

# КАПЛИ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА В ЭЛЕКТРОННОЙ СИСТЕМЕ МАЛОЙ ПЛОТНОСТИ С ПРИТЯЖЕНИЕМ В ПРИСУТСТВИИ СИЛЬНОГО СЛУЧАЙНОГО ПОТЕНЦИАЛА

*М. Ю. Каган\**, *Е. А. Мазур\*\**

*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»  
101000, Москва, Россия*

*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»  
115409, Москва, Россия*

*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»  
123122, Москва, Россия*

*Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук  
119334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 27 сентября 2020 г.,  
после переработки 12 октября 2020 г.  
Принята к публикации 12 октября 2020 г.

Рассчитаны свойства двумерной электронной системы с низкой плотностью ( $n \ll 1$ ) с сильным локальным притяжением Хаббарда  $U > W$  ( $W$  — ширина зоны) в присутствии сильного случайного потенциала  $V$ , равномерно распределенного в диапазоне от  $-V$  до  $+V$ . Учитывались электронные прыжки только на соседние узлы квадратной решетки при  $W = 8t$ . Расчеты осуществлялись на решетке  $24 \times 24$  с периодическими граничными условиями. В рамках подхода Боголюбова – де Жена наблюдалось появление неоднородных состояний пространственно разделенной ферми–бозе-смеси куперовских пар и неспаренных электронов с образованием капель бозонов разного размера в матрице непарных нормальных электронных состояний. Наблюдался эффект уменьшения размера капли (от более крупных капель до отдельных биэлектронных пар) при уменьшении электронной плотности при фиксированных значениях притяжения Хаббарда и случайного потенциала. Полученные результаты важны для построения фазовой диаграммы и понимания природы фазового перехода между сверхпроводящим, нормальным металлическим и локализованными состояниями в квазидвумерном (тонкая пленка) грязном металле. В более практическом смысле полученные результаты интересны также для экспериментального внедрения сверхпроводящих кубитов на квантовых схемах с высоким импедансом в гранулированных сверхпроводниках.

*Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского*

DOI: 10.31857/S0044451021040118

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Влияние сильного беспорядка на сверхпроводимость уже давно является предметом большого интереса как теоретически [1–7], так и экспериментально в тонких пленках [8, 9] и гранулированных сверхпроводниках, используемых в качестве плат-

формы для сверхпроводящих кубитов [10]. Общепринятой физической картины разрушения сверхпроводящего состояния и природы нормального состояния пока не выявлено. Часть теоретических работ [1–7] предполагает, что амплитуда спаривания  $\Delta(r)$  однородна в пространстве (не зависит от  $r$ ) даже для сильно неупорядоченной системы. В работах [7, 11, 12] было решено уравнение Боголюбова – де Жена в реальном пространстве, однако квазибозонный предел низких электронных плотностей не был полностью исследован.

\* E-mail: mkagan@hse.ru

\*\* E-mail: eugen\_mazur@mail.ru

В настоящей статье мы рассмотрим двумерную модель Хаббарда с притяжением  $U$  для  $s$ -волнового сверхпроводника при низких температурах  $T$  в сильном случайном потенциале  $V$  и проанализируем эту модель подробно в рамках подхода Боголюбова – де Жена (БдЖ), принимая во внимание как решения с положительными значениями энергии  $E_n$ , так и решения с отрицательными значениями энергии электронной системы [13, 14]. Наша цель состоит в том, чтобы наблюдать, как амплитуда локального спаривания  $\Delta(r)$  изменяется в пространстве в присутствии беспорядка в диапазонах параметров как сильного эффекта притяжения Хаббарда  $U > W$ , так и сильного беспорядка  $V > W$  при низких концентрациях электронов  $n = 0.125\text{--}0.3$ , которые еще не проанализированы. Мы также ставили цель изучить влияние пространственных неоднородностей на физически значимые корреляционные функции.

Следует отметить, что в последнее время экспериментальные усилия для создания сверхпроводящих кубитов на квантовых схемах с высоким импедансом в гранулированных сверхпроводниках [10] снова делают актуальной проблему построения фазовых диаграмм и понимания природы фазового перехода из нормального состояния в сверхпроводник и перехода изолятор–сверхпроводник в тонких пленках грязного металла  $s$  [9, 10]. В заключение приведем некоторые комментарии о следствии наших результатов в отношении интерпретации опытов на неупорядоченных тонких пленках.

## 2. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ НЕОДНОРОДНОГО СЛУЧАЯ И ПОСТАНОВКА МОДЕЛИ

Рассмотрим двумерную модель Хаббарда неупорядоченного сверхпроводника  $s$ -типа с короткодействующим притяжением между носителями, описываемую гамильтонианом:

$$H = -t \sum_{i,j,\sigma} \left( c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + \text{H.c.} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i,\sigma} (V_i - \mu) n_{i\sigma}. \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое описывает кинетическую энергию,  $t$  соответствует перескокам на соседние узлы квадратной решетки,  $U = -|U|$  — амплитуда хаббардовского потенциала притяжения на одном узле,  $c_{i\sigma}^\dagger (c_{i\sigma})$  — операторы рождения (уничтожения) электрона со спином  $\sigma$  на узле решетки  $r_i$ ,  $n_{i,\sigma}$  — локальная плотность электронов на узле  $i$  для одной

компоненты спина,  $\mu$  — химический потенциал. Случайный потенциал  $V_i$  выбирается независимо для каждого узла и регулируется с помощью случайного равномерного распределения в диапазоне  $[-V, V]$ . Таким образом,  $V$  контролирует интенсивность диагонального беспорядка в системе.

Запишем уравнения БдЖ для функции Боголюбова, т.е. для боголонов в виде «электронов» и в виде «дырок», участвующих в спаривании [13, 14]:

$$-t \sum_{\pm\hat{x},\pm\hat{y}} u_n(r_i \pm \hat{x}, \pm\hat{y}) + (U(r_i) + V_i - \mu) \times u_n(r_i) + \Delta_i \cdot v_n(r_i) = E_n u_n(r_i), \quad (2)$$

$$\Delta_i^* \cdot u_n(r_i) + t \sum_{\pm\hat{x},\pm\hat{y}} v_n(r_i \pm \hat{x}, \pm\hat{y}) - (U(r_i) + V_i - \mu) v_n(r_i) = E_n v_n(r_i). \quad (3)$$

Здесь  $E_n$  — энергия возбуждений в системе,  $\mu$  — химический потенциал в присутствии случайного диагонального беспорядка  $V$ ,  $U(r_i)$  — потенциал среднего поля на узле  $r_i$  [13, 14],  $\Delta(r_i)$  — потенциал спаривания на узле  $r_i$  [13, 14]. Для того, чтобы правильно учитывать как потенциал спаривания, так и химический потенциал  $\mu$  в системе, что требует учета состояний, лежащих ниже уровня Ферми, мы будем удерживать решения системы (1), (2) как с положительными значениями энергии  $E_n$ , так и с отрицательными значениями энергии электронной системы. Наиболее важные вклады в плотность состояний электронов  $n(r_i, E)$  на узле решетки  $r_i$  приводят к выражению [13]

$$n(r_i, E) = 2 \sum_n \left[ |u_n(r_i)|^2 f_n + |v_n(r_i)|^2 (1 - f_n) \right] \times \delta(E - E_n), \quad (4)$$

