

К ВОПРОСУ О СУЩЕСТВОВАНИИ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Н.Н.Боголюбов, В.А.Москаленко*

Предложена обобщенная теорема Вика для сверхпроводящего состояния модели Хаббарда, основанная на введении неприводимых корреляционных функций. Развита соответствующая диаграммная техника и установлено уравнение Дайсона для одночастичной функции Грина. На основе приближенной оценки корреляционных эффектов установлены основные динамические уравнения для сверхпроводящей фазы рассматриваемой модели. Определена критическая температура сверхпроводящего перехода.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

On Existence of Superconductivity in Hubbard Model

N.N.Bogolubov, V.A.Moskalenko

The generalized Vick theorem based on the introduction of irreducible correlation function is proposed for a superconductive state in the Hubbard model. The corresponding diagram technique is developed and the Dyson equation for one-particle Green function is obtained. The dynamical equations for the superconductive phase of the model under consideration are constructed with help of approximative estimations of correlation effects. The critical temperature of the superconductive phase transition in the model is determined.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

1. Введение

В настоящее время считается, что модель Хаббарда^{/1/} описывает некоторые особенности материалов, обладающих высокотемпературной сверхпроводимостью. Однако до сих пор остается

*Институт прикладной физики АН ССР Молдова, Кишинев

неясным вопросом, обладает ли эта модель сверхпроводящей фазой. Дело в том, что в ряде работ ^{2, 3/} было сделано предположение, что однозонная модель Хаббарда обладает сверхпроводящим основным состоянием в пределе больших значений кулоновского отталкивания U электронов, благодаря магнитным взаимодействиям второго порядка. Однако Бэстайд и Лакроа ^{4/} показали, что при слабом отталкивании то же взаимодействие второго порядка не приводит к сверхпроводимости. Возникает опасение, что некоторые сверхпроводящие решения могут оказаться следствием сделанных аппроксимаций.

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы предложить альтернативный вариант теории для выяснения вопроса о возможности существования ренормированного притягательного взаимодействия между электронными парами и образования сверхпроводящего состояния.

Модель Хаббарда предполагает, что в узлах решетки i с координатами R_i расположены ионы переходных металлов с незаполненными оболочками. Эти электроны сильно взаимодействуют между собой с кулоновской энергией и совершают переходы между узлами решетки с интегралом перескока $t(R_j - R_i)$. Соответствующий гамильтониан имеет вид ^{1/}:

$$H = H_0 + H_{int} \quad ,$$

$$H_0 = \sum_i H_{i0} = -\mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad , \quad (1)$$

$$H_{int} = \sum_{i \neq j} \sum_{\sigma} t(R_j - R_i) c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma} ; \quad n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} .$$

Здесь μ — химический потенциал системы, отсчитанный от уровня энергии локализованных электронов, $c_{i\sigma}^+$ ($c_{i\sigma}$) — операторы рождения (уничтожения) электрона на узле i со спином σ . Обозначим энергии следующих четырех состояний невырожденного переходного атома

$$\phi_1 = |0_{\uparrow}, 0_{\downarrow}\rangle, \quad \phi_2 = |1_{\uparrow}, 0_{\downarrow}\rangle, \quad \phi_3 = |0_{\uparrow}, 1_{\downarrow}\rangle, \quad \phi_4 = |1_{\uparrow}, 1_{\downarrow}\rangle$$

соответственно через

$$E_1^{(0)} = 0, \quad E_2^{(0)} = E_3^{(0)} = -\mu, \quad E_4^{(0)} = U - 2\mu .$$

Из-за большого значения кулоновского отталкивания U его следует учитывать в нулевом приближении, рассматривая оператор H_{int} , описывающий перескоки электронов между узлами кристаллической решетки, как возмущение.

Для выяснения возможности реализации механизма сверхпроводимости в рамках данной модели в дальнейшем будут введены квазисредние ^{5/} и соответствующие им функции Грина. Первоначально квазисредние вводятся между электронами с противоположными спинами, принадлежащими одному и тому же узлу $\langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle$ и $\langle c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}^+ \rangle$. С этой целью добавим к гамильтониану H_0 слагаемое H_0^Δ :

$$H_0^\Delta = -\frac{1}{2} \sum_{i\sigma} \Delta_{\sigma,-\sigma}^{(0)} (c_{i-\sigma} c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^+ c_{i-\sigma}^+), \quad (2)$$

$$\Delta_{\sigma,-\sigma}^{(0)} = \Delta_0 (\delta_{\sigma\uparrow} - \delta_{\sigma\downarrow}).$$

В конце вычислений величина Δ_0 устремляется к нулю, однако ренормированные квазисредние предполагаются отличными от нуля при $T < T_c$, где T_c — критическая температура сверхпроводника.

Возникающий вследствие добавления (2) нулевой гамильтониан одного узла

$$\tilde{H}_0 = E_2^{(0)} n_\uparrow + E_3^{(0)} n_\downarrow + U n_\uparrow n_\downarrow - \Delta_0 (c_\downarrow c_\uparrow + c_\uparrow^+ c_\downarrow^+) \quad (3)$$

может быть диагонализирован, если ввести каноническое u, v -преобразование для операторов Хаббарда:

$$\begin{aligned} c_\uparrow &= u (X^{12} + X^{34}) + v (X^{31} - X^{42}), \\ c_\downarrow &= u (X^{13} - X^{24}) - v (X^{21} + X^{43}), \\ c_\uparrow^+ &= u (X^{21} + X^{43}) + v (X^{13} - X^{24}), \\ c_\downarrow^+ &= u (X^{31} - X^{42}) - v (X^{12} + X^{34}); \end{aligned} \quad (4)$$

обратные преобразования имеют вид

$$X^{11} = n_\uparrow n_\downarrow + u^2 (1 - n_\uparrow - n_\downarrow) - uv (c_\uparrow c_\downarrow + c_\downarrow^+ c_\uparrow^+),$$

$$\begin{aligned}
X^{12} &= u c_{\uparrow} (1 - n_{\downarrow}) - v c_{\downarrow}^+ n_{\uparrow}, \\
X^{13} &= u (1 - n_{\uparrow}) c_{\downarrow} + v n_{\downarrow} c_{\uparrow}^+, \\
X^{14} &= -u^2 c_{\uparrow} c_{\downarrow} + v^2 c_{\downarrow}^+ c_{\uparrow}^+ + uv (c_{\downarrow}^+ c_{\downarrow} - c_{\uparrow} c_{\uparrow}^+), \\
X^{22} &= n_{\uparrow} (1 - n_{\downarrow}), \quad X^{23} = c_{\uparrow}^+ c_{\downarrow}, \\
X^{24} &= -u n_{\uparrow} c_{\downarrow} - v (1 - n_{\downarrow}) c_{\uparrow}^+, \\
X^{33} &= n_{\downarrow} (1 - n_{\uparrow}), \\
X^{34} &= u n_{\downarrow} c_{\uparrow} - v c_{\downarrow}^+ (1 - n_{\uparrow}), \\
X^{44} &= n_{\uparrow} n_{\downarrow} + v^2 (1 - n_{\downarrow} - n_{\uparrow}) + uv (c_{\uparrow} c_{\downarrow} + c_{\downarrow}^+ c_{\uparrow}^+).
\end{aligned} \tag{5}$$

Остальные недиагональные операторы Хаббарда получаются из приведенных на основании свойств $X^{nm} = (X^{mn})^+$.

