. О характере электронного фазового перехода . . . . .	37
2.3. Диэлектрическая проницаемость с учетом межзонных переходов	41
2.4. Экситонный механизм сверхпроводимости . . . . .	43
2.5. Сверхпроводимость в условиях близости к экситонной неустой-	
чивости . . . . .	46
2.6. Основные выводы . . . . .	49
<b>Глава 3. RVB-состояния в Кондо - решетках</b>	<b>50</b>
3.1. Эффективное действие . . . . .	50
3.2. Приближение среднего поля . . . . .	54
3.3. Диаграммная техника и уравнение Дайсона . . . . .	57
3.4. Диаграммная техника при конечных температурах в коорди-	
натном представлении . . . . .	64
<b>Глава 4. Стабилизация спиновой жидкости в Кондо - решетках</b>	<b>72</b>
4.1. Эффективное взаимодействие спинов на больших расстояниях	72
4.2. Эффективная экранировка спина. Спиновая восприимчивость.	
Главная последовательность диаграмм . . . . .	74
4.3. Уравнения среднего поля с учетом Кондо - перенормировок . .	80
4.4. Роль эффектов запаздывания. Собственно-энергетическая часть	
спинов . . . . .	85
4.5. Флуктуации калибровочных полей . . . . .	90
<b>Заключение</b>	<b>94</b>
<b>Литература</b>	<b>96</b>

Приложение I	104
Приложение II	107

## Введение

Диссертация посвящена теоретическому исследованию свойств систем с сильными зарядовыми и спиновыми флуктуациями в условиях близости к различного рода неустойчивостям: диэлектрической, сверхпроводящей, магнитной, построению адекватного математического аппарата и применению его для описания двух - и трехмерных сильнокоррелированных систем.

Актуальность темы. Объектом исследования диссертации являются системы с сильными спиновыми и зарядовыми флуктуациями, к которым можно отнести как Высокотемпературные Сверхпроводники (ВТСП), так и тяжелофермионные (ТФ) соединения. И тем и другим соединениям присущ ряд особенностей, позволяющих объединить эти соединения в один класс. Исключительная чувствительность этих соединений к изменению внутренних и внешних по отношению к системе параметров (отклонение от стехиометрического состава, температура, направление и величина внешнего магнитного поля и т.д.) свидетельствует о существенном влиянии близости к различного рода неустойчивостям (зарядовой, магнитной, сверхпроводящей) на свойства нормального и сверхпроводящего состояний.

Диссертация посвящена исследованию конкретных особенностей поведения сильнокоррелированных систем вблизи перехода металл - диэлектрик (экситонная неустойчивость) и перехода в магнитоупорядоченное состояние (антиферромагнетик) или состояние спиновой жидкости типа Резонирующих Валентных Связей (RVB).

В диссертации предложено описание неустойчивостей зарядового типа в рамках двухзонной модели узкощелевого полупроводника при ненулевом допировании. Эта теория обобщает концепцию экситонного диэлектрика на случай отличной от нуля концентрации электронов проводимости и позволяет проанализировать возможности нефоновой сверхпроводимости в этой модели. Использование методов квантовой теории поля позволяет построить самосогласованную микроскопическую теорию экситонного перехода, исследовать неустойчивость в различных каналах взаимодействия.

В диссертации также предлагается микроскопический механизм формирования нейтральной спиновой жидкости в Кондо - решетках. Показано, что одноузельное Кондо - рассеяние электронов проводимости при температурах больше температуры Кондо не только подавляет магнитный порядок, но и способствует возникновению состояний RVB типа. Предложенный в диссертации механизм качественно объясняет целый ряд экспериментов в тяжелофермионных соединениях на основе  $Ce$  и  $U$ , а развитый подход может быть использован для количественного описания необычных свойств этих и других ТФ соединений.

Основной целью настоящей работы является развитие теории сильнокоррелированных спиновых и зарядовых систем в условиях близости к переходу в диэлектрическое, сверхпроводящее или магнитное состояние и ее применение к анализу конкретных физических систем.

Во Введении обоснована актуальность темы, сформулированы цель исследования, постановка задачи и основные положения, выносимые на защиту. Первая и вторая главы диссертации посвящены исследованию систем с сильными зарядовыми флуктуациями вблизи перехода металл-диэлектрик. Исследованы сверхпроводящие свойства таких систем.

В первой главе рассматривается общий подход к задаче об экситонном диэлектрике, основанный на применении метода континуального интегрирования. В качестве исходной модели рассмотрена модель узкощелевого легированного полупроводника с квадратичным законом дисперсии, определяющим широкую зону проводимости с эффективной массой  $m_e$  и узкую валентную зону с эффективной массой  $m_h$ . В работе предполагается легирование в зону проводимости "легкими" носителями. В параграфах 4 и 5 главы 1 выведен эффективный функционал гидродинамического действия в терминах медленных электронных и экситонных полей, получены выражения для эффективных амплитуд рассеяния экситонов на экситонах при ненулевом легировании, а также амплитуда рассеяния экситонов на электронах легирования. Показано, что взаимодействие экситонов и электронов имеет характер притяжения на больших расстояниях (ван-дер-ваальсово притяжение, связанное с взаимодействием типа диполь-заряд). Исследован характер взаимодействия на малых расстояниях. Проанализирован случай двумерной и трехмерной системы.

Во второй главе на основании полученного функционала эффективного действия проанализирована возможность возникновения экситонной фазы в полупроводнике, устойчивом относительно образования экситонов в отсутствие легирования, проанализированы условия возникновения экситонного конденсата.

В параграфах 2 и 3 второй главы исследовано влияние на характер фазового превращения слагаемых в гамильтониане взаимодействия, выходящих за рамки взаимодействия плотность - плотность. Показано, что учет этих слагаемых приводит к возникновению сильной дисперсии диэлектрической проницаемости  $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$  на низких частотах как выше, так и ниже точки неустойчивости. Механизм сверхпроводимости, связанный с подавлением эффективного Кулоновского взаимодействия на низких частотах, рассмотрен в §4. Эффективная температура сверхпроводящего имеет порядок характерного низкоэнергетического масштаба задачи. При этом механизм сверхпроводимости не связан с фононами и имеет чисто электронную природу. Рассмотрен также

механизм сверхпроводимости за счет обмена зарядовыми возбуждениями (экситонами) в трехзонной модели.

В третьей и четвертой главах рассматриваются системы с сильными спиновыми флуктуациями на примере модели Кондо-решетки. Исследуется возможность стабилизации спиновой жидкости нейтральных фермионов как относительно антиферромагнитного упорядочения, так и относительно образования когерентного "кондо-синглетного" состояния при помощи методов, основанных на применении температурной теории возмущений для описания свойств тяжелофермионных соединений с целочисленной валентностью. В §3 главы 3 построена диаграммная техника при конечных температурах в координатном представлении, рассмотрено уравнение на "аномальную" функцию Грина псевдофермионов, отвечающую корреляциям RVB типа. Показано, что пренебрежение эффектами запаздывания в эффективном взаимодействии Рудерман - Киттель - Касуя - Иосида (РККИ) локализованных f-спинов позволяет свести уравнение на собственно-энергетическую часть псевдофермионов к среднеполевому уравнению на параметр порядка RVB для гамильтониана Гайзенберга.

В §1, §2 четвертой главы доказана применимость приближения непересекающихся диаграмм в котором кондо-рассеяние на каждом узле может рассматриваться независимо, а само рассеяние учитывается в логарифмическом приближении, для вычисления перенормировок вершины взаимодействия псевдофермионов с электронами проводимости и спиновой восприимчивости. Проанализированы модифицированные с учетом перенормировок уравнения среднего поля для антиферромагнитного и RVB параметров порядка. В результате анализа полученных уравнений было показано, что логарифмическое усиление обмена вследствие кондо-рассеяния благоприятствует возникновению обеих фаз, но экранирование спина за счет кондо-рассеяния влияет только на  $T_N$ , ослабляя тенденцию к антиферромагнитному спариванию.

В Заключении сформулированы основные результаты и выводы. В Приложении I приведены результаты вычисления мацубаровских сумм и интегралов, возникающих при выводе эффективного действия в двухзонной модели легированного полупроводника. В Приложении II приведены результаты вычисления поправок к собственно - энергетической части спин - фермионов за счет эффектов запаздывания во взаимодействии. Вычисленные интегралы позволяют проанализировать модифицированные уравнения среднего поля.

#### Научная новизна

1. Предсказана возможность возникновения экситонной фазы при ненулевом легировании за счет взаимодействия экситонов с электронами. Найдены усло-

- вия существования экситонного конденсата в двух- и в трехмерных системах.
2. Развита теория взаимодействия сильно - неидеальной ферми - жидкости электронов с экситонной подсистемой. Вычислены амплитуды рассеяния электронов на экситонах в размерности системы  $d = 2$  и  $d = 3$ .
  3. Построена теория взаимодействия электронов проводимости с решеткой спинов редкоземельных металлов в условиях близости температуры Нееля магнитного упорядочения спинов и температуры Кондо.
  4. Предложен механизм стабилизации спиновой жидкости в Кондо - решетках.

Практическая ценность работы Во многих задачах физики конденсированного состояния близость системы к неустойчивости того или иного типа оказывает существенное влияние на свойства этой системы. Развиваемая в работе теория сильнокоррелированных спиновых и зарядовых систем в условиях близости к фазовому переходу представляет собой попытку построения теоретического аппарата применимого для описания систем в области достаточно сильных зарядовых и спиновых флуктуаций.

Применение теории для объяснения сверхпроводимости полупроводниковых соединений позволяет с единых позиций объяснить ряд эффектов, в интерпретации которых существовали до сих пор определенные трудности. Предсказание новых эффектов стимулирует дальнейшее развитие экспериментов в полупроводниках группы  $A^{III}B^V$

Предложенный в работе механизм стабилизации спиновой жидкости в Кондо - решетках помогает понять природу аномальных магнитных свойств соединений с тяжелыми фермионами на основе  $Ce$ .

Развитый подход в задаче об экситонной неустойчивости носит общеметодологический характер и может быть использован при анализе других задач.

#### Защищаемые положения

1. Теория экситонного перехода в узкощелевом легированном полупроводнике, в том числе:
  - а) вывод гидродинамического действия для двухзонной модели полупроводника при наличии легирования.
  - б) вывод выражений для амплитуды рассеяния экситонов на экситонах и экситонов на электронах в двумерном и трехмерном случае.
  - в) электронные механизмы сверхпроводимости в условиях близости к экситонной неустойчивости.
2. Доказательство возможности существования экситонного конденсата в присутствии электронной подсистемы.
3. Теория взаимодействия электронов проводимости с решеткой спинов редкоземельных металлов в условиях близости температуры магнитного упорядочения спинов (температуры Нееля) и температуры Кондо.

4. Доказательство возможности стабилизации спиновой жидкости в Кондо - решетках, в том числе вычисление температуры перехода в однородное RVB - состояние при наличии одноузельных процессов рассеяния с переворотом спина.

Публикации Материал диссертации опубликован в 7 печатных работах [40 – 44], [110, 111].

Апробация работы: результаты работы докладывались на Международной конференции по Высокотемпературной Сверхпроводимости (Израиль, 1993), Международной конференции по Высокотемпературной Сверхпроводимости (Гренобль, Франция, 1994) Международной конференции по Сильнокоррелированным Электронным Системам (Амстердам, Нидерланды, 1994), Зимней школе ПИЯФ по физике твердого тела (Гатчина, 1994), Летней школе ИТФ им. Ландау (Черноголовка, 1994), совместном Российско - Германском семинаре по сильнокоррелированным системам (Дубна 1994) на научных семинарах ФИАН, МИФИ, а также на конференциях и семинарах РНЦ Курчатовский Институт.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и двух приложений. Общий объем - 130 страниц, включая 30 рисунков и библиографического списка из 137 наименований.



# Глава 1. Экситонная неустойчивость в полупроводниках.

## 1.1. Постановка задачи.

Сверхпроводимость полупроводниковых соединений является постоянным объектом как теоретических, так и экспериментальных исследований, свидетельством чему является недавнее открытие сверхпроводимости с  $T_c \sim 10$  сильно легированного  $GaAs$  [1]. Эта величина температуры сверхпроводящего перехода является, по-видимому, слишком большой, чтобы ее можно было объяснить традиционным электрон - фононным механизмом [2]. В настоящей работе рассматривается один из возможных вариантов нефононного механизма сверхпроводимости, который, в принципе, может реализоваться в системах, аналогичных полупроводникам группы  $IIIIV$ , представителем которой является  $GaAs$ . Все эти системы, по-видимому, можно считать близкими к переходу в состояние экситонного диэлектрика [3,4], теоретическому исследованию свойств которого было посвящено большое количество работ [3-19]. Если в систему, близкую к переходу в состояние экситонного диэлектрика, внедрены легирующие примеси, то свободные электроны, появляющиеся в результате легирования, будут сильно взаимодействовать с легко поляризуемой средой, представляющей собой реальные или виртуальные экситоны, что может привести к эффективному притяжению этих электронов, т.е. к сверхпроводимости.

Исследование механизмов сверхпроводимости в системах, близких к экситонному переходу, представляет интерес и для проблемы высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП). В работах [20-30] предпринимались попытки объяснения как нормальных, так и сверхпроводящих свойств медно-оксидных сверхпроводников влиянием экситонной подсистемы.

В связи с тем, что проблема экситонной неустойчивости очень подробно описана в имеющихся обзорах (см., например, [9, 19]), перейдем непосредственно к постановке задачи и описанию методов ее решения, производя необходимые пояснения по ходу изложения.

Рассмотрим модель кристалла с двумя непересекающимися зонами, экстремумы которых находятся в одной точке зоны Бриллюэна (рис.1.1.1 а,б). Будем считать, что энергетический спектр исходной системы известен : в нижней зоне спектр  $\varepsilon_h(\mathbf{p})$ , в верхней  $\varepsilon_e(\mathbf{p})$ . Для простоты будем полагать в дальнейшем функции  $\varepsilon$  изотропными, т.е. зависящими от  $p = |\mathbf{p}|$ :

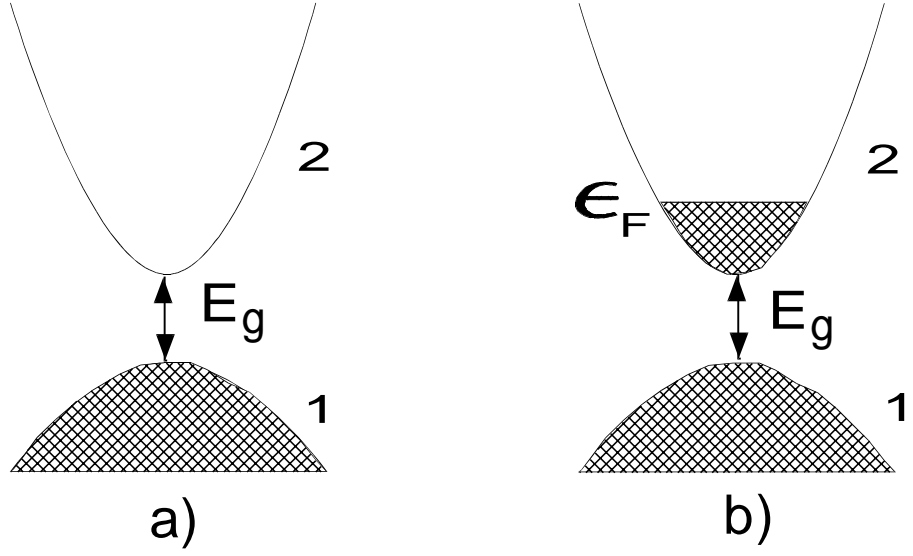


Рисунок 1.1.1

$$\varepsilon_1(\mathbf{p}) = -\frac{E_g}{2} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m_h}, \quad \varepsilon_2(\mathbf{p}) = \frac{E_g}{2} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} \quad (1.1.1)$$

При рассмотрении случая отличного от нуля допирования будем полагать, что допирование происходит в верхнюю зону (зону проводимости) рисунок 1.1.1.b. При этом будем считать выполненным условие  $m_e \leq m_h$ . Отметим, что можно рассматривать постановку задачи с легкой эффективной массой в валентной зоне (случай  $m_e \geq m_h$ ) и допированием дырками. Очевидно, что эти две постановки задачи полностью эквивалентны.

Запишем эффективный гамильтониан системы в виде

$$H = \sum_i \int d\mathbf{x} \Psi_i^\dagger(\mathbf{x}) \varepsilon_i(-i\nabla) \Psi_i(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} \Psi_i^\dagger(\mathbf{x}) \Psi_i(\mathbf{x}) V_{\mathbf{x}-\mathbf{y}} \Psi_j^\dagger(\mathbf{y}) \Psi_j(\mathbf{y}) \quad (1.1.2)$$

$\Psi^\dagger, \Psi$  – операторы рождения и уничтожения электронов из соответствующей зоны,  $i, j$  – индексы зон (1 и 2),  $V(\mathbf{r}) = e^2/(\epsilon_0 r)$  – потенциал кулоновского взаимодействия,  $\epsilon_0$  – статическая диэлектрическая проницаемость полупроводника. Для упрощения изложения спиновые индексы у  $\Psi$ - операторов опущены. Обобщение вывода с учетом спина не представляет трудности, однако приводит к излишней громоздкости выражений и потере простоты и наглядности.

Представим статистическую сумму рассматриваемой системы в виде функционального интеграла [31-36]:

$$Z = \int \exp(S) D\bar{\Psi} D\Psi \quad (1.1.3)$$

Квантование ферми-системы, помещенной в кубический объем  $V = L^d$ , где  $d$  - размерность рассматриваемой системы, осуществляется в результате интегрирования по пространству антикоммутирующих функций (элементов бесконечномерной грассмановой алгебры)  $\bar{\Psi}(\mathbf{x}, \tau)\Psi(\mathbf{x}, \tau)$ ,  $\mathbf{x} \in V$  с антипериодическими граничными условиями по параметру  $\tau$  ("мнимому времени"):

$$\Psi_i(\mathbf{x}, \tau + \beta) = -\Psi_i(\mathbf{x}, \tau), \quad \bar{\Psi}_i(\mathbf{x}, \tau + \beta) = -\bar{\Psi}_i(\mathbf{x}, \tau) \quad (1.1.4)$$

$\beta = (kT)^{-1}$ ,  $T$  - абсолютная температура,  $k$  - постоянная Больцмана везде в дальнейшем равная единице.

Функционал  $S$  от полей  $\bar{\Psi}, \Psi$ , имеющий смысл действия имеет вид

$$S = - \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} \sum_i \bar{\Psi}_i(\mathbf{x}, \tau) \partial_\tau \Psi_i(\mathbf{x}, \tau) - \int_0^\beta d\tau \left( H(\tau) - \mu \sum_i \int d\mathbf{x} \bar{\Psi}_i(\mathbf{x}, \tau) \Psi_i(\mathbf{x}, \tau) \right) \quad (1.1.5)$$

$\mu$  - химический потенциал электронов при легировании в верхнюю зону.

Для гамильтониана взаимодействия в виде (1.1.2) действие может быть записано в следующей форме:

$$S = \int_0^\beta d\tau \sum_j \int d\mathbf{x} \bar{\Psi}_j(\mathbf{x}, \tau) \{ -\partial_\tau - \epsilon_j(-i\nabla) + \mu \} \Psi_j(\mathbf{x}, \tau) - \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \sum_i \sum_j \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} \bar{\Psi}_i(\mathbf{x}, \tau) \Psi_i(\mathbf{x}, \tau) V_{\mathbf{x}-\mathbf{y}} \bar{\Psi}_j(\mathbf{y}, \tau) \Psi_j(\mathbf{y}, \tau), \quad (1.1.6)$$

Отметим, что определив функции Грина как средние по указанному пространству от произведения нескольких полей  $\bar{\Psi}, \Psi$  от различных аргументов с весом  $\exp(S)$ , можно построить стандартную (Мацубаровскую) диаграммную технику при конечных температурах [37 -39]. Вследствие антипериодичности, поля  $\bar{\Psi}, \Psi$  будут разлагаться в ряды Фурье по частотам  $\omega_n = (2n + 1)\pi T$ , где  $n$  - целые числа. Переход на вещественные частоты возможен путем аналитического продолжения корреляторов в запаздывающие или опережающие функции стандартным способом [37].

Введем новое комплексное поле  $\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \tau) = \Delta_1 + i\Delta_2$  следующим образом - обозначим

$$X_1 = \text{Re}(\bar{\Psi}_1(\mathbf{x}, \tau)\Psi_2(\mathbf{y}, \tau)), \quad X_2 = \text{Im}(\bar{\Psi}_1(\mathbf{x}, \tau)\Psi_2(\mathbf{y}, \tau)),$$

тогда

$$Z = \int \exp(S) \delta(\Delta_1 - X_1) \delta(\Delta_2 - X_2) D\bar{\Psi} D\Psi D\Delta_1 D\Delta_2$$

и, воспользуемся представлением Фурье для функциональной  $\delta$ - функции, позволяющим ввести новые поля в исходное действие

$$\delta(\bar{\Psi}_1\Psi_2 - \Delta) \delta(\bar{\Psi}_2\Psi_1 - \bar{\Delta}) =$$

$$\begin{aligned}
&= \int (D\phi^*)(D\phi) \exp(-i \int_0^\beta d\tau \int dx dy \{ \phi_{\mathbf{x}\mathbf{y}}^*(\tau) [\bar{\Psi}_1(\mathbf{x}, \tau) \Psi_2(\mathbf{y}, \tau) - \Delta_{\mathbf{x}\mathbf{y}}(\tau)] + \\
&\quad + \phi_{\mathbf{x}\mathbf{y}}(\tau) [\bar{\Psi}_2(\mathbf{y}, \tau) \Psi_1(\mathbf{x}, \tau) - \Delta_{\mathbf{x}\mathbf{y}}^*(\tau)] \}) \quad (1.1.7)
\end{aligned}$$

Новые бозонные переменные  $\Delta_{\mathbf{x}\mathbf{y}}(\tau)$ , имеющие периодические граничные условия по "мнимому времени"  $\tau$ , описывают как относительное движение электрона и дырки, так и движение электрон-дырочной пары как целого. В дальнейшем будет показано, что поля  $\Delta_{\mathbf{x}\mathbf{y}}$  и им сопряженные представляют коллективные переменные, описывающие экситоны, а именно, поле  $\Delta_{\mathbf{x}\mathbf{y}}$  отвечает волновой функции связанного состояния электрона и дырки, убывающей на больших расстояниях  $|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \gg a_B$  как  $\Delta_{\mathbf{x}\mathbf{y}}^{12} \sim \exp(-|\mathbf{x} - \mathbf{y}|/a_B)$ , где  $a_B = \varepsilon_0 \hbar^2 / (e^2 m^*)$  - борковский радиус,  $m^* = m_e m_h / M$  - приведенная масса,  $M = m_e + m_h$  - масса экситона.

Вследствие антипериодичности, функции  $\bar{\Psi}, \Psi$ , разлагаются в ряды Фурье по частотам  $\varepsilon_m = (2m + 1)\pi T$

$$\begin{aligned}
\Psi_i(\mathbf{x}, \tau) &= (\beta V)^{-1/2} \sum_{\mathbf{p} \in \varepsilon_m} a_i(\mathbf{p}, \varepsilon_m) \exp(i\mathbf{p}\mathbf{x} - i\varepsilon_m \tau), \\
\bar{\Psi}_i(\mathbf{x}, \tau) &= (\beta V)^{-1/2} \sum_{\mathbf{p} \in \varepsilon_m} \bar{a}_i(\mathbf{p}, \varepsilon_m) \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{x} + i\varepsilon_m \tau), \quad (1.1.8)
\end{aligned}$$

Фурье представление для С-числовых полей  $\phi, \Delta$  и им сопряженных содержит только четные частоты  $\omega_n = 2\pi n T$ :

$$\begin{aligned}
\phi_{\mathbf{x}, \mathbf{y}, \tau} &= (\beta V^2)^{-1/2} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2, \omega_n} \phi_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n} \exp[-i\mathbf{p}_1(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \frac{i}{2}\mathbf{p}_2(\mathbf{x} + \mathbf{y}) + i\omega_n \tau], \\
\Delta_{\mathbf{x}, \mathbf{y}, \tau} &= (\beta V^2)^{-1/2} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2, \omega_n} \Delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n} \exp[-i\mathbf{p}_1(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \frac{i}{2}\mathbf{p}_2(\mathbf{x} + \mathbf{y}) + i\omega_n \tau], \quad (1.1.9)
\end{aligned}$$

В дальнейшем положим  $V = 1$ , восстановив все размерные коэффициенты в конечных выражениях. В биллокальных переменных  $\phi, \Delta$  осуществлен переход к системе центра инерции. Импульс  $\mathbf{p}_1$  отвечает относительному движению электрона и дырки, импульс  $\mathbf{p}_2$  их движению как целого. После осуществленного перехода действие примет вид

$$\begin{aligned}
S &= \sum_i \sum_p \bar{a}_i(p) (i\varepsilon_m - \varepsilon_i(\mathbf{p}) + \mu) a_i(p) - \\
&- \frac{1}{2} \beta^{-1} \sum_{ij} \sum_{p_{1,2,3,4}} \bar{a}_i(p_1) a_i(p_2) V_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2} \bar{a}_j(p_3) a_j(p_4) \delta_{p_1 + p_3, p_2 + p_4} + S_{\phi\Delta} \\
S_{\phi\Delta} &= -i\beta^{-1/2} \left[ \sum_{p_{1,2}} \bar{a}_1(p_1) a_2(p_2) \phi^*(p_1, p_2) + c.c \right] \\
&+ i \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n} (\phi^*(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n) \Delta(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n) + c.c) \quad (1.1.10)
\end{aligned}$$

Обозначено  $p = (p, \nu_n)$ , где  $\nu_n$  - фермиевская или бозевская частота.

## 1.2. Локальное и билोकальное расщепление

Введем в рассмотрение оператор плотности

$$\rho(\mathbf{x}, \tau) = \sum_i \bar{\Psi}_i(\mathbf{x}, \tau) \Psi_i(\mathbf{x}, \tau) = \sum_i \rho_i(\mathbf{x}, \tau) \quad (1.2.1)$$

Выделим в  $S$  (1.1.10) в слагаемом, отвечающем взаимодействию, два канала

$$|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2| \ll |\mathbf{p}_0| \quad |\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_4| \ll |\mathbf{p}_0|$$

$\mathbf{p}_0$  - некоторый характерный импульс системы  $|\mathbf{p}_0| \sim \hbar/a_B$ . Введем под знак континуального интеграла по ферми-полям  $\Psi_i$  континуальный интеграл по вспомогательному бозе-полю  $\Phi(\mathbf{x}, \tau)$  таким образом, чтобы сократить член кулоновского взаимодействия в исходном действии (1.1.6) [31-33]. Такое расщепление можно провести для канала 1. Оно локально, так как поля расщепляются в одной точке. Часть действия  $S$  после расщепления примет вид:

$$S = -i \int_0^\beta d\tau \int dx \rho(\mathbf{x}, \tau) \Phi(\mathbf{x}, \tau) - \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int dx \frac{(\nabla \Phi(\mathbf{x}, \tau))^2}{(4\pi e^2)} \quad (1.2.2)$$

Заметим, что расщепление проведено единым полем для двух зон. Однако, есть другой канал в  $S$ , для которого расщепление ферми - полей уже не будет локальным; это канал 2. Воспользовавшись коммутационными соотношениями для элементов грассмановой алгебры, запишем член с кулоновским взаимодействием таким образом, чтобы рядом стояли ферми-поля в комбинации  $\Psi_i(\mathbf{x}, \tau) \Psi_j(\mathbf{y}, \tau)$ . Вводя аналогично вспомогательные бозе поля  $\chi$  для каждой из зон, но зависящие уже от двух координат  $x$  и  $y$ , исключаем член с кулоновским взаимодействием. При этом воспользуемся соотношением

$$\chi_i(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \tau) = \chi_i^*(\mathbf{y}, \mathbf{x}, \tau)$$

Слагаемые, которые после учета коммутационных соотношений содержат ферми поля из разных зон, перепишем через  $\Delta$  и  $\Delta^*$ . При этом  $|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|$  уже не мал по сравнению с  $|\mathbf{p}_0|$ . Результат проведенных преобразований в импульсном представлении имеет вид:

$$\begin{aligned} S = & \sum_{ij} \sum_{p_1, p_2} \bar{a}_i(p_1) \hat{K}_{p_1 p_2}^{ij} a_j(p_2) + \sum_{k, p_1, 2} V_k \Delta(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n) \Delta^*(\mathbf{p}_1 - \mathbf{k}, \mathbf{p}_2, \omega_n) \\ & + i \sum_{p_1, 2} [\phi^*(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n) \Delta(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n) + c.c.] - \\ & - \frac{1}{2} \sum_k V_k^{-1} \left[ \Phi(k) \Phi(-k) + \sum_i \sum_{p_1, 2} \chi_i(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n) \chi_i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{k}, -\mathbf{p}_2, -\omega_n) \right] \quad (1.2.3) \end{aligned}$$

где  $\hat{K}_{p_1 p_2}^{ij}$  определяется соотношениями (1.2.4):

$$\hat{K}_{p_1 p_2}^{ij} = \hat{\mathcal{G}}_{p_1 p_2}^{-1} - i \hat{\Phi}_{p_1 p_2} \quad \hat{\mathcal{G}}_{p_1 p_2}^{-1} = G_0^{-1}(p_1) \delta_{p_1, p_2} - \hat{\Lambda}_{p_1 p_2} \quad (1.2.4)$$

Введены следующие обозначения:

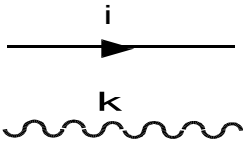
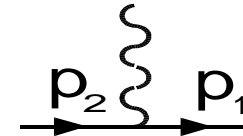

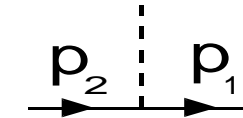
$$\begin{aligned}\hat{G}_0^{-1}(p) &= \begin{pmatrix} i\varepsilon_m - \varepsilon_1(\mathbf{p}) + \mu & 0 \\ 0 & i\varepsilon_m - \varepsilon_2(\mathbf{p}) + \mu \end{pmatrix} \\ \hat{\Lambda}_{p_1 p_2} &= \beta^{-1/2} \begin{pmatrix} \chi_1(p_1, p_2) & i\phi^*(p_1, p_2) \\ i\phi(p_1, p_2) & \chi_2(p_1, p_2) \end{pmatrix} \\ \hat{\Phi}_{p_1 p_2} &= \beta^{-1/2} \begin{pmatrix} \Phi(p_1, p_2) & 0 \\ 0 & \Phi(p_1, p_2) \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (1.2.5)$$

Воспользуемся далее тем, что зона 1 полностью заполнена, а зона 2 пустая и проинтегрируем по всем ферми-полям в обеих зонах

$$\int \exp(S) D\bar{a} D a = \exp(Sp \ln(\hat{K}_{p_1 p_2}^{ij})) \quad (1.2.6)$$

Считая плотность экситонов малой, разложим  $Sp \ln(K)$  в ряд по  $\phi, \phi^*, \Phi$ .

$$Sp \ln(K) = Sp \ln(\hat{G}^{-1} - i\hat{\Phi}) = Sp \ln(\hat{G}_0^{-1}) - Sp \sum_0^{\infty} \frac{i^n}{n} [\hat{G}_0(\hat{\Phi} - i\hat{\Lambda})]^n \quad (1.2.7)$$

	$G_{0i}(p, \omega) = [i\omega - \epsilon_{0i}(p) + \mu]^{-1}$ $V(k) = 4\pi e^2 / k^2$
	$\Phi(p_2; p_1)$
	$X_i(p_2; p_1)$
	$\varphi(p_2; p_1)$

Теория возмущений описывается в терминах графиков, составленных из вышечисленных элементов, рядом с которыми стоят соответствующие им выражения. Результат разложения (1.2.7) графически изображен на рисунке (1.2.1).

$$\begin{aligned}
\text{Sp} \ln(k) = & -i \left[ \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} \right] \\
& - \left( \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} \right) \\
& + \text{Diagram 5} \\
& + i \left[ \text{Diagram 6} + \text{Diagram 7} \right] \\
& + \left[ \text{Diagram 8} + \text{Diagram 9} \right] \\
& - \frac{1}{2} \text{Diagram 10}
\end{aligned}$$

Рисунок 1.2.1

Разложение произведено по параметру  $\phi$  до  $\phi^4$ , при этом оставлены только линейные слагаемые по  $\Phi$  и  $\chi$ . Значение  $Sp \ln G_0^{-1}$  при этом не зависит от полей и может быть опущено. Вычисление и анализ диаграмм составляет основное содержание следующего раздела.

### 1.3. Уравнение Бете-Солпитера

Так как теория возмущений строится по газовому параметру ( $na_B^d \ll 1$ )  $d$ -размерность системы, а слагаемые, линейные по  $\phi$  в разложении  $Sp[\ln(K)]$  отсутствуют, вычисления начнем с диаграммы рисунок 1.3.1, считая эффективные массы в зонах 1 и 2 равными. Конечные ответы легко могут быть

обобщены на случай различных масс.

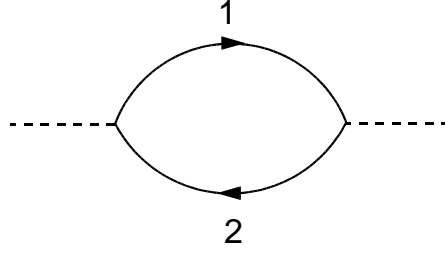


Рисунок 1.3.1

Аналитическое выражение, отвечающее диаграмме, имеет вид:

$$\begin{aligned} \beta^{-1} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n} \phi_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n}^* \phi_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n} \sum_{\varepsilon_m} G_{01}(\mathbf{p} - \mathbf{k}/2, \varepsilon_m - \omega_n/2) G_{02}(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2, \varepsilon_m + \omega_n/2) = \\ = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n} \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) \phi(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) \Pi_{12}(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) \end{aligned} \quad (1.3.1)$$

где  $\Pi_{12}$  представляет собой сумму по частоте от двух гриновских функций электронов из разных зон. Вычисляя сумму согласно [37], получим (Приложение I):

$$\Pi_{12}(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) = -\frac{n_e(\mathbf{p} + \frac{\mathbf{k}}{2}) - n_h(\mathbf{p} - \frac{\mathbf{k}}{2})}{i\omega_n - E_{\mathbf{p}\mathbf{k}}} \quad (1.3.2)$$

$$E_{\mathbf{p}\mathbf{k}} = \varepsilon_2(\mathbf{p} + \frac{\mathbf{k}}{2}) - \varepsilon_1(\mathbf{p} - \frac{\mathbf{k}}{2}) = E_g + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\mathbf{k}^2}{2M} \quad (1.3.3)$$

Обозначено:  $n_i(\mathbf{p}) = [\exp(\varepsilon_i(\mathbf{p}) - \mu)/T + 1]^{-1}$  - фермиевские функции распределения для электронов и дырок из зон 2 и 1 соответственно. Считая массы  $m_e$  и  $m_h$  равными, имеем:  $m = m_e/2$ ,  $M = 2m_e$ ,

$$n_e(\mathbf{p}) = \frac{1}{\exp(\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu)/T + 1} \quad n_h(\mathbf{p}) = 1 - \frac{1}{\exp(\varepsilon(\mathbf{p}) + \mu)/T + 1} \quad (1.3.4)$$

Для  $T = 0, \mu = 0$   $n_e = 0, n_h = 1$ . Отметим, что диаграммы, определяющие экранировку кулоновского взаимодействия вычисляются аналогично и выражаются через  $\Pi_{11}$  и  $\Pi_{22}$ . Очевидно, что для случая  $T = 0, \mu = 0$  эти диаграммы тождественно обращаются в 0. Для случая  $\mu \neq 0$  учет диаграмм с локальным расщеплением будет произведен в следующем разделе. Таким образом, подставив вычисленное слагаемое в действие, имеем :

$$S = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n} \frac{\phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) \phi(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n)}{i\omega_n - E_{\mathbf{p}\mathbf{k}}} + \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n} V_{\mathbf{k}} \Delta^*(\mathbf{p}_1 - \mathbf{k}, \mathbf{p}_2, \omega_n) \Delta(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n) +$$



$$+i \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n} [\phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) \Delta(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) + c.c.] + F_1(\phi^* \phi, \Phi) + F_2(\phi^* \phi, \chi) + F_3(|\phi|^4) + \dots \quad (1.3.5)$$

Будем вычислять статистическую сумму методом перевала по теории возмущений, опуская слагаемые  $F_\alpha$ . Как будет показано ниже, учет этих слагаемых приводит к поправке более высокого порядка малости. Проварьировав по  $\phi^*$  и  $\phi$ , приравняв вариацию к 0 и выразив  $\Delta$  через  $\phi$  в перевале, получим:

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) &= i (E_{\mathbf{p}\mathbf{k}} - i\omega_n) \Delta(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n), \\ \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) &= i (E_{\mathbf{p}\mathbf{k}} - i\omega_n) \Delta^*(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) \end{aligned} \quad (1.3.6)$$

$$\begin{aligned} S &= \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n} \Delta^*(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) (i\omega_n - E_{\mathbf{p}\mathbf{k}}) \Delta(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) + \\ &+ \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{l}, \omega_n} \Delta^*(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) V_1 \Delta(\mathbf{p} + \mathbf{l}, \mathbf{k}, \omega_n) + F_1(\Delta^* \Delta, \Phi) + F_2(\Delta^* \Delta, \chi) + F_3(|\Delta|^4) + \dots \end{aligned} \quad (1.3.7)$$

Проварьировав по  $\Delta^*$  и  $\Delta$  и приравняв вариацию к 0, получим уравнение на  $\Delta(\Delta^*)$  в перевале. Это и есть уравнение Бете-Солпитера

$$\left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\mathbf{k}^2}{2M} + E_g - i\omega_n \right) \Delta(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) = \sum_{\mathbf{l}} V_1 \Delta(\mathbf{p} + \mathbf{l}, \mathbf{k}, \omega_n). \quad (1.3.8)$$

Для того, чтобы найти решение этого уравнения, разложим функцию  $\Delta$  по полному набору собственных функций дискретного спектра атома водорода  $\psi_N(\mathbf{p})$  с собственными значениями  $E^N = -E_c^N = -me^4/2(N+1)^2$  ( $N = 0, 1, 2, \dots$ ):

$$\Delta(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) = \sum_N \psi_N(\mathbf{p}) C_N(\mathbf{k}, \omega_n) \quad (1.3.9)$$

где  $\psi_N$  определяются из уравнения Шредингера:

$$\left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + E_c^N \right) \psi_N(\mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{l}} V_1 \psi_N(\mathbf{p} + \mathbf{l}) \quad (1.3.10)$$

Факторизовав функцию  $\Delta$  подобным образом, заменив суммы по импульсам  $p$  на интегралы обычным способом, получим действие, переписанное через функции  $C^*$  и  $C$ :

$$S = \sum_{\mathbf{k}} \sum_N C_N^*(\mathbf{k}, \omega_n) \left[ i\omega_n - \frac{\mathbf{k}^2}{2M} + (E_c^N - E_g) \right] C_N(\mathbf{k}, \omega_n) + \dots \quad (1.3.11)$$

В дальнейшем ограничимся в сумме только основными состояниями  $N = 0$  экситона. После того как действие представлено в виде (1.3.11), становится понятным физический смысл введенных обозначений. Так  $C$  - экситонное поле,  $\mathbf{k}$  - импульс экситона,  $M$  - его масса. Возможность или невозможность бозе-конденсации экситонов определяется знаком  $\lambda_0 = E_c^0 - E_g$ . В данной

работе неидеальный бозе-газ экситонов будет рассмотрен как в конденсатной области, где  $\lambda_0 > 0$ , так и в области  $\lambda_0 < 0$ , в которой экситоны могут быть только виртуальными.