где  $f_n = 1 / [\exp(E_n/kT) + 1]$  — функция распределения Ферми – Дирака для заданного значения энергии возбуждения  $E_n$ . Химический потенциал  $\mu$  определяется из условия самосогласования для плотности частиц  $n$  (что соответствует среднему числу электронов на узле):

$$\frac{1}{N} \sum_i n_i = 2 \sum_i \sum_n \left[ |u_n(r_i)|^2 f_n + |v_n(r_i)|^2 (1 - f_n) \right] = n. \quad (5)$$

Чтобы получить условия нормировки для собственных функций, мы исходим из соотношения [14]

$$\sum_n [u_n(r) u_n^*(r') + v_n(r) v_n^*(r')] = \delta(r - r').$$

Предполагаем, что как  $r$ , так и  $r'$  лежат в пределах ячейки с радиус-вектором  $R_i$ . Проинтегрируем по  $r'$  по площади ячейки  $R_i$  при условии, что внутри ячейки  $u_n(r) = u_n(R_i)$ ,  $v_n(r) = v_n(R_i)$ . Пусть  $S_i$  будет равно площади элементарной ячейки,  $S_i = S/N$ . В результате получаем

$$\sum_n [u_n(R_i) u_n^*(r') + v_n(R_i) v_n^*(r')] S_i = \int_{S_i} dr \delta(r - r') = 1.$$

Было принято во внимание, что в процессе интегрирования по ячейке  $R_i$  по  $r$  в процессе интегрирования переменная  $r$  совпадает с  $r'$ . Теперь проинтегрируем полученное выражение по  $r'$  в предположении выполнения равенства

$$\sum_n [u_n(R_i) u_n^*(R_i)^* + v_n(R_i) v_n^*(R_i)] S_i S_i = S_i$$

внутри ячейки, так что

$$\sum_n [u_n(R_i) u_n^*(R_i)^* + v_n(R_i) v_n^*(R_i)] = \frac{1}{S_i} = \frac{N}{S} = n_{knots},$$

где  $n_{knots}$  — концентрация ячеек (узлов) в простейшем случае, рассматриваемом здесь. Когда мы выполняем пространственное усреднение в пределах элементарной ячейки типа  $\sum_n [|v_n(r_i)|^2]$ , появляется множитель  $n_{knots}^{-1} S$ , который приводит к исчезновению множителя  $n_{knots}$  в правой стороне условия нормировки. Следовательно, можно эффективно записать условие нормировки в стандартной форме  $\sum_n |u_n(r_i)|^2 + \sum_n |v_n(r_i)|^2 = 1$ . При суммировании следует учитывать как состояния с положительной энергией, так и состояния с отрицательной энергией. В формулах (1), (2) в дополнение к случайному потенциалу  $V_i$  учитывается потенциал среднего поля  $U(r_i)$  на узле  $r_i$  [13, 14]. Это дает [15]

$$U_i \equiv U(r_i) = -U \sum_n [|u_n(r_i)|^2 f_n + |v_n(r_i)|^2 (1 - f_n)]. \quad (6)$$

Вводя хартри-фоковский сдвиг химического потенциала  $\mu_i = \mu + U \frac{n_{ei}(r_i)}{2}$ , перепишем формулы (2), (3) через эффективный химический потенциал  $\mu_i$ , который зависит от сайта  $i$ :

$$-t \sum_{\pm \hat{x}, \pm \hat{y}} u_n(r_i \pm \hat{x}, \pm \hat{y}) + (V_i - \mu_i) u_n(r_i) + \Delta_i \cdot v_n(r_i) = E_n u_n(r_i), \quad (7)$$

$$\Delta_i^* \cdot u_n(r_i) + t \sum_{\pm \hat{x}, \pm \hat{y}} v_n(r_i \pm \hat{x}, \pm \hat{y}) - (V_i - \mu_i) v_n(r_i) = E_n v_n(r_i). \quad (8)$$

В (7), (8)  $\mu_i$  имеет вид

$$\mu_i = \mu + U \sum_n [|u_n(r_i)|^2 f_n + |v_n(r_i)|^2 (1 - f_n)]. \quad (9)$$

В то же время потенциал спаривания  $\Delta(r_i)$ , фигурирующий в (2), (3), (7), (8), может быть записан как [13, 14]

$$\Delta(r_i) = U \sum_n u_n(r_i) v_n^*(r_i) (1 - 2f_n). \quad (10)$$

Исходя из начального предположения для  $\Delta_i(r_i) \equiv \Delta_i$  и  $\mu$ , мы численно решали уравнения БДЖ (2)–(10) для собственных значений  $E_n$  и для собственных векторов  $(u_n(r_i))$ ,  $(v_n(r_i))$  на конечной 2D-решетке из  $N \times N$  узлов с периодическими граничными условиями. Затем рассчитывали величины амплитуд  $(u_n(r_i))$ ,  $(v_n(r_i))$  для конкретных узлов и устанавливали численное значение концентрации боголонов вида  $u$  в сумме по состояниям  $n_{u,\sigma}(r_i) = \sum_n |u_n(r_i)|^2 f_n$  и боголонов вида  $v$   $n_{v,\sigma}(r_i) = \sum_n |v_n(r_i)|^2 (1 - f_n) \neq n_{u,\sigma}(r_i)$  при низких температурах. Далее мы рассчитывали амплитуду локального спаривания  $\Delta(r_i) = U \sum_n u_n(r_i) v_n^*(r_i) (1 - 2f_n)$  на каждом узле и значение плотности боголонов типа  $u$  и  $v$  на узлах  $r_i$ . Мы повторяли итерационный процесс вплоть до достижения самосогласования для  $\Delta_i$  и  $n_i$  на каждом узле.

### 3. МЕТОДИКА РАСЧЕТА

В данной работе мы исследовали решетку с  $24 \times 24$  ячейками с периодическими граничными условиями. Расчет начинался со случайными значениями  $\Delta_i$  и  $\tilde{\mu}_i$  на каждом из узлов, после чего выполнялась процедура численной диагонализации полученного гамильтониана с помощью библиотеки программ языков программирования `maple` и `math-lab`. В результате были найдены собственные векторы  $u_n(r_i)$ ,  $v_n(r_i)$  и собственные значения  $E_n$  системы.

После этого  $\Delta_i$  и  $\tilde{\mu}_i$  вновь пересчитывались из соотношений (10) и (9) и снова использовались в качестве начальных значений на входе самосогласованного цикла. Цикл выполнялся до сходимости значений  $\Delta_i$  и  $\tilde{\mu}_i$  на каждом узле с заданной точностью. Длительность процедуры на компьютере НИЦ

КИ составляла несколько часов. Модель (1) исследовалась для диапазона параметров  $1 < |U|/t < 10$  и  $0 < V/t < 12$  на решетке размером  $N = 24 \times 24$  узла. В исследовании также рассматривались низкие концентрации  $n = 0.125$  при низкой температуре. Величина энергетической щели  $E_{gap}$  определяется как наименьшее положительное собственное значение энергии. Соответственно,  $\Delta_i$  — значение параметра порядка на  $i$ -м узле,  $V$  — амплитуда беспорядка, значения  $E_{gap}$  и  $\Delta_{op}$ , так же как и все результаты, если не указано иное, были усреднены по 25 запускам с различными распределениями случайного беспорядка. В расчетах также использовался программный пакет QUANTUM ESPRESSO Version 6.2.1 [16, 17] и расчетные визуализаторы.

