УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК ИНСТИТУТ ЭЛЕКТРОФИЗИКИ

На правах рукописи

УДК 537.312

КУЧИНСКИЙ ЭДУАРД ЗЯМОВИЧ

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ И НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ В ПСЕВДОЩЕЛЕВОМ СОСТОЯНИИ.

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертация

на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Екатеринбург, 2011

Содержание

1	BBI	ЕДЕН	ИЕ	7		
2	КАЧЕСТВЕННЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О ПСЕВДОЩЕЛЕВОМ СО-					
	СТОЯНИИ.					
	2.1	Псевдощель, как "предчувствие" возникновения щели (сверхпроводя-				
щей или диэлектрической)			ли диэлектрической)	22		
		2.1.1	Основные экспериментальные факты о псевдощелевом состоя-			
			нии ВТСП купратов.	23		
	2.2 Простая одномерная модель псевдощелевого состояния.					
	Модель Садовского		њ Садовского	35		
		2.2.1	Предел бесконечной корреляционной длины флуктуаций ближ-			
			него порядка	37		
		2.2.2	Конечная корреляционная длина	41		
3	3 МОДЕЛИ ПСЕВДОЩЕЛЕВОГО СОСТОЯНИЯ ДВУМЕРНЫХ СИ					
	CTI	EM.		49		
3.1 Псевдощель, вызываемая диэл		Псевд	ощель, вызываемая диэлектрическими флуктуациями ближнего			
		порядка				
		3.1.1	Модель "горячих точек".	49		
		3.1.2	Модель "горячих участков"	61		
		3.1.3	Упрощенная модель псевдощелевого состояния.			
			Модель Бартоша и Копица	67		
	3.2	Псевд	ощель, вызываемая флуктуациями сверхпроводящего ближнего			
порядка		ка	72			
	3.3 Нефермижидкостное поведение в псевдощелевом состоянии. От полк		омижидкостное поведение в псевдощелевом состоянии. От полюса			
к нулю функции Грина		о функции Грина	76			
		3.3.1	Возможные варианты перенормировки функции Грина	78		
		3.3.2	Модель флуктуирующей щели	83		

	3.4	Комбинаторика фейнмановских диаграмм в задачах с гауссовым слу-
		чайным полем
	3.5	Основные выводы
4	CB	ЕРХПРОВОДИМОСТЬ В ПСЕВДОЩЕЛЕВОМ СОСТОЯНИИ.103
	4.1	Сверхпроводимость в модели "горячих участков"
		4.1.1 Предел бесконечной корреляционной длины
		4.1.2 Конечная корреляционная длина
	4.2	Сверхпроводимость в точно решаемой модели псевдощели.
		Эффекты несамоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка. 132
		4.2.1 Сверхпроводимость в точно решаемой модели псевдощели Бар-
		тоша и Копица
		4.2.2 Спектральная плотность и плотность состояний
4.3 Сверхпроводимость в псевдощелев		Сверхпроводимость в псевдощелевом состоянии в модели "горячих то-
		чек"
		4.3.1 Разложение Гинзбурга-Ландау
		4.3.2 Уравнения Горькова. Температурная зависимость сверхпрово-
		дящей щели
		4.3.3 Моделирование фазовой диаграммы
		4.3.4 Выводы
5	ПС	ЕВДОЩЕЛЬ В СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ.197
	5.1	Сильно коррелированные системы. Теория динамического среднего по-
		ля (DMFT)
	5.2	Введение масштаба длины в DMFT. DMFT+ Σ_k
		5.2.1 Построение k -зависящей собственно-энергетической части 206
		5.2.2 Результаты и обсуждение
		5.2.3 Выводы
	5.3	Эволюция поверхности Ферми в псевдощелевом состоянии

		5.3.1	"Разрушение" поверхности Ферми псевдощелевыми флуктуаци-
			ями в сильно коррелированных системах
		5.3.2	"Реконструкция" поверхности Ферми псевдощелевыми флукту-
			ациями
	5.4	Оптич	еская проводимость в псевдощелевом состоянии сильно коррели-
		рован	ных систем
		5.4.1	Основные выражения для оптической проводимости 239
		5.4.2	Рекуррентные соотношения для собственно-энергетической и вер-
			шинной частей
		5.4.3	Результаты и обсуждение
		5.4.4	Выводы
	5.5	Анали	в реалистичных систем
		5.5.1	Купраты. LDA+DMFT+ Σ_k
		5.5.2	Электронная структура и возможное псевдощелевое поведение
			в сверхпроводниках на основе железа
6	ДР	VFUF	типы взлимолействий в сильно коррели
		J I VILL	IIIIDI DSAIMOZENCIDIM D CHIIDHO KOITEIM-
	PO	BAHH	тых системах. обобщенный $DMFT+\Sigma$ подход.280
	PO	ВАНН Перех	зых системах. обобщенный DMFT+Σ подход.280 од Мотта-Хаббарда и андерсоновская локализация
	PO] 6.1	ВАНН Перех 6.1.1	ТИПЫ ВЗАИМОДЕИСТВИИ В СИЛЬПО КОТТЕЛИ- ЗЫХ СИСТЕМАХ. ОБОБЩЕННЫЙ DMFT+Σ ПОДХОД.280 од Мотта-Хаббарда и андерсоновская локализация
	PO 6.1	ВАНН Перех 6.1.1 6.1.2	 СИСТЕМАХ. ОБОБЩЕННЫЙ DMFT+Σ ПОДХОД.280 од Мотта-Хаббарда и андерсоновская локализация
	PO] 6.1	ВАНН Перех 6.1.1 6.1.2 6.1.3	ТИПЫ БОАНМОДЕИСТВИИ Б СИЛЬНО КОТТЕЛИ БЫХ СИСТЕМАХ. ОБОБЩЕННЫЙ DMFT +Σ ПОДХОД.280 од Мотта-Хаббарда и андерсоновская локализация. 280 Основы DMFT+Σ подхода 282 Оптическая проводимость в DMFT+Σ подходе. 284 Трехмерные системы. 289
	PO] 6.1	ВАНН Перех 6.1.1 6.1.2 6.1.3 6.1.4	ТИПЫ ВЗАНКЮДЕНСТВИИ В СИЛЬНО КОТТЕЛИ БЫХ СИСТЕМАХ. ОБОБЩЕННЫЙ DMFT +Σ ПОДХОД.280 од Мотта-Хаббарда и андерсоновская локализация. 280 Основы DMFT+Σ подхода 282 Оптическая проводимость в DMFT+Σ подходе. 284 Трехмерные системы. 289 Двумерные системы. 303
	PO] 6.1	ВАНН Перех 6.1.1 6.1.2 6.1.3 6.1.4 6.1.5	ТИПЫ ВЗАНКЮДЕИСТВИИ В СИЛЬНО КОГГЕЛИ БЫХ СИСТЕМАХ. ОБОБЩЕННЫЙ DMFT +Σ ПОДХОД.280 од Мотта-Хаббарда и андерсоновская локализация. 280 Основы DMFT+Σ подхода 282 Оптическая проводимость в DMFT+Σ подходе. 284 Трехмерные системы. 289 Двумерные системы. 303 Выводы 315
	PO 6.1 6.2	ВАНН Перех 6.1.1 6.1.2 6.1.3 6.1.4 6.1.5 Оптич	ТИПЫ ЪЗАИМОДЕИСТВИИ В СИЛБНО КОГГЕЛИ- СЫХ СИСТЕМАХ. ОБОБЩЕННЫЙ DMFT+Σ ПОДХОД. 280 од Мотта-Хаббарда и андерсоновская локализация. 280 Основы DMFT+Σ подхода 282 Оптическая проводимость в DMFT+Σ подходе. 284 Трехмерные системы. 289 Двумерные системы. 303 Выводы 315 неское правило сумм в сильно коррелированных системах. 316
	PO 6.1 6.2	ВАНН Перех 6.1.1 6.1.2 6.1.3 6.1.4 6.1.5 Оптич 6.2.1	ТИПЫ БЗАНКЮДЕЙСТЫКИ В СИЛЬНО КОГГЕЛИ ЗЫХ СИСТЕМАХ. ОБОБЩЕННЫЙ DMFT+Σ ПОДХОД. 280 од Мотта-Хаббарда и андерсоновская локализация. 280 Основы DMFT+Σ подхода 282 Оптическая проводимость в DMFT+Σ подходе. 284 Трехмерные системы. 289 Двумерные системы. 303 Выводы 315 неское правило сумм в сильно коррелированных системах. 317
	PO 6.1 6.2	ВАНН Перех 6.1.1 6.1.2 6.1.3 6.1.4 6.1.5 Оптич 6.2.1 6.2.2	Initial DSAMMOQUMETERM B CHIMINO KOTTEMI BAX CUCTEMAX. OBOBILEHHBIЙ DMFT+Σ ПОДХОД.280 oq Motta-Xaббарда и андерсоновская локализация. 280 Ochobbi DMFT+Σ подхода 282 Oптическая проводимость в DMFT+Σ подходе. 284 Трехмерные системы. 289 Двумерные системы. 303 Выводы 315 неское правило сумм в сильно коррелированных системах. 316 Однозонное оптическое правило сумм. 317 Оптическое ПС в обобщенном DMFT+Σ приближении 319
	 PO 6.1 6.2 6.3 	ВАНН Перех 6.1.1 6.1.2 6.1.3 6.1.4 6.1.5 Оптич 6.2.1 6.2.2 Элект	Initial BSARIMOZIERCI BRIT B CHIIBITO KOTTEJIA BIX CUCTEMAX. OBOBILEHHBIЙ DMFT+Σ ПОДХОД. 280 od Motta-Xaббарда и андерсоновская локализация. 280 Ochobbi DMFT+Σ подхода 282 Oптическая проводимость в DMFT+Σ подходе. 284 Трехмерные системы. 289 Двумерные системы. 303 Выводы 315 еское правило сумм в сильно коррелированных системах. 316 Однозонное оптическое правило сумм. 317 Оптическое ПС в обобщенном DMFT+Σ приближении 319 pon-фононное взаимодействие. Особенности электронной диспер-

	6.3.1 Детали DMFT+ Σ расчетов	334			
	6.3.2 Результаты и обсуждение	337			
	6.3.3 Выводы	343			
7	ЗАКЛЮЧЕНИЕ. Основные результаты	345			
8	ПРИЛОЖЕНИЯ 3	349			
Α	Анализ одномерной модели.	349			
в	В Комбинаторика фейнмановских диаграмм в задачах с гауссовым слу-				
	чайным полем.	354			
	В.1 Производящая функция числа "скелетных" диаграмм. Рекуррентное				
	соотношение	355			
	В.2 Асимптотика для числа диаграмм при больших <i>N</i>	361			
	В.3 Электрон в гауссовом случайном поле с коррелятором типа "белого				
	шума"	364			
С	Координатное представление. Нормальные и аномальные функции				
	Грина. Модель "плоских участков".	374			
D	Комбинаторика диаграмм в модели гейзенберговских псевдощеле-				
	вых флуктуаций.	377			
\mathbf{E}	Коэффициенты Гинзбурга-Ландау для анизотропного спаривания в				
	отсутствие псевдощели.	382			
\mathbf{F}	Координатное представление. Нормальные и аномальные функции				
	Грина. Модель "горячих точек".	384			
G	Предел $d ightarrow \infty$. Сведение модели Хаббарда к эффективной однопри-				
	месной модели Андерсона.	387			
	G.1 Масштабное преобразование в пределе $d \to \infty$	387			

	G.2 Локальность СЭЧ в пределе $d \to \infty$	389
	G.3 Однопримесная модель Андерсона и ее связь с DMFT	391
н	Обоснование обобщенного $\mathbf{DMFT} + \Sigma_{\mathbf{k}}$ подхода	392
Ι	<i>W</i> в модели Хаббарда.	395
J	Тождество Уорда	398
\mathbf{K}	Уравнение для релаксационного ядра	400
\mathbf{L}	Влияние двухплоскостного расщепления.	402
\mathbf{M}	"Затравочная" электронная дисперсия и скорость для зоны с полу	-
	эллиптической DOS	403

1 ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы. Исследования сверхпроводимости продолжают оставаться в числе наиболее актуальных областей современной физики конденсированного состояния. Это во многом связано с открытием в 1986 году замечательного явления высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в соединениях медных оксидов (купратах). Несмотря на большие усилия как экспериментаторов, так и теоретиков, природа этого явления остается не вполне выясненной.

Главной проблемой остается последовательное теоретическое описание свойств нормального состояния, что требует выяснение природы так называемого псевдощелевого состояния, наблюдающегося в области фазовой диаграммы, соответствующей концентрациям носителей заряда меньше оптимальной, которую обычно называют областью "недодопированных "составов. В этой области в целом ряде экспериментов наблюдаются многочисленные аномалии электронных свойств как в нормальном, так и в сверхпроводящем состоянии, связанные с падением плотности одночастичных возбуждений и анизотропной перестройкой спектральной плотности носителей заряда. Сложилось и продолжает укрепляться мнение, что без понимания природы и свойств псевдощелевого состояния невозможно найти подход к описанию сложной фазовой диаграммы ВТСП купратов и вряд-ли можно надеяться на установление микроскопического механизма высокотемпературной сверхпроводимости. С другой стороны, псевдощелевое состояние не является специфической особенностью только купратов. По-видимому псевдощель наблюдаются также в новых ВТСП на основе железа. Существенные псевдощелевые аномалии обнаружены также в дихалькогенидах ряда переходных металлов $(TaSe_2, NbSe_2, ...)$.

В ВТСП-системах наблюдается сильная анизотропия всех свойств (квазидвумерность). Роль квазидвумерности в реализации высокотемпературной сверхпроводимости в этих системах до сих пор остается не вполне выясненной, однако очевидно, что она может приводить к заметному расширению флуктуационной области различных фаз на фазовой диаграмме, способствуя формированию псевдощелевого состояния. "Родительские" стехиометрические соединения купратов является антиферромагнитными диэлектриками с хорошо определенной оптической щелью и антиферромагнетизмом, обусловленным упорядочением локализованных спинов на медных ионах, с температурой Нееля сотни градусов *K*. Такое диэлектрическое состояние быстро разрушается введением небольшого числа легирующих примесей. Таким образом, эти системы можно отнести в разряд легированных моттовских диэлектриков с сильными электронными корреляциями, которые сильно усложняют проблему описания нормального состояния, делая сомнительной стандартную зонную теорию и фермижидкостный подход. Описание псевдощелевого состояния на фоне таких сильных электронных корреляций представляет достаточно сложную проблему.

Структурная и химическая неоднородность ВТСП- систем делает их существенно неупорядоченными. Поэтому встает вопрос о влиянии беспорядка, в том числе и сильного (локализации) на электронные свойства этих сильно коррелированных систем с пониженной размерностью. Описание андерсоновской локализации на фоне сильных электронных корреляций до сих пор остается не до конца решенной теоретической проблемой. Внутренняя неупорядоченность купратов ярко проявляется в данных сканирующей туннельной микроскопии (STM), ясно свидетельствующих о неоднородности локальной плотности электронных состояний и сверхпроводящей щели на микроскопических масштабах даже в практически идеальных монокристаллах ВТСП – купратов. Теоретическое описание таких неоднородностей представляет исключительно сложную задачу.

Все эти три аспекта (псевдощелевое состояние, сильные электронные корреляции, существенная внутренняя неупорядоченность), характеризующие купраты, в той или иной мере затронуты в диссертации, что и определяет актуальность ее темы.

Цель работы состоит в теоретическом исследовании псевдощелевого состояния в рамках двумерных моделей и разработке практических методов расчета физических свойств сверхпроводников в таком состоянии (в том числе и в условиях сильных электронных корреляций и сильного беспорядка) как в нормальной, так и сверхпроводящей фазе.

Научная новизна.

- Предложена новая, основанная на представлении о "горячих точках" на поверхности Ферми, двумерная модель псевдощелевого состояния, вызываемого флуктуациями ближнего порядка с конечной корреляционной длиной, в которой можно просуммировать все фейнмановские диаграммы теории возмущений по взаимодействию с псевдощелевыми флуктуациями, что позволило получить рекуррентное уравнение для функции Грина и исследовать поведение одноэлектронной плотности состояний и спектральной плотности.
- В рамках двух моделей псевдощелевого состояния, вызываемого флуктуациями ближнего порядка с конечной корреляционной длиной, впервые исследовано влияние псевдощели на свойства сверхпроводящей фазы:

Впервые, в таких моделях псевдощели, проведен микроскопический вывод разложения Гинзбурга-Ландау, построена система рекуррентных уравнений Горькова для куперовского спаривания *s*- и *d*-типа и изучено влияние псевдощели на температуру сверхпроводящего перехода, на основные свойства сверхпроводника вблизи *T_c* и на температурное поведение сверхпроводящей щели.

Впервые выявлены два возможных типа взаимодействия сверхпроводящего параметра порядка с псевдощелевыми флуктуациями, приводящих к существенно различным энергетическим масштабам подавления сверхпроводимости псевдощелью.

В рамках наиболее "реалистичной" модели псевдощели с "горячими точками" на поверхности Ферми впервые исследовано влияние немагнитных примесей на сверхпроводимость в псевдощелевом состоянии и проведено полуколичественное моделирование фазовой диаграммы ВТСП-купратов.

• В рамках двух точно решаемых моделей псевдощели впервые удалось точно исследовать эффекты несамоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка в гауссовом случайном поле псевдощелевых флуктуаций и проанализировать поведение усредненной по этому полю сверхпроводящей щели и ее флуктуаций, а также сверхпроводящих особенностей в плотности состояний и спектральной плотности квазичастиц, которые демонстрируют существование сверхпроводимости (по-видимому, в отдельных областях - "каплях") и в области температур выше среднеполевой температуры T_c однородного сверхпроводящего перехода во всем образце.

- Предложено новое обобщение DMFT+Σ теории динамического среднего поля (DMFT), позволяющее рассматривать нелокальные корреляции (в принципе любого типа), оставаясь в рамках однопримесной картины DMFT и сохраняя неизменной самосогласованную систему ее уравнений, что позволило провести широкое исследование одночастичных электронных свойств сильно коррелированных систем в псевдощелевом состоянии.
- Обобщенный DMFT+Σ подход развит для анализа двухчастичных свойств, что позволило впервые исследовать продольную оптическую проводимость сильно коррелированных систем в псевдощелевом состоянии.
- Впервые проведено теоретическое исследование эффективной картины "разрушения" поверхности Ферми псевдощелевыми флуктуациями, в том числе и в условиях сильных электронных корреляций. Впервые предложена точно решаемая модель псевдощели, способная описать плавный переход от картины "дуг Ферми" при высоких температурах (типичных для большинства ARPES экспериментов) к малым "карманам" поверхности Ферми (наблюдаемым в экспериментах по магнитным квантовым осцилляциям) при низких температурах, и предложен качественный критерий наблюдаемости магнитных осцилляций в псевдощелевом состоянии.
- Предложена новая комбинированная расчетная схема LDA+DMFT+Σ, позволившая ввести нелокальные псевдощелевые флуктуации в первопринципный подход LDA+DMFT, что позволило рассмотреть электронную структуру ря-

да составов ВТСП купратов в псевдощелевом состоянии и провести детальное сравнение с экспериментом.

- Предложена новая простая аналитическая модель многозонного электронного спектра вблизи уровня Ферми для новых ВТСП на основе железа, в рамках которой вперые теоретически исследовано влияние антиферромагнитных флуктуаций ближнего порядка и продемонстрировано возможное псевдощелевое поведение, связанное с частичным "разрушением"поверхности Ферми и перестройкой квазичастичных зон.
- DMFT+Σ подход развит для исследования сильно неупорядоченной модели Хаббарда (модели Андерсона - Хаббарда), что позволило наряду с анализом одночастичных свойств, впервые провести исследование оптической проводимости в такой модели и построить фазовую диаграмму модели Андерсона -Хаббарда.
- Исследована модель Хаббарда с взаимодействием между сильно коррелированными электронами проводимости и решеткой с дебаевскими или эйнштейновскими фононами, что позволило впервые проанализировать взаимовлияние недавно открытых "кинков" чисто электронной природы и обычных фононных "кинков" в электронном спектре.

Практическая ценность. Псевдощелевое состояние приводит к ряду аномалий физических свойств, наблюдаемых экспериментально во всех высокотемпературных сверхпроводниках на основе оксидов меди в области недодопированных составов. Рассмотренные в диссертации модели и расчетные схемы позволяют получить качественное, а в отдельных случаях и полуколичественное согласие с экспериментальными данными. Понимание природы и свойств псевдощелевого состояния позволяет глубже продвинуться в понимании проблем описания сложной фазовой диаграммы ВТСП оксидов.

Основные положения, выносимые на защиту:

- Новая, основанная на представлении о "горячих точках" на поверхности Ферми, двумерная модель псевдощелевого состояния, вызываемого флуктуациями ближнего порядка с конечной корреляционной длиной. Рекуррентное уравнение для одноэлектронной функции Грина и результаты для плотности состояний и спектральной плотности, полученные в такой модели.
- 2. Система рекуррентных уравнений Горькова и микроскопический вывод разложения Гинзбурга-Ландау для куперовского спаривания s- и d-типа, полученные в двух моделях ("горячих точек" и "горячих участков" на поверхности Ферми) псевдощелевого состояния. Результаты по влиянию псевдощели на температуру сверхпроводящего перехода, на основные свойства сверхпроводника вблизи T_c и на температурное поведение сверхпроводящей щели, а так же результаты по влиянию немагнитных примесей на сверхпроводимость в псевдощелевом состоянии и моделированию фазовой диаграммы ВТСП-купратов, полученные в таких моделях.
- 3. Результаты для усредненной по полю псевдощелевых флуктуаций сверхпроводящей щели, ее флуктуаций и сверхпроводящих особенностей в плотности состояний и спектральной плотности, полученные в двух точно решаемых моделях псевдощели и демонстрирующие существование сверхпроводимости в отдельных областях "каплях") и в области температур выше среднеполевой температуры T_c однородного сверхпроводящего перехода во всем образце, и вывод об отсутствии полной самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка в псевдощелевом состоянии.
- 4. Новое обобщение DMFT+Σ теории динамического среднего поля (DMFT), позволяющее включать нелокальные корреляции или дополнительные (по отношению к хаббардовскому) взаимодействия (в принципе любого типа), оставаясь в рамках однопримесной картины DMFT и сохраняя неизменной самосогласованную систему ее уравнений.

- 5. Результаты для одночастичных электронных свойств (плотность состояний, спектральная плотность, ARPES спектры, эффективная картина "разрушения" поверхности Ферми псевдощелью) сильно коррелированных систем в псевдощелевом состоянии, полученные в обобщенном DMFT+Σ подходе.
- 6. Вывод о возможности в рамках точно решаемой модели псевдощели описать плавный переход от картины "дуг Ферми" при высоких температурах (типичных для большинства ARPES экспериментов) к малым "карманам" поверхности Ферми (наблюдаемым в экспериментах по магнитным квантовым осцилляциям) при низких температурах и качественный критерий наблюдаемости магнитных осцилляций в псевдощелевом состоянии.
- Общая схема исследования двухчастичных электронных свойств в DMFT+Σ подходе и результаты для продольной оптической проводимости сильно коррелированных систем в псевдощелевом состоянии, полученные в таком подходе.
- 8. Новая комбинированная расчетная схема LDA+DMFT+ Σ , позволяющая ввести нелокальные псевдощелевые флуктуации в первопринципный подход LDA+ DMFT, и результаты для электронных свойств (плотность состояний, спектральная плотность, квазичастичные зоны и затухание, карта поверхности Ферми, оптическая проводимость) в их сравнении с экспериментом для ряда ВТСП купратов (Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8- δ}, La_{2-x}Sr_xCuO₄, Nd_{2-x}Ce_xCuO₄, Pr_{2-x}Ce_xCuO₄) в псевдощелевом состоянии.
- 9. Простая аналитическая модель многозонного электронного спектра вблизи уровня Ферми для новых ВТСП на основе железа и результаты для квазичастичных зон и карт поверхностей Ферми в условиях антиферромагнитного рассеяния как в случае дальнего порядка в стехиометрическом случае, так и в области возможных флуктуаций антиферромагнитного ближнего порядка в допированных составах.
- 10. Общая схема DMFT+ Σ подхода для исследования модели Андерсона-Хаббарда

(сильные корреляции учитываются с помощью DMFT, а сильный беспорядок – путем подходящего обобщения самосогласованной теории локализации) и результаты для плотности состояний, оптической проводимости, радиуса локализации и фазовой диаграммы трехмерной и двумерной сильно коррелированной и сильно неупорядоченной парамагнитной модели Андерсона–Хаббарда в таком подходе. Вывод о возможности восстановления металлического состояния из диэлектрика Мотта–Хаббарда с ростом беспорядка. Вывод о возможность существования эффективного андерсоновского перехода металл-диэлектрик для конечных двумерных систем.

- 11. Вывод о том, что общее однозонное правило сумм Кубо выполняется в DMFT+Σ подходе (как в модели "горячих точек" для псевдощелевого состояния, так и модели Андерсона–Хаббарда), однако сам оптический интеграл в общем случае зависит от температуры и характерных параметров моделей, таких как ширина псевдощели, корреляционная длина, примесное рассеяние, приводя к эффективному "нарушению" оптического правила сумм, и результаты для таких зависимостей оптического интеграла.
- 12. Результаты для плотности состояний и переломов ("кинков") в энергетической дисперсии, полученные в DMFT+Σ подходе для модели Хаббарда с взаимодействием между сильно коррелированными электронами проводимости и решеткой с дебаевскими или эйнштейновскими фононами.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на Международных школах-симпозиумах физиков-теоретиков "Коуровка" (Кунгур, 2002 г.; Челябинск, 2004 г.; Челябинск, 2006 г.; Новоуральск, 2008; Новоуральск, 2010), на 33-м всероссийском совещании по физике низких температур НТ-33 (Екатеринбург, 2003 г.), на VII и VIII школе-семинаре молодых ученых "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений" (Сочи, 2002 г., 2004 г.), на международных конференциях "Materials and Mechanisms of Superconductivity High Temperature Superconductors" $M^2S - HTSCVI$ (Хьюстон, США, 2000), $M^2S - HTSCVIII$ (Дрезден, Германия, 2006 г.); на международнных конференциях "Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости" ФПС'04 (Звенигород, 2004 г.), ФПС'06 (Звенигород, 2006 г.), ФПС'08 (Звенигород, 2008 г.); на международнных конференциях "Spectroscopies in Novel Superconductors" SNS2004 (Sitges, Испания), SNS2007 (Sendai, Япония), SNS2010 (Шанхай, Китай); на международнных конференциях "Gordon Research Conferences" GRC'01 (Оксфорд, Великобритания, 2001 г.), GRC'04 (Оксфорд, 2004 г.), GRC'07 (Les Diablerets, Швейцария, 2007 г.).

Личный вклад автора. Автор лично принимал участие в постановке всех задач, отраженных в диссертации, разработке моделей и методов их решения, анализе и интерпретации полученных результатов. Основная часть аналитических вычислений, а также разработка и тестирование основной части расчетных программ выполнены лично автором или при его непосредственном участии.

Основная часть результатов диссертации получена совместно с М.В.Садовским. Часть результатов Глав 4 и 6 получена при участии Н.А.Кулеевой (Стригиной). Часть результатов Глав 5 и 6 получена совместно с И.А.Некрасовым. Часть результатов раздела 5.5 получены с участием З.В.Пчелкиной, Е.Е.Кокориной, Н.С.Павлова, а также в сотрудничестве с экспериментальными группами Institute for Solid State Research, Dresden, Germany и Graduate School of Engineering Science, Osaka University, Japan.

Публикации. По теме диссертации опубликованы 30 научных работ, приведенных в списке литературы под номерами [23, 57, 58, 59, 64, 66, 67, 68, 71, 87, 101, 111, 112, 122, 123, 124, 183, 190, 191, 192, 193, 194, 195, 196, 214, 247, 257, 267, 283, 284].

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и тринадцати приложений. Она изложена на 442 страницах, включая 173 рисунка и список литературы из 312 наименований.