#### 1.4. Длинноволновые флуктуации зарядовой плотности электронов

Рассмотрим диаграммы, отвечающие локальному полю  $\Phi$ . Имеется два класса диаграмм. Диаграммы рис.1.4.1.a. не вносят вклада в действие, так как система в целом электронейтральна [31, 38]. Диаграммы, представляющие собой комбинацию полей  $\phi$  и  $\Phi$ , представлены на рис.1.4.1.b. Аналитическое выражение для первой диаграммы рис.1.4.1.b. имеет вид:

$$i\beta^{-1/2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}, \omega_n} \phi^*(\mathbf{q} + \frac{\mathbf{p}_1}{2}, \mathbf{p}_2, \omega_{n2}) \phi(\mathbf{q} + \frac{\mathbf{p}_2}{2}, \mathbf{p}_1, \omega_{n1}) \times \\ \times \Phi(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1, \omega_{n2} - \omega_{n1}) \Pi_{112}(\mathbf{q}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_{n1}, \omega_{n2}) \quad (1.4.1)$$

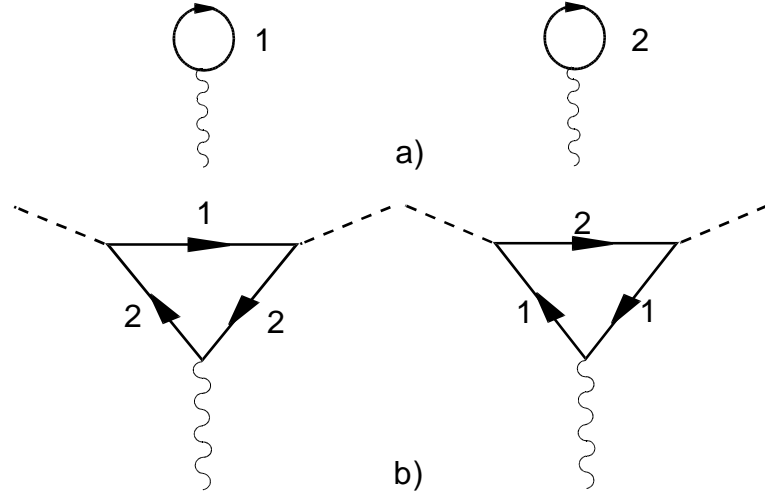


Рисунок 1.4.1

Аналогично для второй диаграммы рис.1.4.1.b:

$$i\beta^{-1/2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}, \omega_n} \phi^*(\mathbf{q} + \frac{\mathbf{p}_2}{2}, \mathbf{p}_1, \omega_{n1}) \phi(\mathbf{q} + \frac{\mathbf{p}_1}{2}, \mathbf{p}_2, \omega_{n2}) \times \\ \times \Phi(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1, \omega_{n2} - \omega_{n1}) \Pi_{221}(\mathbf{q}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_{n1}, \omega_{n2}) \quad (1.4.2)$$

где  $\Pi_{112}$  и  $\Pi_{221}$  представляют собой сумму по кольцевой частоте от трех гриновских функций (Приложение I). Приведем выражение для  $\Pi_{112}$ :

$$\Pi_{112}(\mathbf{q}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_{n1}, \omega_{n2}) = \beta^{-1} \sum_{\varepsilon_m} G_{01} \left( \mathbf{q} - \frac{(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1)}{2}, \varepsilon_m - \frac{(\omega_{n2} - \omega_{n1})}{2} \right) \times \\ \times G_{01} \left( \mathbf{q} + \frac{(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1)}{2}, \varepsilon_m + \frac{(\omega_{n2} - \omega_{n1})}{2} \right) \times$$

$$\times G_{02} \left( \mathbf{q} + \frac{(\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_1)}{2}, \varepsilon_m + \frac{(\omega_{n2} + \omega_{n1})}{2} \right) \quad (1.4.3)$$

Вычислив сумму по частотам и воспользовавшись связью между  $\phi$  и  $\Delta$  в перевале (1.3.6), получим выражение для диаграмм рис.1.4.1.b через  $\Delta$  и  $\Delta^*$  :

$$i\beta^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} \Phi(\mathbf{k}, \omega_k) \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}, \omega_k} \Delta^*(\mathbf{q}, \mathbf{p} + \mathbf{k}, \omega_n + \omega_k) \Delta(\mathbf{q} + \frac{\mathbf{k}}{2}, \mathbf{p}, \omega_n) - \\ - \Delta^*(\mathbf{q} + \frac{\mathbf{k}}{2}, \mathbf{p}, \omega_n) \Delta(\mathbf{q}, \mathbf{p} - \mathbf{k}, \omega_n - \omega_k). \quad (1.4.4)$$

Используем разложение параметра порядка  $\Delta$  (1.3.9) и перейдем к координатному представлению для функций  $\psi$  :

$$\Delta(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) = \sum_N \int d\mathbf{r} \psi_N(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{r}) C_N(\mathbf{k}, \omega_n). \quad (1.4.5)$$

Ограничимся только переходами 0-1 и введем обозначения :

$$D_{10}(\mathbf{k}) = 2 \int d\mathbf{r} \psi_1(\mathbf{r}) \sin\left(\frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{2}\right) \psi_0(\mathbf{r}) = \mathbf{k}\mathbf{d}_{10} + \dots \\ \pi(\mathbf{k}, \omega_k) = \sum_p [C_1^*(p+k)C_0(p) + C_0^*(p)C_1(p-k)] \quad (1.4.6)$$

Здесь  $\mathbf{d}_{10}$  - дипольный момент перехода между основным и первым возбужденным состоянием атома водорода, отнесенный к заряду электрона. Проинтегрировав по "быстрым" импульсам, запишем ответ через экситонные поля:

$$\beta^{-1/2} \sum_k \Phi(\mathbf{k}, \omega_k) D_{10}(\mathbf{k}) \pi(\mathbf{k}, \omega_k) \quad (1.4.7)$$

Отметим, что диаграммы, изображенные на рис.1.4.1.b., после интегрирования по  $\Phi$  дадут вклад во взаимодействие экситонов на больших расстояниях, которое, как будет показано в дальнейшем, носит характер ван-дерваальсовых сил притяжения, а также во взаимодействие легирующих электронов зоны 2 с экситонами, которое имеет вид взаимодействия диполь-заряд.

## 1.5. Эффективное взаимодействие бозонов

Отличие диаграмм рис.1.4.1. для локального расщепления от диаграмм рис.1.5.1. для билакального расщепления состоит в том, что поле  $\Phi$  зависит только от разности импульсов  $\mathbf{p}_1$  и  $\mathbf{p}_2$  и не зависит от импульса, передаваемого в кольце, а поля  $\chi_i$  зависят от этого импульса. Диаграммы (рис.1.5.1.a) после интегрирования по полям  $\chi$  дадут вклад в термодинамический потенциал. Эти диаграммы можно отождествить с эффективной перенормировкой спектра и

включить в определение эффективной массы. Воспользовавшись выражениями для  $\Pi_{112}$  и  $\Pi_{221}$  (Приложение I) и связью между  $\phi$  и  $\Delta$  в перевале (1.3.6), запишем сразу ответ для суммы двух диаграмм (b):

$$\beta^{-1} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}, \omega} \chi_1(\mathbf{q}, \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1, \omega_{n_2} - \omega_{n_1}) \Delta^*(\mathbf{q} + \frac{\mathbf{p}_1}{2}, \mathbf{p}_2, \omega_{n_2}) \Delta(\mathbf{q} + \frac{\mathbf{p}_2}{2}, \mathbf{p}_1, \omega_{n_1}) -$$

$$- \beta^{-1} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}, \omega} \chi_2(\mathbf{q}, \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2, \omega_{n_1} - \omega_{n_2}) \Delta^*(\mathbf{q} - \frac{\mathbf{p}_2}{2}, \mathbf{p}_1, \omega_{n_1}) \Delta(\mathbf{q} - \frac{\mathbf{p}_1}{2}, \mathbf{p}_2, \omega_{n_2}) \quad (1.5.1)$$

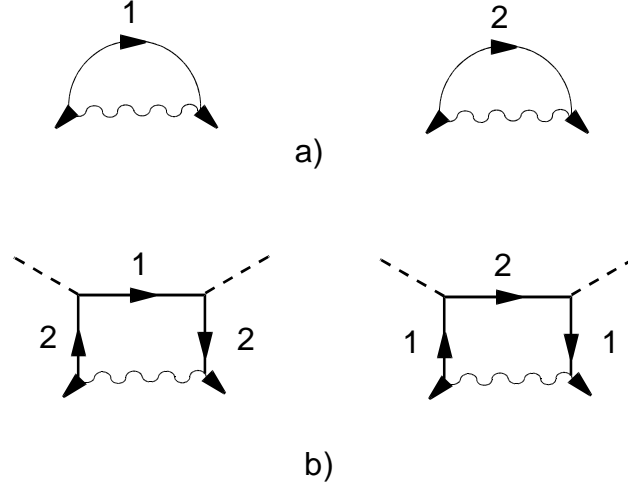


Рисунок 1.5.1

Теперь можно проинтегрировать по полям  $\chi_i$ . Диаграммы после интегрирования по  $\chi_i$  представлены на рис.1.5.2.b,c. Волнистая линия отвечает кулоновскому взаимодействию  $V$ . Вклад в действие от этих диаграмм

$$S = \int \exp [F_2(\Delta^* \Delta, \chi)] D\chi_1^* D\chi_1 D\chi_1^* D\chi_1$$

в формуле (1.3.7) имеет вид :

$$S_2 = \beta^{-1} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{p}, \mathbf{k}} V_1 \Delta^*(\mathbf{p}, k_1) \Delta(\mathbf{p} + \frac{(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)}{2}, k_2) \times$$

$$\times \Delta^*(\mathbf{p} + \mathbf{l} + \frac{(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)}{2}, k_3 - k_1 + k_2) \Delta(\mathbf{p} + \mathbf{l} + \frac{(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)}{2}, k_3) \quad (1.5.2)$$

Так как импульс ( $\mathbf{k}_\alpha$ ) центра масс экситона много меньше характерного импульса относительного движения, можно им пренебречь в первом аргументе функций  $\Delta$ . Воспользуемся разложением (1.3.9) и ограничимся основным состоянием в волновой функции экситонов

$$\Psi_0(p) = \frac{8\sqrt{\pi a_B^3}}{(1 + (pa_B)^2)^2}, \quad d = 3 \quad (1.5.3)$$

Проинтегрировав по импульсам относительного движения, получим  $S_2$  в следующем виде:

$$S_2 = B\beta^{-1} \sum_k C_0^*(k_1)C_0(k_2)C_0^*(k_3)C_0(k_4)\delta_{k_1+k_3, k_2+k_4} \quad (1.5.4)$$

$$B = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^d} \Psi_0^2(\mathbf{p})V_{\mathbf{k}}\Psi_0^2(\mathbf{p} + \mathbf{k}) = \frac{50\pi}{6} \frac{a_B}{m}, \quad d = 3 \quad (1.5.5)$$

При этом  $B$  вносит вклад в амплитуду рассеяния экситона на экситоне, также, как и  $F_3(|\phi|^4)$  (1.3.7).

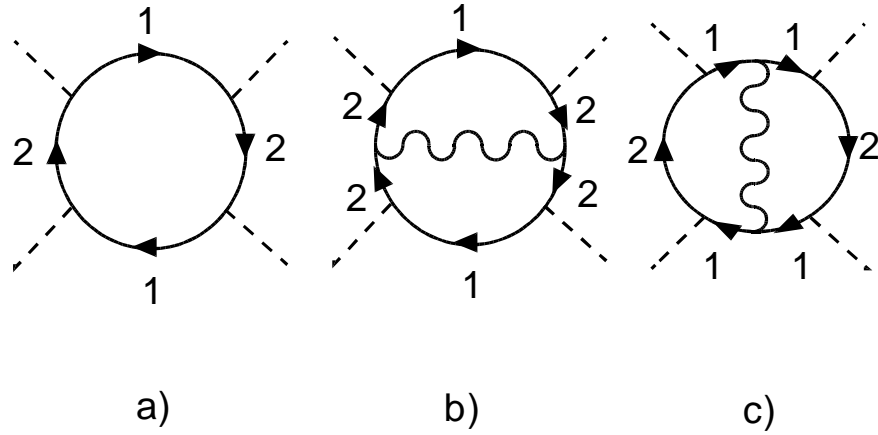


Рисунок 1.5.2

Соответствующая диаграмма представлена на рис.1.5.2.а. Аналитическое выражение, отвечающее этой диаграмме имеет вид:

$$F_3(|\phi|^4) = -\frac{1}{2}\beta^{-1} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega} \phi^*(\mathbf{p} - \frac{(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)}{2}, \mathbf{k}_2, \omega_{n_2}) \phi(\mathbf{p} - \frac{(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)}{2}, \mathbf{k}_3, \omega_{n_3}) \times$$

$$\Pi_{1212}(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega) \phi^*(\mathbf{p}, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3, \omega_{n_1} - \omega_{n_2} + \omega_{n_3}) \phi(\mathbf{p} - \frac{(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)}{2}, \mathbf{k}_1, \omega_{n_1}) \quad (1.5.6)$$

$$\Pi_{1212}(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega) = \beta^{-1} \sum_k G_{01} \left( p - \frac{(k_1 + k_2 - k_3)}{2} \right) G_{02} \left( p - \frac{(k_1 - k_2 - k_3)}{2} \right) \times \\ \times G_{01} \left( p - \frac{(k_1 - k_2 + k_3)}{2} \right) G_{02} \left( p + \frac{(k_1 - k_2 + k_3)}{2} \right) \quad (1.5.7)$$

Напомним, что  $p = (\mathbf{p}, \varepsilon_m)$ ,  $k = (\mathbf{k}, \omega_n)$  и суммирование ведется по кольцевой частоте  $\varepsilon_m$ . После несложных, но достаточно громоздких преобразований, воспользовавшись связью между  $\phi$  и  $\Delta$  в перевале (1.3.6) имеем:

$$S_3 = -\beta^{-1} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n} V_1 \Delta^*(\mathbf{p}, k_1 - k_2 + k_3) \Delta^*(\mathbf{p} - \frac{(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)}{2}, k_2) \times$$

$$\times \Delta(\mathbf{p} - \mathbf{l} - \frac{(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)}{2}, k_3) \Delta(\mathbf{p} - \frac{(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3)}{2}, k_1) \quad (1.5.8)$$

Пренебрегая импульсом центра масс экситона в первом аргументе функции  $\Delta$ , аналогично тому, как это было сделано в случае бислокального расщепления, воспользовавшись разложением параметра порядка (1.3.9) и ограничиваясь только вкладом от основного состояния экситонов, имеем для действия:

$$S_3 = -A\beta^{-1} \sum_k C_0^*(k_1) C_0(k_2) C_0^*(k_3) C_0(k_4) \delta_{k_1+k_3, k_2+k_4} \quad (1.5.9)$$

$$A = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^d} \Psi_0^3(\mathbf{p}) V_{\mathbf{k}} \Psi_0(\mathbf{p} + \mathbf{k}) = \frac{21\pi a_B}{2 m}, \quad d = 3 \quad (1.5.10)$$

Объединяя слагаемые  $S_2$  и  $S_3$  и вводя обозначения для амплитуды рассеяния экситона на экситоне  $f$ , окончательно запишем:

$$S_2 + S_3 = -\frac{f}{2} \beta^{-1} \sum_k C_0^*(k_1) C_0(k_2) C_0^*(k_3) C_0(k_4) \delta_{k_1+k_3, k_2+k_4}$$

$$f = 2(A - B) = \frac{13\pi a_B}{3 m}, \quad d = 3 \quad (1.5.11)$$

Рассмотрим теперь двумерную ситуацию. В этом случае кулоновское взаимодействие в импульсном представлении имеет вид  $V_k = 2\pi e^2/|\mathbf{k}|$ . Воспользовавшись тем, что волновая функция основного состояния в координатном представлении имеет тот же самый вид, что и в трехмерной задаче, перейдем в импульсное представление:

$$\Psi_0(p) = \frac{\sqrt{2\pi a_B^2}}{(1 + (pa_B/2)^2)^{3/2}}, \quad d = 2 \quad (1.5.12)$$

Подставив двумерный кулоновский потенциал и волновую функцию в выражения для  $A$  и  $B$  (1.5.4) (1.5.9), запишем окончательный ответ

$$f = 2(A - B) = \frac{\pi}{m} \left( 4 - 6 \int_0^\infty \frac{dt}{(1+t)^3} \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{(1+t \sin^2 \varphi)^{5/2}} \right) \approx \frac{3.04}{m}, \quad d = 2 \quad (1.5.13)$$

Приведем окончательные формулы в координатном представлении, обобщающие выражения, полученные и исследованные в этом параграфе:

$$f = f_1 - \int d\mathbf{x} V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) (\gamma_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}))^2,$$

$$f_1 = \int d\mathbf{y} d\mathbf{z} d\mathbf{u} V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \Psi_0(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \Psi_0(\mathbf{y} - \mathbf{z}) \Psi_0(\mathbf{z} - \mathbf{u}) \Psi_0(\mathbf{u} - \mathbf{x})$$

$$\gamma_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \int d\mathbf{z} \Psi_0(\mathbf{y} - \mathbf{z}) \Psi_0(\mathbf{z} - \mathbf{x}) \quad (1.5.14)$$

Амплитуда  $f$  была вычислена для случая кулоновского взаимодействия трехмерной электрон-дырочной системы в работе Келдыша и Козлова [10,11]. Отметим, однако, что  $f$  не есть амплитуда рассеяния изолированных экситонов

друг на друге, т.к. учитываются многочастичные эффекты, связанные с тем, что экситон - составная частица. Знак  $f$  отвечает принципу Паули.

Таким образом, были вычислены все слагаемые в разложении до  $|\phi|^4$  и осуществлен переход к параметру порядка, зависящему только от медленных переменных. Функционал гидродинамического действия имеет следующий вид :

$$S = \sum_k C_0^*(\mathbf{k}, \omega_n) \left[ i\omega_n - \frac{k^2}{2M} + \lambda_0 \right] C_0(\mathbf{k}, \omega_n) - \frac{f}{2} \beta^{-1} \sum_k C_0^*(k_1) C_0(k_2) C_0^*(k_3) C_0(k_4) \delta_{k_1+k_3, k_2+k_4} \quad (1.5.15)$$

При отличной от нуля концентрации электронов в верхней зоне поправки к амплитуде рассеяния будут определяться разложением по степеням малого параметра  $x = p_F a_B \ll 1$ . Аналитические выражения, решающие задачу о поправках к амплитуде рассеяния в общем виде приведены в Приложении.

## 1.6. Эффективное фермион - бозонное взаимодействие

Рассмотрим ситуацию, когда в систему, близкую к переходу в состояние экситонного диэлектрика внедрены легирующие примеси. Будем полагать при этом, что среда может обладать сильной поляризуемостью (в дальнейшем это будет доказано). Наличие легко поляризуемой среды может приводить к тому, что свободные носители в зоне могут образовываться даже при малой концентрации примесей, так как взаимодействие электронов с примесями определяется статической диэлектрической проницаемостью, имеющей большую величину за счет экситонного вклада. Это приводит к тому, что радиус связанного состояния электрона с примесью будет существенно больше размера экситона, при этом газ легирующих электронов может иметь плотность, при которой среднее расстояние между электронами будет гораздо больше размера экситона. Это позволяет рассматривать систему легирующих электронов, взаимодействующих с экситонами.

Для того, чтобы вычислить вершину, отвечающую взаимодействию "медленных" электронов, залитых в зону 2 (рис.1.1.1.b.), с экситонами, введем в действие источники, отвечающие "медленным" электронам. Разделение частиц на быстрые и медленные происходит при сравнении импульса частицы с  $p_0 = (a_B)^{-1}$ . Таким образом, вводя в действие функции источников, имеем:

$$S_\eta = S + \sum_p [\bar{a}(p)\eta(p) + \bar{\eta}(p)a(p)] \quad a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad \eta = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} \quad (1.6.1)$$

Далее для упрощения записи будем опускать аргументы функций и знаки

суммирования. Будем вычислять

$$Z[\bar{\eta}, \eta] = \int \exp(S_\eta) D\bar{a} Da D\Delta^* D\Delta D\phi^* D\phi,$$

проинтегрировав, как и в случае отсутствия легирования, по всем ферми-полям, воспользовавшись соотношением:

$$\frac{\int Dx \exp(-\bar{x}Ax - \bar{x}\eta - \bar{\eta}x)}{\int Dx \exp(-\bar{x}Ax)} = \exp(\bar{\eta}A^{-1}\eta). \quad (1.6.2)$$

Выпишем часть действия, зависящую от функций источников :

$$S = S(\phi, \Delta, \Phi, \chi) + Sp \ln \hat{K} + \bar{\eta} \hat{K}^{-1} \eta \quad (1.6.3)$$

При этом  $K$  определяется формулами (1.2.4) - (1.2.5). Интегрируя по всем фермионным полям, а затем осуществляя обратное преобразование, заключающееся в переходе от функций источников к "медленным"электронам в зоне 2, запишем часть действия, зависящую от "медленных"электронных полей  $\alpha$ :

$$S = \sum_p \bar{\alpha}(p)[i\varepsilon_n - \varepsilon(p) + \mu]\alpha(p) - i\beta^{-1/2} \sum_p \bar{\alpha}(p_1)\alpha(p_2)\Phi(p_1 - p_2) - \beta^{-1} \sum_{p_i} \Lambda \bar{\alpha}(p_1)\alpha(p_2)C_0^*(p_3)C_0(p_4)\delta_{p_1+p_3, p_2+p_4} \quad (1.6.4)$$

$$\Lambda = |\Psi_0(p=0)|^2 E_g - \gamma_0 \quad (1.6.5)$$

Происхождение первого слагаемого связано с линейной зависимостью поляриза-ционного оператора  $\Pi_{12}$  (1.3.2) от плотности "медленных"электронов. Вершина  $\gamma_0$  определяется диаграммой, изображенной на рисунке 1.6.1.

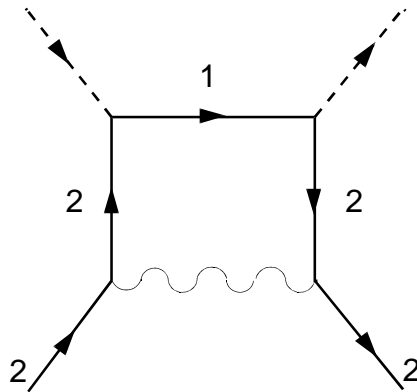


Рисунок 1.6.1

Происхождение этого вклада в амплитуду рассеяния связано с корреляционными эффектами, определяемыми статистикой экситонов, аналогично вкладу в амплитуду рассеяния бозонов друг на друге и, как видно из рисунка,



является следствием интегрирования по полю  $\chi$ , отвечающему бислокальному расщеплению. Знак  $\gamma_0$  отвечает эффективному притяжению электронов и экситонов. Аналитическое выражение для  $\gamma_0$  имеет вид:

$$\gamma_0 = \int d\mathbf{x} V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \left( \int d\mathbf{z} \Psi_0(\mathbf{y} - \mathbf{z}) \Psi_0(\mathbf{z} - \mathbf{x}) \right) \quad (1.6.6)$$

Так как волновая функция водородоподобного атома зависит от разности  $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ , интегралы, стоящие в правой части, естественно, не зависят от координаты. Еще раз отметим полную аналогию вычислений амплитуды рассеяния для экситон - экситонного и экситон - электронного взаимодействия.

Вычисляя интегралы, находим

$$\Lambda = \begin{cases} 2\pi E_g a_B^2 - \frac{3\pi^2}{4m} & , d = 2 \\ 64\pi E_g a_B^3 - 20 \frac{\pi a_B}{m} & , d = 3 \end{cases} \quad (1.6.7)$$

Таким образом, мы видим, что в пределе  $E_g \rightarrow E_c$  полная амплитуда рассеяния электронов на экситонах без учета вклада от взаимодействия электронов и экситонов на больших расстояниях, отвечает их отталкиванию, однако, уменьшая ширину запрещенной зоны даже оставаясь в рамках газового приближения можно достичь ситуации, когда эффективная амплитуда рассеяния электронов на экситонах целиком определяется дипольными силами. Причем, с понижением размерности рассматриваемой системы такая возможность становится более вероятной, то есть притяжение преобладает над отталкиванием. С другой стороны, в пределе малой плотности электронов, существенным становится взаимодействие электронов и экситонов на больших расстояниях, которое является также притяжением. Полная амплитуда рассеяния

$$\Gamma = \Lambda + \gamma$$

Где  $\gamma$  - вклад от взаимодействия на больших расстояниях. К вычислению этого взаимодействия мы и переходим.

Процедура дальнейшего интегрирования по вспомогательным полям  $\phi$  и  $\phi^*$  аналогична проделанной ранее для случая нулевого легирования. Вводя обозначения:  $\rho_\alpha(\mathbf{x}, \tau) = \bar{\alpha}(\mathbf{x}, \tau)\alpha(\mathbf{x}, \tau)$  и объединяя выражения (1.4.7), (1.5.11) с выражением (1.6.4), запишем полный функционал гидродинамического действия:

$$\begin{aligned} S = & \sum_p \bar{\alpha}(p)[i\varepsilon_n - E(p) + \mu]\alpha(p) + \sum_k C_0^*(k)[i\omega_n - \frac{k^2}{2M} + \lambda]C_0(k) - \\ & - i\beta^{-1/2} \sum_k \Phi(k)[\rho_\alpha(k) + i\mathbf{k}\mathbf{d}_{01}\pi(k)] - \sum_k \frac{k^2}{8\pi e^2} \Phi(k)\Phi(-k) - \\ & - \frac{1}{2}\beta^{-1} \tilde{f} \sum_{p_i} C_0^*(p_1)C_0(p_2)C_0^*(p_3)C_0(p_4)\delta_{p_1+p_3, p_2+p_4} \end{aligned} \quad (1.6.8)$$

Здесь  $\tilde{f}$  - экситон-экситонная амплитуда рассеяния перенормированная за счет легирования (будем считать, однако, что  $\tilde{f}$  остается по прежнему положительной, обеспечивая отталкивание экситонов, и, тем самым, устойчивость системы),  $\lambda = E_c^* - E_g$ , причем  $-E_c^*$  - собственное значение уравнения (1.6.9), обобщающего одночастичное уравнение Шредингера на случай ненулевого легирования:

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + E_c^*\right) \tilde{\psi}_0(\mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{l}} V_1 \tilde{\psi}_0(\mathbf{p} + \mathbf{l}) [1 - n(\mathbf{p} + \mathbf{l})] \quad (1.6.9)$$

$n(\mathbf{p}) = [1 + \exp((\mathbf{p}^2 - p_F^2)/(2mT))]^{-1}$  - фермиевская функция распределения. Уравнение (1.6.9) переходит в уравнение (1.3.10) при  $p_F = 0$ . При этом,  $E_c^*$  зависит, вообще говоря, от легирования. Проинтегрировав действие (1.6.8) по полю  $\Phi$ , нетрудно получить вершины для взаимодействия электронов с экситонами и взаимодействие экситонов на больших расстояниях. Как можно было и ожидать, взаимодействие электронов с экситонами имеет вид взаимодействия типа диполь-заряд, а взаимодействие экситонов - диполь-диполь. Так как в системе нет экситонов в возбужденном состоянии, задача о взаимодействии экситонов на больших расстояниях эквивалентна задаче о взаимодействии двух атомов в S- состоянии. Решение этой задачи по теории возмущений, приводит, как известно [45], к ван-дер-ваальсовому притяжению. Действие  $S$  после интегрирования по полю  $\Phi$  имеет вид:

$$\begin{aligned} S = & \sum_p \bar{\alpha}(p) [i\varepsilon_n - E(p) + \mu] \alpha(p) + \sum_k C_0^*(k) [i\omega_n - \frac{k^2}{2M} + \lambda] C_0(k) - \\ & - \beta^{-1} \sum_{p_i} (\gamma + \Lambda) \bar{\alpha}(p_1) \alpha(p_2) C_0^*(p_3) C_0(p_4) \delta_{p_1+p_3, p_2+p_4} - \\ & - \beta^{-1} \sum_{p_i} V^{e-d}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \bar{\alpha}(p_1) \alpha(p_2) [C_1^*(p_3) C_0(p_4) + C_0^*(p_3) C_1(p_4)] \delta_{p_1+p_3, p_2+p_4} - \\ & - \frac{1}{2} \beta^{-1} \sum_{p_i} V^{d-d}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) [C_0^*(p_1) C_0^*(p_2) C_1(p_3) C_1(p_4) + \dots] \delta_{p_1+p_2, p_3+p_4} - \\ & - \frac{1}{2} \beta^{-1} \sum_{p_i} V_c(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \bar{\alpha}(p_1) \alpha(p_2) \bar{\alpha}(p_3) \alpha(p_4) \delta_{p_1+p_3, p_2+p_4} - \\ & - \frac{1}{2} \beta^{-1} \sum_{p_i} \tilde{f} C_0^*(p_1) C_0(p_2) C_0^*(p_3) C_0(p_4) \delta_{p_1+p_3, p_2+p_4} \quad (1.6.10) \end{aligned}$$

Схематически различные процессы рассеяния электронов на экситонах и экситонов друг на друге, отвечающие взаимодействию на больших расстояниях, изображены на рисунке 1.6.2. Выражение для  $\gamma$  имеет следующий вид:

$$\gamma \sim - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} (\mathbf{k}\mathbf{d})(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{d}) V(\mathbf{k}) V(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \frac{1}{\mathbf{k}^2/(2m) + E_c - E_c^1} < 0 \quad (1.6.11)$$

Здесь  $E_c^1$  - энергия первого возбужденного уровня водородоподобного атома.

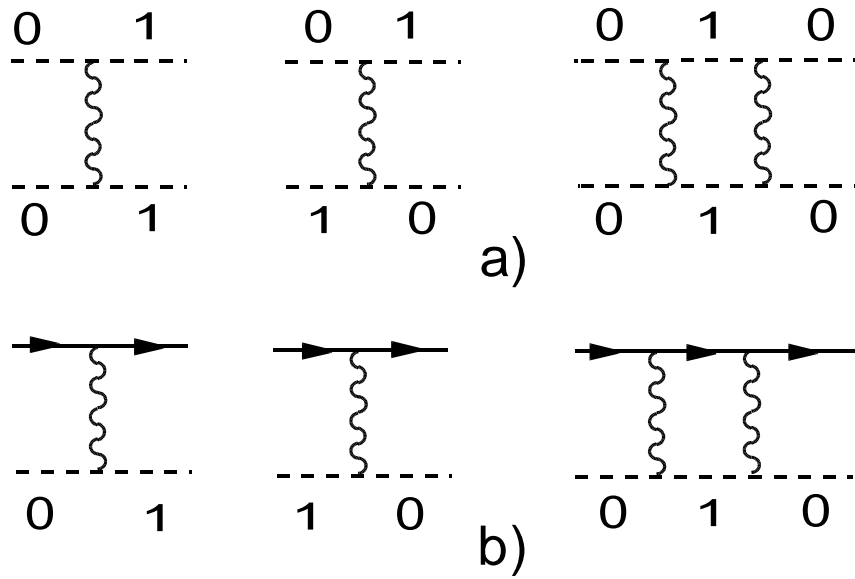


Рисунок 1.6.2

Приняты следующие обозначения:  $V_c(\mathbf{k}) = V_{\mathbf{k}}/(1 + \Pi_{22}V_{\mathbf{k}})$  - потенциал экранированного кулоновского взаимодействия электронов верхней зоны,  $V_{\mathbf{k}}^{e-d} = i\mathbf{k}\mathbf{d}_{01}V_{\mathbf{k}}$  - потенциал взаимодействия диполь-заряд,  $V_{\mathbf{k}}^{d-d} = (\mathbf{k}\mathbf{d}_{01})^2V_{\mathbf{k}}$  - потенциал диполь-дипольного взаимодействия. Однако, в принципе, возможна ситуация, когда без легирования экситонной фазы нет, т.е.  $E_g > E_c$ , но в присутствии легирования экситоны возникают за счет образования связанного состояния экситона с электроном. Возможность подобного явления в связи с проблемами ВТСП обсуждалась в работе [28]. Далее будет рассмотрен случай, когда эти связанные состояния разрушены легированием. К вопросу о возможности образования связанного состояния экситонов с электронами на свойства такой сильно взаимодействующей системы электронов и экситонов мы перейдем в следующей главе.

### 1.7. Экситонный переход в трехзонной модели.

В работах [22-29] на примере модели Эмери рассматривалась возможность экситонных возбуждений в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) в рамках трехзонной задачи и их влияние на сверхпроводящие свойства. В частности, исследовался случай, когда в нелегированной системе нет экситонов, а легирование дырками в широкую кислородную зону стимулирует процесс образования экситонов, т.е. электрон как-бы "вытягивает" экситон, и, в свою очередь, может образовывать с ним связанное состояние. По мнению авторов [28], такая физическая модель позволяет описать ряд экспериментально наблюдаемых явлений в ВТСП. Мы рассмотрим несколько отличную

от [28,20,21] модель трехзонного кристалла с двумя узкими электронными зонами 1 и 2, щель между которыми такова, что система близка к образованию экситонного диэлектрика [3], [4] и широкой зоной 3, в которую может происходить легирование электронами (рис.1.7.1). При этом или щель между зонами 1 и 3 из-за малой электронной массы в 3 слишком велика для экситонной неустойчивости на этой паре зон, либо реализуется ситуация, изображенная на рисунке 1.7.1., когда из-за сильной разницы в массах экситонный переход на зонах 1 - 3 также не происходит [19].

Гамильтониан и исходное действие задачи имеют вид:

$$S = - \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} \sum_i \bar{\Psi}_i(\mathbf{x}, \tau) \partial_\tau \Psi_i(\mathbf{x}, \tau) - \int_0^\beta d\tau \left( H(\tau) - \mu \sum_i \int d\mathbf{x} \bar{\Psi}_i(\mathbf{x}, \tau) \Psi_i(\mathbf{x}, \tau) \right) \quad (1.7.1)$$

$$H = \sum_i \int d\mathbf{x} \Psi_i^\dagger(\mathbf{x}) \varepsilon_i (-i\nabla) \Psi_i(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} \Psi_i^\dagger(\mathbf{x}) \Psi_i(\mathbf{x}) V_{\mathbf{x}-\mathbf{y}} \Psi_j^\dagger(\mathbf{y}) \Psi_j(\mathbf{y}) \quad (1.7.2)$$

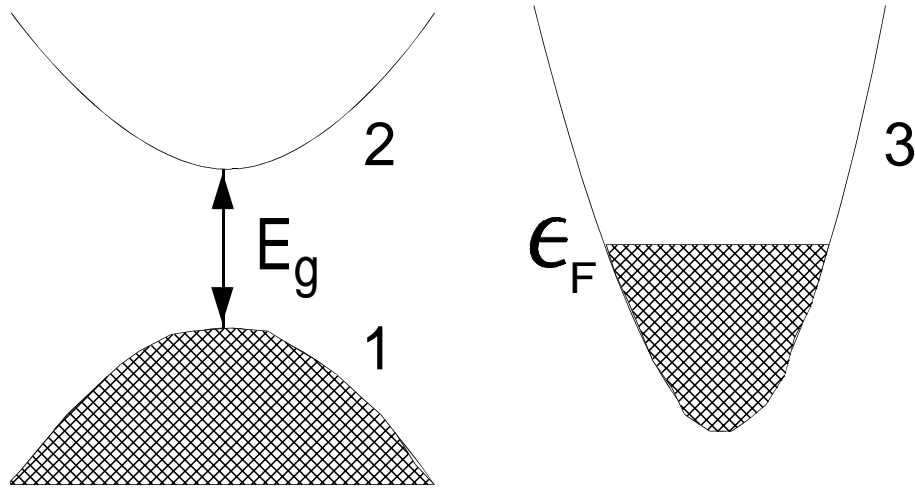


Рисунок 1.7.1

Здесь  $\Psi_i(\mathbf{x}, \tau)$ ,  $\bar{\Psi}_i(\mathbf{x}, \tau)$  - элементы бесконечномерной грассмановой алгебры с антипериодическими граничными условиями [31-36].

$$\Psi_i(\mathbf{x}, \tau + \beta) = -\Psi_i(\mathbf{x}, \tau), \quad \bar{\Psi}_i(\mathbf{x}, \tau + \beta) = -\bar{\Psi}_i(\mathbf{x}, \tau) \quad (1.7.3)$$

$i, j$  - номер зоны ( $i, j = 1, 2, 3$ ),  $V(r) = e^2/(\tilde{\varepsilon}_0 r)$  - потенциал кулоновского взаимодействия,  $\tilde{\varepsilon}_0$  - статическая диэлектрическая проницаемость,  $\varepsilon_i(-i\nabla)$  -

закон дисперсии электронов в зоне  $j$ ,  $\mu$  - химический потенциал,  $\beta = 1/T$ . Для простоты рассмотрим случай квадратичного закона дисперсии:

$$\varepsilon_1(\mathbf{p}) = -E_g^{(1)} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m_1}, \quad \varepsilon_2(\mathbf{p}) = E_g^{(2)} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m_2}, \quad \varepsilon_3(\mathbf{p}) = \frac{(\mathbf{p} + \mathbf{Q})^2 - p_F^2}{2m_3} \quad (1.7.4)$$

Будем также полагать  $m_3 \sim m_e$ ,  $m_1 = m_2 = M \gg m_e$ , где  $m_e$  - масса электрона, при этом масса экситона  $M_{ex} = 2M$ , а приведенная масса электрона и дырки  $M_{red} = M/2$ . Электронная система является нейтральной на фоне однородного положительного компенсирующего заряда. Учет фона, как обычно, приводит к исключению в фурье-компоненте потенциала слагаемого с импульсом, равным нулю. Для получения эффективного гамильтониана модели воспользуемся методом, изложенным в работе авторов [40 -44]. Рассмотрим статистическую сумму аналогично тому, как это было сделано для случая двухзонной модели. Введем интегрирование по дополнительным комплексным полям  $\Delta$  и  $\phi$ , где  $\Delta$ , как будет видно в дальнейшем, имеет смысл поля экситонов, а введение поля  $\phi$  связано с определением функциональной  $\delta$  - функции [40,41].

$$\begin{aligned} S &= \sum_i \sum_p \bar{a}_i(p) (i\varepsilon_m - \varepsilon_i(\mathbf{p}) + \mu) a_i(p) - \\ &- \frac{1}{2} \beta^{-1} \sum_{ij} \sum_{p_{1,2,3,4}} \bar{a}_i(p_1) a_i(p_2) V_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2} \bar{a}_j(p_3) a_j(p_4) \delta_{p_1 + p_3, p_2 + p_4} + S_{\phi\Delta} \\ S_{\phi\Delta} &= -i\beta^{-1/2} \left[ \sum_{p_{1,2}} \bar{a}_1(p_1) a_2(p_2) \phi^*(p_1, p_2) + c.c \right] + \\ &+ i \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n} (\phi^*(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n) \Delta(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n) + c.c) \end{aligned} \quad (1.7.5)$$

Для того, чтобы проинтегрировать по ферми- полям, введем под знак континуального интеграла интегрирование по скалярному бозе-полю  $\Phi$  :

$$\int d\Phi \exp \left( - \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} \frac{(\nabla \Phi(\mathbf{x}, \tau))^2}{8\pi e^2} \right) \quad (1.7.6)$$

Сдвигая стандартным способом:

$$\Phi(\mathbf{x}, \tau) \rightarrow \Phi(\mathbf{x}, \tau) + i \int d\mathbf{y} V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sum_i \bar{\Psi}_i(\mathbf{y}, \tau) \Psi_i(\mathbf{y}, \tau) \quad (1.7.7)$$

таким образом расцепляем член с кулоновским взаимодействием.

Однако, непосредственное взятие гауссова интеграла по  $\bar{\Psi}_i$ ,  $\Psi_i$  на данном этапе привело бы к ошибке, связанной с тем, что расцепив член со взаимодействием локальным (зависящим только от одной координаты) полем  $\Phi$ , мы не учитываем эффекты, связанные с отсутствием электронейтральности в системе на малых расстояниях. Для того, чтобы последовательно учесть эти

эффекты, в противоположность локальному расцеплению полем  $\Phi$ , единому для всех трех зон, необходимо ввести билокальное расцепление скалярными полями  $\Xi_i$ , при этом в каждой зоне расцепление проводится своим полем. Подробно процедура такого рода расцеплений изложена в [40,41].