#### 4. ТЕНДЕНЦИИ В СИСТЕМЕ С УМЕРЕННЫМ БЕСПОРЯДКОМ ПРИ УВЕЛИЧЕНИИ $U$

Первый вариант расчета в рамках уравнений Боголюбова–де Жена (2)–(10) был выполнен при температуре, близкой к нулю, на узлах сетки  $N = 24 \times 24$  при крайне низкой концентрации электронов  $n = 0.15$  в пределе очень сильного притяжения между электронами  $U = -10t$ . Расчеты выполнены для умеренного беспорядка  $V = 2$ . На рис. 1 показаны тенденции, проявляющиеся при увеличении  $|U|$  в виде возникающих зависимостей пространственного распределения электронной плотности (левый столбец), электронной щели  $\Delta$  (правый столбец) и величины, характеризующей сосуществование дырок и электронов в реальных условиях (смешивание частица–дырка) (средний столбец). Видно, что последняя величина коррелирует с  $\Delta$ . Распределения всех величин при увеличении  $U$  (что влияет на эффект локализации на отдельных участках) представлены на рис. 1.

Как видим из рис. 1, при низких концентрациях электронов  $n = 0.15$  система даже при умеренных значениях беспорядка проявляет тенденцию к образованию капель параметра порядка, пространственное расположение которых коррелирует с пространственным распределением плотности электронов в системе (правый столбец), а также со значением, характеризующим сосуществование дырок и электронов в реальном пространстве. Электроны в системе расположены в областях с малыми значениями беспорядка. При рассмотренных параметрах система не является изолятором, так как распределение электронов в пространстве не разбилось на отдель-

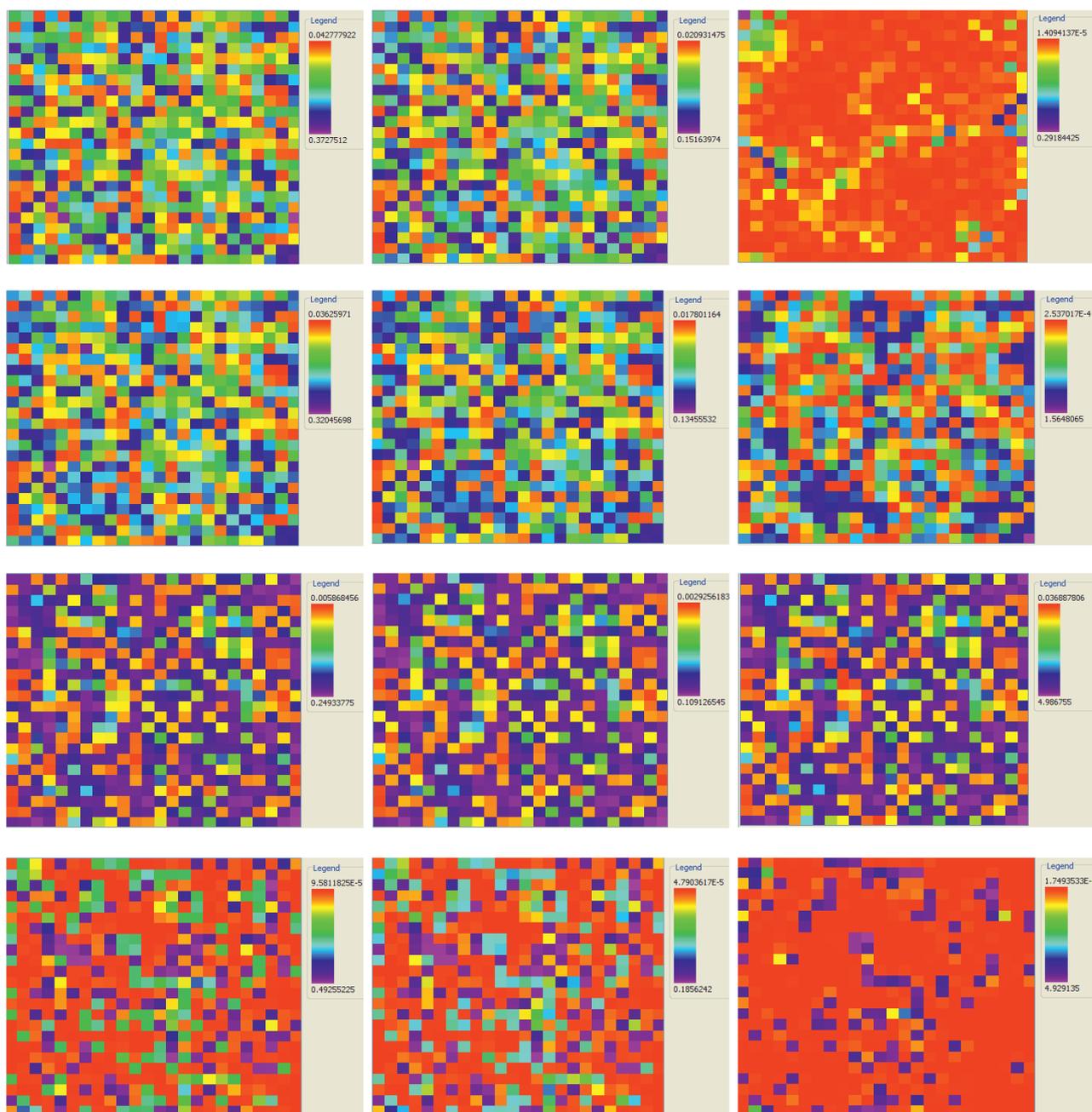
ные изолированные области. При малых концентрациях система проявляет свойства бозонного металла, носителями которого являются бозонные кластеры, состоящие из нескольких электронных пар.

Чтобы охарактеризовать относительную локализацию пар, на рис. 2 показаны графики зависимости математического ожидания  $\Delta_i \Delta_j$ , описывающего корреляцию пространственного расположения пар, для ряда значений концентрации для данных  $U$  и  $V$ . В приведенных выше расчетах мы не усредняли конфигурации беспорядка, все результаты представлены для одной реализации беспорядка.

Как видно из рис. 2в, значение концентрации  $n = 0.4$  соответствует близости системы к переходу в состояние с полным отсутствием спаривания электронов (с исчезновением параметра порядка одновременно на всех узлах). Из рис. 2 следует, что при всех значениях концентрации электронов в системе устанавливается дальний порядок, так что превалирует состояние с парами, расположенными на максимальном расстоянии друг от друга (рис. 2). Как видно из рис. 2, одной и той же пространственной конфигурации взаимного расположения электронных пар соответствует много значений коррелятора. Таким образом, система не демонстрирует четкую зависимость математического ожидания  $\Delta_i \Delta_j$  от взаимного пространственного расположения пар электронов. Анализ поведения математического ожидания  $\Delta_i \Delta_j$  (рис. 2), которое отвечает за пространственное распределение пар в системе, не позволяет сделать вывод, что при этих параметрах система является диэлектриком. Отметим, что в данном разделе мы указали определенные пределы значений параметров, соответствующих переходу системы в состояние изолятора.