Краткое содержание диссертации.

ВО ВВЕДЕНИИ обосновывается актуальность темы диссертационной работы, кратко раскрывается содержание рассматриваемых в ней задач, формулируется цель работы, а также научная новизна и практическая ценность результатов исследования.

ВО ВТОРОЙ ГЛАВЕ дается качественное представление о псевдощелевом состоянии. Проводится обзор основных свойств ВТСП купратов и экспериментальных результатов, демонстрирующих наличие псевдощели в широкой области фазовой диаграммы. Приводятся теоретические соображения о природе псевдощели. Дается обзор, предложенных ранее другими авторами одномерных моделей псевдощелевого состояний, которые служат фундаментом для дальнейших двумерных обобщений, рассматриваемых в диссертации.

В ТРЕТЬЕЙ ГЛАВЕ рассмотрен ряд точно или "почти точно" решаемых двумерных моделей псевдощелевого состояния, вызываемого как "диэлектрическими" (SDW,CDW), так и сверхпроводящими флуктуациями ближнего порядка. Продемонстрировано, что "диэлектрический" сценарий формирования псевдощели в купратах является предпочтительным. В рамках рассматриваемых моделей получены выражения для одночастичных функций Грина, исследовано поведение одноэлектронной плотности состояний и спектральной плотности, демонстрирующей нефермижидкостной характер, обусловленный сильным рассеянием электронов на флуктуациях ближнего порядка.

На широком классе одно и двумерных моделей флуктуирующей щели, служащих для описания псевдощели, исследована квазичастичная перенормировка (Z – фактор) одночастичной функции Грина, демонстрирующая нефермижидкостное поведение, характерное для "маргинальной" ферми жидкости или латтинджеровской жидкости. Исследована эффективная картина "разрушения" поверхности Ферми, как в модели "горячих точек" для диэлектрических (SDW, CDW) псевдощелевых флуктуаций, так и в качественно отличном случае сверхпроводящих d - волновых флуктуаций.

Построен алгоритм вычисления производящей функции для числа "скелетных" графиков неприводимой собственно-энергетической и вершинных частей в диаграмм-

ной технике для задач с гауссовским случайным полем. Найдено точное рекуррентное соотношение, определяющее число графиков в любом порядке теории возмущений и асимптотика в пределе высоких порядков. Полученные результаты применяются к анализу задачи об электроне в гауссовом случайном поле с коррелятором типа "белого шума".

В ЧЕТВЕРТОЙ ГЛАВЕ с использованием ряда двумерных моделей псевдощелевого состояния, рассмотренных в третьей главе, исследовано влияние псевдощели на свойства сверхпроводящей фазы. Во всех моделях псевдощель подавляет сверхпроводимость, а уменьшение корреляционной длины ближнего порядка, замывая псевдощель, способствует росту критической температуры T_c .

В простой точно решаемой модели псевдошелевого состояния, вызываемого флуктуациями ближнего порядка с бесконечной корреляционной длиной, основанной на модели поверхности Ферми с "горячими участками", исследованы особенности сверхпроводящего состояния (*s* и *d*-спаривание). Показано, что усредненная по этим флуктуациям сверхпроводящая щель отлична от нуля и в области температур выше среднеполевой температуры T_c сверхпроводящего перехода во всем образце, что является следствием несамоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка по случайному полю флуктуаций (т.е. следствием нарушения стандартного предположения о самоусредняемости щели, которое позволяет независимо усреднять (по конфигурациям случайного поля) параметр порядка Δ и различные комбинации электронных функций Грина, входящие в основные уравнения теории сверхпроводимости). В области температур $T > T_c$ сверхпроводимость существует, по-видимому, в отдельных областях – "каплях". Изучены спектральная плотность и плотность состояний, сверхпроводящие особенности в которых существуют и в области $T > T_c$, тогда как температура $T = T_c$, в этом смысле, ничем не выделена. Аналогичное исследование, проведенное в другой точно решаемой модели псевдощелевого состояния, позволяющей рассмотрение конечных корреляционных длин ближнего порядка ξ , подтверждает эти выводы. С уменьшением корреляционной длины ξ эффекты несамоусредняемости ослабевают, исчезая при $\xi \to 0$, однако при конечных значениях ξ полная самоусредняемость отсутствует. Полученные аномалии находятся в качественном согласии с рядом экспериментов на недодопированных ВТСП-купратах, в частности, возможна прямая связь с картиной неоднородной сверхпроводимости, наблюдаемой в STM экспериментах.

В моделях псевдощелевого состояния с "горячими участками" и "горячими точками" на поверхности Ферми в стандартном предположении о самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка дан микроскопический вывод разложения Гинзбурга - Ландау для куперовского спаривания s- и d-типа и изучено влияние псевдощелевых флуктуаций на температуру сверхпроводящего перехода и на основные свойства (глубина проникновения, длина когерентности, наклон верхнего критического поля, скачок теплоемкости) сверхпроводника вблизи Т_с. Построена система рекуррентных уравнений Горькова для упомянутых типов спаривания. Проанализировано влияние псевдощели на температуру сверхпроводящего перехода и на температурное поведение сверхпроводящей щели. Выявлены два возможных типа взаимодействия сверхпроводящего параметра порядка с псевдощелевыми флуктуациями, приводящих к существенно различным энергетическим масштабам их влияния на сверхпроводимость. В наиболее "реалистичной" модели "горячих точек" также проанализировано и влияние немагнитных примесей на эти сверхпроводящие характеристики. Показано, что в рамках этой модели удается провести полуколичественное моделирование фазовой диаграммы ВТСП купратов.

В ПЯТОЙ ГЛАВЕ дается краткое введение в проблематику сильно коррелированных систем и теорию динамического среднего поля (DMFT), как вершину современного теоретического описания таких систем.

Предложено новое обобщение DMFT, включающее в ее уравнения характерный масштаб длины через зависящую от импульса "внешнюю" собственно-энергетическую часть Σ_k, вызванную нелокальными поправками от флуктуаций "диэлектрического" (SDW,CDW) ближнего порядка. Такой DMFT+Σ подход, включая в рассмотрение нелокальные корреляции (в принципе любого типа), позволяет сохранить неизменной самосогласованную систему уравнений DMFT. Плотность состояний, спектральная плотность и ARPES спектры, полученные в таком DMFT+Σ подходе для двумерных сильно коррелированных систем, демонстрируют формирование псевдощели вблизи уровня Ферми квазичастичной зоны.

В DMFT+Σ подходе исследуется влияние пседощели на поверхность Ферми в сильно коррелированных системах с демонстрацией частичного ее "разрушения" и формирования "дуг Ферми", наблюдаемого в ARPES экспериментах на купратах.

Предложена точно решаемая упрощенная модель псевдощели, которая способна описать плавный переход от картины "дуг Ферми" при высоких температурах (типичных для большинства ARPES экспериментов) к малым "карманам" поверхности Ферми (наблюдаемым в экспериментах по магнитным квантовым осцилляциям) при низких температурах. Предложен качественный критерий наблюдаемости магнитных осцилляций в псевдощелевом состоянии.

DMFT+Σ подход развит для расчетов двухчастичных свойств, таких как оптическая проводимость, что позволило исследовать псевдощелевые эффекты в продольной оптической проводимости двумерных сильно коррелированных систем.

Предложена новая комбинированная расчетная схема LDA+DMFT+ Σ , в которой LDA(DFT) (теория функционала электронной плотности в приближении локальной плотности) обеспечивает получение модельных параметров для однозонной модели Хаббарда, решаемой (для учета нелокальных псевдощелевых флуктуаций) в DMFT+ Σ подходе. Такой обобщенный LDA+DMFT+ Σ подход использован для описания электронной структуры в псевдощелевом состояний нескольких прототипов высокотемпературных сверхпроводящих составов: дырочно (Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8- δ}, La_{2-x}Sr_xCuO₄) и и электронно (Nd_{2-x}Ce_xCuO₄, Pr_{2-x}Ce_xCuO₄) допированных.

Предложена простая аналитическая модель многозонного электронного спектра вблизи уровня Ферми для новых высокотемпературных сверхпроводников на основе железа, в рамках которой исследовано влияние антиферромагнитного рассеяния, как в условиях дальнего порядка в стехиометрическом случае, так и в области возможных флуктуаций антиферромагнитного ближнего порядка в допированных составах. Продемонстрировано возможное псевдощелевое поведение, связанное с частичным "разрушением" поверхности Ферми и перестройкой квазичастичных зон.

В ШЕСТОЙ ГЛАВЕ обобщенный DMFT+Σ подход развит на учет других видов дополнительных взаимодействий: фононов, примесей и т.д.

В таком DMFT+Σ подходе исследована модель Андерсона-Хаббарда, позволяющая учесть как электронные корреляции, приводящие к моттовскому переходу металл-диэлектрик, так и эффекты сильного беспорядка, приводящие к андерсоновскому переходу металл-диэлектрик. Сильные корреляции учитывались посредством DMFT, а сильный беспорядок – путем подходящего обобщения самосогласованной теории локализации. Рассчитаны плотность состояний, оптическая проводимость, радиус локализации и фазовая диаграмма как трехмерной, так и двумерной сильно коррелированной и сильно неупорядоченной парамагнитной модели Андерсона– Хаббарда. Продемонстрирована возможность восстановления металлического состояния из диэлектрика Мотта–Хаббарда с ростом беспорядка. Показана возможность существования эффективного андерсоновского перехода металл-диэлектрик для конечных двумерных систем.

Исследовано оптическое правило сумм в сильно коррелированных системах. Показано, что в рамках DMFT+Σ подхода общее однозонное правило сумм Кубо выполняется как в модели "горячих точек" для псевдощелевого состояния, так и модели Андерсона–Хаббарда, однако сам оптический интеграл в общем случае зависит от температуры и характерных параметров моделей, таких как ширина псевдощели, корреляционная длина, примесное рассеяние, приводя к эффективному "нарушению" оптического правила сумм, которое может наблюдается в экспериментах.

В DMFT+Σ подходе исследована модель Хаббарда с взаимодействием между сильно коррелированными электронами проводимости и решеткой с дебаевскими или эйнштейновскими фононами. Представлены результаты для плотностей состояний и изломов ("кинков") в дисперсионных кривых электронного спектра при различных параметрах модели. Проанализировано взаимовлияние недавно открытых "кинков"чисто электронной природы и обычных фононных "кинков"в электронном спектре.

В ЗАКЛЮЧЕНИИ сформулированы основные результаты и выводы, полученные в диссертации.

Некоторые технические расчеты, во избежание загромождения основного текста, вынесены в ПРИЛОЖЕНИЯ.

2 КАЧЕСТВЕННЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О ПСЕВ-ДОЩЕЛЕВОМ СОСТОЯНИИ.

2.1 Псевдощель, как "предчувствие" возникновения щели (сверхпроводящей или диэлектрической).

Прежде чем переходить к систематическому изложению материала необходимо ответить на два основных вопроса:

Что такое псевдощель?

Понятие псевдощели было впервые сформулировано Моттом в качественной теории неупорядоченных (некристаллических) полупроводников [1]. Псевдощель по Мотту представляет собой область пониженной плотности электронных состояний в интервале энергий, соответствующих запрещенной зоне идеального кристалла, и представляет собой "воспоминание" об этой зоне, сохраняющееся и при сильном разупорядочении (аморфизации, плавлении и т.п.). К сожалению, достаточно часто в общирной литературе по ВТСП купратам слова псевдощель и псевдощелевое состояние используют в слишком широком смысле, употребляя их и в ситуации, когда есть щель в энергетическом спектре, связанная с некоторым видом дальнего порядка, но она в силу тех или иных причин достаточно размыта. Сразу скажем, что в данной диссертации под этими словами мы будем понимать, следуя Мотту, совсем другую ситуацию – когда дальнего порядка и связанной с ним щели в системе нет, а есть развитые флуктуации этого ближнего порядка и псевдощель, как предчувствие будущего возникновения щели.

Почему именно псевдощель?

Сверхпроводимость по сей день остается одной из самых актуальных и притягательных физических проблем. Открытие в 1986 г. Беднорцем и Мюллером [2] высокотемпературной сверхпроводимости вызвало огромный энтузиазм и колоссальный всплеск исследований. Довольно скоро выяснилось, что на фазовой диаграмме купратов (Рис. 1) есть область, лежащая между антиферромагнитной и сверхпроводящей фазами, где почти все свойства системы имеют существенные аномалии. Это область так называемого псевдощелевого состояния (псевдощели). За прошедшие годы сложилось и продолжает укрепляться мнение, что понимание физики происходящего в этой области есть ключ к пониманию всей природы ВТСП. Этому состоянию посвящены уже тысячи экспериментальных и теоретических работ. Достаточно сказать, что на одной из основных конференции по высокотемпературной сверхпроводимости $M^2S - HTSCVI$ в г. Хьюстон (2000) почти половина докладов в той или иной мере касались исследования псевдощелевого состояния. Конечно за последнее десятилетие появился большой круг новых интересных проблем, синтезированы новые высокотемпературные системы, однако исследования псевдощели продолжают играть заметную роль и в последние годы.

2.1.1 Основные экспериментальные факты о псевдощелевом состоянии ВТСП купратов.

Высокотемпературные сверхпроводники на основе оксидов меди (ВТСП) изучаются уже более 20 лет. За прошедшие годы достигнут несомненный прогресс в понимании природы ВТСП-систем и их основных физических свойств, несмотря на то, что эти системы обладают достаточно сложной фазовой диаграммой (Рис. 1), содержащей практически все основные явления, изучаемые в физике твердого тела.

Собственно сама сверхпроводящая фаза в ВТСП купратах имеет, по-видимому, достаточно обычную природу. Большинство исследователей не сомневается, что в ВТСП – оксидах реализуется куперовское спаривание по более или менее стандартному "сценарию" теории БКШ¹. Однако, вопрос об основном взаимодействии, приводящем к такому спариванию, до сих пор вызывает горячие дискуссии. В стандартном электрон - фононном механизме [3, 4] куперовского спаривания достаточно сложно получить *d* – симметрию куперовских пар, наблюдающуюся в купратах, однако такие попытки продолжают предприниматься [5]. Большее развитие получил спин флуктуационный [6, 7, 8, 9]механизм в рамках которого было *предсказано d* – спа-

¹Из специфических особенностей данных систем следует отметить: спаривание d - типа и относительно малый размер пар $\xi_0 \sim 5 - 10a$, так что купраты оказываются в переходной области от "больших и рыхлых" пар теории БКШ к картине "компактных" бозонов.



Рис. 1: Схематическая фазовая диаграмма ВТСП-купратов. В области температур $T < T^*$ в системе существуют развитые флуктуации ближнего АFM-порядка. При $T' < T < T^*$ эти флуктуации можно рассматривать как статические.

ривание в ВТСП – оксидах. Последующее экспериментальное подтверждение этого факта и возможность полуколичественного объяснения многих свойств этих систем, по-видимому делают этот подход наиболее конкурентноспособным среди множества других предложенных механизмов². Следует сразу отметить, что в этой диссертации мы нигде не будем конкретизировать микроскопический механизм спаривания, оставаясь в рамках общего феноменологического подхода БКШ и анизотропного обобщения стандартной теории Гинзбурга – Ландау, наиболее естественных и полезных с точки зрения описания эксперимента.

Основные же трудности в описании купратов связаны с весьма необычными свойствами этих систем в нормальном (несверхпроводящем) состоянии, без понимания природы которых сложно расчитывать на окончательное выяснение микроскопического механизма ВТСП. Ниже приведены характерные особенности нормального состояния ВТСП купратов, которые в той или иной мере используются или обсуждаются в диссертации.

В ВТСП-системах наблюдается сильная анизотропия всех свойств (квазидвумер-

²Чаще всего обменных – *RVB* [10], *SO*(5) [11] и т.д.

ность). Носители тока достаточно свободно распространяются в плоскостях CuO_2 (направление *ab* в кристалле), тогда как движение в поперечном к плоскости направлении (кристаллическая ось *c*) сильно подавлено. Роль квазидвумерности в реализации высокотемпературной сверхпроводимости в этих системах до сих пор остается не вполне выясненной, однако очевидно, что она может приводить к заметному расширению флуктуационной области различных фаз на фазовой диаграмме.

В этих соединениях при допировании (изменении числа носителей тока легированием) происходит фазовый переход металл-диэлектрик. Например, "родительское" стехиометрическое соединение La_2CuO_4 является антиферромагнитным диэлектриком с температурой Нееля порядка 400K. В нем существует хорошо определенная оптическая щель, а антиферромагнетизм обусловлен упорядочением локализованных спинов на ионах меди и хорошо описывается двумерной моделью Гейзенберга. Это диэлектрическое состояние быстро разрушается введением небольшого числа (порядка нескольких процентов) легирующих примесей. Такая ситуация типична в ВТСП-оксидах, которые, в этом смысле, являются *сильно коррелированными системами*.

Структурная и химическая неоднородность ВТСП- систем делает их существенно неупорядоченными. Поэтому понимание их природы невозможно без детального исследования роли беспорядка в формировании электронных свойств этих сильно коррелированных систем с пониженной размерностью. В частности, в них весьма существенно проявляются эффекты локализации [12]. Внутренняя неупорядоченность купратов ярко проявляется в данных сканирующей туннельной микроскопии, ясно свидетельствующих о неоднородности локальной плотности электронных состояний и сверхпроводящей щели на микроскопических масштабах даже в практически идеальных монокристаллах ВТСП – купратов [13, 14].

Эксперименты по фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES) [15, 16] демонстрируют наличие поверхности Ферми в этих системах. С этой точки зрения купраты несомненно являются *металлами*, хотя и довольно "плохими". На Рис. 2 при-

25



Рис. 2: Экспериментально установленный вид поверхности Ферми системы $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ с x = 0.063. Пунктиром показаны границы антиферромагнитной зоны Бриллюэна, которые возникают при возникновении дальнего антиферромагнитного порядка (удвоении периода). Точки пересечения этой границы с поверхностью Ферми называются "горячими" точками.

веден характерный вид экспериментально определенной поверхности Ферми системы $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ для состава с x = 0.063 [17]. Обратим внимание на наличие у этой поверхности Ферми характерных "плоских" участков. Такой вид поверхности Ферми в ARPES экспериментах достаточно типичен для большинства ВТСП купратов в области фазовой диаграммы, где реализуется сверхпроводимость, и неплохо описывается приближением сильной связи для энергетической дисперсии электронов на квадратной решетке меди с перескоками на первых и вторых ближайших соседей. Недавние эксперименты по квантовым магнитным осцилляциям (осцилляции холловского сопротивления [18], Шубников - де Гааз [19], де Гааз-ван Альфен [19, 20]) свидетельствуют о достаточно маленьких [21] дырочных или электронных "карманах" поверхности Ферми, что кажется находящимся в противоречии с хорошо установленными ARPES данными о поверхности Ферми в купратах. Одно из качественных объяснений этого явного противоречия было дано в работах [22, 23] (см. также раздел 5.3.2).

Как видно из фазовой диаграммы, показанной на Рис. 1, в зависимости от концентрации носителей заряда плоскости CuO_2 в ВТСП – оксидах наблюдается целый ряд фаз и областей с аномальными физическими свойствами. В области малых концентраций дырок все известные ВТСП – купраты являются антиферромагнитными диэлектриками. С ростом допирования, температура Нееля T_N быстро падает от величин порядка сотен градусов K, обращаясь в нуль при концентрации дырок $p \sim 0.05$ и система становится металлом. При дальнейшем допировании система становится сверхпроводником. Температура сверхпроводящего перехода растет с ростом концентрации носителей, проходя через характерный максимум при $p_0 \approx 0.15 - 0.17$ (оптимальное допирование), а затем уменьшается и исчезает при $p \approx 0.25 - 0.30$, хотя в этой (передопированной) области металлическое поведение сохраняется. При этом в области $p > p_0$ металлические свойства являются достаточно традиционными (фермижидкостное поведение), тогда как при $p < p_0$ система является аномальным металлом, не описываемым, по мнению большинства авторов, теорией ферми – жидкости.

Большинство аномалий нормального состояния ВТСП – купратов связано с формированием так называемого псевдощелевого состояния. Это состояние реализуется в широкой области фазовой диаграммы Рис. 1, соответствующей, в основном, "недодопированным" составам, и определяемой неравенством $T < T^*$. Нужно подчеркнуть, что линия T^* на Рис. 1, по - видимому, не является линией какого - либо фазового перехода. Фактически, в области $T \sim T^*$ происходит плавный "кроссовер" в область развитых псевдощелевых аномалий. Многочисленные эксперименты [24, 25] указывают на то, что в области $T < T^*$ в системах, находящихся в нормальном (несверхпроводящем) состоянии, появляются признаки наличия щели в энергетическом спектре. Речь идет не об истинной щели, а о некотором "предчувствии" ее появления в спектре. Величина T^* определяет характерный масштаб температуры (энергии) ниже которой проявляются псевдощелевые аномалии и просто пропорциональна энергетической ширине псевдощели.

Из вида фазовой диаграммы ясно, что щель в спектре может быть либо сверхпроводящей, либо диэлектрической. Соответственно существует два основных теоретических сценария для объяснения псевдощелевых аномалий ВТСП – купратов. Первый основан на модели формирования куперовских пар уже выше температуры сверхпроводящего перехода, с последующим установлением их фазовой когерентности в области существования сверхпроводящего состояния при $T < T_c$. Второй предполагает, что происхождение псевдощелевого состояния связано с флуктуациями ближнего порядка "диэлектрического" типа, существующими в области недодопированных составов на фазовой диаграмме. При этом наиболее популярной является картина антиферромагнитных (AFM) флуктуаций, хотя нельзя исключить аналогичную роль флуктуаций волн зарядовой плотности (CDW). В последнее время появился целый ряд экспериментов, по мнению автора, достаточно убедительно свидетельствующих в пользу именно второго сценария³. Поэтому основная часть диссертации сконцентрирована на рассмотрением именно таких моделей, по большей части имеея ввиду модель антиферромагнитных флуктуаций.

Псевдощелевые аномалии, в общем случае, интерпретируются как связанные с подавлением в данной области фазовой диаграммы плотности состояний (DOS) одночастичных возбуждений вблизи уровня Ферми. Такое подавление DOS в недодопированных купратах наблюдается на целом ряде различных экспериментов: по электронному вкладу в теплоемкость ВТСП – купратов [26, 27], из экспериментов по одночастичному туннелированию [28, 29, 30]. Коротко говоря, эти эксперименты свидетельствуют, что сверхпроводящая щель открывается при $T = T_c$ на фоне плавной псевдощели более широкой и существующей и при более высоких температурах. Псевдощель проявляется также в кинетических свойствах ВТСП – систем в нормальном состоянии, например, в сдвиге Найта и времени релаксации ЯМР (см. для обзора [31, 25]). Эти эксперименты также косвенно свидетельствуют о падении плотности состояний на уровне Ферми при $T < T^*$. Образование псевдощели в области

³Во-первых, псевдощелевые аномалии заметно усиливаются при приближении к области AFM фазы, а для оптимальных составов, где T_c , а значит и сверхпроводящие флуктуации максимальны, псевдощелевые аномалии практически полностью подавлены. Во-вторых, ARPES эксперименты на электронно допированных системах демонстрируют максимальное разрушение поверхности Ферми непосредственно в "горячих точках", что является наиболее ярким свидетельством в пользу "ди-электрического" сценария.

недодопированных составов ВТСП – купратов четко проявляется также в многочисленных экспериментах по измерению оптической проводимости (см. для обзора [24]). Характерной особенностью здесь является появление для недодопированных образцов "псевдощелевого провала" и размытого максимума поглощения через псевдощель на частотах порядка ширины псевдощели $\Delta \sim T^*$ (см. Рис. 119 раздела 5.5.1).

Наиболее мощным инструментом исследования псевдощелевого состояния является фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES) [32]. В течении последнего десятилетия наблюдался огромный прогресс в экспериментальной технике ARPES. На сегодня, многие важные экспериментальные характеристики могут быть получены из ARPES данных, например, поверхность Ферми (FS), квазичастичная дисперсия и затухание и даже поведение СЭЧ [16, 33]. Это позволило открыть целый ряд интересных физических аномалий в недодопированной фазе купратов: формирование псевдощели, "теневые" зоны, дуги Ферми и т.д. [16, 33]. В дальнейшем в диссертации мы будем достаточно часто ссылаться на ARPES данные, поэтому несколько подробнее остановимся на таких экспериментах.

Интенсивность ARPES (энергетическое и импульсное распределение фотоэлектронов) фактически определяется как [16]:

$$I(\mathbf{k}\omega) = I_0(\mathbf{k})f(\omega)A(\mathbf{k}\omega) \tag{1}$$

где **k** – импульс в зоне Бриллюэна, ω – энергия начального состояния, измеренная относительно уровня Ферми (химпотенциала)⁴, $I_0(\mathbf{k})$ включает в себя кинематические факторы и квадрат матричного элемента электрон – фотонного взаимодействия и, в достаточно грубом приближении, считается константой. Величина

$$A(\mathbf{k},\omega) = -\frac{1}{\pi} Im G(\mathbf{k},\omega + i\delta)$$
⁽²⁾

где $G(\mathbf{k},\omega)$ – функция Грина, представляет собой спектральную плотность носителей. Функция распределения Ферми $f(\omega) = [exp(\omega/T) + 1]^{-1}$ отражает тот факт, что в процессе фотоэмиссии участвуют электроны из занятых состояний. Таким образом,

⁴В реальных экспериментах ω измеряется относительно уровня Ферми хорошего металла типа Pt или Ag, находящегося в электрическом контакте с образцом.



Рис. 3: Качественная картина спектральной плотности. (a) – на поверхности Ферми ($\xi_{\mathbf{k}} = 0$) нормального металла (ферми-жидкость). (b) – два симметричных узких пика на поверхности Ферми ($\xi_{\mathbf{k}} = 0$), соответствующих "боголюбовским" квазичастицам в системе с диэлектрической щелью $\Delta_{\mathbf{k}}$ (при наличии дальнего порядка CDW или SDW типа). Размытые максимумы – система без дальнего порядка (псевдощелевое поведение). (c) Тоже самое, что и в случае (b), но для $\xi_{\mathbf{k}} > 0$, т.е. над поверхностью Ферми. В этом случае возникает характерная асимметрия спектральной плотности.

в упомянутом грубом приближении, можно говорить, что в ARPES экспериментах непосредственно измеряется произведение $f(\omega)A(\mathbf{k},\omega)$, и мы получаем прямую информацию о спектральных свойствах одночастичных возбуждений системы.

В стандартной теории ферми – жидкости одноэлектронная функция Грина металла имеет вид:

$$G(\omega, \mathbf{k}) = \frac{Z_{\mathbf{k}}}{\omega - \xi_{\mathbf{k}} - i\gamma} + G_{incoh}$$
(3)

где $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ – энергия квазичастиц, отсчитанная от химпотенциала μ , γ – их затухание, $0 < Z_{\mathbf{k}} < 1$ – вычет в полюсе, G_{incoh} – несингулярный вклад многочастичных возбуждений. Таким образом, хорошо определенным квазичастицам на поверхности Ферми ($\xi_{\mathbf{k}} = 0$) соответствует узкий (с шириной γ) лоренцовский пик спектральной плотности $A(\mathbf{k}_F, \omega)$ при $\omega = 0$ (см. Рис. 3(а)). При установлении дальнего порядка (например SDW(AFM) или CDW типа) в спектре элементарных возбуждений системы открывается (диэлектрическая) щель $\Delta_{\mathbf{k}}$ и одноэлектронная функция Грина (в которую можно добавить и некоторое затухание Г) приобретает характерный горь-



Рис. 4: Корреляционная длина спиновых флуктуаций в купратах. (а) – $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$, зависимость от температуры для разных уровней допирования [34]. (b) – Фазовая диаграмма $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ на которой цветом определена корреляционная длина ξ/a . Пунктир – граница AFM фазы (температура Нейля), штрих-точечная кривая – граница псевдощелевой области (T^*). Вертикальные разрезы соответствуют уровням допирования для кривых на (а). (с) – Зависимость от допирования в $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ [35](a=3.8A).