В результате диагонализации (3) получаем значения коэффициентов преобразования

$$u^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{U - 2\mu}{\sqrt{(U - 2\mu)^2 + 4\Delta_0^2}} \right], \tag{6}$$

$$v^2 = 1 - u^2, \quad uv = \frac{\Delta_0}{\sqrt{(U - 2\mu)^2 + 4\Delta_0^2}}$$

и выражение для \tilde{H}_0 :

$$\tilde{H}_0 = \sum_{n=1}^4 \sum_i E_n X_i^{nn}, \tag{7}$$

где

$$\begin{aligned}
E_1 &= \frac{1}{2} [U - 2\mu - \sqrt{(U - 2\mu)^2 + 4\Delta_0^2}], \\
E_2 &= E_2^{(0)}, \quad E_3 = E_3^{(0)},
\end{aligned} \tag{8}$$

$$E_4 = \frac{1}{2} [U - 2\mu + \sqrt{(U - 2\mu)^2 + 4\Delta_0^2}].$$

Преобразование (4) приводит к перемешиванию волновых функций ϕ_1 и ϕ_4 пустого и дважды занятого узлов гамильтониана H_0 . В результате возникают новые ортонормированные функции:

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}_1 &= u\phi_1 + v\phi_4, \\ \tilde{\phi}_4 &= -v\phi_1 + u\phi_4.\end{aligned}\tag{9}$$

Рассмотрим физический смысл канонических преобразований (4) и (9) и продемонстрируем одну возможность интерпретации кулоновского взаимодействия. С этой целью введем понятие основного состояния системы как такого, в котором на каждом узле решетки имеется по одному электрону с заданным спином ($\sigma = \uparrow$). Это состояние назовем физическим вакуумом Φ_v . Ему соответствует половинное заполнение исходной затравочной зоны. Действие оператора $c_{i\uparrow}$ на это состояние приводит к возникновению в точке i пустого узла, т.е. порождается одна дырка в системе. Поэтому новое квазичастичное состояние целесообразно описать введением оператора рождения дырки (holon) h_i^+ . Действие оператора $c_{i\downarrow}^+$ на Φ_v приводит к тому, что в узле i появляются два электрона с противоположными спинами. Это состояние системы с дважды занятым одним узлом решетки называется дублоном (doublon) и обозначается через d_i^+ . Таким образом, по отношению к вакуумному состоянию Φ_v следует переопределить электронные операторы:

$$c_{i\uparrow} = h_i^+, \quad c_{i\downarrow}^+ = d_i^+.\tag{10}$$

Дублоны и холоны обладают противоположными зарядами по отношению к фону Φ_v и их взаимодействие является притягивающим:

$$U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = U d_i^+ d_i - U h_i^+ h_i d_i^+ d_i.\tag{11}$$

Переход Мотта металл — изолятор может рассматриваться^{/6/} как следствие возникновения связанных зарядово-нейтральных пар из холонов и дублонов.

Возвращаясь к каноническим преобразованиям (4) и (9), призванным описать возникновение сверхпроводящего состояния, отметим, что они означают интерференцию на узле холонных и дублонных состояний подобно тому, как в теории низкотемпературной сверхпроводимости^{/7, 8/} u, v -преобразование описывает

интерференцию состояний частиц и дырок вблизи уровня Ферми в энергетическом интервале $2\omega_2$. Интерференция холон-дублонных состояний на каждом узле приводит, благодаря перескокам, к интерференции этих состояний между различными узлами. На основании свойств операторов Хаббарда и их временной эволюции

$$X_{i\sigma}^{nm}(\tau) = e^{\tau H_0} X_{i\sigma}^{nm} e^{-\tau H_0} = X_{i\sigma}^{nm} e^{\tau(E_n - E_m)} \quad (12)$$

получаем нулевые функции Грина системы. Благодаря u, v -преобразованию возникают квазисредние и тем самым аномальные функции Грина, матричное представление которых известно как представление Намбу-Горькова^{/9/}:

$$\hat{G}_{i\sigma}^{(0)}(\tau - \tau') = \begin{pmatrix} G_{i\sigma}^{(0)}(\tau - \tau') & F_{i\sigma}^{(0)}(\tau - \tau') \\ \bar{F}_{i-\sigma}^{(0)}(\tau - \tau') & -G_{i-\sigma}^{(0)}(\tau' - \tau) \end{pmatrix}, \quad (13)$$

где

$$G_{i\sigma}^{(0)}(\tau - \tau') = -\langle T c_{i\sigma}(\tau) \bar{c}_{i\sigma}(\tau') \rangle_0,$$

$$F_{i\sigma}^{(0)}(\tau - \tau') = -\langle T c_{i\sigma}(\tau) c_{i-\sigma}(\tau') \rangle_0. \quad (14)$$

$$\bar{F}_{i-\sigma}^{(0)}(\tau - \tau') = -\langle T \bar{c}_{i-\sigma}(\tau) \bar{c}_{i\sigma}(\tau') \rangle_0.$$

Здесь эволюция операторов c, c^+ и статистическое усреднение определяются гамильтонианом \hat{H}_0 .

Введем фурье-образ этих функций по формуле:

$$G(\tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} G(i\omega_n) e^{-i\omega_n(\tau - \tau')}, \quad \omega_n = (2n+1)\pi/\beta. \quad (15)$$

На основе непосредственного вычисления получаем:

$$\begin{aligned}
G_{\uparrow}^{(0)}(i\omega_n) = & \frac{1}{Z_0} \left[\frac{u^2 (e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2})}{i\omega_n + E_1 - E_2} + \frac{u^2 (e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_4})}{i\omega_n + E_3 - E_4} + \right. \\
& \left. + \frac{v^2 (e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_3})}{i\omega_n + E_3 - E_1} + \frac{v^2 (e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_4})}{i\omega_n + E_4 - E_2} \right]; \\
\bar{F}_{\downarrow}^{(0)}(i\omega_n) = F^{(0)}(i\omega_n) = & \frac{uv}{Z_0} \left[\frac{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_3}}{i\omega_n + E_3 - E_1} + \right. \\
& \left. + \frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_4}}{i\omega_n + E_4 - E_2} - \frac{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2}}{i\omega_n + E_1 - E_2} - \frac{e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_4}}{i\omega_n + E_3 - E_4} \right]; \quad (16)
\end{aligned}$$

$$Z_0 = \sum_{n=1}^4 e^{-\beta E_n}.$$

Учет перескоков электронов между узлами решетки приводит к перенормировке одночастичных функций Грина и к возникновению, в частности, полных квазисредних. Эти ренормированные величины при температурах, меньших критической, могут, как уже отмечалось выше, оказаться конечными и после устремления Δ_0 к нулю.

Возможен и другой подход к данной задаче, основанный на предположении о конечности Δ_0 и введении нового возмущающего взаимодействия $\tilde{H}_{\text{int}} = H_{\text{int}} - H_0^{\Delta}$ с последующим самосогласованным определением Δ_0 . Ниже будет реализован первый вариант.

Перейдем теперь к учету перескоков электронов между узлами решетки.

2. Основные уравнения

Введем полные локаторные и пропагаторные одночастичные функции Грина:

$$\hat{G}(\vec{i}, \sigma, \tau | \vec{j}, \sigma', \tau') = - \frac{\langle T \hat{\psi}_{i\sigma}^{\uparrow}(\tau) \hat{\psi}_{j\sigma'}^{\downarrow}(\tau') U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}, \quad (17)$$

$$\hat{G}(\vec{k}, \sigma, \tau | \vec{k}', \sigma', \tau') = - \frac{\langle T \hat{\psi}_{k,\sigma}^{\uparrow}(\tau) \hat{\psi}_{k',\sigma'}^{\downarrow}(\tau') U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0},$$

где

$$\hat{\psi}_{i\sigma}^{\uparrow} = \begin{pmatrix} c_{i\sigma}^{\uparrow} \\ c_{i-\sigma}^{\uparrow} \end{pmatrix}; \quad \hat{\psi}_{i\sigma}^{\downarrow} = (c_{i\sigma}^{\downarrow}, c_{i-\sigma}^{\downarrow}); \quad (18)$$

$$c_{i\sigma}^{\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} c_{k\sigma} e^{-i\vec{k}\vec{R}_i}; \quad c_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i c_{i\sigma} e^{i\vec{k}\vec{R}_i}.$$

Здесь N — число узлов решетки, $U(\beta)$ — термодинамический оператор эволюции:

$$U(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_n T(H_{int}(\tau_1) \dots H_{int}(\tau_n)). \quad (19)$$

Все операторы берутся в представлении взаимодействия. Здесь, как и выше, статистическое усреднение выполняется с гамильтонианом \tilde{H}_0 .