Выполнив указанные тождественные преобразования и переходя к импульсному представлению в системе центра масс тяжелых электрона и дырки, получим действие в виде:

$$\begin{aligned}
S = & \sum_{ij} \sum_{p_1, p_2} \bar{a}_i(p_1) \hat{K}_{p_1 p_2}^{ij} a_j(p_2) + \sum_{k, p_{1,2}} V_k \Delta(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n) \Delta^*(\mathbf{p}_1 - \mathbf{k}, \mathbf{p}_2, \omega_n) + \\
& + i \sum_{p_{1,2}} [\phi^*(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n) \Delta(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n) + c.c.] + \sum_p [\bar{a}_3(p) \eta(p) + \bar{\eta}(p) a_3(p)] - \\
& - \frac{1}{2} \sum_k V_k^{-1} \left[ \Phi(k) \Phi(-k) + \sum_i \sum_{p_{1,2}} \chi_i(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_n) \chi_i(\mathbf{p}_1 - \mathbf{k}, -\mathbf{p}_2, -\omega_n) \right] \quad (1.7.8)
\end{aligned}$$

где  $p = (\mathbf{p}, \varepsilon_n = (2n + 1)\pi T)$ , а  $\hat{K}_{p_1 p_2}^{ij}$  представляется в виде матрицы  $3 \times 3$ :

$$\hat{K}_{p_1 p_2}^{ij} = \hat{G}_0^{-1}(p_1) \delta_{p_1, p_2} - i \hat{\Theta}_{p_1, p_2} \quad (1.7.9)$$

$$\hat{G}_0^{-1}(p) = \begin{pmatrix} i\varepsilon_m - \varepsilon_1(\mathbf{p}) + \mu & 0 & 0 \\ 0 & i\varepsilon_m - \varepsilon_2(\mathbf{p}) + \mu & 0 \\ 0 & 0 & i\varepsilon_m - \varepsilon_3(\mathbf{p}) + \mu \end{pmatrix} \quad (1.7.10)$$

$$\hat{\Theta}_{p_1 p_2} = \beta^{-1/2} \begin{pmatrix} \Phi - i\Xi_1 & \phi^* & 0 \\ \phi & \Phi - i\Xi_2 & 0 \\ 0 & 0 & \Phi - i\Xi_3 \end{pmatrix} \quad (1.7.11)$$

Для получения (1.7.8) мы воспользовались тем, что верхняя зона 2 пустая, а зона 1 полностью заполнена. Заполнение зоны 3 было учтено введением функций источников  $\eta(p)$  [31-33], [36].

Дальнейшая процедура состоит в последовательном интегрировании по полям  $\bar{a}_i, a_i, \phi, \Xi_i, \Phi$ . При этом, интегрирование по ферми-полям производится точно, а для построения теории возмущений используется разложение:

$$Sp \ln(K) = Sp \ln(\hat{G}_0^{-1}) - Sp \sum_0^{\infty} \frac{i^n}{n} [\hat{G}_0 \hat{\Theta}]^n \quad (1.7.12)$$

Параметром теории возмущений является отношение  $|E_g - E_c|/E_c \ll 1$ , где  $E_g = E_g^{(1)} + E_g^{(2)}$ ,  $E_c$  - эффективная энергия связи электрона и дырки в экситоне. Это эквивалентно газовому приближению  $n_0 a_B^3 \ll 1$ ,  $n_0$  - плотность экситонного конденсата,  $a_B$  - боровский радиус экситона. Разлагая по полю  $\phi$  до членов  $\phi^4$ , а по полям  $\Phi$  и  $\Xi_i$  до  $\Phi^2(\Xi_i^2)$ , методом перевала вычисляем интеграл по  $\phi$  и гауссовы интегралы по  $\Phi$  и  $\Xi_i$ . Полученный таким образом вклад в действие, зависящий от функций источников, можно снова переписать в терминах фермионного поля.

Опуская громоздкие, но несложные выкладки, приведем конечный результат для функционала эффективного действия, выраженный через бозонное поле  $C$  и фермионное поле  $\alpha$ , при этом  $C$  есть коэффициенты в разложении  $\Delta$  по собственным функциям водородоподобного атома аналогично тому, как это было сделано в выражениях (1.3.9), (1.3.10).

Таким образом  $C$  имеет смысл поля экситонов. Ограничиваясь для  $C$  только основным и первым возбужденным состояниями, запишем функционал эффективного действия, сохраняя обозначения предыдущего параграфа, в виде :

$$\begin{aligned}
S &= S_0 + S_{ex} + S_{el} + S_{el-ex} \\
S_0 &= \sum_p \bar{\alpha}(p)[i\varepsilon_n - E(p) + \mu]\alpha(p) + \sum_k C_0^*(k)[i\omega_n - \frac{k^2}{2M} + \lambda]C_0(k) \\
S_{el} &= -\frac{1}{2}\beta^{-1} \sum_{p_i} V_c(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\bar{\alpha}(p_1)\alpha(p_2)\bar{\alpha}(p_3)\alpha(p_4) \\
S_{ex} &= -\frac{\tilde{f}}{2}\beta^{-1} \sum_{p_i} C_0^*(p_1)C_0(p_2)C_0^*(p_3)C_0(p_4)\delta_{p_1+p_3,p_2+p_4} - \\
&\quad -\frac{1}{2}\beta^{-1} \sum_{p_i} V^{d-d}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) [C_0^*(p_1)C_0^*(p_2)C_1(p_3)C_1(p_4) + \dots] \delta_{p_1+p_3,p_2+p_4} \\
S_{el-ex} &= -\beta^{-1} \sum_{p_i} V^{e-d}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\bar{\alpha}_{p_1}\alpha_{p_2} [C_{1p_3}^*C_{0p_4} + C_{0p_3}^*C_{1p_4}] \delta_{p_1+p_3,p_2+p_4} \quad (1.7.13)
\end{aligned}$$

Таким образом, эффективное действие трехзонной модели может быть записано в виде, аналогичном двухзонной модели с легированием.

Рассмотрим электрон - экситонную систему при  $T = 0$ . Учтем взаимодействие электронов с экситонами на больших по сравнению с размерами экситона расстояниях во втором порядке теории возмущений. Будем считать также  $E_g < E_c$ , что означает [31,37,45-47], что в бозе-системе возможна конденсация. Выделяя конденсат стандартным образом, в итоге получим эффективный гамильтониан электрон - экситонной системы:

$$\begin{aligned}
H_{eff} &= H_{el} + H_{ex} + H_{el-ex} \\
H_{el} &= \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_3(\mathbf{p})\bar{\alpha}(\mathbf{p})\alpha(\mathbf{p}) + 1/2 \sum_{\mathbf{pl}} V_c(\mathbf{l})\bar{\alpha}(\mathbf{p}_1)\bar{\alpha}(\mathbf{p}_2)\alpha(\mathbf{p}_2 - \mathbf{l})\alpha(\mathbf{p}_1 + \mathbf{l}) \\
H_{ex} &= \sum_{\mathbf{k}} s|\mathbf{k}|C_0^*(\mathbf{k})C_0(\mathbf{k}) \\
H_{el-ex} &= \sum_{\mathbf{pl}} \gamma\bar{\alpha}(\mathbf{p}_1)\alpha(\mathbf{p}_1 + \mathbf{l})C_0^*(\mathbf{p}_2)C_0(\mathbf{p}_2 - \mathbf{l}) \quad (1.7.14)
\end{aligned}$$

где  $s = \sqrt{n_0 f / M_{ex}}$  скорость звука экситонов, зависящая от плотности конденсата  $n_0$ ,  $\gamma$  - константа эффективного взаимодействия электронов с экситонами, отвечающая их притяжению. При этом на больших по сравнению с боровским радиусом экситона расстояниях  $\gamma$  убывает как  $R^{-4}$ .

Оценивая  $|\gamma_R| \sim (a_B/R)^2(M_{ex}R^2)^{-1}$ , и считая взаимодействие дальнедействующим  $R \sim 1/p_F \gg a_B$ , для борновского параметра взаимодействия электрона с экситоном получим следующую оценку:

$$\xi = m|\gamma(\mathbf{p} = 0)|/R \sim (m/M)(a_B/R)^2 \ll 1$$

Таким образом, связанное состояние тяжелого экситона с легким электроном в размерности  $d = 3$  оказывается невозможным.



## Глава 2. Экситонный механизм сверхпроводимости.

### 2.1. Экситонный переход, индуцированный легированием

Хорошо известно, что основное состояние полупроводника с шириной запрещенной зоны  $E_g$ , меньшей энергии связи электрона и дырки (экситона)  $E_c$ , является неустойчивым относительно перехода в состояние экситонного диэлектрика [3-5]. В настоящей статье будет рассмотрена двухзонная модель полупроводника с легированием при условии  $E_g > E_c$ . При отсутствии легирования основное состояние такого полупроводника устойчиво относительно образования экситонов. Однако, если предположить, что ширина запрещенной зоны меньше суммы энергии связи экситона и энергии связи экситона с электроном  $E_g < E_c + J$  (где  $J$  – энергия связи экситона с электроном), то наличие в системе хотя бы одного свободного электрона делает энергетически выгодным рождение экситона из вакуума. При этом образуется связанное состояние этого экситона с электроном. Такое образование имеет заряд, равный заряду электрона и, если отталкивательное взаимодействие между экситонами достаточно мало, может вызвать рождение еще одного экситона, образуя с ним более сложное связанное состояние и так далее. В результате может возникнуть сложный комплекс из одного электрона и большого числа экситонов. Процесс рождения экситонов будет стабилизироваться их отталкиванием, которое обусловлено тем, что экситон, состоящий из двух ферми-частиц, не является бозе-частицей [10,11]. Качественные соображения, приведенные выше, справедливы при условии малости размера экситона по сравнению с радиусом связанного состояния электрона с экситоном, что имеет место при  $J \ll E_c$  (отметим, что для отрицательно заряженного водородного иона  $H^-$  потенциал ионизации  $J \sim 0,75 \ll E_c$  [45,48]). Выполнение условия малости  $J$  по сравнению с  $E_c$  будет предполагаться в дальнейшем.

Проинтегрируем (1.1.5) по всем полям  $\Psi_h$  и по полям  $\Psi_e$ , меняющимся на масштабах, меньших среднего расстояния между электронами легирования. Вводя коллективные переменные, описывающие движение экситона как целого и медленно меняющиеся на экситонных масштабах, получим эффективное действие для системы электронов легирования, взаимодействующих с экситонами, рожденными из вакуума этим же взаимодействием. Подробное описание процедуры получения эффективного действия дано в работе авторов [40,41].

$$S = S_0 + S_{ex} + S_{el} + S_{el-ex}$$
$$S_0 = \sum_p \bar{a}(p) [\epsilon - \mathbf{p}^2/(2m_e) + \mu] a(p) + \sum_k B^*(k) [\omega - \lambda(\mathbf{k})] B(k)$$
$$S_{el} = -\frac{1}{2} \sum_{qp} V_q^{eff} \bar{a}(p_1) \bar{a}(p_2) a(p_2 - q) a(p_1 + q)$$

$$S_{ex} = -\frac{f}{2} \sum_{qp} B^*(p_1) B^*(p_2) B(p_2 - q) B(p_1 + q)$$

$$S_{el-ex} = -\sum_{qp} \gamma(\mathbf{q}) \bar{a}(p_1 + q) a(p_1) B^*(p_2 - q) B(p_2). \quad (2.1.1)$$

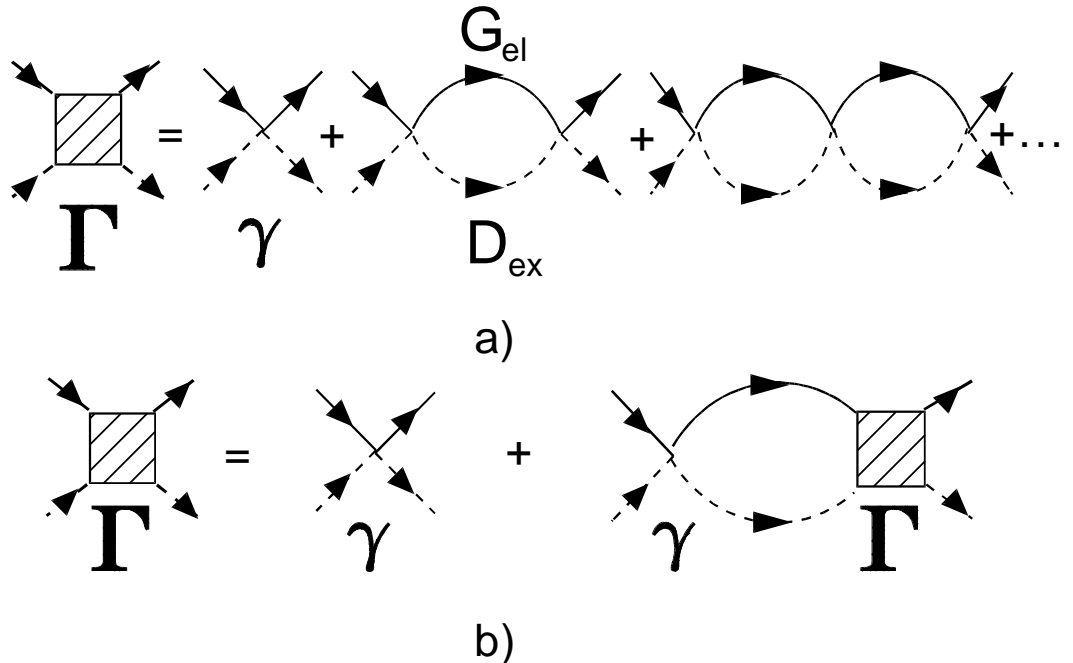
Поля  $a$  описывают электронную подсистему,  $B$  – экситонную подсистему;  $\lambda(\mathbf{k}) = E_g - E_c[1 - A(p_F a_B)^d] + \mathbf{k}^2/(2M)$  – закон дисперсии экситонов в случае  $\lambda_0 = E_g - E_c > 0$ ,  $a_B = \hbar^2 \epsilon_0 / (m e^2)$  – боровский радиус электрона,  $p_F$  – импульс Ферми. В выражении для  $\lambda(\mathbf{k})$  учтено, что при плотностях легирования  $p_F a_B \ll 1$  энергия связи экситона линейно убывает с ростом электронной плотности, при этом константа  $A \sim 1$ ,  $d$  – размерность системы.  $M = m_e + m_h$  – масса экситона,  $V_q^{eff}$  – эффективный потенциал кулоновского взаимодействия электронов легирования,  $\gamma(q)$  – потенциал взаимодействия электронов с экситонами, являющегося притяжением

$$\gamma(\mathbf{q}) \sim -\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} (\mathbf{k} \mathbf{d})(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \mathbf{d}) V(\mathbf{k}) V(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \frac{e^2}{\mathbf{k}^2 / (2m^*) + E_c - E_c^1} \quad (2.1.2)$$

$m^* = m_e M / (m_e + M)$ ,  $|\mathbf{d}| \sim e a_B$  – матричный элемент дипольного момента перехода из основного в первое возбужденное состояние экситона. Так как  $\gamma(\mathbf{q})$  при  $q a_B < 1$  слабо зависит от импульса, в дальнейшем зависимостью  $\gamma$  от  $q$  будем пренебрегать. Амплитуда рассеяния  $f$  экситонов друг на друге определяется отталкиванием экситонов на малых расстояниях и имеет вид [10,11]

$$f = 2(2\pi)^{-2d} \int d\mathbf{k} d\mathbf{p} [\Psi_0^3(\mathbf{p}) V_{\mathbf{k}} \Psi_0(\mathbf{p} + \mathbf{k}) - \Psi_0^2(\mathbf{p}) V_{\mathbf{k}} \Psi_0^2(\mathbf{p} + \mathbf{k})] \sim E_c a_B^d \quad (2.1.3)$$

$\Psi_0$  – волновая функция основного состояния водородоподобного атома.



### Рисунок 2.1.1

Для справедливости вывода действия (2.1.1) необходимо предположить малость плотности экситонной системы  $n_{ex}a_B^d \ll 1$ . Будем считать, что величина притяжения между электронами и экситонами достаточна для образования связанного состояния даже при  $d = 3$ . В этом случае вершина электрон-экситонного взаимодействия  $\gamma$  сильно перенормируется, и полная вершина определяется последовательностью диаграмм лестничного типа (рис.2.1.1). В результате суммирования этих диаграмм, получим:

$$\Gamma(P) = \frac{\gamma}{1 - \gamma \Pi_{el-ex}(P)}, \quad (2.1.4)$$

$\Pi_{el-ex}$  выражается через электронную  $G_{el}$  и экситонную  $D_{ex}$  функции Грина следующим образом:

$$\Pi_{el-ex}(P) = i \int \frac{d^{d+1}k}{(2\pi)^{d+1}} G_{el}(k) D_{ex}(P - k). \quad (2.1.5)$$

Отметим, что интеграл (2.1.5) является расходящимся на больших импульсах и интегрирование должно быть обрезано на импульсах  $k \sim 1/a_B$ , так как радиус действия потенциала  $\gamma$  порядка величины  $a_B$ .

Вообще говоря, вершина экситон-экситонного взаимодействия  $f$  также перенормируется и должна быть заменена полной амплитудой рассеяния экситона на экситоне  $F$ . Амплитуда  $F$  при условии малой плотности экситонов  $n_{ex}a_B^d \ll 1$  определяется суммой лестничных диаграмм. Заметим, что перенормировка экситон-экситонной вершины существенна лишь при  $d = 2$ .

В результате перенормировок в эффективном действии для электрон-экситонной системы (2.1.1) вершину электрон-экситонного взаимодействия  $\gamma$  необходимо заменить на  $\Gamma$ , а вершину экситон-экситонного взаимодействия  $f$  на  $F$ .

Рассмотрим классическое уравнение движения для экситонных полей  $B$ , определяющее перевальную траекторию для этих полей:

$$(i\partial_t - \lambda(0) + \frac{\nabla^2}{2M} - \Sigma)B(\mathbf{r}, t) - F|B(\mathbf{r}, t)|^2 B(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (2.1.6)$$

$\Sigma$  в этом уравнении представляется диаграммой рис.2.1.2.а. Отличное от нуля статическое и однородное решение уравнения (2.1.6), определяющее равновесную плотность экситонов, существует при условии

$$\lambda(0) + \Sigma < 0, \quad (2.1.7)$$

равновесная плотность экситонов  $n_0$  при этом выражается равенством:

$$n_0 = -\frac{\lambda(0) + \Sigma}{F}. \quad (2.1.8)$$

Рассмотрим случай  $d = 2$ . Вычисляя  $\Pi_{el-ex}(P)$ , получим

$$\Pi_{el-ex} = -\frac{m^*}{2\pi} \ln[E_c/\max\{p_0^2/(2m^*), \lambda_0\}], \quad (2.1.9)$$

где  $p_0 = \max\{p_F, (\mu_{ex}M)^{1/2}\}$ ;  $\mu_{ex}$  – химический потенциал экситонов при условии существования конденсата,  $\mu_{ex} = n_0F$ . Выражение для перенормированной электрон-экситонной вершины имеет вид:

$$\Gamma(P) = -\frac{2\pi}{m^* \ln[\max\{p_0^2/(2m^*), \lambda_0\}/J]}, \quad (2.1.10)$$

где  $J = E_c \exp\{-2\pi/m^*|\gamma|\} \ll E_c$  – энергия связи электрона с экситоном. Перенормированная амплитуда рассеяния экситона на экситоне  $F$ , определяемая суммой лестничных диаграмм, в случае  $d = 2$  может быть записана в виде [31]:

$$F = \frac{f}{1 + f\frac{M}{4\pi} \ln[E_c/\mu_{ex}]} \approx \frac{4\pi}{M \ln[E_c/\mu_{ex}]}. \quad (2.1.11)$$

Выражение для  $\Sigma$  (рис.2.1.2) имеет наиболее простой вид при  $p_0 > p_F$ , что, как будет показано в дальнейшем, выполняется в области максимальной плотности конденсата:

$$\Sigma = \Gamma n_{el} \quad (2.1.12)$$

$n_{el}$  – плотность электронов легирования. Выражение для  $\Sigma$  при  $p_0 \sim p_F$  имеет более громоздкий вид, но качественной картины не меняет.

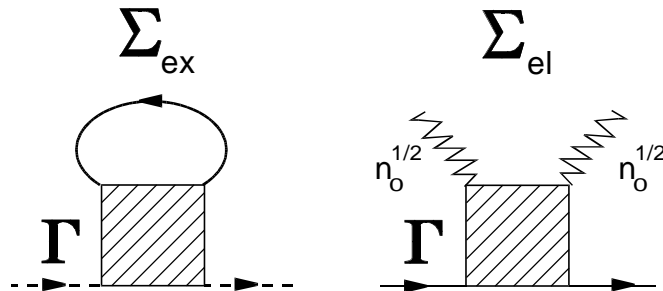


Рисунок 2.1.2

Анализ неравенства (2.1.7) показывает, что равновесная плотность экситонов  $n_0$  существует при  $\epsilon_F < \epsilon_F^{max} \sim J$  только для  $\lambda_0 < J$ , при этом максимальное значение плотности экситонов  $n_0$  оказывается порядка  $n_0 \sim m^* J \ln\{E_c/J\}$ . В этом случае  $\mu_{ex} \sim m^* J/M$ , а  $p_0 \sim (m^* J)^{1/2}$ .

Заметим, что при  $\epsilon_F \ll J$  система является неустойчивой относительно образования связанных состояний электронов и экситонов и не может быть рассмотрена в виде двух однородных взаимодействующих подсистем.

В случае  $d = 3$  перенормированная вершина электрон-экситонного взаимодействия имеет вид:

$$\Gamma(P) = -\frac{2\pi^2}{(2m^*)^{3/2}[\sqrt{\max\{p_0^2/(2m^*), \lambda_0\}} - \sqrt{J}]}, \quad (2.1.13)$$

где  $J = 4\pi^{-2} [1 - \pi^2 a_B / m^* |\gamma|]^2 E_c \ll E_c$  – энергия связи электрона и экситона, причем связанное состояние существует, если  $m^* |\gamma| / (\pi^2 a_B) > 1$ . Для устойчивости системы необходимо, чтобы знаменатель выражения (2.1.13) был положительным.

Неравенство (2.1.7), являющееся условием существования экситонного конденсата, выполняется в области плотностей легирования, при которых  $\epsilon_F^{\min} < \epsilon_F < \epsilon_F^{\max} \ll E_c$ ,  $\epsilon_F^{\min} = \max\{J, \lambda_0\}$ . В этом случае равновесная плотность экситонов, получаемая из решения уравнения (2.1.8), оказывается порядка  $n_0 \sim (m^*/M)^{1/3} \epsilon_F / f$ .

Отметим, что большая величина амплитуды рассеяния  $\Gamma$ , обеспечивающая возможность существования экситонной фазы, может быть обусловлена рассеянием как на резонансном  $J \ll E_c$ , так и на мелком квазирезонансном уровне. Полученные плотности экситонной фазы как в случае  $d = 2$ , так и в случае  $d = 3$  удовлетворяют условию  $n_0 a_B^d \ll 1$ .

В области существования экситонного конденсата электрон - экситонная система представляет собой электронную жидкость, сильно взаимодействующую с экситонной подсистемой, что оказывает существенное влияние на свойства электронной ферми - жидкости в нормальном состоянии и создает возможность нефононной сверхпроводимости этой жидкости. Дальнейший анализ свойств (в том числе и сверхпроводящих) такой системы требует отдельного рассмотрения.

## 2.2. О характере электронного фазового перехода

Для того, чтобы учесть влияние межзонных переходов в рассматриваемой модели на характер фазового превращения, введем в гамильтониан слагаемые, отвечающие превращению электронов одной зоны в электроны другой зоны, наряду с уже имеющимися. Таким образом, вместо гамильтониана (1.1.2) будем рассматривать гамильтониан (2.2.1):

$$\mathcal{H}(\tau) = \sum_i \int d\mathbf{x} \bar{\Psi}_i(\mathbf{x}, \tau) [\epsilon_i(-i\nabla) - \mu] \Psi_i(\mathbf{x}, \tau) +$$

$$+\frac{1}{2} \sum_{ijkl} \int d\mathbf{x}d\mathbf{y} \bar{\Psi}_i(\mathbf{x}, \tau) \Psi_j(\mathbf{x}, \tau) V(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \bar{\Psi}_k(\mathbf{y}, \tau) \Psi_l(\mathbf{y}, \tau) \quad (2.2.1)$$

По прежнему  $V = e^2/r$  - кулоновское взаимодействие. Отличие гамильтониана (1.1.2) от гамильтониана (2.2.1) состоит в том, что в последнем учитываются слагаемые, выходящие за рамки взаимодействия типа плотность-плотность. Учет членов такого типа как малых поправок для случая малой плотности экситонов в лестничном приближении был произведен в работах Келдыша и Гусейнова [12,13] методом канонического преобразования. В результате снимается вырождение по фазе параметра порядка. Фазовый переход полупроводник-экситонный диэлектрик становится переходом первого рода, исчезает звуковой характер спектра коллективных возбуждений. Это ликвидирует аналогию экситонного диэлектрика со сверхтекучим конденсатом бозе-частиц. Рассмотрим, как введение дополнительных слагаемых в гамильтониан отражается на уравнении Бете-Солпитера в формализме функционального интегрирования. Различные диаграммы, отвечающие взаимодействию  $V$  изображены на рисунке 2.2.1.

Рассмотрим различные матричные элементы кулоновского взаимодействия, соответствующие переходам из первой зоны во вторую

$$V_1(\mathbf{k}) = V_{1112} = V_{1121} = \dots = \int u_{1k_0}^*(\mathbf{x}_1) u_{1k_0}^*(\mathbf{x}_2) V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) u_{1k_0}(\mathbf{x}_2) u_{2k_0}(\mathbf{x}_1) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \quad (2.2.2)$$

Здесь  $u_{k_0}(\mathbf{x})$  - блоховские функции,  $k_0$  квазиимпульсы экстремумов зон. Аналогично записываются матричные элементы, отвечающие переходам из второй зоны в первую  $V_{2221} = V_{2212} = \dots = V_2$  и перекрестные переходы  $V_{1221} = V_{1212} = \dots = V_3$ . Вследствие ортогональности  $u_{1k_0}(\mathbf{x})$  и  $u_{1k_0}(\mathbf{x})$ , матричные элементы  $V_{1,2,3}$  малы по сравнению с кулоновским потенциалом, отвечающим взаимодействию плотность - плотность. Величины  $V_1$  и  $V_2$  отличаются не сильно и в дальнейшем будем считать их равными  $V_1 = V_2 = V^1$ . Для простоты изложения предположим, что матричные элементы  $V_1, V_2, V_3$  связаны с кулоновским потенциалом (и между собой) простыми соотношениями:

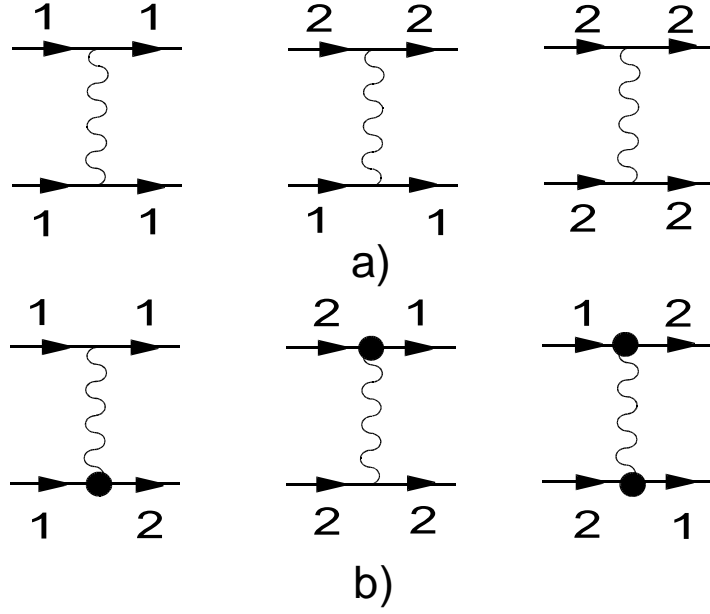


Рисунок 2.2.1

$$V_1(\mathbf{k}) = V_2(\mathbf{k}) = g(\mathbf{k})V(\mathbf{k}) \quad V_3(\mathbf{k}) = |g(\mathbf{k})|^2V(\mathbf{k})$$

Здесь  $g(\mathbf{k})$  - введенный нами формфактор, определяющий связь между матричными элементами.

$$g(\mathbf{k}) \sim \int d\mathbf{x} [u_{1\mathbf{p}}(\mathbf{x})u_{2\mathbf{p}+\mathbf{k}}^*(\mathbf{x})] \sim ik\mathbf{d}_{12} \quad (2.2.3)$$

Здесь  $-\mathbf{d}_{12}$  - эффективный дипольный момент межзонного перехода. Предполагая малость указанных матричных элементов, будем учитывать их по теории возмущений. Возникающие в случае узкой запрещенной зоны экситоны являются экситонами большого радиуса. При этом все характерные импульсы задачи малы по сравнению с вектором обратной решетки. Для учета дополнительных слагаемых в гамильтониане, применим метод, аналогичный введению экситонных средних при помощи функциональной  $\delta$  - функции (см. Главу 1).

Введем в выражение, определяющее статистическую сумму системы интегрирование по новым комплексным полям согласно:

$$Z = \int D\bar{\Psi}D\Psi D\Delta \exp(S) \delta(\bar{\Psi}_i\Psi_j - \Delta_{\mathbf{xy}}^{(ij)}) \delta(\bar{\Psi}_j\Psi_i - \Delta_{\mathbf{xy}}^{*(ij)}) \quad (2.2.4)$$

Здесь  $i, j = 1, 2$  допускает любые комбинации сочетания зон. Для функциональной  $\delta$  - функции используем представление Фурье

$$\begin{aligned} & \delta(\bar{\Psi}_i\Psi_j - \Delta_{\mathbf{xy}}^{(ij)}) \delta(\bar{\Psi}_j\Psi_i - \Delta_{\mathbf{xy}}^{*(ij)}) = \\ & = \int (D\Sigma^*)(D\Sigma) \exp(-i \int_0^\beta d\tau \int dx dy \{ \Sigma_{\mathbf{xy}}^{*(ij)}(\tau) [\bar{\Psi}_i(\mathbf{x}, \tau)\Psi_j(\mathbf{y}, \tau) - \Delta_{\mathbf{xy}}^{(ij)}(\tau)] + \\ & \quad + \Sigma_{\mathbf{xy}}^{ij}(\tau) [\bar{\Psi}_j(\mathbf{y}, \tau)\Psi_i(\mathbf{x}, \tau) - \Delta_{\mathbf{xy}}^{*(ij)}(\tau)] \}) \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

Симметричные свойства полей  $\Sigma$  и  $\Delta$  задаются следующими соотношениями:

$$\Sigma^+ = \Sigma, \quad \Delta^+ = \Delta$$

где операция обозначенная знаком эрмитового сопряжения означает

$$(\Sigma^+(\tau))_{\mathbf{xy}}^{(ij)} = \Sigma_{\mathbf{yx}}^{*(ij)}(\tau), \quad (\Delta^+(\tau))_{\mathbf{xy}}^{(ij)} = \Delta_{\mathbf{yx}}^{*(ij)}(\tau)$$

Дальнейшая процедура ничем не отличается от изложенной в первой главе. Необходимо проинтегрировать по полям  $\Sigma$  и по полям  $\Delta^{(11)}$ ,  $\Delta^{(22)}$ . При этом, поля  $\Delta^{(12)}$  и  $\Delta^{(21)}$  отвечают уже рассмотренным нами ранее экситонным переменным, а поля  $\Delta^{(11)}$ ,  $\Delta^{(22)}$  аналогичны полям билакального расщепления. В результате проведенных преобразований, выразим эффективное действие в терминах экситонных переменных:

$$\begin{aligned} S = & \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n} \Delta^*(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) \left[ i\omega - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{k}^2}{2M} - E_g \right] \Delta(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) + \\ & + \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n} V_l \Delta^*(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) \Delta(\mathbf{p} + \mathbf{l}, \mathbf{k}, \omega_n) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n} V_l [g(\mathbf{l})g(-\mathbf{l})\Delta(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n)\Delta(\mathbf{p} + \mathbf{l}, -\mathbf{k}, -\omega_n) + c.c.] - \\ & - i \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}} \Phi(k)g(\mathbf{k})[\Delta(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) + \Delta^*(\mathbf{p}, -\mathbf{k}, -\omega_n)] - \\ & - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{k}^2}{8\pi e^2} \Phi(k)\Phi(-k) - F(|\Delta|^4) \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

Как видно из выражения (2.2.6) в действии появились слагаемые, нарушающие глобальную  $U(1)$  инвариантность. При этом эффективный гамильтониан взаимодействия, отвечающий эффективному действию вида (2.2.6), эквивалентен гамильтониану, рассмотренному Келдышем и Гусейновым [12,13]. Отметим также, что фиксация фазы в гамильтонианах вида (2.2.1), и возникающие при этом неоднородные решения уравнения типа синус-Гордона, описывающие волны плотности поляризации (или волны плотности намагниченности) для задачи с пространственно разделенными носителями впервые была исследована в работах [14,15]. Результаты этих работ могут быть воспроизведены при помощи методов, используемых в диссертации. Таким образом, учет дополнительных слагаемых во взаимодействии, выходящих за рамки взаимодействия типа плотность - плотность может быть проведен формальным образом в рамках формализма континуального интегрирования.



### 2.3. Диэлектрическая проницаемость с учетом межзонных переходов

Исключим из статистической суммы интегрирование по "быстрым" переменным, воспользовавшись разложением  $\Delta$  в виде (1.3.9), в результате эффективное действие имеет вид:

$$S_{eff} = \sum_k C_0^*(k) \left[ i\omega_n - \frac{\mathbf{k}^2}{2M} + E_c - E_g \right] C_0(k) + \\ + \frac{\tilde{v}}{2} \sum_k [C_0(k)C_0(-k) + C_0^*(k)C_0^*(-k)] - \\ - i \sum_k \Phi(k) \gamma(\mathbf{k}) [C_0(k) + C_0^*(-k)] - \sum_k \frac{\mathbf{k}^2}{8\pi e^2} \Phi(k) \Phi(-k) - F(|C|^4) \quad (2.3.1)$$

где

$$\gamma(\mathbf{k}) = \frac{g(\mathbf{k})}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{p} \psi_0(\mathbf{p}), \quad \tilde{v} = \frac{1}{(2\pi)^6} \int d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 \psi_0(\mathbf{p}_1) V_3(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \psi_0(\mathbf{p}_2) \quad (2.3.2)$$

Действие можно переписать в более компактном виде, введя следующие обозначения:  $J(k) = i\gamma(\mathbf{k})\Phi(k) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ , и  $c(k) = \begin{pmatrix} C_0(k) \\ C_0^*(-k) \end{pmatrix}$

$$S = S_0 + \frac{1}{2} \sum_k \bar{c}(k) \hat{\Gamma}(k) c(k) - \frac{1}{2} \sum_k [\bar{J}(k) c(k) + \bar{c}(k) J(k)] - \sum_k \frac{\mathbf{k}^2}{8\pi e^2} \Phi(k) \Phi(-k) \quad (2.3.3)$$

Матрица  $\hat{\Gamma}$  и функционал  $S_0$  имеют различный вид выше и ниже точки перестройки спектра экситонов. Для того, чтобы найти  $\hat{\Gamma}$  и  $S_0$  в экситонной фазе, необходимо выделить конденсатную часть, представив поля  $C_0$  и  $C_0^*$  в следующем виде:

$$C_0(k) = \sqrt{\nu_0 \beta} \delta_{k,0} + \tilde{C}_0(k), \quad C_0^*(k) = \sqrt{\nu_0 \beta} \delta_{k,0} + \tilde{C}_0^*(k) \quad (2.3.4)$$

Здесь  $\nu_0$  имеет смысл плотности конденсата и определяется из уравнения компенсации, получающегося при обращении в 0 коэффициента при  $\tilde{C}_0(0)$ , как и в случае слабо неидеального бозе-газа. Таким образом, функционал  $S_0$  и матрица  $\Gamma$  имеют следующий вид:

$$S_0 = \begin{cases} 0, & E_g > E_c + \tilde{v} \\ \frac{(E_c - E_g + \tilde{v})^2}{2f} \beta \mathbf{V}, & E_g < E_c + \tilde{v} \end{cases} \quad (2.3.5)$$

$$\hat{\Gamma} = \begin{cases} \hat{\Gamma}_>, & E_g > E_c + \tilde{v} \\ \hat{\Gamma}_<, & E_g < E_c + \tilde{v} \end{cases} \quad (2.3.6)$$

В формуле (2.3.5) в явном виде приведена зависимость действия от объема системы  $\mathbf{V}$ , напомним, что ранее объем был положен равным 1.

$$\hat{\Gamma}_> = \begin{pmatrix} i\omega_n - \frac{\mathbf{k}^2}{2M} - (E_g - E_c) & \tilde{v} \\ \tilde{v} & -i\omega_n - \frac{\mathbf{k}^2}{2M} - (E_g - E_c) \end{pmatrix}$$

$$\hat{\Gamma}_< = \begin{pmatrix} i\omega_n - \frac{\mathbf{k}^2}{2M} + (E_g - E_c) - 2\tilde{v} & E_g - E_c \\ E_g - E_c & -i\omega_n - \frac{\mathbf{k}^2}{2M} + (E_g - E_c) - 2\tilde{v} \end{pmatrix} \quad (2.3.7)$$

После выполнения указанных преобразований становится возможным проинтегрировать действие по экситонным полям, при этом, нули  $\det(\hat{\Gamma})$  определяют спектр экситонов  $\mathcal{E}(\mathbf{k})$  как в области неустойчивости, так и выше,  $Spln(\hat{\Gamma})$  вносит вклад в термодинамику системы.