ковский вид:

$$G(\omega, \mathbf{k}) = \frac{u_{\mathbf{k}}^2}{\omega - E_{\mathbf{k}} + i\Gamma_{\mathbf{k}}} + \frac{v_{\mathbf{k}}^2}{\omega + E_{\mathbf{k}} - i\Gamma}$$
(4)

где $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$ – спектр возбуждений, а $u_{\mathbf{k}}^2(v_{\mathbf{k}}^2) = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right)$ – коэффициенты Боголюбова. Тогда в спектральной плотности вблизи поверхности Ферми $A(\mathbf{k} \sim \mathbf{k}_F, \omega)$ возникает *два* узких, в меру малости Г, пика, соответствующих "боголюбовским" квазичастицам (см. Рис. 3(b,c)). Если дальний порядок (SDW или CDW) отсутствует, но есть сильное рассеяние на флуктуациях соответствующего ближнего порядка, характеризуемого корреляционной длиной ξ , то в области импульсного пространства, где при наличии дальнего порядка открывается диэлектрическая щель, сохраняется "воспоминание" о ней в виде характерной "двугорбой" структуры, как это качественно показано на Рис. 3(b,c). При этом ширина максимумов, естественно, определятся параметром v_F/ξ , т.е. обратным временем пролета электрона через область размером ξ , в которой эффективно сохраняется "диэлектрическое" упорядочение. Дальнейшее теоретическое рассмотрение полностью подтверждает такую качественную картину.

Отметим, что эксперименты по рассеянию нейтронов действительно подтверждают наличие развитых спиновых флуктуаций AFM ближнего порядка во всей области псевдощелевых аномалий [34, 35]. На Рис. 4(a,b) показана зависимость корреляционной длины таких флуктуаций от допирования и температуры в электронном ВТСП $Nd_{2-x}Ce_{x}CuO_{4}$ [34]. Видим, что штрих-точечная кривая Рис. 4(b), соответствующая температуре исчезновения псевдощелевых аномалий (T^*) , хорошо коррелирует с областью заметного уменьшения корреляционной длины, а во всей псевдощелевой области корреляционная длина спиновых флуктуаций составляет десятки и даже сотни параметров решетки а. Для сравнения на Рис. 4(с) приведена зависимость корреляционной длины от допирования для дырочной системы La_{2-x}Sr_xCuO₄ [35]. При оптимальном допирования корреляционная длина ξ становится совсем малой, составляя лишь $\sim 2a$, да и для недодопированных составов $\xi \sim 5a$. Это подтверждает наблюдающуюся в экспериментах общую закономерность, что в электронно допированных купратах псевдощелевые аномалии выражены гораздо сильнее, чем в дырочных. Поэтому достаточно часто далее в диссертации как объект исследования и сравнения будут выбираться именно электронные купраты.

Однако, вернемся к ARPES экспериментам которые, последнее время очень широко используют для исследования свойств купратов. Большое количество экспериментальных ARPES результатов будет с необходимыми пояснениями приведено в разделе 5.5.1 диссертации, а здесь мы коснемся только наиболее ярких. Как уже отмечалось хорошо определенным квазичастицам должен соответствовать достаточно узкий пик спектральной плотности $A(\mathbf{k}_F, \omega)$ при $\omega = 0$, в то время как для недодопированных составов вблизи "горячих точек", где рассеяние на AEM флуктуациях сильно, можно ожидать "двугорбое" поведение спектральной плотности, аналогичное Рис. 3(b), соответствующее размытому максимуму ARPES интенсивности $I \approx f(\omega)A(\mathbf{k}_F, \omega)$, смещенному от уровня Ферми ($\omega = 0$) в область отрицательных частот. Это ярко видно, из данных работы [36], показанных на Рис. 5, где четко прослежена эволюция такого пика при движении вдоль поверхности Ферми. Видим,



Рис. 5: Спектры ARPES, измеренные в различных точках на поверхности Ферми, по мере перехода от диагонали зоны Бриллюэна к окрестности точки $(\pi, 0)$: (a) – точки в которых проводились измерения; (b) – сравнение данных в "антинодальной" точке A (окрестность $(\pi, 0)$) в оптимально допированном и передопированном Bi2201; (c) – данные по оптимально допированному Bi2212 с $T_c = 90K$, полученные при T = 140K; (d) – такие же данные для передопированного Bi2201 с $T_c = 0$, измеренные при T = 140K.

что квазичастичное поведение имеет место всюду для передопированных образцов и только в окрестности диагонали зоны Бриллюэна (направление $(0,0) - (\pi,\pi)$) для оптимально допированных (и недодопированных). Квазичастичный пик в диагональном направлении сохраняется даже для сильно недодопированных образцов, находящихся на пороге перехода в диэлектрическое состояние [17].

Особенно поразительно наблюдение в ARPES экспериментах на дырочных купратах "дуг Ферми", т.е. частей "большой" поверхности Ферми вблизи диагоналей зоны Бриллюэна с более или менее хорошо определенными квазичастицами, в то время как части поверхности Ферми вблизи границ зоны Бриллюэна полностью "разрушены" [32, 16, 37] (см. левую панель Рис. 6), что часто интерпретируется в том смысле, что и псевдощель имеет $d_{x^2-y^2}$ – волновую симметрию, и имеет сверхпроводящую природу, переходя в истинную щель при $T < T_c$. Однако имеются прямые экспериментальные данные, которые свидетельствуют о "диэлектрической" природе псевдощели. На правой панели Рис. 6 приведены ARPES данные о поверхности Фер-



Рис. 6: ARPES поверхности Ферми. Слева – дырочного сверхпроводника $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ [38]. Справа – электронного сверхпроводника $Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO_4$ в одном квадранте зоны Бриллюэна [39]. Пунктир обозначает границу антиферромагнитной зоны Бриллюэна.

ми электронного сверхпроводника $Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO_4$ [39], которые демонстрируют, что "разрушение" поверхности Ферми за счет образования псевдощели происходит в окрестности "горячих точек", возникающих при пересечении этой поверхности с границей "будущей" AFM зоны Бриллюэна. Соответствующая щель в спектре, очевидно имеет обычный "зонный" или "диэлектрический" характер, а куперовское спаривание с d – симметрией тут не причем. Наблюдение именно "дуг Ферми" в большинстве ARPES экспериментов в ВТСП купратах связано просто с тем, что основная масса таких экспериментов проводится на дырочных системах, в которых расстояние от "горячих точек" до точки (0, π) заметно меньше, чем в NdCeCuO, и разрешающей способности ARPES просто не хватает для выделения отдельных "горячих точек", находящиеся близко друг другу в окрестности (0, π). По-видимому, результаты работы [39] однозначно решают вопрос в пользу "диэлектрического" сценария формирования псевдощели в ВТСП – купратах.

В различных экспериментах, обсуждавшихся выше, характерная температура T^* , ниже которой проявляются псевдощелевые аномалии, несколько меняется, в зависимости от того, какая величина измеряется. Однако наблюдается очевидная универсальность – T^* падает с ростом допирования, обращаясь в нуль при концентрации носителей слегка превышающей оптимальную. На Рис. 7 приведена обобщающая свод-



Рис. 7: Зависимость энергетической ширины псевдощели E_g в *YBCO* от концентрации дырок по данным различных экспериментов.

ка данных (найденных из обработки самых разных экспериментов) по энергетической ширине псевдощели E_g в системе YBCO в зависимости от концентрации дырок [40]⁵. Псевдощель "закрывается" при критическом значении концентрации $p_c \approx 0.19$, слегка превышающем оптимальную концентрацию носителей, что также указывает на несверхпроводящую природу псевдощели в ВТСП – купратах.

В заключение отметим, что псевдощель свойственна не только ВТСП-купратам. В недавно открытых [41] высокотемпературных сверхпроводниках на основе железа (см. для обзора [42, 43]) также были обнаружены псевдощелевые аномалии похожие на аномалии в купратах [44]. Существенные псевдощелевые аномалии обнаружены также в дихалькогенидах ряда переходных металлов (*TaSe*₂, *NbSe*₂, ...), обладающих гексогональной структурой [45, 46, 47]. По-видимому, псевдощелевое состояние может оказаться достаточно распространенным в квазидвумерных системах⁶ вблизи SDW или CDW переходов, что представляет большой интерес для дальнейших исследований.

2.2 Простая одномерная модель псевдощелевого состояния. Модель Садовского.

Как уже отмечалось выше далее мы будем предполагать "диэлектрический" сценарий формирования псевдощели и рассматривать рассеяние носителей заряда на псевдо-

⁵Здесь принималось достаточно произвольное модельное соотношение $E_g = 2.5T^*$

⁶В которых можно ожидать достаточно широких флуктуационных областей.

щелевых флуктуациях SDW или CDW типа. В условиях дальнего порядка когерентное поле рассеивает такие носители строго на вектор антиферромагнитизма Q, приводя к горьковской функции Грина (4). Если дальнего порядка нет, но есть развитые флуктуации соответствующего ближнего порядка, то имеется узкий пик рассеяния на импульсы вблизи Q с характерной шириной порядка обратной корреляционной длины флуктуаций $\kappa = 1/\xi$. Флуктуации далее будем полагать гауссовыми и статическими⁷. Таким образом, будем рассматривать рассеяние носителей в гауссовом статическом ("замороженном") случайном поле псевдощелевых флуктуаций.

Прежде чем анализировать "реалистические" двумерные модели, которые будут рассмотрены в следующей главе, весьма поучительно рассмотреть элементарную одномерную модель псевдощелевого состояния, предложенную в 1974 г. Садовским в качестве модели для описания флуктационной области перехода Пайерлса жидких полупроводников и допускающую точное решение в аналитическом виде [48, 49]. Несколько позднее такая модель была развита на случай конечных корреляционных длин флуктуаций [50, 51, 52].

В одномерном случае поверхность Ферми сводится к двум точкам $\pm p_F$. В результате, вектор антиферромагнитизма $Q = \pm 2p_F$, что сразу подразумевает рассмотрение несоизмеримых (с периодом обратной решетки) флуктуаций. Итак, пусть электрон совершает одномерное движение в случайном поле гауссовых флуктуаций, фурье - образ коррелятора которых, сопоставляемый линии взаимодействия (рассеяния) в соответствующей теории возмущений, имеет вид:

$$V_{eff}(q) = 2W^2 \left\{ \frac{\kappa}{(q-Q)^2 + \kappa^2} + \frac{\kappa}{(q+Q)^2 + \kappa^2} \right\} \qquad Q = 2p_F \tag{5}$$

⁷Как будет показано в следующей главе, такое предположение является разумным лишь при достаточно высоких температурах.
2.2.1 Предел бесконечной корреляционной длины флуктуаций ближнего порядка.

Точное решение можно получить в предел $\xi \to \infty$ ($\kappa \to 0$), т.е. в асимптотике очень больших корреляционных длин флуктуаций ближнего порядка⁸. Интересующий нас предел следует понимать в смысле:

$$v_F \kappa = v_F \xi^{-1} \ll Max\{2\pi T, \xi_p\} \tag{6}$$

В таком пределе можно просуммировать *все* фейнмановские графики теории возмущений с "взаимодействием" вида (5), которое переходит в нем в:

$$V_{eff}(q) = 2\pi W^2 \{ \delta(q - 2p_F) + \delta(q + 2p_F) \}$$
(7)

Действительно в графике m – го порядка по $V_{eff}(q)$ имеется 2m вершин, соединенных между собой линиями взаимодействия. При этом эти линии поочередно⁹ "уносят" и "приносят" импульсы $Q = 2p_F$. В результате, вклады любых графиков в данном порядке имеют вид $\frac{W^{2m}}{(i\varepsilon_n - \xi_p)^{m+1}(i\varepsilon_n + \xi_p)^m}$ ¹⁰ и просто совпадают, а их суммарный вклад определяется их полным числом m!, которое легко подсчитать из комбинаторных соображений. В самом деле, имеется 2m точек (вершин), куда "входят" или "выходят" линии взаимодействия. Из них m точек имеют "выходящую" линию, которая любым из m! способов может "войти" в оставшиеся "свободными" m вершин. Используя тождество (суммирование по Борелю):

$$\sum_{m=0}^{\infty} m! z^m = \sum_{m=0}^{\infty} \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} (\zeta z)^m = \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \frac{1}{1-\zeta z}$$
(8)

легко суммируем весь ряд для функции Грина:

$$G(\varepsilon_n p) = \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - \zeta W^2} = \int_0^\infty d\Delta \mathcal{P}(\Delta) \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - \Delta^2} \equiv \langle G_\Delta(\varepsilon_n p) \rangle$$
(9)

⁸Отметим, что переход к такому пределу не означает возникновения дальнего порядка. Электрон движется в гауссовом случайном поле со специфическим парным коррелятором, а не в периодической системе.

⁹Поочередность важна, чтобы электрон "не уходил" далеко от поверхности Ферми (точек $\pm p_F$). Это не так для случая соизмеримых флуктуаций (с Q соответствующему удвоению периода), когда "приход" или "уход" любого числа импульсов Q оставляет электрон вблизи уровня Ферми. Соответственно, для этого частного случая возникает несколько иная комбинаторика диаграмм [53].

¹⁰Здесь $\varepsilon_n = (2n+1)\pi T$ и мы воспользовались всегда справедливым в одномерии условием "нестинга" $\xi_{p-2p_F} = -\xi_p$.



Рис. 8: Спектральная плотность (слева (1)— $\xi_p = 0$; (2)— $\xi_p = 0.1W$; (3)— $\xi_p = 0.5W$) и плотность состояний (справа) в одномерной модели псевдощелевого состояния.

где возникла "нормальная" функция Грина диэлектрика (пайерлсовского типа):

$$G_{\Delta}(\varepsilon_n p) = \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - \Delta^2}$$
(10)

под знаком усреднения с так называемым распределением Релея¹¹:

$$\mathcal{P}(\Delta) = \frac{2\Delta}{W^2} e^{-\frac{\Delta^2}{W^2}} \tag{11}$$

Нетрудно показать (доказательство можно найти в [55]), что (9) представляет собой функцию Грина электрона, движущегося во внешнем поле вида $\Delta \cos(2p_F x + \phi)$, амплитуда которого "флуктуирует" с распределением Рэлея, а фаза ϕ распределена однородно на интервале от 0 до 2π .

Выполняя аналитическое продолжение $i\varepsilon_n \to \varepsilon \pm i\delta$, из (9) получаем , что спектральная плотность:

$$A(\varepsilon\xi_p) = -\frac{1}{\pi} Im G^R(\varepsilon p) = \frac{1}{W^2} (\varepsilon + \xi_p) \theta(\varepsilon^2 - \xi_p^2) e^{-\frac{\varepsilon^2 - \xi_p^2}{W^2}}$$
(12)

имеет "нефермижидкостный" вид, показанный на левой панели Рис. 8. Таким образом, полученная функция Грина не обладает особенностями полюсного вида на действительно оси ε , которые соответствовали – бы одночастичным возбуждениям квазичастичного типа.

¹¹Это распределение хорошо известно в статистической радиофизике, см. например [54].

Плотность состояний электронов имеет вид:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0(0)} = \left|\frac{\varepsilon}{W}\right| \int_0^{\frac{\varepsilon^2}{W^2}} d\zeta \frac{e^{-\zeta}}{\sqrt{\frac{\varepsilon^2}{W^2} - \zeta}} = 2\left|\frac{\varepsilon}{W}\right| \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{W^2}\right) Erfi\left(\frac{\varepsilon}{W}\right) = \\ = \begin{cases} 1 & \text{при} \quad |\varepsilon| \to \infty\\ \frac{2\varepsilon^2}{W^2} & \text{при} \quad |\varepsilon| \to 0 \end{cases}$$
(13)

где $N_0(0)$ – плотность состояний свободных электронов на уровне Ферми, а $Erfi(x) = \int_0^x dx e^{x^2}$ – интеграл вероятностей от мнимого аргумента. Вид этой плотности состояний, показанный на правой панели Рис. 8, демонстрирует наличие размытой псевдощели в окрестности уровня Ферми. По сути дела, это есть плотность состояний одномерного диэлектрика со щелью шириной 2 Δ , усредненная по флуктуациям этой щели, определяемым распределением (11).

Замечательной особенностью рассматриваемой модели является возможность получить точное решение (просуммировать *все* диаграммы) и для функции отклика на внешнее электромагнитное поле [48, 49, 55]. Произвольная диаграмма для вершинной части, описывающей такой отклик, может быть получена из произвольной диаграммы для функции Грина "вставкой" в любую из электронных линий линии внешнего поля. Проводя такие "вставки" во всех диаграммах ряда для одночастичной функции Грина (9) можно просуммировать весь ряд для вершинной части и получить замкнутые выражения для функций отклика (например для поляризационного оператора) [48, 49, 55]). Однако, структура ответа понятна и без вычислений нужно просто рассчитать отклик диэлектрика с фиксированной щелью Δ , а потом усреднить результат по флуктуациям щели с распределением Релея (11). В частности, для поляризационного оператора возникает следующее изящное выражение ($\omega_m = 2\pi mT$):

$$\Pi(\mathbf{q}\omega_m) = \int_0^\infty d\Delta \mathcal{P}(\Delta) 2T \sum_n \int_{-\infty}^\infty \frac{dp}{2\pi} \left\{ G_\Delta(\varepsilon_n \mathbf{p}) G_\Delta(\varepsilon_n + \omega_m \mathbf{p} + \mathbf{q}) + F_\Delta(\varepsilon_n \mathbf{p}) F_\Delta^+(\varepsilon_n + \omega_m \mathbf{p} + \mathbf{q}) \right\} = <\Pi_\Delta(\mathbf{q}\omega_m) >$$
(14)

где автоматически возникает произведение двух "аномальных" функций Грина:

$$F_{\Delta}(\varepsilon_n p) = \frac{\Delta^*}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\Delta|^2}$$
(15)



Рис. 9: Частотная зависимость действительной части проводимости в псевдощелевом состоянии. Проводимость дана в единицах $\frac{\omega_p^2}{4\pi W}$.

описывающих процессы переброса в системе с дальним порядком [55]. Ввиду отсутствия дальнего порядка в рассматриваемой задаче, среднее значение (15) обращается нуль при усреднении по фазе, тогда как среднее от парного произведения в двухчастичном отклике (14) отлично от нуля. В итоге, под знаком усреднения по флуктуациям щели здесь стоит просто поляризационный оператор диэлектрика (пайерлсовского типа).

Соответственно, для получения, например, действительной части проводимости в такой модели псевдощели достаточно усреднить выражение для действительной части проводимости одномерного диэлектрика со щелью Δ [55]:

$$Re\sigma_{\Delta}(\omega) = \begin{cases} \frac{\omega_p^2}{2\omega^2} \frac{\Delta^2}{\sqrt{\omega^2 - 4\Delta^2}} & \text{при} \quad |\omega| > 2\Delta\\ 0 & \text{при} \quad |\omega| < 2\Delta \end{cases}$$
(16)

по флуктуациям амплитуды этой щели с распределением Релея (11):

$$Re\sigma(\omega) = \frac{\omega_p^2}{2\omega^2} \int_0^{\frac{\omega}{2}} d\Delta \mathcal{P}(\Delta) \frac{\Delta^2}{\sqrt{\omega^2 - 4\Delta^2}}$$
(17)

где $\omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}$ – квадрат плазменной частоты. Соответствующая частотная зависимость показана на Рис. 9, где мы видим характерный размытый максимум поглощения через псевдощель.

Рассмотренная элементарная модель псевдощелевого состояния оказывается весьма полезной при решении целого ряда задач. Как будет показано в следующей главе,

она легко обобщается на двумерный случай в варианте модели "горячих участков" на поверхности Ферми [56]. Это позволяет (см. главу 4) проанализировать целый ряд вопросов, связанных с формированием сверхпроводящего состояния "на фоне" такой (диэлектрической) псевдощели [56, 57, 58, 59, 60]. Благодаря возможности точного аналитического решения, удается проанализировать тонкие вопросы отсутствия самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка в случайном поле псевдощелевых флуктуаций [57, 59], что указывает на возможный механизм образования локальных неоднородностей ("сверхпроводящих капель") при температурах выше среднеполевой температуры сверхпроводящего перехода. Это может объяснить, в частности, экспериментально наблюдаемые ¹² проявления сверхпроводящей псевдощели. Возможна и прямая связь с картиной неоднородной сверхпроводящей псевдощедаемой в STM экспериментах [13, 14].

Наряду с очевидными достоинствами модели заметны и ее существенные недостатки. В частности, совершенно нереалистической является асимптотика бесконечной корреляционной длины псевдощелевых флуктуаций.

2.2.2 Конечная корреляционная длина.

Учет эффектов конечности корреляционной длины представляет собой весьма сложную задачу. Для одномерной модели такое обобщение было впервые предложено в работе [50]. К сожалению, эту задачу нельзя решить точно, однако можно сформулировать некоторый весьма эффективный приближенный Ansatz, позволяющий выписать явное выражение для любой диаграммы произвольного порядка. Итак, будем рассматривать рассеяние электронов с линеаризованным спектром $\xi_p = v_F(|p| - p_F)$ в гауссовом случайном поле с коррелятором (5). С ростом порядка теории возмущений интегрирования становятся все более громоздкими, однако ситуация заметно упрощается, если при проведении интегрирований пренебречь вкладом вычетов от всех полюсов, кроме полюсов лоренцианов $V_{eff}(q)$ (5). Отметим, что такое приближение

¹²Например, аномальный эффект Нернста



Рис. 10: Пример диаграммы для СЭЧ 4-го порядка (а) и равной ей диаграмме без пересечения линий взаимодействия (b) с расставленными "начальными" (i) и "конечными" (f) вершинами, числами n_j и комбинаторными множителями s(k).

становится просто *точным*, когда вектор рассеяния $Q < p_F$ и рассеяние электронов происходит только на одной ("правой" или "левой") ветви линеаризованного спектра. Это связано с тем, что для электрона, рассеивающегося в пределах одной ветви спектра, скорость не меняет знак и все полюса электронных функций Грина лежат в одной комплексной полуплоскости. В интересующем нас сейчас случае $Q = 2p_F$ это конечно не так, однако такое приближение является весьма эффективным и в этом случае (см. Приложение А) и позволяет просуммировать *все* диаграммы теории возмущений. Действительно, в таком приближении любая диаграмма *m*-го порядка для собственно - энергетической части (СЭЧ) сводится к виду:

$$\Sigma^{(m)}(\varepsilon_n p) = W^{2m} \prod_{j=1}^{2m-1} \frac{1}{i\varepsilon_n - (-1)^j \xi_p + in_j v_F \kappa}$$
(18)

где n_j -число линий взаимодействия, охватывающих *j*-ю функцию Грина в данной диаграмме. В этом и состоит смысл предложенного Ansatz'a! Фактически, он является точным в пределе $\xi \to \infty$ (или $\kappa \to 0$), что очевидно из прямого сравнения с результатами рассмотрения этого предела, проведенного выше. Таким образом, для $Q = 2p_F$ точно учитывается рассеяние назад (с одной ветви спектра на другую) на вектор Q, а приближенно учитываются только малые (при больших ξ) "отклонения" от вектора рассеяния $Q = 2p_F$. Отметим также, что Ansatz становиться точным и в обратном "тривиальном" предельном случае $\kappa \to \infty$, когда эффективное взаимодействие (5) просто пропадает. В результате, Ansatz (18) обеспечивает эффективную интерполяцию между двумя точными пределами.

Обозначим, как показано на Рис. 10, буквами *i* и *f* "начальные" (слева на диаграмме) и "конечные" (справа) вершины, принадлежащие любой линии взаимодействия. В данном порядке теории возмущений, как следует из (18), величина диаграммы определяется лишь числами n_j , а следовательно лишь расстановкой *i* и*f* вершин. Более того, любая диаграмма с пересечением линий взаимодействия оказывается равной некоторой *единственной* диаграмме того же порядка без пересечения этих линий. Рецепт построения такой диаграммы (без пересечений) для данной последовательности *i* и *f* вершин может быть сформулирован следующим образом: начиная слева, первая *f* вершина соединяется линией взаимодействия с ближайшей к ней слева *i* вершиной, и так далее для оставшихся несоединенными вершин. Поэтому, фактически, мы можем рассматривать лишь *диаграммы без пересечения линий вза*имодействия, учитывая вклад диаграмм с пересечением с помощью дополнительных комбинаторных множителей *s*(*k*), приписываемых линиям взаимодействия (см. Рис. 10):

$$s(k) = \begin{cases} \frac{k+1}{2} & \text{при нечетных } k\\ \frac{k}{2} & \text{при четных } k \end{cases}$$
(19)

где k - 1 – число линий взаимодействия, охватывающих данную. Такой метод был впервые использован (для другой задачи) в работе Елютина [61]. Нетрудно убедиться, что число диаграмм для СЭЧ, равных заданной диаграмме без пересечений линий взаимодействия равно произведению множителей s(k), сопоставляемых всем линиям взаимодействия данной диаграммы [61, 50]¹³.

В результате, мы получаем фундаментальное рекуррентное соотношение для собственно – энергетической части [50]:

$$\Sigma_k(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{W^2 s(k)}{i\varepsilon_n - (-1)^k \xi_p + ikv_F \kappa - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n, \xi_p)}$$
(20)

Отсюда сразу же получается рекуррентное уравнение и для самой функции Грина:

$$G_k(\varepsilon_n, \xi_p) = \{i\varepsilon_n - (-1)^k \xi_p + ikv_F \kappa - W^2 v(k+1) G_{k+1}(\varepsilon_n, \xi_p)\}^{-1},$$
(21)

которое может быть представлено в виде "уравнения Дайсона", показанного графически на Рис. 11. Физическая функция Грина определяется как $G(\varepsilon_n, p) \equiv G_{k=0}(\varepsilon_n, p),$

¹³Единственное изменение, которое нужно сделать для случая соизмеримых флуктуаций состоит в том, что множители s(k) = k для всех k.



Рис. 11: Диаграммное представление рекуррентного соотношения для функции Грина в виде "уравнения Дайсона".

что эквивалентно полной сумме всего фейнмановского диаграммного ряда для рассматриваемой модели. Фактически, эти рекуррентные уравнения дают представление одноэлектронной функции Грина в виде следующей *цепной дроби*:

$$G(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p - \frac{W^2 s(1)}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa - \frac{W^2 s(2)}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_F \kappa - \frac{W^2 s(3)}{i\varepsilon_n + \xi_p + 3iv_F \kappa - \dots}}}$$
(22)

После аналитического продолжения $i\varepsilon_n \to \varepsilon + i\delta$ легко получить спектральную плотность $A(\varepsilon, \xi_p) = -\frac{1}{\pi} G^R(\varepsilon, \xi_p)$, результаты для которой можно найти в [55]. Здесь мы остановимся лишь на плотности состояний:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0(0)} = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p A(\varepsilon, \xi_p)$$
(23)

результаты для которой при различных значениях $\Gamma = v_F \kappa / W$ показаны на Рис. 12 сплошными кривыми. Видим, что при конечных значениях $\kappa = \xi^{-1}$ плотность состояний на уровне Ферми становится конечной (ср. правая панель Рис. 8). Псевдощель постепенно "замывается" из–за дополнительного рассеяния, вызванного конечностью корреляционной длины, полностью исчезая при $v_F \kappa \gg W$. Пунктирные кривые на Рис. 12 показывают результаты *точного* численного моделирования плотности состояний в такой модели, полученные прямым численным решением уравнения Шредингера для множества конфигураций гауссова случайного поля (с коррелятором (5)) с последующим усреднением [62]. Ясно видно, что приближение, основанное на



Рис. 12: Плотность состояний с псевдощелью для различных значений $\Gamma = v_F \kappa / W$. Сплошные линии – рассматриваемое приближение. Пунктир – результаты точного численного моделирования [62].