Вычисление полных функций Грина сводится, таким образом, к вычислению среднего $\langle \dots \rangle_c$ от T -произведения электронных операторов. Такое вычисление выполняется в узельном представлении, в котором матрица плотности факторизуется по узлам

$$e^{-\beta H_0} = \prod_i e^{-\beta H_{i0}}.$$

Обобщенная теорема Вика, предложенная для модели Хаббарда в нормальном состоянии в работе /10/, переносится на сверхпроводящее состояние посредством включения квазисредних

и соответствующих аномальных одночастичных и многочастичных функций Грина. Так, например, на рис.1 приведены простейшие одночастичные функции Грина. Объединенные вместе диаграммы рис.1 представляют полную матричную функцию Грина

$$\hat{G}(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau') = \begin{pmatrix} G(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau') & F(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', -\sigma', \tau') \\ \bar{F}(\vec{x}, -\sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau') & -G(\vec{x}', -\sigma', \tau' | \vec{x}, -\sigma, \tau) \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Часть этих диаграмм, представленная первыми строками этого рисунка, может быть просуммирована введением массового оператора:

$$\hat{\Sigma}(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau') = \delta_{\sigma, \sigma'} \tilde{\delta}(\tau - \tau') \hat{\Sigma}(\vec{x} - \vec{x}'); \quad \hat{\Sigma}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} t(\vec{x}) & 0 \\ 0 & -t(-\vec{x}) \end{pmatrix}, \quad (21)$$

где

$$\tilde{\delta}(\tau) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n \delta(\tau + n\beta). \quad (22)$$

Фурье-образ $\tilde{\Sigma}$ по τ и по \vec{x} , определенный по формуле

$$\Sigma(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau') = \frac{1}{\beta N} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} e^{-i\vec{k}(\vec{x} - \vec{x}') - i\omega_n(\tau - \tau')} \sum_{\sigma\sigma'} \langle \vec{k} | i\omega_n \rangle, \quad (23)$$

равен

$$\sum_{\sigma\sigma'} \langle \vec{k} | i\omega_n \rangle = \delta_{\sigma, \sigma'} \hat{\Sigma}(\vec{k}), \quad \hat{\Sigma}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \epsilon(\vec{k}) & 0 \\ 0 & -\epsilon(-\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (24)$$

где $\epsilon(\vec{k})$ — зонная энергия электрона, являющаяся образом Фурье интеграла перескока

$$t(\vec{x}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{x}}. \quad (25)$$

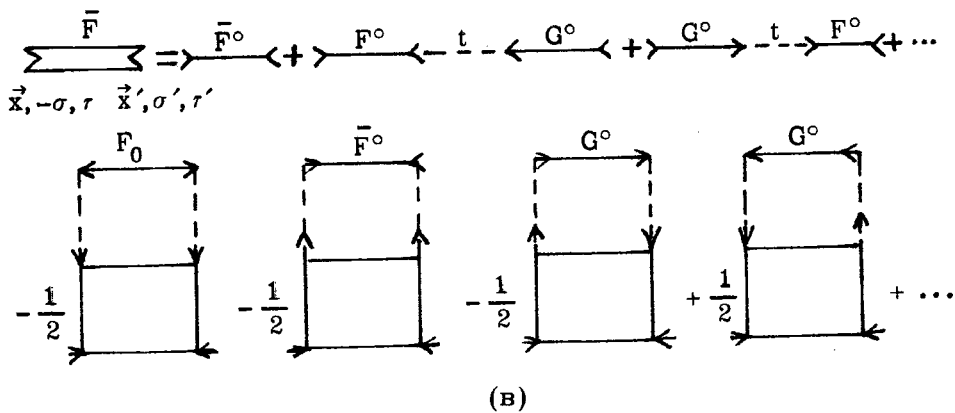
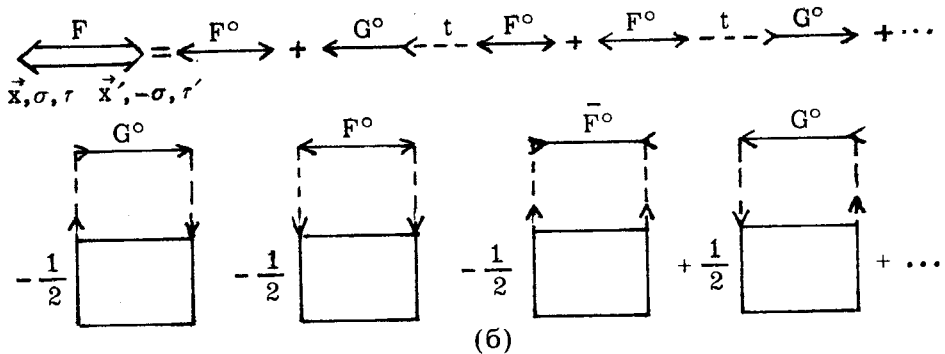
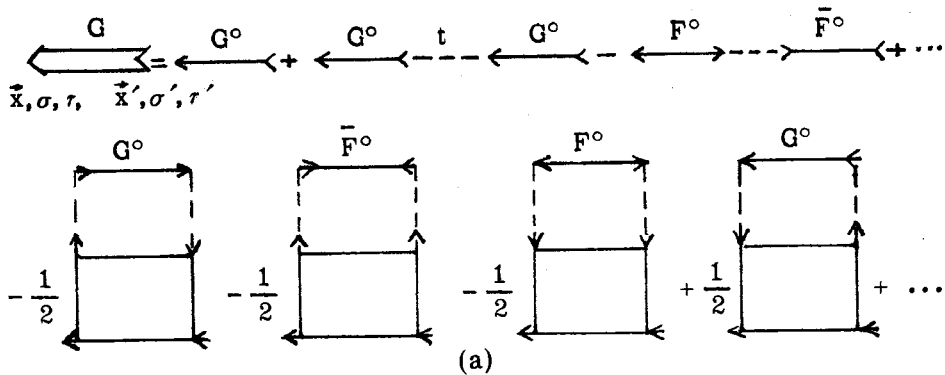


Рис. 1. Диаграммы одночастичной функции Грина. (а) — Диаграммы для функции $G(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau')$. Вторая строка изображает функцию $Z^{(2)}(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau')$. (б) — Диаграммы для функции $F(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', -\sigma', \tau')$. Вторая строка изображает функцию $Y^{(2)}(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', -\sigma', \tau')$. (в) — Диаграммы для функции $\bar{F}(\vec{x}, -\sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau')$. Вторая строка изображает функцию $\bar{Y}^{(2)}(\vec{x}, -\sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau')$.

Диаграммы, представленные вторыми строками рис.1, обязаны сильным электронным корреляциям, возникающим из-за электронного отталкивания. Эти диаграммы определяют отличие предложенной обобщенной теоремы Вика от обычной.

В сверхпроводящей фазе возникают матричные неприводимые двухчастичные и многочастичные функции Грина и отсюда следует необходимость введения наряду с массовым оператором $\hat{\Sigma}$ матричной функции \hat{Z} :

$$Z(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau') = \begin{pmatrix} Z(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau') & Y(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', -\sigma', \tau') \\ \bar{Y}(\vec{x}, -\sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau') & -Z(\vec{x}', -\sigma', \tau' | \vec{x}, -\sigma, \tau) \end{pmatrix} \quad (26)$$

Во втором порядке по интегралу перескока функции $Z^{(2)}$, $Y^{(2)}$, $\bar{Y}^{(2)}$ представлены вторыми строками рис.1 соответственно. Каждая из них выражается через след (tr) произведения двух матриц, одна из которых является неприводимой двухчастичной функцией Грина $\hat{G}_2^{(0)ir}$, $\hat{F}_2^{(0)ir}$, $\hat{F}_2^{(0)ir}$ по формулам:

$$Z^{(2)}(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau') = -\frac{\delta_{\vec{x}, \vec{x}'}}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \times \\ \times \text{tr} [\hat{G}_2^{(0)ir}(\sigma, \tau; \sigma', \tau'; \sigma_1, \tau_1; \sigma_2, \tau_2) \cdot \hat{g}_{\sigma_2, \sigma_1}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1)], \quad (27)$$

$$Y^{(2)}(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau') = -\frac{\delta_{\vec{x}, \vec{x}'}}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \times \\ \times \text{tr} [\hat{F}_2^{(0)ir}(\sigma, \tau; -\sigma', \tau'; \sigma_1, \tau_1; \sigma_2, \tau_2) \cdot \hat{g}_{\sigma_2, \sigma_1}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1)],$$

$$\bar{Y}^{(2)}(\vec{x}, -\sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau') = -\frac{\delta_{\vec{x}, \vec{x}'}}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \times \\ \times \text{tr} [\hat{F}_2^{(0)ir}(-\sigma, \tau; \sigma', \tau'; \sigma_1, \tau_1; \sigma_2, \tau_2) \cdot \hat{g}_{\sigma_2, \sigma_1}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1)].$$

