

Системы сильно коррелированных электронов, взаимодействующих между собой и с фононами. Диаграммный подход

И. Д. Чеботарь

*Институт прикладной физики, Молдавский государственный университет,
г. Кишинев, MD-2028, Молдова, e-mail: chebotar.irina@gmail.com*

Поступила в редакцию 28.07.2023

После доработки 15.09.2023

Принята к публикации 20.09.2023

Рассмотрены особенности материалов, приводящие к эффекту сильной корреляции, и реализуемые в них явления: переход металл–диэлектрик Мотта и высокотемпературная сверхпроводимость. Прослеживается история их изучения. Особое внимание уделяется исследованию роли межорбитального корреляционного эффекта и связи Хунда в многоорбитальных системах, а также электрон-фононного взаимодействия в системах с сильным кулоновским взаимодействием. Проанализировано развитие метода диаграммной техники сильной связи и приведены результаты, полученные на основании используемого подхода.

Ключевые слова: диаграммная техника, сильно коррелированные системы, теорема Вика, переход металл–диэлектрик Мотта, высокотемпературная сверхпроводимость

УДК 538.945.9

<https://doi.org/10.52577/eom.2023.59.5.72>

ВВЕДЕНИЕ

Теории твердого тела, такие как зонная теория проводимости Уилсона–Блоха или сверхпроводимости Бардина–Купера–Шриффера (БКШ), адекватно описывают свойства лишь ограниченного числа материалов. Существует большая категория материалов, представленная переходными (редкоземельными) металлами и их химическими соединениями, а также фуллеридами (A_nC_{60} , где A – щелочной металл), которые проявляют нехарактерные с точки зрения этих концепций физические свойства или в них реализуются необычные явления. Речь идет о переходе металл–диэлектрик Мотта–Хаббарда, гигантском магнетосопротивлении с отрицательным знаком, высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП), сосуществовании магнетизма и сверхпроводимости и др.

Эти явления вызывают много вопросов фундаментального характера. Например, до конца не понятен механизм образования сверхпроводящих электронных пар в высокотемпературных сверхпроводниках. Многие исследователи сходятся во мнении, что эти явления обусловлены эффектом сильной корреляции, который ассоциирован, в первую очередь, с сильным кулоновским взаимодействием электронов друг с другом, а также сильной электрон-фононной связью в кристаллах (в том числе молекулярных) и их взаимовлиянием [1]. Системы, в которых проявляется эффект сильной корреляции электронов друг с другом,

электронов с фононами или оба эффекта вместе, называют сильно коррелированными. Сущность проблемы физики сильно коррелированных систем (СКС) заключается в возникающей в них конкуренции между стремлением электронов к локализации вблизи атомных остовов и к коллективизации и перемещению по узлам решетки.

Современная теория СКС основывается на гамильтоновом формализме, сформулированном на языке вторичного квантования. Модельные гамильтонианы, описывающие поведение электронов в таких системах, включают в себя параметр величины кулоновского взаимодействия электронов. Это полярная модель Шубина–Вонсовского [2–4], модели Боголюбова–Тябликова [5–6], Хаббарда [7–12], Андерсона [13] (примесная и ее обобщение – периодическая) и др. Модель Хаббарда самая простая из них и содержит минимум параметров. Она предложена Хаббардом в начале 60-х гг. прошлого века для описания поведения электронов в узкозонных системах, представленных соединениями переходных металлов, и опубликована в серии работ [7–12]. Основное допущение модели заключается в том, что на одном узле решетки может «находиться» не более двух электронов в $d(f)$ -состояниях с противоположно направленными спинами, взаимодействующих друг с другом с энергией кулоновского отталкивания U . Часть оператора Гамильтона, которая отвечает энергии взаимодействия в

этой модели, может быть представлена в виде суммы гамильтонианов отдельных узлов. В модель также входит член, ответственный за вероятность туннелирования электрона (кинетическую энергию), – интеграл перескока t , соответственно определяющий ширину зоны проводимости W . При этом учитывается взаимодействие только электронов одного узла, в отличие от модели Боголюбова–Тябликова, в которой учитывается взаимодействие электронов соседних узлов. Соотношение U/W в некотором смысле является мерой электронных корреляций.

Немного ранее (в 1960 г.) другая модель, рассматривающая сильное локальное взаимодействие электронов, была разработана Андерсоном [13] для объяснения образования магнитных моментов в материалах, которые содержат примесные атомы из группы переходных металлов. В дальнейшем она находит более широкое применение при описании свойств СКС. Модель рассматривает две взаимодействующие системы электронов в твердом теле: систему электронов проводимости (электроны s , p -оболочек атомов решетки) и систему локализованных электронов (спинов), в качестве которой рассмотрены электроны $d(f)$ -оболочек примесного атома переходного или редкоземельного металла. При этом локализованные электроны сильно коррелируют между собой с энергией взаимодействия U , испытывают обменное взаимодействие, а также происходит гибридизация состояний локализации и проводимости ($s(p)$ - d -гибридизация).

Во многих материалах орбитальное вырождение снимается полностью. Однако существуют системы, такие как оксиды 3d- и 4d-переходных металлов (рутенаты), сверхпроводники на основе железа (см., например, [14]) или фуллериды [15], в которых имеется орбитальное вырождение уровней локализованных электронов. В связи с вырождением в этих системах возникает так называемый межорбитальный корреляционный эффект, который обуславливается величиной обменного интеграла Хунда I_H (связи Хунда). Связь Хунда – величина, имеющая размерность энергии, ассоциирована с внутриатомным обменным взаимодействием и уменьшает значение кулоновской энергии отталкивания двух электронов с параллельными спинами различных орбиталей, в отличие от двух электронов одной орбитали (цит. по [16], с. 138). Параметр Хунда может значительно влиять на физическую картину, реализующуюся в этих материалах, как на сверхпроводящие свойства, так и на поведение перехода металл–диэлектрик. Минимальной моделью для изучения таких систем является

двухорбитальная модель Хаббарда. Для некоторых систем интерес представляет анализ моделей квантовых точек и магнитных примесей, таких как модели Кондо и примесная модель Андерсона с двукратным вырождением.

Роль сильного электрон-фононного взаимодействия также недостаточно ясна, особенно это касается ВТСП. Экспериментальные данные, полученные при изучении изотопического эффекта в высокотемпературных сверхпроводниках (показывающего корреляцию температуры сверхпроводящего перехода и массы изотопа соответствующего иона), достаточно противоречивы. Одни исследования показывают, что во многих высокотемпературных металлооксидах имеет место изотопический эффект по кислороду и даже известны соединения, в которых его величина превышает предсказание теории сверхпроводимости БКШ. Например, исследование фотоэмиссионной спектроскопией с угловым разрешением [17] показало сильный необычный изотопический эффект, наблюдавшийся в образцах $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_y$ (Bi_{-2212}) с различными изотопами кислорода. В более ранних работах [18] не обнаружено значительной корреляции между температурой сверхпроводящего перехода и массами ионов решетки.

Более сложная картина вырисовывается в сверхпроводниках на основе железа (см. [19] и цитируемую литературу). Например, сильный изотопический эффект (даже сильнее, чем в обычных сверхпроводниках) обнаруживается в $\text{SmFeAs}(\text{O}, \text{F})$ и $(\text{Ba}, \text{K})\text{Fe}_2\text{As}_2$ при замещении железа [20]. Наоборот, в работе [21] в $(\text{Ba}, \text{K})\text{Fe}_2\text{As}_2$ наблюдается обратный изотопический эффект при различных изотопных замещениях. Позже было высказано предположение, что изотопные замещения могут приводить к структурным изменениям [22], что еще больше усложняет картину.

Из теоретических исследований ясно, что чисто электрон-фононный механизм образования куперовских пар маловероятен, однако некоторые исследователи полагают, что он благоприятствует формированию сверхпроводящих пар электронов, а ряд других [23–25] считают, что он может непосредственно участвовать в механизме образования сверхпроводящих пар.

Модель Холстейна [26] используется для изучения электрон-фононных взаимодействий. Самой простой моделью сильно коррелированных электронов, взаимодействующих с фононами, является модель Хаббарда–Холстейна. Еще одна модель, которая представляет интерес, это модель Андерсона–Холстейна. Модели Хаббарда и примесная модель

Андерсона в данном случае дополняются системой фононов и членом, ответственным за взаимодействие систем электронов с фононами.

Актуальным остается вопрос развития методов анализа этих моделей, ведь разработанные для исследования систем со слабым взаимодействием методы не применимы. Предложены различные математические концепции, приближения и методы, аналитические, численные, пертурбативные и непертурбативные, часть из которых представлена в работе [27]. Все они имеют свои преимущества и недостатки.

Задача работы заключается в том, чтобы дать общий обзор исследования явлений фазовых переходов металл–диэлектрик Мотта и сверхпроводимости в рамках моделей сильно коррелированных систем. На основании этого будут представлены основные идеи и результаты диаграммного подхода сильной связи, предложенного В.А. Москаленко [28, 29].

МАТЕРИАЛЫ С СИЛЬНЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ

Особенности материалов с сильными корреляциями

Примерами материалов с сильными корреляциями являются соединения переходных (редкоземельных) металлов, такие как купраты, манганаты, а также фуллериды.

Рассмотрим ряд особенностей этих материалов, которые обуславливают эффект сильных корреляций. В переходных металлах эти особенности в первую очередь связаны с наличием незаполненных $d(f)$ -оболочек. Волновые функции электронов в $d(f)$ -состояниях обладают малой пространственной протяженностью, соответственно эти электроны проявляют тенденцию к локализации возле атомных остовов (в отличие от электронов в s - или p -состояниях). Последнее обстоятельство проявляется в наличии магнитного упорядочения (ферро- и антиферромагнетизма) в этих материалах. В то же время плотность электронных состояний на уровне Ферми высока в большинстве из них, и ее основу составляют именно $d(f)$ -состояния. Поверхность Ферми часто является сильно анизотропной (на ней присутствует несколько энергетических зон).

Другая особенность заключается в том, что в переходных металлах и их соединениях имеется сильный электрон-фононный потенциал. Он зависит от углового момента l , и при его значениях $l = 2$ (соответствующих d -состояниям) возникает яма, глубина которой варьирует в

зависимости от элемента. При рассеивании электрона на таком потенциале в сечении рассеяния возможно появление резкого пика, соответствующего резонансному состоянию [30]. Ширина резонанса зависит от матричных элементов s - d -гибридизации и определяет время жизни электрона возле данного иона, который близок к атомной функции. Наличие резонансного рассеяния d -состояния на изолированном ионном потенциале приводит к тому, что когерентное рассеяние электронов в кристалле образует узкую d -зону (по мере сужения резонанса) [30]. Она намного уже зон, образованных волновыми функциями электронов в $s(p)$ -состояниях, имеющих более обширную пространственную протяженность. Для многих переходных металлов этот резонанс близок к уровню Ферми. В этом смысле такие системы часто называют узкозонными.