Ansatz'e (18), дает очень хорошие результаты практически в количественном согласии с численным моделированием, кроме, может быть, непосредственной окрестности уровня Ферми¹⁴. В тоже время очевидно, что такой метод имеет много преимуществ, по сравнению с "прямым" численным моделированием, поскольку допускает обобщение на более сложные ситуации, например, на двумерный случай [63, 64] (см. следующую главу) весьма важный, для описания псевдощелевого состояния в ВТСП купратах. Причем обобщение возможно и на ситуацию сильных электронных корреляций [65, 66, 67, 68] (см. главу 5), характерную для купратов. Кроме того такой подход может быть развит и на исследование электромагнитного отклика в рассматриваемой одномерной модели псевдощели. Впервые это было сделано в работах Садовского и Тимофеева [51, 52] 1991 г. путем вывода рекуррентных уравнений для вершинной части, описывающей такой отклик.

Произвольная диаграмма для вершинной части, как уже упоминалось выше, может быть получена вставкой линии внешнего поля в соответствующую диаграмму

¹⁴В случае соизмеримых флуктуаций аналогичное сравнение показывает, что *Ansatz* менее точен — он не описывает появление так называемой дайсоновской сингулярности плотности состояний в центре псевдощели [62].



Рис. 13: Диаграммы для вершины. (a) – общий вид диаграммы для вершинной поправки. (b) – рекуррентное уравнение "Бете – Солпитера" для вершинной части.

для СЭЧ. В рассматриваемом подходе можно ограничиться только диаграммами без пересечения линий взаимодействия, с дополнительными комбинаторными множителями v(k), приписываемыми линиям взаимодействия. Тогда при расчете вершинных поправок достаточно рассмотреть только диаграммы типа показанных на Рис. 13 (а). Тогда для вершинной части мы немедленно получаем рекуррентное уравнение типа "лестничного" уравнения "Бете – Солпитера" (но с дополнительными комбинаторными множителями!), показанное на Рис. 13 (b). В аналитическом виде в RA канале соответствующее уравнение имеет вид [51, 52]:

$$J_{k-1}^{RA}(\varepsilon,\xi_p;\varepsilon+\omega,\xi_{p+q}) = 1 + W^2 v(k) G_k^A(\varepsilon,\xi_p) G_k^R(\varepsilon+\omega,\xi_{p+q}) \times \left\{1 + \frac{2iv_F \kappa k}{\omega - (-1)^k v_F q - \sum_{k+1}^R (\varepsilon+\omega,\xi_{p+q}) + \sum_{k+1}^A (\varepsilon,\xi_p)}\right\} J_k^{RA}(\varepsilon,\xi_p;\varepsilon+\omega,\xi_{p+q})$$

$$(24)$$

где все собственно - энергетические части и функции Грина определяются из аналитически продолженных (на вещественные частоты) рекуррентных соотношений (20), (21). "Физическая" вершинная часть $J^{RA}(\varepsilon, \xi_p; \varepsilon + \omega, \xi_{p+q})$ определяется как $J^{RA}_{k=0}(\varepsilon, \xi_p; \varepsilon + \omega, \xi_{p+q}).$

Некоторых дополнительных пояснений требует только появление фигурной скобки в правой части (24). Этот дополнительный множитель с одной стороны обеспечивает точный результат для вершины J^{RA} в первом порядке теории возмущений, с другой – приводит к выполнению точного тождества Уорда (27), гарантируя самосогласованность рекуррентных процедур для одночастичной функции Грина и двухчастичной вершины (детали см. [51, 52, 55]). В случае вершин RR и AA – типа имеем аналогичные рекуррентные соотношения, с очевидной заменой $G^R \leftrightarrow G^A$, а также с заменой выражения в фигурных скобках в правой части на 1. При $\kappa \to 0$ ($\xi \to \infty$) эти рекуррентные уравнения эквивалентны полной сумме диаграммного ряда для вершины, изучавшейся выше, когда суммирование удается провести в аналитическом виде. Стандартное "лестничное" приближение соответствует в этой схеме выбору комбинаторных множителей в (24) s(k) = 1.

Проводимость системы выражается через запаздывающую функцию отклика плотность – плотность $\chi^R(q,\omega)$ [69, 55]:

$$\sigma(\omega) = e^2 \lim_{q \to 0} \left(-\frac{i\omega}{q^2} \right) \chi^R(q,\omega)$$
(25)

которая определяется аналитическим продолжением на действительные частоты полной поляризационной петли [69]¹⁵:

$$\chi^{R}(q,\omega) = -\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left\{ \left[f(\varepsilon + \omega) - f(\varepsilon) \right] \Phi_{\varepsilon}^{RA}(q,\omega) + f(\varepsilon) \Phi_{\varepsilon}^{RR}(q,\omega) - f(\varepsilon + \omega) \Phi_{\varepsilon}^{AA}(q,\omega) \right\} \right\}$$
(26)

где
$$f(\varepsilon)$$
 – функция Ферми, а двухчастичные петли
 $\Phi_{\varepsilon}^{R(A)R(A)}(q,\omega) = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{p} G^{R(A)}(\varepsilon,\xi_{p}) G^{R(A)}(\varepsilon+\omega,\xi_{p+q}) J^{R(A)R(A)}(\varepsilon,\xi_{p};\varepsilon+\omega,\xi_{p+q}).$

Типичные зависимости действительной части проводимости от частоты показаны на Рис. 14. Видим, что уменьшение корреляционной длины $\xi = \kappa^{-1}$ ведет к постепенному росту поглощения внутри псевдощели. Наиболее удивительной аномалией является появление дополнительного плавного максимума в частотной зависимости проводимости внутри псевдощелевой области, которое по-видимому связано с проявлением эффектов андерсоновской локализации, всегда имеющей место в одномерных неупорядоченных системах. Локализационная природа этой аномалии подтверждается сравнением "точного" (т.е. учитывающего все диаграммы) расчета с результатом "лестничного" приближения, сводящегося к использованию во всех соотношениях комбинаторных множителей s(k) = 1 и показанного на Рис. 14 штриховой кривой. Ясно видно, что локализационное поведение трансформируется в узкий "друдевский"

¹⁵В оригинальных работах [51, 52] для упрощения численных расчетов использовалось выражение $\chi^{R}(q\omega) = \omega \left\{ \Phi^{RA}(q\omega) - \Phi^{RA}(0\omega) \right\}$, справедливое в пределе малых ω , что приводит к определенной (количественной, но не качественной!) неточности результатов, особенно в пределе малых κ .



Рис. 14: Частотная зависимость действительной части проводимости в случае несоизмеримых псевдощелевых флуктуаций для различных значений $\Gamma = v_F \kappa / W$. Точечная кривая – случай $\Gamma = 0$. Штрихи – результаты "лестничного" приближения для $\Gamma = 1.0$. Проводимость дана в единицах $\frac{\omega_p^2}{4\pi W}$.

пик на малых частотах. Это вполне естественно, поскольку локализация тесно связана с учетом диаграмм с перекрещивающимися линиями взаимодействия, отсутствующими в "лестничном" приближении.

В качестве подтверждения надежности используемого подхода может служить выполнение ряда точных соотношений. Прямые численные расчеты [51, 52] показывают, что рекуррентная процедура (24) удовлетворяет точному (в пределе $\omega \to 0$) тождеству Уорда:

$$\Phi^{RA}(0\omega) = -\frac{N(E_F)}{\omega}$$
(27)

где плотность состояний на уровне Ферми N(0), может быть независимо рассчитана с помощью (21). Также прямые расчеты показывают, что результаты для проводимости удовлетворяют точному оптическому правилу сумм $\int_0^\infty d\omega Re\sigma(\omega) = \frac{\omega_p^2}{8}$.

Этот подход непосредственно обобщается также и на расчеты проводимости в двумерных моделях псевдощелевого поведения [70], используемых в теории ВТСП купратов, в том числе и в условиях сильных электронных корреляций [71] (см. также раздел 5.4), характерных для этих систем.

3 МОДЕЛИ ПСЕВДОЩЕЛЕВОГО СОСТОЯНИЯ ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМ.

3.1 Псевдощель, вызываемая диэлектрическими флуктуациями ближнего порядка.

3.1.1 Модель "горячих точек".

В этом разделе мы, следуя работе [64], рассмотрим достаточно общую модель псевдощелевого состояния, вызываемого флуктуациями ближнего порядка "диэлектрического" (например антиферромагнитного) типа, в двумерных системах. Такая модель, являющяяся прямым обобщением на двумерный случай одномерной модели Садовского [48, 50], рассмотреной в предыдущей главе, приводит к анизотропной псевдощели на поверхности Ферми. В этом разделе будет получена рекуррентная процедура вычисления одноэлектронной функции Грина, эквивалентная суммированию всех фейнмановских диаграмм, основанная на приближенном представлении вкладов диаграмм высших порядков. Мы проведем детальные расчеты спектральных плотностей и одноэлектронной плотности состояний. Будут также проанализированы пределы применимости и некоторые принципиальные вопросы обоснованности используемых приближений.

Начнем рассмотрение с модели "почти антиферромагнитной" Ферми-жидкости [72, 73], которая основана на картине сильно развитых флуктуаций AFM ближнего порядка в широкой области фазовой диаграммы, представленной на Рис.1. В этой модели вводится эффективное взаимодействие электронов со спиновыми флуктуациями, описываемое динамической спиновой восприимчивостью $\chi_{\mathbf{q}}(\omega)$, форма которой определялась из подгонки к данным ЯМР–экспериментов[73]:

$$V_{eff}(\mathbf{q},\omega) = g^2 \chi_{\mathbf{q}}(\omega) \approx \frac{g^2 \xi^2}{1 + \xi^2 (\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 - i \frac{\omega}{\omega_{sf}}}$$
(28)

где g-константа связи, ξ -корреляционная длина спиновых флуктуаций, $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ вектор антиферромагнитного упорядочения в диэлектрической фазе, ω_{sf} -характерная частота спиновых флуктуаций, a-постоянная (квадратной) решетки.

Поскольку динамическая спиновая восприимчивость $\chi_{\mathbf{q}}(\omega)$ имеет пики при вол-



Рис. 15: Модельная поверхность Ферми ВТСП-купратов. Электронные состояния вблизи точек пересечения поверхности Ферми с границами магнитной зоны Бриллюэна (показанной пунктиром) сильно взаимодействуют с флуктуациями АFM ближнего порядка. Такие "горячие точки" связаны между собой вектором рассеяния. $\mathbf{Q} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}).$

новых векторах в окрестности ($\pi/a, \pi/a$), в системе возникает "два типа" квазичастиц — "горячие квазичастицы", импульсы которых расположены в окрестности "горячих точек" на поверхности Ферми (Рис.15), и "холодные", импульсы которых находятся вблизи участков поверхности Ферми, окружающих диагонали зоны Бриллюэна $|p_x| = |p_y|$ [63]. Эта терминология связана с тем, что квазичастицы из окрестности "горячих точек" сильно рассеиваются на вектор порядка **Q**, за счет взаимодействия со спиновыми флуктуациями (28), тогда как для частиц с импульсами вдали от "горячих точек" это взаимодействие является достаточно слабым.

В дальнейшем мы будем рассматривать случай достаточно высоких температур, когда $\pi T \gg \omega_{sf}$, что соответствует области "слабой псевдощели" на Рис.1 [63]. В этом случае спиновая динамика несущественна и можно ограничиться статическим приближением:

$$V_{eff}(\mathbf{q}) = \tilde{W}^2 \frac{\xi^2}{1 + \xi^2 (\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2}$$
(29)

где \tilde{W} -эффективный параметр размерности энергии, который в модели AFM флуктуаций может быть записан как [63]:

$$\tilde{W}^2 = g^2 T \sum_{m\mathbf{q}} \chi_{\mathbf{q}}(i\omega_m) = g^2 < \mathbf{S}_i^2 > /3$$
(30)



Рис. 16: Диаграмма первого порядка для собственно-энергетической части электрона, взаимодействующего с флуктуациями ближнего порядка.

где \mathbf{S}_i -спин на узле решетки (ионе Cu в плоскости CuO_2 для ВТСП-купратов). В дальнейшем для нас \tilde{W} (также как и ξ) является просто феноменологическим параметром теории, определяющим эффективную ширину псевдощели.

Существенное упрощение расчетов возникает, если от (29) перейти к модельному взаимодействию вида (ср. аналогичную модель в [74]):

$$V_{eff}(\mathbf{q}) = W^2 \frac{2\xi^{-1}}{\xi^{-2} + (q_x - Q_x)^2} \frac{2\xi^{-1}}{\xi^{-2} + (q_y - Q_y)^2}$$
(31)

где $W^2 = \tilde{W}^2/4$. Фактически, выражение (31) качественно вполне аналогично (29) и мало от него отличается количественно в наиболее интересной области $|\mathbf{q} - \mathbf{Q}| < \xi^{-1}$.

Рассмотрим поправку первого порядка по V_{eff} к собственно-энергетической части электрона, представленную диаграммой на Рис.16:

$$\Sigma(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{q}} V_{eff}(\mathbf{q}) \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}}$$
(32)

Основной вклад в сумму по **q** дает область вблизи $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$. Тогда записывая:

$$\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} = \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}+\mathbf{k}} \approx \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} + \mathbf{v}_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}\mathbf{k}$$
(33)

где $v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^{\alpha} = \frac{\partial \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}}{\partial p_{\alpha}}$, и вычисляя интеграл по **k**, получаем:

$$\Sigma(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{W^2}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} + (|v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x| + |v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y|)\kappa sign\varepsilon_n}$$
(34)

где $\kappa = \xi^{-1}$.

Спектр исходных (свободных) квазичастиц возьмем в виде[63]:

$$\xi_{\mathbf{p}} = -2t(\cos p_x a + \cos p_y a) - 4t' \cos p_x a \cos p_y a - \mu \tag{35}$$

где *t*-интеграл переноса между ближайшими соседями, а *t*'-между вторыми ближайшими соседями на квадратной решетке, *µ*-химический потенциал. При анализе



Рис. 17: Диаграммы для собственно-энергетической части второго порядка по взаимодействию с флуктуациями ближнего порядка.

реальных ВТСП-систем в работах[63] принималось, например, t = 0.25 eV, t' = -0.45 tдля $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$, а μ фиксировался концентрацией дырок. Ниже мы увидим, что представляет существенный интерес проанализировать ситуацию при различных соотношениях параметров t и t'.

Рассмотрим поправки к собственно-энергетической части второго порядка, показанные на Рис.17. С использованием (31) получаем:

$$\Sigma(a) = W^{4} \int \frac{d\mathbf{k_{1}}}{\pi^{2}} \int \frac{d\mathbf{k_{2}}}{\pi^{2}} \frac{\kappa}{\kappa^{2} + k_{1x}^{2}} \frac{\kappa}{\kappa^{2} + k_{1y}^{2}} \frac{\kappa}{\kappa^{2} + k_{2x}^{2}} \frac{\kappa}{\kappa^{2} + k_{2y}^{2}}}{\frac{1}{i\varepsilon_{n} - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^{x}k_{1x} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^{y}k_{1y}}} \frac{1}{i\varepsilon_{n} - \xi_{\mathbf{p}-\mathbf{Q}} - v_{\mathbf{p}}^{x}(k_{1x} + k_{2x}) - v_{\mathbf{p}}^{y}(k_{1y} + k_{2y})}}{\frac{1}{i\varepsilon_{n} - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^{x}k_{1x} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^{y}k_{1y}}}$$
(36)

$$\Sigma(b) = W^4 \int \frac{d\mathbf{k_1}}{\pi^2} \int \frac{d\mathbf{k_2}}{\pi^2} \frac{\kappa}{\kappa^2 + k_{1x}^2} \frac{\kappa}{\kappa^2 + k_{1y}^2} \frac{\kappa}{\kappa^2 + k_{2x}^2} \frac{\kappa}{\kappa^2 + k_{2y}^2} \frac{\kappa}{\kappa^2 + k_{2y}^2} \frac{\kappa}{\kappa^2 + k_{2y}^2} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x k_{1x} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y k_{1y}} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x k_{2x} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y k_{2y}} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x k_{2x} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y k_{2y}}$$
(37)

где воспользовались видом спектра (35), откуда, в частности, следует $\xi_{\mathbf{p}+2\mathbf{Q}} = \xi_{\mathbf{p}}$, $\mathbf{v}_{\mathbf{p}+2\mathbf{Q}} = \mathbf{v}_{\mathbf{p}}$ при $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$. Если знаки $v_{\mathbf{p}}^x$ и $v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x$, а также $v_{\mathbf{p}}^y$ и $v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y$ совпадают, то интегралы в (36) и (37) полностью определяются вкладами от полюсов лоренцианов, определяющих взаимодействие с флуктуациями ближнего порядка, и после элементарного контурного интегрирования получаем:

$$\Sigma(a) = \Sigma(b) = \frac{1}{[i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} + i(|v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x| + |v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y|)\kappa]^2} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}} + i2(|v_{\mathbf{p}}^x| + |v_{\mathbf{p}}^y|)\kappa}$$
(38)

Здесь и далее, для определенности, полагаем $\varepsilon_n > 0$. Нетрудно убедиться, что в случае совпадающих знаков проекций скоростей, аналогичным образом вычисляются

вклады любых диаграмм высших порядков. Соответственно, вклад произвольной диаграммы для собственно-энергетической части N-го порядка по взаимодействию (31) имеет вид:

$$\Sigma^{(N)}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = W^{2N} \prod_{j=1}^{2N-1} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_j + in_j v_j \kappa}$$
(39)

где $\xi_j = \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}$ и $v_j = |v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x| + |v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y|$ для нечетных j и $\xi_j = \xi_{\mathbf{p}}$ и $v_j = |v_{\mathbf{p}}^x| + |v_{\mathbf{p}}^y|$ для четных j. Здесь n_j -число линий взаимодействия, охватывающих j-ю функцию Грина в данной диаграмме.

В этом случае любая диаграмма с пересечением линий взаимодействия оказывается равной некоторой диаграмме того же порядка без пересечения этих линий. Поэтому, фактически, мы можем рассматривать лишь диаграммы без пересечения линий взаимодействия, учитывая вклад диаграмм с пересечением с помощью дополнительных комбинаторных множителей, приписываемых линиям взаимодействия [61], как это делалось для одномерной модели псевдощелевого состояния [50, 51, 52] в предыдущей главе.

В результате, для одноэлектронной функции Грина возникает следующее рекуррентное соотношение (представление в виде цепной дроби [50, 51, 52]):

$$G^{-1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) = G_0^{-1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) - \Sigma_1(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}})$$
(40)

$$\Sigma_k(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) = W^2 \frac{s(k)}{i\varepsilon_n - \xi_k + ikv_k\kappa - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}})}$$
(41)

где

$$\xi_k(\mathbf{p}) = \begin{cases} \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} & \text{при нечетных } k \\ \xi_{\mathbf{p}} & \text{при четных } k \end{cases}$$
(42)

$$v_k = \begin{cases} |v_x(\mathbf{p} + \mathbf{Q})| + |v_y(\mathbf{p} + \mathbf{Q})| & \text{при нечетных } k \\ |v_x(\mathbf{p})| + |v_y(\mathbf{p})| & \text{при четных } k \end{cases}$$
(43)

Можно записать рекуррентное соотношение непосредственно для одночастичной функции Грина. Введем:

$$G_{0k}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_k(\mathbf{p}) + ikv_k\kappa}$$
(44)

И

$$G_k^{-1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) = G_{0k}^{-1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}})$$
(45)

Из (41) немедленно получаем рекуррентную процедуру:

$$G_k(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{1}{G_{0k}^{-1}(\varepsilon_n \mathbf{p}) - W^2 s(k+1) G_{k+1}(\varepsilon_n \mathbf{p})}$$
(46)

Диаграммное представление этой процедуры представлено на Рис. 11. "Физическая" функция Грина определяется из (46) как $G(\varepsilon_n \mathbf{p}) \equiv G_0(\varepsilon_n \mathbf{p})$.

Комбинаторный множитель:

$$s(k) = k \tag{47}$$

соответствует рассматриваемому нами случаю соизмеримых флуктуаций с $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ [50]. Не составляет труда рассмотреть и случай несоизмеримых флуктуаций, когда \mathbf{Q} не "привязан" к периоду обратной решетки. В этом случае диаграммы, в которых линии взаимодействия охватывают нечетное число вершин, оказываются существенно меньше диаграмм, у которых линии взаимодействия охватывают четное число вершин. Поэтому можно учесть только эти последние диаграммы [48, 49, 50, 51, 52]. В этом случае рекуррентное соотношение (41) сохраняется, но комбинаторика диаграмм, а следовательно и множители s(k), изменяются [50]:

$$s(k) = \begin{cases} \frac{k+1}{2} & \text{при нечетных } k\\ \frac{k}{2} & \text{при четных } k \end{cases}$$
(48)

В работах [63] была учтена спиновая структура взаимодействия в рамках модели "почти антиферромагнитной" Ферми-жидкости (спин-фермионная модель [63]). Оказывается, что ее учет приводит к более сложной комбинаторике диаграмм в соизмеримом случае $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$. А именно, рассеяние с сохранением спина дает формально соизмеримую комбинаторику, тогда как рассеяние с переворотом спина описывается диаграммами несоизмеримого случая ("заряженного" случайного поля в терминологии [63]). В результате, рекуррентное соотношение для функции Грина, по прежнему, имеет вид (41), но комбинаторный множитель s(k) имеет вид[63]:

$$s(k) = \begin{cases} \frac{k+2}{3} & \text{при нечетных } k\\ \frac{k}{3} & \text{при четных } k \end{cases}$$
(49)

Как уже отмечено выше, решение (41) получается при условии, что знаки проекций скоростей $v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^{x}(v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^{y})$ и $v_{\mathbf{p}}^{x}(v_{\mathbf{p}}^{y})$ совпадают. Ниже мы еще проанализируем усло-

вия, когда это действительно так. В случае, когда знаки этих проекций разные, интегралы типа (36) и (37), соответствующие поправкам высших порядков, не могут быть вычислены столь простым образом, поскольку в них начинают играть роль вклады от полюсов электронных функций Грина. При этом, вместо простых ответов типа (38) возникают гораздо более громоздкие выражения, и, что более существенно, исчезает сам факт равенства широких классов диаграмм с пересекающимися и непересекающимися линиями взаимодействия, который и позволяет провести систематизацию вкладов высших порядков и получить "точное" решение (41). Данная проблема существенна только при рассмотрении случая конечных корреляционных длин флуктуаций $\xi = \kappa^{-1}$, в пределе $\xi \to \infty(\kappa \to 0)$ точное решение для функции Грина не зависит от скоростей $\mathbf{v_p}$ и $\mathbf{v_{p+Q}}$ и может быть легко получено в аналитическом виде методом работ [48, 49] (см. также[63]). В одномерной модели, рассмотренной в работах [48, 49, 50, 51, 52], знаки соответствующих проекций скоростей всегда разные (они соответствуют электронам, летящим "вправо" и "влево"). Именно это обстоятельство было отмечено в недавней работе [75]. В Приложении А мы достаточно подробно проанализируем эти трудности для одномерного случая и покажем, что использованный в [50, 51, 52] "анзатц" типа (39) для вкладов диаграмм высших порядков и решение (41) фактически дает очень хорошее приближение даже в случае проекций скоростей разных знаков. Очевидным образом это решение является точным в пределах $\xi \to \infty(\kappa \to 0)$ и $\xi \to 0(\kappa \to \infty)$, обеспечивая достаточно корректное (количественно) описание в области конечных корреляционных длин.

Для энергетического спектра (35) нетрудно указать условия (соотношения параметров t,t' и μ), при которых решение (41) является точным. Прежде всего, определим область параметров t,t' и μ , когда на поверхности Ферми существуют "горячие точки", т.е. точки, связанные вектором $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$. Если $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ - "горячая точка" на поверхности Ферми, то точка $\mathbf{p} + \mathbf{Q} = (p_x + \pi/a, p_y + \pi/a)$ также должна лежать на поверхности Ферми, что сводится для спектра (35) сводится к требованию:

$$-2t(\cos p_x a + \cos p_y a) - 4t' \cos p_x a \cos p_y a - \mu = 0$$

$$2t(\cos p_x a + \cos p_y a) - 4t' \cos p_x a \cos p_y a - \mu = 0$$
 (50)

Отсюда получаем условия существования "горячих точек" в виде:

$$\cos p_y a = -\cos p_x a \qquad \mathbf{H} \qquad \cos^2 p_x a = \frac{\mu}{4t'} \tag{51}$$

Таким образом, "горячие точки" на поверхности Ферми существуют, если:

$$0 \le \frac{\mu}{4t'} \le 1 \tag{52}$$

Определим теперь область параметров t,t' и μ , где решение (41) является точным, из условия положительности произведений $v_{\mathbf{p}}^{x}v_{\mathbf{p+Q}}^{x}$ и $v_{\mathbf{p}}^{y}v_{\mathbf{p+Q}}^{y}$. Имеем:

$$v_{\mathbf{p}}^{x} = \frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial p_{x}} = 2ta \sin p_{x}a + 4t'a \sin p_{x}a \cos p_{y}a$$

$$v_{\mathbf{p}}^{y} = \frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial p_{y}} = 2ta \sin p_{y}a + 4t'a \sin p_{y}a \cos p_{x}a$$

$$v_{\mathbf{p}}^{x}v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^{x} = 16t'^{2}a^{2} \sin^{2} p_{x}a[\cos^{2} p_{y}a - (\frac{t}{2t'})^{2}]$$

$$v_{\mathbf{p}}^{y}v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^{y} = 16t'^{2}a^{2} \sin^{2} p_{y}a[\cos^{2} p_{x}a - (\frac{t}{2t'})^{2}]$$
(53)

Легко видеть, что для существования точек на поверхности Ферми, где проекции скоростей имеют одинаковые знаки, необходимо выполнение неравенства |t'/t| > 1/2. Нас, в основном, интересует окрестность "горячих точек", в которых, с учетом (51):

$$v_{\mathbf{p}}^{x}v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^{x} = v_{\mathbf{p}}^{y}v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^{y} = 4t^{2}a^{2}(1-\frac{\mu}{4t'})(\frac{\mu t'}{t^{2}}-1)$$
(54)

Таким образом, в "горячих точках" проекции скоростей имеют одинаковый знак при выполнении условия:

$$\frac{\mu t'}{t^2} > 1 \tag{55}$$

Это же условие, очевидно, обеспечивает выполнение неравенства $\mathbf{v_pv_{p+Q}} > 0$, необходимого для справедливости решения (41) в модели [63].



Рис. 18: Область существования "горячих точек" (заштрихована) и область параметров спектра, где проекции скоростей в "горячих точках" имеют одинаковые знаки (заштрихована дважды).



Рис. 19: Поверхности Ферми, определяемые спектром (35), для различных значений химического потенциала μ (заполнения зоны) и разных значений параметра t'/t. (а) — случай t'/t = -0.6, $\mu/t =: (1) - -2.2$; (2) — -1.8; (3) — -1.666...; (4) — -1.63; (5) — -1.6; (6) — 0; (7) — 2, решение (41) является точным вблизи "горячих точек" (проекции скоростей имеют одинаковые знаки) при $\mu/t < -1.666...$, "горячие точки" существуют при $\mu/t < 0$. (б) — случай t'/t = -0.4, характерный для ВТСП-купратов, когда решение (41) является приближенным, $\mu/t =: (1) - -2.2$; (2) — -2; (3) — -1.6; (4) — -1.3; (5) — 0; (6) — 2; (7) — 4, "горячие точки" существуют при $-1.6 < \mu/t < 0$.



Рис. 20: Энергетическая зависимость спектральной плотности для различных комбинаторик диаграмм в "горячей точке" ($p_x a/\pi = 0.1666, p_y a/\pi = 0.8333$) для случая $t'/t = -0.6, \mu/t = -1.8$, когда решение (41) является точным: (a)—несоизмеримый случай. (б)—соизмеримый случай. (c)—спин-фермионная комбинаторика. Корреляционная длина соответствует значениям κa : (1)—0.01; (2)—0.1; (3)—0.5, W = 0.1t. На вставках: Энергетическая зависимость спектральной плотности для соответствующих комбинаторик диаграмм при $\kappa a = 0.01$ (1)—в "горячей точке" $p_x a/\pi = 0.1666, p_y a/\pi = 0.8333.$ (2)—вблизи от "горячей точки" $p_x a/\pi = 0.1663, p_y a/\pi = 0.8155.$ (3)—вдали от "горячей точки" $p_x a/\pi = 0.01, p_y a/\pi = 0.333.$

На Рис.18 заштрихована область параметров, где существуют "горячие точки" $(0 \le \mu/4t' \le 1)$, и область, где при существовании "горячих точек", проекции скоростей в них имеют одинаковые знаки ($\mu t' > 1$). На Рис.19 показаны поверхности Ферми, определяемые спектром (35), для различных значений химического потенциала μ (заполнений зоны) и для которых обсуждавшиеся выше условия либо выполняются, либо нет.