Вторым множителем произведений (27) является матрица $\hat{\mathbf{g}}_{\sigma, \sigma'}^{(0)}$ вида

$$\hat{\mathbf{g}}_{\sigma, \sigma'}^{(0)}(\tau - \tau') = \sum_{i_1, i_2} \hat{\Sigma}(\vec{x} - \vec{i}_1) \hat{\mathbf{G}}^{(0)}(\vec{i}_1, \sigma, \tau | \vec{i}_2, \sigma', \tau') \hat{\Sigma}(\vec{i}_2 - \vec{x}) =$$

$$= \begin{pmatrix} \mathbf{g}_{\sigma, \sigma'}^{(0)}(\tau - \tau') & -\mathbf{f}_{\sigma, -\sigma'}^{(0)}(\tau - \tau') \\ -\bar{\mathbf{f}}_{-\sigma, \sigma'}^{(0)}(\tau - \tau') & -\mathbf{g}_{-\sigma', -\sigma}^{(0)}(\tau' - \tau) \end{pmatrix}, \quad (28)$$

где

$$\mathbf{g}_{\sigma, \sigma'}^{(0)}(\tau - \tau') = \sum_{i_1, i_2} t(\vec{x} - \vec{i}_1) \mathbf{G}^{(0)}(\vec{i}_1, \sigma, \tau | \vec{i}_2, \sigma', \tau') t(\vec{i}_2 - \vec{x}) =$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) \mathbf{G}_{\sigma, \sigma'}^{(0)}(\vec{k} | \tau - \tau') \epsilon(\vec{k}),$$

$$\mathbf{f}_{\sigma, -\sigma'}^{(0)}(\tau - \tau') = \sum_{i_1, i_2} t(\vec{x} - \vec{i}_1) \mathbf{F}^{(0)}(\vec{i}_1, \sigma, \tau | \vec{i}_2, -\sigma', \tau') t(\vec{x} - \vec{i}_2) =$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) \mathbf{F}_{\sigma, -\sigma'}^{(0)}(\vec{k} | \tau - \tau') \epsilon(\vec{k}),$$

$$\bar{\mathbf{f}}_{-\sigma, \sigma'}^{(0)}(\tau - \tau') = \sum_{i_1, i_2} t(\vec{i}_1 - \vec{x}) \bar{\mathbf{F}}^{(0)}(\vec{i}_1, -\sigma, \tau | \vec{i}_2, \sigma', \tau') t(\vec{i}_2 - \vec{x}) =$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \epsilon(-\vec{k}) \bar{\mathbf{F}}_{-\sigma, \sigma'}^{(0)}(\vec{k} | \tau - \tau') \epsilon(\vec{k}). \quad (29)$$

Матрицы $\hat{\mathbf{G}}_2^{(0)ir}$, $\hat{\mathbf{F}}_2^{(0)ir}$, $\bar{\mathbf{F}}_2^{(0)ir}$ являются корреляционными функциями Грина сверхпроводящей фазы. Их неприводимые компоненты строятся по правилу работы ^{/10/} вычитания из двухчастичной функции Грина тех членов, которые представляют обычную теорему Вика, с учетом существования квазисредних. Эти величины имеют вид:

$$\hat{G}_2^{(0) \text{ ir}} (\sigma, \tau; \sigma', \tau'; \sigma_1, \tau_1; \sigma_2, \tau_2) =$$

$$= \begin{pmatrix} \langle T c_\sigma(\tau) \bar{c}_{\sigma'}(\tau') c_{\sigma_1}(\tau_1) \bar{c}_{\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0^{\text{ir}} & \langle T c_\sigma(\tau) \bar{c}_{\sigma'}(\tau') c_{\sigma_1}(\tau_1) c_{\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0^{\text{ir}} \\ \langle T c_\sigma(\tau) \bar{c}_{\sigma'}(\tau') \bar{c}_{-\sigma_1}(\tau_1) \bar{c}_{\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0^{\text{ir}} & \langle T c_\sigma(\tau) \bar{c}_{\sigma'}(\tau') \bar{c}_{-\sigma_1}(\tau_1) c_{-\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0^{\text{ir}} \end{pmatrix},$$

$$\hat{F}_2^{(0) \text{ ir}} (\sigma, \tau; -\sigma', \tau'; \sigma_1, \tau_1; \sigma_2, \tau_2) = \quad (30)$$

$$= \begin{pmatrix} \langle T c_\sigma(\tau) c_{-\sigma'}(\tau') c_{\sigma_1}(\tau_1) \bar{c}_{\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0^{\text{ir}} & \langle T c_\sigma(\tau) c_{-\sigma'}(\tau') c_{\sigma_1}(\tau_1) c_{-\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0^{\text{ir}} \\ \langle T c_\sigma(\tau) c_{-\sigma'}(\tau') \bar{c}_{-\sigma_1}(\tau_1) \bar{c}_{\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0^{\text{ir}} & \langle T c_\sigma(\tau) c_{-\sigma'}(\tau') \bar{c}_{-\sigma_1}(\tau_1) c_{-\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0^{\text{ir}} \end{pmatrix}$$

Матрица $\hat{F}_2^{(0) \text{ ir}}$ получается на $\hat{G}_2^{(0) \text{ ir}}$, если в последней заменить операторы $c_\sigma(\tau) \bar{c}_{\sigma'}(\tau')$ на $\bar{c}_{-\sigma}(\tau) \bar{c}_{-\sigma'}(\tau')$.

Нетрудно видеть, что в нормальном состоянии из-за исчезновения квазисредних функции $Y^{(2)}$ и $\bar{Y}^{(2)}$ обращаются в нуль, а величина $Z^{(2)}$ приобретает вид /10/:

$$Z^{(2)}(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau') = -\delta_{\vec{x}, \vec{x}'} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \times \quad (31)$$

$$\times \langle T c_\sigma(\tau) c_{\sigma_1}(\tau_1) \bar{c}_{\sigma_2}(\tau_2) \bar{c}_{\sigma'}(\tau') \rangle^{\text{ir}} \cdot g_{\sigma_2, \sigma_1}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1).$$

Учет последующих членов разложения оператора эволюции позволяет, по аналогии с /10/, написать уравнение Дайсона для полной одночастичной функции Грина:

$$\hat{G}(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau') = \hat{\Lambda}(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau') + \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sum_{i_1, i_2} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \hat{\Lambda}(\vec{x}, \sigma, \tau | i_1, \sigma_1, \tau_1) \times \quad (32)$$

$$\times \hat{\Sigma}(\vec{i}_1, \sigma_1, \tau_1 | \vec{i}_2, \sigma_2, \tau_2) \hat{G}(\vec{i}_2, \sigma_2, \tau_2 | \vec{x}', \sigma', \tau').$$

где

$$\hat{\Lambda} = \hat{G}^{(0)} + \hat{Z}. \quad (33)$$

Функция \hat{Z} обобщает функцию $\hat{Z}^{(2)}$ и содержит все возможные неприводимые функции Грина. Некоторые диаграммы для Z приведены в работе /10/ в случае нормальной фазы. Переход к импульсному представлению упрощает вид уравнения (32):

$$\hat{G}_{\sigma, \sigma'}(\vec{k} | i\omega_n) = \hat{\Lambda}_{\sigma, \sigma'}(\vec{k} | i\omega_n) + \quad (34)$$

$$+ \sum_{\sigma_1} \hat{\Lambda}_{\sigma, \sigma_1}(\vec{k} | i\omega_n) \hat{\Sigma}(\vec{k}) \hat{G}_{\sigma_1, \sigma'}(\vec{k} | i\omega_n).$$

С учетом диагональности величин по спиновым индексам имеем:

$$\hat{G}_{\sigma}(\vec{k} | i\omega_n) = \hat{\Lambda}_{\sigma}(\vec{k} | i\omega_n) (1 + \hat{\Sigma}(\vec{k}) \hat{G}_{\sigma}(\vec{k} | i\omega_n)), \quad (35)$$

$$\hat{\Lambda}_{\sigma}(\vec{k} | i\omega_n) = \hat{G}_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n) + \hat{Z}_{\sigma}(\vec{k} | i\omega_n).$$

Формуле (35) можно придать обычный вид, введя массовый оператор $\hat{M}_{\sigma}(\vec{k} | i\omega_n)$:

$$\hat{G}_{\sigma}(\vec{k} | i\omega_n) = \hat{G}_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n) (1 + \hat{M}_{\sigma}(\vec{k} | i\omega_n) \hat{G}_{\sigma}(\vec{k} | i\omega_n)) \quad (36)$$

при условии, что оператор \hat{M} связан с функциями $\hat{\Sigma}$ и \hat{Z} соотношением

$$\hat{M}_{\sigma}(\vec{k} | i\omega) = \hat{\Sigma}_{\sigma}(\vec{k} | i\omega) + \hat{G}_{\sigma}^{(0)-1}(i\omega) - (\hat{G}_{\sigma}^{(0)}(i\omega) + \hat{Z}_{\sigma}(\vec{k} | i\omega))^{-1}. \quad (37)$$

Массовый оператор \hat{M}_{σ} является бесконечным рядом по степеням оператора \hat{Z}_{σ} и в этом смысле введение функции \hat{Z}_{σ} является обоснованным.