Интересными материалами с сильными корреляциями также считаются фуллериды, представляющие собой интеркалированные щелочными металлами фуллериты. Фуллерит – это кристаллический фуллерен, имеющий гранцентрированную кубическую решетку, в узлах которого расположены кластеры C_{60} . При интеркаливании щелочными металлами фуллеритов атомы щелочных металлов располагаются в межузельных пустотах, и при достаточно высоких концентрациях интеркалирования в узлах кристалла образуются положительно заряженные кластеры C_{60} . Электроны s -орбитали щелочного металла передаются в t_{1u} зону проводимости чистого C_{60} кристалла, которая трижды вырождена в точке Γ [15]. Таким образом, фуллериды проявляются как сильно связанный ионный кристалл. При этом в связи участвуют как зонные энергии, так и энергия Маделунга [15]. Электронные системы в фуллеридах являются узкополосными, с вырождением основных состояний.

Узкополосная или сильно коррелированная электронная система и вырожденные основные состояния имеют отношение к объяснению необычных явлений в фуллеридах.

Переход металл–диэлектрик Мотта

В 1937 г. де Бур и Фервей [31] впервые выносят на обсуждение вопрос проводимости соединений переходных металлов, отмечая, что оксиды переходных металлов типа оксида никеля NiO ведут себя нехарактерно с точки зрения зонной теории проводимости. Зная электронную конфигурацию атомов кристалла и структуру решетки, можно предположить, какие вещества при низких температурах будут

проводниками, диэлектриками или полупроводниками. Так, изоляторами будут те вещества, количество электронов в которых достаточно для того, чтобы полностью заполнить зоны Бриллюэна, и между самой нижней незанятой зоной Бриллюэна и занятой зоной Бриллюэна с наибольшей энергией имеется большое расстояние, то есть широкая энергетическая щель. А частичное заполнение последней разрешенной зоны обуславливает кристалл с металлическими свойствами. Например, такие ионные соединения, как NaCl, MgO, AgCl, ZnO, TiCl, содержат ионы с заполненными электронными зонами или подзонами, таким образом, только полностью заполненные зоны Бриллюэна, а они, как известно, в чистом виде и стехиометрического состава очень плохие проводники. Такие соединения с незаполненными внутренними 3d-оболочками, как NiO, CoO, в терминах зонной теории при низких температурах должны быть проводниками. Действительно, уровни энергии электронов 3d-оболочки атома кристаллов типа NiO образуют энергетическую зону, рассчитанную на 10 электронов, которая в соответствии со структурой решетки разделяется на две подзоны из шести и четырех электронов [32]. Одна из этих подзон окажется частично пустой (Ni, например, имеет конфигурацию 3d⁸s) и согласно ожиданиям зонной теории с понижением температуры проводимость должна только увеличиваться. Однако, несмотря на это, при низкой температуре материалы этого типа являются полупроводниками или изоляторами. Резкий переход (до девяти порядков) при изменении условий (таких как температура, давление, легирование) из состояния, когда материал является проводником в состояние, когда его проводимость падает, и он становится полуметаллом или диэлектриком, и соответственно наоборот называют переходом Мотта (Мотта–Хаббарда). Переход Мотта–Хаббарда отличается от другого типа перехода металл–диэлектрик (Пайерлса) тем, что для него незначительны структурные изменения решетки, а основную роль, как показано ниже, играют перестройки в электронной системе. При этом в спектре электронов появляется щель.

Мотт и Пайерлс [33] интуитивно попытались дать качественную картину поведения электронов в моттовских диэлектриках, выдвинув предположение, что электростатическое взаимодействие электронов в *d*-состояниях переходных атомов может обуславливать такой характер проводимости материалов. Если проникаемость межатомных потенциальных барьеров низка (имеется глубокая яма), рассуждали они, при низких

температурах большинство электронов не покинут своих атомных остовов, а движению остальных электронов, которым удастся преодолеть межатомный потенциальный барьер, будет препятствовать электростатическое отталкивание электронов, локализованных на соседнем атоме.

В последующих работах [34, 35] переход Мотта–Хаббарда рассматривается в рамках приближения решетки водородоподобных атомов с постоянной решеткой *a*, которая может меняться. Также произведена количественная оценка эффектов корреляции, показавшая, что правильный их учет при условии изменения постоянной решетки *a* допускает существование диэлектрического состояния при не полностью заполненной электронами энергетической зоне. Если межатомное расстояние *a* меньше некоторого критического значения *a*₀, то кристалл обладает металлическими свойствами, а при большем значении он является изолятором.

На данный момент проблема моттовских диэлектриков решается с помощью модельных гамильтонианов теории сильной связи, каковыми являются полярная модель Шубина–Вонсовского, Боголюбова–Тябликова и Хаббарда (а также примесные модели, такие как примесная модель Андерсона и Кондо) [36]. Переход Мотта–Хаббарда управляется соотношением двух параметров, которые включены в модели: величиной кулоновского взаимодействия между электронами *U* и шириной зоны проводимости *W*, которую определяет интеграл перескока *t*, то есть или *U/W* или *U/t*, а также заполнением зоны [37].

При высоких значениях постоянной решетки *a* модель Хаббарда приводит к состоянию антиферромагнитного изолятора, так что уровни энергии электронов образуют две зоны: полностью заполненную и пустую. Их называют нижней и верхней хаббардовской подзоной соответственно. В этой интерпретации переход металл–изолятор проявляется как переход от антиферромагнитного металла к антиферромагнитному изолятору, связанный с расщеплением подзон. Наиболее благоприятным для реализации перехода является состояние половинного заполнения электронной энергетической зоны, то есть один электрон на атом. В этом случае имеется электрон-дырочная симметрия.

Сильно коррелированная сверхпроводимость

Рассмотрим другое необычное явление, которое реализуется в материалах с сильными корреляциями.

Долгое время переход в сверхпроводящее состояние наблюдался только при низких температурах (близких к 0 К), при этом также имел

место эффект Мейснера (вытеснение магнитного поля из объема сверхпроводника). Однако в сплавах и химических соединениях переходных металлов температуры сверхпроводящих переходов наблюдались более высокие (4–23 К). В 1979 г. в системах с тяжелыми фермионами, то есть в системах с сильно коррелированными электронами 4f-оболочек соединений некоторых переходных металлов с высокой эффективной массой, обнаруживается объемная сверхпроводимость [38, 39]. И настоящим открытием стало обнаружение Беднорцем и Мюллером [40], что температура сверхпроводящего перехода керамики на основе оксида меди, лантана и бария составляет 30 К. Это открытие высокотемпературной сверхпроводимости породило волну экспериментальных исследований, направленных на получение керамик на основе купратов, и изучение их сверхпроводящей фазы. Со структурной точки зрения купраты представляют собой слои меди и кислорода, зажатые между другими веществами (La, Ba, Hg).

В 1987 г. была получена керамика с температурой сверхпроводящего перехода под давлением 93 К, что выше точки кипения азота [41]. В связи с этим согласно одной классификации высокотемпературными считаются сверхпроводники, критическая температура которых выше 30 К (будем придерживаться этой классификации), согласно другой – не ниже точки кипения азота. Рекордная и по сей день при нормальном давлении критическая температура сверхпроводящего перехода (до 135 К) была обнаружена в ртутьсодержащих керамиках [42, 43], а при высоком давлении – в гидридах LaH_{10} и супергидридах лантана LaH_{16} [44]. При этом температуры сверхпроводящего перехода таких систем могут приближаться к комнатной.

Высокотемпературная сверхпроводимость реализуется также в фуллеридах; в 1991 г. обнаружено, что фуллерид $\text{RbCs}_2\text{C}_{60}$ имеет температуру сверхпроводящего перехода 33 К [45], а Cs_3C_{60} под давлением показал температуру сверхпроводящего перехода 40 К [46]. Начиная с 1999 г. высокие критические температуры обнаруживаются в оксидных сверхпроводниках, не содержащих медь, таких как, например, монокристалл перовскитного диэлектрика оксида вольфрама $\text{Na}_{0,05}\text{WO}_3$, допированного натрием, его критическая температура составляет 91 К [47]).

В 2001 г. группа японских ученых обнаружила способность простого соединения интерметаллида MgB_2 переходить в сверхпроводящее состояние при температуре около 39 К [48]. Следующим важным экспериментальным

фактом явилось обнаружение нового класса сверхпроводников – железосодержащих сверхпроводников [49]. Эта группа высокотемпературных сверхпроводящих материалов представлена ферропниктидами (соединения железа с элементами из группы пниктидов) и феррохалькогенидами (соединения железа с элементами из группы халькогенидов). Это, как и купраты, слоистые соединения, структурной особенностью которых является наличие слоев железа и элементов из групп халькогенидов или пниктидов (кислородсодержащие и некислородные), зажатых между слоями других элементов. Температура сверхпроводящего перехода у сверхпроводников этого класса составляет около 56 К.

Таким образом, на данный момент высокотемпературная сверхпроводимость наблюдается в следующих основных классах материалов: керамики на основе купратов, а также монокристаллы и тонкие пленки на основе оксида меди, безмедные сверхпроводники (например, $\text{Na}_{0,05}\text{WO}_3$), фуллериды, железосодержащие сверхпроводники (ферропниктиды, феррохалькогениды), супергидриды; в отдельную группу следует отнести диборид магния.

В высокотемпературных сверхпроводниках, таких как купраты, железосодержащие сверхпроводники, а также низкотемпературные органические сверхпроводники, наблюдается еще одно удивительное свойство – возможность одновременного сосуществования двух дальних упорядочений: магнитного порядка и сверхпроводимости. Сверхпроводящая фаза керамик на основе купратов может сопровождаться антиферромагнетизмом и ферромагнетизмом, а железосодержащих сверхпроводников – состоянием волны спиновой плотности, зарядовой плотности и недавно наблюдаемым магнитным упорядочением – спин-вихревой кристалл (*spin-vortex crystal*) [50].

Долгое время механизм сверхпроводимости оставался тайной. Лишь в конце 50-х гг. прошлого века микроскопическая теория сверхпроводимости была предложена и развита Бардином, Купером, Шриффером (теория БКШ) [51, 52], а также Боголюбовым [53] и Горьковым [54]. Это стало возможным благодаря обнаружению изотопического эффекта (изотопический эффект показывает корреляцию между температурой сверхпроводящего перехода T_c и массой ионов в узлах кристаллов), который подтвердил предположение о причастности к данному явлению взаимодействия электронов с фононами.