Рассмотрим спектральную плотность:

$$A(E\mathbf{p}) = -\frac{1}{\pi} Im G^R(E\mathbf{p}) \tag{56}$$

где $G^R(E\mathbf{p})$ -запаздывающая функция Грина, полученная обычным аналитическим продолжением (40) на вещественную ось энергий *E*. На Рис.20 приведены энергетические зависимости $A(E\mathbf{p})$, полученные из (40),(41) с различными вариантами комбинаторных множителей (47), (48). Энергетическая зависимость спектральной плотности в случае комбинаторики спин-фермионной модели (49) качественно и даже количественно весьма близка к полученной в несоизмеримом случае (48) и для экономии места не приведена на Рис.20. При t'/t = -0.6 и $\mu/t = -1.8 < t/t' = 1.666$ в "горячих точках" проекции скоростей имеют одинаковые знаки и соотношение (41) определяет функцию Грина точно. Видим, что в несоизмеримом случае (48) (Рис.20(а)) и соответственно в случае комбинаторики спин-фермионной модели (49) спектральная плотность в "горячей точке" демонстрирует явно нефермижидкостное поведение (при достаточно больших значениях корреляционной длины флуктуаций ξ). В случае соизмеримой комбинаторики (47) (Рис.20(б)), непосредственно в "горячей точке" спектральная плотность имеет один пик и, в этом смысле, похожа на обычную фермижидкостную, даже при больших ξ . Однако, уже в ближайшей окрестности "горячей точки" спектральная плотность при достаточно больших ξ обладает двухпиковой структурой ("теневая" зона) нефермижидкостного вида (вставка на Рис.20(б)).

Вдали от "горячих точек" проекции скоростей имеют, вообще говоря, разные знаки, даже при выполнении условия (55). Соответственно, рекуррентное соотношение (41) для функции Грина уже не является точным. Однако, из обсуждения, проведенного в Приложении А ясно, что "анзатц" (39) и решение (41) фактически лишь несколько преувеличивает роль конечности корреляционной длины ξ . Там же предложен несколько иной вариант решения (421), который несколько преуменьшает роль конечности корреляционной длины. На вставках Рис.20 приведены энергетические зависимости спектральной плотности вдали от "горячей точки" для различных комбинаторик (47), (48).

На Рис.21 показаны энергетические зависимости спектральной плотности для комбинаторик (47),(48) ¹⁶ в "горячей точке" для t'/t = -0.4, что согласно [63], соответствует системе $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$. При таким значении t/t' даже в "горячих точках" проекции скоростей имеют разные знаки. Однако, спектральная плотность (в несоизмеримом случае), полученная с помощью решения с "чередующимися κ " (421) (пунктирная кривая Рис.21(а)), как легко видеть, почти совпадает с полученной из

¹⁶Спектральная плотность в случае комбинаторики спин-фермионной модели (49) количественно весьма близка к полученной в несоизмеримом случае (48).



Рис. 21: Энергетическая зависимость спектральной плотности для различных комбинаторик диаграмм в "горячей точке" ($p_x a/\pi = 0.142, p_y a/\pi = 0.857$) для случая $t'/t = -0.4, \mu/t = -1.3$, приблизительно соответствующего ВТСП-купратам: (a)—несоизмеримый случай. Пунктирная кривая – спектральная плотность для несоизмеримого случая, полученная с помощью (421). (б)—соизмеримый случай. (c)—комбинаторика спин-фермионной модели. Корреляционная длина соответствует значениям κa : (1)—0.01; (2)—0.1; (3)—0.5, W = 0.1t. На вставках: Энергетическая зависимость спектральной плотности для соответствующих комбинаторик диаграмм при $\kappa a = 0.01$ (1)—в "горячей точке" $p_x a/\pi = 0.142, p_y a/\pi = 0.857$. (2)—вблизи от "горячей точки" $p_x a/\pi = 0.145, p_y a/\pi = 0.843$. (3)—вдали от "горячей точки" $p_x a/\pi = 0.375$.

решения (41). Это показывает, что "анзатц" (39) и решение (41), по-видимому, дают результаты количественно очень близкие к точному решению. Подчеркнем еще раз, что решение (41) дает точный ответ при $\xi \to \infty$ и $\xi \to 0$, а в области конечных ξ обеспечивает очень хорошую интерполяцию между этими двумя пределами.

Перейдем к рассмотрению одноэлектронной плотности состояний:

$$N(E) = \sum_{\mathbf{p}} A(E, \mathbf{p}) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{p}} ImG^{R}(E\mathbf{p})$$
(57)

которая определяется интегралом от спектральной плотности $A(E\mathbf{p})$ по всей зоне Бриллюэна. Выше мы видели, что хотя при некоторых топологиях исходной поверхности Ферми (заполнениях зоны) в окрестности "горячих точек" и можно обеспечить одинаковые знаки интересующих нас проекций скоростей, вдали от "горячих точек" они, в общем случае, разные и решение (41), основанное на "анзатце" (39), является лишь приближенным. Соответственно, использование (41) при вычислении плотности состояний согласно (57) также является приближенным. На Рис.22 приведены плотности состояний, полученные из (40),(41),(57), с использованием спектра



Рис. 22: Одноэлектронная плотность состояний для различных комбинаторик диаграмм ((a)-случай t'/t = -0.4, $\mu/t = -1.3$; (б)-случай t'/t = -0.6, $\mu/t = -1.8$): (1)несоизмеримый случай. (2)-соизмеримый случай. (3)-комбинаторика спин-фермионной модели. (4)-в отсутствие AFM флуктуаций. Пунктирная кривая — несоизмеримый случай, решение (421). W/t = 1, корреляционная длина соответствует значениям $\kappa a = 0.1$. На вставках: Одноэлектронная плотность состояний для соизмеримой комбинаторики диаграмм при: (1)- $\kappa a = 0.1$; (2)- $\kappa a = 0.01$.

(35), для различных вариантов комбинаторики диаграмм (47),(48),(49), для значений t'/t = -0.4 (Рис.22(a)) и t'/t = -0.6 (Рис.22(б)). Видим, что при t'/t = -0.4 в плотности состояний наблюдается небольшой провал (псевдощель). Это понижение плотности состояний довольно слабо зависит от величины корреляционной длины ξ (см. вставку Рис.22(a)). Если заполнение зоны таково, что уровень Ферми μ попадает в эту область энергий, то на поверхности Ферми существуют и "горячие точки". При t'/t = -0.6 область существования "горячих точек" достаточно широка, но псевдощель в плотности состояний, тем не менее, практически не видна. Заметно лишь замытие Ван-Хововской особенности, существующей в отсутствие рассеяния на флуктуациях.

3.1.2 Модель "горячих участков".

Рассмотрим несколько упрощенную модель псевдощелевого состояния [56], основанную на картине развитых флуктуаций ближнего антиферромагнитного порядка¹⁷, близкую по смыслу к модели "горячих точек" на поверхности Ферми [64, 63], рассмотренной в предыдущем разделе. Предполагаем, что поверхность Ферми двумерной

¹⁷Заметим, что по существу наше рассмотрение применимо и к случаю флуктуаций ближнего порядка типа волны зарядовой плотности и другим подобным моделям.

электронной системы имеет вид, показанный на Рис.23. Такая поверхность Ферми, фактически, наблюдалась в ARPES-экспериментах на ВТСП-купратах (см. например работы [76, 77]). Заметим, что предположение о наличии плоских участков не является принципиальным для нашей модели, но значительно упрощает расчеты, которые, в принципе, можно было-бы провести и в более реалистической модели "горячих точек". Подобная модель поверхности Ферми уже довольно давно рассматривалась в применении к ВТСП – купратам в работах [78, 79, 80], где, в частности, были достаточно детально проанализированы микроскопические критерии существования антиферромагнитной и сверхпроводящей фаз.

Флуктуации ближнего порядка будем считать статическими и гауссовыми, определяя их корреляционную функцию в следующем виде (ср. [74]):

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{\pi^2} \frac{\xi^{-1}}{(q_x - Q_x)^2 + \xi^{-2}} \frac{\xi^{-1}}{(q_y - Q_y)^2 + \xi^{-2}}$$
(58)

где ξ -корреляционная длина флуктуаций, а вектор рассеяния берется в виде $Q_x = \pm 2k_F$, $Q_y = 0$ или $Q_y = \pm 2k_F$, $Q_x = 0$. Факторизованный вид коррелятора (58), впервые введенный в работе [74], сильно упрощает все вычисления, при этом чисто количественно он практически совпадает с обычным изотропным лоренцианом в наиболее существенной для нас области $|\mathbf{q} - \mathbf{Q}| < \xi^{-1}$ [64].

Наименее оправданным физически является предположение о статическом характере флуктуаций, которое может быть применимо только при достаточно высоких температурах [63, 64]. При низких температурах, в том числе в сверхпроводящей фазе, спиновая динамика, конечно, может оказаться весьма существенной, в том числе и для самой микроскопики куперовского спаривания в рамках модели "почти антиферромагнитной" Ферми – жидкости [81, 82]. Мы полагаем, однако, что рассматриваемое нами статическое приближение может оказаться достаточным для изучения качественного влияния образования псевдощели на сверхпроводимость, которая будет описываться ниже в рамках чисто феноменологического похода теории БКШ.

Предполагаем, что с этими флуктуациями взаимодействует электроны только с плоских ("горячих") участков на поверхности Ферми, показанных на Рис.23, при-



Рис. 23: Поверхность Ферми двумерной системы. "Горячие" участки показаны толстыми линиями, ширина которых $\sim \xi^{-1}$.

чем это рассеяние носит фактически одномерный характер. Эффективное взаимодействие электронов с этими флуктуациями будем описывать величиной $V_{eff} = (2\pi)^2 W^2 S(\mathbf{q})$, где параметр W размерности энергии будет определять энергетический масштаб (ширину) псевдощели ¹⁸. Выбор вектора рассеяния $\mathbf{Q} = (\pm 2k_F, 0)$ или $\mathbf{Q} = (0, \pm 2k_F)$ подразумевает картину несоизмеримых флуктуаций (обобщение на соизмеримый случай также возможно [56], но мы его здесь не рассматриваем). Мы также полностью пренебрегаем спиновой структурой взаимодействия, которую можно было-бы достаточно легко учесть [63]. В этом смысле наше рассмотрение буквально применимо к описанию взаимодействия с флуктуациями ближнего порядка типа волн зарядовой, а не спиновой плотности (AFM), но мы полагаем, что это упрощение совершенно несущественно для анализа интересующих нас качественных эффектов влияния псевдощелевого состояния на сверхпроводимость.

Факторизованный вид коррелятора (58) и, соответственно, эффективного взаимодействия V_{eff} , а также выбранная модель поверхности Ферми, приводит к тому, что рассеяние на флуктуациях носит одномерный характер.

¹⁸Можно сказать, что мы вводим эффективную "константу" взаимодействия с флуктуациями вида: $W_{\mathbf{p}} = W[\theta(p_x^0 - p_x)\theta(p_x^0 + p_x) + \theta(p_y^0 - p_y)\theta(p_y^0 + p_y)].$

Предел бесконечной корреляционной длины.

В пределе $\xi \to \infty$ такая модель допускает точное решение методами, предложенными в работах для одномерного случая в [48, 49]. При конечных ξ можно построить "почти" точное решение [63, 64], используя также обобщение одномерного подхода работ [50, 51]. Сейчас мы рассмотрим максимально упрощенный вариант модели с $\xi \to \infty$, когда эффективное взаимодействие с флуктуациями (58) приобретает простейший вид¹⁹:

$$(2\pi)^2 W^2 \left\{ \delta(q_x \pm 2p_F) \delta(q_y) + \delta(q_y \pm 2p_F) \delta(q_x) \right\}$$
(59)

В этом случае весь ряд теории возмущений для электрона, рассеивающегося на таких флуктуациях, легко суммируется [48, 49] и для одноэлектронной функции Грина получаем [56]:

$$G(\epsilon_n, p) = \int_0^\infty dD \mathcal{P}(D) \frac{i\epsilon_n + \xi_p}{(i\epsilon_n)^2 - \xi_p^2 - D(\phi)^2},\tag{60}$$

где $\xi_p = v_F(|\mathbf{p}| - p_F)$ (v_F - скорость на поверхности Ферми), $\epsilon_n = (2n+1)\pi T$, а флуктуирующая диэлектрическая щель $D(\phi)$ отлична от нуля только на "горячих" участках:

$$D(\phi) = \begin{cases} D & , 0 \le \phi \le \alpha, \ \frac{\pi}{2} - \alpha \le \phi \le \frac{\pi}{2} \\ 0 & , \alpha \le \phi \le \frac{\pi}{2} - \alpha \end{cases}$$
(61)

где $\alpha = arctg(\frac{p_y^0}{p_F}), \phi$ - полярный угол, определяющий направление вектора **р** в плоскости (p_x, p_y) . Для остальных значений ϕ величина $D(\phi)$ определяется очевидным образом аналогично (61) из соображений симметрии.

Амплитуда диэлектрической щели D случайна и распределена по Рэлею [50] (ее фаза при этом также случайна и распределена однородно на интервале $(0, 2\pi)$):

$$\mathcal{P}(D) = \frac{2D}{W^2} \exp\left(-\frac{D^2}{W^2}\right) \tag{62}$$

Таким образом, на "горячих" участках функция Грина имеет вид "нормальной" горьковской функции Грина, усредненной по флуктуациям диэлектрической щели *D*, распределенной согласно (62). "Аномальные" горьковские функции на этих "диэлектризованных" участках равны нулю (из-за случайности фаз диэлектрической щели

 $^{^{19}\}Pi$ одчеркнем, что ввиду гауссовского характера флуктуаций, предел $\xi\to\infty$ не подразумевает установления какого-либо дальнего порядка

D), что соответствует отсутствию дальнего порядка, но их попарные средние отличны от нуля и дают, например, вклад в двухчастичную функцию Грина [48, 49, 56]. Изменяя параметр α в (61) в пределах $0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{4}$, мы меняем размер "горячих участков" на поверхности Ферми, на которых выполняется условие "нестинга" $\xi_{p-Q} = -\xi_p$. В частности, $\alpha = \pi/4$ соответствует квадратной поверхности Ферми. За пределами "горячих" участков (второе неравенство в (61)) функция Грина (60) просто совпадает с функцией Грина свободных электронов.

Результаты расчетов электронной плотности состояний и спектральной плотности, соответствующих (60), приведены в работе [56] и демонстрируют образование псевдощели (с характерной шириной $\sim 2W$) и нефермижидкостное поведение на "горячих" участках.

Конечная корреляционная длина.

При конечных ξ можно построить "почти точное" решение [64], обобщающее одномерный подход, предложенный в работе [50]. При этом удается (приближенно) просуммировать весь диаграммный ряд для одночастичной функции Грина электронов с плоских участков поверхности Ферми (где выполнено условие "нестинга" электронного спектра $\xi_{\mathbf{p}\pm\mathbf{Q}} = -\xi_{\mathbf{p}}$).

Для вклада произвольной диаграммы для собственно-энергетической части *N*-го порядка по взаимодействию (31) записывается следующий *Ansatz*, аналогичный (39) [64, 50]:

$$\Sigma^{(N)}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = W^{2N} \prod_{j=1}^{2N-1} G_{0k_j}(\varepsilon \mathbf{p}),$$

$$G_{0k_j}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{1}{i\varepsilon_n - (-1)^j \xi_{\mathbf{p}} + ik_j \kappa}$$
(63)

где $\kappa = v_F \xi^{-1} (v_F - \text{скорость Ферми}), k_j - число линий взаимодействия, охваты$ вающих*j* $-ю (от начала) электронную линию в диаграмме, <math>\varepsilon_n = 2\pi T (n + 1/2)$ (для определенности считаем $\varepsilon_n > 0$). Таким образом, вклад любой диаграммы определяется, фактически, лишь набором целых чисел k_j . Любая диаграмма с пересечением линий взаимодействия оказывается равной некоторой диаграмме того же порядка без пересечения линий взаимодействия, и вклад всех диаграмм с пересечениями можно учесть с помощью комбинаторных множителей $s(k_j)$, приписываемых линиям взаимодействия на диаграммах без пересечений [50, 64, 63]. В рассматриваемой модели несоизмеримых флуктуаций комбинаторные множители определяются (48).

В результате для одночастичной функции Грина $G(\varepsilon_n \mathbf{p})$ электронов с "горячих" участков возникает следующая рекуррентная процедура (представление в виде цепной дроби) [50, 64, 63]:

$$G_k(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{1}{i\varepsilon_n - (-1)^k \xi_{\mathbf{p}} + ik\kappa - W^2 s(k+1) G_{k+1}(\varepsilon_n \mathbf{p})}; \quad G(\varepsilon_n \mathbf{p}) \equiv G_0(\varepsilon_n \mathbf{p})$$
(64)

Диаграммное представление этой процедуры представлено на Рис.11.

Ansatz (63) для вклада произвольной диаграммы N-го порядка не является, в общем случае, точным [64, 75]. Однако, в двумерном случае можно указать топологии поверхности Ферми, для которых представление (63) является точным [64], в остальных же случаях можно показать [64], что оно, в некотором смысле, преувеличивает роль конечности корреляционной длины ξ в данном порядке теории возмущений. Для одномерного случая, когда эта проблема является особенно острой [64, 75], оказывается, что для несоизмеримых флуктуаций расчеты плотности состояний на основе приближения (63) дают количественно почти идеальное совпадение [83] с результатами точного численного моделирования этой задачи, проведенного в работах [62, 84] ²⁰. В пределе $\xi \to \infty$ Ansatz (63) сводится к точному решению [48, 49], а в пределе $\xi \to 0$ при фиксированном значении W дает физически корректный предел свободных электронов.

За пределами "горячих участков" электроны с флуктуациями в нашей модели вообще не взаимодействуют и функция Грина остается свободной:

$$G(\varepsilon_n \mathbf{p}) = G_{00}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}}}$$
(65)

²⁰В случае одномерной задачи с соизмеримыми флуктуациями Ansatz (63) не описывает лишь достаточно слабую дайсоновскую сингулярность плотности состояний вблизи центра псевдощели [62, 84], давая за ее пределами также количественно весьма хорошее приближение точных результатов. Заметим, что в двумерном случае дайсоновская сингулярность плотности состояний, скорее всего, просто отсутствует.

Рассмотренная модель приводит к нефермижидкостному (двугорбому) поведению спектральной плотности на "горячих" участках поверхности Ферми и к замытой псевдощели в плотности состояний (ср. аналогичные результаты в модели "горячих точек" [63, 64]). На "холодных" участках поверхности Ферми имеем обычное фермижидкостное поведение (свободные электроны).

В модели с конечной корреляционной длиной ξ спектральная плотность демонстрирует все более "размытое" (по сравнению со случаем $\xi \to \infty$) поведение при уменьшении ξ , подробно описанное в [51, 63, 64]. В работе [85] эта модель применялась к расчетам оптической проводимости двумерной системы в псевдощелевом состоянии.

3.1.3 Упрощенная модель псевдощелевого состояния. Модель Бартоша и Копица.

Рассмотрим точно решаемую модель псевдощелевого состояния, предложенную в работе [86], используя несколько иной подход [59, 87]. Пусть электрон совершает одномерное движение в периодическом поле вида:

$$V(x) = 2D\cos(Qx + \phi) \tag{66}$$

Выберем $Q = 2p_F - k$, где p_F – импульс Ферми, а $k \ll p_F$ – некоторая "отстройка" от выделенного вектора рассеяния $2p_F^{21}$. Электронный спектр выберем в обычном, линеаризованном вблизи уровня Ферми, виде:

$$\xi_1 \equiv \xi_p = v_F(|p| - p_F) \qquad \xi_{p-2p_F} = -\xi_p \quad (\text{``HeCTUHF''})$$
$$\xi_2 \equiv \xi_{p-Q} = -\xi_p - v_F k \equiv -\xi_p - \eta \tag{67}$$

где ввели переменную $\eta = v_F k \ (v_F - \text{скорость Ферми})$, которая будет широко использоваться в дальнейшем. Поле (66) можно переписать в виде:

$$V(x) = De^{i2p_F x - ikx} + D^* e^{-i2p_F x + ikx}$$
(68)

где ввели комплексную амплитуду заменой $D \to D e^{i\phi}$.

²¹Такой выбор вектора AFM или CDW сверхструктуры подразумевает картину несоизмеримого упорядочения и соответствующих флуктуаций.

Решение такой задачи элементарно. В "двухволновом" приближении обычной зонной теории одноэлектронная (нормальная) функция Грина, соответствующая (диагональному) переходу $p \to p$, в мацубаровском представлении есть:

$$g_{11}(i\varepsilon_n pp) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_1} + \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_1} D^* \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_2} D \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_1} + \dots =$$
$$= \frac{i\varepsilon_n - \xi_2}{(i\varepsilon_n - \xi_1)(i\varepsilon_n - \xi_2) - |D|^2} = \frac{i\varepsilon + \xi + \eta}{(i\varepsilon - \xi)(i\varepsilon + \xi + \eta) - |D|^2}$$
(69)

где в последнем равенстве введены сокращенные обозначения $\xi_p = \xi$ и $\varepsilon_n = \varepsilon$, которые широко применяются ниже для сокращения записи. Можно ввести и недиагональную (аномальную) функцию Грина, соответствующую процессу переброса $p \to p - Q$:

$$g_{12}(i\varepsilon_n pp - Q) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_1} D^* \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_2} + \dots = \frac{D^*}{(i\varepsilon_n - \xi_1)(i\varepsilon_n - \xi_2) - |D|^2} = \frac{D^*}{(i\varepsilon - \xi)(i\varepsilon + \xi + \eta) - |D|^2}$$
(70)

Пусть теперь поле (66) является случайным. Рассмотрим вслед за [86] весьма специфическую модель беспорядка, в которой случайным считается вектор k "отстройки", причем его функция распределения задается в виде лоренциана²²:

$$\mathcal{P}_k(k) = \frac{1}{\pi} \frac{\kappa}{k^2 + \kappa^2} \tag{71}$$

где $\kappa \equiv \xi_{corr}^{-1}$, а ξ_{corr} – корреляционная длина ближнего порядка. Фаза ϕ в (66) также считается случайной и распределенной однородно на интервале от 0 до 2π :

$$\mathcal{P}_{\phi}(\phi) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} & \text{при} \quad 0 \le \phi \le 2\pi \\ 0 & \text{для остальных значений} \end{cases}$$
(72)

Корреляционная функция полей V(x) в разных точках вычисляется элементарно и равна:

$$\langle V(x)V(x') \rangle = 2D^2 \cos[2p_F(x-x')] \exp[-\kappa |x-x'|]$$
 (73)

где угловые скобки обозначают усреднение по (71) и (72). Случайное поле именно с такой корреляционной функцией рассматривалось в известной работе [88], а также

 $^{^{22}}$ Фактически речь здесь идет о специфической модели фазовых флуктуаций поля (66).

в работах [48, 49, 50, 51, 52], где предполагалось, что это поле является гауссовским 23 . Рассматриваемое здесь случайное поле V(x) гауссовским, в общем случае, не является [86]. Фурье – образ (73) имеет вид характерного лоренциана, определяющего эффективное взаимодействие электрона с флуктуациями ближнего порядка [25]:

$$V_{eff}(q) = 2D^2 \left\{ \frac{\kappa}{(q-2p_F)^2 + \kappa^2} + \frac{\kappa}{(q+2p_F)^2 + \kappa^2} \right\}$$
(74)

Именно взаимодействие такого типа рассматривалось во всех цитированных выше работах по "диэлектрической" псевдощели.

Функции Грина, усредненные по ансамблю случайных полей вида (66) с распределениями (71) и (72), вычисляются элементарным интегрированием. При этом среднее от аномальной функции Грина (70) просто равно нулю (после усреднения по (72)), что соответствует отсутствию дальнего "диэлектрического" порядка. Усредненная функция Грина (69) легко получается почленным интегрированием ряда (69) по (71) и равна:

$$G(i\varepsilon_n p) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} + \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} D^* \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F\kappa} D \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} + \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} D^* \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_$$

Это и есть точное решение для функции Грина, предложенное в [86].

Далее можно считать, что у поля (66) флуктуирует не только фаза, но и амплитуда D, причем соответствующая функция Грина будет получаться простым усреднением (75) с соответствующим распределением $\mathcal{P}_D(D)$. В частности, распределение амплитуды можно выбрать в виде распределения Рэлея (62) [48, 49, 50, 86]. Усреднение корреляторов (73) и (74) приводит при этом к простой замене $D \to W$. Усредненная функция Грина электрона имеет теперь вид:

$$G(i\varepsilon_n p) = \int_0^\infty dD\mathcal{P}_D(D) \frac{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F\kappa}{(i\varepsilon_n - \xi_p)(i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F\kappa) - |D|^2} = \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \frac{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F\kappa}{(i\varepsilon_n - \xi_p)(i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F\kappa) - \zeta W^2}$$
(76)

²³Для гауссовского поля все высшие корреляторы поля V(x) факторизуются "по Вику" через парные (73).

где W определяет теперь энергетическую ширину псевдощели. В пределе больших корреляционных длин флуктуаций поля (66), т.е. при $\xi_{corr} \to \infty$ ($\kappa \to 0$), решение (76) совпадает с найденным в работах [48, 49] для случая гауссова случайного поля. При конечных κ оно совпадает с решением, предложенным в работе [64] при формальном анализе точности приближений, использовавшихся в [50, 51, 52] при рассмотрении общей задачи об электроне в гауссовом случайном поле с парным коррелятором вида (73). В работах [64, 86] было показано, что плотность состояний, соответствующая функции Грина (76), обладает характерной "размытой" псевдощелью в окрестности уровня Ферми, причем значения плотности состояний количественно весьма близки [64, 86, 83] (для несоизмеримого случая практически при всех энергиях) к значениям, найденным в [50], а также к результатам точного численного моделирования задачи с гауссовским случайным полем, проведенного в работах [62, 89, 84]²⁴.

Если поле (66) создается флуктуациями какого - либо "диэлектрического" параметра порядка (например CDW или AFM), то распределение (62) может соответствовать его гауссовым флуктуациям в области достаточно высоких температур [63, 64]. При понижении температуры ниже некоторой характерной, даже до появления в системе соответствующего дальнего порядка, флуктуации амплитуды "вымораживаются" (ср. [90, 91]) и можно просто считать D = W, тогда как флуктуации фазы остаются вплоть до самых низких температур. Поэтому решение типа (75), приводящее к достаточно резко выраженной псевдощели при больших корреляционных длинах ξ_{corr} [88], мы будем использовать подразумевая "низкотемпературный" режим флуктуаций ближнего порядка. Поскольку микроскопика "диэлектрических" флуктуаций нами не рассматривается, все параметры их характеризующие, такие как корреляционная длина $\xi_{corr} = \kappa^{-1}$ и амплитуды D или W (энергетическая ширина псевдощели) рассматриваются здесь как феноменологические параметры. Аналогичным образом "низкотемпературный" или "высокотемпературный" режим флуктуаций

²⁴Используя метод [48, 49] в рассматриваемой модели можно точно рассчитать и двухчастичную функцию Грина и соответствующие частотные зависимости проводимости [86]. К сожалению, специфический вид рассматриваемого "беспорядка" приводит к нефизическому поведению на нулевой частоте, соответствующему "идеальному" проводнику.

ближнего порядка может реализоваться при различных температурах в сравнении, например, с температурой сверхпроводящего перехода.