При отсутствии электронных корреляций, вызванных одно-узельным кулоновским отталкиванием, все затраченные много-

частичные неприводимые функции Грина $G_n^{(0)ir}$ равны нулю и, следовательно, оператор \hat{Z} отсутствует.

В предложенной диаграммной технике с двумя операторами $\hat{\Sigma}$ и \hat{Z} массовый оператор $\hat{\Sigma}$, учитывающий перескоки, имеет простой вид и вся трудность вычисления физических величин состоит в определении вклада электронных корреляций, содержащихся в операторе \hat{Z} . Учет высших членов взаимодействия $U(\beta)$ приводит, с одной стороны, к перенормировке диаграмм для \hat{Z} , приведенных на рис.1, и, с другой стороны, к возникновению новых диаграмм, обязанных существованию более сложных неприводимых функций Грина. На рис.2 приведены некоторые из диаграмм, суммирующих высшие поправки. После возникновения полных ренормированных функций Грина сверхпроводящей фазы исчезает необходимость во введении затравочного гамильтониана спаривания H_0^Δ и, следовательно, можно положить $\Delta_0 = 0$. При этом обращаются в нуль затравочные одночастичные квазисредние $F^{(0)}$ и $F^{(0)}$, и в нулевых двухчастичных неприводимых функциях Грина (30) сохраняются только те компоненты, которые имеют одинаковое число операторов рождения и уничтожения электронов. Это соответствует сохранению только тех диаграмм рис.2, которые содержат одноузельные квадратики с одинаковым числом входящих и выходящих линий. Вместе с тем предполагается, что в области температур, меньших критической ($T < T_c$), ренормированные квазисредние остаются отличными от нуля. Нелинейные уравнения, которым они удовлетворяют, при $T < T_c$ могут иметь нетривиальное решение, соответствующее сверхпроводящей фазе. Именно это решение будет в дальнейшем исследоваться. При $\Delta_0 = 0$ оставшиеся вклады равны:

$$Z^{(2)}(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', \sigma', \tau') =$$

$$= -\delta_{\vec{x}, \vec{x}'} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \langle T c_\sigma(\tau) c_{\sigma_1}(\tau_1) \bar{c}_{\sigma_2}(\tau_2) \bar{c}_{\sigma'}(\tau') \rangle_0^{ir} g_{\sigma_2 \sigma_1}(\tau_2 - \tau_1),$$

$$Y^{(2)}(\vec{x}, \sigma, \tau | \vec{x}', -\sigma', \tau') = \quad (38)$$

$$= -\frac{\delta_{\vec{x}, \vec{x}'}}{2} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \langle T c_\sigma(\tau) c_{-\sigma'}(\tau') \bar{c}_{\sigma_1}(\tau_1) \bar{c}_{-\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0^{ir} f_{\sigma_1, -\sigma_2}(\tau_1 - \tau_2),$$

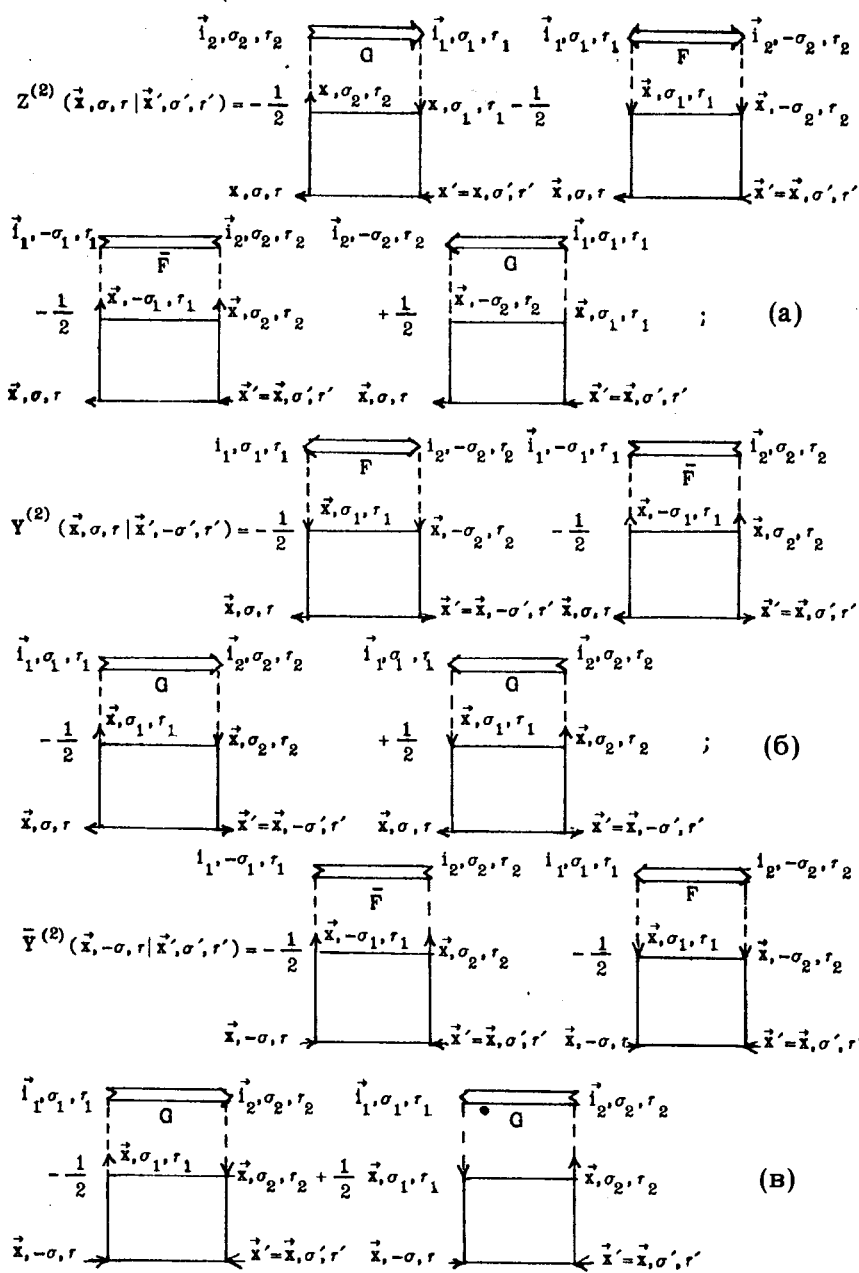


Рис.2. Диаграммы для операторов \hat{Z} . (a) — $Z^{(2)}$. (б) — $Y^{(2)}$. (в) — $\bar{Y}^{(2)}$. Двойные линии обозначают ренормированные одночастичные функции Грина. Двухчастичные неприводимые функции Грина нулевого приближения представлены квадратиками. При $\Delta_0=0$ сохраняются только те диаграммы, которые содержат квадратики с одинаковым числом входящих и выходящих линий.

$$\bar{Y}^{(2)}(\vec{x}, -\sigma, r | \vec{x}', \sigma', r') =$$

$$= -\frac{\delta_{\vec{x}, \vec{x}'}}{2} \frac{\beta}{0} \iint d\tau_1 d\tau_2 \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \langle T \bar{c}_{-\sigma}(r) \bar{c}_{\sigma'}(r') c_{-\sigma_1}(\tau_1) c_{\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0^{\text{ir}} f_{-\sigma_1, \sigma_2}^{\text{ir}}(\tau_1 - \tau_2).$$

Следуя работе /10/, введем фурье-разложение

$$G_2^{(0)\text{ir}}(\sigma, r; \sigma_1, \tau_1 | \sigma_2, \tau_2; \sigma', r') \equiv$$

$$\equiv \langle T c_{\sigma}(r) c_{\sigma_1}(\tau_1) \bar{c}_{\sigma_2}(\tau_2) \bar{c}_{\sigma'}(r') \rangle_0^{\text{ir}} =$$

$$= \frac{1}{\beta^4} \sum_{\omega, \omega_1, \omega_2, \omega'} \times \quad (39)$$

$$\times G_2^{(0)\text{ir}}(\sigma, \omega; \sigma_1, \omega_1 | \sigma_2, \omega_2; \sigma', \omega') e^{-i\omega r - i\omega_1 \tau_1 + i\omega_2 \tau_2 + i\omega' r'}$$