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \begin{cases} [(E_g - E_c + \frac{\mathbf{k}^2}{2M})^2 - |\tilde{v}|^2]^{1/2}, & E_g > E_c + \tilde{v} \\ [\delta^2 + s^2\mathbf{k}^2 + (\frac{k^2}{2M})^2]^{1/2}, & E_g < E_c + \tilde{v} \end{cases} \quad (2.3.8)$$

Здесь  $\delta$  - щель в спектре экситонов,  $s$  - скорость "звука":

$$\delta^2 = 4|\tilde{v}|(E_c - E_g + |\tilde{v}|)$$

$$Ms^2 = E_c - E_g + 2|\tilde{v}| \quad (2.3.9)$$

После интегрирования по экситонным полям коэффициент при  $\Phi_k\Phi_{-k}$  определяет диэлектрическую проницаемость системы  $\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}, \omega_n)$  создаваемую экситонной подсистемой (без учета процессов экранировки). Для простоты приведем выражение для  $\tilde{\epsilon}(k, \omega = 0)$ :

$$\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}, \omega = 0) = \begin{cases} 1 + \frac{8\pi e^2 |\gamma(\mathbf{k})|^2 / \mathbf{k}^2}{E_g - E_c - |\tilde{v}| + \mathbf{k}^2 / (2M)} & E_g > E_c + \tilde{v} \\ 1 + \frac{4\pi e^2 |\gamma(\mathbf{k})|^2 / \mathbf{k}^2}{E_c - E_g + |\tilde{v}| + \mathbf{k}^2 / (4M)} & E_g < E_c + \tilde{v} \end{cases} \quad (2.3.10)$$

Числитель  $\tilde{\epsilon}$  при  $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$  стремится к конечному значению  $\nu_0$ , пропорциональному дипольному моменту межзонного перехода. Таким образом, учет дополнительных слагаемых в гамильтониане (2.2.1) приводит к изменению характера фазового превращения, в спектре экситонов появляется щель, фаза параметра порядка фиксируется. При этом диэлектрическая проницаемость системы вблизи точки перестройки спектра стремится к бесконечности. Рассмотрим систему с легированием верхней зоны. После интегрирования по экситонным полям функционал эффективного действия имеет следующий вид:

$$S_{eff} = \sum_p \bar{\alpha}(\mathbf{p}) [i\varepsilon_n - \varepsilon(\mathbf{p}) + \mu] \alpha(p) - i\beta^{-1/2} \sum_{p,k} \bar{\alpha}(p) \alpha(p+k) \Phi(k) -$$

$$-\frac{1}{2} \sum_k \left[ \frac{k^2}{4\pi e^2} \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega) + \Pi_{22}(\mathbf{k}, \omega_n) \right] \Phi(k) \Phi(-k) \quad (2.3.11)$$

где  $\varepsilon(\mathbf{p})$  спектр "медленных" электронов,  $\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega)$  - диэлектрическая проницаемость среды (2.3.10), в которой  $E_c$ , вообще говоря, зависит от степени легирования,  $\Pi_{22}$  - поляризационный оператор, описывающий экранировку на больших расстояниях. Проинтегрировав по полю  $\Phi$ , получим действие, зависящее только от "медленных" электронов легирования:

$$S_{eff} = \sum_p \bar{\alpha}(p) [i\varepsilon_n - E(\mathbf{p}) + \mu] \alpha(p) - \frac{1}{2} \beta^{-1} \sum_{p_i, k} V_{eff}(k) \bar{\alpha}_{p_1} \bar{\alpha}_{p_2} \alpha_{p_2+k} \alpha_{p_1-k} \quad (2.3.12)$$

Потенциал  $V_{eff}$  описывает кулоновское эффективное взаимодействие электронов с учетом эффектов экранировки

$$V_{eff}(\mathbf{k}) = \frac{V(k)}{\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega) + \Pi_{22}(\mathbf{k}, \omega_n) V(\mathbf{k})} = \frac{V_c}{1 + \Pi_{22} V_c} \quad (2.3.13)$$

Мы ввели новое обозначение  $V_c = V/\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega_n)$  для обозначения кулоновского потенциала, перенормированного за счет взаимодействия с экситонной подсистемой. Такое разделение вкладов от взаимодействия с экситонами и взаимодействия внутри электронной подсистемы, обеспечивающего экранировку окажется полезным в дальнейшем. Таким образом, эффективное взаимодействие электронов верхней зоны на малых по сравнению с энергией ферми частотах ослабляется в  $\tilde{\varepsilon}$  раз, причем  $\tilde{\varepsilon} \gg 1$ .

Рассмотрим теперь случай, когда одна из зон, например верхняя, значительно уже, чем другая. Уравнение Бете-Солпитера необходимо записывать теперь в системе центра масс экситона, при этом, после выделения быстрых переменных оно сведется к уравнению Шредингера для атома водорода. Приведенная масса  $m$  будет в этом случае легкой массой, а масса экситона  $M = m_1 + m_2$  определяется узкой зоной. Поэтому в спектре экситонов и в выражении для  $\tilde{\varepsilon}$  слагаемыми, имеющими порядок величины кинетической энергии экситона можно пренебречь не только при  $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$ , но и для  $|\mathbf{k}| \rightarrow a^{-1}$ , где  $a$  - размер элементарной ячейки кристалла. При этом вид выражений (2.3.6) - (2.3.13) сохраняется.

## 2.4. Экситонный механизм сверхпроводимости

Рассмотрим ферми-жидкость электронов с затравочным кулоновским взаимодействием (2.3.13). Диэлектрическая проницаемость среды  $\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega)$ , обусловленная близостью к фазовому переходу в состояние экситонного диэлектрика и определяемая выражением (2.3.10) сильно зависит от частоты на

частотах  $\omega < \omega_0 \ll \varepsilon_F$ , где  $\omega_0 \sim |E_c - E_g|$ . Вычислим амплитуду рассеяния электронов с противоположными импульсами вблизи поверхности ферми. Диаграммы, дающие вклад в интересующую нас вершинную часть можно разбить на два класса: диаграммы класса (1), которые нельзя разрезать по двум параллельным электронным линиям на две несвязные части и диаграммы класса (2), которые могут быть рассечены на две части по параллельным электронным линиям, однако электроны на линии разреза имеют энергии  $\Omega$ , существенно большие  $\omega_0$ , так что,  $\omega_0 \ll \Omega \ll \varepsilon_F$ . Рассмотрим более подробно диаграммы класса (1). Такие диаграммы можно разделить на два подкласса (рис. 2.4.1.a) : а) Диаграммы, неприводимые по кулоновскому взаимодействию, т.е. такие, которые нельзя разрезать ни по одной линии кулоновского взаимодействия на две несвязные части (рис. 2.4.1.b.). Вершинную часть, отвечающую сумме всех таких диаграмм обозначим  $\Gamma_1$ . б) Диаграммы, приводимые по кулоновскому взаимодействию, которые можно рассечь хотя бы по одной линии кулоновского взаимодействия на две несвязные части (рис. 2.4.1.c.). Вершину, отвечающую сумме таких диаграмм обозначим  $V^{eff}(0)$ . Выражение для  $V^{eff}(0)$  имеет вид:

$$V^{eff}(0) = V^{eff}(\mathbf{k}, \omega \sim \omega_0) = \Lambda \frac{V_c(\mathbf{k}, \omega_0)}{1 + \Pi(\mathbf{k}, \omega_0)V_c(\mathbf{k}, \omega_0)} \Lambda \quad (2.4.1)$$

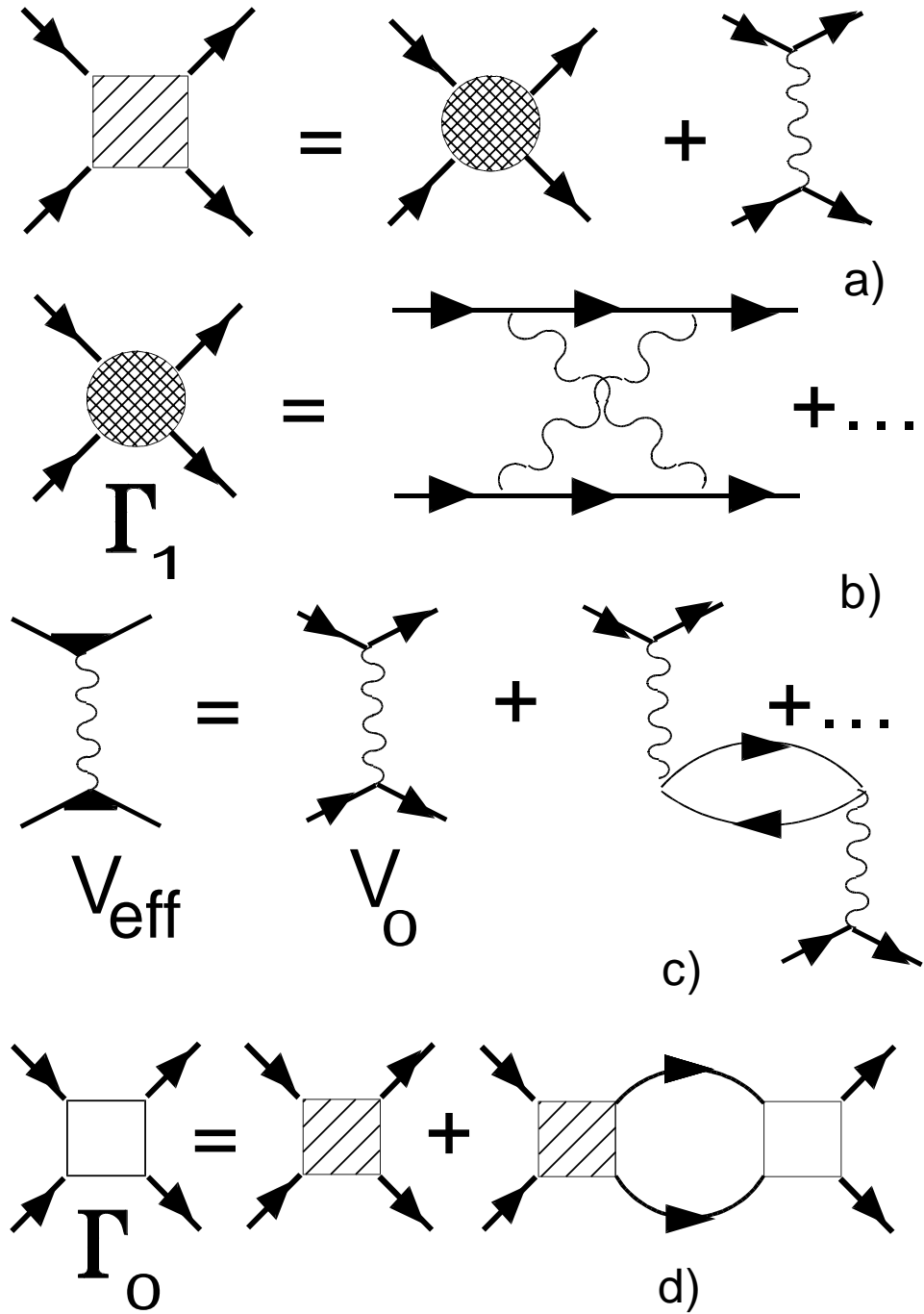


Рисунок 2.4.1

Здесь  $\Pi$  - полный поляризационный оператор электронов,  $\Lambda$  - перенормированная вершина (рис.2.4.1.c), имеющая две внешних электронных и одну кулоновскую линии,  $V_c(\mathbf{k}, \omega_0) = 4\pi e^2 / (\mathbf{k}^2 \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}, \omega_0))$  - кулоновское взаимодействие с учетом диэлектрической проницаемости экситонной среды. Сумму диаграмм класса (1) и класса (2) обозначим  $\Gamma_0$ . Графически уравнение на  $\Gamma_0$  изображено на рис.2.4.1.d. Решая его, находим

$$\Gamma_0 = -V_{\infty}^{eff} + V^{eff}(0) + \frac{V_{\infty}^{eff} + \Gamma_1}{1 + N_0(V_{\infty}^{eff} + \Gamma_1) \ln(\varepsilon_F/\Omega)} \quad (2.4.2)$$

Здесь  $N_0$  - плотность состояний на поверхности ферми,  $V_\infty^{eff} \sim \frac{4\pi e^2}{k^2 \tilde{\epsilon}_\infty}$ , где  $\tilde{\epsilon}_\infty$  - диэлектрическая проницаемость экситонной среды на частотах  $\Omega$ , удовлетворяющих условию  $\omega_0 \ll \Omega \ll \epsilon_F$ , и, таким образом,  $\tilde{\epsilon}_\infty \sim 1$ . Так как  $V_\infty^{eff}(0)$  сильно ослаблено за счет  $\tilde{\epsilon}_0$ , вторым слагаемым в выражении (2.4.2) можно пренебречь. Третье слагаемое мало по сравнению с  $V_\infty^{eff}$  при условии  $\ln(\epsilon_F/\Omega) \gg 1$  (полагаем, что  $N_0 V_\infty^{eff} \sim 1$ ) и его также можно отбросить. Это означает, что  $\Gamma_0 \approx -V_\infty^{eff}$  и, таким образом, является притяжением. Суммируя куперовскую лестницу для амплитуды рассеяния электронов с противоположными импульсами, находим для вершинной части  $\mathfrak{S}$ .

$$\mathfrak{S} = \frac{V_\infty^{eff}}{1 - N_0 V_\infty^{eff} \ln(2\omega_n \gamma / \pi T_c)} \quad (2.4.3)$$

где  $T_c$  - температура сверхпроводящего перехода,  $\ln \gamma = C = 0,577$ . Из выражения (2.4.3) получаем оценку для температуры сверхпроводящего перехода:

$$T_c = \frac{2\omega_0 \gamma}{\pi} \exp\left(-\frac{1}{N_0 V_\infty^{eff}}\right). \quad (2.4.4)$$

Так как  $N_0 V_\infty^{eff} \sim 1$ , можно считать, что реализована ситуация приближения сильной связи и

$$T_c \sim \omega_0 \sim |E_c - E_g| \quad (2.4.5)$$

Впервые механизм сверхпроводимости в системах с сильной дисперсией диэлектрической проницаемости за счет взаимодействия электронов с оптическими фононами обсуждался в работе Гуревича, Ларкина и Фирсова [49]. На возможность сильного ослабления негативной роли прямого кулоновского взаимодействия в ВТСП системах, обусловленного аналогичным механизмом, было указано в работе [50]. Механизм сверхпроводимости в ВТСП, связанный с сильной поляризуемостью среды в предположении близости к экситонному переходу рассматривался в работах [51-53].

## 2.5. Сверхпроводимость в условиях близости к экситонной неустойчивости

Рассмотрим сначала механизм сверхпроводимости в трехзонной модели, используя результаты, полученные в параграфе 7 главы 1 и сохраняя все обозначения этого параграфа.

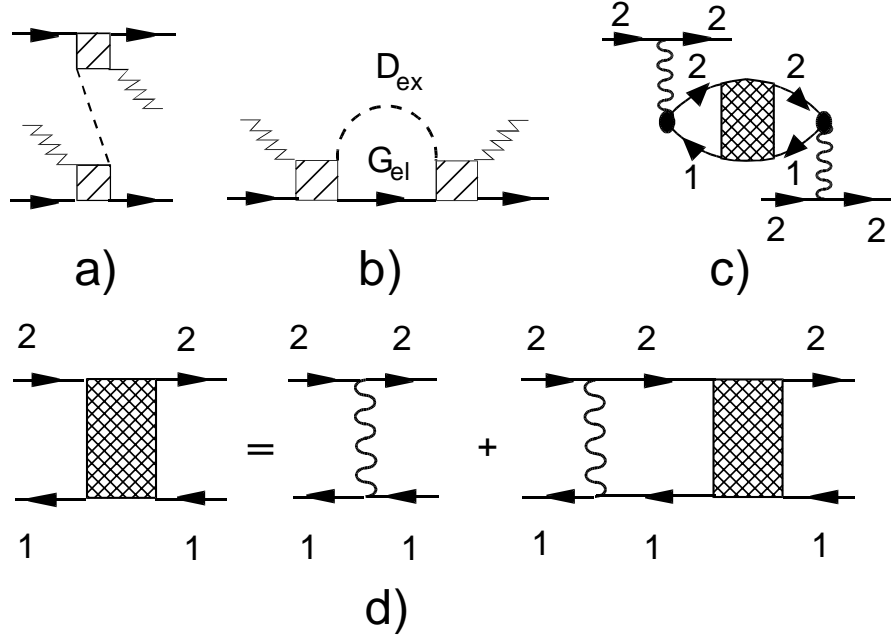


Рисунок 2.5.1

Наличие в системе бозе-конденсации экситонов означает существование как нормальных, так и аномальных бозонных функций Грина [37,39,47,54]. Фейнмановская диаграмма для электронной собственно-энергетической части изображена на рис.2.5.b. (с единственным отличием - вершину необходимо считать перенормированной). Пунктирная линия отвечает сумме всех гриновских функций бозе-газа:

$$D(\mathbf{k}, \omega) = (M_{ex}s^2)^{-1} \frac{s^2\mathbf{k}^2}{\omega^2 - E_{\mathbf{k}}^2 + i\delta} \quad E_{\mathbf{k}}^2 = s^2\mathbf{k}^2 + \left( \frac{\mathbf{k}^2}{2M_{ex}} \right)^2 \quad (2.5.1)$$

Формально, с точностью до перенормировки вершины взаимодействия, гриновская функция  $D(\mathbf{k}, \omega)$  эквивалентна гриновской функции фонона. Оставаясь в рамках газового приближения  $n_0 a_B^d \ll 1$  и малой плотности электронов  $p_F a_B \ll 1$ , рассмотрим сначала случай  $\mu_{ex} = n_0 F > \varepsilon_F$ , когда существенную роль играет звуковая ветвь спектра возбуждений, то есть характерные импульсы удовлетворяют условию  $k < \sqrt{2M_{ex}\mu_{ex}}$ .

Спектр возбуждений квазичастиц вблизи Ферми - поверхности определяется следующей формулой:

$$\eta = \frac{v_F}{1 + \lambda} (|\mathbf{p}| - p_F) \quad (2.5.2)$$

Оценивая  $\lambda$  (см. диаграмму рис.2.5.1.a) как

$$\lambda \sim m p_F \frac{\gamma^2 n_0}{\mu_{ex}} \sim \frac{m}{M} p_F a_B (n_0 a_B^3)^{2/3} \ll 1,$$

нетрудно получить оценку сверху на температуру сверхпроводящего перехода:

$$T_c \sim \mu_{ex} \exp\left(-\frac{1}{\lambda}\right) \ll \mu_{ex} \quad (2.5.3)$$

В обратном предельном случае  $\varepsilon_F > \mu_{ex}$ , когда характерные импульсы удовлетворяют условию  $k > \sqrt{2M_{ex}\mu_{ex}}$  и спектр бозонов можно считать квадратичным, мы имеем следующую оценку

$$\lambda \sim m p_F \frac{\gamma^2 n_0}{\frac{m}{M} \varepsilon_F} \sim \frac{m}{M} p_F a_B n_0 a_B^3 \ll 1$$

$$T_c \sim (m/M) \varepsilon_F \exp\left(-\frac{1}{\lambda}\right) \ll \varepsilon_F \quad (2.5.4)$$

Таким образом, обмен экситоном в трехзонной модели не может приводить к высоким температурам сверхпроводящего перехода ни в одном из рассмотренных предельных случаев. Отметим, однако, что хотя формально механизм сверхпроводимости аналогичен электрон - фононному, спаривание электронов имеет кулоновскую природу и определяется перерассеянием электронов на экситонах при наличии бозе - конденсата.

В связи с тем, что борновский параметр для рассеяния электронов на экситонах  $\xi \ll 1$  в нашей модели полностью исключается ситуация, в которой легирование стимулирует процесс образования экситонов, так как связанное состояние электрона с экситоном невозможно [45,57].

Рассмотрим теперь механизм сверхпроводимости, связанный с обменом экситоном для двухзонной задачи, в которой, как было выяснено в параграфе 1 второй главы, возможно образование связанного состояния электрона и экситона. Остановимся для наглядности на двумерном случае, когда амплитуда рассеяния электронов на экситонах имеет логарифмическую особенность. В этом случае электронная собственно - энергетическая часть  $\Sigma_{el}$  (рисунок 2.5.1.b) может быть записана в виде:

$$\Sigma_{el} = -T n_0 \sum_{\omega} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} D(p-p') G_{el}(p) \Gamma^2(p, p') \quad (2.5.5)$$

Следуя работе [37], запишем мнимую часть  $\Sigma_{el}$

$$Im \Sigma_{el} = -T \Gamma^2 n_0 m \int \frac{dk}{2\pi p_F} D(0, k) \quad (2.5.6)$$

Здесь  $\Gamma$  - усредненная по углам на ферми - поверхности эффективная вершина электрон - экситонного взаимодействия, остальные обозначения имеют стандартный вид. Вычисляя интеграл (2.5.6), окончательно получим

$$Im \Sigma_{el} = \frac{T \Gamma^2 n_0 m M}{\pi p_F \sqrt{2M\mu_{ex}}} \quad (2.5.7)$$



Таким образом, мнимая часть  $\Sigma_{el}$  пропорциональна температуре, а, следовательно, сопротивление в нормальной фазе также будет пропорционально температуре [58 - 60].

Эффективное взаимодействие между электронами через обмен надконденсатным экситоном (рисунок 2.5.1.а) является притяжением и приводит к следующей оценке на температуру сверхпроводящего перехода:

$$T_c \sim \mu_{ex} \exp\left(-\frac{1}{\lambda}\right) \quad \lambda = \frac{m\Gamma^2 n_0}{\mu_{ex}} \quad (2.5.8)$$

При этом мы не учитывали возможности более сложной спиновой структуры основного состояния экситона, которая не вносит существенных поправок к сделанным оценкам.

В заключение отметим еще один возможный механизм сверхпроводимости, связанный с близостью к экситонной неустойчивости. Графически этот механизм изображен на рисунках (2.5.1.с d). На рисунке (d) изображено уравнение Бете - Солпитера, определяющее экситонные возбуждения. Таким образом, механизм сверхпроводимости обусловлен обменом виртуальным экситоном и может реализоваться в том числе в области параметров, когда экситонная неустойчивость отсутствует. Очевидно, что такой механизм не может приводить к высоким температурам сверхпроводящего перехода во-первых по причине малости константы взаимодействия (пропорционально квадрату дипольного момента межзонного перехода), и, во-вторых в следствие узкой области энергий  $|E_g - E_c| \ll E_c$ , определяющей предэкспоненту. Максимально возможные температуры перехода при этом  $T_c \ll |E_g - E_c|$ .

## 2.6. Основные выводы.

Исследование ферми-жидкостных свойств сильно - неидеальной жидкости легирующих электронов в среде с большой дисперсией диэлектрической проницаемостью на низких частотах, обусловленной близостью к переходу в состояние экситонного диэлектрика показало возможность сверхпроводящего перехода в такой системе. Механизм сверхпроводимости имеет кулоновскую природу.

Отметим, что в системе взаимодействующих электронов и экситонов в принципе возможно образование связанного состояния электрона и экситона, что может привести к появлению экситонного перехода, индуцированного легированием. В области существования экситонного конденсата электрон - экситонная система представляет собой электронную жидкость, сильно взаимодействующую с экситонной подсистемой, что оказывает существенное влияние на свойства электронной ферми - жидкости в нормальном состоянии и создает возможность нефононной сверхпроводимости этой жидкости.

## Глава 3. RVB - состояния в Кондо - решетках.

### 3.1. Эффективное действие.

В ряде работ, появившихся в последнее время были представлены соображения, что в системах с почти целочисленной валентностью  $f$  - оболочки тяжелые фермионы возникают как нейтральные возбуждения спиновой природы [61 - 66]. В кондо - решетке взаимодействие  $f$  - электронов с электронами проводимости ведет к частичной спиновой экранировке и косвенному взаимодействию между спинами, обуславливая возникновение квантовой жидкости. Низкотемпературные возбуждения этой жидкости не несут заряда и подчиняются статистике Ферми.

Ферми - жидкость, образованная электронами проводимости, в свою очередь, определяет заряженную ветвь возбуждений, ответственную за проводимость и такой эффект, как квантовые осцилляции магнитной восприимчивости (эффект dHvA). В общем случае взаимодействие спиновой и зарядовой подсистем может привести к сильной перенормировке массы электронов проводимости. Однако, общий анализ, проведенный в [61,62] показал, что тем не менее, масса носителей заряда остается существенно меньше эффективной массы, определяемой из термодинамических измерений. Имеющиеся эксперименты по измерению теплоемкости и dHvA в системах на основе  $Ce$  свидетельствуют в пользу этого утверждения [обзоры 67,68 и литература к ним].

Необычное поведение систем с тяжелыми фермионами связано с трансформацией свойств спинов редкоземельных ионов, входящих в их состав, при переходе от "высокотемпературной" области  $T > T^*$ , где они ведут себя, как обычные локализованные моменты, к области низких температур  $T < T_{coh} \ll T^*$ , где вся термодинамика определяется фермиевскими ветвями возбуждений. Поскольку число спиновых степеней свободы ( $\sim 2$  на элементарную ячейку) значительно превышает число зарядовых степеней свободы, вовлеченных в формирование тяжелых фермионов ( $2T^*/\varepsilon_F$  на элементарную ячейку), естественно считать, что источником аномально высокой плотности фермионных возбуждений при  $T < T^*$  являются именно спиновые степени свободы.

В отличие от традиционной точки зрения, (см., напр., [66,69]) предполагающей связывание электронов проводимости с  $f$ -спинами в состояния "кондо-синглетов", в работах [61,62] был рассмотрен сценарий двухкомпонентной ферми-жидкости, с нейтральной спиновой и заряженной электронной составляющими. В данной работе предлагается микроскопический механизм формирования нейтральной спиновой жидкости и показывается, что одноузельное кондо-рассеяние при высоких температурах  $T > T_K$  способствует ее ста-

билизации как относительно антиферромагнитного упорядочения, так и относительно образования когерентного "кондо-синглетного" состояния.

Рассмотрим возможность возникновения спиновой жидкости на примере модели Гайзенберга. В связи с тем, что в различных работах спиновая жидкость определяется, вообще говоря, по-разному, введем определение спиновой жидкости. Везде в дальнейшем под спиновой жидкостью мы будем понимать спиновую систему без дальнего магнитного порядка, т.е.  $\langle S_i^z \rangle = 0$  вплоть до  $T = 0$ , а коррелятор  $\langle S_i^z S_j^z \rangle$  отличен от нуля на расстояниях порядка постоянной решетки. При изложении вывода эффективного действия мы будем существенно пользоваться результатами работ [70 - 72], где аналогичный вывод был проделан для  $t - J$  модели.

Исходный гамильтониан имеет вид:

$$H = -J \sum_{i,j} H_{ij} \quad (3.1.1)$$

где

$$H_{ij} = \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} \quad (3.1.2)$$

где для антиферромагнитного взаимодействия  $J < 0$ . Выразим операторы спина через набор  $\{S^+, S^-, S^z\}$

$$\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \equiv \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \quad (3.1.3)$$

и перейдем для каждого узла к псевдофермионному представлению Абриковского. Спиновое представление эквивалентно псевдофермионному

$$\begin{aligned} S^+ &= f_\uparrow^+ f_\downarrow; \quad S^- = f_\downarrow^+ f_\uparrow \\ S^z &= \frac{1}{2} (f_\uparrow^+ f_\uparrow - f_\downarrow^+ f_\downarrow) \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

при учете Гуцвиллеровского констринта

$$n = f_\uparrow^+ f_\uparrow + f_\downarrow^+ f_\downarrow = 1 \quad (3.1.5)$$

Пользуясь фермиевскими антикоммутиационными соотношениями, можно представить (3.1.5) в эквивалентной форме

$$f_\sigma^+ f_\sigma = f_{-\sigma} f_{-\sigma}^+ \quad (3.1.6)$$

Подставляя (3.1.4) в Гайзенберговский оператор (3.1.1), получим

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \frac{1}{2} f_{i\uparrow}^+ f_{i\downarrow} f_{j\downarrow}^+ f_{j\uparrow} + \frac{1}{2} f_{i\downarrow}^+ f_{i\uparrow} f_{j\uparrow}^+ f_{j\downarrow} + \\ &+ \frac{1}{4} f_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} f_{j\uparrow}^+ f_{j\uparrow} + \frac{1}{4} f_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} f_{j\downarrow}^+ f_{j\downarrow} - \frac{1}{4} f_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} f_{j\downarrow}^+ f_{j\downarrow} - \frac{1}{4} f_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} f_{j\uparrow}^+ f_{j\uparrow} - \frac{1}{4} \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

Введем операторы

$$\chi_{ij}^\sigma = f_{i\sigma}^+ f_{j\sigma}, \quad (\chi_{ij}^\sigma)^+ = -f_{i\sigma} f_{j\sigma}^+ \quad \sigma = \uparrow, \downarrow; \quad (3.1.8)$$

обладающие очевидным свойством

$$(\chi_{ij}^\sigma)^+ = \chi_{ji}^\sigma \quad (3.1.9)$$

и выразим (3.1.7) через (3.1.8). В первом и втором членах все индексы различны и их можно выразить через (3.1.8) путем четной перестановки. Во третьем и четвертом членах выразим  $f_{j\sigma}^+ f_{j\sigma} = -f_{j\sigma} f_{j\sigma}^+ + 1$  и затем в четырехоператорном члене произведем нечетную перестановку. В пятом и шестом членах воспользуемся констрэинтом (3.1.6) для преобразования операторов узла  $\mathbf{j}$ . Выражение для  $H_{ij}$  принимает вид

$$\begin{aligned} H_{ij} = & \frac{1}{2} \chi_{ij}^\uparrow (\chi_{ji}^\downarrow)^+ + \frac{1}{2} \chi_{ij}^\downarrow (\chi_{ji}^\uparrow)^+ + \frac{1}{4} \chi_{ij}^\uparrow (\chi_{ji}^\uparrow)^+ + \frac{1}{4} \chi_{ij}^\downarrow (\chi_{ji}^\downarrow)^+ + \\ & + \frac{1}{4} \chi_{ij}^\uparrow (\chi_{ji}^\uparrow)^+ + \frac{1}{4} \chi_{ij}^\downarrow (\chi_{ji}^\downarrow)^+ + \frac{1}{2} [f_{j\uparrow}^+ f_{j\uparrow} + f_{j\downarrow}^+ f_{j\downarrow} - 1] \end{aligned} \quad (3.1.10)$$

где член в квадратных скобках выражения (3.1.10) равен нулю в соответствии с констрэинтом (3.1.5). Воспользовавшись (3.1.9), получим окончательное выражение для Гайзенберговского гамильтониана в псевдофермионном представлении

$$H = \frac{J}{2} \sum_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} f_{i\sigma}^+ f_{j\sigma} f_{j\sigma'}^+ f_{i\sigma'} \quad (3.1.11)$$

Рассмотрим представление статистической суммы для модели Гайзенберга в виде континуального интеграла

$$Z = \int D\bar{f} Df \exp \left( - \int_0^\beta d\tau [\sum_{i\sigma} \bar{f}_{i\sigma} \partial_\tau f_{i\sigma} + H(\tau)] \right) \prod_i \delta \left( \sum_\sigma \bar{f}_{i\sigma} f_{i\sigma} - 1 \right) \quad (3.1.12)$$

где приняты стандартные обозначения :

$$D\bar{f} = \prod_i d\bar{f}_i, \quad Df = \prod_i df_i,$$

поля  $f$  описываются Грассмановыми переменными. Дельта - функция описывает локальный констрэинт (3.1.5). Гамильтониан  $H(\tau)$  имеет вид (3.1.11). Аналогично тому, как это было сделано в Главе 1, представим функциональную  $\delta$  - функцию, вводя интегрирование по новым полям  $\lambda_i$

$$\delta \left( \sum_\sigma \bar{f}_{i\sigma} f_{i\sigma} - 1 \right) = \int d\lambda_i \exp \left( i\lambda_i \left( \sum_\sigma \bar{f}_{i\sigma} f_{i\sigma} - 1 \right) \right) \quad (3.1.13)$$

Так как мы воспользовались представлением гамильтониана Гайзенберга в виде (3.1.11), удобно ввести новые - числовые поля, аналогичные коллективным переменным в задаче об экситонном диэлектрике и отвечающие биллокальному расцеплению. Отметим, что локальное расцепление отвечало бы в

данном случае переменным, описывающим антиферромагнитное упорядочение спинов. Реализация одного из состояний, отвечающих различным расщеплениям, определяется из сравнения свободной энергии этих состояний. Мы, однако, не будем заниматься вопросом основного состояния системы, а рассмотрим более простую задачу о температуре перехода в то или иное состояние, имея в виду не только модель Гайзенберга, но и модель Кондо-решетки, для которой теория возмущений справедлива лишь для высоких по сравнению с температурой Кондо температур. С другой стороны различные представления спиновых операторов вносят в исходную модель дополнительные симметричные свойства. В частности, псевдофермионное представление связано с дополнительной локальной -  $U(1)$  симметрией гамильтониана. Другие представления, например, представление Майорана [107], добавляет дискретную  $Z_2$  группу. Оказывается, что искусственно привнесенная группа симметрии связана с различными физическими реализациями состояния системы. К этому вопросу мы вернемся в четвертой главе.

Таким образом, введем новые переменные  $\Delta$  согласно выражениям

$$1 = \int d\Delta_{ij} d\Delta_{ij}^* \delta \left( \Delta_{ij} - \sum_{\sigma} \bar{f}_{i\sigma} f_{j\sigma} \right) \delta \left( \Delta_{ij}^* - \sum_{\sigma} \bar{f}_{j\sigma} f_{i\sigma} \right) \quad (3.1.14)$$

Снова воспользовавшись представлением для  $\delta$  функции, получим

$$1 = \int d\Delta_{ij} d\Delta_{ij}^* d\phi_{ij} d\phi_{ij}^* \exp \left( \phi_{ij}^* \left[ \Delta_{ij} - \sum_{\sigma} \bar{f}_{i\sigma} f_{j\sigma} \right] + \phi_{ij} \left[ \Delta_{ij}^* - \sum_{\sigma} \bar{f}_{j\sigma} f_{i\sigma} \right] \right) \quad (3.1.15)$$

При этом статистическая сумма имеет вид:

$$Z = \int D\bar{f} Df D\Delta^* D\Delta D\phi^* D\phi D\lambda \exp(S) \quad (3.1.16)$$

$S$  - эффективное действие задачи, которое с учетом введения новых полей имеет вид

$$\begin{aligned} S = & - \int_0^{\beta} d\tau \mathcal{L} \\ \mathcal{L} = & \sum_{i\sigma} \bar{f}_{i\sigma} [\partial_{\tau} - i\lambda_i] f_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma} \left( \frac{J}{4} \Delta_{ij} + \phi_{ij} \right) \bar{f}_{j\sigma} f_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma} \left( \frac{J}{4} \Delta_{ij}^* + \phi_{ij}^* \right) \bar{f}_{i\sigma} f_{j\sigma} - \\ & - \sum_{ij} (\phi_{ij}^* \Delta_{ij} + \Delta_{ij}^* \phi_{ij}) + i \sum_i \lambda_i \end{aligned} \quad (3.1.17)$$

Произведем замену переменных:

$$\frac{J}{4} \eta_{ij} = \frac{J}{4} \Delta_{ij} + \phi_{ij}, \quad \frac{J}{4} \eta_{ij}^* = \frac{J}{4} \Delta_{ij}^* + \phi_{ij}^* \quad (3.1.18)$$

Выражение (3.1.17) примет вид:

$$\mathcal{L} = \sum_{i\sigma} \bar{f}_{i\sigma} [\partial_{\tau} - i\lambda_i] f_{i\sigma} + \frac{J}{4} \sum_{ij\sigma} \eta_{ij} \bar{f}_{j\sigma} f_{i\sigma} + \frac{J}{4} \sum_{ij\sigma} \eta_{ij}^* \bar{f}_{i\sigma} f_{j\sigma}$$

$$-\frac{J}{4} \sum_{ij} (\eta_{ij}^* \Delta_{ij} + \Delta_{ij}^* \eta_{ij} - 2|\Delta_{ij}|^2) + i \sum_i \lambda_i \quad (3.1.19)$$

Таким образом, в результате проделанных преобразований мы получили возможность проинтегрировать по грассмановым переменным, описывающим псевдофермионы. Так как действие является квадратичной формой по полям  $f$ , гауссов интеграл легко может быть вычислен. В результате эффективное действие, зависящее от полей  $\Delta$ ,  $\phi$  и  $\lambda$  имеет вид:

$$S_{eff} = Sp \ln (\mathcal{G}^{-1}(\eta^*, \eta, \lambda)) + \frac{J}{4} \sum_{ij} (\eta_{ij}^* \Delta_{ij} + \Delta_{ij}^* \eta_{ij} - 2|\Delta_{ij}|^2) - i \sum_i \lambda_i \quad (3.1.20)$$

где  $\mathcal{G}$  функция Грина псевдофермионов. В следующем параграфе будет показано, что вычисление оставшихся интегралов методом перевала приводит к среднеполевым уравнениям на параметр порядка задачи, рассмотрена возможность введения различных параметров порядка, которым отвечают различные состояния спиновой жидкости.

### 3.2. Приближение среднего поля

Рассмотрим эффективное действие вида (3.1.20). Будем вычислять интегралы по полям  $\Delta$  и  $\phi$ , описывающим коллективные переменные, смысл которых будет ясен в дальнейшем, и  $\lambda$ , описывающего локальный констрэинт (3.1.5) методом перевала. При этом будем учитывать взаимодействие только ближайших соседей в гамильтониане (3.1.1). Возникающие при вычисления шпура функции Грина с совпадающими аргументами  $\tau$  надо понимать как предел  $\lim_{\delta \rightarrow 0} \mathcal{G}(\tau, \tau + \delta)$ . Число псевдофермионов на один узел связано с функцией Грина псевдофермионов соотношением:

$$n = n_{\uparrow} + n_{\downarrow} = 1 = T \sum_{\omega_n} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{p}} \mathcal{G}_{\sigma\sigma}(\mathbf{p}, \omega_n) e^{i\omega_n \tau} \quad (\tau \rightarrow +0) \quad (3.2.1)$$

Седловая точка по переменным  $\lambda_j$  приводит к замене локального констрэинта на глобальный  $\lambda_j = i\lambda_0$ . Варьируя по переменным  $\lambda$ , а также  $\eta^*$ ,  $\eta$ ,  $\Delta^*$ ,  $\Delta$ , отличным от нуля только для ближайших соседей, получим следующие уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda_0} = 0 &\implies 2T \sum_{\omega_n} \sum_{\mathbf{p}} \frac{e^{i\omega_n \tau|_{+0}}}{i\omega_n - \frac{J}{4}(\eta_0 + \eta_0^*)\varphi(\mathbf{p}) + \lambda_0} = 1 \\ \frac{\partial}{\partial \eta_0} = 0 &\implies \frac{J}{4} \Delta z - 2T \sum_{\omega_n} \sum_{\mathbf{p}} \frac{J}{4} \varphi(\mathbf{p}) \frac{e^{i\omega_n \tau|_{+0}}}{i\omega_n - \frac{J}{4}(\eta_0 + \eta_0^*)\varphi(\mathbf{p}) + \lambda_0} = 0 \\ \frac{\partial}{\partial \eta_0^*} = 0 &\implies \frac{J}{4} \Delta_0^* z - 2T \sum_{\omega_n} \sum_{\mathbf{p}} \frac{J}{4} \varphi(\mathbf{p}) \frac{e^{i\omega_n \tau|_{+0}}}{i\omega_n - \frac{J}{4}(\eta_0 + \eta_0^*)\varphi(\mathbf{p}) + \lambda_0} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \Delta_0} = 0 &\implies \frac{J}{2} \Delta_0^* z = \frac{J}{4} \eta_0^* z \implies \Delta_0^* = \frac{1}{2} \eta_0^* \\ \frac{\partial}{\partial \Delta_0^*} = 0 &\implies \frac{J}{2} \Delta_0 z = \frac{J}{4} \eta_0 z \implies \Delta_0 = \frac{1}{2} \eta_0\end{aligned}\quad (3.2.2)$$

где  $z$  число ближайших соседей,  $\varphi(\mathbf{p}) = \sum_{\langle \mathbf{g} \rangle} e^{i\mathbf{p}\mathbf{g}}$  - структурный фактор (сумма берется по ближайшим соседям). Воспользовавшись соотношениями

$$\tanh\left(\frac{x}{2}\right) = 1 - 2\frac{1}{e^x + 1} = 1 - 2n_x, \quad \sum_{\mathbf{p}} \varphi(\mathbf{p}) = 0, \quad (3.2.3)$$

перепишем уравнения (3.2.2) в виде:

$$\begin{aligned}\sum_{\mathbf{p}} \tanh\left(\frac{J\varphi(\mathbf{p})(\Delta_0^* + \Delta) - 2\lambda_0}{4T}\right) &= 0 \\ \frac{\Delta_0 + \Delta_0^*}{2} &= -\frac{1}{z} \sum_{\mathbf{p}} \varphi(\mathbf{p}) \tanh\left(\frac{J\varphi(\mathbf{p})(\Delta_0 + \Delta_0^*) - 2\lambda_0}{4T}\right)\end{aligned}\quad (3.2.4)$$

В результате решения уравнений (3.2.4), получим наполовину заполненную зону псевдофермионов с "химическим потенциалом"  $\lambda_0 = 0$  и законом дисперсии  $\varepsilon(\mathbf{p}) = J\Delta\varphi(\mathbf{p})$ , где

$$\begin{aligned}\Delta = \Delta_0 = \Delta_0^* &= \frac{1}{N} \sum_i \frac{1}{z} \sum_{\langle j \rangle} \langle f_{i\uparrow}^+ f_{j\uparrow} + f_{i\downarrow}^+ f_{j\downarrow} \rangle \\ \Delta &= -\frac{1}{z} \sum_{\mathbf{p}} \varphi(\mathbf{p}) \tanh\left(\frac{J\varphi(\mathbf{p})\Delta}{2T}\right)\end{aligned}\quad (3.2.5)$$

При этом вышеуказанное решение существует только для антиферромагнитного взаимодействия в гамильтониане Гайзенберга  $J < 0$  а  $\Delta$  играет роль параметра порядка. Полученное состояние носит название **однородного** состояния Резонирующих Валентных Связей (RVB) и отвечает спиновой жидкости в нашем определении (см. §1 главы 3). Уравнения (3.2.5) полностью аналогичны уравнениям среднего поля, полученным в работах [70 - 77].