#### 5. РАСЧЕТЫ ДЛЯ ЧРЕЗВЫЧАЙНО НИЗКИХ ПЛОТНОСТЕЙ И СЛАБОГО БЕСПОРЯДКА

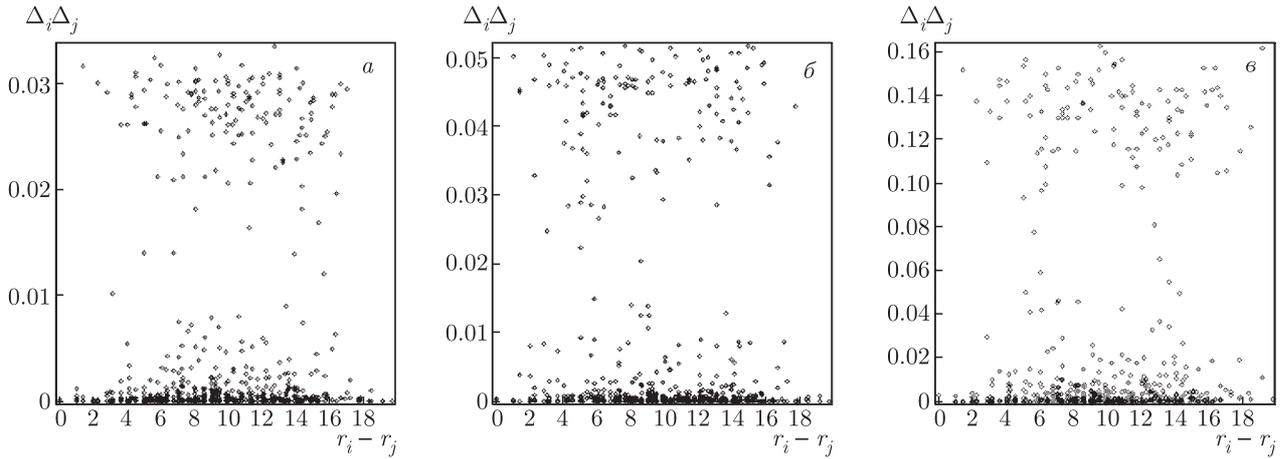
Расчеты, аналогичные [18–20], но для ранее не исследованной области предельно низкой концентрации электронов  $n = 0.125$ , были выполнены при ненулевой температуре на сетке  $N = 24 \times 24$  узлов для  $U = -10t$ . Результаты предыдущего раздела дополнены расчетами для слабого беспорядка с амплитудами  $V = 0.25, 2.0, 4.0, 10.0$ . Для  $U = 10$  и  $V = 2$  рис. 3 показывает, как увеличение концентрации  $n$  влияет на характер и масштаб уменьшения среднего параметра спаривания  $\Delta_{op}$  и на величину  $E_{gap}$  при изменении концентрации от  $n = 0.18$  до  $n = 0.20$ . Результаты усреднены по пяти конфигурациям.



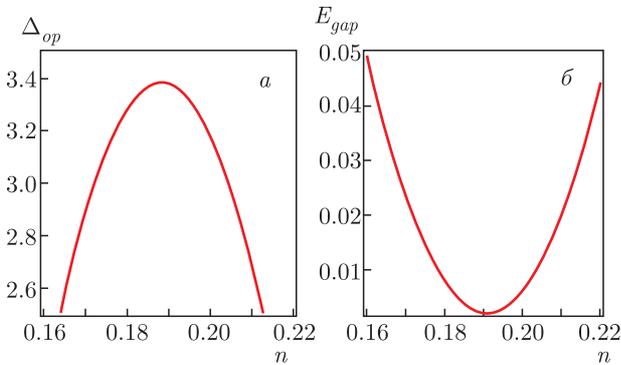
**Рис. 1.** Пространственное распределение щели в спектре электронов  $\Delta$  (правый столбец), концентрация электронов (левый столбец) и величина, характеризующая сосуществование дырок и электронов в реальном пространстве (средний столбец). Верхняя строка соответствует  $|U| = 2t, V = 2t$ , вторая строка при отсчете сверху вниз соответствует  $|U| = 4t, V = 2t$ , третья строка соответствует  $|U| = 10t, V = 2t$ , нижняя строка, представленная здесь для сравнения, соответствует  $|U| = 10t, V = 10t$ . Расчеты выполнены для малой электронной плотности  $n = 0.15$

Наличие минимума на зависимости  $E_{gap}$  от степени разупорядочения  $V$  (рис. 4а) согласуется с результатами [18–20]. На рис. 5, 6 показаны зависимости пространственного распределения  $\Delta$  (левые столбцы), электронной плотности (правые столбцы)

и величины, характеризующей сосуществование дырок и электронов в реальном пространстве (смешивание частиц с дырками, средние столбцы) для различных амплитуд  $V$  степени беспорядка в системе. Для каждого конкретного изображения мы исполь-



**Рис. 2.** Зависимости математического ожидания  $\Delta_i \Delta_j$ , отражающего пространственное распределение электронных пар, от расстояния между парами, выраженного в постоянных решетках. Серия графиков представлена с изменением средней концентрации для  $V = 8$  и  $U = 6$ :  $n = 0.07$  (а),  $0.30$  (б),  $0.40$  (в)



**Рис. 3.** Зависимости среднего параметра спаривания  $\Delta_{op}$  (а) и величины  $E_{gap}$  (б) от электронной плотности в диапазоне от  $n = 0.16$  до  $n = 0.22$ ,  $U/t = -10$ ,  $V = 2$ , температура  $T = 0.01$  для решетки с  $24 \times 24$  узлами

зую собственную шкалу контрастности от белого до черного, поэтому некоторые конфигурации выглядят блеклыми по сравнению с другими из-за конкретной реализации беспорядка.

### 6. РАСЧЕТЫ ДЛЯ МАЛЫХ КОНЦЕНТРАЦИЙ ЭЛЕКТРОНОВ В ДИАПАЗОНЕ БЕСПОРЯДКА ОТ НИЗКИХ ДО ВЫСОКИХ ЗНАЧЕНИЙ

В данном разделе представлены результаты расчетов в широком диапазоне степени беспорядка с амплитудами  $V = 0.5, 6.0, 10.0$  для системы  $24 \times 24$  с плотностью  $n = 0.15$ .

Из рис. 5 видно, что до определенных значений  $V$  (порядка 5) четко прослеживается корреляция между левым и средним столбцами. На рис. 5 показан переход от капель параметра порядка к отдельным парам электронов — бозонам, с увеличением степени беспорядка в системе. Вопрос относительно перехода к предельной величине беспорядка, при котором наша система переходит от бозе-металла к бозе-изолятору, на рис. 5 остается открытым и требует дополнительного исследования. Таким образом, наша задача разделена на две независимые проблемы: проблему бозе-металла и проблему бозе-изолятора для значений беспорядка, превышающих критическое значение, с распределением капель параметра порядка, содержащих бозе-состояния. Сравнивая все три столбца рис. 5, можно сделать вывод, что существует также фаза, в которой большинство электронных пар локализовано, а меньшая часть делокализованных пар движется на фоне такого состояния бозе-изолятора.

На рис. 6 показаны значения  $|u_n(r_i)|^2 + |v_n(r_i)|^2$  с положительными значениями энергии для первых трех возбуждений для  $V = 0.5, 4$ .