Теория БКШ предлагает следующий механизм появления сверхпроводимости. При

низких температурах (близких к 0 К) за счет косвенного взаимодействия движущихся электронов и ближайших к ним положительно заряженных ионов возле них возникает отрицательный потенциал, притягивающий к электрону соседний электрон с противоположным спином и импульсом. Это происходит в слое k -пространства вблизи поверхности Ферми и глубины порядка предельной частоты фононных колебаний, то есть дебаевской частоты. Связанные между собой пары электронов представляют квазичастицы, которые ведут себя как бозоны. Их называют куперовскими парами. Они являются квазибозонами и способны образовывать бозе-эйнштейновский конденсат. В основном состоянии они все покоятся либо движутся когерентно. Согласно БКШ, бозе-эйнштейновская конденсация пар электронов, связанных через колебания ионов решетки (фононов), и есть причина когерентного движения пар электронов без сопротивления и появления сверхпроводимости.

Модель БКШ основывается на гамильтониане Фрелиха и применима для описания сверхпроводимости узкого класса материалов: изотропных сверхпроводников со слабым кулоновским взаимодействием. Учет кулоновского взаимодействия был произведен Боголюбовым, Толмачевым и Ширковым [55]. Модель, учитывающая анизотропию поверхности Ферми сверхпроводников с перекрывающимися энергетическими зонами, предложенная в 1959 г. В.А. Москаленко [56] и независимо Сухлом [57], является обобщенной версией модели БКШ – двухзонной модели сверхпроводимости. В ней предполагается наличие двух энергетических зон и возможность перехода пар электронов, образованных внутри одной зоны, в другую. Благодаря возникновению как внутризонного, так и межзонного косвенного электронного взаимодействия, приводящего к дополнительному притяжению между электронами, такие сверхпроводники могут обладать более высокой критической температурой сверхпроводящего перехода. Эта модель и развитые на ее основе методы расчета физических параметров получили экспериментальное подтверждение полвека спустя (см., например, [58]) после обнаружения высокой температуры сверхпроводящего перехода у интерметаллида MgB_2 . Кроме того, она подходит также для описания многозонных высокотемпературных сверхпроводников, в которых можно пренебречь учетом сильных корреляций [59].

Таким образом, появился вопрос о механизме образования куперовских пар в высокотемпературных сверхпроводниках (хотя роль фононов

не исключена, чисто фононный механизм в связи с высокими температурами маловероятен). По-видимому, он может отличаться у различных типов высокотемпературных сверхпроводников. В нем могут участвовать как спиновые флуктуации (см., например, [60]), так и сильное кулоновское и электрон-фононное взаимодействие. Соответственно каждый из классов высокотемпературных сверхпроводников требует отдельного рассмотрения.

Если речь идет об узкозонных системах, то сверхпроводимость в них является скорее атомистическим свойством, и такие характеристики сверхпроводника, как температура сверхпроводящего перехода и др., должны определяться в первую очередь локальными характеристиками. Это обстоятельство послужило поводом для анализа моделей Хаббарда и примесной модели Андерсона в качестве кандидатов на возникновение сверхпроводимости в рамках этих моделей.

В работе [61] показано, что возможно возникновение эффективного притяжения между ближайшими электронами с антипараллельными спинами (а значит, и сверхпроводимости) в моделях примесной Андерсона и Хаббарда в пределе большого кулоновского отталкивания электронов одного узла $U \rightarrow \infty$. Также в работе 1986 г. при рассмотрении трехмерной модели Хаббарда было показано, что спиновые флуктуации (вызванные обменом парамагнонами) около нестабильности состояния волны спиновой плотности (ВСП) обуславливают сильное синглетное d -волновое спаривание электронов с антипараллельными спинами [62].

Андерсон [63] предположил, что механизм сверхпроводимости в керамиках на основе оксида меди имеет чисто электронную и магнитную природу, а взаимодействие с фононами может этому благоприятствовать. Подходящей моделью для описания этих сверхпроводников Андерсон считает модель Хаббарда с половинным заполнением зоны и с сильным кулоновским взаимодействием U , а также константы обменного антиферромагнитного взаимодействия $J = t^2/U$. В работе [64] методами теории возмущений в приближении малого t и ($U \rightarrow \infty$) показано, что в многозонной модели Хаббарда возможно возникновение сверхпроводимости, обусловленной спариванием d -электронов (механизм сверхпроводимости благодаря зарядовым флуктуациям). Также в периодической модели Андерсона авторы пришли к выводу, что возможно возникновение сверхпроводимости по причине появления эффективного притяжения и образования куперовских пар d -электронов [65]. В последу-

ющем обобщенная периодическая модель Андерсона, описывающая две группы сильно коррелированных (dd и ff) электронов с локальной гибридизацией состояний и перескоком dd -электронов между узлами решетки, исследуется с точки зрения возможных механизмов появления связанных электронных пар с использованием метода среднего поля в [66]. Здесь авторы пришли к выводу, что имеется несколько факторов, способствующих образованию сверхпроводящих пар: во-первых, это синглетное состояние с отрицательной энергией, которое содержит выигрыш энергии благодаря эффекту Кондо, который приводит к появлению притяжения между электронами; во-вторых, наличие корреляционных переходов, которые порождают флуктуирующие пары электронов с противоположными спинами, принадлежащие к обеим орбиталам (спин-флуктуационный механизм). Туннелирование электронных пар между различными орбиталями также способно привести к дополнительному притяжению между электронами.

Несмотря на интенсивное изучение моделей СКС, в частности, существования сверхпроводимости в модели Хаббарда, до сих пор получены противоречивые результаты. Так, в недавней работе 2020 г. показано отсутствие сверхпроводимости в двухмерной модели Хаббарда [67]. При этом авторы использовали современные вычислительные методы – квантовый метод Монте–Карло и метод ренормгруппы матрицы плотности. В работе 2022 г. [68] в рамках динамической теории среднего поля (ДТСП) в качестве механизма образования сверхпроводящих пар в модели Хаббарда опять предлагаются те же антиферромагнитные флуктуации, причем как в недопированном, так и в сильно допированном режимах.

Возможно, эти противоречивые результаты связаны с использованием различных теоретических методов и приближений.

ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

В рамках теории динамического среднего поля (DMFT) [69–72] достигнуты значительные успехи в понимании явлений СКС, что связано в том числе с возможностью комбинирования этого метода с методом производящего функционала (DMF + DFT) и другими (см., например, обзор [72]).

Одним из самых эффективных методов исследования квантовой статистики является аппарат функций Грина. Для их вычисления используются методы расщепления цепочки уравнений движения, вспомогательных

бозонных полей, резольвенты, численный метод Монте–Карло, метод вариационных производных, диаграммный метод и др.

Рассмотрим метод диаграммной техники, являющийся графическим представлением теории возмущений для функции Грина. Он позволяет получать физические величины, например, плотность электронных состояний, вычисленные в приближениях, полученных внутри этого метода. В теории слабого взаимодействия он основывается на разложении S -матрицы и теореме Вика. За гамильтониан нулевого приближения обычно принимается гамильтониан системы свободных частиц, который имеет билинейную форму. В случае же сильной связи взаимодействия необходимо включить в гамильтониан нулевого приближения, поэтому теорема Вика не применима.

Впервые Хаббард выполнил разложение в ряд теории возмущений для своей модели на основе кумулянтного разложения Кубо [73] и методики операторов Хаббарда [11]. Вакс, Ларкин и Пикин [74], Изюмов, Кассан-оглы и Скрябин [75] разработали диаграммную технику для спиновых операторов. Слободян и Стасюк [76], а также Зайцев [77] предложили диаграммную технику для операторов Хаббарда, базирующуюся на теореме Вика и кумулянтных разложениях, и способ вычисления функций Грина и корреляционных функций, построенных на таких операторах. Она была использована для изучения как магнитных, так и сверхпроводящих фаз модели (см., например, [78]). Аналогичный подход развивается для модели Хаббарда в работе [79] и для примесной модели Андерсона в [80].

Диаграммная техника сильной связи, основанная на более простой алгебре Ферми-операторов, впервые разработана в 1991 г. Мецнером [81] и независимо В.А. Москаленко [28, 29]. Последняя в отличие от диаграммной техники [81] позволяет сформулировать для функций Грина сильно коррелированных электронов уравнение типа Дайсона.

Другая диаграммная техника сильной связи предложена в работе [82]. Эта диаграммная техника развивается на основании формализма интегралов по траектории. Проблема невозможности использования теоремы Вика решается с помощью преобразования Хаббарда–Стратоновича, которое заключается в выражении части действия возмущения в модели Хаббарда через интеграл Гаусса по дополнительному полю Грассмана [83]. Теория возмущений, основанная на формализме интегралов по траекториям, также развивается в работе [84].

Диаграммная техника [85] сформулирована для среднего значения величины кулоновского отталкивания. Разложение по интегралу перескока выражается, как и в диаграммной теории Москаленко, в терминах одноузельных кумулянт операторов рождения и уничтожения электронов. Однако для функции Грина было получено уравнение типа Ларкина, которое было решено в однопетлевом приближении, в двумерном случае, а также в приближении соседних перескоков и в случае половинного заполнения зоны проводимости.

Диаграммная техника [28, 29] обходит невозможность применения теоремы Вика с помощью обобщения этой теоремы на небилинейные гамильтонианы. Небилинейность обуславливает возникновение неприводимых многочастичных локальных структур (одного атома или узла) – кумулянтов Кубо, называемых также неприводимыми функциями Грина. Они учитывают как спиновые, зарядовые, так и парные флуктуации системы. Согласно обобщенной теореме Вика (ОТВ) среднее от Т-произведения электронных операторов в представлении взаимодействия с гамильтонианом H_0 может быть представлено в виде суммы, которая содержит помимо парных одноузельных произведений операторов (отвечающих обычной теореме Вика) также неприводимые одноузельные многочастичные структуры – кумулянты Кубо. Кумулянты образуются по правилу вычитания из полной функции Грина тех структур, которые характерны для обычной теоремы Вика. В случае, когда гамильтониан H_0 описывает систему без взаимодействия, эти неприводимые структуры тождественно обращаются в нуль, а обобщенная теорема Вика переходит в обычную теорему Вика. Все знаковые множители слагаемых ОТВ определяются четностью перестановок фермиевских операторов, необходимых для образования из исходного произведения операторов данной структуры. При этом следует соблюдать условие, чтобы под знаком Т-произведений всегда оставалось одинаковое число операторов рождения и уничтожения электронов, если речь идет о нормальной системе, и четное число операторов для сверхпроводящей системы.

Функции Грина нулевого приближения, определяющие локальные или атомные свойства системы, можно точно вычислять с помощью методики Х-операторов (или операторов Хаббарда) либо на основе представления электронных операторов в терминах вспомогательных бозонных полей (slave-boson) [86–88].