и учтем пропорциональность фурье-образа δ -символу Кронекера

$$G_2^{(0)\text{ir}}(\sigma, \omega; \sigma_1, \omega_1 | \sigma_2, \omega_2; \sigma', \omega') = \beta \delta(\omega + \omega_1 - \omega_2 - \omega'). \quad (40)$$

$$\cdot g_2^{(0)\text{ir}}(\sigma, \omega; \sigma_1, \omega_1 | \sigma_2, \omega_2; \sigma', \omega + \omega_1 - \omega_2).$$

Подставляя (39) и (40) в (38), получаем

$$Z_{\sigma, \sigma'}^{(2)}(\vec{k} | i\omega) = \delta_{\sigma, \sigma'} Z_{\sigma}^{(2)}(\vec{k} | i\omega) =$$

$$= -\delta_{\sigma, \sigma'} \sum_{\sigma_1} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} g_2^{(0)\text{ir}}(\sigma, \omega; \sigma_1, \omega_1 | \sigma_1, \omega_1; \sigma, \omega) g_{\sigma_1}(i\omega_1); \quad (41)$$

$$Y_{\sigma, -\sigma}^{(2)}(\vec{k} | i\omega) = \delta_{\sigma, \sigma'} Y_{\sigma, -\sigma}^{(2)}(\vec{k} | i\omega) = -\frac{\delta_{\sigma, \sigma'}}{2} \sum_{\sigma_1} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} f_{\sigma_1, -\sigma_1}(i\omega).$$

$$\cdot g_2^{(0)\text{ir}}(\sigma, \omega; -\sigma, -\omega | \sigma_1, \omega_1; -\sigma_1; -\omega_1);$$

$$\bar{Y}_{-\sigma,\sigma'}^{(2)}(\vec{k}|i\omega) = \delta_{\sigma,\sigma'} \bar{Y}_{-\sigma,\sigma}^{(2)}(\vec{k}|i\omega) = -\frac{\delta_{\sigma,\sigma'}}{2} \sum_{\sigma_1} \frac{1}{\beta \omega_1} \sum_{-\sigma_1,\sigma_1} \bar{f}_{-\sigma_1,\sigma_1}^{(i\omega_1)} \cdot$$

$$\cdot \mathbf{g}_2^{(0)1r}(-\sigma_1, -\omega_1; \sigma_1, \omega_1 | -\sigma, -\omega; \sigma, \omega).$$

Здесь учтена диагональность по спину одночастичных функций Грина \hat{G} и их моментов \hat{g} , а также сохранение спина в двухчастичных корреляционных функциях. Основное приближение, которое делается в следующей части работы, состоит в допущении замены точной функции \hat{Z} на выражение (41):

$$\hat{Z}_\sigma(\vec{k}|i\omega) \approx \hat{Z}_\sigma^{(2)}(\vec{k}|i\omega). \quad (42)$$

Аналогичная аппроксимация, выполненная в /10/ для нормальной фазы модели Хаббарда, удовлетворительно описывает ее термодинамические свойства и, в частности, переход Мотта металл — диэлектрик. Поэтому можно надеяться на разумность приближения (42), написанного для нормальных величин и квази-средних, для описания сверхпроводящей фазы при соответствующем выборе значений параметров модели. (42) рассматривается как приближенное уравнение Дайсона для \hat{Z} оператора. Оно выражает \hat{Z} через одночастичную функцию Грина и тем самым система уравнений для одночастичной функции Грина замыкается.

3. Определение сверхпроводящей фазы

На основании уравнения (35) получаем следующие определения компонент одночастичной функции Грина:

$$G_\sigma(\vec{k}|i\omega) = \frac{1}{D_\sigma(\vec{k}|i\omega)} [\Lambda_\sigma(\vec{k}|i\omega) (1 - \epsilon(-\vec{k}) \Lambda_{-\sigma}(-\vec{k}|i\omega)) -$$

$$- \epsilon(-\vec{k}) \bar{Y}_{-\sigma,\sigma}(\vec{k}|i\omega) Y_{\sigma,-\sigma}(\vec{k}|i\omega)];$$

$$F_{\sigma,-\sigma}(\vec{k}|i\omega) = \frac{Y_{\sigma,-\sigma}(\vec{k}|i\omega)}{D_\sigma(\vec{k}|i\omega)}; \bar{F}_{-\sigma,\sigma}(\vec{k}|i\omega) = \frac{\bar{Y}_{-\sigma,\sigma}(\vec{k}|i\omega)}{D_\sigma(\vec{k}|i\omega)};$$

$$\begin{aligned}
D_{\sigma}(\vec{k}|i\omega) &= (1 - \epsilon(\vec{k}) \Lambda_{\sigma}(\vec{k}|i\omega)) (1 - \epsilon(-\vec{k}) \Lambda_{-\sigma}(-\vec{k}|-i\omega)) + \\
&+ Y_{\sigma, -\sigma}(\vec{k}|i\omega) \bar{Y}_{-\sigma, \sigma}(\vec{k}|i\omega) \epsilon(\vec{k}) \epsilon(-\vec{k}); \\
\Lambda_{\sigma}(\vec{k}|i\omega) &= G_{\sigma}^{(0)}(i\omega) + Z_{\sigma}(\vec{k}|i\omega).
\end{aligned} \tag{43}$$

Внутреннее самосоглашение этих формул обеспечивается равенствами:

$$\begin{aligned}
F_{\sigma, -\sigma}(\vec{k}|i\omega) &= -F_{-\sigma, \sigma}(-\vec{k}|-i\omega); \bar{F}_{-\sigma, \sigma}(\vec{k}|i\omega) = -\bar{F}_{\sigma, -\sigma}(-\vec{k}|-i\omega); \\
Y_{\sigma, -\sigma}(\vec{k}|i\omega) &= -Y_{-\sigma, \sigma}(-\vec{k}|-i\omega); \bar{Y}_{-\sigma, \sigma}(\vec{k}|i\omega) = -\bar{Y}_{\sigma, -\sigma}(-\vec{k}|-i\omega); \\
D_{\sigma}(\vec{k}|i\omega) &= D_{-\sigma}(-\vec{k}|-i\omega).
\end{aligned} \tag{44}$$

В (43) следует подставить приближенные значения (41) для функций Z , Y , \bar{Y} . Эти функции не зависят от импульса. На основании сделанных упрощений получаем основные уравнения сверхпроводящего состояния в терминах трех функций Λ_{σ} , $Y_{\sigma, -\sigma}$, $\bar{Y}_{-\sigma, \sigma}$. Они имеют вид:

$$\begin{aligned}
\Lambda_{\sigma}(i\omega) &= G_{\sigma}^{(0)}(i\omega) - \frac{1}{\beta} \sum_{\sigma_1} \sum_{\omega_1} g_2^{(0)ir}(\sigma, \omega; \sigma_1, \omega_1 | \sigma_1, \omega_1; \sigma, \omega) \cdot \\
&\cdot \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\epsilon^2(\vec{k})}{D_{\sigma_1}(\vec{k}|i\omega_1)} \{ \Lambda_{\sigma_1}(i\omega_1) (1 - \epsilon(-\vec{k}) \Lambda_{-\sigma_1}(-i\omega_1)) - \epsilon(-\vec{k}) \cdot \\
&\cdot \bar{Y}_{-\sigma_1, \sigma_1}(i\omega_1) Y_{\sigma_1, -\sigma_1}(i\omega_1) \}; \\
Y_{\sigma, -\sigma}(i\omega) &= -\frac{1}{2\beta} \sum_{\omega_1} \sum_{\sigma_1} g_2^{(0)ir}(\sigma, \omega; -\sigma, -\omega | \sigma_1, \omega_1; -\sigma_1, -\omega_1) \cdot \\
&\cdot \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\epsilon(\vec{k}) \epsilon(-\vec{k})}{D_{\sigma_1}(\vec{k}|i\omega_1)} Y_{\sigma_1, -\sigma_1}(i\omega_1);
\end{aligned} \tag{45}$$

$$\bar{Y}_{-\sigma, \sigma}(i\omega) = -\frac{1}{2\beta} \sum_{\omega_1} \sum_{\sigma_1} \mathfrak{g}_2^{(0)ir}(-\sigma_1, -\omega_1; \sigma_1, \omega_1 | -\sigma, -\omega; \sigma, \omega) \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\epsilon(\vec{k}) \epsilon(-\vec{k})}{D_{\sigma_1}(k|i\omega_1)} Y_{-\sigma_1, \sigma_1}(i\omega_1);$$

$$D_{\sigma}(\vec{k}|i\omega) = (1 - \epsilon(\vec{k}) \Lambda_{\sigma}(i\omega))(1 - \epsilon(-\vec{k}) \Lambda_{-\sigma}(-i\omega)) + Y_{\sigma, -\sigma}(i\omega) \bar{Y}_{-\sigma, \sigma}(i\omega).$$