Обобщение на случай двумерной электронной системы, характерной для ВТСП купратов, может быть проведено в духе модели "горячих" участков поверхности Ферми, рассматривавшейся в работах [56, 57, 58]. При этом предполагается, что в системе существуют две независимые системы флуктуаций типа (66)²⁵, ориентированные вдоль ортогональных осей х и у, с которыми сильно взаимодействуют только электроны с плоских участков двумерной поверхности Ферми, ортогональных эти осям. При этом двумерный потенциал, в котором движется электрон $V(\mathbf{r}) = 2D\cos(\mathbf{Qr}+\phi)$, где $\mathbf{Q} = (2p_F - k, 0)$ или $(0, 2p_F - k)$. Размер плоских ("горячих") участков задается параметром α , причем 2α представляет собой угловой размер плоского участка при рассмотрении его из центра зоны Бриллюэна [25, 56, 57, 58]. В частности, значение $\alpha = \pi/4$ соответствует квадратной поверхности Ферми (полный "нестинг"), когда вся поверхность Ферми является "горячей". При $\alpha < \pi/4$ на поверхности Ферми имеются "холодные" участки, на которых рассеяние на флуктуациях "диэлектрического" параметра порядка считается отсутствующим, а электроны рассматриваются как "свободные". В такой модели различные характеристики, определяющиеся интегралами по поверхности Ферми, состоят из аддитивных вкладов "горячих" и "холодных" участков. Псевдощелевая перестройка электронного спектра происходит лишь на горячих участках (и вблизи них), тогда как на "холодных" участках сохраняется фермижидкостное поведение [25].

Эта картина находится в качественном согласии с многочисленными ARPES – экспериментами на недодопированных ВТСП – купратах [24, 25], которые показывают, что псевдощелевые аномалии возникают в окрестности точки (0, π) в зоне Бриллюэна, исчезая при переходе к ее диагонали. Наличие плоских участков на поверхности Ферми ВТСП – купратов также достаточно надежно наблюдалось в ARPES – экспериментах нескольких независимых групп [25].

²⁵Отметим грубую аналогию этой картины с концепцией расслоения фаз в ВТСП – купратах (stripes) [92], если корреляционную длину ξ_{corr} понимать как характерный размер (период) областей расслоения [25].



Рис. 24: Диаграммы для собственно-энергетической части в модели SC-флуктуаций: (a)диаграмма первого порядка с "расшифровкой" смысла волнистой линии – флуктуационного пропагатора куперовских пар (пунктир – спаривательное взаимодействие). (б)-диаграмма второго порядка.

3.2 Псевдощель, вызываемая флуктуациями сверхпроводящего ближнего порядка.

Как уже отмечалось, явления псевдощели можно попытаться объяснить и на основе представлений о флуктуационном образовании куперовских пар при температурах выше температуры сверхпроводящего перехода T_c [93, 94, 95, 96]. Рассмотрим простейший модельный подход к этой задаче. На Рис.24(а) показана диаграмма для собственно-энергетической части электрона в первом порядке по флуктуационному пропагатору куперовских пар при $T > T_c$. Имея ввиду рассмотрение как обычного спаривания *s*-типа, так и спаривания *d*-типа, характерного для ВТСП-систем, введем спаривательное взаимодействие простейшего (сепарабельного) вида:

$$V(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = -Ve(\phi)e(\phi') \tag{77}$$

где ϕ -полярный угол, определяющий направление электронного импульса **р** в плоскости, а для $e(\phi)$ принимается модельная зависимость [97, 98]:

$$e(\phi) = \begin{cases} 1 & s - \text{спаривание} \\ \sqrt{2}\cos(2\phi) & d - \text{спариваниe} \end{cases}$$
(78)

Константа взаимодействия V, как обычно, предполагается отличной от нуля для электронов, находящихся в некотором слое вблизи поверхности Ферми. Тогда собственно-
энергетическая часть, соответствующая Рис.24(а), имеет вид:

$$\Sigma(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \sum_{m\mathbf{p}} V_{eff}(i\omega_m \mathbf{q}) G(i\omega_m - i\varepsilon_n, -\mathbf{p} + \mathbf{q})$$
(79)

где эффективное взаимодействие с SC-флуктуациями имеет вид:

$$V_{eff}(i\omega_m \mathbf{q}) = -\frac{Ve^2(\phi)}{1 - VT \sum_{n\mathbf{p}} G_0(i\varepsilon_n \mathbf{p}) G_0(i\omega_m - i\varepsilon_n, -\mathbf{p} + \mathbf{q})e^2(\phi)}$$
(80)

В дальнейшем будем считать SC-флуктуации статическими, так что в (84) можно ограничиться учетом только слагаемого с $\omega_m = 0$.Тогда эффективное взаимодействие можно записать как:

$$V_{eff}(\mathbf{q}) \approx -\frac{\tilde{W}^2 e^2(\phi)}{\xi^{-2}(T) + \mathbf{q}^2}$$
 (81)

где

$$\xi(T) = \frac{\xi_0}{\sqrt{\frac{T - T_c}{T_c}}} ; \quad \xi_0 \approx 0.18 \frac{v_F}{T_c}$$
 (82)

обычная длина когерентности сверхпроводника, $\tilde{W}^2 = \frac{1}{N(E_F)\xi_0^2} (N(E_F)$ -плотность состояний на уровне Ферми E_F). Конечно, в рамках рассматриваемой элементарной модели тип БКШ, имеем $\tilde{W} \approx 2\pi^2 T_c(T_c/E_F) \sim \Delta_0(\Delta_0/E_F) \ll \Delta_0$ (где Δ_0 энергетическая щель сверхпроводника при T = 0) и здесь возникает очевидная проблема объяснения наблюдающегося на эксперименте масштаба соответствующих аномалий. Однако в дальнейшем мы опять будем рассматривать ξ и \tilde{W} в качестве феноменологических параметров теории, имея ввиду, что в ВТСП-системах их можно пытаться определить из эксперимента, а не из неприменимой, в этом случае, простой теории БКШ.

Аналогично переходу от (29) к (31) введем вместо (81) модельное взаимодействие вида:

$$V_{eff}(\mathbf{q}) = -W^2 e^2(\phi) \frac{2\xi^{-1}}{\xi^{-2} + q_x^2} \frac{2\xi^{-1}}{\xi^{-2} + q_y^2}$$
(83)

где $W^2 = \tilde{W}^2/4$. Количественно это достаточно близко к (81) и сильно упрощает вычисления, позволяя провести систематизацию вкладов диаграмм высших порядков. В этом случае вклад первого порядка от диаграммы Рис.24(a) имеет вид:

$$\Sigma^{(1)}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{W^2 e^2(\phi)}{i\varepsilon_n + \xi_{\mathbf{p}} + i(|v_x| + |v_y|)\kappa sign\varepsilon_n}$$
(84)

где $v_x = v_f \cos \phi, v_y = v_F \sin \phi, \kappa = \xi^{-1}$. Вклад диаграммы второго порядка Рис.24(б) определяется как:

$$\Sigma^{(2)}(\varepsilon_{n}\mathbf{p}) = (W^{2}e^{2}(\phi))^{2} \int \frac{dq_{1x}}{\pi} \frac{\kappa}{\kappa^{2} + q_{1x}^{2}} \int \frac{dq_{1y}}{\pi} \frac{\kappa}{\kappa^{2} + q_{1y}^{2}} \int \frac{dq_{1x}}{\pi} \frac{\kappa}{\kappa^{2} + q_{2x}^{2}} \int \frac{dq_{1y}}{\pi} \frac{\kappa}{\kappa^{2} + q_{2y}^{2}} \times \frac{1}{(i\varepsilon_{n} + \xi_{\mathbf{p}} - \mathbf{v_{1}q_{1}})^{2}} \frac{1}{i\varepsilon_{n} - \xi_{\mathbf{p}} - \mathbf{v_{2}q_{1}} - \mathbf{v_{2}q_{2}}}$$

$$(85)$$

где $\mathbf{v}_1 = -\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_F$. Фактически, нетрудно убедиться, что в данной задаче возникают правила диаграммной техники практически идентичные рассмотренным выше в модели "горячих точек" с комбинаторикой, соответствующей несоизмеримому случаю. Последнее обстоятельство легко понять из топологии линии взаимодействия (флуктуационного пропагатора куперовских пар) диаграммы Рис.24(а)—видно, что в высших порядках существуют лишь диаграммы, в которых линия взаимодействия охватывает четное число вершин. Выражение (85) вполне аналогично (36), однако знаки проекций скоростей в знаменателях функций Грина здесь всегда разные: $\mathbf{v}_1 = -\mathbf{v}_2$. Поэтому в диаграммах высших порядков вклад в интегралы по передаваемым импульсам дают не только полюса от лоренцианов взаимодействия, но и от функций Грина. Тем не менее (имея ввиду дискуссию в Приложении А) мы можем оценить вклад диаграмм высших порядков, используя "анзатц" типа (39), т.е. вычислить все интегралы, например в (85), считая, что проекции скоростей \mathbf{v}_1 и \mathbf{v}_2 имеют один знак, а в *ответе* положить $\mathbf{v}_1 = -\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_F$. Тогда и в данной задаче для функции Грина получим рекуррентное соотношение типа (41):

$$\Sigma_k(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{W^2 e^2(\phi) s(k)}{i\varepsilon_n - (-1)^k \xi_{\mathbf{p}} + ikv_F \kappa(|\cos\phi| + |\sin\phi|) - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}})}$$
(86)

где s(k) определяется из (48). Разумеется, соотношение (86) не является точным, однако оно дает точный ответ в предельных случаях $\kappa \to 0(\xi \to \infty)$ и $\kappa \to \infty(\xi \to 0)$, обеспечивая достаточно корректную (количественно) интерполяцию между ними в случае конечных корреляционных длин.

На Рис.25(а) приведены энергетические зависимости спектральной плотности $A(E\mathbf{p})$ одночастичной функции Грина (56), рассчитанные с помощью (86), для различных значений полярного угла ϕ , определяющего направление импульса в плоскости (по-



Рис. 25: (а)–Энергетическая зависимость спектральной плотности $A(E, \mathbf{p})$ для случая флуктуационного спаривания *d*-типа для различных значений полярного угла ϕ , определяющего направление электронного импульса в плоскости: (1)– ϕ = 0; (2)– ϕ = $\pi/6$. Корреляционная длина выбрана соответствующей $v_F \kappa/W = 0.5$ (сплошные кривые) и 0.1 (пунктир). (б)–аналогичная зависимость произведения $f(E)A(E, \mathbf{p})$ (f(E)– функция Ферми): (1)– ϕ = 0; (2)– ϕ = $\pi/6$; (3)– ϕ = $\pi/4.83$. Температура (в функции Ферми) T = 0.1W, $v_F \kappa/W = 0.5$.

лагаем $|\mathbf{p}| = p_F$), для случая флуктуационного спаривания *d*-типа. Ясно видно, что в окрестности точки (π/a , 0) в зоне Бриллюэна спектральная плотность имеет нефермижидкостный (псевдощелевой) характер. По мере поворота вектора \mathbf{p} в направлении диагонали зоны Бриллюэна двухпиковая структура исчезает и спектральная плотность трансформируется в типично фермижидкостную с одним пиком, который тем уже, чем значение ϕ ближе к $\pi/4$. Аналогичная трансформация спектральной плотности происходит и по мере уменьшения корреляционной длины ξ .

На Рис.25(б) показана также эволюция величины $f(E)A(E\mathbf{p})$ (где f(E)– функция распределения Ферми), которая, в сущности, и измеряется в ARPES экспериментах [99]. Отметим, что кривые на Рис.25(б) очень похожи на аналогичные кривые, полученные в [63] в модели "горячих точек". Картина "разрушения " поверхности Ферми, следующая из этих расчетов очень напоминает имеющиеся экспериментальные данные, полученные в работе [100] для системы $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$.

В случае флуктуационного спаривания *s*-типа псевдощель возникает изотропно на всей поверхности Ферми, и спектральная плотность имеет нефермижидкостный вид при достаточно больших значениях корреляционной длины *ξ* SC-флуктуаций.

На Рис.26 представлены результаты расчетов одноэлектронной плотности состоя-



Рис. 26: Одноэлектронная плотность состояний в модели SC-флуктуаций при различных значениях параметра $v_F \kappa/W$ (корреляционных длинах флуктуаций ближнего порядка): (а)—случай *s*-спаривания. (б)—случай *d*-спаривания. Кривые построены для следующих значений параметра $v_F \kappa/W$: (1)—0.1; (2)—0.5; (3)—1.0; (4)—2.0.

ний с помощью (86) для случая *s*-спаривания (Рис.26(а)) и для случая *d*-спаривания (Рис.26(б)), для различных значений корреляционной длины SC-флуктуаций. Видим, что в случае *d*-спаривания псевдощель в плотности состояний не столь ярко выражена по сравнению с *s*-случаем, даже при достаточно больших значениях корреляционной длины флуктуаций. В тоже время из этих данных видно, что в модели SC-флуктуаций псевдощель в плотности состояний все же гораздо заметнее, нежели в рассмотренной выше модели "горячих точек".

3.3 Нефермижидкостное поведение в псевдощелевом состоянии. От полюса к нулю функции Грина.

В этом разделе мы проанализируем нефермижидкостное поведение, как одномерных, так и двумерных систем в псевдощелевом состоянии, детально обсудим квазичастичную перенормировку (Z – фактор), демонстрирующую поведение, характерное для "маргинальной" ферми жидкости или латтинжеровской жидкости, и топологическую устойчивость "затравочной" поверхности Ферми (теорема Латтинжера). В двумерном случае мы рассматрим эффективную картину "разрушения" поверхности Ферми, как в модели "горячих точек" для диэлектрических (AFM, CDW) псевдощелевых флуктуаций, так и качественно отличный случай сверхпроводящих d - волновых флуктуаций. Такое "разрушение" поверхности Ферми отражает нефермижидкостное поведение спектральной плотности и похоже на наблюдаемое в ARPES экспериментах в купратах. Дальнейшее рассмотрение в этом разделе в основном следует работе [101].

Псевдощель в электронном спектре недодопированных купратов – одна из наиболее существенных аномалий нормального состояния высокотемпературных сверхпроводников [25]. Существует два основных "сценария" формирования псевдощели – сверхпроводящие флуктуации, ведущие к образованию куперовских пар при температуре выше критической T_c , или флуктуации другого, конкурирующего с сверхпроводимостью, параметра порядка.

Мы полагаем, что предпочтительным является "сценарий" формирования псевдощели, базирующийся на модели сильного рассеяния носителей тока на спиновых флуктуациях антиферромагнитного ближнего порядка AFM, SDW) [25]. В импульсном представлении это рассеяние с импульсами переноса порядка вектора антиферромагнитизма $\mathbf{Q} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}) (a -$ параметр двумерной решетки). Это приводит к формированию особенностей в одночастичном спектре, которые являются "предчувствием" изменений в спектре, связанных с возникновением дальнего AFM порядка (удвоения периода).

В таком спин-флуктационном сценарии простейшая модель псевдощелевого состояния исследовалась в [25, 63, 64] и в предыдущих разделах главы в предположении, что динамикой спиновых флуктуаций для достаточно высоких температур можно пренебречь и рассматривать рассеяние на статическом гауссовом случайном поле ("замороженный" беспорядок) псевдощелевых флуктуаций. Эти флуктуации характеризуются достаточно узким пиком на импульсах рассеяния вблизи **Q**, с шириной пика, определяемой обратной корреляционной длиной ближнего порядка $\kappa = \xi^{-1}$. Как мы видели в разделе 3.2, аналогичная простая модель может быть развита также и в случае описания псевдощели сверхпроводящей природы [64].

Такие модели, основаны на более ранней одномерной модели псевдощелевого поведения [48, 49, 50], описанной в разделе 2.2 – модели с флуктуирующей щелью (fluctuating gap model – FGM), которая является точно решаемой в асимптотическом пределе большой корреляционной длины псевдощелевых флуктуаций $\kappa = \xi^{-1} \to 0$ [48, 49], и "почти точно" решаемой в случае конечной κ , где мы можем учесть *все* феймановские диаграммы теории возмущений, используя некоторое приближение *анзац*для диаграмм высоких порядков [50].

Нефермижидкостное поведение в FGM ранее уже обсуждалось как в одномерном варианте [48, 49, 53, 51, 52, 102](см. раздел 2.2), так и в двумерии [25, 63, 64](см. предыдущие разделы этой главы). Однако, некоторые интересные аспекты этой модели продолжают обсуждаться [103]. Ниже мы проанализируем различные аспекты нефермижидкостных аномалий поведения в 1D и 2D системах, в основном рассматривая случай диэлектрических (AFM (SDW) или CDW) псевдощелевых флуктуаций, а также более кратко и случай сверхпроводящих флуктуаций. Рассматриваемые модели демонстрируют некоторый вид "маргинального" фермижидкостного поведения и качественную картину "разрушения" поверхности Ферми и формирования "Ферми дуг" в 2D, похожую на наблюдаемое в ARPES экспериментах в купратах.

3.3.1 Возможные варианты перенормировки функции Грина.

Мы начнем с качественного обсуждения возможных проявлений нефермижидкостного поведения. Функция Грина системы взаимодействующих электронов определяется уравнением Дайсона (в мацубаровском представлении $\varepsilon_n = (2n+1)\pi T^{-26}$, $\xi_p = v_F(p-p_F)$):

$$G(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p - \Sigma(\varepsilon_n, \xi_p)}$$
(87)

В дальнейшем, мы будем использовать несколько *необычное* определение перенормировочного Z -фактора ("вычета"), вводимого следующим образом [103]:

$$G(\varepsilon_n, \xi_p) = Z(\varepsilon_n, \xi_p) G_0(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{Z(\varepsilon_n, \xi_p)}{i\varepsilon_n - \xi_p}$$
(88)

или

$$Z(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{i\varepsilon_n - \xi_p}{i\varepsilon_n - \xi_p - \Sigma(\varepsilon_n, \xi_p)} = (i\varepsilon_n - \xi_p)G(\varepsilon_n, \xi_p)$$
(89)

²⁶Несмотря на использование мацубаровского представления, ниже мы будем рассматривать ε_n как *непрерывную* переменную.

Заметим, что $Z(\varepsilon_n, \xi_p)$ в общем случае комплексный и фактически определяет полную перенормировку свободной электронной функции Грина $G_0(\varepsilon_n, \xi_p)$ вследствие взаимодействия. В тоже время он во многих смыслах аналогичен стандартному перенормирующему множителю ("вычету"), использующемуся в теории Ферми жидкости.

Давайте рассмотрим возможные альтернативы поведения $Z(\varepsilon_n, \xi_p)$.

Фермижидкостное поведение.

В нормальной Ферми жидкости мы можем сделать обычное разложение (вблизи уровня Ферми и в очевидных обозначениях), предполагая отсутствие каких либо сингулярностей в $\Sigma(\varepsilon_n, p)$:

$$\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p) \approx \Sigma(0, 0) + i\varepsilon_n \left. \frac{\partial \Sigma(\varepsilon_n, \xi_p)}{\partial (i\varepsilon_n)} \right|_0 + \xi_p \left. \frac{\partial \Sigma(\varepsilon_n, \xi_p)}{\partial \xi_p} \right|_0 + \cdots$$
(90)

В отсутствие статического примесного рассеяния $\Sigma(0,0)$ вещественна и лишь перенормирует химический потенциал. Тогда мы можем переписать (87) в виде:

$$G(\varepsilon) = \frac{1}{i\varepsilon_n \left\{ 1 - \frac{\partial \Sigma}{\partial (i\varepsilon_n)} \right\}_0 - \xi_p \left\{ 1 + \frac{\partial \Sigma}{\partial \xi_p} \right\}_0} \equiv \frac{\tilde{Z}}{i\varepsilon_n - \tilde{\xi}_p}$$
(91)

где введен обычный перенормирующий вычет в полюсе:

$$\tilde{Z} = \frac{1}{1 - \frac{\partial \Sigma}{\partial (i\varepsilon_n)}} ; \qquad \tilde{Z}^{-1} = 1 - \frac{\partial \Sigma}{\partial (i\varepsilon_n)} \Big|_0$$
(92)

и спектр квазичастиц:

$$\tilde{\xi}_p = \tilde{Z} \left(1 + \frac{\partial \Sigma}{\partial \xi_p} \right)_0 \xi_p \tag{93}$$

Обычное аналитическое продолжение на действительные частоты дает стандартное выражение теории Ферми жидкости [104, 55] с действительным $0 < \tilde{Z} < 1$, сохраняющее квазичастичный полюс функции Грина.

В специфическом случае $\xi_p = 0$, т.е. на поверхности Ферми, которая не перенормируется взаимодействием (в соответствии с гипотезой Ландау и теоремой Латтинджера), мы имеем:

$$G(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{\tilde{Z}}{i\varepsilon_n} \tag{94}$$

т.е. \tilde{Z} совпадает с пределом $Z(\varepsilon_n \to 0, \xi_p = 0)$ Z-фактора, определенного (88), (89), и мы имеем обычный полюс при $\varepsilon_n \to 0$. Аналогично для $\varepsilon_n = 0$, мы имеем $Z(\varepsilon_n = 0, \xi_p \to 0) \sim \tilde{Z}$.

В общем случае такое поведение сохраняется не только для $\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p)$, имеющего регулярное разложение при малых ε_n и ξ_p , но также для $\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p) \sim Max(\varepsilon_n^{\alpha}, \xi_p^{\alpha})$ с любыми $\alpha \geq 1$.

Ферми жидкость с примесями.

В случае малой концентрации случайных статических примесей мы имеем $\Sigma(\varepsilon_n \rightarrow 0, \xi_p \rightarrow 0) \rightarrow const$, с $Re\Sigma(0,0)$, дающим опять лишь сдвиг химического потенциала, но $Im\Sigma(0,0) \sim \gamma$, где γ – частота примесного рассеяния. Для функции Грина получаем:

$$G(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{\tilde{Z}}{i\varepsilon_n - \tilde{\xi}_p + i\gamma \frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|}}$$
(95)

и, следовательно, ренормализационный фактор, определяемый (89), имеет вид:

$$Z(\varepsilon_n, \xi_p) = \tilde{Z} \frac{i\varepsilon_n - \xi_p}{i\varepsilon_n - \tilde{\xi}_p + i\gamma \frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|}}$$
(96)

При $\xi_p = 0$ мы имеем:

$$Z(\varepsilon_n, \xi_p = 0) = \tilde{Z} \frac{i\varepsilon_n}{i\varepsilon_n + i\gamma \frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|}} \sim \frac{|\varepsilon_n|}{\gamma} \to 0 \quad \text{при} \quad |\varepsilon_n| \to 0$$
(97)

а для $|\varepsilon_n| \ll |\xi_p|$:

$$Z(\varepsilon_n \to 0, \xi_p) = \tilde{Z} \frac{\xi_p}{\xi_p - i\gamma \frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|}} \sim -i \frac{\xi_p}{\gamma} sign \varepsilon_n \to 0 \quad \text{при} \quad \xi_p \to 0$$
(98)

т.е. примесное рассеяние приводит к обращению Z - фактора в ноль на поверхности Ферми, что приводит к исчезновению обычной фермижидкостной *полюсной* сингулярности и возникновению конечного *скачка* функции Грина при $\varepsilon_n = 0$. Такое поведение является следствием нарушения трансляционной инвариантности (сохранения импульса) теории Ферми жидкости примесным рассеянием. Фактически, функция Грина (95), полученная после *усреднения* по положениям примесей, которое формально восстанавливает трансляционную инвариантность, приводит к некоторой разновидности (тривиального) нефермижидкостного поведения. Заметим, что такое поведение наблюдается для $|\varepsilon_n|, |\xi_p| \ll \gamma$, а в противоположном пределе мы с очевидностью имеем конечный $Z(\varepsilon,\xi_p) \sim \tilde{Z}$.

Сверхпроводники, пайерлсовские и экситонные диэлектрики.

Рассмотрим случай *s* - волнового сверхпроводника. Нормальная горьковская функция Грина имеет вид:

$$G(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\Delta|^2}$$
(99)

где Δ – *сверхпроводящая* щель. Такую же форму нормальная функция Грина имеет также в экситонном или пайерлсовском диэлектриках, где Δ обозначает соответствующую *диэлектрическую* щель в спектре [55]. Тогда:

$$Z(\varepsilon_n,\xi_p) = \frac{(i\varepsilon_n)^2 - (\xi_p)^2}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\Delta|^2} \sim \frac{Max(\varepsilon_n^2,\xi_p^2)}{|\Delta|^2} \to 0 \quad \text{при} \quad \varepsilon_n,\xi_p \to 0$$
(100)

т.е. мы имеем нефермижидкостное поведение с заменой *полюса* функции Грина на поверхности Ферми *нулем*, вследствии "закрытия" поверхности Ферми сверхпроводящей или диэлектрической щелью.

И снова фермижидкостной тип поведения с конечным Z - фактором "восстанавливается" при $|\varepsilon_n|, |\xi_p| \gg |\Delta|$.

Однако, полное описание сверхпроводящей (экситонной, пайерлсовской) фазы возможно только после введения также аномальных горьковских функций Грина. Спектр возбуждений на обеих сторонах фазового перехода определяется различными функциями Грина с разными топологическими свойствами [103].

Нефермижидкостное поведение вследствие взаимодействия.

Нефермижидкостное поведение функции Грина вследствие взаимодействия может возникать также в случае сингулярного поведения $\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p) \to \infty$ для $\varepsilon_n \to 0$ и $\xi_p \to 0$, например, степенной расходимости²⁷ $\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p) \sim Max(\varepsilon_n^{-\alpha}, \xi_p^{-\alpha})$ с $\alpha > 0$. Очевидно, в этом случае $Z(\varepsilon_n \to 0, \xi_p \to 0) \to 0$, и мы опять имеем *ноль* функции Грина на поверхности Ферми.

Другая возможность сингулярного поведения наблюдается в случае $\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p) \sim Max(\varepsilon_n^{\alpha}, \xi_p^{\alpha})$ с $0 < \alpha < 1$, что приводит к более слабой, чем обычная полюсная,

²⁷Дополнительная логарифмическая расходимость также может присутствовать!

сингулярности функции Грина на поверхности Ферми.

Оба типа поведения реализуются в одномерной модели Томонага–Латтинджера [106], где асимптотическое поведение $G(i\varepsilon_n, \xi_p)$ в области малых $\xi_p \sim \varepsilon_n$ может быть представлено в виде:

$$G(\varepsilon_n \sim \xi_p) \sim \frac{1}{\varepsilon_n^{1-2\alpha'}} \tag{101}$$

с $\alpha' < 1/2$. Для $\alpha' > 1/2$:

$$G(\varepsilon_n \sim \xi_p) \sim A + B\varepsilon_n^{2\alpha'-1} \tag{102}$$

Для $3/2 > \alpha' > 1$:

$$G(\varepsilon_n \sim \xi_p) \sim A + B\varepsilon_n + C\varepsilon_n^{2\alpha'-1},$$
 и т.д. (103)

с величиной α' , определяемой силой взаимодействия.

Выделенным является случай так называемого "маргинального" фермижидкостного поведения, предполагаемого [107] для объяснения электронных свойств CuO_2 плоскостей медных оксидов, в котором СЭЧ имеет вид:

$$\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p) \sim \lambda i \varepsilon_n \ln \frac{Max(\varepsilon_n, \xi_p)}{\omega_c}$$
(104)

где λ – безразмерная константа взаимодействия, ω_c – характерное обрезание по частоте. Если мы формально используем (92) при конечных ε_n , мы получим:

$$\tilde{Z}(\varepsilon_n, \xi_p) \sim \frac{1}{1 - \lambda \ln \frac{Max(\varepsilon_n, \xi_p)}{\omega_c}}$$
(105)

В этом случае "вычет в полюсе" функции Грина (Z-фактор) ²⁸ стремится к *нулю* непосредственно на поверхности Ферми и квазичастицы снова оказываются на ней не определены! Однако, везде, за исключением узкой (логарифмически) области вокруг поверхности Ферми, мы имеем более или менее "обычный" квазичастичный вклад — квазичастицы (вблизи поверхности Ферми) определены "маргинально". В настоящее время не существует общепринятой микроскопической модели "маргинального" фермижидкостного поведения в двумерии.