На основании ОТВ исследовательская группа В.А. Москаленко в дальнейшем развивает

диаграммную технику для модели Хаббарда в целях изучения перехода металл–диэлектрик Мотта [89] и для исследования вопроса существования сверхпроводимости в модели в предположении половинного заполнения зоны [90, 91]. Для исследования сверхпроводящей фазы предполагается существование сверхпроводящих пар, и разложение в ряд теории возмущений по интегралу перескока также выполняется для аномальных функций Грина. Для функций Грина локализованных электронов удается получить уравнение типа Дайсона.

Соответствующее уравнение типа Дайсона для одноэлектронной функции Грина $G_\sigma(k, i\omega)$ имеет вид:

$$G_\sigma(k, i\omega) = \frac{\Lambda_\sigma(k, i\omega)}{1 - \varepsilon(k\omega)\Lambda_\sigma(k, i\omega)}, \quad (1)$$

где σ , k , ω – соответственно проекция спина, импульс электрона и матцубаровская частота; $\varepsilon(k)$ – Фурье-образ интеграла перескока, представляющий собой энергию электрона в зоне проводимости. Роль сильных межэлектронных корреляций, содержащихся в модели Хаббарда, проявляется в структуре величины $Z_\sigma(k/i\omega_0)$, которую авторы называют корреляционной функцией. Она содержит все флуктуации системы и связана с величиной Λ_σ (массовым оператором) равенством:

$$\Lambda_\sigma(k, i\omega) = G_\sigma^0(k, i\omega) + Z_\sigma(k, i\omega) \quad (2)$$

здесь $G_\sigma^0(k, i\omega)$ – функция Грина нулевого приближения модели Хаббарда.

В самом простом приближении (Хаббарда–I или среднего поля) все неприводимые функции Грина в (2) равны нулю. В этом приближении уравнение типа Дайсона имеет вид:

$$G_\sigma^I(k, i\omega) = \frac{G_0(k, i\omega)}{1 - \varepsilon(k, i\omega)G_0(k, i\omega)}. \quad (3)$$

Суммирование, учитывающее двухчастичный корреляционный эффект, лестничное суммирование продемонстрированы, например, в работе [92]. Это приближение является обобщением приближения случайных фаз теории слабой связи. Лестничные диаграммы для функции $Z_\sigma(k, i\omega)$ повторяют бесконечное число раз двухчастичные неприводимые функции Грина.

В аппроксимации Хаббарда–I, обычно достаточной для описания нормальной фазы модели Хаббарда, была получена система уравнений, определяющая сверхпроводящую фазу модели Хаббарда [90]. По-видимому, это уравнение не имеет решения, и авторы пришли к выводу, что сверхпроводящая фаза не может реализоваться при данном приближении. В другой работе рассматривается модель Хаббарда в случае

отклонения от половинного заполнения зоны, а также получено уравнение, определяющее температуру сверхпроводящего перехода [91].

Диаграммная техника также была развита для анализа примесной [93] и периодической моделей Андерсона [66, 94–97], которая представляет особый интерес при исследовании сверхпроводимости. При этом для подсистемы сильно коррелированных локализованных электронов применяется обобщенная теорема Вика, а для подсистемы электронов проводимости обычная теорема Вика. Для одночастичных функций Грина электронов проводимости были получены уравнения Дайсона и уравнения типа Дайсона для подсистемы сильно коррелированных локализованных электронов. В работе [98] при исследовании сверхпроводящего состояния периодической модели Андерсона для равноправного описания как нормальных, так и аномальных функций Грина вводится дополнительное зарядовое квантовое число, которое отличает операторы рождения электронов от операторов уничтожения. Полученные уравнения допускают существование как синглетной, так и триплетной сверхпроводимости.

И. Г. Медведев использует ОТВ для определения термодинамического потенциала примесной модели Андерсона [99]. В работе [100], посвященной рассмотрению конкурирующих фаз – состоянию волны спиновой плотности антиферромагнетизма и сверхпроводимости (обусловленной корреляциями), получен удивительный результат: появляется триплетная сверхпроводимость при условии сосуществования синглетной сверхпроводимости и антиферромагнетизма.

МЕЖОРБИТАЛЬНЫЙ КОРРЕЛЯЦИОННЫЙ ЭФФЕКТ И ВЗАИМОВЛИЯНИЕ СИЛЬНЫХ МЕЖЭЛЕКТРОННОГО И ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Межорбитальный корреляционный эффект

Значительные результаты в исследовании роли связи Хунда (обменного взаимодействия Хунда, или интеграла Хунда) I_H в определении перехода металл–диэлектрик Мотта–Хаббарда и сверхпроводимости в многоорбитальных системах достигнуты благодаря развитию метода ДТСП. Так, с помощью ДТСП исследуется роль связи Хунда в переходе Мотта в рамках двухзонной модели Хаббарда при $T = 0$ с использованием метода численной ренормгруппы Вильсона [101]. В работе [102] с помощью приближения обобщенного среднего поля была

вычислена одночастичная функция Грина и энергетический спектр квазичастиц, исследуется переход металл–диэлектрик при различных целочисленных значениях концентрации электронов.

Путем комбинирования ДТСП с методом точной диагонализации [103] и квантового метода Монте–Карло [104] исследуется стабильность металлического состояния в двухорбитальной модели Хаббарда при половинном заполнении зоны. Изучено влияние внутризонных и межзонных кулоновских взаимодействий совместно со связью Хунда на поведение перехода металл–диэлектрик. Обнаружено, что когда внутризонное и межзонное кулоновские взаимодействия почти равны, то Ферми-жидкостное состояние стабилизируется за счет орбитальных флуктуаций вплоть до достаточно больших взаимодействий.

Проанализирована двухорбитальная модель Хаббарда при произвольном заполнении зоны с помощью подхода функционала собственной энергии [105] и обсуждается конкуренция между металлическим и диэлектрическим состояниями в системах с одинаковой и разной шириной зоны. Установлено, что диэлектрическая фаза Мотта реализуется при соизмеримых заполнениях зон. Кроме того, выясняется, что орбитально-селективная фаза Мотта, в которой одна орбиталь локализована, а другая нет, стабилизируется даже при частичном заполнении зон в системе с различной шириной зоны. Путем комбинирования методов ДТСП и точной диагонализации была проанализирована многоорбитальная модель Хаббарда [106].

Модель Хаббарда с двукратным и четырехкратным орбитальным вырождением проанализирована и в работе [107] с использованием метода вспомогательных бозонных полей для исследования роли связи Хунда в переходе Мотта, реализуемом в ферропниктидах. Установлено, что в двукратно вырожденной модели Хаббарда переход Мотта также осуществляется при половинном заполнении зоны. Природа моттовского диэлектрика зависит от отношения U/U' (где U , U' – внутри- и межорбитальное взаимодействия соответственно). При $U > U'$ изолятор представляет собой высокоспиновое моттовское состояние (триплетное) с нулевой двойной заселенностью. При $U' > U$, напротив, изолятор является синглетным моттовским состоянием с ненулевым двойным заселением. При сильной связи Хунда происходит переход в локализованное высокоспиновое состояние моттовского изолятора, а при нулевой и слабой – в среднеспиновое изолирующее состояние, что можно рассматри-

вать как орбитально-селективный переход металл–изолятор. Низкоспиновое орбитально-моттовское состояние неустойчиво по отношению к зонному изолятору. В случае, когда орбитальное вырождение снимается, его можно рассматривать как частный случай орбитально-поляризованного изолятора.

Роль интеграла Хунда I_H была изучена в рамках γ -модели, введенной в контексте сверхпроводимости вблизи квантовой критической точки (см. [108] и цитируемую литературу), а также других моделей магнитных примесей и квантовых точек, таких как примесные модели Кондо и Андерсона с двукратным вырождением [109]. Квантовым методом Монте–Карло изучена двукратно вырожденная модель Андерсона [110]. Показано, что при слабом или среднем взаимодействии основное состояние остается Ферми-жидкостью. Кроме того, найдено, что внутриатомное обменное взаимодействие приводит к возникновению притяжения между электронами зоны проводимости с параллельными спинами в одном орбитальном состоянии.

Исследование модели Андерсона с двукратным вырождением в работах [111, 112] привело к различным предсказаниям относительно поведения температуры Кондо как функции от I_H . Вопрос исследовался путем применения к некоторым моделям комбинированного метода численной ренормгруппы и перенормированной теории возмущений. Исследована также фазовая диаграмма примесной модели Андерсона с использованием метода численной ренормгруппы Вильсона и показано, что физическое поведение примесной модели Андерсона в окрестности нетривиальной неподвижной точки напоминает поведение двухпримесной модели Кондо. Эта неподвижная точка находится в непосредственной близости к переходу металл–диэлектрик при изменении интеграла Хунда.

Системы с одновременно сильным взаимодействием друг с другом и с фононами

Роль электрон-фононного взаимодействия в системах, в которых имеется как сильная электрон-фононная связь, так и сильное кулоновское взаимодействие локализованных электронов, анализируется в основном в рамках модели Хаббарда–Холстейна, которая была исследована разными методами. Например, методом уравнений движения для двувременной запаздывающей функции Грина [113], ренормгруппы матрицы плотности [114], квантовым методом Монте–Карло [115] и др.

Исследование перехода Мотта–Хаббарда в Ti_2O_3 в рамках модели Хаббарда–Холстейна выявило, что для с.с. и в.с.с. зонных структур с сильной связью и для доминирующей моды

оптических фононов, равной половине вектора обратной решетки, при возрастании температуры в системе реализуется непрерывный переход металл–диэлектрик. Он происходит в результате перекрытия пиков в функции плотности состояний при увеличении температуры [113]. Изменение удельной теплоемкости также характерно для перехода изолятор–металл.

Влияние электрон-фононного взаимодействия на переход металл–диэлектрик и его конкуренция с электрон-электронным были изучены как в случае половинного заполнения зоны [114, 115], так и отклонения от него. При доминировании взаимодействия локализованных электронов друг с другом U переход осуществляется в моттовский изолятор, а если доминирует величина электрон-фононного взаимодействия g , то переход осуществляется в так называемое биполярное локализованное состояние (биполярный изолятор). В последнем случае локализованные электроны проявляют тенденцию образовывать биполярон, то есть пару сильно связанных между собой электронов за счет общих фононов (возбужденных ими). Исследование фазовой диаграммы модели Хаббарда–Холстейна также показало, что в случае половинного заполнения зоны основное состояние является антиферромагнитным изолятором при доминировании U и состоянием волны зарядовой плотности (или биполярного изолятора) при доминировании g [115].