Однако, кроме средних типа (3.2.5) можно ввести и другие средние. Пользуясь констрэинтом (3.1.5), например, для преобразования комбинаций операторов  $f_{j\sigma} f_{j\sigma}^+$  можно преобразовать гамильтониан к другой эквивалентной форме. Для этого представим его в виде

$$H_{ij} = -\frac{1}{2} [f_{i\uparrow}^+ f_{j\uparrow} f_{j\uparrow}^+ f_{i\uparrow} + f_{i\uparrow}^+ f_{j\uparrow} f_{j\downarrow}^+ f_{i\downarrow} + f_{i\downarrow}^+ f_{j\downarrow} f_{j\uparrow}^+ f_{i\uparrow} + f_{i\downarrow}^+ f_{j\downarrow} f_{j\downarrow}^+ f_{i\downarrow}] \quad (3.2.6)$$

Введем оператор синглетного RVB спаривания

$$\chi_{ji} = f_{j\uparrow} f_{i\downarrow} - f_{j\downarrow} f_{i\uparrow}; \quad (3.2.7)$$

В результате преобразований, аналогичных проделанным в предыдущем параграфе, гамильтониан Гайзенберга может быть представлен в виде:

$$H = \frac{J}{2} \sum_{ij} \chi_{ji} (\chi_{ji})^+ \quad (3.2.8)$$

Очевидно, что преобразования, проделанные в первых двух параграфах этой главы для средних типа однородного RVB могут быть повторены и для случая средних типа синглетного RVB состояния. При половинном заполнении (а именно этому случаю соответствует модель Гайзенберга) состояния синглетного и однородного RVB приводят к одному и тому же уравнению для параметра порядка (3.2.5) и имеют одинаковую энергию основного состояния.

Температура перехода в RVB состояние определяется из уравнения (3.2.5) как температура, при которой появляется нетривиальное решение уравнения:

$$T_{RVB} = \frac{|J|}{2} \quad (3.2.9)$$

Отметим, что в отличие от температуры перехода в магнитоупорядоченное состояние, полученная температура не зависит от числа ближайших соседей.

Эквивалентность синглетного и однородного RVB состояний связана с наличием у гамильтониана Гайзенберга локальной  $SU(2)$  калибровочной симметрии. Представление оператора спина через псевдофермионы Абрикосова легко может быть переписано в виде [78-81]

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{4} Sp(\hat{F}_i^+ \hat{F}_i \sigma^T) \quad (3.2.10)$$

где  $\sigma^T$  - вектор из транспонированных матриц Паули, а  $\hat{F}_i$  - двухрядная матрица с операторными компонентами:

$$\hat{F}_i = \begin{pmatrix} f_{i\uparrow} & f_{i\downarrow} \\ f_{i\downarrow}^+ & -f_{i\uparrow}^+ \end{pmatrix} \quad (3.2.11)$$

С помощью этого представления гайзенберговский гамильтониан может быть записан в форме

$$H = -\frac{1}{16} J \sum_{\langle ij \rangle} \left( Sp(\hat{F}_i^+ \hat{F}_i \sigma^T) \right) \left( Sp(\hat{F}_j^+ \hat{F}_j \sigma^T) \right) \quad (3.2.12)$$

Гамильтониан (3.2.12) остается инвариантным относительно преобразования калибровочной симметрии

$$F_{i\alpha\beta} \rightarrow \sum_{\gamma} g_{i\alpha\gamma} F_{\gamma\beta} \quad (3.2.13)$$

где  $g_i$  -  $SU(2)$  матрицы, зависящие от узельного индекса.



Выявление локальной  $SU(2)$  - калибровочной симметрии приводит к параметру порядка, образованному  $SU(2)$  - матрицами, следующего вида:

$$\langle \hat{F}_i \hat{F}_j^+ \rangle = \begin{pmatrix} -\Delta_{ij}^+ & \chi_{ij} \\ \chi_{ij}^+ & \Delta_{ij} \end{pmatrix} \quad (3.2.14)$$

где  $\Delta$  и  $\chi$  -  $U(1)$  -калибровочные поля, отвечающие однородному и синглетному RVB состояниям. Таким образом, открывается возможность описания теории RVB с помощью решеточных  $SU(2)$  - калибровочных полей. Учитывая эквивалентность синглетного и однородного состояний, везде в дальнейшем под состояниями Резонирующих Валентных Связей мы будем понимать однородное RVB состояние.

### 3.3. Диаграммная техника и уравнение Дайсона

Рассмотрим Гамильтониан  $sf$  модели

$$H = \int d\mathbf{x} \sum_{\alpha=\pm} \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \left( -\frac{\nabla^2}{2m} \right) \Psi_{\alpha}(\mathbf{x}) - \left( \frac{J}{n_0} \right) \sum_i \sum_{\alpha, \alpha'=\pm} \int d\mathbf{x} \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}) (\vec{\sigma}_{\alpha\alpha'} \vec{S}_i) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R}_i) \quad (3.3.1)$$

Коэффициент  $J$  имеет размерность энергии ( $n_0 = N/V$  - введено для нормировки).  $J < 0$  - отвечает антиферромагнитному знаку взаимодействия электронного спина и спина, локализованного на узле  $i$  [82,83].

Воспользуемся псевдофермионным представлением оператора спина

$$\mathbf{S}_i = \sum_{\beta, \beta'=\pm} f_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{R}_i) \mathbf{S}_{\beta\beta'} f_{\beta'}(\mathbf{R}_i) \quad (3.3.2)$$

где  $f_{\beta}$  и  $f_{\beta}^{\dagger}$  являются фермиевскими операторами, а  $\mathbf{S}_{\beta\beta'}$  -матричный элемент оператора спина  $\mathbf{S}$ . В качестве базисных функций можно взять собственные функции  $|m\rangle$  оператора  $S^z$ . Таким образом, для  $S = 1/2$  представление (3.3.2) имеет вид

$$S^+ = f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\downarrow}; \quad S^- = f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}; \quad S^z = \frac{1}{2} (f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow}) \quad (3.3.3)$$

В дальнейшем мы будем пользоваться только представлением (3.3.3) для  $S = 1/2$ . Представление (3.3.3) сохраняет все перестановочные соотношения для оператора спина, однако оно вводит лишние нефизические состояния, когда число псевдофермионов на узле  $\sum_{\beta} f_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{R}_i) f_{\beta}(\mathbf{R}_i)$  больше единицы. Нефизические средние будут устранены при вычислении средних по статистическому ансамблю, если в гамильтониан (3.3.1) добавить член  $\lambda_i (\sum_{\beta} f_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{R}_i) f_{\beta}(\mathbf{R}_i) - 1)$ , причем  $\lambda_i \rightarrow \infty$  при вычислении псевдофермионных замкнутых петель [79].

Теория возмущений описывается в терминах следующих графических элементов:

$$\begin{array}{l}
 \longrightarrow \quad G_0(p, \omega_n) = [i\omega_n - \epsilon(p) + \mu]^{-1} \\
 \text{---} \longrightarrow \quad g_0(\omega_n) = [i\omega_n - \lambda]^{-1} \\
 \begin{array}{c}
 k \sigma \quad k' \sigma' \\
 \swarrow \quad \nearrow \\
 \nearrow \quad \swarrow \\
 m \quad m'
 \end{array} = J \overrightarrow{\sigma} \overrightarrow{S}
 \end{array}$$

Систему уравнений Дайсона можно получить непосредственно из уравнений движения для гайзенберговских фермионных операторов  $\tilde{\Psi}_\alpha$  и псевдофермионных операторов  $\tilde{f}_\beta$ , переходя к представлению с нефиксированным числом частиц. Оператор  $\mathcal{H}$  мы можем представлять как через шредингеровские операторы, так и через гайзенберговские операторы, поскольку  $\hat{H}$ ,  $\hat{N}_{el}$  и  $\hat{N}_{pf}$  одинаковы в обоих представлениях.

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = H - \mu N_{el} + \sum_i \lambda_i (\sum_\beta f_\beta^\dagger(\mathbf{R}_i) f_\beta(\mathbf{R}_i) - 1) = \int d\mathbf{x} \sum_{\alpha=\pm} \Psi_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \left( -\frac{\nabla^2}{2m} - \mu \right) \Psi_\alpha(\mathbf{x}) - \\
 - \frac{1}{2} \left( \frac{J}{n_0} \right) \sum_i \sum_{\alpha, \alpha', \beta, \beta'=\pm} \int d\mathbf{x} \Psi_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \Psi_{\alpha'}(\mathbf{x}) (\vec{\sigma}_{\alpha\alpha'} \vec{\sigma}_{\beta\beta'}) f_\beta^\dagger(\mathbf{R}_i) f_{\beta'}(\mathbf{R}_i) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{R}_i) + \\
 + \sum_i \lambda_i (\sum_\beta f_\beta^\dagger(\mathbf{R}_i) f_\beta(\mathbf{R}_i) - 1)
 \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

Выделяя  $H_{int}$  из  $\mathcal{H}$  и используя правила коммутации гайзенберговских операторов, взятых в один момент времени, получим

$$\begin{aligned}
 i \frac{\partial \tilde{\Psi}_\alpha(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= \left( -\frac{\nabla^2}{2m} - \mu \right) \tilde{\Psi}_\alpha(\mathbf{x}, t) + [\tilde{\Psi}_\alpha(\mathbf{x}, t), H_{int}] \\
 i \frac{\partial \tilde{f}_\beta(\mathbf{R}_j, t)}{\partial t} &= \lambda_j \tilde{f}_\beta(\mathbf{R}_j, t) + [\tilde{f}_\beta(\mathbf{R}_j, t), H_{int}]
 \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

Введем определение фермионной функции Грина  $G_{\alpha\alpha'}$  и псевдофермионной функции Грина  $\mathcal{G}_{\beta\beta'}$  при конечной температуре как функции мнимого времени  $\tau$ , изменяющемуся в интервале от нуля до  $1/T$ .

$$G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau, \mathbf{x}', \tau') = - \langle T_\tau (\tilde{\Psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \tilde{\Psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau')) \rangle$$

$$\mathcal{G}_{\beta\beta'}(\mathbf{R}_i, \tau, \mathbf{R}_j, \tau') = - \langle T_\tau(\tilde{f}_\beta(\mathbf{R}_i, \tau) \tilde{f}_{\beta'}^\dagger(\mathbf{R}_j, \tau')) \rangle \quad (3.3.6)$$

Переход к мнимому времени отвечает замене в уравнениях (3.3.5)  $i\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -\frac{\partial}{\partial \tau}$   
 Продифференцируем функции Грина по первому временному аргументу

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau, \mathbf{x}', \tau') &= -\frac{\partial}{\partial \tau} \langle T_\tau(\tilde{\Psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau) \tilde{\Psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau')) \rangle \\ \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{\beta\beta'}(\mathbf{R}_i, \tau, \mathbf{R}_j, \tau') &= -\frac{\partial}{\partial \tau} \langle T_\tau(\tilde{f}_\beta(\mathbf{R}_i, \tau) \tilde{f}_{\beta'}^\dagger(\mathbf{R}_j, \tau')) \rangle \end{aligned} \quad (3.3.7)$$

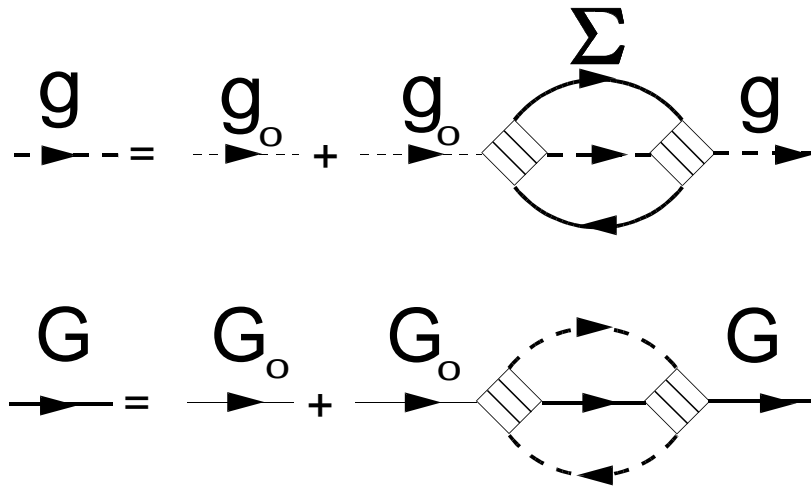
Раскрывая  $T$ -произведение и используя правила коммутации, окончательно получим систему уравнений

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial \tau} G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau, \mathbf{x}', \tau') &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(\tau - \tau')\delta_{\alpha\alpha'} + \langle T_\tau\left(\frac{\partial \tilde{\Psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau)}{\partial \tau} \tilde{\Psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau')\right) \rangle \\ -\frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{G}_{\beta\beta'}(\mathbf{R}_i, \tau, \mathbf{R}_j, \tau') &= \delta(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)\delta(\tau - \tau')\delta_{\beta\beta'} + \\ &+ \langle T_\tau\left(\frac{\partial \tilde{f}_\beta(\mathbf{R}_i, \tau)}{\partial \tau} \tilde{f}_{\beta'}^\dagger(\mathbf{R}_j, \tau')\right) \rangle \end{aligned} \quad (3.3.8)$$

Подставляя (3.3.5) в (3.3.8), имеем

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2m} + \mu\right) G_{\alpha\alpha'}(\mathbf{x}, \tau, \mathbf{x}', \tau') &= \\ \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(\tau - \tau')\delta_{\alpha\alpha'} - \langle T_\tau([\tilde{\Psi}_\alpha(\mathbf{x}, \tau), H_{int}], \tilde{\Psi}_{\alpha'}^\dagger(\mathbf{x}', \tau')) \rangle \\ \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} - \lambda_i\right) \mathcal{G}_{\beta\beta'}(\mathbf{R}_i, \tau, \mathbf{R}_j, \tau') &= \\ \delta(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)\delta(\tau - \tau')\delta_{\beta\beta'} - \langle T_\tau([f_\beta(\mathbf{R}_i, \tau), H_{int}], f_{\beta'}^\dagger(\mathbf{R}_j, \tau')) \rangle \end{aligned} \quad (3.3.9)$$

Графическое изображение системы уравнений (3.3.9) представлено на рисунке 3.3.1.



### Рисунок 3.3.1

В частности, используя выражение (3.3.5) для гамильтониана (3.3.1), получаем следующее уравнение для псевдофермионной функции Грина

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\partial}{\partial \tau} - \lambda_i\right) \mathcal{G}_{\beta\beta'}(\mathbf{R}_i, \tau, \mathbf{R}_j, \tau') &= \delta(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \delta(\tau - \tau') \delta_{\beta\beta'} + \\ + \frac{J}{2n_0} \sum_{\alpha, \alpha', \gamma = \pm} &< T_\tau (\tilde{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{R}_i, \tau) \tilde{\Psi}_{\alpha'}(\mathbf{R}_i, \tau) (\vec{\sigma}_{\alpha\alpha'} \vec{\sigma}_{\beta\gamma}) \tilde{f}_\gamma(\mathbf{R}_i, \tau) \tilde{f}_{\beta'}^\dagger(\mathbf{R}_j, \tau')) > \end{aligned} \quad (3.3.10)$$

Таким образом, задача сводится к нахождению среднего от хронологизированного произведения двух фермионных и двух псевдофермионных операторов. Как будет показано в дальнейшем, функция Грина электронов проводимости перенормируется только в узкой области частот  $|\varepsilon| \sim T_K$ , где  $T_K$  - температура Кондо. Пользуясь свойствами матриц Паули  $Sp(\vec{\sigma}) = 0$ , легко показать, что в уравнении Дайсона отсутствуют с замкнутыми электронными петлями, отвечающие электронной функции Грина с совпадающими пространственными аргументами. Функция Грина электрона входит в уравнение только в парной комбинации в виде поляризационного оператора, т.е. в виде интеграла по частоте от двух функций  $G$ , причем в интеграл существенный вклад вносят частоты гораздо превышающие температуру Кондо  $|\varepsilon| \sim \varepsilon_F \gg T_K$ . Это означает, что в уравнении на псевдофермионную функцию Грина электронную функцию Грина можно считать неперенормированной. Система уравнений Дайсона при этом сводится только к уравнению для функции  $\mathcal{G}$ . Для окончательной записи уравнения для функции  $\mathcal{G}$  и собственно энергетической части  $\Sigma$  при вычислении сумм по спиновым индексам оказывается полезным еще одно свойство матриц Паули

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\gamma}^\mu \sigma_{\gamma\beta}^\nu &= (\sigma^\mu \sigma^\nu)_{\alpha\beta} = \delta^{\mu\nu} \delta_{\alpha\beta} + i\varepsilon_{\zeta\mu\nu} \sigma_{\alpha\beta}^\zeta \\ (\sigma_x)^2 &= (\sigma_y)^2 = (\sigma_z)^2 = 1 \end{aligned}$$

В частности  $\sum_\alpha (\sigma^\mu \sigma^\nu)_{\alpha\alpha} = 2\delta^{\mu\nu}$ ,  $Sp(\vec{\sigma})^2 = 3$ .

Произведем расщепление в уравнении (3.3.10). При отсутствии внешнего магнитного поля функция Грина свободных электронов диагональна по спиновым индексам  $G_{\alpha\alpha'} = G\delta_{\alpha\alpha'}$ . Будем искать функцию Грина  $\mathcal{G}_{\beta\beta'}$  в виде  $\mathcal{G}_{\beta\beta'} = \mathcal{G}\delta_{\beta\beta'}$ . Как станет ясно в дальнейшем, такой выбор вида функции Грина отвечает однородному  $RVB$  состоянию. Переходя к импульсному представлению и заменяя локальный констрэинт глобальным  $\lambda_i = \lambda$  (обоснованность такой замены будет обсуждаться в следующей главе), получим следующее уравнение

$$(i\omega_n - \lambda) \mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega_n) = 1 -$$

$$\begin{aligned}
& -2S(S+1)T^2 \sum_{n_1, n_2} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \mathcal{J}(\omega_{n_1}, \omega_{n_2}; \omega_{n_1}, \omega_{n_2-n_1}) \times \\
& \times G^{(0)}(\mathbf{p}_1, \omega_{n_1}) G^{(0)}(\mathbf{p}_2, \omega_{n_2}) \mathcal{G}(\mathbf{p} + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1, \omega_n + \omega_{n_2} - \omega_{n_1}) \times \\
& \times \mathcal{J}(\omega_{n_1}, \omega_{n_2-n_1}; \omega_n, \omega_{n_2}) \mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega_n) \quad (3.3.11)
\end{aligned}$$

Рассмотрим для простоты ситуацию, когда частотной зависимостью вершин можно пренебречь (например, высокие температуры) и введем определение поляризационного оператора

$$\Pi(\mathbf{p}, \varepsilon_m) = T \sum_{\mathbf{k}, n} G^{(0)}(\mathbf{p} + \mathbf{k}, \omega_n + \varepsilon_m) G^{(0)}(\mathbf{p}, \omega_n), \quad \varepsilon_m = 2m\pi T \quad (3.3.12)$$

В этом случае вершину  $\mathcal{J}$  можно заменить "голой" константой взаимодействия  $J$ . Как будет показано позднее, это приближение перестает быть корректным при температурах порядка температуры Кондо. Учет частотной зависимости приводит к сильной перенормировке эффективной константы  $J_{eff}$ .

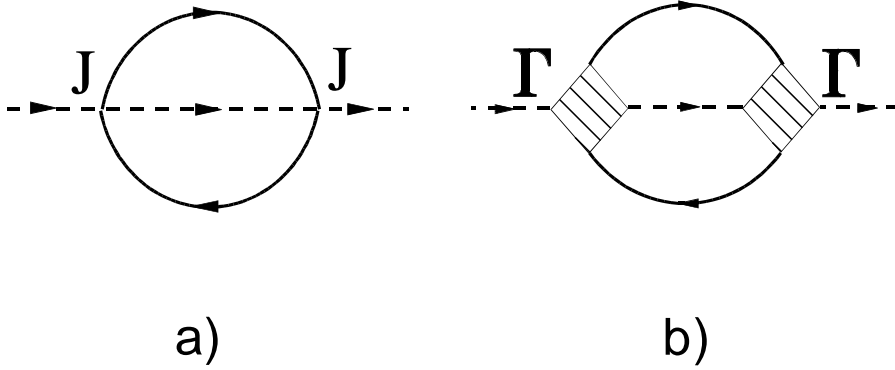


Рисунок 3.3.2

Уравнение на  $\mathcal{G}$  принимает более удобный вид

$$\begin{aligned}
& (i\omega_n - \lambda) \mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega_n) = \\
& = 1 - 2S(S+1) \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 T \sum_m \sum_{\mathbf{q}} \Pi(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \omega_n - \Omega_m) \mathcal{G}(\mathbf{q}, \Omega_m) \mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega_n) \quad (3.3.13)
\end{aligned}$$

Так как уравнение (3.3.13) не содержит замкнутых петель от псевдофермионной функции Грина, а все суммы по спиновым индексам уже вычислены, в дальнейшем будем считать зону псевдофермионов заполненной на половину и  $\lambda$  положим равным 0. Определяя функцию Грина через полную неприводимую собственно энергетическую часть  $\Sigma$

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \Sigma(\mathbf{p}, \omega_n)}, \quad (3.3.14)$$

запишем уравнение на  $\Sigma$ .

Для этого выделим в поляризационном операторе слагаемые, отвечающие одноузельным и межузельным процессам. При этом будем учитывать взаимодействие только ближайших соседей на простой кубической решетке

$$\Pi(\mathbf{q}, \varepsilon_m) = \sum_{r=0, \langle R \rangle} \Pi(r, \varepsilon_m) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \Pi(0, \varepsilon_m) + \Pi(R, \varepsilon_m) \varphi(\mathbf{q}) \quad (3.3.15)$$

$$\varphi(\mathbf{q}) = \sum_{\langle R \rangle} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = 2(\cos(q_x R) + \cos(q_y R) + \cos(q_z R)) \quad (3.3.16)$$

Формфактор  $\varphi(\mathbf{q})$  обладает очевидным свойством  $\varphi(0) = z$  - число ближайших соседей на простой кубической решетке.

Уравнение (3.3.13) можно переписать в следующем виде

$$\begin{aligned} & (i\omega_n + 2S(S+1) \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 T^2 \sum_{n_1, n_2} G^{(0)}(0, \omega_{n_1}) G^{(0)}(0, \omega_{n_2}) \times \\ & \quad \times \mathcal{G}(0, \omega_n + \omega_{n_2} - \omega_{n_1})) \mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega_n) = \\ & = 1 - 2S(S+1) \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 T \sum_m \sum_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \Pi(R, \omega_n - \Omega_m) \mathcal{G}(\mathbf{q}, \Omega_m) \mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega_n) \end{aligned} \quad (3.3.17)$$

где  $G^{(0)}(0, \omega_{n_2}) = G^{(0)}(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_i, \omega_{n_2})$ , и, аналогично для функции  $\mathcal{G}$ .

Обозначим выражение

$$\tilde{\Sigma}(\omega_n) = -2S(S+1) \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 T^2 \sum_{n_1, n_2} G^{(0)}(0, \omega_{n_1}) G^{(0)}(0, \omega_{n_2}) \mathcal{G}(0, \omega_n + \omega_{n_2} - \omega_{n_1}) \quad (3.3.18)$$

По своей структуре это вклад одноузельных процессов в собственно энергетическую часть. Поэтому мы можем заменить в выражении (3.3.18) функцию  $\mathcal{G}$  на  $\mathcal{G}^{(0)} = 1/(i\omega_n)$ .

Обозначим

$$M(\mathbf{p}, \omega_n) = -2S(S+1) \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 T \sum_m \sum_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \Pi(R, \omega_n - \Omega_m) \mathcal{G}(\mathbf{q}, \Omega_m) \quad (3.3.19)$$

Выражение (3.3.14) примет вид

$$\mathcal{G}(\mathbf{p}, \omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \tilde{\Sigma}(\omega_n) - M(\mathbf{p}, \omega_n)} \quad (3.3.20)$$

Окончательно, уравнение на полностью неприводимую собственно энергетическую часть примет вид

$$\begin{aligned} M(\mathbf{p}, \omega_n) & = -2S(S+1) \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 T \sum_m \sum_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \Pi(R, \omega_n - \Omega_m) \times \\ & \quad \times \frac{1}{i\Omega_m - \tilde{\Sigma}(\Omega_m) - M(\mathbf{q}, \Omega_m)} \end{aligned} \quad (3.3.21)$$

Сравнивая (3.3.19), (3.3.20) и (3.3.21) с (3.3.14) видим, что в принятом приближении

$$\Sigma(\mathbf{p}, \omega_n) = \tilde{\Sigma}(\omega_n) + M(\mathbf{p}, \omega_n) \quad (3.3.22)$$

Приведем ряд формул, позволяющих вычислять суммы с формфакторами  $\varphi(\mathbf{p})$  и суммы по мацубаровским частотам  $\omega_n = (2n + 1)\pi T$ , которые будут полезны нам в дальнейшем.

$$\sum_{\mathbf{p}} \varphi(\mathbf{p})\varphi(\mathbf{p} - \mathbf{q}) = \varphi(\mathbf{q}) \quad (3.3.23)$$

$$\sum_{\mathbf{p}} \varphi(\mathbf{p}) \frac{\partial \varphi(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{\partial q_\alpha} = \frac{\partial \varphi(\mathbf{q})}{\partial q_\alpha}, \quad \alpha = x, y, z \quad (3.3.24)$$

$$T \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \frac{1}{i\omega_n - z} = -\frac{1}{2} \tanh\left(\frac{z}{2T}\right),$$

$$T \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \frac{1}{i\omega_n - z'} \frac{1}{i(\omega_{n'} - \omega_n) - z} = -\frac{1}{2} \frac{\tanh\left(\frac{z'}{2T}\right) + \coth\left(\frac{z}{2T}\right)}{i\omega_{n'} - z - z'} \quad (3.3.25)$$

Выражение (3.3.23) может быть легко получено, если перейти от сумм к интегралам

$$\sum_{\mathbf{p}} = \left(\frac{R}{2\pi}\right)^3 \int_{-\frac{\pi}{R}}^{\frac{\pi}{R}} dq_x \int_{-\frac{\pi}{R}}^{\frac{\pi}{R}} dq_y \int_{-\frac{\pi}{R}}^{\frac{\pi}{R}} dq_z$$

Заметим, что если пренебречь частотной зависимостью в поляризационном операторе и не учитывать влияние одноузельных процессов, собственно энергетическая часть  $M$  становится частотно-независимой. При этом, уравнение на по своей структуре аналогично среднеполевому уравнению на параметр порядка  $\Delta = \langle f_{i\uparrow}^\dagger f_{j\uparrow} + f_{i\downarrow}^\dagger f_{j\downarrow} \rangle$ .

$$M(\mathbf{p}) = S(S + 1) \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 \sum_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \Pi(R, 0) \tanh\left(\frac{M(\mathbf{q})}{2T}\right) \quad (3.3.26)$$

При вычислении мацубаровской суммы воспользовались формулой (3.3.25). Появление в уравнении коэффициента  $S(S + 1) = 3/4$  вызвано, с одной стороны отличающимся определением среднеполевых средних, с другой стороны, отсутствием явного учета констрэинта присутствующее в формулах (3.1.1 - 3.1.5).

Определим  $T_{RVB}$  как температуру, при которой появляется нетривиальное решение уравнения (3.3.26). Будем искать решение в виде

$$M(\mathbf{p}) = \Delta \varphi(\mathbf{p}) \quad (3.3.27)$$

Воспользовавшись формулой (3.3.24), легко получить

$$T_{RVB} = \frac{3}{8} \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 \Pi(R, 0) \quad (3.3.27)$$

Таким образом, температуру  $T_{RVB}$  можно отождествить с температурой возникновения спин-фермионной зоны. При этом абрикосовские псевдофермионы играют роль нейтральных спин-фермионов. Пренебрежение частотной зависимостью в поляризационном операторе отвечает тому, что мы не учитываем эффекты запаздывания, т.е. локализованные спины взаимодействуют в один и тот же момент времени. Взаимодействие спинов при этом описывается эффективным гамильтонианом Гайзенберга.

### 3.4. Диаграммная техника при конечных температурах в координатном представлении.

Для вычисления эффективного косвенного обмена на больших по сравнению с обратным импульсом Ферми расстояниях воспользуемся асимптотическими формулами для функций Грина и поляризационного оператора в координатном представлении на мнимых частотах [37].

Выпишем ряд стандартных выражений. Функция Грина электронов проводимости на Мацубаровских частотах имеет вид.

$$G(\mathbf{p}, \omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon(\mathbf{p}) + \mu}, \quad \omega_n = (2n + 1)\pi T \quad (3.4.1)$$

Здесь  $\varepsilon(\mathbf{p})$  - спектр квазичастиц,  $\mu$  - химический потенциал, совпадающий для идеального газа при  $T = 0$  с энергией Ферми  $\varepsilon_0$ . Воспользуемся стандартным выражением для компоненты Фурье функции Грина

$$G(\mathbf{R}, \omega_n) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^d} G(\mathbf{p}, \omega_n) e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}} \quad (3.4.2)$$

Поляризационный оператор определяется как

$$\Pi(\mathbf{R}, \varepsilon_m) = T \sum_n G(\mathbf{R}, \omega_n + \varepsilon_m) G(\mathbf{R}, \omega_n), \quad \varepsilon_m = 2m\pi T \quad (3.4.3)$$

Отсутствие коэффициента 2 в определении поляризационного оператора, связанного с суммированием по состояниям с различной проекцией спина электрона, вызвано тем, что суммирование производится не независимо, а с учетом значения проекции соответствующего локализованного спина. Выражение для константы косвенного обмена может быть получено из гамильтониана (3.3.1) во втором порядке теории возмущений



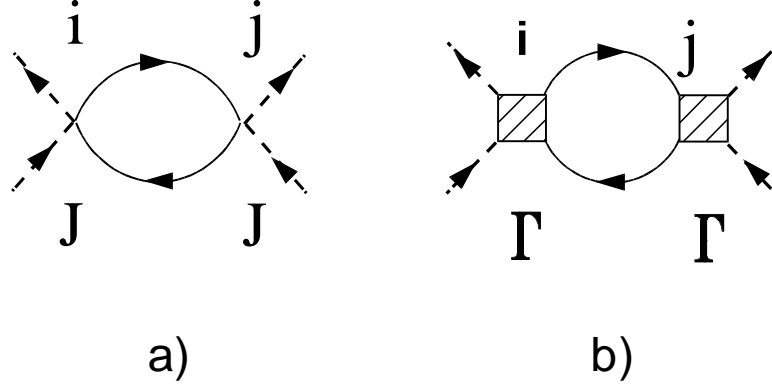


Рисунок 3.4.1

$$J_{RKKY} = \sum_{m \neq 0} \frac{|(H_{int})_{m0}|^2}{E_0 - E_m} = 2 \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \frac{n_{\mathbf{p}}(1 - n_{\mathbf{p}'})}{\xi_{\mathbf{p}} - \xi_{\mathbf{p}'}} e^{i(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\mathbf{R}}, \quad \mathbf{R} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$$

В принятых обозначениях  $J_{RKKY}$  можно записать в виде

$$J_{RKKY}(\mathbf{R}) = \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 \Pi(\mathbf{R}, 0), \quad (3.4.4)$$

$n_0$  - плотность электронов проводимости,  $n_0 = N/V$ . Предельный переход  $T \rightarrow 0$  соответствует замене  $T \sum_n \rightarrow \int \frac{d\omega}{2\pi}$ , что означает, что при стремлении  $T$  к нулю в суммах по частотам главную роль играют большие  $n$ . Так как при  $T \ll \varepsilon_0$  учет конечной температуры приводит к поправкам  $\sim (\frac{T}{\varepsilon_0} p_0 R)^2$ , можно заменять мацубаровские суммы на интегралы, работая, таким образом, в технике на мнимых частотах при  $T = 0$ . Как будет показано ниже, при наличии в системе Кондо-резонанса, учет конечных температур в выражении (3.4.3) становится существенным, однако, утверждение относительно возможности замены сумм на интегралы остается справедливым.

В начале рассмотрим косвенный обмен в трехмерном случае  $d = 3$ , электроны проводимости будем считать свободными

$\xi(\mathbf{p}) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 - p_0^2}{2m} \approx v(|\mathbf{p}| - p_0)$ , где  $v$  - скорость квазичастиц на Ферми-поверхности. С учетом вышесказанного, функция Грина имеет вид

$$G(\mathbf{R}, \omega_n) = \int \frac{p^2 dp d\Omega}{(2\pi)^3} \frac{1}{i\omega_n - \xi(\mathbf{p})} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}} = \frac{m}{(2\pi)^2 i R} \int d\xi \frac{e^{ip_0 R + i\frac{\xi}{v}} - e^{-ip_0 R - i\frac{\xi}{v}}}{i\omega_n - \xi}$$

Здесь  $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$  и мы воспользовались асимптотической формулой при  $p_0 R \gg 1$ ,  $pR \approx p_0 R + \frac{\xi}{v} R$ . В случае сферической Ферми-поверхности функция Грина зависит только от модуля радиус-вектора. Заменяя  $\int_{-\varepsilon_0}^{\infty}$  на  $\int_{-\infty}^{\infty}$

и замыкая контур в верхнюю или нижнюю полуплоскость в зависимости от знака  $\omega$  окончательно получим

$$G(R, \omega_n) = -\frac{m}{2\pi R} \exp\left(-\frac{|\omega_n|}{2\varepsilon_0} + ip_0 R \operatorname{sgn} \omega_n\right), \quad p_0 R \gg 1 \quad (3.4.5)$$

Вычислим (3.4.3), воспользовавшись асимптотическим представлением функции Грина (3.4.5)

$$\begin{aligned} \Pi_{R, \varepsilon_m} &= \left(\frac{m}{2\pi R}\right)^2 T \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \exp\left(-\frac{|\omega_n|}{v} R - \frac{|\omega_n + \varepsilon_m|}{v} R\right) \times \\ &\quad \times \exp(ip_0 R (\operatorname{sgn} \omega_n + \operatorname{sgn}(\omega_n + \varepsilon_m))) \end{aligned} \quad (3.4.6)$$

При вычислении геометрических прогрессий воспользуемся формулами

$$\begin{aligned} T \sum_{n=m}^{n=\infty} \exp\left(-\frac{2(2n+1)\pi T}{v} R\right) &= \frac{1}{2} \frac{\exp\left(-\frac{2(2\pi m T)}{v} R\right)}{\sinh\left(\frac{2\pi T}{v} R\right)} = \frac{1}{2} \frac{\exp\left(-\frac{2\varepsilon_m}{v}\right)}{\sinh\left(\frac{2\pi T}{v} R\right)}, \\ T \sum_{n=0}^{n=m-1} \exp\left(-\frac{2(2n+1)\pi T}{v} R\right) &= \exp\left(-\frac{2\pi m T}{v} R\right) \frac{\sinh\left(\frac{2\pi m T}{v} R\right)}{\sinh\left(\frac{2\pi T}{v} R\right)} = \\ &= \exp\left(-\frac{\varepsilon_m}{v} R\right) \frac{\sinh\left(\frac{\varepsilon_m}{v} R\right)}{\sinh\left(\frac{2\pi T}{v} R\right)} \end{aligned} \quad (3.4.7)$$

Окончательный ответ

$$\begin{aligned} \Pi(R, \varepsilon_m) &= T \left(\frac{m}{2\pi R}\right)^2 \exp\left(-\frac{2|\varepsilon_m|}{v} R\right) \frac{\cos(2p_0 R + \frac{i\varepsilon_m}{v} R)}{\sinh\left(\frac{2\pi T}{v} R\right)} + \\ &\quad + T \left(\frac{m}{2\pi R}\right)^2 \exp\left(-\frac{|\varepsilon_m|}{v} R\right) \times \\ &\quad \times \left( \frac{|\varepsilon_m|}{2\pi T} + \frac{\sinh\left(\frac{|\varepsilon_m|}{v} R\right)}{\sinh\left(\frac{2\pi T}{v} R\right)} \exp\left(-\frac{|\varepsilon_m|}{v} R + 2ip_0 R \operatorname{sgn} \varepsilon_m\right) \right) \end{aligned} \quad (3.4.8)$$

При  $T/\varepsilon_0 \rightarrow 0$  можно разложить  $\sinh$  в ряд. Выражение для поляризационного оператора на нулевой частоте при этом имеет следующий вид

$$\Pi(R, 0) = T \left(\frac{m}{2\pi R}\right)^2 \frac{\cos(2p_0 R)}{\sinh\left(\frac{2\pi T}{v} R\right)} = \frac{mp_0^4 \cos(2p_0 R)}{8\pi^3 (p_0 R)^3} \left(1 - \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{T}{\varepsilon_0} p_0 R\right)^2 + \dots\right) \quad (3.4.9)$$

Можно получить это выражение и другим способом

$$\begin{aligned} \Pi(R, 0) &= 2\left(\frac{m}{2\pi R}\right)^2 \cos(2p_0 R) \int_{T \rightarrow 0}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} p_0 R} = \\ &= \frac{mp_0^4}{8\pi^3} \left[ \frac{\cos(2p_0 R)}{(p_0 R)^3} + O\left(\frac{1}{(p_0 R)^4}\right) \right] \end{aligned} \quad (3.4.10)$$

Плотность электронов выражается стандартным образом  $n_0 = 2 \frac{\frac{4}{3}\pi p_0^3}{(2\pi)^3} = \frac{p_0^3}{3\pi^2}$  введем также обозначение одночастичной плотности состояний на уровне Ферми  $\rho(0) = \frac{mp_0}{2\pi^2}$ , и коэффициентов  $\gamma = \frac{J}{\varepsilon_F}$  и  $\alpha = \frac{J}{n_0} \rho(0)$ , связанных простым соотношением  $\alpha = \frac{3}{4}\gamma$ . При этом выражения для эффективной константы взаимодействия и характерных температур приобретают наиболее простой вид

$$J_{RKKY}(R) = \varepsilon_0 \frac{9\pi}{16} \gamma^2 \frac{\cos(2p_0 R)}{(p_0 R)^3} = \varepsilon_0 \pi \alpha^2 \frac{\cos(2p_0 R)}{(p_0 R)^3} \quad (3.4.11)$$

Температура перехода в АФМ-фазу ( $T_N$ ) выражается через эффективную константу спин-спинового взаимодействия  $J_{ss}$

$$T_N = \frac{zS(S+1)}{3} |J_{ss}| \quad (3.4.12)$$

$z = 6$  - число ближайших соседей для простой кубической решетки.

$$T_N = \frac{3}{2} |J_{ss}| \quad (3.4.13)$$

Температура Кондо в принятых обозначениях определяется как

$$T_K = \varepsilon_0 \exp\left(-\frac{1}{2\alpha}\right) \quad (3.4.14)$$

Таким образом определенный знак у поляризационного оператора отвечает эффективному гамильтониану Гайзенберга в приближении взаимодействия ближайших соседей

$$H_{int} = -J_{ss} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad J_{ss} = -J_{RKKY}(R) \quad (3.4.15)$$

антиферромагнитное упорядочение спинов происходит при выполнении условия  $\cos(2p_0 R) > 0$ , максимальное по абсолютной величине значение эффективной константы взаимодействия, а, следовательно и температуры Нееля, достигается при  $p_0 R \approx \pi$ , при этом

$$T_N = \varepsilon_0 \frac{27\pi}{32} \gamma^2 \frac{|\cos(2p_0 R)|}{(p_0 R)^3} = \varepsilon_0 \frac{3\pi}{2} \alpha^2 \frac{|\cos(2p_0 R)|}{(p_0 R)^3} \approx \varepsilon_0 \frac{3\alpha^2}{2\pi^2} \quad (3.4.16)$$