²⁸Отметим, что (105), строго говоря, не может служить корректным определением "вычета", поскольку стандартное выражение (92) определено только непосредственно на поверхности Ферми, где (105) не существует. В дальнейшем мы будем в основном использовать достаточно нестандартное определение (88).

3.3.2 Модель флуктуирующей щели.

Физическая природа FGM широко обсуждалась в литературе [25, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 63, 64, 55, 102]. Модель основана на картине электронов, распространяющихся в статическом *гауссовом* случайном поле (псевдощелевых) флуктуаций, приводящих к рассеянию с характерным импульсом переноса в окрестности некоторого фиксированного вектора рассеяния **Q**. Такие флуктуации описываются двумя основными параметрами: амплитуда W и корреляционная длина (ближнего порядка) ξ , определяющая эффективную ширину $\kappa = \xi^{-1}$ распределения векторов рассеяния.

В одномерии в качестве характерного вектора рассеяния обычно выбирается $Q = 2p_F$ (флуктуационная область перехода Пайерлса) [48, 49, 50], а в двумерии обычно рассматривают так называемую модель "горячих точек" с $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ [63, 64]. Эти модели предполагают "диэлектрическую" (CDW, SDW) природу псевдощелевых флуктуаций, но фактический аналогичный формализм может быть использован и в случае сверхпроводящих флуктуаций [64].

Случай сверхпроводящих (*s* - волновых) псевдощелевых флуктуаций в пространстве произвольной размерности фактический описывается одномерным вариантом FGM [48, 49, 64, 103].

Важным свойством обсуждаемых моделей является возможность точного решения достигаемая полным суммированием всего ряда феймановских диаграмм в асимптотическом пределе больших корреляционных длин $\xi \to \infty$ [48, 49, 53]. В случае конечных корреляционных длин также возможно произвести суммирование *всех* феймановских диаграмм для одноэлектронной функции Грина, используя *приближенный* анзац для вкладов высших порядков как в одномерии [50] так и в двумерном случае [63, 64]. Похожий метод суммирования диаграмм также может быть применен для расчетов двухчастичных функций Грина (вершинных частей) [48, 49, 51, 52, 63, 64, 70, 55].

Нашей целью будет показать, что почти все аспекты нефермижидкостного поведения, обсуждаемые выше, могут быть подробно продемонстрированы в различных вариантах FGM.

Одномерия.

Мы ограничимся здесь лишь случаем несоизмеримых псевдощелевых (CDW) флуктуаций [48, 49, 50]. Соизмеримый случай [53, 50] может быть проанализирован аналогично. Отметим, что такие же выражения возникают также в случае сверхпроводящих (*s* - волновых) флуктуаций в любой размерности.

В пределе бесконечной корреляционной длины псевдощелевых флуктуаций мы имеем следующее *точное* решение для одноэлектронной функции Грина [48, 49, 55]:

$$G(\varepsilon_n,\xi_p) = \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - \zeta W^2} = \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{W^2} \exp\left(\frac{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2}{W^2}\right) Ei\left(\frac{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2}{W^2}\right) \approx \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{W^2} \ln\left(\gamma'\frac{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2}{W^2}\right) \quad \text{при} \quad \varepsilon_n \to 0, \ \xi_p \to \emptyset^{106}$$

где Ei(-x) –интегральная экспонентная функция и мы использовали асимптотическое поведение $Ei(-x) \sim \ln(\gamma' x)$ при $x \to 0$ ($\ln \gamma' = 0.577$ – константа Эйлера). Тогда, используя (89) мы получаем:

$$Z(\varepsilon_n \sim \xi_p) = -\frac{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2}{W^2} \ln\left(\gamma' \frac{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2}{W^2}\right) \to 0 \quad \text{при} \quad \varepsilon_n \to 0, \ \xi_p \to 0 \tag{107}$$

Точно такой же результат получается, если для конечных ε_n, ξ_p мы определим:

$$\tilde{Z}(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{1}{1 - \frac{\partial \Sigma(\varepsilon_n, \xi_p)}{\partial (i\varepsilon_n)}}$$
(108)

аналогично тому, как делали в (92). Отметим, что вследствие $|\varepsilon_n| \ll W$, $|\xi_p| \ll W$ мы с очевидностью имеем Z > 0, но обычный *полюс* функции Грина на поверхности ("точке") Ферми в "нормальной" системе здесь превращается в *ноль* вследствие псевдощелевых флуктуаций. Топологическая устойчивость [103] приводит к тому, что сингулярность функции Грина сохраняется: *ноль является такой же сингулярностью* (с тем же топологическим зарядом) как и полюс. Фактически FGM дает явный пример некоторой разновидности латтинджеровской или "маргинальной" Ферми жидкости с очень сильно перенормированной сингулярностью на поверхности Ферми. Рассмотрим СЭЧ, соответствующую функции Грина (106):

$$\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p) = i\varepsilon_n - \xi_p - \left[\int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - \zeta W^2}\right]^{-1}$$
(109)

Взяв для упрощения $\xi_p = 0$ и $\varepsilon_n \to 0$, мы получаем:

$$\Sigma(\varepsilon_n \to 0, \xi_p = 0) = \frac{1}{i\varepsilon_n} \left[\int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \frac{1}{\varepsilon_n^2 + \zeta W^2} \right]^{-1} \approx -\frac{W^2}{i\varepsilon_n} \frac{1}{\ln\left(\gamma' \frac{\varepsilon_n^2}{W^2}\right)} \to \infty$$
(110)

т.е. расходимость типа, обсуждаемой выше.

В случае конечной корреляционной длины $\xi = \kappa^{-1}$ псевдощелевых флуктуаций мы используем представление одночастичной функции Грина в виде непрерывной дроби, выведенное в работе [50], для получения фактора перенормировки ($\varepsilon_n > 0$) в виде:

$$Z(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{i\varepsilon_n - \xi_p}{i\varepsilon_n - \xi_p - \frac{W^2}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F\kappa - \frac{W^2}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_F\kappa - \frac{2W^2}{i\varepsilon_n + \xi_p + 3iv_F\kappa - \dots}}}$$
(111)

который может изучаться численно.

На Рис. 27 показаны типичные зависимости фактора перенормировки $Z(\varepsilon_n, \xi_p)$. Во всех случаях он стремится к нулю на ("невозмущенной") поверхности Ферми и полюс функции Грина пропадает

По существу, такая сильная перенормировка работает на масштабах порядка ширины псевдощели, т.е. при $|\varepsilon_n| < W$ и $|\xi_p| < W$, отражая нефермижидкостное поведение системы вследствие псевдощелевых флуктуаций.

Однако, роль конечных корреляционных длин ξ (конечных κ) качественно похожа на статическое примесное рассеяние²⁹ и более детальные расчеты показывают следующее поведение Z - фактора при малых $\epsilon_n \ll v_F \kappa$ и $|\xi_p| \ll v_F \kappa$ (с $\varepsilon_n > 0$):

$$Z(\epsilon_n, \xi_p) \approx \alpha \left(\frac{v_F \kappa}{W}\right) \left(\frac{\epsilon_n + i\xi_p}{W}\right) \to 0 \quad \text{при} \quad \varepsilon_n \to 0, \ \xi_p \to 0, \tag{112}$$

²⁹Это происходит вследствие нашего приближения статических псевдощелевых флуктуаций.



Рис. 27: Типичные зависимости $Z(\varepsilon_n, \xi_p)$ – фактора в одномерной FGM с конечной корреляционной длиной: зависимости $Z(\varepsilon_n = 0, \xi_p)$ и $Z(\varepsilon_n, \xi_p = 0)$ от ε_n и ξ_p для $v_F \kappa / W = 0.1$. На вставке: зависимости $ReZ(\varepsilon_n = 0, \xi_p)$ от ξ_p для различных величин κ . ε_n и ξ_p даны в единицах W.



Рис. 28: Зависимость $\alpha\left(\frac{v_{F}\kappa}{W}\right)$ от обратной корреляционной длины.

с $\alpha(v_F\kappa/W) \to 0$ при $\kappa \to 0$, как видно из Рис. 28. В терминах функции Грина такое поведение соответствует следующему:

$$G(\varepsilon_n, \xi_p) \approx \frac{1}{W} \alpha \left(\frac{v_F \kappa}{W}\right) \frac{\varepsilon_n + i\xi_p}{i\varepsilon_n - \xi_p} = -i \frac{1}{W} \alpha \left(\frac{v_F \kappa}{W}\right)$$
(113)

Таким образом для конечных κ , нуля функции Грина при $\epsilon_n = 0$ и $\xi_p = 0$ не наблюдается , она остается конечной, как в примесных системах.

Стремление к нулю перенормировочного фактора $Z(\varepsilon_n, \xi_p)$ на "невозмущенной" поверхности Ферми находится в соответствии с общими аргументами о ее топологической стабильности [103] – в отсутствие статического примесного рассеяния полюсная сингулярность функции Грина заменяется нулем. В присутствии дополнительного примесного рассеяния этот ноль заменяется конечным скачком, т.е. сингулярность все равно остается.

Модель "горячих точек" в двумерии.

В двумерии мы будем использовать так называемую модель "горячих точек", описанную в разделе 3.1.1. Рассмотрим типичную поверхность Ферми электронов движущихся в *CuO*₂ плоскостях купратов, показанную на Рис. 15. Если отвлечься то тонких деталей, наблюдаемая (например, в ARPES экспериментах) поверхность Ферми (а также спектр элементарных возбуждений) в *CuO*₂ плоскости, в первом приближении неплохо описывается обычным приближением сильной связи (35) для электронной дисперсии.

Фазовый переход в антиферромагнитное (SDW) состояние вызывает к удвоению периода решетки и приводит к возникновению "антиферромагнитной" зоны Бриллюэна в обратном пространстве, как показано на Рис. 15. Если спектр носителей дается (35) с t' = 0 и мы рассматриваем случай половинного заполнения, поверхность Ферми становится квадратной, совпадая с границами антиферромагнитной зоны, и мы имеем полный "нестинг" — плоские участки поверхности Ферми, переходящие друг в друга при трансляции на вектор антиферромагнитизма $\mathbf{Q} = (\pm \pi/a, \pm \pi/a)$. В этом случае для T = 0 электронный спектр не устойчив, на всей поверхности Ферми открывается энергетическая щель и система становится диэлектриком, вследствие формирования антиферромагнитной волны спиновой плотности (SDW)³⁰. В случае поверхности Ферми, показанной на Рис. 15, антиферромагнитный дальний порядок, в соответствии с общими правилами зонной теории, приводит к возникновению разрывов изоэнергетических поверхностей (например, поверхности Ферми) в точках пересечения с границами новой (магнитной) зоны Бриллюэна, вследствие открытия щели в точках, связанных вектором \mathbf{Q} .

В большей части недодопированной области фазовой диаграммы купратов дальний антиферромагнитный порядок отсутствует, однако, ряд экспериментов подтвер-

³⁰Аналогичная диэлектризация реализуется также в случае формирования похожей волны зарядовой плотности (CDW).

ждает наличие хорошо развитых флуктуаций антиферромагнитного ближнего порядка, которые рассеивают электроны с характерным импульсом переноса порядка **Q**. Похожий эффект может возникать благодаря CDW флуктуациям. Эти флуктуации снова предполагаются статическими и гауссовыми и характеризуются двумя параметрами: амплитудой W и корреляционной длиной $\xi = \kappa^{-1}$ [25]. В этом случае мы можем получить достаточно полное решение для одночастичной функции Грина путем суммирования *всех* феймановских диаграмм ряда теории возмущений, описывающих рассеяние на этих флуктуациях [25, 63, 64]. Это решение опять является точным в пределе $\xi \to \infty$ [63] и, несомненно, очень близко к точному в случае конечных ξ [108]. Также вполне осуществимо обобщение такого подхода для описания двухчастичных свойств (вершинных частей).

Мы начнем опять с точного решения для $\xi \to \infty$ (или $\kappa = 0$) [63]. Введем (нормальную) функцию Грина в SDW (CDW) состоянии с дальним порядком (см. например [55]):

$$G(\varepsilon_n, \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}-\mathbf{Q}}}{(i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}})(i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}-\mathbf{Q}}) - D^2}$$
(114)

где D обозначена амплитуда SDW (CDW) периодического потенциала и $\xi_{\mathbf{p}} = \varepsilon(\mathbf{p}) - \mu$. Тогда мы можем записать соответствующий Z - фактор в виде:

$$Z(\varepsilon_n, \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{(i\varepsilon_n - \xi_1)(i\varepsilon_n - \xi_2)}{(i\varepsilon_n - \xi_1)(i\varepsilon_n - \xi_2) - D^2}$$
(115)

где мы положили : $\xi_{\mathbf{p}} = \xi_1$ и $\xi_{\mathbf{p}-\mathbf{Q}} = \xi_2$. В дальнейшем нас в основном будет интересовать предел $\varepsilon_n \to 0$ и $\xi_1 \to 0$, т.е. окрестность "невозмущенной" поверхности Ферми. Отметим, что условие $\xi_2 = 0$ определяет так называемую "теневую" поверхность Ферми. Непосредственно в "горячих точках" мы имеем $\xi_1 = \xi_2 = 0$. Удобно ввесть комплексную переменную:

$$z = (i\varepsilon_n - \xi_1)(i\varepsilon_n - \xi_2) \tag{116}$$

которая становится малой при $\varepsilon_n, \xi_1, \xi_2 \to 0.$

1. Несоизмеримая комбинаторика.

В случае несоизмеримых (CDW) псевдощелевых флуктуаций точное решение для функции Грина FGM в пределе $\xi \to \infty$ имеет вид аналогичный (106) [25, 63] и мы получаем (усредняя (115) с распределением Релея для D):

$$Z(z) = \int_0^\infty dD \frac{2D}{W^2} e^{-\frac{D^2}{W^2}} \frac{z}{z - D^2} = \int_0^\infty \frac{d\zeta}{W^2} e^{-\frac{\zeta}{W^2}} \frac{z}{z - \zeta} = \frac{z}{W^2} e^{-\frac{z}{W^2}} Ei\left(\frac{z}{W^2}\right)$$
(117)

Тогда, при $z \to 0$ мы получаем:

$$Z(z \to 0) \approx \frac{z}{W^2} \left[\ln \left(\gamma' \frac{z}{W^2} \right) - i\pi \right]$$
(118)

На "невозмущенной" поверхности Ферми мы имеем $\xi_1 = 0$ и в дальнейшем мы ограничимся $\varepsilon_n > 0$. Тогда, из (118) мы можем легко найти предельное поведение Z(z). Интересующие нас результаты имеют вид:

1. Для $\varepsilon_n \ll |\xi_2|$:

$$ReZ(\varepsilon_n \ll |\xi_2|, \xi_1 = 0) \approx \frac{\pi}{2} \frac{\varepsilon_n |\xi_2|}{W^2}$$
(119)

т.е. "примесно"-подобное линейное поведение от ε_n .

2. Для $\varepsilon_n \gg |\xi_2|$ (т.е. также и для "горячих точек", где $\xi_2 = 0$):

$$ReZ(\varepsilon_n \gg |\xi_2|, \xi_1 = 0) \approx -\frac{\varepsilon_n^2}{W^2} \ln\left(\gamma' \frac{\varepsilon_n^2}{W^2}\right) + \frac{1}{2} \frac{\xi_2^2}{W^2}$$
(120)

т.е. (для $\xi_2 = 0$) нефермижидкостное поведение, похожее на одномерный случай.

Отметим, что мы всегда имеем ImZ = 0 при $\xi_2 = 0$, т.е. на "теневой" поверхности Ферми и, в частности, непосредственно в "горячих точках".

2. Спин – фермионная комбинаторика.

Сейчас рассмотрим спин-фермионную (гейзенберговскую) модель псевдощелевых (SDW) флуктуаций [63]. В этом случае мы опять получаем FGM, но с распределением щелей отличающимся от распределения Релея и вместо (117) мы имеем:

$$Z(z) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty dD \frac{D^2}{\left(\frac{W^2}{3}\right)^{3/2}} e^{-\frac{D^2}{2\left(\frac{W^2}{3}\right)}} \frac{z}{z - D^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty d\zeta \frac{\sqrt{\zeta}}{\left(\frac{W^2}{3}\right)^{3/2}} e^{-\frac{\zeta}{2\left(\frac{W^2}{3}\right)}} \frac{\zeta}{z - \zeta} = \frac{\Gamma(3/2)}{\sqrt{2\pi}} \frac{(-z)^{3/2}}{\left(\frac{W^2}{3}\right)^{3/2}} \exp\left[-\frac{z}{2\left(\frac{W^2}{3}\right)}\right] \Gamma\left(-\frac{1}{2}; -\frac{z}{2\left(\frac{W^2}{3}\right)}\right)$$

Таким образом, для $z \to 0$ получаем:

$$Z(z) \approx \frac{2\Gamma(3/2)}{\sqrt{\pi}} \left[-\frac{z}{2\left(\frac{W^2}{3}\right)} + \Gamma(-1/2) \left(-\frac{z}{2\left(\frac{W^2}{3}\right)} \right)^{3/2} \right]$$
(121)

Тогда на "невозмущенной" поверхности Ферми ($\xi_p = 0$) мы имеем:

$$Z(\varepsilon_n \to 0, \xi_2, \xi_1 = 0) = \frac{2\Gamma(3/2)}{\sqrt{\pi}} \left[-\frac{\varepsilon_n(\varepsilon_n + i\xi_2)}{2\left(\frac{W^2}{3}\right)} + \Gamma(-1/2) \left(-\frac{\varepsilon_n(\varepsilon_n + i\xi_2)}{2\left(\frac{W^2}{3}\right)} \right)^{3/2} \right]$$
(122)

В частности, при $\xi_2 = 0$ имеем ImZ = 0 и:

$$Z(\varepsilon_n \to 0, \xi_2 = \xi_1 = 0) = ReZ(\varepsilon_n \to 0, \xi_2 = \xi_1 = 0) = \frac{\Gamma(3/2)}{\sqrt{\pi}} \frac{\varepsilon_n^2}{\left(\frac{W^2}{3}\right)}$$
(123)

Таким образом, мы получаем квадратичное нефермижидкостное поведение Z - фактора. Опять представим ряд результатов предельного поведения:

1. При $\varepsilon_n \ll |\xi_2|$:

$$ReZ(\varepsilon_n \ll |\xi_2|, \xi_1 = 0) = \frac{2\Gamma(3/2)}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{\varepsilon_n^2}{2\left(\frac{W^2}{3}\right)} + \sqrt{2\pi} \left(\frac{\varepsilon_n |\xi_2|}{2\left(\frac{W^2}{3}\right)} \right)^{3/2} \right]$$
(124)

т.е. "нулевое" нефермижидкостное поведение.

2. При $\varepsilon_n \gg |\xi_2|$ (т.е. и непосредственно в "горячих точках", где $\xi_2 = 0$):

$$ReZ(\varepsilon_n \gg \xi_2, \xi_1 = 0) = \frac{\Gamma(3/2)}{\sqrt{\pi}} \frac{\varepsilon_n^2}{\left(\frac{W^2}{3}\right)}$$
(125)

т.е. снова "нулевое" нефермижидкостное поведение.

В общем случае конечной корреляционной длины $\xi = \kappa^{-1}$ мы представим численный анализ, используя рекуррентные соотношения, предложенные в работах [63, 64] (см. раздел 3.1.1). Мы снова используем основное определение Z - фактора, данное в (89), а для вычисления СЭЧ $\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p)$ электрона распространяющегося в замороженном (статическом) случайном поле гауссовых спиновых флуктуаций с векторами рассеяния, лежащими вблизи характерного вектора **Q**, мы используем рекуррентную процедуру (41) [63, 64], описанную в разделе 3.1.1, которая учитывает *все* диаграммы Фейнмана, описывающие рассеяние электронов этим случайным полем. Ниже мы



Рис. 29: Зависимость ReZ от ε_n (в единицах t) в различных точках поверхности Ферми (соответствующей t' = -0.4t и $\mu = -1.3t$) в модели "горячих точек" (спин-фермионная комбинаторика диаграмм) с корреляционной длиной $\xi \to \infty$ ($\kappa = 0$) и $\xi^{-1}a = \kappa a = 0.01$. Амплитуда псевдощели W = 0.1t. На вставке показана "невозмущенная" поверхность Ферми и точки, в которых проводились расчеты.

представим только наши результаты для спин-фермионной комбинаторики, в других случаях (несоизмеримой и соизмеримой комбинаторик) мы получаем более или менее похожее поведение перенормировочного Z-фактора.

На Рис. 29 показаны результаты численных расчетов $ReZ(\varepsilon_n, \xi_p = 0)$ в различных точках, взятых на "невозмущенной" поверхности Ферми и показанных на вставке. Для сравнения мы приводим данные, полученные в пределе бесконечной корреляционной длины $\xi \to \infty$ (или $\kappa = 0$ – точно решаемый случай) и для конечной $\kappa a = 0.01$ (i.e. $\xi = 100a$). Ясно видно, что в обоих случаях $ReZ \sim 1$ в "нодальной" точке D, за исключением очень малых величин ε_n , а в окрестности "горячей точки" (точки A и C) и в самой "горячей точке" (точка B), ReZ становится малым в достаточно широком интервале $\varepsilon_n < W$. Это соответствует более или менее фермижидкостному поведению в "нодальной" области (вблизи диагонали зоны Бриллюэна) и с нефермижидкостным поведением, соответствующим "маргинальной" Ферми жидкости или латтинджеровской жидкости, в окрестности "горячей точки".

Для полноты картины на Рис. 30 показано сравнение зависимостей ImZ от ε_n в тех же характерных точках на поверхности Ферми и длля таких же параметров, как на Рис. 29. Необходимо еще раз подчеркнуть, что только непосредственно в самой "горячей точке" (точка *B*) мы имеем ImZ = 0 и *Z* становится действительным,



Рис. 30: Зависимость ImZ от ε_n ((в единицах t) в различных точках поверхности Ферми (соответствующей t' = -0.4t и $\mu = -1.3t$) в модели "горячих точек" (спин-фермионная комбинаторика диаграмм) с конечной корреляционной длиной $\xi^{-1}a = \kappa a = 0.01$. Амплитуда псевдощели W = 0.1t. На вставке – "невозмущенная" поверхность Ферми и точки, в которых проводились расчеты.

демонстрируя зависимость от ε_n более или менее эквивалентную предполагаемой в модели "маргинальной" Ферми жидкости (или латтинджеровской жидкости).

Во всех случаях мы наблюдаем обращение в ноль перенормировочного $Z(\varepsilon_n, \xi_p)$ фактора на "невозмущенной" поверхности Ферми. В отсутствие статического примесноподобного рассеяния вследствие конечной величины корреляционной длины $\xi = \kappa^{-1}$ полюсная сингулярность функции Грина заменяется нулем, отражая топологическую устойчивость "невозмущенной" поверхности Ферми (теорема Латтинджера) [103]. В присутствии такого рассеяния особенность функции Грина на топологически устойчивой "невозмущенной" поверхности Ферми проявляется в форме конечного скачка.

Спектральная плотность и "разрушение" поверхности Ферми в модели "горячих точек".

Давайте вернемся к (114) и проведем обычное аналитическое продолжение на действительные частоты: $i\varepsilon_n \to \varepsilon + i\delta$. Тогда мы получаем:

$$G^{R}(\varepsilon,\xi_{\mathbf{p}}) = \frac{\varepsilon - \xi_{2}}{(\varepsilon + i\delta - \xi_{1})(\varepsilon - \xi_{2} + i\delta) - D^{2}} = \frac{\varepsilon - \xi_{2}}{(\varepsilon - \xi_{1})(\varepsilon - \xi_{2}) - D^{2} + i\delta(2\varepsilon - \xi_{1} - \xi_{2})}$$
(126)

так что спектральная плотность в случае дальнего (CDW, SDW) порядка имеет следующий вид:

$$A_D(\varepsilon,\xi_{\mathbf{p}}) = -\frac{1}{\pi} Im G^R(\varepsilon,\xi_{\mathbf{p}}) = (\varepsilon - \xi_2)\delta[(\varepsilon - \xi_1)(\varepsilon - \xi_2) - D^2]sign(2\varepsilon - \xi_1 - \xi_2) \quad (127)$$

Соответственно, для FGM с корреляционной длиной $\xi \to \infty$ мы имеем:

$$A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) = \int_0^\infty dD \mathcal{P}_D A_D(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}})$$
(128)

где \mathcal{P}_D – функция распределения щелевых флуктуаций, зависящая от комбинаторики диаграмм и приводящая к трем следующим различным случаям, уже рассматриваемым (или упомянутым) выше:

1. Несоизмеримая комбинаторика.

В случае несоизмеримых CDW-подобных псевдощелевых флуктуаций мы имеем:

$$\mathcal{P}_D = \frac{2D}{W^2} e^{-\frac{D^2}{W^2}} \tag{129}$$

– распределение Релея [48, 49, 55]. Тогда, из (128) мы получаем:

$$A(\varepsilon,\xi_{\mathbf{p}}) = \frac{\varepsilon - \xi_2}{W^2} e^{-\frac{(\varepsilon - \xi_1)(\varepsilon - \xi_2)}{W^2}} \theta[(\varepsilon - \xi_1)(\varepsilon - \xi_2)] sign(2\varepsilon - \xi_1 - \xi_2)$$
(130)

Для $\varepsilon = 0$ мы имеем:

$$A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{\xi_2}{W^2} e^{-\frac{\xi_1 \xi_2}{W^2}} \theta[\xi_1 \xi_2] sign(\xi_1 + \xi_2)$$
(131)

При $\xi_1 \to \pm 0$ мы получаем:

$$A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}} \to \pm 0, \xi_2) = \pm \frac{\xi_2}{W^2} \theta(\pm \xi_2)$$
(132)

и следовательно $A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}})$ отлична от нуля в зоне Бриллюэна только в области между "невозмущенной" поверхностью Ферми и "теневой" поверхностью Ферми. Этот качественный результат подтверждается ниже для всех других комбинаторик в случае "чистой" FGM с $\xi^{-1} = \kappa = 0$.

2. Соизмеримая комбинаторика.

В случае соизмеримых CDW-подобных псевдощелевых флуктуаций мы имеем [53]:

$$\mathcal{P}_D = \frac{1}{\sqrt{2\pi}W} e^{-\frac{D^2}{2W^2}}$$
(133)

– распределение Гаусса. Тогда, из (128) мы получаем:

$$A(\varepsilon,\xi_{\mathbf{p}}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\varepsilon - \xi_2}{W\sqrt{(\varepsilon - \xi_1)(\varepsilon - \xi_2)}} e^{-\frac{(\varepsilon - \xi_1)(\varepsilon - \xi_2)}{2W^2}} \theta[(\varepsilon - \xi_1)(\varepsilon - \xi_2)] sign(2\varepsilon - \xi_1 - \xi_2)$$
(134)

с такими же качественными выводами, как в несоизмеримом случае.

3. Спин – фермионная комбинаторика.

В случае соизмеримых SDW-подобных псевдощелевых флуктуаций (гейзенберговской) спин-фермионной модели [63] мы имеем следующее распределение щелей:

$$\mathcal{P}_D = \frac{2}{\pi} \frac{D^2}{\left(\frac{W^2}{3}\right)^{3/2}} e^{-\frac{D^2}{2\left(\frac{W^2}{3}\right)}}$$
(135)

Тогда, из (128) мы получаем:

$$A(\varepsilon,\xi_{\mathbf{p}}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{(\varepsilon-\xi_1)(\varepsilon-\xi_2)}}{\left(\frac{W^2}{3}\right)^{3/2}} e^{-\frac{(\varepsilon-\xi_1)(\varepsilon-\xi_2)}{2\left(\frac{W^2}{3}\right)}} \theta[(\varepsilon-\xi_1)(\varepsilon-\xi_2)]sign(2\varepsilon-\xi_1-\xi_2)$$
(136)

снова с такими же качественными выводами, как и в несоизмеримом случае.