Касательно роли электрон-фононного взаимодействия в сверхпроводниках, в которых эта связь велика, теоретические исследования демонстрируют как благоприятствующее спариванию электронов влияние, так и возможный поляронный (биполярный) механизм сверхпроводимости. Так, в работе [116] найдено, что электрон-фононное взаимодействие может индуцировать s -компоненту в d -волновую яму в $(d+s)$ -форме с анизотропией взаимодействия и в $(d+is)$ -форме без анизотропии соответственно. Однако в любом случае T_c не увеличивается по сравнению с чистым d -спариванием (без взаимодействия с фононами). В то же время анизотропное взаимодействие фононов может значительно усиливать само d -спаривание и, следовательно, критическую температуру вместе с взаимодействием спиновых флуктуаций. Интересно, что спаривание этого типа (d -волновые антиферромагнитные спиновые флуктуации + электрон-фононное взаимодействие) демонстрирует сильно уменьшенный изотопический коэффициент, несмотря на значительное усиление T_c за счет фононного взаимодействия.

Показано [117], что для одномерного электронного газа с сильным электрон-электронным взаимодействием и слабым притягательным косвенным электрон-фононным взаимодействием сверхпроводящие флуктуации могут происходить при высоких температурах. При этом доминантный вклад также принадлежит электрон-электронному отталкиванию. Найдена и сверхпроводящая фаза модели, которая возникает, когда оба взаимодействия малы.

Этот вопрос требует отдельного подхода при рассмотрении соединений класса ферропниктидов и феррохалькогенидов, поскольку возникают разные представления о механизме появления сверхпроводимости. Одно из них заключается в том, что в системах, в которых имеются электронные зоны на поверхности Ферми, основным механизмом взаимодействия при возникновении сверхпроводимости являются спиновые флуктуации. В других соединениях (с другой базовой сверхпроводящей плоскостью) такой механизм не может быть реализован из-за отсутствия вложенности в электронном энергетическом спектре и отсутствия магнитного обменного взаимодействия.

В железосодержащих сверхпроводниках влияние электрон-фононного взаимодействия на сверхпроводящие характеристики было изучено методом ренормгруппы [118]. Исследование показало, что в механизме спаривания электронов доминантную роль играет взаимодействие между электронами (в том числе в различных орбитальных состояниях). А «аномальный» изотопический эффект объясняется многозонностью – включением субдоминантных взаимодействий (межзонных и внутризонных). Примечательно также то, что знак показателя степени изотопического коэффициента α зависит от того, подвергаются ли межзонные и/или внутризонные взаимодействия изотопным заменам.

Сильно коррелированные электронные системы при сильном взаимодействии с фононами также были проанализированы с помощью диаграммной техники сильной связи в рамках модели Хаббарда–Холстейна [25, 119–120]. Этот подход использует каноническое преобразование Ланг–Фирсова, которое позволяет исключить линейные по фононной координате члены гамильтониана и сводит задачу к рассмотрению движущихся поляронов (электронов, окруженных фононными облаками). При этом возникает новая группа средних производений, сформированная из операторов фононных облаков. Для этой группы была предложена обобщенная теорема Вика [119, 120].

Исследование модели Хаббарда–Холстейна позволило предложить новый механизм сверхпроводимости – поляронный [25]. Он основывается на предположении о спаривании поляронов путем обмена фононными облаками. Под поляроном в общепринятом смысле понимают квазичастицу, возникающую в результате динамического взаимодействия носителя заряда (как правило, электрона) с кристаллической средой. В этой работе получено уравнение, определяющее критическую температуру в предположении высокого значения частоты коллективной моды и случая, близкого к половинному заполнению зоны. Параметры, определяющие критическую температуру: ω_c ($\omega_c \geq W/4$) и $\varepsilon = 0$ (случай половинного заполнения зоны). В пределе сильной связи получено значение критической температуры порядка частоты коллективной моды $\omega_c/3$. В работе [121] обсуждается спаривание электронов в присутствии акустических фононных облаков и определяется критическая температура сверхпроводящего фазового перехода для частного случая $U < 0$.

Исследования поляронной сверхпроводимости в модели Хаббарда–Холстейна [122] показали, что остаточное кинематическое взаимодействие, пропорциональное квадрату энергии перескока полярона между поляронами и фононами создает условие для спаривания поляронов. Авторы пришли к выводу, что сверхпроводящая нестабильность в d -волновом канале возможна при низких температурах перехода и достигает своего максимума в регионе перехода (*cross-over*) от большого полярона к малому. Показано, что s -волновая нестабильность в свою очередь невозможна, когда эффективное одноузельное взаимодействие поляронов отталкивающее.

Основные результаты последовательного изучения электрон-фононного взаимодействия в кристаллах в пределе сильной связи и предположении возможного поляронного механизма сверхпроводимости можно найти в работах [23, 24]. В обзорах показано, что образование малых поляронов и биполяронов обеспечивает ряд новых физических явлений как в нормальном, так и в сверхпроводящем состояниях системы, и рассматриваются два механизма сверхпроводимости. Первый возникает из-за куперовского спаривания малых поляронов в импульсном пространстве (поляронная сверхпроводимость). Второй механизм связан со спариванием поляронов в реальном пространстве, что приводит к образованию локализованного биполярона со сверхпроводимостью, аналогичной сверхтекучести.

ВЫВОДЫ

Переход металл–диэлектрик Мотта и высокотемпературная сверхпроводимость – явления, ассоциируемые с физикой сильно коррелированных систем. Они реализуются в таких материалах, как соединения переходных металлов различной структуры, молекулярные органические кристаллы и др. Эти явления невозможно описать с помощью лишь классических теорий, таких как зонная теория Уилсона–Блоха или теория сверхпроводимости БКШ. Большинство исследователей сходятся во мнении, что в формировании этих явлений важную роль играет эффект сильных корреляций, то есть сильное взаимодействие электронов, электронов с фононами и их взаимовлияние; в многоорбитальных системах особую роль играют процессы, обусловленные параметром связи Хунда, внутри- и межорбитальными электронными взаимодействиями.

То обстоятельство, что эти материалы являются узкозонными системами, привело к представлению, что как транспортные, так и сверхпроводящие свойства этих материалов в первую очередь определяются атомистическими характеристиками. Эти явления рассматриваются в рамках модельных гамильтонианов сильно коррелированных систем, таких как модель Хаббарда или примесная модель Андерсона. Зачастую в этих системах имеется сильная электрон-фононная связь или они являются многоорбитальными системами. Орбитальное вырождение обуславливает появление обменного взаимодействия Хунда. Последнее, наряду с электрон-фононным взаимодействием, может играть существенную роль как в высокотемпературной сверхпроводимости, в частности, в механизме образования сверхпроводящих электронных пар, так и в переходе металл–диэлектрик Мотта. При этом у различных классов высокотемпературных сверхпроводников эти механизмы могут отличаться. Для выяснения роли электрон-фононного взаимодействия в системах, где оно также велико, модельные гамильтонианы СКС часто дополняются гамильтонианом Холстейна, а в многоорбитальных системах учитываются взаимодействие и переходы электронов в различных орбитальных состояниях, а также наличие внутриатомного обменного взаимодействия Хунда.

Наибольшие успехи в исследовании СКС достигнуты на основании теории динамического среднего поля в комбинации с теорией производящего функционала (ДТСП + ТПФ), а также метода численной ренормгруппы.

Еще одним наиболее эффективным остается пертурбативный метод вычисления функций Грина, в том числе и его графическое представление, позволяющее суммировать некие «главные» поправки к функции Грина нулевого приближения. Он основывается на теореме Вика для статистических средних упорядоченного во времени произведения операторов, а одним из способов суммирования «главных» диаграмм является уравнение Дайсона, выражающее полную функцию Грина через функцию Грина нулевого приближения и массовый оператор. В случае сильной связи обычная теорема Вика не применима из-за небилинейной формы гамильтониана основного приближения, в который необходимо включать члены, ответственные за сильные взаимодействия.

Предложены различные пути решения этой проблемы: 1) с помощью кумулянтного разложения Кубо и техники операторов Хаббарда удастся построить теорию возмущений и диаграммную технику на основе операторов Хаббарда; 2) используя преобразование Хаббарда–Стратоновича, которое заключается в выражении части возмущения действия в модели Хаббарда в виде интеграла Гаусса по дополнительному полю Грассмана; 3) с помощью обобщенной теоремы Вика. Техника этого типа, предложенная В.А. Москаленко и независимо Мецнером, работает с простой алгеброй Ферми-операторов, а диаграммная техника Москаленко позволяет также получить уравнение типа Дайсона. Последняя диаграммная техника успешно развита для анализа модели Хаббарда, примесной и периодической моделей Андерсона, а также модели Хаббарда–Холстейна и др. Для исследования явления перехода Мотта рассмотрена нормальная фаза модели, а также сверхпроводящая фаза – для изучения возможного появления сверхпроводимости и механизмов образования куперовских пар (появления эффективного притяжения между электронами). Невозможность использования теоремы Вика решается с помощью обобщенной теоремы Вика. Когда взаимодействие слабо, эта теорема переходит в обычную теорему Вика. Это обобщение основывается на статистическом кумулянтном разложении Кубо. Помимо членов, соответствующих обычной теореме Вика, возникают многочастичные структуры, неприводимые функции Грина или кумулянты Кубо, в которых отражены все флуктуации системы, обусловленные взаимодействием. Для функций Грина электронов и фононов различных моделей получены уравнения типа Дайсона. Массовый оператор в этом уравнении содержит сумму неприводимых функций Грина. Простейшие

суммирования, которые были выполнены, – это суммирование диаграмм цепочечного типа, соответствующее приближению Хаббарда–I или среднего поля, а также лестничное суммирование, производящее суммирование простейших двухчастичных неприводимых функций Грина и являющееся обобщением приближения случайных фаз теории слабой связи.

Системы, в которых имеется сильное взаимодействие электронов друг с другом, а также с фононами, исследуются в основном в рамках модели Хаббарда–Холстейна. Показано, что при определенных значениях доминирующей фононной моды в модели возможна реализация перехода металл–диэлектрик Мотта при возрастании температуры. В зависимости от того, какое взаимодействие является доминирующим в системе, а также от заполнения зоны n наблюдается различная физическая картина. Система находится в состоянии антиферромагнитного моттовского изолятора в случае, когда доминирует кулоновское взаимодействие U , либо в так называемом биполярном локализованном состоянии (или в состоянии волны зарядовой плотности) в случае доминирования константы электрон-фононного взаимодействия g .

В сверхпроводящих системах, в которых электрон-фононное взаимодействие предполагается значительным, исследования демонстрируют, что оно либо несущественно влияет на сверхпроводимость, либо благоприятствует d -спариванию электронов. Предложены два механизма появления сверхпроводящих электронных пар в таких системах: поляронный и биполяронный. При исследовании модели Хаббарда–Холстейна в системах с сильным взаимодействием с оптическими фононами с помощью диаграммной техники предложен поляронный механизм сверхпроводимости, который основывается на предположении о спаривании поляронов путем обмена фононными облаками, а в случае взаимодействия с акустическими фононами в модели Хаббарда этим же методом показано, что вклад от поляронов несуществен.