Из предыдущей главы нам известно (см формулу (3.3.27)), что

$$T_{RVB} = \frac{3}{8} J_{RKKY} = \varepsilon_0 \frac{27\pi}{128} \gamma^2 \frac{|\cos(2p_0 R)|}{(p_0 R)^3} =$$

$$= \varepsilon_0 \frac{3\pi}{8} \alpha^2 \frac{|\cos(2p_0 R)|}{(p_0 R)^3} \approx \varepsilon_0 \frac{3\alpha^2}{8\pi^2} \quad (3.4.17)$$

Таким образом, в трехмерии отношение температур Нееля и  $RVB$

$$\frac{T_N}{T_{RVB}} = 4 \quad (3.4.18)$$

Перейдем теперь к рассмотрению двумерного случая  $d = 2$ , считая спектр квазичастиц независимым от импульса  $p_z$   $\xi(\mathbf{p}) = \frac{p_x^2 + p_y^2 - p_0^2}{2m}$ ,  $-p_{z0} < p_z < p_{z0}$ , что отвечает цилиндрической форме Ферми-поверхности. Плотность электронов  $\tilde{n}_0$  в этом случае вычисляется аналогично трехмерному как отношение фазового объема "цилиндра Ферми" к объему системы с учетом суммирования по проекциям спина  $\tilde{n}_0 = 2 \frac{2\pi p_0^2 p_{z0}}{(2\pi)^3} = \frac{p_{z0} p_0^2}{2\pi^2} = \frac{p_{z0}}{\pi} n_0$ ,  $n_0 = \frac{p_0^2}{2\pi}$ , обозначения для коэффициентов  $\gamma, \alpha$  сохранены прежними, а выражения для плотности состояний и связи между  $\gamma$  и  $\alpha$  имеют вид  $\rho(0) = \frac{m p_{z0}}{2\pi^2}$ ,  $\alpha = \frac{1}{2}\gamma$ . Компонента Фурье функции Грина с учетом цилиндрической симметрии имеет вид

$$\begin{aligned} g(\mathbf{R}, z, \omega_n) &= \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{i\omega_n - \xi(\mathbf{p})} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R} + ip_z z} = \\ &= \int_{-p_{z0}}^{p_{z0}} \frac{dp_z}{2\pi} e^{ip_z z} \int \frac{pdpd\varphi}{(2\pi)^2} \frac{1}{i\omega_n - \xi(\mathbf{p})} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}} \\ g(\mathbf{R}, z, \omega_n) &= \frac{\sin(p_{z0} z)}{\pi z} G(\mathbf{R}, \omega_n) \end{aligned} \quad (3.4.19)$$

Приняты следующие обозначения  $\mathbf{R}$  - вектор в плоскости  $xy$ ,  $G(\mathbf{R}, \omega_n)$  - двумерная функция Грина, связанная с функцией Грина  $g(\mathbf{R}, z, \omega_n)$  соотношением  $G(\mathbf{R}, \omega_n) = \frac{\pi}{p_{z0}} g(\mathbf{R}, 0, \omega_n)$ . В случае бесконечной цилиндрической поверхности воспользуемся предельным соотношением  $\frac{1}{\pi} \lim_{p_{z0} \rightarrow \infty} \frac{\sin(p_{z0} z)}{z} = \delta(z)$ . Однако, даже при конечных  $p_{z0} \gg p_0$  (условие квазидвумерности системы) конечные выражения для эффективного взаимодействия, температуры фазового перехода и.т.д. для плоскости  $z = 0$  не будут зависеть от  $p_{z0}$ .

$$\begin{aligned} J_{RKKY}(\mathbf{R}) &= \left(\frac{J}{\tilde{n}_0}\right)^2 \Pi(\mathbf{R}, 0) = \left(\frac{J}{\tilde{n}_0}\right)^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} (g(\mathbf{R}, \omega))^2 = \\ &= \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 \int \frac{d\omega}{2\pi} (G(\mathbf{R}, \omega))^2 \end{aligned} \quad (3.4.20)$$

Так как спектр квазичастиц изотропный, функция Грина не зависит от направления радиус-вектора в плоскости.

$$G(R, \omega_n) = \int \frac{pdpd\varphi}{(2\pi)^2} \frac{1}{i\omega_n - \xi(\mathbf{p})} e^{ipR \cos \varphi} \quad (3.4.21)$$

Воспользуемся интегральным представлением функции Бесселя

$$J_0(z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{iz \cos \varphi} \quad (3.4.22)$$

При значениях аргумента  $|z| \gg 1$  функция Бесселя  $J_0$  имеет асимптотику

$$J_0(z) \approx \sqrt{\frac{2}{z\pi}} \cos\left(z - \frac{\pi}{4}\right) \quad (3.4.23)$$

Подставляя (3.4.22) и (3.4.23) в (3.4.21), получим

$$G(R, \omega_n) = \int_0^\infty p dp \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3 p R}} \frac{e^{ipR - i\frac{\pi}{4}} + e^{-ipR + i\frac{\pi}{4}}}{i\omega_n - \xi(\mathbf{p})} \quad (3.4.24)$$

Перейдем как и в случае  $d = 3$  к интегрированию по  $d\xi$  воспользовавшись асимптотикой при  $p_0 R \gg 1$ ,  $pR \approx p_0 R + \frac{\xi}{v}$ .

$$G(R, \omega_n) = \frac{m}{\sqrt{(2\pi)^3 R}} \int d\xi \frac{1}{\sqrt{p_0 + \frac{\xi}{v}}} \frac{e^{ip_0 R + i\frac{\xi}{v} - i\frac{\pi}{4}} + e^{-ip_0 R - i\frac{\xi}{v} + i\frac{\pi}{4}}}{i\omega_n - \xi} \quad (3.4.25)$$

Заменяя  $\int_{-\varepsilon_0}^\infty$  на  $\int_{-\infty}^\infty$  и замыкая контур в верхнюю или нижнюю полуплоскость в зависимости от знака  $\omega$  окончательно получим

$$G(R, \omega_n) = -i \operatorname{sgn} \omega_n \frac{m}{\sqrt{2\pi p_0 R}} \exp\left(-\frac{|\omega_n|}{2\varepsilon_0} + i\left(p_0 R - \frac{\pi}{4}\right) \operatorname{sgn} \omega_n\right) \quad (3.4.26)$$

Приведем выражение для двумерного поляризованного оператора при конечных температурах как функцию мацубаровской частоты  $\varepsilon_m$ . Вычисления аналогичны трехмерному случаю (см. (3.4.4)-(3.4.8))

$$\begin{aligned} \Pi(R, \varepsilon_m) = & -T \frac{m^2}{2\pi p_0 R} \exp\left(-\frac{2|\varepsilon_m|}{v} R\right) \frac{\sin\left(2p_0 R + \frac{i\varepsilon_m}{v} R\right)}{\sinh\left(\frac{2\pi T}{v} R\right)} \\ & - T \frac{m^2}{2\pi R} \exp\left(-\frac{|\varepsilon_m|}{v} R\right) \times \\ & \times \left( \frac{|\varepsilon_m|}{2\pi T} - \frac{\sinh\left(\frac{|\varepsilon_m|}{v} R\right)}{\sinh\left(\frac{2\pi T}{v} R\right)} \exp\left(-\frac{|\varepsilon_m|}{v} R + 2i\left(p_0 R - \frac{\pi}{4}\right) \operatorname{sgn} \varepsilon_m\right) \right) \end{aligned} \quad (3.4.27)$$

Также можно привести выражение при низких температурах

$$\Pi(R, 0) = -T \frac{m^2}{2\pi p_0 R} \frac{\sin(2p_0 R)}{\sinh\left(\frac{2\pi T}{v} R\right)} =$$

$$= -\frac{mp_0^2 \sin(2p_0R)}{4\pi^2 (p_0R)^2} \left( 1 - \frac{\pi^2}{6} \left( \frac{T}{\varepsilon_0} p_0R \right)^2 + \dots \right) \quad (3.4.28)$$

Или другим способом,

$$\begin{aligned} \Pi(R, 0) &= -\frac{m^2}{\pi p_0 R} \cos\left(2p_0R - \frac{\pi}{2}\right) \int_{T \rightarrow 0}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} e^{-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} p_0 R} = \\ &= -\frac{mp_0^2}{4\pi^2} \left[ \frac{\sin(2p_0R)}{(p_0R)^2} + O\left(\frac{1}{(p_0R)^3}\right) \right] \end{aligned} \quad (3.4.29)$$

Эффективная константа  $RKKY$  - взаимодействия равна

$$J_{RKKY}(R) = -\frac{1}{2} \varepsilon_0 \gamma^2 \frac{\sin(2p_0R)}{(p_0R)^2} = -2\varepsilon_0 \alpha^2 \frac{\sin(2p_0R)}{(p_0R)^2} \quad (3.4.30)$$

Гамильтониан классической модели Гайзенберга обладает непрерывной симметрией, описываемой группой трехмерных вращений, и для нее выполнены условия теоремы Мермина и Вагнера [79-81, 84], так что спонтанный момент отсутствует при  $T \neq 0$  для  $D = 2$ . Однако, корреляционная длина за счет классических флуктуаций при конечных, но малых по сравнению с константой взаимодействия температурах, экспоненциально велика [85]. В реальных тяжелофермионных соединениях (например  $CeRu_2Si_2$ ) ферми-поверхность представляет собой хотя и сильно вытянутый, но не бесконечный цилиндр [67,68]. Таким образом, ситуация реально является квазидвумерной, причем флуктуации, разрушающие дальний порядок, подавляются. При  $T = 0$  дальний АФМ порядок существует даже в чисто двумерной ситуации (корреляционная длина бесконечна). Говоря о спиновой жидкости, мы имеем в виду состояние спиновой системы, в которой даже при нулевой температуре корреляционная длина конечна. Так как мы имеем, вообще говоря, единственный масштаб энергий, определяемый константой спин-спинового взаимодействия, мы можем определить среднеполевое понятие температуры Нееля.

Учитывая, что в двумерии число ближайших соседей в простой кубической решетке  $z = 4$  и  $\frac{zS(S+1)}{3} = 1$ , получаем

$$T_N = |J_{RKKY}| = 2\varepsilon_0 \alpha^2 \frac{|\sin(2p_0R)|}{(p_0R)^2} \quad (3.4.31)$$

Выражение для температуры Кондо остается без изменений. Условием антиферромагнитного упорядочения является  $\sin(2p_0R) < 0$ , максимальное значение температуры Нееля достигается при  $p_0R \approx \frac{3\pi}{4}$

Температура перехода в однородное  $RVB$  состояние определяется как и в трехмерии

$$T_{RVB} = \frac{3}{8} |J_{RKKY}| = \frac{3}{4} \varepsilon_0 \alpha^2 \frac{|\sin(2p_0R)|}{(p_0R)^2} = \frac{3}{16} \varepsilon_0 \gamma^2 \frac{|\sin(2p_0R)|}{(p_0R)^2} \quad (3.4.32)$$

Отношение температур Нееля и  $RVB$  в двумерии равно

$$\frac{T_N}{T_{RVB}} = \frac{8}{3} \quad (3.4.33)$$

Таким образом, как в трехмерии, так и в двумерии, для модели Гайзенберга среднеполевые решения свидетельствуют о предпочтительном формировании магнитного порядка относительно состояния спиновой жидкости. По этой причине интересную и важную задачу представляет поиск механизма стабилизации спиновой жидкости относительно перехода в антиферромагнитное состояние. Один из возможных механизмов будет рассмотрен в следующей главе.

## Глава 4. Стабилизация спиновой жидкости в Кондо-решетках.

### 4.1. Эффективное взаимодействие спинов на больших расстояниях.

При рассмотрении изолированной кондо - примеси при антиферромагнитном знаке взаимодействия электронов проводимости и спинов возникает когерентный эффект, связанный с резонансным рассеянием электронов с переворотом спина [86-89]. Эта ситуация реализуется, во-первых, в случае, когда концентрация магнитных примесей так мала, что температура примесного антиферро - и ферромагнетизма, пропорциональная концентрации примесей является самым малым энергетическим параметром системы. Или же, примеси расположены хаотично, что не дает возможности регулярного упорядочения спинов, в следствие осциллирующего характера эффективного спин - спинового взаимодействия, оставляя, однако возможность перехода в спин - стекольное состояние с эффективной температурой, также пропорциональной концентрации примесей. И в том и в другом случае исключаются процессы, "замораживающие" спин и препятствующие переворотам спина при рассеянии. Резонансный эффект, проявляющийся в появлении минимума в зависимости электрического сопротивления очень чистых золота, серебра, меди, связанный с наличием в металлах примесных атомов с незаполненными внутренними оболочками, обладающими отличным от нуля спином (в основном, атомов переходных и редкоземельных металлов) достаточно подробно исследован в литературе [90-97]. Диаграммная техника, основанная на использовании псевдофермионного представления для спиновых оператором была построена в работах Абрикосова [87,90] и использовалась также в последующих работах, посвященных исследованию однопримесного Кондо - эффекта. В результате отбора диаграмм для амплитуды рассеяния электронов на спинах, оказывается, что наиболее расходящимися являются, так называемые, паркетные диаграммы (рисунок 4.1.1) [87, 98-103]



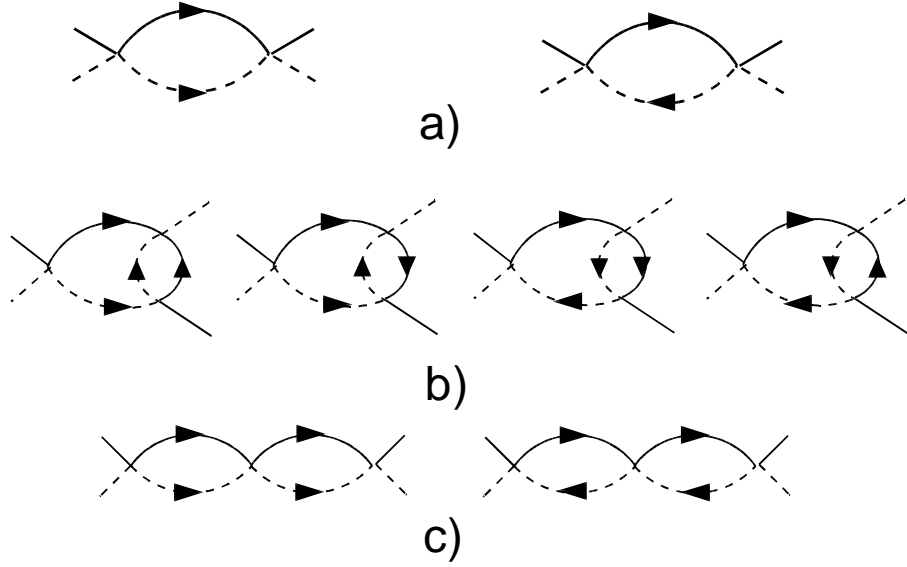


Рисунок 4.1.1

При этом амплитуда рассеяния для  $s - f$  обменного взаимодействия имеет вид

$$\Gamma(\epsilon, 0, \epsilon, 0) = \Gamma(\epsilon) = \frac{J}{1 + 2\frac{\rho(0)J}{n_0} \ln\left(\frac{\epsilon_F}{\max[T, \epsilon]}\right)} \quad (4.1.1)$$

и имеет полюс при антиферромагнитном знаке  $s - f$  - обменного взаимодействия, определяющий новый энергетический масштаб, не зависящий от концентрации магнитных примесей и называемый температурой Кондо.

$$T_k = \epsilon_F \exp\left(-\frac{n_0}{2\rho(0)|J|}\right)$$

Оказывается, что энергетический масштаб, определяемый температурой Кондо, является универсальным как в области  $T \ll T_k$ , так и при температурах выше  $T_k$ . Поправки к термодинамическим и кинетическим характеристикам системы, пропорциональные концентрации магнитных примесей, в области низких температур имеют фермижидкостной характер [82]:

$$\Delta C_m \sim T/T_k, \quad \Delta\rho_J \sim (T/T_k)^2, \quad \Delta\chi_m \sim 1/T_k \quad (4.1.2)$$

Здесь  $\Delta C_m$  - поправка к теплоемкости,  $\Delta\rho_J$  - поправка к сопротивлению,  $\Delta\chi_m$  - поправка к парамагнитной восприимчивости электронов [82,104,105].

Рассмотрим влияние Кондо - рассеяния на РККУ - взаимодействие, а именно, случай, когда температуры Кондо и Нееля имеют один и тот же энергетический масштаб. Вместо вершины РККУ - взаимодействия (рисунок 3.4.1.a), как уже отмечалось, необходимо рассматривать взаимодействие в виде (рисунок 3.4.1.b). Аналитическое выражение, отвечающее данной диаграмме, име-

ет вид:

$$\tilde{J}_{RKKY} = T \sum_m \Gamma^2(\varepsilon_m, T) G^2(R, \varepsilon_m, T) \quad (4.1.3)$$

где  $\Gamma$  определяется формулой (4.1.1). Как отмечалось в работах [106,107], в следствие того, что сумма по  $\varepsilon_m$  набирается эффективно на больших частотах порядка энергии Ферми, усиление эффективного обменного взаимодействия как бы "замывается". Данное утверждение справедливо, в так называемых "плотных Кондо -решетках". Однако, если расстояние между редкоземельными атомами в Кондо -решетке достаточно велико, при понижении температуры усиление эффективного обмена начинает играть существенную роль. Именно такая ситуация реализуется в ТФ соединениях на основе  $Ce$ .

При записи выражения (4.1.3) использовалось приближение непересекающихся диаграмм - рассеяние на каждом спине рассматривалось независимо. Очевидно, что для достаточно разреженной решетки данное приближение представляется корректным. Более подробно вопрос об адекватности подхода с отдельным учетом одноузельных и межузельных корреляций будет исследован в следующем параграфе. Вопрос об эффективном усилении обменного взаимодействия рассмотрен в параграфе об уравнениях среднего поля с учетом Кондо - перенормировок.

Отметим, что ферми - жидкостной характер поведения спиновой подсистемы даже в однопримесной проблеме Кондо указывает на то, что концепция спиновой жидкости типа Резонирующих Валентных Связей может являться хорошей стартовой точкой для описания возбуждений в модели Кондо - решетки.

## 4.2. Эффективная экранировка спина. Спиновая восприимчивость. Главная последовательность диаграмм

В этом разделе проанализируем свойства спиновой подсистемы при высоких по сравнению с  $T_k$  температурах в рамках Приближения Непересекающихся Диаграмм, заключающегося в независимом рассмотрении рассеяния электронов проводимости на каждом атоме редкоземельного элемента. Корректность применения этого приближения, аналогичного Приближению Хаотических Фаз для сильносжатых кулоновских систем будет обоснована в процессе вычислений.

Начнем с исследования одноузельных характеристик - эффективного магнитного момента и эффективной спиновой восприимчивости. Для полноты изложения будем использовать как стандартную диаграммную технику для псевдофермионов, так и диаграммную технику, используемую в работе [90], представляющую диаграммную технику на вещественных частотах в маг-

нитном поле. При этом приведем ответы не содержащие численных ошибок в коэффициентах, которые, к сожалению, имеются в цитированной работе [90]. При конечных температурах магнитный момент редкоземельного атома определяется следующим выражением (рисунок 4.2.1):

$$\mathcal{M}(H, T) = g\mu_B \frac{\sum_{M=-1/2}^{1/2} MT \sum_{\omega} \mathcal{G}_{MM}(\omega) \exp(i\omega\tau)}{\sum_{M=-1/2}^{1/2} T \sum_{\omega} \mathcal{G}_{MM}(\omega) \exp(i\omega\tau)}, \quad \tau \rightarrow +0 \quad (4.2.1)$$

где в нулевом приближении

$$\mathcal{G}_{MM'}^0(\omega) = \delta_{MM'} \frac{1}{i\omega - \lambda + \alpha H \operatorname{sgn}(M - S)} \quad (4.2.2)$$

- стандартное представление одноузельной функции Грина абрикосовских псевдофермионов, уже использованное нами в третьей главе  $\alpha = 1/2g\mu_B$ ,  $g$  - гиромагнитное отношение,  $\mu_B$  - магнетон Бора,  $\lambda$  - учитывает констрэинт на одном узле. Одноузельная спиновая восприимчивость определяется как

$$\chi_0(T) = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\mathcal{M}(H, T)}{H} \quad (4.2.3)$$

Данное представление удобно для исследования слабых магнитных полей  $T \gg \mu_B H$ .

Другой способ учета констрэинта заключается во введении магнитного поля и переводе всех интегралов, определяющих физические характеристики системы (амплитуда рассеяния, магнитный момент, восприимчивость...) на вещественную ось. Эффективно это отвечает случаю  $T = 0$  или случаю сильных магнитных полей, когда  $T \ll \mu_B H$ . Функция Грина псевдофермионов в этом представлении имеет вид

$$\mathcal{G}_{MM'}^0(\omega) = \delta_{MM'} \frac{1}{\omega + \alpha H + i\delta \operatorname{sgn}(M - S)} \quad (4.2.4)$$

Эффективный магнитный момент определяется следующим образом

$$\mathcal{M} = g\mu_B \sum_{M=-1/2}^{1/2} M \int \mathcal{G}_{MM} e^{i\omega\tau} \frac{d\omega}{2\pi i} \quad \tau \rightarrow +0 \quad (4.2.5)$$

Таким образом, выражения (4.2.1) и (4.2.5) описывают два предельных случая сильных и слабых по сравнению с температурой магнитных полей. В работе [90] использовалось представление (4.2.4), нас, однако, интересует предельный случай  $T \gg \mu_B H$ , поэтому, мы воспользуемся представлением (4.2.1). Отметим также что для спина  $S = 1/2$  для вычисления одноузельных характеристик нет необходимости во введении  $\lambda$  для учета локального констрэинта (3.1.5). Выделенность в этом отношении спина  $S = 1/2$  связана с тем, что действие операторов, средние значения которых определяют физические

свойства системы на нефизические состояния, появление которых связано с введением псевдофермионного представления, дает тождественный ноль. Таким образом, можно положить  $\lambda = 0$  заменить знаменатель выражения (4.1.2) на  $2 \cosh(\frac{g\mu_B H}{2T})$  - то есть в линейном по  $\mu_B H/T$  приближении, которым мы и собираемся ограничиться, можно заменить в знаменателе полную функцию Грина псевдофермионов на ее нулевое приближение. Для спина  $S \neq 1/2$  и числитель и знаменатель магнитного момента необходимо домножить на  $\exp(\lambda/T)/(2S + 1)$ , а затем устремить  $\lambda \rightarrow \infty$ . Подробно правила диаграммной техники для однопримесной задачи Кондо изложены в работе Абрикосова [87].

Первая исчезающая поправка к магнитному моменту изображена на диаграмме (рисунок 4.2.1 b)

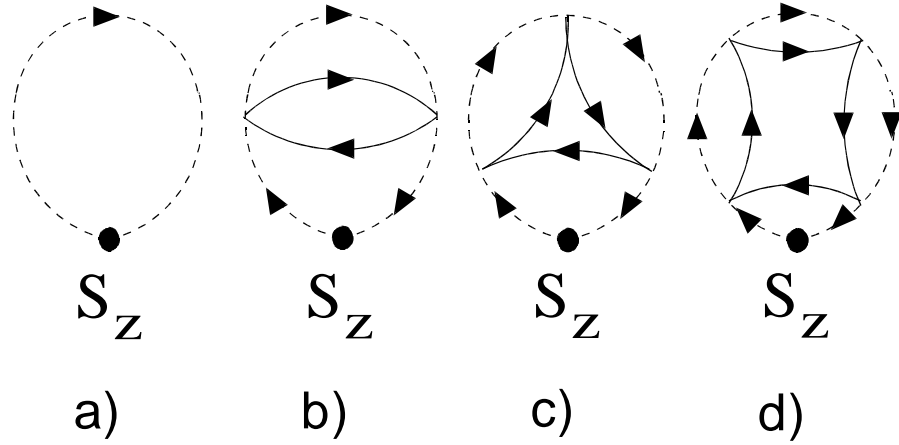


Рисунок 4.2.1

Аналитическое выражение для магнитного момента с учетом первой поправки имеет следующий вид:

$$\mathcal{M}^1(H, T) = \frac{1}{2} g\mu_B \frac{2 \sinh(\frac{g\mu_B H}{2T}) + \mathcal{N}^1(H, T)}{2 \cosh(\frac{g\mu_B H}{2T})} \quad (4.2.6)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{N}^1 = T^2 \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 \sum_{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \sum_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2} G(\mathbf{p}_1, \varepsilon_1) G(\mathbf{p}_2, \varepsilon_2) \times \\ \times T \sum_{\omega} \left[ \frac{1}{2} (A_{\uparrow\uparrow\uparrow} - A_{\downarrow\downarrow\downarrow}) + (A_{\uparrow\uparrow\downarrow} - A_{\downarrow\downarrow\uparrow}) \right] \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

ввиду громоздкости выражений приведем определение одной из функций  $A$ , остальные определяются аналогично

$$A_{\uparrow\uparrow\uparrow} = \mathcal{G}_{\uparrow}^0(i\omega) \mathcal{G}_{\uparrow}^0(i\omega) \mathcal{G}_{\uparrow}^0(i\omega + i\varepsilon_1 - i\varepsilon_2) \quad (4.2.8)$$

Вычисляя сумму по  $\omega$  в пределе  $T \gg \mu_B H$  и переходя от суммирования по импульсам к интегрированию по фазовому объему, получим довольно простое выражение для эффективного магнитного момента:

$$\mathcal{M}^1(H, T) = \frac{S(S+1)(g\mu_B)^2 H}{3T} (1 - 4\phi(T))$$

$$\phi(T) = \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 T^2 \sum_{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \int \int \frac{d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^{2d}} \frac{1}{i\varepsilon_1 - \xi(\mathbf{p}_1)} \frac{1}{i\varepsilon_2 - \xi(\mathbf{p}_2)} \frac{1}{(i\varepsilon_1 - i\varepsilon_2)^2} \quad (4.2.9)$$

Вычисляя функцию  $\phi$  в логарифмическом приближении с постоянной плотностью состояний, получим окончательное выражение:

$$\mathcal{M}^1(H, T) = \frac{S(S+1)(g\mu_B)^2 H}{3T} \left(1 - 4\left(\frac{\rho(0)J}{n_0}\right)^2 \ln\left(\frac{\varepsilon_F}{T}\right)\right) \quad (4.2.10)$$

Поправка третьего порядка изображена на рисунке (4.2.1.c). Вычисления для изображенной диаграммы могут быть проделаны аналогично. Диаграммы четвертого порядка, вообще говоря, можно разбить на несколько типов. На рисунке d. приведена диаграмма с одной непрерывной электронной петлей. Можно показать, что именно она и дает вклад в главное логарифмическое приближение.

Таким образом, сформулируем правила вычисления поправок к магнитному моменту по теории возмущений. Диаграмма  $n$ -го порядка определяется  $n$  вершинами  $s-f$  обменного взаимодействия, содержит  $n$  функций Грина электронов и  $n+1$  функцию Грина псевдофермионов, при этом отбирается диаграмма с одной непрерывной электронной петлей, производится интегрирование по всем внутренним импульсам и суммирование по всем внутренним частотам. Сумма ряда теории возмущения для магнитного момента в главном логарифмическом приближении определяется выражением [104]

$$\begin{aligned} \mathcal{M} &= \frac{S(S+1)(g\mu_B)^2 H}{3T} \left(1 - \frac{4\left(\frac{\rho(0)J}{n_0}\right)^2 \ln\left(\frac{\varepsilon_F}{T}\right)}{1 + 2\frac{\rho(0)J}{n_0} \ln\left(\frac{\varepsilon_F}{T}\right)} + \dots\right) = \\ &= \frac{S(S+1)(g\mu_B)^2 H}{3T} \left(1 - \frac{1}{\ln(T/T_k)} + \dots\right) \end{aligned} \quad (4.2.11)$$

Для температуры Кондо использовано стандартное обозначение. Выражение (4.2.11) показывает тенденцию к экранировке примесного спина электронами проводимости при понижении температуры. Асимптотическая формула (4.2.11) совпадает с асимптотикой точного решения, (см. работу [104]). Отметим, что формально параметром теории возмущений в данном случае является  $\frac{1}{\ln(T/T_k)} \ll 1$ , поэтому использованное рассмотрение справедливо при температурах  $T > eT_k$ . Из точного решения следует, однако, что при  $T \approx T_k$

эффективный магнитный момент составляет примерно одну треть от полного магнитного момента. Это обстоятельство будет использовано при анализе уравнений среднего поля с учетом Кондо - перенормировок в следующем параграфе.

Зная магнитный момент, можно вычислить другую одноузельную характеристику - эффективную статическую спиновую восприимчивость  $\chi_0(T)$ .

$$\chi_0(T) = \frac{S(S+1)(g\mu_B)^2}{3T} \left(1 - \frac{1}{\ln(T/T_k)} + \dots\right) \quad (4.2.12)$$

На самом деле, можно было строить теорию возмущений не для вычисления магнитного момента, а прямо для спиновой восприимчивости.

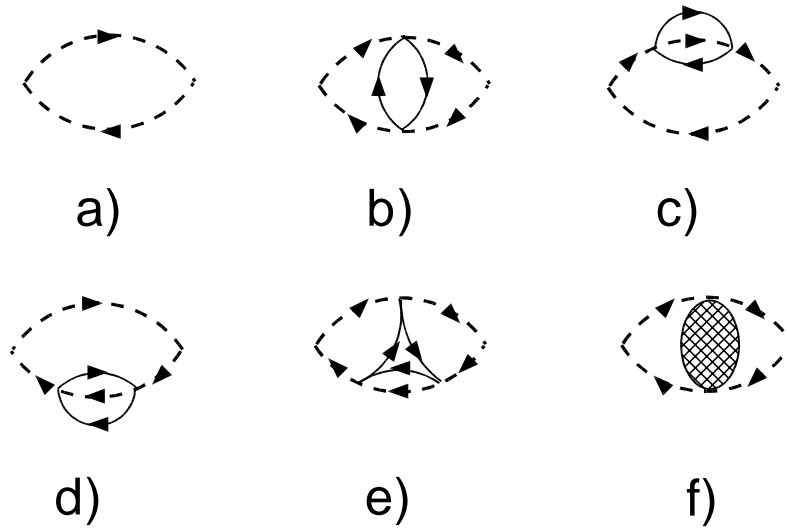


Рисунок 4.2.2

Диаграммы, отвечающие ряду теории возмущений, изображены на рисунке (4.2.2.a-e). Эффективная восприимчивость также экранируется электронами проводимости см.(4.2.12), рисунок (4.2.2.f).

Приближение непересекающихся диаграмм в Кондо - решетке для полной статической спиновой восприимчивости приводит к выражению вида [83,104]

$$\chi(\mathbf{q}, T) = \frac{\chi_0(T)}{1 + \tilde{J}_{RKKY}(\mathbf{q}, T)\chi_0(T)} \quad (4.2.13)$$

Полюс этого выражения определяет критическую температуру магнитного упорядочения. Волновой вектор  $\mathbf{Q}$ , на котором расходится восприимчивость, зависит от вида функции  $\tilde{J}_{RKKY}$ . В данном случае, косвенный обмен приводит к тенденции антиферромагнитного упорядочения спинов. При этом фактор связанный с усилением эффективного косвенного обмена за счет Кондо -

рассеяния эффективно стремится увеличить температуру магнитного упорядочения, и, таким, образом, заморозить спины, однако эффективная экранировка одноузельной восприимчивости, наоборот, мешает установлению магнитного порядка. Конкуренция этих двух процессов и определяет возможность (или невозможность) магнитного упорядочения спинов в решетке.

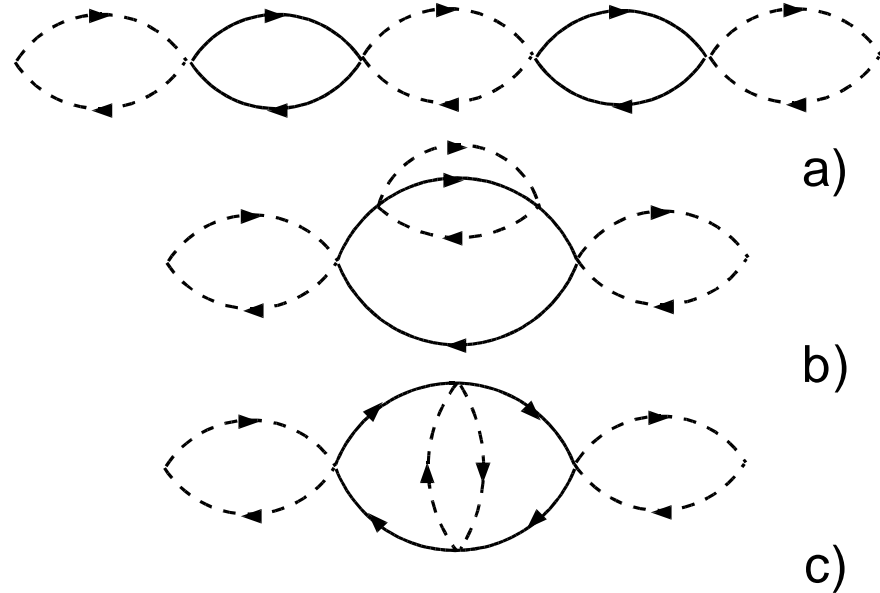


Рисунок 4.2.3

При рассмотрении состояний типа Резонирующих Валентных Связей, эффективной экранировки не возникает по причине нелокальности рассматриваемого параметра порядка. Тенденция к увеличению эффективной критической температуры, тем не менее, сохраняется. Таким образом, возможно, что при некоторых значениях параметров задачи, температура перехода в RVB состояние окажется выше температуры антиферромагнитного упорядочения спинов. Эта возможность будет рассмотрена в дальнейшем.

Вернемся к обоснованию применимости приближения непересекающихся диаграмм в нашей задаче. Диаграмма (а) второго порядка по РККУ - взаимодействию на рисунке (4.2.3) соответствует данному приближению. Вершины отвечают различным узлам решетки спинов. Ряд теории возмущения строится при помощи ужирнения узельных вершин, а также замены одноузельной восприимчивости (рисунок 4.2.2.а) на эффективную вершину, вычисленную в главном логарифмическом приближении (рисунок 4.2.2.ф). Вклад в восприимчивость, отвечающий диаграмме, изображенной на рисунке (4.2.3.б), и определяющий ужирнение электронных линий мал по параметру  $T/\varepsilon_F$ , так как интеграл от двух электронных функций Грина определяется масштабом энергий порядка энергии Ферми.

Рассмотрим диаграмму рисунок (4.2.3.с). Оценка интегралов в координатном представлении, наиболее удобном в данном случае, показывает, что вклад

в восприимчивость от этой диаграммы мал по сравнению с вкладом от диаграммы (а) по параметру  $\frac{T}{\varepsilon_F} p_0 R \ll 1$ . Кроме того, волновой вектор, на котором достигается максимум выражения, отвечающего диаграмме (с) несоизмерим с антиферромагнитным вектором.

Таким образом, приближение непересекающихся диаграмм, введенное в теориях  $1/N$  разложения, оказывается корректным и в данном случае.

### 4.3. Уравнения среднего поля с учетом Кондо - перенормировок

Регулярная теория возмущений для решетки Кондо, описываемой гамильтонианом (3.3.1), может быть сформулирована только для высоких температур  $T > T_K$ , где справедливо приближение непересекающихся диаграмм [69], в котором кондо-рассеяние на каждом узле решетки может рассматриваться независимо, а само это рассеяние учитывается в логарифмическом приближении. Согласно Доньяху [108,109], это приближение приводит к конкуренции антиферромагнитного состояния, реализующегося при малых значениях эффективной константы связи  $\alpha = J_{sf}/\varepsilon_F$  и немагнитного состояния "Кондо-синглета", которое должно формироваться при больших  $\alpha$ . Мы, однако, увидим, что в критической области  $\alpha_{c0}^2 \approx \exp(-1/2\alpha_{c0})$  или иными словами  $T_N \approx T_K$ , где  $T_{N,K}$  - соответственно, температуры Нееля и Кондо, реализуется третья возможность – возникает спиновая жидкость типа резонирующей валентной связи (RVB) (см.[73-77]) с характерной энергией  $T^* > T_K$ . При этом кондо-рассеяние замораживается при  $T \sim T^*$ , но остается возможность для заметных антиферромагнитных корреляций [110,111].

Воспользуемся стандартной техникой температурных функций Грина, введя представление псевдофермионов Абрикосова для спиновых операторов, и применим при  $T > T_K$  приближение непересекающихся диаграмм (NSA), в котором одноузельные кондовские процессы можно рассмотреть независимо от наличия других узлов. В этом приближении межузельное взаимодействие описывается косвенным РККИ обменом (см. рис.4.3.1а, где сплошными и пунктирными линиями обозначены электронные и псевдофермионные пропагаторы, соответственно). Влияние многократного кондо-рассеяния проявляется в перенормировке одноузельных вершинных частей, усиление которых в логарифмическом приближении имеет известный вид [87] (4.1.1) При вычислении межузельного косвенного обмена мы ограничились в поляризационном операторе учетом только ближайших соседей,  $\Pi_{\mathbf{q}}(i\omega_n) = \Pi_R(i\omega_n)S^{(1)}(\mathbf{q})$ ,



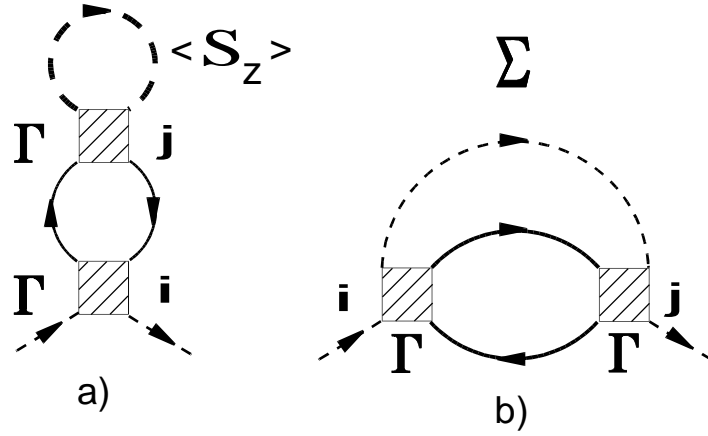


Рисунок 4.3.1

где  $S^{(1)}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{l}} \exp i\mathbf{q}(\mathbf{j}-\mathbf{l})$  - структурный фактор,  $R = |\mathbf{j}-\mathbf{l}|$ . В этом приближении фурье компонента статического РККИ взаимодействия  $\tilde{J}(R, T)$   $S^{(1)}(\mathbf{q})$  выражается через эффективную константу формула (4.1.3), где электронная функция Грина в координатном представлении на мнимых частотах берется в асимптотической форме [37] (3.4.5)

Подставляя (3.4.5) в (4.1.3), находим

$$\tilde{J}(R, T) \approx (p_F R) \Phi(p_F R) \alpha^2 \int_T^{\varepsilon_F} d\varepsilon \frac{\exp(-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F} p_F R)}{\left[1 + 2\alpha \ln \frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}\right]^2} \quad (4.3.1)$$

Здесь  $\Phi(x)$  осциллирующая функция РККИ. Энергетическая зависимость одноузельных вершинных частей  $\Gamma(\varepsilon)$  приводит к резкому изменению температурной зависимости РККИ взаимодействия при  $T \ll \varepsilon_F$ . Вместо практически не зависящего от температуры множителя  $\exp\left(-\frac{T}{\varepsilon_F} p_F R\right) \approx 1$  в окрестности температуры Кондо появляется логарифмическое усиление вида  $\ln^{-n}(T/T_K)$ . Асимптотические оценки и численные расчеты выражения (4.3.2) показывают, что показатель  $n \approx 1$ . Усиление РККУ взаимодействия, связанное с логарифмической Кондо -перенормировкой одноузельной вершины (формула (4.1.1)) может быть записано в виде интеграла

$$f(p_F R, \alpha, T/\varepsilon_F) = \int_{T/\varepsilon_F}^{\infty} \frac{\exp(-p_F R x) dx}{(1 - 2\alpha \ln(x))^2} \quad (4.3.2)$$

температурная зависимость которого определяется как параметром Дониаха  $\alpha$ , так и от расстояния между Кондо-ионами  $p_F R$ . В пренебрежении логарифмической перенормировкой одноузельных вершин (4.3.3) и при температурах много меньше  $\varepsilon_F$  интеграл равен  $1/(p_F R)$ , что приводит к стандартному виду РККУ взаимодействия (см. 3.4.11).