### 7. РАСЧЕТЫ ДЛЯ ВЫСОКОЙ СТЕПЕНИ БЕСПОРЯДКА В ДИАПАЗОНЕ ЭЛЕКТРОННОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ ОТ НИЗКИХ $n = 0.15$ ДО СРЕДНИХ $n = 0.32$ ЗНАЧЕНИЙ

В данном разделе представлены результаты расчетов в диапазоне электронных плотностей от низкой  $n = 0.15$  до умеренной  $n = 0.30$  величины с

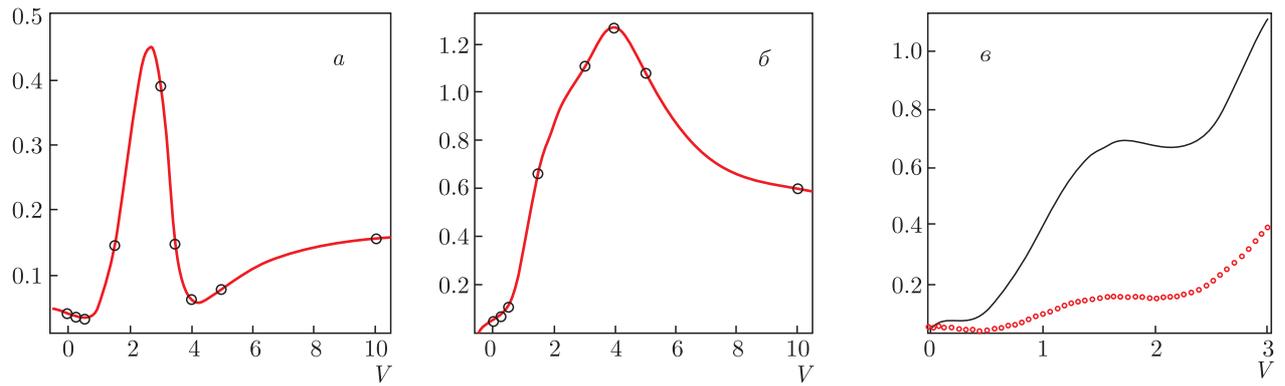


Рис. 4. Зависимости  $E_{gap}$  (а) и  $\Delta_{op}$  (б) от амплитуды беспорядка  $V$ .  $n = 0.05$ ,  $U/t = -8$  для решетки с  $24 \times 24$  узлами. На рис. в оба графика показаны более подробно в тех же пределах:  $E_{gap}$  — символы,  $\Delta_{op}$  — сплошная линия

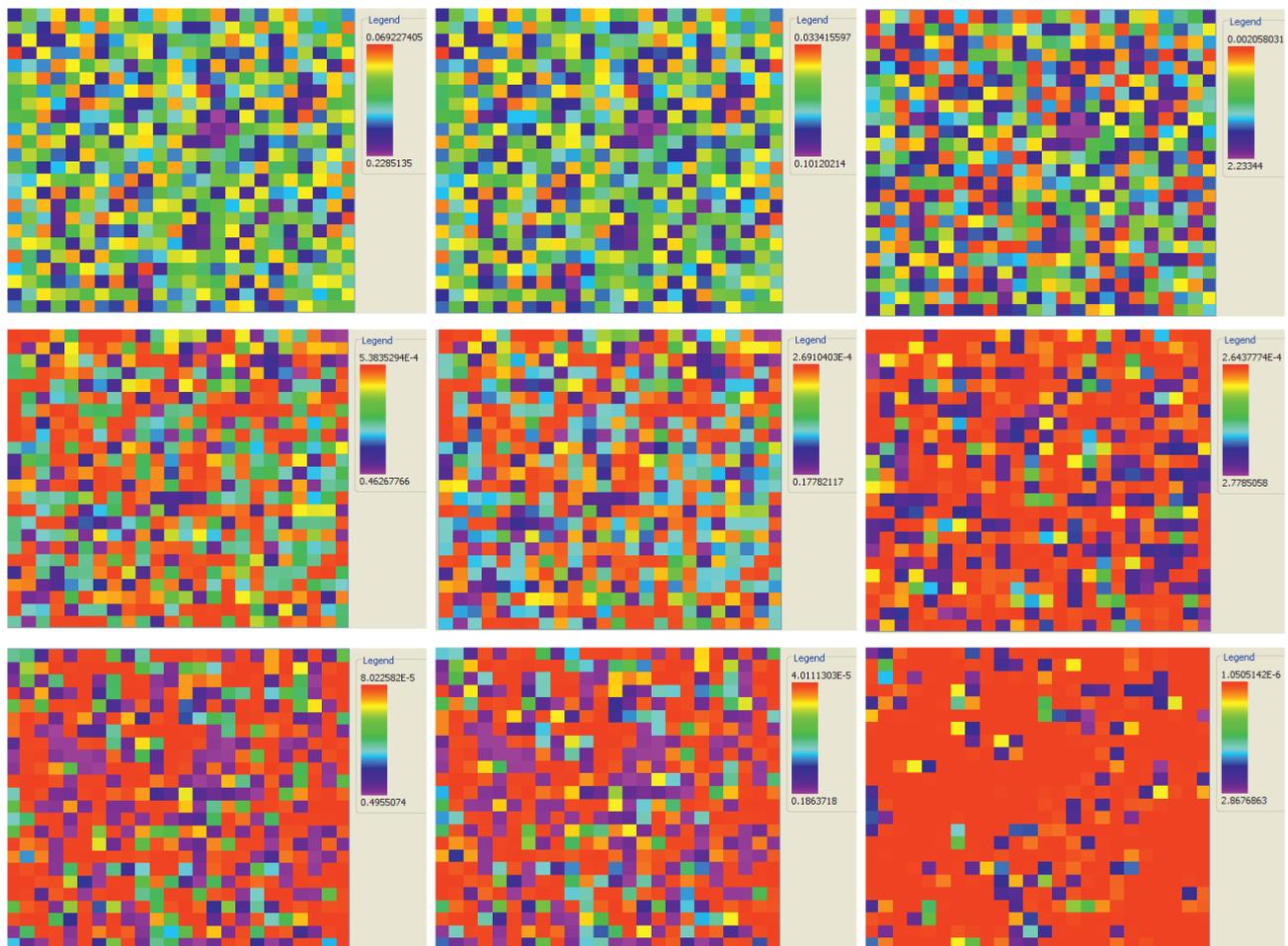
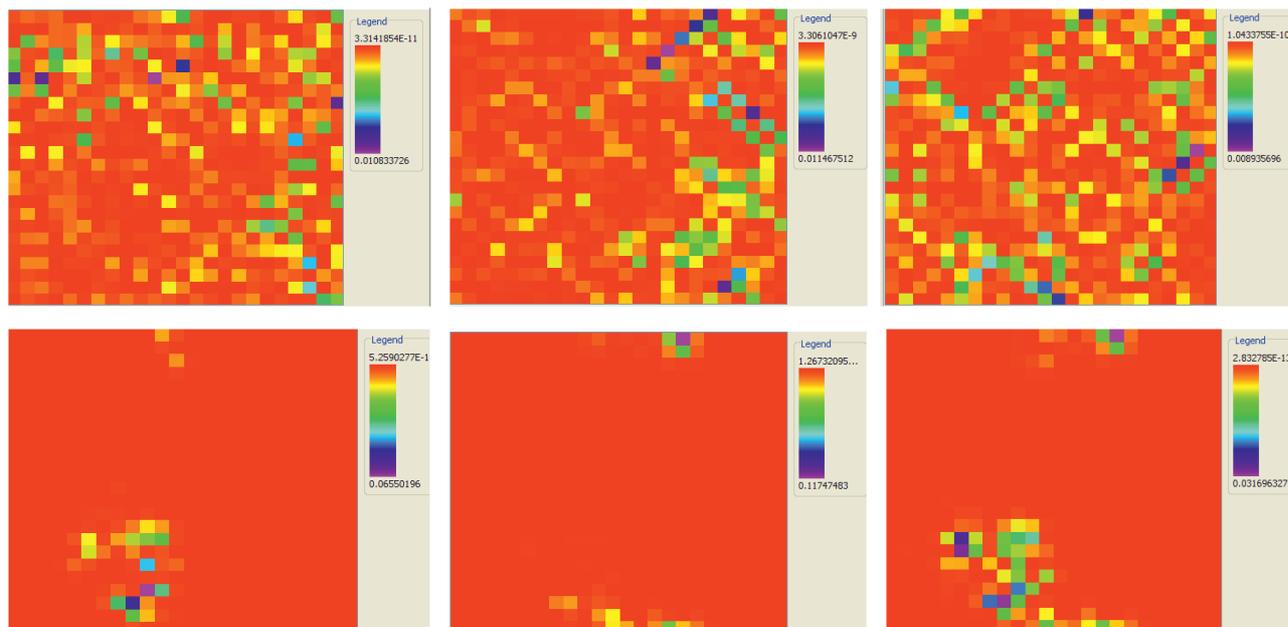