Роль обменного интеграла Хунда I_H в основном исследовалась также в рамках метода ДТСП. При изучении модели Хаббарда с двукратным вырождением этим методом с использованием численной ренормгруппы, а также методами вспомогательных бозонных полей найдено, что природа моттовского диэлектрика зависит от отношения U/U' (где U , U' – внутри- и межорбитальное взаимодействия соответственно).

Связь Хунда также имеет отношение к объяснению необычного изотопического эффекта в

многоорбитальных системах типа железосодержащих сверхпроводников. Роль этой связи исследована в рамках магнитных примесей и квантовых точек, таких как γ -модель, модель Кондо и примесная модель Андерсона с двукратным вырождением, что привело к различным предсказаниям поведения в этих системах температуры Кондо как функции от I_H .

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках проекта ANCD 20.80009.5007.07 (2020–2023) Tehnologii cuantice hibride avansate (Передовые квантовые гибридные технологии).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Автор заявляет, что у нее нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Koller, W., Meyer, D., Ono, Y. and Hewson, A.C., First- and second-order phase transitions in the Holstein-Hubbard model, *Europhys Lett.*, 2004, vol. 66, no. 4, p. 559. <https://doi.org/10.1209/epl/i2003-10228-6>
2. Schubin, S.P. and Wonsowskii, S.V., On the electron theory of metals, *Proc. Roy. Soc.*, 1934, vol. A145, no. 854, p. 159.
3. Schubin, S. and Vonsowsky, S., Zur Elektronentheorie der Metalle I, *Phys. Zs. UdSSR*, 1935, vol. 7, no. 1, p. 292.
4. Schubin, S. and Vonsowsky, S., Zur Elektronentheorie der Metalle II, *Phys. Zs. UdSSR*, 1936, т.10, no. 3, p. 348.
5. Боголюбов, П.И., Тябликов, Р.В., Об одном применении теории возмущений к полярной модели металла, *ЖЭТФ*, 1949, т. 19, № 3, с. 251.
6. Боголюбов, П.И., Тябликов, Р.В., Приближенный метод нахождения низших энергетических уровней электронов в металле, *ЖЭТФ*, 1949, т. 19, с. 256.
7. Hubbard, J., Electron correlations in narrow energy bands. *Proc. Roy. Soc. A*, 1963, vol. 276, no. 1365, p. 238. <https://doi.org/10.1098/rspa.1963.0204>
8. Hubbard, J., Electron correlations in narrow energy bands II. The degenerate band case, *Proc. Roy. Soc. A*, 1964, vol. 277, no. 1369, p. 237. <https://doi.org/10.1098/rspa.1964.0019>
9. Hubbard, J., Electron correlations in narrow energy bands III. An improved solution, *Proc. Roy. Soc. A*, 1964, vol. 281, no. 1386, p. 401. <https://doi.org/10.1098/rspa.1964.0190>
10. Hubbard, J., Electron correlations in narrow energy bands IV. The atomic representation, *Proc. Roy. Soc. A*, 1965, vol. 285, no. 1403, p. 542. <https://doi.org/10.1098/rspa.1965.0124>

11. Hubbard, J., Electron correlations in narrow energy bands V. A perturbation expansion about the atomic limit, *Proc. Roy. Soc. A*, 1967, vol. 296, no. 1444, p. 82. <https://doi.org/10.1098/rspa.1967.0007>
12. Hubbard, J., Electron correlations in narrow energy bands VI. The connection with many-body perturbation theory, *Proc. Roy. Soc. A*, 1967, vol. 296, no. 1444, p. 100. <https://doi.org/10.1098/rspa.1967.0008>
13. Anderson, P.W., Localized magnetic states in metals, *Phys. Rev.*, 1961, vol. 124, no. 1, p. 4. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.124.41>
14. Richard, P., Sato, T., Nakayama, K., Souma, S., et al., Angle-resolved photoemission spectroscopy of the Fe-based $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ high temperature superconductor: evidence for an orbital selective electron-mode coupling, *Phys. Rev. Lett.*, 2009, vol. 102, art. ID 047003. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.047003>
15. Oshnana, A., Saito, S., Hamada N. and Iyamoto, Y., Electronic structures of C_{60} fullerides and related materials, *J. Phys. Chem. Solids*, 1992, vol. 53, no. 11, p. 1457. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(92\)90239-A](https://doi.org/10.1016/0022-3697(92)90239-A)
16. Georges, A., de' Medici, L. and Mravlje, J., Strong correlations from Hund's coupling, *Annual Rev. Cond. Matter Phys.*, 2013, vol. 4, no. 1, p. 137. <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-020911-125045>
17. Gweon, Gh., Sasagawa, T., Zhou, S., et. al., An unusual isotope effect in a high-transition-temperature superconductor, *Nature*, 2004, vol. 430, p. 187. <https://doi.org/10.1038/nature02731>
18. Franck, J.Pm., *Physical Properties of High Temperature Superconductors IV*, Ginsberg, D.M. (ed.), Singapore: World Scientific, 1994, p. 189.
19. Wen-min, H. and Hsiu-hau, L., Anomalous isotope effect in iron-based superconductors, *Nature Sci. Rep.*, 2019, vol. 9, no. 1, p. 5547. <https://doi.org/10.1038/s41598-019-42041-z>
20. Liu, R.H., Wu, T., Wu, G., Chen, H., et al., A large iron isotope effect in $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ and $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$, *Nature*, 2009, vol. 459, p. 64. <https://doi.org/10.1038/nature07981>
21. Shirage, P.M., Kihou, K., Mियाqzawa, K., Lee, Ch.-H., et al., Inverse iron isotope effect on the transition temperature of the $(\text{Ba}, \text{K})\text{Fe}_2\text{As}_2$ superconductor, *Phys. Rev. Lett.*, 2009, vol. 103, no. 25, art. ID 257003. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.257003>
22. Khasanov, R., Bendele, M., Bussmann-Holder, A. and Keller, H., Intrinsic and structural isotope effects in iron-based superconductors, *Phys. Rev. B*, 2010, vol. 82, no. 21, art. ID 21250. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.212505>
23. Александров, А.С., Кребс, А.Б., Поляроны в высокотемпературных сверхпроводниках, *УФН*, 1992, т. 162, № 5, с. 1. Alexandrov, A.S. and Krebs, A.B., Polarons in high-temperature superconductors, *Sov. Phys. Usp.* 1992, vol. 35, no. 5, p. 345.
24. Alexandrov, A.S., Superconducting polarons and bipolarons. In: *Polarons in Advanced Materials*. Alexandrov, A.S. (eds.). Springer Series in Materials Science. Dordrecht: Springer, 2007, vol. 103. <https://doi.org/10.1007/978-1-4020-6348-0>
25. Moskalenko, V.A., Entel, P., Marinaro, M. and Digor, D.F., Strong interaction of correlated electrons with phonons: Exchange of phonon clouds by polarons, *JETP*, vol. 97, no. 3, p. 632.
26. Holstein, T., Studies of polaron motion: Part I. The molecular-crystal model, *Ann. Phys.*, 1969, vol. 8, no. 3, p. 325. [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(59\)90002-8](https://doi.org/10.1016/0003-4916(59)90002-8)
27. *Theoretical Methods for Strongly correlated electrons*, CRM Series in Mathematical Physics. Sénéchal, D., Tremblay, A.-M., Bourbonnais, C. (Eds.). New York: Springer-Verlag, 2004.
28. Москаленко, В.А., Обобщенная теорема Вика для электронных систем с сильными корреляциями. *Вопросы квантовой теории конденсированных сред*, Ред. Хаджи, П.И., и др. Кишинев: Штиинца, 1990, с. 122.
29. Владимир, М.И., Москаленко, В.А., Диаграммная техника для модели Хаббарда, *ТМФ*, 1990, т. 82, № 3, с. 428; Владимир, М.И. and Moskalenko, V.A., Diagram technique for the Hubbard model, *Theor. Math. Phys.*, 1990, vol. 82, no. 3, p. 301. <https://doi.org/10.1007/BF01029224>
30. Вонсовский, Р.В., Изюмов, Ю.А., Курмаев, Э.З., *Сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений*. М.: Наука, 1977. 384 с.
31. De Boer, J.H. and Verwey, E.J.W., Semi-conductors with partially and with completely filled 3d-lattice bands, *Proc. Phys. Soc.*, 1937, vol. 49, no. 59, p. 59. <https://doi.org/10.1088/0959-5309/49/4S/307>
32. Mott, N.F., The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals, *Proc. Phys. Soc. A*, 1949, vol. 62, p. 416. <http://doi.org/10.1088/0370-1298/62/7/303>
33. Mott, N.F. and Peierls, R., Discussion of the paper by de Boer and Verwey, *Proc. Phys. Soc.*, 1937, vol. 49, no. 4S, p. 72. <https://doi.org/10.1088/0959-5309/49/4S/308>
34. Mott, N.F., On the transition to metallic conduction in semiconductors, *Canad. J. Phys.*, 1956, vol. 34, no. 12A, p. 1356. <https://doi.org/10.1139/p56-151>
35. Mott, N.F., The transition to the metallic state, *Philosoph. Mag.*, 1961, vol. 6, no. 62, p. 287. <https://doi.org/10.1080/14786436108243318>
36. Мотт, Н.Ф., *Переходы металл-изолятор*. М.: Наука, 1979. 342 с.
37. Imada, M., Fujimori, A. and Tokura, Y., Metal-insulator transitions, *Rev. Modern Phys.*, 1998, vol. 70, no. 4, p. 1039. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.43.1892>