Сверхпроводящие функции обладают свойствами:

$$Y_{\sigma, -\sigma}(i\omega) = -Y_{-\sigma, \sigma}(-i\omega); \quad \bar{Y}_{-\sigma, \sigma}(i\omega) = -\bar{Y}_{\sigma, -\sigma}(-i\omega). \quad (46)$$

Система уравнений (45) для полноты должна быть дополнена уравнением, определяющим связь химического потенциала системы с числом электронов проводимости N_e :

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k}, \sigma, \omega} \frac{[\Lambda_{\sigma}(i\omega)(1 - \epsilon(-\vec{k}) \Lambda_{-\sigma}(-i\omega)) - \epsilon(-\vec{k}) \bar{Y}_{-\sigma, \sigma}(i\omega) Y_{\sigma, -\sigma}(i\omega)] e^{i\omega 0^+}}{D_{\sigma}(\vec{k}|i\omega)} = N_e \quad (47)$$

и свойствами симметрии корреляционной функции:

$$\begin{aligned} \mathfrak{g}_2^{(0)ir}(\sigma_1, \omega_1; \sigma_2, \omega_2 | \sigma_3, \omega_3; \sigma_4, \omega_4) &= \\ &= -\mathfrak{g}_2^{(0)ir}(\sigma_2, \omega_2; \sigma_1, \omega_1 | \sigma_3, \omega_3; \sigma_4, \omega_4) = \\ &= -\mathfrak{g}_2^{(0)ir}(\sigma_1, \omega_1; \sigma_2, \omega_2 | \sigma_4, \omega_4; \sigma_3, \omega_3). \end{aligned} \quad (48)$$

Следует также учесть, что замена всех спиновых индексов корреляционной функции на обратные приводит к замене E_2 на E_3 . Предположим в дальнейшем равенство $E_2 = E_3$. В этом случае Λ_{σ} не должна зависеть от спинового индекса. Для трех функций

$$\Lambda(i\omega) = \Lambda_{\uparrow}(i\omega) = \Lambda_{\downarrow}(i\omega); \quad (49)$$

$$Y(i\omega) = Y_{\uparrow\downarrow}(i\omega); \quad \bar{Y}(i\omega) = \bar{Y}_{\downarrow\uparrow}(i\omega)$$

получаем более простые уравнения

$$\begin{aligned}
 \Lambda(i\omega) = & G^{(0)}(i\omega) - \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} \mathbf{g}_2^{(0)ir}(\uparrow\omega; \uparrow\omega_1 | \uparrow\omega_1; \uparrow\omega) \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\epsilon^2(\vec{k})}{D(\vec{k}|i\omega)} \cdot \\
 & \cdot [\Lambda(i\omega_1)(1 - \epsilon(-\vec{k})\Lambda(-i\omega_1)) - \epsilon(-\vec{k})\mathbf{Y}(i\omega_1)\bar{\mathbf{Y}}(i\omega_1)] - \\
 & - \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} \mathbf{g}_2^{(0)ir}(\uparrow\omega; \downarrow -\omega_1 | \downarrow -\omega_1; \uparrow\omega) \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\epsilon^2(\vec{k})}{D(\vec{k}|i\omega_1)} \cdot \\
 & \cdot [\Lambda(-i\omega_1)(1 - \epsilon(\vec{k})\Lambda(i\omega_1)) - \epsilon(\vec{k})\mathbf{Y}(i\omega_1)\bar{\mathbf{Y}}(i\omega_1)]; \quad (50)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{Y}(i\omega) = & \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} \mathbf{g}_2^{(0)ir}(\uparrow\omega; \downarrow -\omega_1 | \downarrow -\omega_1; \uparrow\omega_1) \cdot \\
 & \cdot \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\epsilon(\vec{k})\epsilon(-\vec{k})\mathbf{Y}(i\omega_1)}{D(\vec{k}|i\omega_1)};
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \bar{\mathbf{Y}}(i\omega) = & \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} \mathbf{g}_2^{(0)ir}(\uparrow\omega_1; \downarrow -\omega_1 | \downarrow -\omega; \uparrow\omega) \cdot \\
 & \cdot \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\epsilon(\vec{k})\epsilon(-\vec{k})\mathbf{Y}(i\omega_1)}{D(\vec{k}|i\omega_1)};
 \end{aligned}$$

$$D(\vec{k}|i\omega) = D_{\uparrow}(\vec{k}|i\omega) = D_{\downarrow}(-\vec{k}|-i\omega).$$

Как будет видно из дальнейшего, ядра последних двух интегральных уравнений одинаковы, поэтому имеет место равенство

$$\mathbf{Y}(i\omega) = \bar{\mathbf{Y}}(i\omega) \equiv \Delta(i\omega). \quad (51)$$

Рассмотрим теперь определение критической температуры T_c сверхпроводящего перехода как точки ветвления нетривиального решения для $\Delta(i\omega)$. T_c определяется из линеаризованного уравнения ($T = T_c$):

$$\Delta(i\omega) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} \mathbf{g}_2^{(0)ir}(\uparrow\omega; \downarrow-\omega | \downarrow-\omega_1; \uparrow\omega_1) \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\epsilon(\vec{k}) \epsilon(-\vec{k}) \Delta(i\omega_1)}{(1 - \epsilon(\vec{k}) \Lambda(i\omega_1)) (1 - \epsilon(-\vec{k}) \Lambda(-i\omega_1))}.$$
(52)

Здесь $\Lambda(i\omega)$ — величина, характеризующая нормальную фазу модели Хаббарда. Она определяется из уравнения:

$$\Lambda(i\omega) = \mathbf{G}^{(0)}(i\omega) - \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} \mathbf{g}_2^{(0)ir}(\uparrow\omega; \uparrow\omega_1 | \uparrow\omega_1; \uparrow\omega) \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\epsilon^2(\vec{k}) \Lambda(i\omega_1)}{1 - \epsilon(\vec{k}) \Lambda(i\omega_1)} -$$

$$- \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} \mathbf{g}_2^{(0)ir}(\uparrow\omega; \downarrow\omega_1 | \downarrow\omega_1; \uparrow\omega) \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\epsilon^2(\vec{k}) \Lambda(i\omega_1)}{1 - \epsilon(-\vec{k}) \Lambda(i\omega_1)}.$$
(53)

Уравнение (53) было рассмотрено в работе^{/11/}. Оно описывает переход металл — диэлектрик и показывает, что при значениях константы U кулоновского взаимодействия, меньших, чем критическое значение U_c , модель Хаббарда обладает нормальной металлической фазой. На фоне металлического состояния системы ожидается, что при $T = T_c$ возникает сверхпроводимость. Уравнения (52) и (53), определяющие значение T_c , могут быть обобщены в смысле перенормировки коррелятора \mathbf{g}_2^{ir} в том случае, если перенормировка этой вершины существенна.

Для дальнейшего исследования этих формул необходимо вычислить неприводимую функцию Грина при специальных предположениях о значении параметров теории.

4. Определение T_c

Для выяснения вопроса о возможности существования сверхпроводящей фазы у одной модели Хаббарда в данной, заведомо приближенной постановке вопроса следует более детально изучить свойства линеаризованного уравнения (52) и выяснить, имеется ли физически разумное значение для T_c .

Это исследование возможно на основе конкретного значения для неприводимой корреляционной функции $G_2^{(0)ir}$.