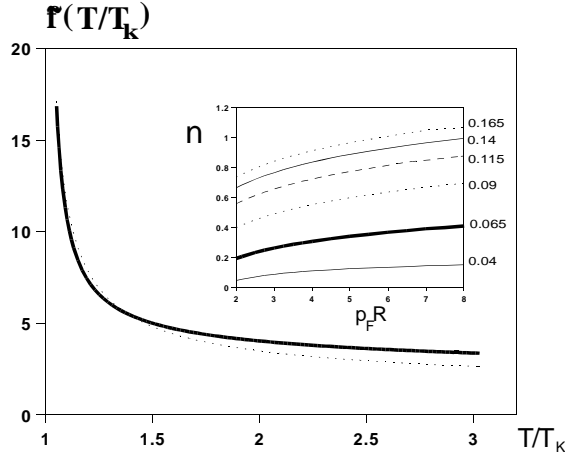


Рисунок 4.3.2

Однако в случае учета Кондо-перенормировки (4.1.1) в интересующем нас интервале температур  $[T_K, 3T_K]$  функцию можно представить в следующем приближенном виде

$$f_{app}(p_F R, \alpha, T/\varepsilon_F) \approx \frac{1}{p_F R} \frac{1}{(1 - 2\alpha \ln(T/\varepsilon_F))^{n(p_F R, \alpha)}} \quad (4.3.3)$$

где показатель  $n = n(p_F R, \alpha)$  не зависит от температуры, а является функцией параметра Дониаха и расстояния. Таким образом, связанное с логарифмической перенормировкой температурное усиление РККУ взаимодействия определяется функцией

$$\tilde{f}(p_F R, \alpha, T/\varepsilon_F) = f(p_F R, \alpha, T/\varepsilon_F) p_F R \quad (4.3.4)$$

которая может быть представлена в приближенном виде

$$\tilde{f}_{app}(p_F R, \alpha, T/\varepsilon_F) \approx \frac{1}{(1 - 2\alpha \ln(T/\varepsilon_F))^{n(p_F R, \alpha)}} \quad (4.3.5)$$

На рисунке 4.3.2. представлены графики точного значения интеграла  $\tilde{f}(p_F R = 5.0, \alpha = 0.09, T)$  (сплошная линия) и приближенной функции  $\tilde{f}_{app}(p_F R = 5.0, \alpha = 0.09, T)$  (прерывистая линия) в интервале температур  $T_K < T < 3T_K$ . Значения показателя  $n = n(p_F R, \alpha)$  приближенной функции в зависимости от параметра  $p_F R$  в интервале значений  $2 < p_F R < 8$  для ряда значений  $\alpha$  в диапазоне  $0.04 < \alpha < 0.165$  представлены на врезке. Показатель определялся методом среднеквадратичной подгонки на интервале  $1.2T_K < T < 3T_K$ . Значения параметров, для которых определены показатели приближенной функции, были выбраны, чтобы включить всю физически значимую область

параметров. Диапазон значений параметра Дониаха  $\alpha$  определялся из соображений чтобы предполагаемая температура RVB  $T_{RVB}$  (которая предполагалась порядка  $\approx 2T_K$ ) не превышала 100К (при  $\varepsilon_F = 1eV$ ).

Вернемся к анализу возможности подавления антиферромагнитного упорядочения спинов. В псевдофермионном представлении Абрикосова взаимодействие в спиновой подсистеме описывается эффективной четырехфермионной вершиной (рис.3.4.1). Возможные коррелированные состояния этой подсистемы могут быть описаны массовыми операторами, изображенными на рис. 4.3.1.a и b (ср.[97,90]). Диаграмме рис.4.3.1.a, в которой псевдофермионные линии замкнуты на одном узле отвечает соизмеримый магнитный порядок с антиферромагнитным вектором  $\mathbf{Q}$  таким, что  $\mathbf{Q}\mathbf{R}_{ij} = \pi$ . Параметром порядка антиферромагнитной фазы является неелевское молекулярное поле  $B_N(T) = \lambda_1 \tilde{J}(R, T) \langle S_z \rangle$ , где средний спин узла стандартным образом выражается через среднее от псевдофермионных операторов  $\langle S_z \rangle = \frac{1}{2} \langle f_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} - f_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} \rangle$  (замкнутая петля на диаграмме рис.4.3.1a). Здесь  $\lambda_1$  – численный множитель, определяемый геометрией решетки. В рамках NCA кондовские процессы приводят к зависящей от температуры экранировке среднего спина  $\langle S_z \rangle$  [90] на каждом узле решетки, жирная линия  $\langle S_z \rangle$  рис.4.3.1.a. Результатом точного решения одноузельной задачи Кондо [104,105] является монотонно убывающая с понижением температуры функция  $K(T)$ , описывающая процессы экранировки спина (см. предыдущий параграф этой главы) и имеющая при температуре Кондо конечное значение [ $K(T_K) \approx 0.37$ ]. Само согласованное уравнение для температуры перехода в антиферромагнитное состояние отличается от обычного уравнения для параметра порядка наличием экранирующей поправки  $K(T)$

$$\langle S_z(T_N) \rangle = \frac{1}{2} K(T_N) \tanh \frac{B_N(T_N)}{2T_N}. \quad (4.3.6)$$

Здесь  $T_N$  определяется, как температура, при которой появляется нетривиальное решение уравнение для  $\langle S_z \rangle$ .

Резонирующие валентные связи (RVB) являются альтернативной возможностью возникновения коррелированного состояния спиновой подсистемы, а именно, состояния спиновой жидкости. В этой фазе спины соседних f-электронов попарно связываются в синглетные состояния, характеризующиеся в приближении среднего поля отличным от нуля значением "параметра порядка"  $\Delta_{RVB}$  (см. Главу 3, а также, напр., [73-77, 112-114]). Отличное от нуля "аномальное" среднее соответствует замыканию псевдофермионных линий разных узлов на рис.4.3.1.b. Определенный таким образом параметр порядка описывает однородную спиновую жидкость.

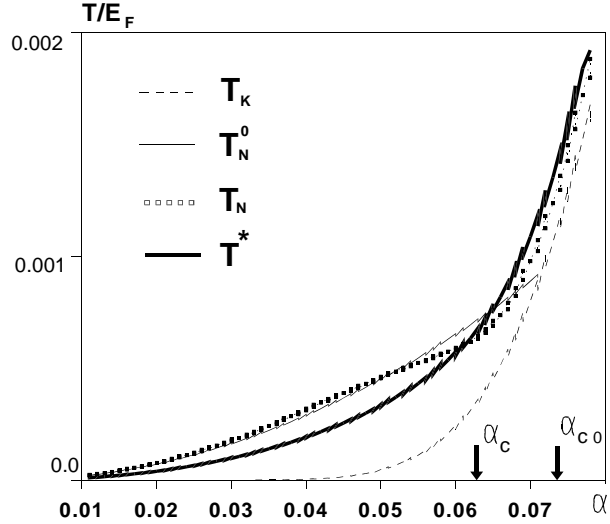


Рисунок 4.3.3

На рисунке 4.3.3 представлена модифицированная диаграмма Доньяха для конкурирующих фаз Нееля и RVB при значениях параметров  $z = 6$ ,  $\lambda_1/\lambda_2 = 2.1$ ,  $p_F R = 2.88$ . Точкам  $\alpha_{c0}$  и  $\alpha_c$  отвечают критические точки, в которых на традиционной и модифицированной диаграмме Доньяха исчезает антиферромагнитное решение.

В приближении ближайших соседей RVB-состоянию отвечает фермиевский спектр элементарных возбуждений с законом дисперсии  $u(k) \sim \Delta_{RVB} \alpha^2 \varepsilon_F S^{(1)}(\mathbf{k})$ . В общем случае величина молекулярного поля определяется выражением  $B_{RVB}(T) = \sum_m \tilde{J}^{(m)}(R_m, T) \Delta_{RVB}^{(m)} S^{(m)}(\mathbf{k})$  где суммирование идет по координационным сферам ( $m$ ), для которых косвенный обмен имеет антиферромагнитный знак [83]. Диаграмма рис.4.3.1.b дает самосогласованное уравнение для температуры перехода системы в состояние спиновой жидкости

$$\Delta_{RVB}(T^*) = (zN)^{-1} \sum_{\mathbf{k}} S^{(1)}(\mathbf{k}) \tanh \frac{B_{RVB}(T^*)}{2T^*} \quad (4.3.7)$$

(ср. [73-77]). Здесь  $T^*$  определяется, как температура, при которой появляется нетривиальное решение уравнение для  $\Delta_{RVB}$  с  $m = 1$  и координационным числом  $z$ .

Вычисляя молекулярные поля  $B_N(T)$  и  $B_{RVB}(T)$  с помощью (4.3.6) и (4.3.7), находим

$$\begin{aligned} B_N(T) &\simeq B_N^0(T) K(T) \ln^{-n}(T/T_K), \\ B_{RVB}(T) &\simeq B_{RVB}^0(T) \ln^{-n}(T/T_K). \end{aligned}$$

(индекс (0) отвечает чисто гайзенберговскому взаимодействию  $J_{ij}$  без кондоперенормировок). Сравнивая эти выражения, мы видим, что логарифмиче-

ское усиление обмена вследствие кондо-рассеяния благоприятствует возникновению обеих фаз, но экранирование спина ( $K(T)$ ) влияет только на  $T_N$ , ослабляя тенденцию к антиферромагнитному спариванию.

В результате фазовая диаграмма Доньяха ( $T_N^0, T_K$  vs  $\alpha$ ) [108] сильно модифицируется в критической области  $\alpha \sim \alpha_c$  и превращается в диаграмму ( $T_N, T^*$  vs  $\alpha$ ) с обширной областью существования RVB-фазы. Вид этой диаграммы зависит от геометрии решетки, формы ферми-поверхности и других факторов. Мы рассчитали температуры перехода для сферической и цилиндрической ферми-поверхности с функциями РККИ вида  $\Phi(x) \approx \pi x^{-3} \cos 2x$  и  $\Phi(x) \approx -2x^{-2} \sin 2x$ , соответственно (см. Главу 3), и нашли, что область существования RVB-фазы шире в последнем случае, который близок к реальной ситуации в тяжелофермионном соединении  $\text{CeRu}_2\text{Si}_2$  [67,68]. Результат расчета для цилиндрической поверхности Ферми приведен на рис.4.3.3. При этом для молекулярного поля  $B_{RVB}$  использовалось приближение  $B_{RVB}(T) = \lambda_2 \tilde{J}^{(1)}(R, T) \Delta_{RVB}^{(1)} S^{(1)}(\mathbf{k})$  где  $\lambda_2$  – геометрический фактор. В трехмерных гайзенберговских решетках, как правило,  $\lambda_2 < \lambda_1$ , и RVB-фаза не реализуется, но влияние кондо-рассеяния приводит к появлению фазы спиновой жидкости вместо магнитной фазы для  $\alpha > \alpha_c$ .

Критическая область характеризуется иерархией температур  $T^* > T_N > T_K$ . Это означает, во-первых, что спины, участвующие в RVB-парах, в существенной степени заэкранированы кондо-взаимодействием, а во-вторых, что нейтральная спиновая жидкость близка к антиферромагнитной неустойчивости. С другой стороны, кондо-рассеяние "замораживается" при  $T \approx T^* > T_K$ , так что одноузельные кондо-синглеты не образуются, и соответствующие аномальные средние  $\langle c_i^+ f_i \rangle$ , вводимые в теориях среднего поля [66] с гамильтонианом (3.3.1), в действительности равны нулю.  $T_K$  более не является точкой сингулярности, и мы можем перейти в область низких температур  $T < T_K$  и рассмотреть задачу о двухкомпонентной ферми-жидкости, в которой медленные электроны с  $\varepsilon < T_K$  взаимодействуют с нейтральными спин-фермионами, спектр которых характеризуется энергией  $T^*$ . Константу этого взаимодействия можно оценить, как  $\tilde{J}(T^*)$ . Именно такая картина предлагалась в [61-65] для описания низкотемпературных свойств систем с тяжелыми фермионами (см. также многочисленные работы [115-130]).

#### 4.4. Роль эффектов запаздывания. Собственно - энергетическая часть

Рассмотрим свойства собственно- энергетической части спин - фермионов, изображенной на рисунке 4.4.1. При этом будем считать зону спинов наполовину заполненной, спектр квазичастиц  $\Delta_{\mathbf{p}} \sim \Delta_0 \varphi_{\mathbf{p}}$  (для  $\Delta$  и  $\varphi$  сохраня-

ются обозначения, использованные в предыдущей главе,  $J_{RKKY}$  - константа эффективного гайзенберговского взаимодействия), будем также отсчитывать химический потенциал спинов от середины зоны, используя выражение для спиновой функции Грина (3.3.20).

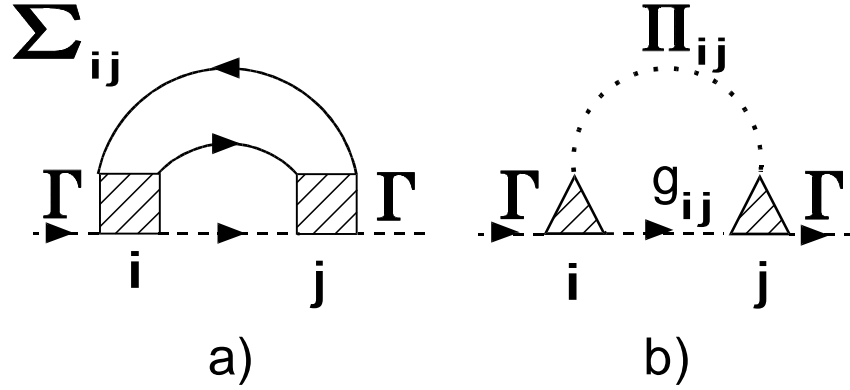


Рисунок 4.4.1

Аналитическое выражение, отвечающее диаграмме, имеет следующий вид:

$$\Sigma(\mathbf{q}, \varepsilon_m) = -\left(\frac{J}{n_0}\right)^2 \kappa T^2 \sum_{\varepsilon_m, k} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \mathcal{G}(\mathbf{p}_1, \varepsilon_k) G(\mathbf{p}_2, \varepsilon_m) G(\mathbf{p}_2 + \mathbf{q} - \mathbf{p}_1, \varepsilon_m + \varepsilon_n - \varepsilon_k) \quad (4.4.1)$$

где  $\kappa = 2S(S + 1)$  - численный множитель, возникающий при вычислении шпура с матрицами Паули. Как видно из рисунка (4.4.1.b), рассеяние спина на  $d$ -электронах эффективно сводится к рассеянию на электрон - дырочной паре. При этом поляризационный оператор  $d$ -электронов играет роль эффективного бозонного пропагатора (рисунок 4.4.1.b).

$$\Pi(\mathbf{p}, \varepsilon_m) = T \sum_{\varepsilon_n} \sum_{\mathbf{p}_1} G(\mathbf{p}_1, \varepsilon_n) G(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}, \varepsilon_n - \varepsilon_m) \quad (4.4.2)$$

Вычисляя сумму по частотам стандартным способом, получим хорошо - известное выражение для поляризационного оператора:

$$\Pi(\mathbf{p}, \varepsilon_m) = \sum_{\mathbf{p}_1} n_{\mathbf{p}_1} (1 - n_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}}) \frac{2(\varepsilon_{\mathbf{p}_1} - \varepsilon_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}})}{(\varepsilon_{\mathbf{p}_1} - \varepsilon_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}})^2 + \varepsilon_m^2} \quad (4.4.3)$$

Воспользуемся интегральным представлением поляризационного оператора

$$\Pi(\mathbf{p}, \varepsilon_m) = - \int_0^\infty P_{\mathbf{p}}(E) \frac{2E}{\varepsilon_m^2 + E^2} dE \quad (4.4.4)$$

$$P_{\mathbf{p}}(E) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}'} (1 - n_{\mathbf{k}}) \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}') - E) \delta_{\mathbf{k} + \mathbf{p}, \mathbf{k}'} \quad (4.4.5)$$

При этом функция  $P_{\mathbf{p}}(E)$ , определяющая двухчастичную плотность состояний в низкочастотной области обладает свойством  $P(E) \sim E$ . В результате проведенных преобразований, получим выражение для собственно - энергетической части спионов (4.4.6), которое и будем исследовать.

$$\Sigma(\mathbf{q}, \varepsilon_m) = 2\kappa \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 T \sum_{\mathbf{p}_1} \int_0^\infty E P_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}}(E) \sum_{\varepsilon_k} \mathcal{G}(\mathbf{p}_1, \varepsilon_k) \frac{1}{E^2 + (\varepsilon_k - \varepsilon_m)^2} dE \quad (4.4.6)$$

Далее вычисления будут проводиться следующим образом: сначала будет вычислена сумма по дискретным мацубаровским частотам, а затем проведено интегрирование по энергии  $E$ . Не вдаваясь в детали вычислений, приведем лишь конечные выражения. Для внутренней суммы результат имеет вид:

$$\Sigma(\mathbf{q}, \varepsilon_m) = \kappa \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 T \sum_{\mathbf{p}_1} \int_0^\infty P_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}}(E) F(\mathbf{p}_1, E, \varepsilon_m) dE$$

$$F(\mathbf{p}_1, E, \varepsilon_m) = \frac{x}{E^2 - x^2} \coth \frac{E}{2T} - \frac{E}{E^2 - x^2} \tanh \frac{\Delta_{\mathbf{p}_1}}{2T} \quad (4.4.7)$$

Введено обозначение  $x = \Delta_{\mathbf{p}_1} - i\varepsilon_m$ .

Так как при интегрировании по  $E$  основной вклад в интегралы, за исключением формально расходящихся и обрезаемых на  $E \sim D \sim \varepsilon_F$ , где  $D$  - ширина зоны  $d$  - электронов вносит область энергий, существенно меньшей энергии Ферми  $E \sim J_{RKKY} \Delta_0 \ll \varepsilon_F$ , для получения оценочных соотношений для собственно - энергетической части воспользуемся свойствами спектральной функции  $P_{\mathbf{p}}(E)$ , представив ее в виде:

$$P_{\mathbf{p}}(E) = AE\varphi(\mathbf{p}) \quad E \ll \varepsilon_F \quad (4.4.8)$$

где  $A$  - некоторая постоянная, смысл которой будет выяснен ниже. Вычисляя интеграл по  $E$ , получим окончательный ответ [131]:

$$\Sigma(\mathbf{q}, \varepsilon_m) = -AS(S+1) \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 \sum_{\mathbf{p}_1} \varphi(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}) \tanh\left(\frac{\Delta(\mathbf{p}_1)}{2T}\right) +$$

$$+ AS(S+1) \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 \sum_{\mathbf{p}_1} \varphi(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}) \left( \frac{x}{2\varepsilon_F} \ln\left(\frac{\varepsilon_F}{x}\right)^2 + \frac{x}{\varepsilon_F} \left[ \ln\left(\frac{ix}{2\pi T}\right) + \frac{i\pi T}{x} - \Psi\left(\frac{ix}{2\pi T}\right) \right] \right) \quad (4.4.9)$$

Здесь  $\Psi$  - логарифмическая производная гамма-функции (дигамма - функция). Выражение (4.4.9) полностью решает задачу о виде собственно - энергетической части спионов, а также проблему аналитического продолжения  $\Sigma$  с дискретного множества точек на всю верхнюю (нижнюю) полуплоскость. Таким образом, видно, что вклад, отвечающий приближению среднего поля входит в выражение для  $\Sigma$  в виде аддитивного слагаемого. Уравнение среднего поля может быть получено в результате самосогласования выражения (4.3.9), а именно, положив  $\Sigma(\mathbf{q}, \varepsilon_m) = \Delta(\mathbf{q})$ . Поправки к приближению

среднего поля имеют "поляронную" природу и обладают дополнительной малостью  $\alpha^2 = (\rho(0)J/n_0)^2 \sim (J/\varepsilon_F)^2$ . При этом константа  $A < 0$ .

Кажущееся противоречие с тем, что поляризационный оператор для свободных электронов, определенный в форме (4.4.2) удовлетворяет условию

$$\Pi(\mathbf{p}, \varepsilon_m) < 0, \quad P_{\mathbf{p}}(E) > 0$$

объясняется тем, что необходимо учитывать тот факт, что спины занимают определенное положение в пространстве - образуют решетку. Поэтому выражение для  $\Sigma$  определяется, вообще говоря, корректно только в координатном пространстве. Переход от суммирования по узлам решетки к интегрированию по объему, таким образом, незаконен. Однако, используя процедуру перераспределения по импульсам, определенную в третьей главе, можно придать вполне определенный физический смысл полученным выражениям. В конце этого раздела мы покажем, как вычислять собственно - энергетическую часть непосредственно в узельном представлении.

Наиболее простой вид имеет выражение для собственно - энергетической части в предельном случае бездисперсионной зоны. Этот случай отвечает учету только одноузельных процессов и хорошо исследован в литературе. Приведем выражения для запаздывающей собственно - энергетической части:

$$\begin{aligned} \Sigma^R(\varepsilon) &= -2S(S+1)\alpha^2\varepsilon \ln\left(\frac{\varepsilon_F}{\varepsilon}\right), \quad T \ll \varepsilon \\ \Sigma^R(\varepsilon) &= -2S(S+1)\alpha^2 \left[ \varepsilon \ln\left(\frac{\gamma\varepsilon_F}{2\pi T}\right) + i\pi T \right] \quad T \gg \varepsilon \end{aligned} \quad (4.4.10)$$

Последнее выражение имеет простой физический смысл. В обычной ферми - жидкости квадратичный закон затухания возбуждений  $Im\Sigma \sim \tau^{-1} \sim T^2$  связан с тем, что средняя энергия квазичастиц порядка температуры и число возбуждений, определяемое размытием функции Ферми, имеет тот же порядок. В рассмотренном случае число возбуждений постоянно и определяется числом спинов, а энергия возбуждения порядка температуры. Таким образом, затухание имеет линейную температурную зависимость. Напомним, что выражения для опережающей функции Грина  $\Sigma^A$  связаны с выражениями для запаздывающей собственно - энергетической части на вещественной оси простым соотношением

$$(\Sigma^R(\varepsilon))^* = \Sigma^A(\varepsilon)$$

Перейдем теперь к вычислению собственно - энергетической части в узельном представлении.

$$\begin{aligned} \Sigma_{ij}(\varepsilon_m) &= -\kappa\left(\frac{J}{n_0}\right)^2 T \sum_n \Pi_{ij}(\varepsilon_m - \Omega_n) \mathcal{G}_{ij}(\omega_n) \\ \Pi_{ij} &= \Pi(|\mathbf{R}_{ij}|) = \Pi_R, \quad \Sigma_{ij} = \Sigma(|\mathbf{R}_{ij}|) = \Sigma_R \end{aligned} \quad (4.4.11)$$



или, учитывая взаимодействие только ближайших соседей,

$$\Sigma(\mathbf{q}, \varepsilon_m) = -\kappa \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 T \sum_n \sum_{\mathbf{p}} \varphi(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \Pi_R(\varepsilon_m - \Omega_n) \mathcal{G}(\mathbf{p}, \Omega_n) \quad (4.4.12)$$

Воспользуемся, далее, асимптотической формулой для поляризационного оператора, полученной в главе 3 [132].

$$\begin{aligned} \Pi_R(\varepsilon_m) &\sim C(R) \exp\left(-\frac{|\varepsilon_m|}{v} R\right) \\ C(R) = \Pi_R(0) &= \begin{cases} T \left(\frac{m}{2\pi R}\right)^2 \frac{\cos(2p_0 R)}{\sinh\left(\frac{2\pi T R}{v}\right)}, & D = 3 \\ -T \frac{m^2}{2\pi p_0 R} \frac{\sin(2p_0 R)}{\sinh\left(\frac{2\pi T R}{v}\right)}, & D = 2 \end{cases} \end{aligned} \quad (4.4.13)$$

Таким образом, окончательно выражение для  $\Sigma$  имеет вид

$$\Sigma(\mathbf{q}, \varepsilon_m) = -2S(S+1) \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 \Pi_R(0) T \sum_n \sum_{\mathbf{p}} \varphi(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \frac{\exp(-\eta|\Omega_n - \varepsilon_m|)}{i\Omega_n - \Delta(\mathbf{p})} \quad (4.4.14)$$

где  $\eta = p_0 R / (2\varepsilon_F)$ . Сумма по дискретным частотам вычисляется с помощью перехода к интегралу по контуру, изображенному на рисунке (4.4.2).

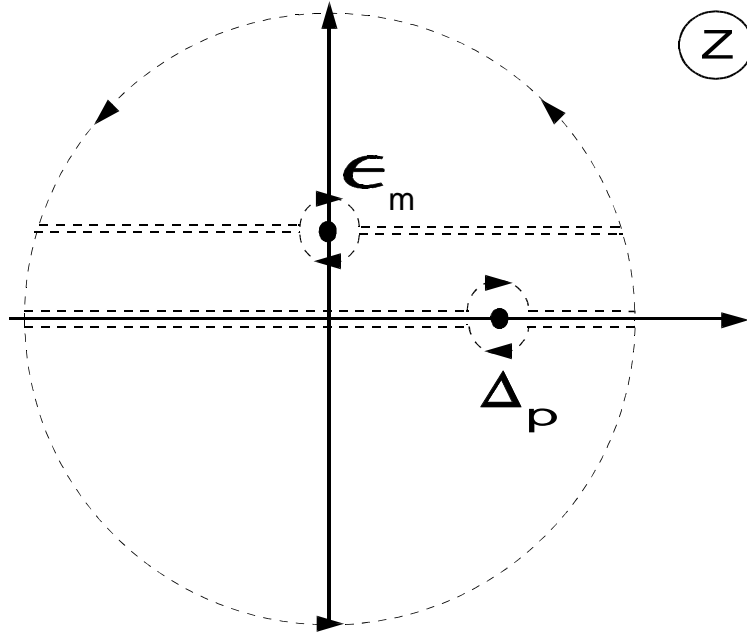


Рисунок 4.4.2

При этом полюс, лежащий на вещественной оси отвечает приближению среднего поля, а интеграл по берегам разреза определяет "поляронные" поправки к собственно - энергетической части.

$$\Sigma(\mathbf{q}, \varepsilon_m) = S(S+1) \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 \Pi_R(0) T \sum_{\mathbf{p}} \varphi(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \tanh\left(\frac{\Delta(\mathbf{p})}{2T}\right) \exp(-\eta(|\varepsilon_m| + i\Delta(\mathbf{p})))$$

$$-\frac{S(S+1)}{\pi} \left(\frac{J}{n_0}\right)^2 \Pi_R(0) T \sum_{\mathbf{p}} \varphi(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \int_{-\infty}^{+\infty} dy \frac{\Delta(\mathbf{p}) - i\varepsilon_m}{y^2 + (\varepsilon_m + i\Delta(\mathbf{p}))^2} \coth \frac{y}{2T} \sin(\eta y) \quad (4.4.15)$$

Вводя безразмерный параметр  $t = \eta T = \frac{T}{2\varepsilon_F} p_0 R \ll 1$  и воспользовавшись методом вычисления интеграла, определяющего поляронные поправки к собственно - энергетической части, изложенном в Приложении II, снова приходим к выражениям вида (4.4.9) с определенной константой  $A$ . Нетрудно проверить, что ответы полностью идентичны в главном логарифмическом приближении. Возникающее расхождение в линейном члене, малом по параметру  $t$  связано с использованием асимптотического выражения для поляризационного оператора, не учитывающего поправки, содержащие экспоненту с большим по модулю показателем а также пренебрежение неосциллирующим слагаемым, пропорциональным частоте  $\varepsilon_m$ . Не вдаваясь в детали вычисления, отметим, что учет указанных поправок приводит к коррекции выражения для  $\Sigma$  представляющей разложение по малому параметру  $t$ .

Таким образом, было показано, что учет эффектов запаздывания при переходе от уравнений среднего поля к уравнению Дайсона приводит к "поляронным" поправкам к уравнению среднего поля и не меняет качественно (и количественно) результаты, полученные в главе 3.

#### 4.5. Флуктуации калибровочных полей

Вернемся к рассмотрению эффективного действия, полученного в §1 третьей главы. Как было показано, вычисление статистической суммы методом перевала приводит к уравнениям среднего поля на параметр порядка, который определяет эффективную ширину зоны спин - фермионов. При этом, для однородного RVB состояния параметр  $\Delta$  является вещественным, что означает, что фаза параметра порядка на экстремальной траектории равна нулю (или  $\pi$ ). Попытаемся учесть флуктуации фазы параметра порядка вблизи решения, определяемого седловой точкой эффективного действия. Пользуясь связью между полями  $\Delta$  и  $\eta$  в перевале, запишем функционал эффективного действия в виде:

$$S_{eff} = - \int_0^\beta d\tau (\mathcal{L}_{MF} + \tilde{\mathcal{L}}) \quad (4.5.1)$$

где  $\mathcal{L}_{MF}$  - определяется перевальным решением, а  $\tilde{\mathcal{L}}$  имеет следующий вид:

$$\tilde{\mathcal{L}} = \sum_{j\sigma} \bar{f}_{j\sigma} (\partial_\tau - iA_0(\mathbf{r}_j)) f_{j\sigma} + \frac{J}{2} \sum_{ij\sigma} (\Delta_{ji} + \Delta_{ij}^*) \bar{f}_{i\sigma} f_{j\sigma} \quad (4.5.2)$$

Скалярный потенциал  $a_0(\mathbf{r}_j)$ , введен для учета флуктуаций поля  $\lambda_j = i\lambda_0 + iA_0(\mathbf{r}_j)$ , описывающего локальный констрэинт. Переходя к переменным мо-

дуль - фаза, определим поле  $\Delta_{ij}$  как

$$\Delta_{ij} = |\Delta_{ij}| e^{i\theta_{ij}} \quad (4.5.3)$$

Флуктуации амплитуды параметра порядка не могут изменить характера эффективного взаимодействия и по этому могут быть отброшены. Это позволяет нам подставить вместо  $|\Delta_{ij}|$  значение в перевале  $|\Delta_{ij}| = \Delta_0$  Эффективный лагранжиан задачи в новых переменных переписывается в виде:

$$\tilde{\mathcal{L}} = \bar{f}_{j\sigma} (\partial_\tau - iA_0(\mathbf{r}_i)) f_{j\sigma} + J\Delta_0 \sum_{ij\sigma} \exp(i\theta_{ij}) \bar{f}_{i\sigma} f_{j\sigma} \quad (4.5.4)$$

Отметим, что выражение (4.5.4) инвариантно относительно калибровочного преобразования

$$f_{i\sigma} \rightarrow f_{i\sigma} e^{i\phi_i(\tau)}, \quad A_0(\mathbf{r}_i) \rightarrow A_0(\mathbf{r}_i) + \frac{\partial\phi}{\partial\tau}, \quad \theta_{ij} \rightarrow \theta_{ij} + \phi_i - \phi_j \quad (4.5.5)$$

При этом поле, описывающее локальный констрэинт и, первоначально, не зависящее от мнимого времени  $\tau$ , приобретает эту зависимость в результате калибровочного преобразования. Очевидно, что выбором надлежащей калибровки, поле  $A_0$  может быть вообще устранено из действия. Таким образом, имеется полная аналогия с лагранжианами, рассматриваемыми при построении решеточных калибровочных теорий [133]:

$$\mathcal{L} = K \sum_{i,\underline{n}} \cos(\phi_i - \phi_{i+\underline{n}} + A_{i,\underline{n}}) + \frac{1}{g^2} \sum_{i,\underline{g} \neq \underline{g}'} \cos(A_{i,\underline{g}} + A_{i+\underline{g},\underline{g}'} - A_{i+\underline{g}',\underline{g}} - A_{i,\underline{g}'}) \quad (4.5.6)$$

инвариантных относительно калибровочного преобразования локальной  $U(1)$  симметрии:

$$\phi_i \rightarrow \phi_i + C_i, \quad A_{i,\underline{g}} \rightarrow A_{i,\underline{g}} + C_i - C_{i+\underline{g}} \quad (4.5.7)$$

Согласно теореме Элитцера [133,80], локальная калибровочная симметрия не может быть спонтанно нарушена и только калибровочно инвариантные средние могут иметь ненулевые значения. Одной из таких характеристик на квадратной решетке является поле:

$$\Pi = \Delta_{12}\Delta_{23}\Delta_{34}\Delta_{41} \quad (4.5.8)$$

Суммарная фаза (4.5.8) равна "магнитному потоку" через плакетт.

$$\theta_{tot} = \theta_{12} + \theta_{23} + \theta_{34} + \theta_{41} = ha_0^2 \quad (4.5.9)$$

здесь  $a_0$  - постоянная решетки,  $\mathbf{h} = \text{rot}\mathbf{A}$ . Очевидно, что фиксация фазы, возникающая в теориях среднего поля, приводит к появлению отличных от нуля средних калибровочно - неинвариантных величин. Таким образом, "вульгарные" теории среднего поля противоречат теореме Элитцера. Возможны следующие пути преодоления указанной трудности. Во-первых, по всей видимости возможно построение среднеполевых теорий для калибровочно - инвариантных параметров порядка. При этом, сложный параметр порядка типа

киральности [70,71,80] может быть переписан и в терминах спинов ( $U(1)$  - калибровочная симметрия не является внутренней симметрией гамильтониана Гайзенберга, а "привнесена" введением псевдофермионного представления спина). С другой стороны, хотя сама величина  $\Delta$  и обращается в ноль, концепция "спинов" как среднеполевых возбуждений может оказаться полезной для объяснения физических характеристик достаточно сложных систем, каковыми являются ТФ и ВТСП соединения. И третья возможность - рассмотрение моделей с "фиксацией фазы", изначально не обладающих  $U(1)$  симметрией. Механизм фиксации фазы может быть связан, например, с гибридизацией  $f$  и  $d$  электронов в периодической модели Андерсона [128-130]. При этом, правда, оказывается невозможным разделения спина и заряда и рассмотрение двухкомпонентной ферми - жидкости с нейтральной и заряженной составляющими. В любом случае, изучение возбуждений типа Резонирующих Валентных Связей представляет важную и интересную задачу физики конденсированного состояния.

Вполне естественно определить "магнитное поле" через эффективный векторный потенциал на "линиях ребрах решетки.

$$\theta_{ij} = \theta(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j, \frac{\mathbf{R}_i + \mathbf{R}_j}{2}) = \theta(\vec{\rho}, \vec{\mathbf{R}}) \quad (4.5.10)$$

В континуальном пределе

$$\theta(\vec{\rho}, \vec{\mathbf{R}}) = \vec{\rho} \frac{\partial \theta}{\partial \vec{\rho}} \Big|_0 = \vec{\rho} \vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{R}}) \quad (4.5.11)$$

Переходя к континуальному пределу в действии (4.5.2), запишем преобразованное действие в виде:

$$S_{eff} = \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{x} \sum_\sigma \bar{f}_{\mathbf{x}\sigma} \left( -\partial_\tau - \frac{(\mathbf{p} + \mathbf{A}(\mathbf{x}))^2}{2m} + iA_0(\mathbf{x}) \right) f_{\mathbf{x}\sigma} \quad (4.5.12)$$

Эффективная масса спин-фермионов определяется эффективной шириной зоны

$$\frac{1}{2m} = J\Delta_0 a^2 \quad (4.5.13)$$

Таким образом, в континуальном пределе гамильтониан Гайзенберга может быть приведен к задаче о взаимодействии свободных фермионов с калибровочным полем [134,135]. При этом, формально, локальный констринт, возникающий за счет выбора псевдофермионного представления спиновых операторов, учитывается точно [71]. Оказывается, учет длинноволновых флуктуаций векторного потенциала (флуктуации скалярного потенциала, описывающего констринт, являются короткодействующими и могут быть отброшены) в двумерной задаче приводит к обращению в ноль параметра порядка при конечных температурах даже в условиях фиксированной калибровки. В

трехмерной модели Гайзенберга и sf-обменной модели эта расходимость отсутствует и, кроме того, переход в RVB-фазу происходит в условиях близости к АФМ неустойчивости, так что флуктуации фазы носят существенно неоднородный характер и имеют спектральную плотность антипарамагнетного типа. Учет запаздывания в РККИ-взаимодействии приведет к "поляронным" перенормировкам  $\sim \alpha^2 \omega \ln \frac{\varepsilon_F}{T}$  и затуханию  $\sim \alpha^2 T$  спин-фермионов при  $T$ . Сами спин-фермионы, в свою очередь, существенно повлияют на низкочастотный спектр электронов [115]. Однако, можно полагать, что все эти явления не изменят существенным образом общую картину возникновения двухкомпонентной ферми-жидкости, индуцированной кондо-рассеянием, согласно которой кондо-процессы в решетке предотвращают возникновение АФМ фазы в критической области параметров  $\alpha \sim \alpha_c$  и одновременно стабилизируют состояние спиновой жидкости. При этом величина  $T^*$  играет роль универсальной температуры, шкалирующей свойства тяжелых фермионов, но сами спин-фермионы становятся хорошо определенными квазичастицами лишь при  $T < T_{coh} \ll T^*$ , когда их затухание приобретает ферми-жидкостный характер. В кроссоверной области  $T^* > T > T_{coh}$  происходит превращение локализованных спинов в нейтральные элементарные возбуждения с ферми-статистикой.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этом разделе кратко сформулируем основные результаты, полученные в диссертации.

1. Построена теория, описывающая экситонный переход в легированном узкощелевом полупроводнике. Предсказана возможность возникновения экситонной фазы при ненулевом легировании за счет взаимодействия экситонов с электронами. Найдены условия существования экситонного конденсата в двух- и в трехмерных системах.

2. Из первых принципов вычислена амплитуда рассеяния экситонов на электронах в пределе малой плотности экситонов. Построен функционал эффективного действия, описывающий электронную жидкость, взаимодействующую с экситонной подсистемой для двухзонной и трехзонной модели.

3. Вычислена диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$  среды в условиях близости к экситонному переходу. Рассмотрен нефононный механизм сверхпроводимости, связанный с возникновением электрон - электронного притяжения при наличии сильной поляризуемости среды. Проанализированы факторы, способствующие увеличению температуры сверхпроводящего перехода. Рассмотрена возможность сверхпроводимости за счет обмена зарядовыми возбуждениями (экситонами). Исследовано поведение сильно - неидеальной ферми-жидкости электронов проводимости при наличии сильных зарядовых флуктуаций.

4. Предложен механизм стабилизации спиновой жидкости нейтральных фермионов в Кондо - решетках. Показано, что одноузельное Кондо - рассеяние электронов проводимости при температурах выше температуры Кондо не только подавляет антиферромагнитный порядок, но и способствует возникновению состояний типа Резонирующих Валентных Связей. При этом нейтральная спиновая жидкость возникает в условиях близости к антиферромагнитной неустойчивости.

5. Построена теория взаимодействия электронов проводимости со спинами редкоземельных металлов в условиях близости температуры магнитного упорядочения спинов (температуры Нееля) и температуры Кондо. Получены среднеполевые уравнения с учетом Кондо - перенормировок эффективного взаимодействия и спиновой восприимчивости.

Сравнение теории и эксперимента показало, что многочисленные экспериментальные данные для тяжелофермионных систем на основе Се могут быть объяснены единым образом в рамках теории двухкомпонентной ферми - жидкости с нейтральной и зарядовой составляющими.