38. Steglich, F., Aarts, J., Bredl, C.D., Lieke, W.J., et. al., Superconductivity in the presence of strong Pauli paramagnetism: CeCu_2Si_2 , *Phys. Rev. Lett.*, 1979, vol. 43, no. 25, p. 1892. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.43.1892>
39. Stewart, G.R., Heavy-fermion systems, 1984, *Rev. Mod. Phys.*, vol. 56, no. 4, p. 755. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.56.755>
40. Bednorz, J.G. and Müller, K.A., Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system, *Z. Physik B.*, 1986, vol. 64, no. 2, p. 189. <https://doi.org/10.1007/BF01303701>
41. Wu, M.K., Asburn, J.R., Torng, C.J., Hor, P.H., et. al., Superconductivity at 93 K in a new mixed-phase Y-Ba-Cu-O compound system at ambient pressure, *Phys. Rev. Lett.*, 1987, vol. 58, no. 9, p. 908. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.908>
42. Putilin, S.N., Antipov, E.V., Chmaissem, O. and Marezio, M., Superconductivity at 94 K in $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$, *Nature*, 1993, vol. 362, p. 226.
43. Абакумов, А.М., Антипов, Е.В., Ковба, Л.М., Копнин, Е.М., и др., Сложные оксиды со структурами когерентного срастания, *Успехи химии*, 1995, т. 64, № 8, с. 769. *Russ. Chem. Rev.*, 1995, vol. 64, no. 8, p. 769.
44. Somayazulu, M., Ahart, M., Mishra A. K. Geballe, Z.M., et. al., Evidence for superconductivity above 260 K in lanthanum superhydride at megabar pressures, *Phys. Rev. Lett.*, 2019, vol. 122, no. 2, art ID 027001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.027001>
45. Tanigaki, K., Ebbesen, T., Saito, S., Mizuki, J., et al., Superconductivity at 33 K in CsxRbyC60 , *Nature*, 1991, vol. 352, p. 222. <https://doi.org/10.1038/352222a0>
46. Palstra, T.T.M., Zhou, O., Iwasa, Y., Sulewski, P.E., et. al., Superconductivity at 40K in cesium doped C_{60} , *Solid State Commun.*, 1995, vol. 93, no. 4, p. 327. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(94\)00787-X](https://doi.org/10.1016/0038-1098(94)00787-X)
47. Reich, S., Leitus, G., Tssaba, Y., Levi, Y., et al., Localized high- T_c superconductivity on the surface of Na-doped WO_3 , *J. Supercond.*, 2000, vol. 13, p. 855. <https://doi.org/10.1023/A:100786771051>
48. Takahashi, T., Sato, T., Souma, S., Muranaka, T., et. al., High-resolution photoemission study of MgB_2 T_c , *Phys. Rev. Lett.*, 2001, vol. 86, no. 21, art. ID 4915. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.4915>
49. Kamihara, Y., Takumi, W., Hirano, M. and Hosono, H., Iron-based layered superconductor $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$ ($x = 0.05-0.12$) with $T_c = 26$ K., *Am. Chem. Soc.*, 2008. vol. 130, no. 11, p. 3296. <https://doi.org/10.1021/ja800073m>
50. Meier, W.R., Ding, Q., Kreyssig, A., Bud'ko, S.L., et al., Hedgehog spin-vortex crystal stabilized in a hole-doped iron-based superconductor, *npj Quant. Mater.*, 2018, vol. 3, no. 5. <https://doi.org/10.1038/s41535-017-0076-x>
51. Bardeen, J., Cooper, L.N. and Schrieffer, L.R., Microscopic theory of superconductivity, *Phys. Rev.*, 1957, vol. 106, no. 1, p. 162. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.106.162>
52. Bardeen, J., Cooper, L.N. and Schrieffer, L.R., Theory of superconductivity, *Phys. Rev.*, 1957, 108, no. 5, p. 1175. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.108.1175>
53. Боголюбов, Н.Н., О новом методе в теории сверхпроводимости. I, *ЖЭТФ*, 1958, т. 34, с. 58. Bogoliubov, N.N., A new method in the theory of superconductivity. I. *Sov. Phys. JETP*, 1958, vol. 34, p. 41.
54. Горьков, Л.П., Об энергетическом спектре сверхпроводников, *ЖЭТФ*, 1958, т. 34, № 3, с. 735. Gor'kov, L.P., On the energy spectrum of superconductors, *Sov. Phys. JETP*, 1958, vol. 7, no. 3, p. 505.
55. Боголюбов, Н.Н., Толмачев, В.В., Ширков, Д.В., *Новый метод в теории сверхпроводимости*. М.: Изд. АН СССР, 1958, 128 с.
56. Москаленко, В.А., Сверхпроводимость металлов с учетом перекрытия энергетических полос, *Физика металлов и металловедение*, 1959, т. 8, № 4, с. 503.
57. Suhl, H., Matthias, B.T. and Walker, L.R., Bardeen-Cooper-Schrieffer theory of superconductivity in the case of overlapping bands, *Phys. Rev. Lett.*, 1959, vol. 3, p. 552. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.3.552>
58. Palistrant, M.E. and Ursu, V.A., Thermodynamic and magnetic properties of superconductors with anisotropic energy spectrum, MgB_2 , *J. Supercond. Nov. Magn.*, 2008, vol. 21, no. 3, p. 171. <https://doi.org/10.1007/s10948-008-0312-5>
59. Skornyakov, S.L., Efremov, A.V., Skorikov, N.A., Korotin, M.A., et. al., Classification of the electronic correlation strength in the iron pnictides: The case of the parent compound BaFe_2As_2 , *Phys. Rev. B*, 2009, vol. 80, no. 9, art. ID 092501. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.092501>
60. Scalapino, D.J., Superconductivity and spin fluctuations, *Journal of Low Temperature Physics*, vol. 117, no. p. 179. doi: <https://doi.org/10.1023/A:1022559920049>
61. Hirsch, J.E., Attractive interaction and pairing in fermion systems with strong on-site repulsion, *Phys. Rev. Lett.*, 1985, vol. 54, no. 12, p. 1317. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.54.1317>
62. Scalapino, D.J., Oh, E.L. and Hirsch, J.E., D-wave pairing near a spin-density-wave instability, *Phys. Rev. B*, 1986, vol. 34, no. 11, p. 8190. <https://doi.org/10.1103/physrevb.34.8190>
63. Anderson, P.W., The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity, *Science*, 1987, vol. 235, no. 4793, p. 1196. <https://doi.org/10.1126/science.235.4793.1196>
64. Bastide, C., Repulsion-induced superconductivity in a multiband Hubbard model, *Phys. Rev. B*, 1990, vol. 41, p. 807. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.807> . Erratum: *Phys. Rev. B*, 1991, vol. 43, p. 1210.

65. Bastide, C. and Lacroix, C., The Anderson lattice in the weak-hopping limit: superconductivity induced by dynamic interactions, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 1988, vol. 21, p. 3557. <https://doi.org/10.1088/0022-3719/21/19/009>
66. Дигор, Д.Ф., Ентел, П., Маринаро, М., Москаленко, В.А. и др., О возможности образования связанных пар в периодической модели Андерсона, *ТМФ*, 2001, vol. 127, no. 2, p. 304; Digor, D.F., Entel, P., Marinaro, M., Moskalenko, V.A., et al., The possibility of forming coupled pairs in the periodic Anderson model, *Theor. Math. Phys.*, 2001, vol. 127, no. 2, p. 664. <https://doi.org/10.1023/A:1010401720592>
67. Qin, M., Chung, Ch.-M., Shui, H., Vitali, E., et al., Absence of superconductivity in the pure two-dimensional Hubbard model, *Phys. Rev. X*, 2020, vol. 10, no. 3, art. ID 031016. <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.10.031016>
68. Dong, X., Del Re, L., Toschi, A. and Gull, E., Mechanism of superconductivity in the Hubbard model at intermediate interaction strength, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, 2022, vol. 19, no. 33, p. 1. <https://doi.org/10.1073/pnas.2205048119>
69. Vollhardt, D., Byczuk, K. and Kollar, M., Dynamical Mean-Field Theory. In: *Strongly Correlated Systems*. Avella, A. and Mancini, F. (eds). Springer Series in Solid-State Sciences, vol. 171. Heidelberg: Springer, 2012, p. 203. https://doi.org/10.1007/978-3-642-21831-6_7
70. Kotliar, G., Savrasov, S.Y., Haule, K., Oudovenko, V.S., et al., Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory, *Rev. Mod. Phys.*, 2006, vol. 78, no. 3, p. 865. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.78.865>
71. Georges, A., Kotliar, G., Krauth, W. and Rozenberg, M.J., Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions, *Rev. Mod. Phys.*, 1996, 8, vol. 8, no. 13, p. 13. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.68.13>
72. Kotliar, G. and Vollhardt, D., Strongly correlated materials: insights from dynamical mean-field theory, *Phys. Today*, 2004, vol. 57, no. 3, p. 53. <https://doi.org/10.1063/1.1712502>
73. Kubo, R., Generalized cumulant expansion method, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1962, vol. 17, no. 7, p. 1100. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.17.1100>
74. Vaks, V.G., Larkin, A.I. and Pikin, S.A., Thermodynamics of an ideal ferromagnetic substance, *Sov. Phys. JETP*, 1968, vol. 26, no. 1, p. 188.
75. Изюмов, Ю.А., Кассан-оглы, Ф.Л., *Полевые методы в теории ферромагнетизма*. М.: Наука, 1974. 223 с.
76. Слободян, П.М., Стасюк, И.В., Диаграммная техника для операторов Хаббарда, *ТМФ*, 1974, т. 19, № 3, с. 423. Slobodyan, P.M. and Stasyuk, I.V., Diagram technique for Hubbard operators, *Theoret. and Math. Phys.*, 1974, vol. 19, no. 3, p. 616. <https://doi.org/10.1007/BF01035575>
77. Zaitsev, R.O., Generalized diagram technique and spin waves in an anisotropic ferromagnet, *Sov. Phys. JETP*, 1976, vol. 41, no. 3, p. 100.
78. Изюмов, Ю.А., Кацнельсон, М.И., Скрыбин, Ю.Н., Магнетизм коллективизированных электронов. М.: Физ.-мат. лит., 1994. 365 с.
79. Барабанов, А.Ф., Кикоин, К.А., Максимов, Л.А., Диаграммная техника для обобщенной модели Хаббарда, *ТМФ*, 1975, т. 25, № 1, с. 8. Barabanov, A.F., Kikoin, K.A. and Maksimov, L.A., Graphical technique for the generalized Hubbard model, *Theor. Math. Phys.*, 1975, vol. 25, no. 1, p. 997. <https://doi.org/10.1007/BF01037645>
80. Барабанов, А.Ф., Кикоин, К.А., Максимов, Л.А., Диаграммная техника для моделей Андерсона, *ТМФ*, 1974, т. 20, № 3, с. 364. Barabanov, A.F., Kikoin, K.A. and Maksimov, L.A., Diagram technique for the Anderson model, *Theor. Math. Phys.*, 1974, vol. 20, no. 3, p. 881. <https://doi.org/10.1007/BF01040169>
81. Metzner, W., Linked-cluster expansion around the atomic limit of the Hubbard model, *Phys. Rev. B*, 1991, vol. 43, no. 10, p. 8549. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.8549>
82. Pairault, S., Sénéchal, D. and Tremblay, A.-M.S., Strong-coupling expansion for the Hubbard model, *Phys. Rev. Lett.*, 1998, vol. 80, № 24, с. 5389, doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.5389>
83. Pairault, S., Sénéchal, D. and Tremblay, A.-M.S., Strong-coupling perturbation theory of the Hubbard model, *Eur. Phys. J. B*, 2000, vol. 16, p. 85. <https://doi.org/10.1007/s100510070253>
84. Boies, D., Bourbonnais, C. and Tremblay, A.-M. S., One-particle and two-particle instability of coupled Luttinger liquids, *Phys. Rev. Lett.*, 1995, vol. 74, p. 968. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.74.96>
85. Sarker, S.K., A new functional integral formalism for strongly correlated Fermi systems, *J. Phys. C*, 1988, vol. 21, no. 18, p. L667. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.57.1362>
86. Sherman, A., One-loop approximation for the Hubbard model, *Phys. Rev. B*, 2006, vol. 73, no. 15, art. ID 155105. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.155105>
87. Barnes, S.E., New method for the Anderson model, *J. Phys.*, 1976, vol. 6, no. 7, p. 1375. <https://doi.org/10.1088/0305-4608/6/7/018>
88. Barnes, S.E., New method for the Anderson model. II. The U=0 limit, *J. Phys.*, 1977, vol. 7, no. 12, p. 2631. <https://doi.org/10.1088/0305-4608/7/12/022>
89. Coleman, P., New approach to the mixed-valence problem, *Phys. Rev. B*, 1984, vol. 29, no. 6, p. 3035. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.3035>
90. Вакару, С.И., Владимир, М.И., Москаленко, В.А., Диаграммная техника для модели Хаббарда II. Переход металл-диэлектрик, *ТМФ*, 1990, т. 85, № 2, с. 248. Vakaru, S.I., Vladimir, M.I. and