Рис. 5. Двумерное распределение электронной плотности (левый столбец), электронно-дырочного перемешивания (средний столбец) и параметра порядка (правый столбец) при  $n = 0.15$ ,  $U/t = -6$  на решетке  $24 \times 24$  с амплитудой беспорядка  $V/t = 0.5$  (верхняя строка),  $V/t = 6.0$  (средняя строка),  $V/t = 10.0$  (нижняя строка)



**Рис. 6.** Показаны три возбуждения для набора значений  $V = 0.5$ ,  $U = 6$ ,  $t = 0.01$ ,  $n = 0.3$  (верхняя строка), для набора значений  $V = 4$ ,  $U = 6$ ,  $t = 0.01$ ,  $n = 0.15$  (нижняя строка). Слева направо номер возбуждения для данного значения  $U$  увеличивается с соответствующими энергиями 0.000088, 0.004876, 0.013679 для верхней строки и энергиями 0.102606, 0.172969, 0.217828 для нижней строки

амплитудой беспорядка  $V = 8$  и амплитудой притяжения Хаббарда  $U = 6$  для решетки с  $24 \times 24$  узлами. Также показаны отдельные случайные возбуждения.

Как видим, для плотности  $n = 0.11$  появляются одиночные пары или сдвоенные пары электронов (квартеты) в виде пар, соседствующих на прилегающих ячейках (рис. 7), при  $n = 0.17$  наблюдаются большие капли параметра порядка (рис. 8), в результате чего распределение электронов имеет форму капель с большим числом электронных пар в каждой электронной капле. Пики двумерного распределения электронной плотности и параметра порядка касаются друг друга, но не перекрываются. Капли параметра порядка сливаются в перколяционный кластер (сетевой каркас или network) цепочек, напоминающих дерево с большим количеством ветвей (рис. 8), которые практически не испытывают разрывов вдоль их длины. При больших плотностях  $n = 0.30$  возникающий сетевой каркас параметра порядка в этом случае концентрируется в пространственных областях в виде «долин» между пиками электронной плотности (рис. 9).

На рис. 10 показаны три возбуждения с наименьшей энергией для одной конкретной реализации беспорядка.

## 8. ВЫВОДЫ

Как уже отмечалось в предыдущих теоретических работах [7, 11, 12, 21–23], специфические особенности в двумерном случае полной фазовой диаграммы моделей типа Хаббарда – Андерсона (с локальным взаимодействием Хаббарда на узле и с диагональным беспорядком) связаны с тем, что в квазидвумерных системах помимо стандартного фазового перехода сверхпроводника к нормальному металлу в определенном диапазоне параметров возможен также «прямой» переход из сверхпроводящего состояния в диэлектрическое локализованное состояние без возникновения промежуточного состояния в виде нормального металла. Похожая ситуация проявляется в экспериментальных исследованиях сверхпроводимости и локализации в грязных тонких пленках [8, 9]. Это обстоятельство делает расчеты, представленные в данной статье, весьма актуальными.

Приведем основные результаты работы.

1. По мере роста беспорядка пространственное распределение локальной амплитуды спаривания  $\Delta(r)$  сначала принимает форму отдельных капель, а затем — отдельных пар.

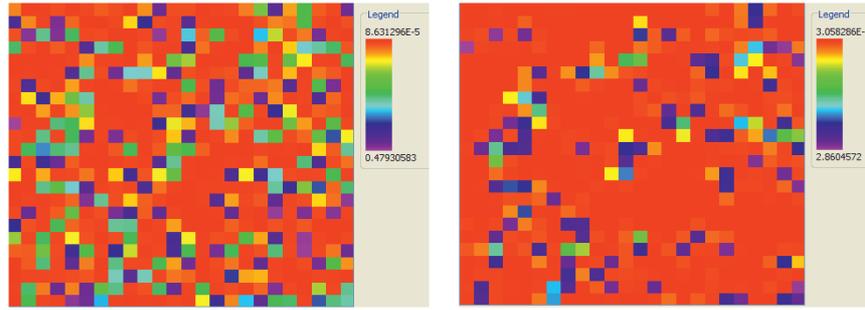


Рис. 7. Двумерное распределение электронной плотности (слева) и параметра порядка (справа) для  $n = 0.11$ ,  $U/t = -6$  на решетке  $24 \times 24$  с амплитудой беспорядка  $V/t = 8$

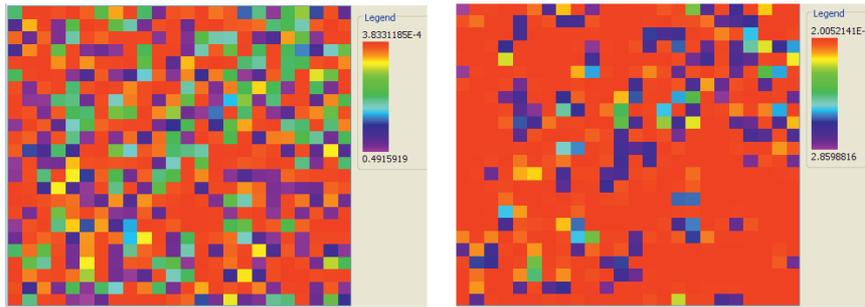


Рис. 8. Двумерное распределение электронной плотности (слева) и параметра порядка (справа) для  $n = 0.17$ ,  $U/t = -6$  на решетке  $24 \times 24$  с амплитудой беспорядка  $V/t = 8$

2. Спектральная щель в одночастичной плотности состояний сохраняется даже при большом беспорядке, несмотря на растущее число пространственных узлов с  $\Delta(r) = 0$ . Детальное понимание этого эффекта возникает из исследования пространственного изменения функции  $\Delta(r)$  и собственных функций уравнений Боголюбова–де Жена. На наш взгляд, этот эффект нуждается в пересмотре, с рассмотрением модели типа ферми–бозе-смеси, важной чертой которой является сосуществование электронных пар и одиночных неспаренных электронов.

Подчеркнем, что наши результаты были получены в пределе сильной связи  $|U|/t \gg 1$  и малой плотности  $n \ll 1$ . Более того, предельные значения в проведенных нами расчетах соответствуют случаю  $|U|/t = 10$  и  $n = 0.125$  для двумерной квадратной решетки с шириной зоны  $W = 8t$ . В этом предельном случае простые оценки с использованием формул, приведенных в [1–3], дают  $\varepsilon_F \sim 0.8t$ ,  $|E_b| \sim 0.2t$  соответственно для энергии Ферми и энергии связи электронной пары. Таким образом,  $|E_b| < 2\varepsilon_F$ , и мы все еще находимся в области БКШ для БКШ–БЭК-кроссовера. Если мы введем удоб-

ные обозначения для энергии связи, для энергии Ферми и для зонной массы электрона:

$$|E_b| = \frac{1}{ma^2}, \quad \varepsilon_F = \frac{k_F^2}{2m}, \quad m = \frac{1}{2td^2},$$

где  $d$  – расстояние между узлами,  $a$  – радиус пары и  $k_F$  – импульс Ферми, то безразмерный параметр БКШ–БЭК-кроссовера, связанный с двумерностью электронной плотности,  $n_{2D} = k_F^2/2\pi$ , для параболического спектра принимает вид

$$n_{2D}a^2 = \frac{k_F^2 a^2}{2\pi} = \frac{2\varepsilon_F}{|E_b|} \frac{1}{2\pi} \approx \frac{8}{6.28} \geq 1$$

и для предельных параметров задачи оказывается близким к 1.