Рассмотрим сначала наиболее неблагоприятную ситуацию для металлооксидных сверхпроводников, когда число электронов на узле равняется единице, $\mu = U/2$ и система должна находиться в диэлектрическом состоянии. Небольшое допирование двухвалентными элементами типа Sr, Ba и т.д. приводит к отклонению числа электронов на узле от единицы и возникновению сверхпроводимости. Воспользуемся значениями корреляционной функции $g_2^{(0)ir}$, вычисленной в работе /11/ в предположении выполнения равенств $E_2 = E_3 = -\mu$, $E_1 = E_4 = 0$, $\mu = U/2$:

$$\begin{aligned}
 g_2^{(0)ir}(\uparrow\omega_1; \uparrow\omega_2 | \uparrow\omega_3; \uparrow\omega_4) &= \frac{\beta [\delta(\omega_1 - \omega_4) - \delta(\omega_1 - \omega_3)] \epsilon^2}{(\omega_1^2 + \epsilon^2)(\omega_2^2 + \epsilon^2)}; \\
 g_2^{(0)ir}(\uparrow\omega_1; \downarrow\omega_2 | \downarrow\omega_3; \uparrow\omega_4) &= \\
 &= \frac{\beta \delta(\omega_1 - \omega_4) \epsilon^2 (e^{-\beta E_1} - e^{-\beta E_2})}{(\omega_1^2 + \epsilon^2)(\omega_2^2 + \epsilon^2) (e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2})} - \\
 &- \frac{2\beta \delta(\omega_1 - \omega_3) \epsilon^2 e^{-\beta E_2}}{(\omega_1^2 + \epsilon^2)(\omega_2^2 + \epsilon^2) (e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2})} + \\
 &+ \frac{2\beta \delta(\omega_1 + \omega_2) \epsilon^2 e^{-\beta E_1}}{(\omega_1^2 + \epsilon^2)(\omega_3^2 + \epsilon^2) (e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2})} -
 \end{aligned} \tag{54}$$

$$\frac{2\epsilon [3\epsilon^4 + \epsilon^2(\omega_1 + \omega_2)^2 - \epsilon^2(\omega_1\omega_2 + \omega_3\omega_4) - \omega_1\omega_2\omega_3\omega_4]}{(\omega_1^2 + \epsilon^2)(\omega_2^2 + \epsilon^2)(\omega_3^2 + \epsilon^2)(\omega_4^2 + \epsilon^2)},$$

$$\epsilon = E_2 - E_1 = -U/2,$$

как это следует из определения функции $g_2^{(0)ir}$, частоты ω_i , содержащиеся в этих формулах, связаны условием сохранения $\omega_1 + \omega_2 = \omega_3 + \omega_4$. Остальные корреляционные функции (45) могут быть получены из приведенных на основании свойств симметрии (48).

Характерно, что та же корреляционная функция Грина $g_2^{(0)ir}$ определяет как сверхпроводимость, так и переход металл — диэлектрик, однако соотношение между спинами и частотами, определяющими динамику взаимодействий частиц, разное для двух явлений. Подставим в линейное интегральное уравнение (52) значение (54) для корреляционной функции $g_2^{(0)ir}$. Тогда получаем:

$$\begin{aligned} \Delta(i\omega) = & \frac{\epsilon^2 (e^{-\beta E_1} - e^{-\beta E_2}) \Delta_1(i\omega)}{(\omega^2 + \epsilon^2)^2 (e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2})} - \\ & - \frac{2\epsilon^2 e^{-\beta E_2} \Delta_1(-i\omega)}{(\omega^2 + \epsilon^2)^2 (e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2})} + \\ & + \frac{2\epsilon}{\omega^2 + \epsilon^2} \left[\frac{\epsilon e^{-\beta E_1}}{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2}} + \frac{1}{\beta} - \frac{2\epsilon^2}{\beta(\omega^2 + \epsilon^2)} \right] \sum_{\omega_1} \frac{\Delta_1(i\omega_1)}{\omega_1 (\omega_1^2 + \epsilon^2)} - \\ & - \frac{4\epsilon^3}{\omega^2 + \epsilon^2} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} \frac{\Delta_1(i\omega_1)}{(\omega_1^2 + \epsilon^2)^2}, \end{aligned} \quad (55)$$

где

$$\Delta_1(i\omega) = \Delta(i\omega) \phi(i\omega), \quad \phi(i\omega) = \phi(-i\omega),$$

$$\phi(i\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{\epsilon(\vec{k}) \epsilon(-\vec{k})}{(1 - \epsilon(\vec{k}) \Lambda(i\omega) (1 - \epsilon(\vec{k}) \Lambda(-i\omega)))}. \quad (56)$$

Исходя из четности $\Delta(i\omega)$ и неравенства $e^{\beta U/2} \gg 1$, можно это уравнение упростить. В результате получаем ($T = T_c$):

$$\Delta(i\omega) = \frac{-3(U/2)^2 \Delta(i\omega) \phi(i\omega)}{[\omega^2 + (U/2)^2]^2} - \frac{U\psi_1}{[\omega^2 + (U/2)^2]^2} (\omega^2 - (U/2)^2) + \frac{2U\psi_2}{\omega^2 + (U/2)^2}, \quad (57)$$

где

$$\psi_1 = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega} \frac{\Delta_1(i\omega)}{\omega^2 + (U/2)^2}, \quad \psi_2 = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega} \frac{\Delta_1(i\omega)(U/2)^2}{[\omega^2 + (U/2)^2]^2}. \quad (58)$$

Найдем отсюда функцию $\Delta(i\omega)$:

$$\Delta(i\omega) = \left[1 + \frac{3(U/2)^2 \phi(i\omega)}{[\omega^2 + (U/2)^2]^2} \right]^{-1} \frac{U}{\omega^2 + (U/2)^2} \left[2\psi_2 - \frac{\omega^2 - (U/2)^2}{\omega^2 + (U/2)^2} \psi_1 \right] \quad (59)$$

и уравнение для ее моментов ψ_1 и ψ_2 :

$$\psi_1 = \psi_1 (I_1 - I_0) + 2I_0 \psi_2, \quad (60)$$

$$\psi_2 = \frac{1}{2} \psi_1 (I_2 - I_1) + I_1 \psi_2,$$

где

$$I_n = \frac{U}{\beta} \sum_{\omega} \frac{2^n (U/2)^{2n}}{[\omega^2 + (U/2)^2]^{n+2}} \left[\frac{1}{\phi(i\omega)} + \frac{3(U/2)^2}{[\omega^2 + (U/2)^2]^2} \right]^{-1}. \quad (61)$$

Из условия совместимости (60) следует определение критической температуры $T = T_c$ сверхпроводящего перехода

$$(1 - I_1)^2 = I_0 (I_2 - 1). \quad (62)$$

Таким образом, вопрос о существовании сверхпроводящего перехода в модели Хаббарда, в рамках сделанных аппроксимаций и в предположении половинного заполнения зоны, сводится к вопросу о существовании физически разумного решения этого уравнения. Приближенная оценка интегралов I_n показывает, что все они положительные и I_2 меньше единицы. Следовательно, условие (62) не выполняется и сверхпроводящая фаза не может реализоваться при данном предположении. Вопрос о существовании сверхпроводимости при $\mu \neq U/2$ нуждается в дальнейшем исследовании.

Литература

1. Hubbard J. — *Pros.Roy.Soc.* 1963, v.A236, p.238.
2. Hirsch J.E. — *Phys.Rev.Lett.*, 1985, v.54, p.317.
3. Anderson P.W. — *Science*, 1987, v.235, p.1196.
4. Bastide C., Lacroix C. — *J.Phys.C*, 1988, v.21, p.3557.
Bastide C. — *Phys.Rev.B*, 1990, v.41, p.807.
5. Боголюбов Н.Н. — *Избранные труды*. Киев: Наукова думка, 1971, т.31, с.174.
6. Krishnamurthy H.R., Jayaprakash Sanjoy, Sarker C., Wenzel W. — *Phys.Rev.Lett.*, 1990, v.64, p.950.
7. Боголюбов Н.Н., Зубарев Д.Н., Церковников Ю.А. — *ДАН СССР*, 1957, т.117, с.788.
Боголюбов Н.Н. — *ЖЭТФ*, 1958, т.34, с.58.
8. Боголюбов Н.Н., Толмачев В.В., Ширков Д.В. — *Новый метод в теории сверхпроводимости*. М.: Изд-во АН СССР, 1958, с.154.
9. Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. — *Методы квантовой теории поля в статистической физике*. М.: ГИФМЛ, 1962, с.450.
10. Владимир М.И., Москаленко В.А. — *ТМФ*, 1990, №3, с.428.
11. Вакару С.И., Владимир М.И., Москаленко В.А. — *ТМФ* (в печати).

Рукопись поступила 24 июля 1990 года.