- Moskalenko, V.A., Diagram technique for the Hubbard model. II. Metal-insulator transition, *Theor. Math. Phys.*, 1990, vol. 85, no. 2, p. 1185. <https://doi.org/10.1007/BF01086848>
91. Боголюбов, Н.Н., Москаленко, В.А., К вопросу о существовании сверхпроводимости в модели Хаббарда, *ТМФ*, 1991, т. 86, № 1, с. 16. Bogolyubov, N.N. and Moskalenko, V.A., On the existence of superconductivity in the Hubbard model, *Theor. Math. Phys.*, 1991, vol. 86, no. 1, p. 10. <https://doi.org/10.1007/BF01018492>
92. Боголюбов, Н.Н., Москаленко, В.А., Сверхпроводимость в модели Хаббарда с отклонением от половинного заполнения, *ТМФ*, 1992, т. 92, № 2, с. 182. Bogolyubov, N.N. and Moskalenko, V.A., Superconductivity in the Hubbard model with deviation from half filling, *Theor. Math. Phys.*, 1992, vol. 92, no. 2, p. 820. <https://doi.org/10.1007/BF01015550>
93. Moskalenko, V.A. and Kon, L.Z., Diagram technique for the Hubbard model. Ladder diagram summation, *Cond. Matter Phys.*, 1998, vol. 1, no. 1, p. 23.
94. Moskalenko, V.A., Entel, P., Dohotaru, L.A., Digor, D.F., et. al., *Diagrammatic theory for Anderson impurity model*. Preprint E17-2008-56. Dubna, Joint Inst. for Nuclear Res., 2008. 36 p.
95. Москаленко, В.А., Перкинс, Н.Б., Метод канонического преобразования для периодической модели Андерсона, *ТМФ*, 1999, т. 121, № 3, с. 464. Moskalenko, V.A. and Perkins, N.B. The canonical transformation method in the periodic Anderson model, *Theor. Math. Phys.*, 1999, vol. 121, no. 3, p. 1654. <https://doi.org/10.1007/BF02557210>
96. Moskalenko, V.A., Entel P., Marinaro, M., Perkins, N.B., et. al., Hopping perturbation treatment of the periodic Anderson model around the atomic limit, *Phys. Rev. B.*, 2001, vol. 63, no. 24, art. ID 245119.
97. Москаленко, В.А., Теория возмущений для периодической модели Андерсона, *ТМФ*, 1997, т. 110, № 2, с. 308. Moskalenko, V.A., Perturbation theory for the periodic Anderson model, *Theor. Math. Phys.*, 1997, vol. 110, p. 243. <https://doi.org/10.1007/BF02630450>
98. Москаленко, В.А., Теория возмущений для периодической модели Андерсона. II. Сверхпроводящее состояние, *ТМФ*, 1998, т. 116, № 3, с. 456. Moskalenko, V.A., Perturbation theory for the periodic Anderson model: II. Superconducting state, *Theor. Math. Phys.*, 1998, vol. 116, no. 3, p. 1094. <https://doi.org/10.1007/BF02557150>
99. Медведев, И.Г., Новая диаграммная техника для модели Андерсона, *ТМФ*, 1996, т. 109, № 2, с. 279. Medvedev, I.G., New diagram technique for the Anderson model, *Theor. Math. Phys.*, 1996, vol. 109, no. 2, p. 1460. <https://doi.org/10.1007/BF02072011>
100. Moskalenko, V.A., Entel, P., Digor, D.F. and Dohotaru, L.A., Competing spin waves and superconducting fluctuations in strongly correlated electron systems, *Phase Trans.*, 2005, vol. 78, nos. 1–3, p. 277. <https://doi.org/10.1080/01411590412331316519>
101. Pruschke, Th. and Bulla, R., Hund's coupling and the metal-insulator transition in the two-band Hubbard model, *Eur. Phys. J. B*, 2005, vol. 44, p. 217. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2005-00117-4>
102. Didukh, L., Skorenky, Yu., Dovyhopaty, Yu. and Hankevych, V., Metal-insulator transition in a doubly orbitally degenerate model with correlated hopping, *Phys. Rev. B*, vol. 61, no. 12, p. 7893. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.7893>
103. Koga, A., Imai, Y. and Kawakami, N., Stability of a metallic state in the two-orbital Hubbard model, *Phys. Rev. B.*, 2002, vol. 66, no. 16, art. ID 165107. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.165107>
104. Koga, A., Imai, Y., Suga, S.-I. and Kawakami, N., Effects of degenerate orbitals on the Hubbard model, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2003, vol. 72, no. 5, p. 1306. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.72.1306>
105. Inaba, K. and Koga, A., Metal-insulator transition in the two-orbital Hubbard model at fractional band fillings: self-energy functional approach, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2007, vol. 76, no. 9, art. ID 094712. doi: <https://doi.org/10.1143/JPSJ.76.094712>
106. Koga, A., Kawakami, N., Rice, T.M. and Sigrist, M., Mott transitions in the multi-orbital systems, *Physica B: Condensed Matter*, 2005, vol. 359-361, p. 1366. doi: <https://doi.org/10.1016/j.physb.2005.01.414>
107. Rong, Y. and Qimiao, Si., Mott transition in multiorbital models for iron pnictides, *Phys. Rev. B*, 2011, vol. 84, no. 24, art. ID 235115. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.235115>
108. Lee, T.-H., Chubukov, A., Miao, H. and Kotliar, G., Pairing mechanism in Hund's metal superconductors and the universality of the superconducting gap to critical temperature, *Phys. Rev. Lett.*, 2018, vol. 121, no. 18, art. ID 187003. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.187003>
109. Nishikawa, Y. and Hewson, A.C., Study of Hund's rule coupling in models of magnetic impurities and quantum dots, *Phys. Rev. B*, vol. 86, no. 24, art. ID 245131. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.245131>
110. Kubo, K. and Hirashima, D.S., Effects of the Hund's rule coupling in an orbitally degenerate Anderson model, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1999, vol. 68, p. 2317. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.68.2317>
111. Fabrizio, M., Ho, A.F., De Leo, L. and Santoro, G.E., Nontrivial fixed point in a twofold orbitally degenerate Anderson impurity model, *Phys. Rev. Lett.*, 2003, vol. 91, no. 24, art. ID 246402. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.246402>
112. De Leo, L. and Fabrizio, M., Spectral properties of a two-orbital Anderson impurity model across a non-Fermi-liquid fixed point, *Phys. Rev. B*, 2004, vol. 69, no. 24, art. ID 245114. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.245114>
113. Kalra, M.L. and Upadhyaya, U.N., Role of the electron-phonon interaction in the insulator-metal

- transition, *Nuov. Cim. B*, 1977, vol. 41, no. 1, p. 151. <https://doi.org/10.1007/BF02726550>
114. Tezuka, M., Arita, R. and Aoki, H., Phase diagram for the one-dimensional Hubbard-Holstein model: A density-matrix renormalization group study, *Phys. Rev. B*, 2007, vol. 76, no. 15, art. ID 155114. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.155114>
115. Karakuzu, S., Luca, F., Tocchio, Sorella, S., et. al., Superconductivity, charge-density waves, antiferromagnetism, and phase separation in the Hubbard-Holstein model, *Phys. Rev. B*, 2017, vol. 96, no. 20, art. ID 205145. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.205145>
116. Yunkyu, B., Effects of phonon interaction on pairing in high- T_c superconductors, *Phys. Rev. B*, 2008, vol. 78, no. 7, art. ID 075116. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.075116>
117. Zimanyi, G.T., Kivelson, S.A. and Luther, A., Superconductivity from predominantly repulsive interactions in quasi one-dimensional systems, *Phys. Rev. Lett.*, 1988, vol. 60, no. 20, art. ID 2089. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.60.2089>
118. Huang, W.-M., Shih, H.-Y., Wang, F. and Lin, H.-H., Anomalous isotope effect in phonon-dressed iron-based superconductor, *Sci. Rep.*, 2019, vol. 9, art. ID 5547. <https://doi.org/10.1038/s41598-019-42041-z>
119. Москаленко, В.А., Электрон-фононное взаимодействие сильно коррелированных систем. II. Предел сильной связи, *ТМФ*, 1997, т. 113, № 3, с. 432. Moskalenko, V.A., Electron-phonon interaction of strongly correlated systems. II. Strong coupling limit, *Theor. Math. Phys.*, 1997, vol. 113, no. 3, p. 1559. <https://doi.org/10.1007/BF0263451>
120. Moskalenko, V.A., Entel, P. and Digor, D.F., Strong interaction of correlated electrons with phonons: A diagrammatic approach, *Phys. Rev. B*, 1999, vol. 59, no. 1, p. 619. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.619>
121. Moskalenko, V.A., Entel, P. and Digor, D.F., Strong interaction of correlated electrons with acoustical phonons using the extended Hubbard-Holstein model, *Phys. Rev. B*, 2006, vol. 74, no. 7, art. ID 075109. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.075109>
122. Ramakumar, R. and Das, A.N., Polaron cross-overs and d -wave superconductivity in Hubbard-Holstein model, *Eur. Phys. J. B*, 2004, vol. 41, p. 197. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2004-00309>

Summary

The features of materials leading to the effect of strong correlation and the phenomena realized in them, namely, the metal-insulator Mott transition and high-temperature superconductivity, were considered. The history of their study was traced. Special attention was paid to the study of the role of the interorbital correlation effect and Hund's coupling in multi-orbital systems, as well as of the electron-phonon interaction in the systems with both strong electron-phonon and Coulomb interactions. The development of the method of the diagram technique of a strong coupling was analyzed, and the results obtained on the base of that approach are presented.

Keywords: diagram technique, strongly correlated systems, Wick's theorem, Mott metal-dielectric transition, high-temperature superconductivity