Это показывает, как обсуждалось в [1], что, хотя мы находимся в области БКШ для БКШ–БЭК-кроссовера, электронные пары уже достаточно компактны, они слабо перекрываются и почти касаются друг друга. Таким образом, мы действительно очень близки к пределу, когда пары начинают «раздавливать» друг друга, т.е. к пределу ферми–бозе-смеси компактных пар и неспаренных одиночных электронов.

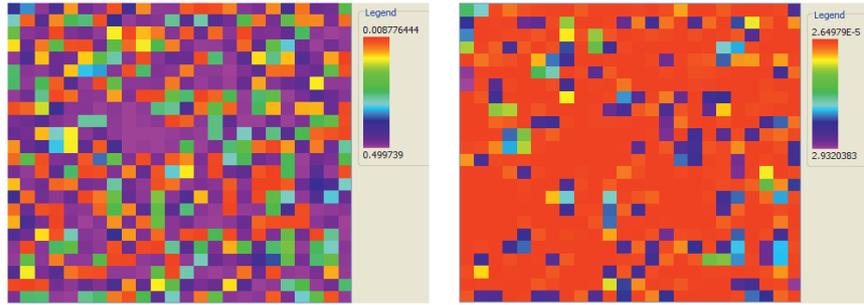


Рис. 9. Двумерное распределение электронной плотности (слева) и параметра порядка (справа) для значений  $n = 0.30$ ,  $U/t = -6$  на решетке  $24 \times 24$  с амплитудой беспорядка  $V/t = 8$

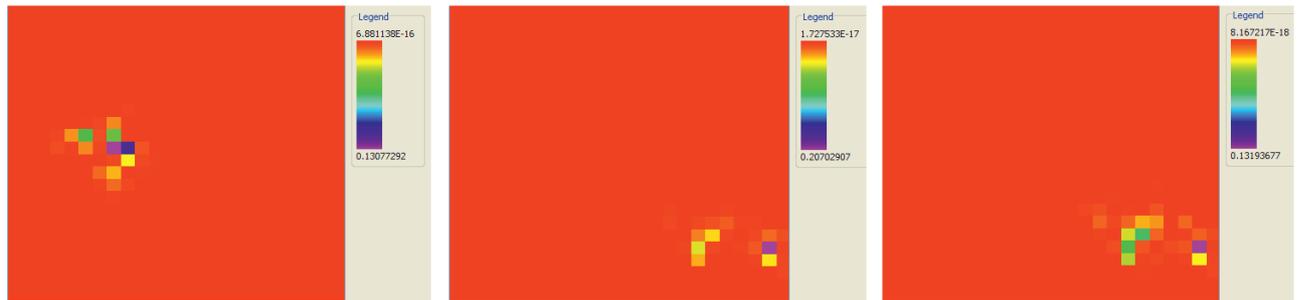


Рис. 10. Три возбуждения с наименьшей энергией для одной реализации беспорядка для набора значений  $V = 8$ ,  $U = 6$ ,  $n = 0.28$ . Слева направо номер возбуждения увеличивается для данного набора значений  $U$ ,  $V$ ,  $n$ : энергия возбуждения  $E_1 = 0.070$  (слева), энергия возбуждения  $E_2 = 0.084$  (посередине), энергия возбуждения  $E_3 = 0.107$  (справа)

Отметим, что модель ферми–бозе-смеси чрезвычайно богата и может содержать очень разнообразную физику, в частности, с возможностью наноразмерного фазового разделения в системе и образованием пространственно разделенных фермионных и бозонных кластеров и многочастичных капель различных композиций (в зависимости от знака и относительной величины конкурирующих бозон-бозонного, бозон-фермионного и фермион-фермионного взаимодействий  $U_{BB}$ ,  $U_{FF}$ ,  $U_{FB}$ , а также отношения плотностей двух фаз  $n_B$ ,  $n_F$  [24, 25]). Модель, изучаемая в данной статье, явно учитывает роль фермион-фермионных взаимодействий в виде потенциала спаривания  $\Delta(r_i)$  на узле  $r_i$ , а также бозон-фермионное взаимодействие  $U_{FB}$  в виде потенциала среднего поля  $U(r_i)$ . Описание бозон-бозонного взаимодействия электронных пар  $U_{BB}$  требует дальнейшего изучения в рамках обобщенной и расширенной модели.

Подчеркнем, что все результаты этой работы были получены в подходе Боголюбова–де Жена, приводящем к локальному минимуму функционала свободной энергии, без каких-либо дополнитель-

ных приближений. Это означает, в частности, что состояние с более равномерным пространственным распределением пар в системе («равномерно перемешанное» решение для ферми–бозе-смеси пар и распаренных электронов) должно соответствовать более высокой энергии, чем рассмотренное нами неоднородное состояние. Более строгое рассмотрение задачи требует анализа парциальных сжимаемостей компонент ферми–бозе-смеси для того, чтобы строго доказать неустойчивость равномерно перемешанного состояния относительно возможности наноразмерного расслоения на фазы с образованием капель одной (состоящей из пар) бозонной фазы внутри матрицы другой (неспаренной) фермионной фазы [25–27]. Такой анализ будет проводиться отдельно вместе с более строгим определением природы парных состояний внутри капель (бозе-металл или бозе-изолятор), а также состояний в распаренной фермионной матрице (нормальный фермионный металл или фермионный изолятор).

Дополнительный вопрос в этом контексте связан с фазовой когерентностью и сверхпроводимостью. Согласно [24], один из возможных сценариев сверх-

проводящего перехода в пространственно разделенной ферми-бозе-смеси может быть связан с туннелированием пар из одного бозонного кластера в соседний через изолирующий фермионный барьер, с установлением при этом макроскопического дальнего порядка и фазовой когерентности в системе.

Отметим также, что все расчеты в данной работе были выполнены при температуре, близкой к нулю, когда теория среднего поля применима для малой плотности двумерного ферми-газа (см. [1–4] и ссылки в этих работах) и когда флуктуационные поправки Березинского – Костерлица – Таулеса [28, 29] малы. Температурная эволюция системы в квазибозонной области параметров (области параметров, соответствующей появлению ферми-бозе-смеси) также очень интересна [1–3, 24, 26, 30] и требует тщательного исследования.

С увеличением степени беспорядка происходит существенное уменьшение жесткости для макроскопической волновой функции сверхпроводящего состояния и диагональных корреляций. Ожидается также, что, когда бозон-бозонное взаимодействие  $U_{BB}$  будет включено в модель для более детального описания капель, подвижность таких капель будет демонстрировать псевдощелевые свойства в спектре.

В заключение обсудим более детально эволюцию размеров капель с изменением параметров задачи. В частности, представляется весьма конструктивным зафиксировать предельное значение сильного хаббардовского притяжения на узле  $|U|/t = 10$  и постепенно увеличивать электронную плотность, двигаясь от  $n = 0.125$  к большим электронным плотностям, более близким к половинному заполнению. В этом случае наши результаты показывают, что когда мы увеличиваем электронную плотность, сначала происходит переход от одиночных электронных пар к более крупным каплям, содержащим большое число пар. И только после этого, при дальнейшем увеличении плотности электронов в нашей системе образуется большой перколяционный кластер, содержащий каркасную сеть (network) из парных состояний электронов.