В заключение пользуюсь возможностью поблагодарить своих научных руководителей В.С.Бабиченко и К.А.Кикоина за руководство и помощь в работе, предложивших, на первый взгляд, очень разные задачи, имеющие, как

оказалось, много общего, а также всех участников научного семинара Ю.Кагана за многочисленные критические дискуссии.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. J.M. Baranovski, Z.Liliental - Weber, W.-F.Yan, and E.R.Weber. Evidence of Low - Temperature - Grown GaAs. Phys.Rev.Lett. 66, 3079 - 3082, 1991.
2. Ю.А.Изюмов, Н.М.Плакида, Ю.Н.Скрябин. Магнетизм в высокотемпературных сверхпроводящих соединениях. УФН 159, 621-663, 1989.
3. Л.В.Келдыш, Ю.В.Копаев. Возможная неустойчивость полуметаллического состояния относительно кулоновского взаимодействия. ФТТ, 6, 2791-2798, 1964.
4. А.Н.Козлов, Л.А.Максимов. О фазовом переходе металл-диэлектрик. Двухвалентный кристалл. ЖЭТФ, 48, 1184-1193, 1965.
5. А.Н.Козлов, Л.А.Максимов. Коллективные возбуждения в полуметалле. ЖЭТФ, 49, 1284-1292, 1965.
6. А.Н.Козлов, Л.А.Максимов. О возможности "сверхтеплопроводимости" в полупроводниках. ЖЭТФ, 50, 131-134, 1966.
7. Ю.В.Копаев. О фазовом переходе полуметалл-диэлектрик. ФТТ 8, 223-230, 1966.
8. D.Jerome, T.M.Rice, W.Kohn. Excitonic Insulator. Phys.Rev. 158, 462-475, 1967.
9. V.I.Halperin, T.M.Rice. The Excitonic State at the Semiconductor - Semimetal transition. Sol.St.Phys. 21, 115-192, 1968.
10. Л.В.Келдыш, А.Н.Козлов. Коллективные свойства экситонов в полупроводниках. ЖЭТФ, 54, 978-993, 1968.
11. Л.В.Келдыш. Когерентные состояния экситонов. В сб. Проблемы теоретической физики., 433-444, М: Наука, 1972.
12. Р.Р.Гусейнов, Л.В.Келдыш. О характере электронного фазового перехода при экситонной неустойчивости. Краткие сообщения по физике. No 7, 58-62, 1971.
13. Р.Р.Гусейнов, Л.В.Келдыш. О характере фазового перехода в условиях "экситонной" неустойчивости электронного спектра кристалла. ЖЭТФ, 63, 2255-2263, 1972.
14. А.В.Ключник, Ю.Е.Лозовик. Влияние межзонных переходов на токовые состояния в системах со спариванием электронов и дырок. ЖЭТФ, 76, 670-686, 1979.
15. Yu.E.Loikov, V.I.Yudson. Electron - hole superconductivity. Influence of structure defects. Sol.St.Comm., 21, 211 - 215, 1977.
16. J.Zittartz. Anisotropy effects in excitonic insulator. Phys.Rev.162, 752-758, 1967.
17. J.Zittartz. Transport properties of the "excitonic insulator". Electrical conductivity. Phys.Rev.165, 605-611, 1968.



18. J.Zittartz. Transport properties of the "excitonic insulator". Thermal conductivity. Phys.Rev.165, 612-617, 1968.
19. Ю.В.Копаев. К теории взаимосвязи электронных и структурных превращений и сверхпроводимости. Труды ФИАН, Том 66, 3-100, 1975.
20. K.B.Efetov. Pairing of spatially separated electrons and holes in high  $T_c$  materials. Sol.St.Comm. 76, 911-915, 1990.
21. K.B.Efetov. Electron-hole pairing and anomalous properties of layered high- $T_c$  compounds. Phys.Rev. B43, 5538-5553, 1991.
22. C.M.Varma, S.Schmitt - Rink, E.Abrahams. Charge transfer excitations and superconductivity in "ionic"metals. Sol.St.Comm. 62, 681-685, 1987.
23. P.B.Littlewood, C.M.Varma, S.Schmitt-Rink, E.Abrahams. Collective excitations in the normal state of Cu-O-based superconductors. Phys.Rev. B39, 12371-12374, 1989.
24. P.B. Littlewood, C.M. Varma, E. Abrahams. Pairing Instability of the Extended Hubbard Model for Cu-O-Based Superconductors. Phys. Rev. Lett. 63, 2602-2605, 1989.
25. C.M.Varma, P.B.Littlewood, S.Schmitt-Rink. Phenomenology of the Normal State of Cu-O High Temperature Superconductor. Phys.Rev.Lett. 63, 1996-1999, 1989.
26. Y.Bang, K.Quader, E.Abrahams, P.B.Littlewood. Pairing by dynamic charge fluctuations in the extended Hubbard model. Phys.Rev.B42, 4865-4868, 1990.
27. P.B.Littlewood. Collective modes and superconductivity in an extended Hubbard model for copper oxide superconductors. Phys.Rev.B42, 10075-10089, 1990.
28. A.E.Rukenstein, C.M.Varma. A theory of marginal Fermi-liquid. Physica C 185-189, 134-140, 1991.
29. W.Barford, M.W.Long. Strong-coupling description of high-temperature superconductors: electronic attraction from a repulsive potential. J.Phys.:Cond.Mat. 5, 199-216, 1993.
30. А.А.Горбацевич, Ю.В.Копаев. Локально неустойчивые кристаллические конфигурации и электронный механизм сверхпроводимости. Письма ЖЭТФ 51, 327-331, 1990.
31. В.Н.Попов. Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике. М: Атомиздат, 1976.
32. В.Н.Попов, В.С.Ярунин. Коллективные эффекты в квантовой статистике излучения и вещества. Издательство Ленинградского Университета. Л: 1985.
33. П.Н.Брусов, В.Н.Попов. Сверхтекучесть и коллективные свойства квантовых жидкостей. М: Наука, 1988.
34. Ф.А.Березин. Метод вторичного квантования. Москва: Наука, 1986.

35. Ф.А.Березин. Введение в алгебру и анализ с антикоммутирующими переменными. Издательство Московского Университета, М: 1983.
36. А.А.Славнов,Л.Д.Фаддеев. Введение в квантовую теорию калибровочных полей. М: Наука, 1988.
37. А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков,И.Е.Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М: Физматгиз, 1962.
38. Д.А.Киржниц. Полевые методы теории многих частиц. М: Атомиздат, 1963.
39. А.Б.Мигдал. Теория конечных Ферми-систем и свойства атомных ядер. М: Наука, 1983.
40. В.С.Бабиченко, М.Н.Киселев. Экситонная неустойчивость и сверхпроводимость. Препринт ИАЭ-5490/9, 1992.
41. V.S.Babichenko, M.N.Kiselev. Superconductivity in systems with excitonic instability. J.Mos.Phys.Soc. 2, 311-332, 1992
42. В.С.Бабиченко, М.Н.Киселев., Экситонный переход, индуцированный легированием. Письма ЖЭТФ, 57, 174-178, 1993.
43. V.S. Babichenko, M.N. Kiselev. On the Excitonic Mechanism of Superconductivity. Physica C 209, 133 - 136, 1993.
44. M.N.Kiselev. Excitonic Instability and Origin of the Mid-Gap States. Physica C 235-240, 2325-2326, 1994.
45. Л.Д.Ландау,Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М: Наука, 1974.
46. Л.Д.Ландау,Е.М.Лифшиц. Статистическая физика (Часть 1). М: Наука, 1976.
47. Е.М.Лифшиц,Л.П.Питаевский. Статистическая физика (Часть 2). Теория конденсированного состояния. М: Наука, 1978.
48. Г.Бете,Э.Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М: ГИФМЛИ, 1960.
49. В.Л.Гуревич, А.И.Ларкин, Ю.А.Фирсов. О возможности сверхпроводимости у полупроводников. ФТТ 4, 185-190, 1962.
50. В.С.Бабиченко, Ю.Каган. S-спаривание за счет антиферромагнитных флуктуаций в ВТСП. Письма ЖЭТФ 56, 305-310, 1992.
51. D.Allender, J.Bray, J.Bardeen. Model for an Exciton Mechanism of Superconductivity. Phys.Rev. B7, 1020-1029, 1973.
52. J.C.Inkson, P.W.Anderson. Comment on "Model for an Exciton Mechanism of Superconductivity". Phys.Rev. B8, 4429-4432, 1973.
53. W.Hanke and L.J.Sham. Local-field and excitonic effects in the optical spectrum of a covalent crystal. Phys.Rev. B12, 4501-4510, 1975.
54. В.М.Галицкий.Избранные труды. Исследования по теоретической физике. М: Наука, 1983.

55. Дж.Шриффер. Теория сверхпроводимости. М: Наука, 1970.
56. С.В.Вонсовский, Ю.А.Изюмов, Э.З.Курмаев. Сверхпроводимость металлов, их сплавов и соединений. М: Наука, 1977.
57. А.И.Базь, Я.Б.Зельдович, А.М.Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М: Наука, 1971.
58. Проблема высокотемпературной сверхпроводимости. Под редакцией В.Л.Гинзбурга и Д.А.Киржница. М: Наука, 1977.
59. А.А.Горбацевич, И.В.Токатлы. Сверхпроводимость в системах с низкой плотностью частиц. ЖЭТФ 103, 702-716, 1993.
60. Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников. Под редакцией Д.М.Гинзберга. М: Мир, 1990.
61. Yu.Kagan, K.A.Kikoin and N.V.Prokof'ev. Heavy fermions in the Kondo lattice as neutral quasiparticles, Physica B182, 201-208, 1992.
62. Ю.Каган, К.А.Кикоин, Н.В.Прокофьев. Перенормировка эффективной массы и эффект де Гааза-ван Альфена в системах с тяжелыми фермионами. Письма ЖЭТФ, 56, 221-226, 1992.
63. Ю.Каган, К.А.Кикоин, Н.В.Прокофьев. О природе псевдощели в энергетическом спектре  $CeNiSn$ . Письма ЖЭТФ 57, 584-591, 1993.
64. Yu.Kagan, K.A.Kikoin, N.V.Prokof'ev. On the nature of the pseudogap in the low energy spectrum of noncubic Kondo insulators. Physica B 199&200, 211-212, 1994.
65. Yu.Kagan and N.V.Prokof'ev. The tunneling current in heavy-fermion systems. J.Phys.:Cond.Mat. 5, 6189-6201, 1993.
66. P.Coleman, N.Andrei. Kondo - stabilised spin liquid and heavy fermion superconductivity. J.Phys.:Cond.Mat. 1, 4057-4080, 1989.
67. N.Grew, F.Steglich. Heavy Fermions. Handbook on the Physics and Chemistry on rare Earth. Vol.14. edited by K.A.Gschneider. Elsevier Science Publisher B.V., Amsterdam 1991.
68. H.R.Ott. Character features of heavy-electron materials. in: Progress in Low Temperature Physics. Vol. XI. ed. D.F.Brewer. Elsevier, Amsterdam 1987.
69. A.J.Millis and P.A.Lee. Large-orbital-degeneracy expansion for the lattice Anderson model. Phys.Rev. B35, 3394-3414, 1987
70. L.V.Ioffe and A.I.Larkin. Gapless fermions and gauge fields in dielectrics. Phys.Rev. B39, 8988-8999, 1989.
71. P.A.Lee and N.Nagaosa. Gauge theory of the normal state of high- $T_c$  superconductors. Phys.Rev B46, 5621-5639, 1992.
72. N.Nagaosa, P.A.Lee. Ginzburg-Landau theory of the spin - charge - separated system. Phys.Rev. B45, 966-970, 1992.
73. P.W.Anderson. Resonating valence bonds: a new kind of insulator? Mat.Res.Bull. 8, 153-160, 1973.

74. Z.Zou and P.W.Anderson. Effective Magnetic Moments of Heavy Fermions and the Wilson Ratio for Kondo Lattices. *Phys.Rev.Lett* 57, 2073-2076, 1986.
75. G.Baskaran, Z.Zou, and P.W.Anderson. The resonating valence bond state and high- $T_c$  superconductivity - a mean field theory. *Sol.St.Comm.* 63, 973-976, 1987.
76. G.Baskaran, P.W.Anderson. Gauge theory of high-temperature superconductors and strongly correlated Fermi systems. *Phys.Rev.* B37, 580-583, 1988.
77. Z.Zou, P.W.Anderson. Neutral fermions, charge-e bosons in the resonating-valence-bond state and superconductivity in  $La_2CuO_4$ -based compounds. *Phys.Rev.* B37, 627-630, 1988.
78. I.Affleck, Z.Zou, T.Hsu, P.W.Anderson.  $SU(2)$  gauge symmetry of the large-U limit of the Hubbard model. *Phys.Rev.* B 38, 745-747, 1988.
79. Ю.А.Изюмов, Ю.Н.Скрябин. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. М: Наука, 1987.
80. Ю.А.Изюмов, М.И.Канцельсон, Ю.Н.Скрябин. Магнетизм коллективизированных электронов. М: Наука, 1994.
81. Т.Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. М: Мир, 1988.
82. А.А.Абрикосов. Основы теории металлов. М: Наука, 1987.
83. Р.Уайт. Квантовая теория магнетизма. М: Мир, 1985.
84. А.З.Паташинский, В.Л.Покровский. Флуктуационная теория фазовых переходов. М: Наука, 1982.
85. А.М.Polyakov. Interaction of Goldstone particles in two dimensions. Application to ferromagnets and massive Yang - Mills fields. *Phys.Lett.* 59B, 79 -81, 1975.
86. J.Kondo. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Progr. Theor. Phys.* 32, 37 - 49, 1964.
87. А.А.Абрикосов. О рассеянии электронов в металле на магнитных примесных атомах и особенностях поведения сопротивления. *Physica* 2, 21-37, 1965.
88. H.Suhl. Paramagnetic impurities in metals at finite temperatures. *Physica* 2, 39-59, 1965.
89. H.Suhl. Exact solution of the one particle model of exchange scattering in solids. *Phys.Rev.* 141, 483-486, 1966.
90. А.А.Абрикосов and А.А.Мигдал, On the Theory of the Kondo Effect, *J.Low.Temp.Phys.* 3, 519-536, 1970.
91. M.Fowler and A.Zawadowski. Scaling and the renormalization group in the Kondo Effect. *Sol.St.Comm.* 9, 471-476, 1971.

92. A.Zawadowski and P.Fazekas. The role of many particle intermediate states in the formation of the Abricosov-Suhl resonance. Phys.Lett. 28A, 669-670, 1969.
93. A.Zawadowski and P.Fazekas. Dynamics of impurity spin above the Kondo temperature. I. Calculations of the spin propagator and the static susceptibility. Z.Phys. 226, 235-265, 1969.
94. G. Yuval and P.W. Anderson. Exact results in the Kondo problem: equivalence to a classical onedimensional Colomb gas. Phys. Rev. Lett.23, 89-92, 1969.
95. P.W.Anderson. A poor man's derivation of scaling laws for the Kondo problem. J.Phys.C: Sol.St.Phys. 3, 2436-2441, 1970.
96. S.D.Silverstein and C.B.Duke. Theory of s-d Scattering in Dilute Magnetic Alloys. I. Perturbation Theory and the Derivation of the Low Equation. Phys.Rev. 161, 456-469, 1967.
97. C.B.Duke and S.D.Silverstein. Theory of s-d Scattering in Dilute Magnetic Alloys. II. Derivation and Solution of Linear Vertex Equation. Phys.Rev. 161, 470-477, 1967.
98. И.Т.Дятлов, В.В.Судаков, К.А.Тер-Мартirosян. Асимптотическая теория рассеяния мезона на мезоне. ЖЭТФ, 32, 767-780, 1957.
99. Ю.А.Бычков, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский. Об одномерной сверхпроводимости. Письма ЖЭТФ, 2, 146-152, 1965.
100. Ю.А.Бычков, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский. О возможности явлений типа сверхпроводимости в одномерной системе. ЖЭТФ, 50, 738-758, 1966.
101. V.Roulet, J.Gavoret and P.Nozieres. Singularities in the X-Ray Absorbption and Emission of Metals. I.First-Order Parquet Calculation. Phys.Rev. 178, 1072-1083, 1969.
102. P.Nozieres, J.Cavoret and V.Roulet. Singularities in the X-Ray Absorbption and Emission of Metals. II.Self-Consistent Treatment of Divergences. Phys.Rev. 178, 1084-1096, 1969.
103. P.Nozieres and C.T.De Dominicis, Singularities in the X-Ray Absorbption and Emission of Metals. III.One-Body Theory Exact Solution. Phys.Rev. 178, 1097-1107, 1969.
104. A.M.Tsvelick and P.B.Wiegmann. Exact results in the theory of magnetic alloys. Adv.Phys. 32, 453-713, 1982.
105. N.Andrei,K.Furuya,J.B.Lowenstain, Solution of the Kondo problem. Rev.Mod.Phys. 55, 331, 1983.
106. C.M. Varma. Valence fluctuations, Heavy Fermions and Their Superconductivity. Comments Solid State Phys. 11, 221 - 243, 1985.
107. Г.Г.Халлиуллин. Спиновые флуктуации и тяжелые фермионы в Кондо - решетке. ЖЭТФ 106, 860-876, 1994.

108. S.Doniach. The Kondo Lattice and weak antiferromagnetism. *Physica B* 91, 231-234, 1977.
109. R.Jullien, J.N.Fields, and S.Doniach. Zero-temperature real-space renormalization-group method for a Kondo lattice model Hamiltonian. *Phys.Rev.* B16, 4889-4900, 1977.
110. К.А.Кикоин, М.Н.Киселев, А.С.Мищенко. О механизме стабилизации спиновой жидкости в Кондо-решетках. *Письма ЖЭТФ* 60, 583-588, 1994
111. К.А.Kikoin, М.Н.Kiselev, А.С.Mishchenko. On the Spin Origin of Heavy Fermions in Rare-Earth Intermetallides. *Physica B* 206-207, 129-131, 1995.
112. А.Ф.Барабанов, Л.А.Максимов, Г.В.Уймин. Элементарные дырочные возбуждения в  $CuO_2$  плоскости. *ЖЭТФ*, 96, 665 - , 1989.
113. А.Ф.Barabanov, Л.А.Maksimov, О.А.Starykh The disappearance of two - dimensional long range order in Heisenberg model with competing interactions. *Int.J.Mod.Phys.* B4, 2319-2333, 1990.
114. А.Ф.Barabanov, Л.А.Maksimov, Л.Е.Zhukov. Hole spectrum of adjacent  $CuO_2$  planes in the two-band model and the non-monotonic  $T_c$  dependence on the external parameters. *Physica C* 212, 355-380, 1993.
115. Г.М.Элиашберг. Тяжелые фермионы - гигантский эффект Мигдала. *Письма ЖЭТФ*, 45, 28-30, 1986.
116. С.Lacroix and М.Cyrot, Phase diagramm of the Kondo lattice. *Phys.Rev.* B20, 1969-1976, 1979.
117. L.C.Lopes, R.Jullien, А.К.Bhattacharjee, and В.Сoqblin. Theoretical study of a Kondo lattice: A reexamination. *Phys.Rev.* B26, 2640-2643, 1982.
118. М.Lavangna and М.Cyrot. Coherence effect in the two-impurity Kondo problem. *Sol.St.Comm.* 55, 555-558, 1985
119. С.Zhou and Т.К.Lee Perturbative result of two-impurity Anderson model in the Kondo limit. *JMMM* 63&64, 248-250, 1987.
120. В.А.Jones and С.М.Varma. Study of a Two Magnetic Impurities in a Fermi Gas. *Phys.Rev.Lett.* 58, 843-846, 1987.
121. В.А.Jones, С.М.Varma and J.W.Wilkins. Low-Temperature Properties of the Two-Impurity Kondo Hamiltonian. *Phys.Rev.Lett.* 61, 125-128, 1988.
122. E.Abrahams. Kondo effect, one and two Kondo impurities: implication for the lattice problem. *JMMM* 63&64, 234-238, 1987.
123. R.M.Fye and J.E.Hirsch. Quantum Monte Carlo study of the two-impurity Kondo Hamiltonian. *Phys.Rev.* B40, 4780-4796, 1989.
124. W.Loinaz, J.W.Rasul and P.Schlottmann. Perturbation theory for the two-impurity Kondo problem - RKKY-induced vanishing of the Kondo temperature. *J.Phys.:Cond.Matt.* 5, 4035-4044, 1993.
125. М.Nagashapour and S.E.Barnes. Nonuniversality in the Kondo Effect. *Phys.Rev.Lett.* 69, 3824-3826, 1992.

126. Z.Wang, X.P.Li, D.H.Lee. Spin-triplet solution in the one-dimensional symmetric Kondo lattice. *Phys.Rev.* B47, 11935-11939, 1993
127. H.Shiba,P.Fazecas. Correlated Fermi-Liquid State Formed with Overlapping Kondo Clouds. *Prog.Th.Ph.Supp.*, 101, 403-418, 1990.
128. P.Fazecas, H.Shiba. Variational theory of correlated Fermi-Liquid State in the Kondo Lattice Model. *Int.J.Mod.Phys.* 5, 289-308, 1991.
129. P.Fazecas, E.Muller-Hartmann. Magnetic and non-magnetic ground states of the Kondo lattice. *Z.Phys.B.* 85, 285-300, 1991.
130. S.Doniach, P.Fazecas. Magnetism in doped Kondo insulators. *Phil.Mag.B*, 65, 1171-1183, 1992.
131. И.С.Градштейн И.М.Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М: Наука, 1971.
132. L.R. Tagirov. RKKY indirect exchange in low - dimensional superconductors. *Sol.St.Comm.* 88, 257-261, 1993.
133. S.Elitzur. Impossibility of spontaneously breaking local symmetry. *Phys.Rev.* D12, 3978-3982, 1975.
134. M.Yu. Reizer. Effective electron - electron interaction in metals and superconductors. *Phys.Rev.* B39, 1602 - 1608, 1989.
135. M.Yu. Reizer. Relativistic effects in the electron density of states, specific heat, and the electron spectrum of normal metals. *Phys.Rev.* B40, 11571 - 11575, 1989.
136. М.А.Лаврентьев, Б.В.Шабат. Методы теории функций комплексного переменного. М: Наука, 1987.
137. Е.Титчмаш. Введение в теорию интегралов Фурье. М: ОГИЗ, 1948.

## Приложение I.

В данном приложении приведены конечные формулы для сумм по кольцевой частоте в диаграммах с двумя и тремя концами, получающихся из разложения шпура логарифма обратной функции Грина. Приняты следующие обозначения:  $\varepsilon_n = \pi(2n + 1)T$  - фермиевские частоты,  $\omega_n = 2\pi nT$  - бозевские частоты. Вычисление подобных сумм подробно описано в [37].

$$\varepsilon_1(\mathbf{p}) = -\frac{E_g}{2} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m_h}, \quad \varepsilon_2(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{E_g}{2} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e}, \quad m_e = m_h \quad (I.1)$$

$$\hat{G}_0^{-1}(p) = \begin{pmatrix} i\varepsilon_m - \varepsilon_1(\mathbf{p}) + \mu & 0 \\ 0 & i\varepsilon_m - \varepsilon_2(\mathbf{p}) + \mu \end{pmatrix} \quad (I.2)$$

$$n_e(\mathbf{p}) = n_2(\mathbf{p}) = \frac{1}{\exp(\varepsilon_2(\mathbf{p}) - \mu)/T + 1}$$

$$n_h(\mathbf{p}) = n_1(\mathbf{p}) = \frac{1}{\exp(\varepsilon_1(\mathbf{p}) - \mu)/T + 1} = 1 - \frac{1}{\exp(\varepsilon(\mathbf{p}) + \mu)/T + 1} \quad (I.3)$$

Петля с двумя внешними концами:

$$\Pi_{12}(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) = \beta^{-1} \sum_{\varepsilon_m} G_{01}(\mathbf{p} - \mathbf{k}/2, \varepsilon_m - \omega_n/2) G_{02}(\mathbf{p} + \mathbf{k}/2, \varepsilon_m + \omega_n/2) \quad (I.4)$$

$$\Pi_{12}(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega_n) = -\frac{n_e(\mathbf{p} + \frac{\mathbf{k}}{2}) - n_h(\mathbf{p} - \frac{\mathbf{k}}{2})}{i\omega_n - E_{\mathbf{p}\mathbf{k}}} \quad (I.5)$$

$$E_{\mathbf{p}\mathbf{k}} = \varepsilon_2(\mathbf{p} + \frac{\mathbf{k}}{2}) - \varepsilon_1(\mathbf{p} - \frac{\mathbf{k}}{2}) = E_g + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\mathbf{k}^2}{2M} \quad (I.6)$$

Петли с тремя внешними концами

$$\begin{aligned} \Pi_{112}(\mathbf{q}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_{n1}, \omega_{n2}) &= \beta^{-1} \sum_{\varepsilon_m} G_{01} \left( \mathbf{q} - \frac{(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1)}{2}, \varepsilon_m - \frac{(\omega_{n2} - \omega_{n1})}{2} \right) \times \\ &\times G_{01} \left( \mathbf{q} + \frac{(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1)}{2}, \varepsilon_m + \frac{(\omega_{n2} - \omega_{n1})}{2} \right) \times \\ &\times G_{02} \left( \mathbf{q} + \frac{(\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_1)}{2}, \varepsilon_m + \frac{(\omega_{n2} + \omega_{n1})}{2} \right) \end{aligned} \quad (I.7)$$

$$\Pi_{112} = \frac{n_1(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)/2) - n_2(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)/2)}{(i(\omega_m - \omega_n) + E_{212})(i\omega_m - [\varepsilon_2(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)/2) - \varepsilon_1(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)/2)])} \times \frac{n_1(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1)/2) - n_2(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)/2)}{(i(\omega_m - \omega_n) + E_{212})(i\omega_m - [\varepsilon_2(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1)/2) - \varepsilon_1(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)/2)])} \quad (I.8)$$

$$E_{212} = \varepsilon_2(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1)/2) + \varepsilon_1(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)/2) \quad (I.9)$$



$$\begin{aligned}
\Pi_{221}(\mathbf{q}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \omega_{n1}, \omega_{n2}) &= \beta^{-1} \sum_{\varepsilon_m} G_{01} \left( \mathbf{q} - \frac{(\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_1)}{2}, \varepsilon_m - \frac{(\omega_{n2} + \omega_{n1})}{2} \right) \times \\
&\quad \times G_{02} \left( \mathbf{q} + \frac{(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1)}{2}, \varepsilon_m + \frac{(\omega_{n2} - \omega_{n1})}{2} \right) \times \\
&\quad \times G_{02} \left( \mathbf{q} - \frac{(\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_1)}{2}, \varepsilon_m + \frac{(\omega_{n2} - \omega_{n1})}{2} \right) \quad (I.10)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Pi_{112} &= \frac{n_1(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)/2) - n_2(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)/2)}{(i(\omega_m - \omega_n) + E_{212})(i\omega_m - [\varepsilon_2(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)/2) - \varepsilon_1(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)/2)])} \\
&\quad - \frac{n_1(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_1)/2) - n_2(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)/2)}{(i(\omega_m - \omega_n) + E_{212})(i\omega_m - [\varepsilon_2(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1)/2) - \varepsilon_1(\mathbf{q} + (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)/2)])} \quad (I.11)
\end{aligned}$$

И, наконец, петля с четырьмя внешними концами:

$$\begin{aligned}
\Pi_{1212}(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega) &= \beta^{-1} \sum_{\varepsilon} G_{01} \left( p - \frac{(k_1 + k_2 - k_3)}{2} \right) G_{02} \left( p - \frac{(k_1 - k_2 - k_3)}{2} \right) \times \\
&\quad \times G_{01} \left( p - \frac{(k_1 - k_2 + k_3)}{2} \right) G_{02} \left( p + \frac{(k_1 - k_2 + k_3)}{2} \right) \quad (I.12)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Pi_{1212}(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \omega) &= \frac{\frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\varepsilon(p - \frac{(k_1 + k_2 - k_3)}{2})}{2T}\right)}{(i(\omega_2 - \omega_3) + \varepsilon(p - \frac{(k_1 - k_2 + k_3)}{2})) - \varepsilon(p + \frac{(k_1 - k_2 + k_3)}{2})} \times \\
&\quad \times \frac{1}{(i\omega_2 + \varepsilon(p - \frac{(k_1 + k_2 - k_3)}{2})) - \varepsilon(p + \frac{(k_1 - k_2 - k_3)}{2})} \times \\
&\quad \times \frac{1}{(i\omega_1 + \varepsilon(p - \frac{(k_1 + k_2 - k_3)}{2})) - \varepsilon(p + \frac{(k_1 - k_2 + k_3)}{2})} - \\
&\quad - \frac{\frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\varepsilon(p - \frac{(k_1 - k_2 - k_3)}{2})}{2T}\right)}{(i\omega_2 - \varepsilon(p - \frac{(k_1 - k_2 - k_3)}{2})) - \varepsilon(p - \frac{(k_1 + k_2 - k_3)}{2})} \times \\
&\quad \times \frac{1}{(i\omega_3 - \varepsilon(p - \frac{(k_1 + k_2 - k_3)}{2})) - \varepsilon(p + \frac{(k_1 - k_2 + k_3)}{2})} \times \\
&\quad \times \frac{1}{(i(\omega_1 - \omega_3) + \varepsilon(p - \frac{(k_1 + k_2 - k_3)}{2})) - \varepsilon(p + \frac{(k_1 - k_2 + k_3)}{2})} + \\
&\quad + \frac{\frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\varepsilon(p - \frac{(k_1 - k_2 - k_3)}{2})}{2T}\right)}{(i(\omega_3 - \omega_2) - \varepsilon(p - \frac{(k_1 - k_2 + k_3)}{2})) + \varepsilon(p + \frac{(k_1 - k_2 + k_3)}{2})} \times
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \frac{1}{(i\omega_3 - \varepsilon(p - \frac{k_1 - k_2 - k_3}{2}) - \varepsilon(p - \frac{k_1 - k_2 + k_3}{2}))} \times \\
& \times \frac{1}{(i(\omega_1 - \omega_2 + \omega_3) - \varepsilon(p - \frac{k_1 - k_2 + k_3}{2}) - \varepsilon(p + \frac{k_1 - k_2 + k_3}{2}))} \times \\
& \quad - \frac{\frac{1}{2} \tanh(\frac{\varepsilon(p + \frac{k_1 - k_2 + k_3}{2})}{2T})}{(i\omega_1 - \varepsilon(p + \frac{k_1 - k_2 + k_3}{2}) - \varepsilon(p - \frac{k_1 + k_2 - k_3}{2}))} \times \\
& \times \frac{1}{(i(\omega_1 - \omega_3) - \varepsilon(p + \frac{k_1 - k_2 + k_3}{2}) + \varepsilon(p - \frac{k_1 - k_2 - k_3}{2}))} \times \\
& \times \frac{1}{(i(\omega_2 - \omega_3 + \omega_1) + \varepsilon(p - \frac{k_1 - k_2 + k_3}{2}) + \varepsilon(p + \frac{k_1 - k_2 + k_3}{2}))} \quad (.I.12)
\end{aligned}$$

Полученные формулы полностью решают задачу о различных амплитудах рассеяния при наличии легирования. В заключение приведем формулы, описывающие поправку к энергии связи экситона за счет легирования (аналог сдвига Бурштейна)

$$\delta E = E_c(p_F) - E_c^0 = -\frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int d\mathbf{p} \int d\mathbf{k} \Psi_0(\mathbf{p}) V(\mathbf{p} - \mathbf{k}) n_e(\mathbf{p}) \Psi_0(\mathbf{k}) \quad (.I.13)$$

$$E_c(p_F) = \begin{cases} E_c^0 - \frac{p_F^2}{m} & , \quad d = 2 \\ E_c^0 - \frac{32\varepsilon_F}{3\pi} (p_F a_B) & , \quad d = 3 \end{cases} \quad (.I.14)$$

Таким образом, поправки к энергии связи экситона линейно зависят от плотности вне зависимости от размерности системы.

## Приложение II

В данном приложении вычислим интегралы следующего вида:

$$I_{2m+1}(t) = \int_0^\infty \frac{\sin ty}{y^2 + (2m+1)^2} \coth \frac{\pi y}{2} dy \quad (.II.1)$$

$$J_{2m+1}(t) = \int_0^\infty \frac{\sin ty}{y^2 + (2m+1)^2} \tanh \frac{\pi y}{2} dy \quad (.II.1)$$

и их аналитическое продолжение с дискретного множества точек  $z = i(2m+1)$  на всю верхнюю (нижнюю) полуплоскость. В связи с тем, что интегралы вида (П.И.1) и (П.И.2) не описаны даже в специальной справочной литературе, изложим также идею вычисления.

Рассмотрим сначала случай (П.И.1). Воспользуемся представлением гиперболического котангенса в виде интеграла Лежандра [136,137].

$$\coth \frac{\pi y}{2} = \frac{2}{\pi y} + \frac{4}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sin xy}{e^{2x} - 1} dx \quad (.II.3)$$

Искомый интеграл разбивается на сумму двух интегралов:

$$\begin{aligned} I_n(t) &= L_n(t) + M_n(t), \quad n = 2m + 1 \\ L_n(t) &= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{dy}{y} \frac{\sin ty}{y^2 + n^2} \\ M_n(t) &= \frac{4}{\pi} \int_0^\infty dy \int_0^\infty dx \frac{\sin ty \sin xy}{y^2 + n^2} \frac{1}{e^{2x} - 1} \end{aligned} \quad (.II.4)$$

Первый интеграл легко вычисляется путем осуществления перехода к контурному интегралу (рис. П.1)

$$L_n(t) = \frac{1}{n^2} (1 - e^{-nt}) \quad (.II.5)$$

Во втором интеграле изменим порядок интегрирования. После несложных, но достаточно громоздких выкладок получим ответ:

$$\begin{aligned} M_{2m+1}(t) &= \frac{e^{-(2m+1)t}}{2m+1} \sum_{k=0}^m \sum_{n=0}^{m-k-1} (-1)^k \frac{(2m-k)!}{k!(m-k)!} 2^{m-k} \times \\ &\times \left( \frac{1 - e^{-t}}{(m-k)!} + \frac{2(m-k)!}{n!(2(m-k)-n)!} \frac{e^{-t} [1 - e^{-2(m-k-n)t}]}{4(m-k-n)^2 - 1} \right) + \\ &+ \frac{\sinh(2m+1)t}{2m+1} \left( \ln \coth \frac{t}{2} - 2 \sum_{k=0}^m \frac{e^{-(2k+1)t}}{2k+1} \right) \end{aligned} \quad (.II.6)$$

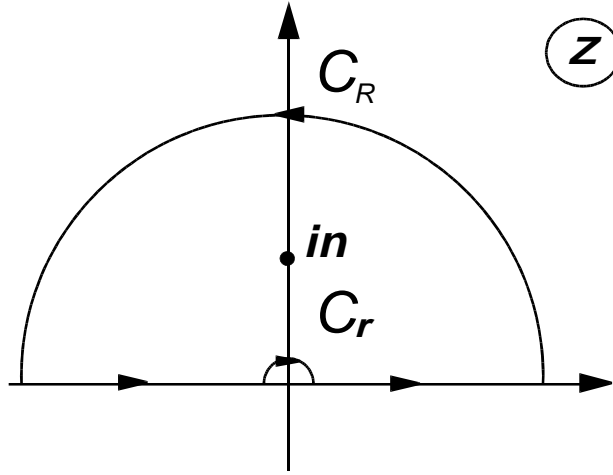


Рисунок П.П.1

Для вычисления интеграла (П.П.2) воспользуемся представлением гиперболического тангенса в виде [136]

$$\tanh \frac{\pi y}{2} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sin xy}{\sinh x} dx \quad (.II.7)$$

Меняя порядок интегрирования аналогично предыдущему случаю, получим

$$\begin{aligned} J_{2m+1}(t) = & -\frac{\sinh(2m+1)t}{2m+1} \left( \ln(2 \sinh t) - t + \sum_{k=1}^m \frac{e^{-2kt}}{k} \right) + \\ & + \frac{e^{-(2m+1)t}}{2m+1} \sum_{k=0}^m \sum_{n=0}^{m-k-1} (-1)^k \frac{(2m-k)!}{k!(m-k)!} 2^{m-k} \times \\ & \times \left( \frac{t}{(m-k)!} + \frac{(m-k)!}{n!(2(m-k)-n)!} \frac{\sinh 2(m-k-n)t}{m-k-n} \right) \end{aligned} \quad (.II.8)$$

В дальнейшем нас будет интересовать интеграл вида

$$\begin{aligned} I(t, z) = \int_0^{\infty} \frac{\sin ty}{y^2 + z^2} \coth \frac{\pi y}{2} dy, \\ \operatorname{Re} z > 0, \quad \operatorname{Re} t > 0, \quad \operatorname{Im} t = 0 \end{aligned} \quad (.II.9)$$

Действуя аналогично и представляя

$$I(t, z) = L(t, z) + M(t, z)$$

запишем ответ в виде

$$\begin{aligned} I(t, z) = & \frac{1}{z^2} (1 - e^{-tz}) + \\ & + \frac{e^{-tz}}{2z} \left[ B(1 - e^{-2t}, 0, 1 - \frac{z}{2}) - B(1 - e^{-2t}, 0, 1 + \frac{z}{2}) \right] + \end{aligned}$$

$$+\frac{\sinh tz}{z}B(e^{-2t}, 1 + \frac{z}{2}, 0) \quad (.II.10)$$

Здесь  $B(x, p, q)$  - неполная  $B$  - функция,

$$B(x, p, q) = \int_0^x dy y^{p-1} (1-y)^{q-1}$$

При выполнении условий  $t \ll 1$ ,  $t|z| \ll 1$  можно разложить выражение (П.П.10) по малым параметрам, однако проще воспользоваться формулой Гаусса [136] для логарифмической производной  $\Gamma$  - функции

$$\Psi(x) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)} = -C + \int_0^1 \frac{1-t^{x-1}}{1-t} dt \quad (.II.11)$$

обозначено  $C = \ln \gamma = 0.577$  - постоянная Эйлера.

В этом предельном случае имеем

$$I(t, z) \approx (1 - \ln \gamma)t + t \ln\left(\frac{1}{2t}\right) - \frac{t}{z} - t\Psi\left(\frac{z}{2}\right) \quad (.II.12)$$

Естественно, что аналогичные преобразования можно проделать и для интеграла  $J(t, z)$ , определенного аналогично (П.П.9), но так как эти выражения не задействованы в рассмотрении физических приложений, их приводить не будем.

Отметим, что класс вычисленных интегралов включает также в себя интегралы типа:

$$\mathcal{I}(t, z) = \int_0^\infty \frac{y \cos ty}{y^2 + z^2} \coth \frac{\pi y}{2} dy \quad (.II.13)$$

$$\mathcal{J}(t, z) = \int_0^\infty \frac{y \sin ty}{y^2 + z^2} \tanh \frac{\pi y}{2} dy \quad (.II.14)$$

Взаимосвязь интеграла (П.П.13) и интеграла (П.П.9) при  $z = 1$ , например, легко проследить, вычисляя интеграл

$$\oint f(\xi) d\xi \quad f(\xi) = \frac{e^{\pi t} e^{i\xi t}}{\xi - i\pi} \coth\left(\frac{\xi}{2}\right) \quad (.II.15)$$

по контуру, изображенному на рисунке (П.2)

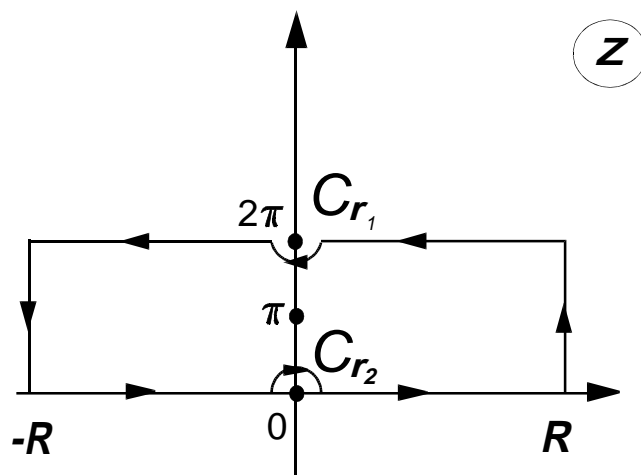


Рисунок П.И.2

После несложных вычислений получим

$$I(t, 1) = \tanh t (1 + \mathcal{I}(t, 1)) \quad (.II.16)$$

Аналогичные вычисления также могут быть проделаны для любого  $z$  и для интегралов типа (П.И.14). Полученные выражения ввиду их громоздкости мы приводить не будем.