Отметим также, что недавние экспериментальные исследования по различным реализациям сверхпроводящих кубитов (в частности, флакс-кубитов) снова повысили интерес к построению глобальной фазовой диаграммы и к более детальному пониманию природы фазовых переходов сверхпроводник–нормальный металл и сверхпроводник–изолятор в системах с понижен-

ной размерностью ( $D = 1, 2$ ). В этом контексте исследования резонансных контуров с высокими значениями импеданса в гранулированных сверхпроводниках, в частности, в сверхпроводящих (полосатых) страйп-структурах гранулированного алюминия, которые являются альтернативой обычным джозефсоновским переходам, представляются весьма перспективными [23].

Отметим, что образование наноразмерных областей расслоения на фазы (капель) в двумерном электронном газе (2DEG) и в многослойном случае для гетероструктур и интерфейса тонких пленок  $\text{SrTiO}_3\text{--LaAlO}_3$  явилось в последние годы предметом интенсивных исследований в целом ряде работ [31–36].

**Благодарности.** Мы благодарны Р. Ш. Ихсанову, Е. А. Буровскому, К. И. Кугелю, А. Я. Цаленчук, А. С. Васенко, Н. Н. Дегтяренко, А. В. Красавину, А. А. Голубову за полезное обсуждение этой работы.

**Финансирование.** Работа поддержана Проектом повышения конкурентоспособности НИЯУ «МИФИ» (договор № 02.а03.21.0005, 27.08.2013) с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс для моделирования и обработки данных с исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт» (дотация Министерства образования и науки, рабочий идентификатор RFMEFI62117X0016), <http://ckp.nrcki.ru/>.

М. Ю. К. благодарит за поддержку Программу фундаментальных исследований НИУ «Высшая школа экономики» и Российский фонд фундаментальных исследований (грант № 20-02-00015).

## ЛИТЕРАТУРА

1. M. Yu. Kagan, *Modern Trends in Superconductivity and Superfluidity*, Lect. Notes Phys. **874**, Springer, Dordrecht (2013).
2. M. Yu. Kagan, R. Frésard, M. Capezzali, and H. Beck, *Phys. Rev. B* **57**, 5995 (1998); *Physica B* **284–288**, 347 (2000).
3. Ю. М. Каган, Письма в ЖЭТФ **103**, 822 (2016) [*JETP Lett.* **103**, 728 (2016)].
4. А. И. Ларкин, ЖЭТФ **58**, 1466 (1970) [*Sov. Phys. JETP* **31**, 784 (1970)].

5. Э. З. Кучинский, Н. А. Кулеева, М. В. Садовский, ЖЭТФ **154**, 881 (2018) [JETP **127**, 753 (2018)].
6. A. V. Balatsky, I. Vechter, and J. X. Zhu, Rev. Mod. Phys. **78**, 373 (2000).
7. M. V. Feigel'man, L. B. Ioffe, V. E. Kravtsov, and E. Cuevas, Ann. Phys. **325**, 1390 (2010).
8. A. M. Goldman and N. Markovic, Phys. Today **51**, 39 (1998).
9. D. B. Haviland, Y. Liu, and A. M. Goldman, Phys. Rev. Lett. **62**, 2180 (1989).
10. N. Grunhaupt et al., Nature Mater. **18**, 816 (2019); arXiv:cond-mat1809.10146.
11. I. S. Burmistrov, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin, Phys. Rev. Lett. **108**, 017002 (2012).
12. М. А. Скворцов, М. В. Фейгельман, ЖЭТФ **144**, 560 (2013) [JETP **117**, 487 (2013)].
13. P.-J. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys*, Benjamin, New York (1966).
14. А. В. Свидзинский, *Пространственно-неоднородные задачи теории сверхпроводимости*, Наука, Москва (1982).
15. R. Hausmann, Z. Phys. B **91**, 291 (1991).
16. P. Giannozzi et al., J. Phys.: Condens. Matter **21**, 395502 (2009).
17. P. Giannozzi et al., J. Phys.: Condens. Matter **29**, 465901 (2017).
18. A. Ghosal, M. Randeria, and N. Trivedi, Phys. Rev. Lett. **81**, 3940 (1998).
19. A. Ghosal, M. Randeria, and N. Trivedi, Phys. Rev. B **65**, 014501 (2001).
20. Y. L. Loh and N. Trivedi, in *Conductor-Insulator Quantum Phase Transitions*, ed. by V. Dobrosavljević, N. Trivedi, and J. M. Valles, Jr. (CIQPT Conf., Ohio State Univ., 2008), Oxford Univ. Press, Oxford (2012), Ch. 17, pp. 492–548.
21. R. Combescot, H. Leyronas, and M. Yu. Kagan, Phys. Rev. A **73**, 023618 (2006).
22. S. Wolf, A. Vagov, A. A. Shanenko, V. M. Axt, A. Perali, and J. Albino-Agular, Phys. Rev. B **95**, 094521 (2017).
23. Э. З. Кучинский, И. А. Некрасов, М. В. Садовский, УФН **182**, 345 (2012) [Phys. Usp. **53**, 325 (2012)].
24. А. П. Менушенков, А. В. Кузнецов, А. В. Клементьев, М. Ю. Каган, ЖЭТФ **120**, 700 (2001) [JETP **93**, 615 (2001)].
25. M. Yu. Kagan, I. V. Brodsky, D. V. Efremov, and A. V. Klaptsov, Phys. Rev. A **70**, 023607 (2004).
26. A. V. Turlapov and M. Yu. Kagan, J. Phys.: Condens. Matter **24**, 383004 (2017).
27. М. Ю. Каган, К. И. Кугель, УФН **171**, 577 (2001) [Phys. Usp. **44**, 553 (2001)].
28. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C: Sol. St. Phys. **6**, 1181 (1973).
29. В. Л. Березинский, ЖЭТФ **61**, 1144 (1971) [JETP **34**, 610 (1972)].
30. M. Yu. Kagan and A. Bianconi, Condens. Matter (Switzerland) **4**, 51 (2019).
31. N. Reyren, S. Thiel, A. D. Caviglia, L. F. Kourkoutis, G. Hammerl, C. Richter, C. W. Schneider, T. Kopp, A.-S. Rüetschi, D. Jaccard et al., Science **317**, 1196 (2007).
32. A. Camjayi, K. Haule, V. Dobrosavljević, and G. Kotliar, Nature Phys. **4**, 932 (2008).
33. Ariando, X. Wang, G. Baskaran, J. Liu, Z. Q. Huijben, J. B. Yi, A. Annadi, A. R. Barman, A. Rusydi, S. Dhar, Y. P. Feng et al., Nature Commun. **2**, 188 (2011).
34. N. Tenen, A. Y. Kuntsevich, V. M. Pudalov, and M. Reznikov, Phys. Rev. Lett. **109**, 226403 (2012).
35. В. М. Пудалов, М. Е. Геншензон, Письма в ЖЭТФ **111**, 237 (2020) [V. M. Pudalov and M. E. Gershenson, JETP Lett. **111**, 225 (2020)].
36. V. Tripathi, K. Dhochak, B. A. Aronson, V. V. Rylkov, A. B. Davydov, B. Raquet, M. Goiranand, and K. I. Kugel, Phys. Rev. B **84**, 075305 (2011).