В общем случае конечной корреляционной длины $\xi = \kappa^{-1}$ спектральная плотность может быть напрямую рассчитана, используя аналитической продолжение рекуррентных соотношений (309), (41) на действительные частоты [63, 64].

Фактически, двумерный контурный график $A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}})$ (который напрямую соответствует графику ARPES интенсивности) может быть использован для "практического" определения перенормированной поверхности Ферми и выявления качественной картины ее эволюции в FGM с изменением модельных параметров³¹.

На Рис. 31 приведены типичные диаграммы интенсивности спектральной плотности $A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}})$ в четверти зоны Бриллюэна в модели "горячих точек" для случаев бесконечной ($\xi^{-1} = \kappa = 0$) и конечной ($\xi^{-1}a = \kappa a = 0.01$) корреляционных длин

³¹Отметим, что для свободных электронов $A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}}) = \delta(\xi_{\mathbf{p}})$, так что соответствующий график интенсивности напрямую воспроизводит "невозмущенную" поверхность Ферми.



Рис. 31: Диаграммы интенсивности спектральной плотности $A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}})$ в четверти зоны Бриллюэна в модели "горячих точек" (t' = -0.4t and $\mu = -1.3t$) для случаев бесконечной $\xi^{-1} = \kappa = 0$ и конечной $\xi^{-1}a = \kappa a = 0.01$ корреляционных длин (спин-фермионная комбинаторика диаграмм) с различными величинами амплитуды псевдощели W = 0.1t и W = t. "Невозмущенная" поверхность Ферми показана пунктирной линией.

(со спин-фермионной комбинаторикой диаграмм, в других случаях поведение достаточно похожее) и для различных величин W. Эти диаграммы демонстрируют формирование типичных "Ферми дуг" с ростом W и качественно подобны типичным ARPES данным в купратах [32, 109].

Сверхпроводящие *d* – волновые флуктуации.

Как уже отмечалось выше, случай сверхпроводящих *s* - волновых псевдощелевых флуктуаций просто сводится к одномерной FGM. Более интересен случай сверхпроводящих *d* - волновых флуктуаций в двумерии.

Для получения точных результатов в случае бесконечной корреляционной длины $\xi^{-1} = \kappa = 0$ необходимо просто произвести следующую замену выражений в модели "горячих точек" с несоизмеримой комбинаторикой: $\xi_2 \to -\xi_1 = -\xi_p$ и $W \to W_p$, где W_p определяет амплитуду флуктуаций с d - волновой симметрией:

$$W_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2}W\left[\cos(p_{x}a) - \cos(p_{y}a)\right]$$
(137)

W здесь также характеризует энергетический масштаб сверхпроводящих псевдощелевых флуктуаций.

Тогда (116) превращается в $z = -(\varepsilon_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2)$ и для Z-фактора мы немедленно

получаем выражение, аналогичное (107):

$$Z(\varepsilon_n, \xi_p) = -\frac{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2}{W_p^2} \exp\left(-\frac{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2}{W_p^2}\right) Ei\left(-\frac{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2}{W_p^2}\right) \approx \\ \approx -\frac{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2}{W_p^2} \ln\left(\gamma' \frac{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2}{W_p^2}\right) \to 0 \quad \text{при} \quad \varepsilon_n \to 0, \ \xi_p \to 0$$
(138)

снова полюсная особенность заменяется нулем на "невозмущенной" поверхности Ферми, за исключением "нодальной" точки на диагонали зоны Бриллюэна, где $W_{\mathbf{p}} = 0$ (см. (137)).

Вместо (130), мы получаем спектральную плотность в виде:

$$A(\varepsilon,\xi_{\mathbf{p}}) = \frac{\varepsilon + \xi_{\mathbf{p}}}{W_{\mathbf{p}}^2} e^{-\frac{\varepsilon^2 - \xi_{\mathbf{p}}^2}{W_{\mathbf{p}}^2}} \theta(\varepsilon^2 - \xi_{\mathbf{p}}^2) sign\varepsilon$$
(139)

которая отлична от нуля только при $|\xi_{\mathbf{p}}| < \varepsilon$. В результате, при $\varepsilon = 0$ мы имеем $A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}}) = 0$ для $W_{\mathbf{p}} \neq 0$, и спектральная плотность отлична от нуля только на пересечении "невозмущенной" поверхности Ферми с диагональю зоны Бриллюэна, где $W_{\mathbf{p}}$, определяемое (137), обращается в ноль. На самой поверхности Ферми мы имеем:

$$A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}} = 0) = \frac{|\varepsilon|}{W_{\mathbf{p}}^2} e^{-\frac{\varepsilon^2}{W_{\mathbf{p}}^2}}$$
(140)

с двумя максимумами при $\varepsilon=\pm W/\sqrt{2}.$

Рассматривая общий случай конечной корреляционной длины $\xi = \kappa^{-1}$, мы снова проводим численный анализ, используя рекуррентную процедуру, определенную для этой задачи в работе [64], и используем базовое определение (89) Z - фактора. Для вычисления СЭЧ $\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p)$ электронов, рассеиваемых статическими флуктуациями сверхпроводящего параметра с d - волновой симметрией, мы используем рекуррентное соотношение (похожее на (41)), слегка обобщающее аналогичное (86):

$$\Sigma_k(\varepsilon_n, \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{W_{\mathbf{p}}^2 s(k)}{i\varepsilon_n - (-1)^k \xi_{\mathbf{p}} + ik\kappa(|v_{\mathbf{p}}^x| + |v_{\mathbf{p}}^y|) - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n, \xi_{\mathbf{p}})}$$
(141)

где комбинаторные множители s(k), соответствующие здесь несоизмеримому случаю, определены в (48).

На Рис. 32 показаны результаты для $ReZ(\varepsilon_n, \xi_p = 0)$, полученные для различных точек на "невозмущенной" поверхности Ферми, показанных на вставке. Корреляционная длина $\xi = 100a$ ($\kappa a = 0.01$) и W = 0.1t. ReZ = 1 непосредственно в "нодальной"



Рис. 32: Зависимость ReZ от ε_n (в единицах t) в различных точках поверхности Ферми (соответствующей t' = -0.4t и $\mu = -1.3t$) в модели сверхпроводящих (d - волновых) псевдощелевых флуктуаций с корреляционной длиной $\xi^{-1}a = \kappa a = 0.01$. Амплитуда псевдощели W = 0.1t. На вставке показана "невозмущенная" поверхность Ферми и точки, в которых выполнялись расчеты.



Рис. 33: Диаграммы интенсивности спектральной плотности $A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}})$ в зоне Бриллюэна (t' = -0.4t и $\mu = -1.3t)$ в модели сверхпроводящих (d - волновых) псевдощелевых флуктуаций с корреляционной длиной $\xi^{-1}a = \kappa a = 0.1$ (спин – фермионная комбинаторика диаграмм) для двух величин псевдощелевой амплитуды W = 0.3t и W = t.

точке D (где $W_{\mathbf{p}} = 0$), но в других точках "невозмущенной" поверхности Ферми ReZ сильно перенормировано в достаточно широком энергетическом интервале $\varepsilon_n < |W_{\mathbf{p}}|$ и стремится к нулю при $\varepsilon_n \to 0$. Таким образом мы опять получаем некоторый вариант "маргинальной" Ферми жидкости или латтинджеровской жидкости (нефермижидкостное поведение), но качественно отличающийся от случая модели "горячих точек".

На Рис. 33 показаны типичные диаграммы интенсивности спектральной плотности $A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}})$ в зоне Бриллюэна в случае сверхпроводящих (d - волновых) псевдощелевых флуктуаций с корреляционной длиной $\xi^{-1}a = \kappa a = 0.1$ для двух величин псевдощелевой амплитуды W. Мы видим, что здесь спектральная плотность дает совершенно другую картину "разрушения" поверхности Ферми в отличие от случая модели "горячих точек". Такая карта поверхности Ферми, по нашему мнению, значительно отличается от большинства результатов ARPES измерений в медных оксидах. Ферми поверхность четко определена только в одной точке (на диагонали зоны Бриллюэна), где W_p, определяемая (137), точно равна нулю и нет резко обозначенных Ферми дуг, формирующихся вблизи этой точки Мы наблюдаем только более или менее широкие "крылья летящего дракона", формирующиеся вокруг этой точки. Отметим также отсутствие каких-либо признаков "теневой" поверхности Ферми.

3.4 Комбинаторика фейнмановских диаграмм в задачах с гауссовым случайным полем.

В предыдущих разделах этой главы был рассмотрен ряд точно или "почти точно" решаемых моделей псевдощлевого состояния. Безусловно, в случаях достаточно реалистичных моделей (например, моделей с конечной корреляционной длиной), точного решения получить не удается, но можно сформулировать, подход называемый нами "почти точным" решением. Стандартный подход в теории возмущений состоит в суммировании некоторой подпоследовательности феймановских диаграмм, являющихся по тому или иному критерию преобладающими (например, диаграмм без перекрестов линий взаимодействия в самосогласованном борновском приближении). Наш поход состоит в использовании некоторого приближения, "анзаца" при рассмотрении диаграмм в данном порядке теории возмущений с дальнейшим суммированием *всех* феймановских диаграмм. Такой подход позволяет (с некоторым приближением) включить в рассмотрение существенно непертурбативные эффекты.

Данный заключительный раздел этой главы посвящен использованию такого подхода к рассмотрению задачи об электроне в гауссовом случайном поле с коррелятором типа "белого шума" – стандартной теоретической модели при описании рассеяния электрона на примесях. Отметим, что все модели, рассмотренные в этой и предыдущей главах, также рассматривали электрон, движущийся в статическом ("замороженном") гауссовом случайном поле правда с достаточно "хитрым" коррелятором. Так что и по объекту исследования и методологически (по использованному подходу) такое рассмотрение достаточно близко к моделям, исследуемым выше. Однако, такая задача сильно "выбивается" из основной темы диссертации и чтобы не загромождать основной текст в нем оставлена только короткая аннотация, а само исследование вынесено в отдельное Приложение В, где с ним и может познакомится интересующийся читатель.

Итак, в Приложении В, следуя работе [111], построен алгоритм вычисления производящей функции для числа "скелетных" графиков неприводимой собственно энергетической и вершинных частей в диаграммной технике для задач с гауссовским случайным полем. Найдено точное рекуррентное соотношение, определяющее число графиков в любом порядке теории возмущений и асимптотика в пределе высоких порядков. Полученные результаты применяются к анализу задачи об электроне в гауссовом случайном поле с коррелятором типа "белого шума". В приближении равенства "скелетных" графиков для собственно - энергетической части в данном порядке теории возмущений удается построить замкнутое интегральное уравнение для одноэлектронной функции Грина, "ядро" которого определяется упомянутой производящей функцией. Проведенный анализ показывает, что рассматриваемое приближение дает качественно правильное описание "хвоста" плотности состояний в области отрицательных энергий и, по-видимому, вполне применимо в наиболее интересной области сильного рассеяния вблизи края исходной зоны, где удается определить асимптотику функции Грина и плотности состояний в пределе бесконечно сильного рассеяния.

3.5 Основные выводы.

В настоящей главе мы рассмотрели точно и "почти точно" решаемые модели псевдощелевого состояния электронного спектра двумерных систем, основанные на альтернативных сценариях происхождения этих аномалий — картине флуктуаций "диэлектрического" (AFM, SDW, CDW) типа, приводящей к модели "горячих точек", или картине флуктуационного образования куперовских пар при $T > T_c$ (SC-флуктуаций). Термин "почти точно" решаемые означает, что в данном подходе удается просуммировать весь ряд фейнмановских диаграмм для одноэлектронной функции Грина (а фактически и для двухэлектронной [51, 52]), используя для вкладов диаграмм высших порядков *приближенный* "анзатц" (39). Как показано в Приложении A, а также на численных примерах, приведенных в основном тексте, этот "анзатц" обеспечивает очень неплохое (количественно) приближение к точному решению в области конечных корреляционных длин флуктуаций ближнего порядка ξ , а в пределах $\xi \to \infty$ и $\xi \to 0$ решение является просто точным.

Проведенные расчеты спектральных плотностей показывают, что в рамках обоих сценариев можно получить привлекательную (с точки зрения сравнения с экспериментом на ВТСП-купратах) картину "разрушения" ферми-жидкостного состояния на отдельных ("горячих") участках поверхности Ферми, при ее сохранении на остальной ("холодной") ее части. Такое нефермижидкостное поведение целиком обусловлено сильным рассеянием электронов на флуктуациях ближнего порядка и, в общем случае, тем заметнее, чем больше корреляционная длина ξ . В тоже время, между двумя сценариями образования псевдощелевого состояния имеются определенные различия, которые можно попытаться использовать при анализе ситуации в реальных системах. В частности, в модели "горячих точек" (АFM-флуктуаций) псевдощель в плотности электронных состояний является довольно слабо выраженной (см. Рис.22). В модели SC-флуктуаций эффект образования псевдощели в плотности состояний гораздо более заметен (см. Рис.26). Заметно различается в этих моделях и эффективные картины разрушения поверхности Ферми (ср. Рис. 33 и 31) В тоже время, модель "диэлектрических" АГМ-флуктуаций кажется более привлекательной даже из простого рассмотрения фазовой диаграммы Рис.1 — псевдощелевые аномалии наблюдаются в области недодопированных составов и, по-видимому, тем сильнее, чем ближе система к диэлектрическому (AFM) состоянию. Именно в этой области следует ожидать более существенную роль флуктуаций ближнего порядка "диэлектрического" (AFM) типа, роста соответствующей корреляционной длины ξ и т.д. Довольно

трудно понять, почему в этой области фазовой диаграммы может стать более существенным флуктуационное образование куперовских пар (SC-флуктуации), что, казалось-бы, должно проявляться наоборот в области составов, близких к оптимальному (соответствующему максимальной температуре сверхпроводящего перехода). Кроме того, в этом сценарии существует очевидная проблема объяснения характерных масштабов аномалий (по температуре и энергии), которую невозможно решить в рамках простых подходов, основанных на теории БКШ, что требует новых микроскопических подходов[94, 96]. Рассмотренные нами модели полезны при анализе в рамках обоих сценариев образования псевдощели, поскольку они основаны, по сути дела, лишь на достаточно общей (полуфеноменологической) форме коррелятора флуктуаций ближнего порядка.

В этой главе также анализируется достаточно необычное (нефермижидкостное) поведение в одно и двумерных моделях флуктуирующей щели (FGM), служащих для описания псевдощели. Детально изучается квазичастичная перенормировка (Z – фактор) одночастичной функции Грина, демонстрирующая разновидность поведения, характерного для "маргинальной" ферми жидкости или латтинджеровской жидкости (т.е. отсутствие хорошо определенных квазичастиц вблизи поверхности Ферми), а также топологическую устойчивость "невозмущенной" поверхности Ферми (теорема Латтинджера). Это отражается в эффектах сильной перенормировки, ведущей к замене обычной полюсной сингулярности функции Грина в Ферми жидкости *нулем*, т.е. эффективной заменой фермиевской поверхности полюсов *латтинджсеровской поверхностью* нулей [110]. В присутствии статического примесно–подобного рассеяния вследствие эффектов конечности корреляционной длины псевдощелевых флуктуаций эта сингулярность заменяется конечным скачком.

Также в главе обсуждается эффективная картина "разрушения" поверхности Ферми, как в модели "горячих точек" для диэлектрических (AFM, CDW) псевдощелевых флуктуаций, так и в качественно отличном случае сверхпроводящих *d* - волновых флуктуаций. Такая картина отражает нефермижидкостное поведение спектральной плотности и похожа на наблюдаемую в ARPES экспериментах в купратах. Диаграмма интенсивности спектральной плотности, получаемая в случае AFM (CDW) флуктуаций является, по нашему мнению, более соответствующей экспериментальным данным по ARPES интенсивности в медных оксидах. Отметим, что аналогичная эффективная картина "разрушения" поверхности Ферми была получена также прямым обобщением для случая сильно коррелированных металлов или допированных моттовских диэлектриков [66], используя так называемый DMFT+ Σ_k подход [65, 67, 68] (см. также главу 5).

4 СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В ПСЕВДОЩЕЛЕВОМ СОСТОЯНИИ.

4.1 Сверхпроводимость в модели "горячих участков".

Большинство теоретических работ посвящено исследованию псевдощелевого состояния в нормальной фазе при $T > T_c$. В работе [56] была предложена очень простая точно решаемая модель псевдощелевого состояния, основанная на представлении о существовании "горячих" (плоских) участков на поверхности Ферми, в рамках которой было построено разложение Гинзбурга–Ландау для различных типов куперовского спаривания и проведено исследование качественных эффектов влияния псевдощели (обусловленной флуктуациями ближнего порядка AFM-типа) на основные свойства сверхпроводников вблизи T_c . Модель псевдощели с "горячими участками" на поверхности Ферми рассматривалась в предыдущей главе. Этот раздел посвящена дальнейшему развитию этой упрощенной модели в направлении анализа особенностей сверхпроводящего состояния во всей области температур $T < T_c$ [57, 112, 58].

Будем считать, что сверхпроводящее спаривание обусловлено потенциалом притяжения, который имеет следующий простейший вид [56]:

$$V(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = V(\phi, \phi') = -Ve(\phi)e(\phi'), \qquad (142)$$

где ϕ - полярный угол, определяющий направление электронного импульса **р** в плоскости, а для $e(\phi)$ принимаем простейшую модельную зависимость:

$$e(\phi) = \begin{cases} 1 & (s-\text{спаривание}) \\ \sqrt{2}\cos(2\phi) & (d-\text{спариваниe}) \end{cases}.$$
(143)

Константа притяжения V, как обычно, считается отличной от нуля в некотором слое шириной $2\omega_c$ в окрестности уровня Ферми (ω_c - характерная частота квантов, обеспечивающая притяжение электронов). В этом случае сверхпроводящая щель имеет вид:

$$\Delta(\mathbf{p}) \equiv \Delta(\phi) = \Delta e(\phi). \tag{144}$$

В дальнейшем, чтобы не загромождать формулы, под щелью Δ будем понимать именно $\Delta(\phi)$, явно выписывая угловую зависимость только там, где это необходимо.

4.1.1 Предел бесконечной корреляционной длины.

Достаточно подробно рассмотрим предел бесконечной корреляционной длины, в котором задача о сверхпроводимости в псевдощелевом состоянии может быть решена точно [57, 112]. Мы покажем, что AFM флуктуации могут приводить к сильным флуктуациям сверхпроводящего параметра порядка (энергетической щели Δ), нарушающим стандартное предположение о самоусредняемости щели [105, 113, 12], которое позволяет независимо усреднять (по конфигурациям случайного поля статических флуктуаций ближнего порядка) параметр порядка Δ и различные комбинации электронных функций Грина. Это приводит к тому, что усредненная по AFM флуктуациям сверхпроводящая щель отлична от нуля и в области температур выше среднеполевой температуры T_c сверхпроводящего перехода во всем образце. В области температур $T > T_c$ сверхпроводимость существует, по-видимому, в отдельных областях ("каплях").

Сначала рассмотрим вопрос о сверхпроводимости в системе, в которой имеется фиксированная диэлектрическая щель *D* на "горячих" участках поверхности Ферми. Задача о сверхпроводимости в системе с частичной диэлектризацией спектра на отдельных участках поверхности Ферми рассматривалась в целом ряде работ (см. например [114, 115]), а в наиболее близкой к нашему случаю модели в работе Билбро и МакМиллана [116], рядом результатов которой мы можем непосредственно воспользоваться или провести их простое обобщение.

В частности, для случая *s*-спаривания, уравнение для сверхпроводящей щели Δ в рассматриваемой модели принимает вид:

$$1 = \lambda \int_{0}^{\omega_{c}} d\xi \left\{ \tilde{\alpha} \frac{th \frac{\sqrt{\xi^{2} + D^{2} + \Delta^{2}(D)}}{2T}}{\sqrt{\xi^{2} + D^{2} + \Delta^{2}(D)}} + (1 - \tilde{\alpha}) \frac{th \frac{\sqrt{\xi^{2} + \Delta^{2}(D)}}{2T}}{\sqrt{\xi^{2} + \Delta^{2}(D)}} \right\}$$
(145)

где $\lambda = V N_0(0)$ – безразмерная константа спаривательного взаимодействия ($N_0(0)$ – плотность состояний свободных электронов на уровне Ферми), а параметр $\tilde{\alpha} = 4\alpha/\pi$ определяет долю "горячих" (плоских) участков на поверхности Ферми.

В уравнении (145) первое слагаемое в правой части соответствует вкладу "горя-

чих" (диэлектризованных) участков, на которых спектр электронов имеет вид [116]: $E_p = \sqrt{\xi_p^2 + D^2 + \Delta^2}$, а второе слагаемое дает вклад "холодных" (металлических) участков, где спектр имеет обычный вид теории БКШ: $E_p = \sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}$. Уравнение (145) определяет сверхпроводящую щель $\Delta(D)$ при фиксированном значении диэлектрической щели D, отличной от нуля на "горячих" участках.

В случае *d*-спаривания, аналогичное уравнение имеет вид:

$$1 = \lambda \frac{4}{\pi} \int_{0}^{\omega_{c}} d\xi \left\{ \int_{0}^{\alpha} d\phi e^{2}(\phi) \frac{th \frac{\sqrt{\xi^{2} + D^{2} + \Delta^{2}(D)e^{2}(\phi)}}{2T}}{\sqrt{\xi^{2} + D^{2} + \Delta^{2}(D)e^{2}(\phi)}} + \int_{\alpha}^{\pi/4} d\phi e^{2}(\phi) \frac{th \frac{\sqrt{\xi^{2} + \Delta^{2}(D)e^{2}(\phi)}}{2T}}{\sqrt{\xi^{2} + \Delta^{2}(D)e^{2}(\phi)}} \right\}$$
(146)

Из этих уравнений видно, что $\Delta(D)$ уменьшается с ростом D, а $\Delta(0)$ совпадает с обычной щелью Δ_0 в отсутствие диэлектризации на плоских участках, которая появляется при температуре $T = T_{c0}$, определяемой уравнением:

$$1 = \lambda \int_0^{\omega_c} d\xi \frac{th \frac{\xi}{2T_{c0}}}{\xi} \tag{147}$$

как для *s*, так и для *d*-спаривания.

При $D \to \infty$ первые слагаемые в (145),(146) обращаются в нуль, так что соответствующие уравнения для $\Delta_{\infty} = \Delta(D \to \infty)$ принимают вид:

$$1 = \lambda \int_0^{\omega_c} d\xi (1 - \tilde{\alpha}) \frac{th \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta_{\infty}^2}}{2T}}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_{\infty}^2}} \quad (s - \text{спариваниe})$$
(148)

$$1 = \lambda \frac{4}{\pi} \int_0^{\omega_c} d\xi \int_{\alpha}^{\pi/4} d\phi e^2(\phi) \frac{th \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta_{\infty}^2 e^2(\phi)}}{2T}}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_{\infty}^2 e^2(\phi)}} \quad (d-\text{спариваниe})$$
(149)

Уравнение (148) совпадает с уравнением на щель при D = 0 с "переномированной" константой связи $\tilde{\lambda} = \lambda(1 - \tilde{\alpha})$, так что для случая *s*-спаривания:

$$\Delta_{\infty} = \Delta_0(\tilde{\lambda} = \lambda(1 - \tilde{\alpha})) \tag{150}$$

соответственно, отличная от нуля щель при $D \to \infty$ возникает при $T < T_{c\infty}$

$$T_{c\infty} = T_{c0}(\tilde{\lambda} = \lambda(1 - \tilde{\alpha})).$$
(151)

В случае *d*-спаривания из уравнения (149) получаем:

$$T_{c\infty} = T_{c0}(\tilde{\lambda} = \lambda(1 - \alpha_d)) \tag{152}$$

где

$$\alpha_d = \tilde{\alpha} + \frac{\sin \pi \tilde{\alpha}}{\pi} \tag{153}$$

представляет собой "эффективную" долю плоских участков в случае d-спаривания. Таким образом, при $T < T_{c\infty}$ щель отлична от нуля при любых значениях D и уменьшается от Δ_0 до Δ_∞ с ростом D. При $T_{c\infty} < T < T_{c0}$ щель отлична от нуля лишь при $D < D_{max}$. Соответствующие зависимости Δ от D несложно найти численным решением уравнений (145) и (146).

В нашей модели псевдощелевого состояния диэлектрическая щель D является не фиксированной, а случайной величиной, распределенной согласно (62). Полученные выше уравнения нужно усреднить по этим флуктуациям. При этом мы можем непосредственно вычислить точную усредненную по флуктуациям D сверхпроводящую щель $< \Delta >$:

$$<\Delta>=\int_0^\infty dD\mathcal{P}(D)\Delta(D) = \frac{2}{W^2}\int_0^\infty dDDe^{-\frac{D^2}{W^2}}\Delta(D)$$
(154)

При этом, описанные выше зависимости $\Delta(D)$ приводят к тому, что усредненная щель (154) оказывается отличной от нуля вплоть до $T = T_{c0}$, т.е. до температуры сверхпроводящего перехода в отсутствие псевдощелевых аномалий. В тоже время, температура сверхпроводящего перехода T_c в сверхпроводнике с псевдощелью, очевидно, меньше T_{c0} [56]. Такое парадоксальное поведение $<\Delta >$ означает, повидимому, появление в системе индуцированных флуктуациями D локальных областей с $\Delta \neq 0$ (сверхпроводящих "капель") во всей области температур $T_c < T < T_{c0}$, при установлении когерентного по всему образцу сверхпроводящего состояния только в области $T < T_c$. Разумеется, полное обоснование такой качественной картины может быть получено лишь при анализе более реалистической модели к конечной длиной ξ флуктуаций AFM ближнего порядка³².В тоже время, простота рассмотренной здесь модели с $\xi \to \infty$ позволяет сразу же получить точное решение для $<\Delta >$.

³²Качественно, возникающая здесь ситуация, напоминает возникновение неоднородного сверхпроводящего состояния, индуцированного сильными флуктуациями локальной плотности состояний, вблизи андерсоновского перехода металл-диэлектрик [117, 12].

Для определения температуры T_c сверхпроводящего перехода в образце в целом, мы воспользуемся стандартной процедурой приближения среднего поля (ср. например аналогичный подход в задаче о сверхпроводнике с примесями [12]), предполагающей самоусредняемость сверхпроводящей щели по флуктуациями D (т.е. фактически независимость Δ от флуктуаций D). Тогда уравнения для среднеполевой щели Δ_{mf} имеют вид:

$$1 = \lambda \int_{0}^{\omega_{c}} d\xi \left\{ \tilde{\alpha} \frac{2}{W^{2}} \int_{0}^{\infty} dDDe^{-\frac{D^{2}}{W^{2}}} \frac{th \frac{\sqrt{\xi^{2} + D^{2} + \Delta_{mf}^{2}}}{2T}}{\sqrt{\xi^{2} + D^{2} + \Delta_{mf}^{2}}} + (1 - \tilde{\alpha}) \frac{th \frac{\sqrt{\xi^{2} + \Delta_{mf}^{2}}}{2T}}{\sqrt{\xi^{2} + \Delta_{mf}^{2}}} \right\}$$
(155)

для случая *s*-спаривания, и

$$1 = \lambda \frac{4}{\pi} \int_{0}^{\omega_{c}} d\xi \left\{ \frac{2}{W^{2}} \int_{0}^{\infty} dDDe^{-\frac{D^{2}}{W^{2}}} \int_{0}^{\alpha} d\phi e^{2}(\phi) \frac{th \frac{\sqrt{\xi^{2} + D^{2} + \Delta_{mf}^{2} e^{2}(\phi)}}{2T}}{\sqrt{\xi^{2} + D^{2} + \Delta_{mf}^{2} e^{2}(\phi)}} + \int_{\alpha}^{\pi/4} d\phi e^{2}(\phi) \frac{th \frac{\sqrt{\xi^{2} + \Delta_{mf}^{2} e^{2}(\phi)}}{2T}}{\sqrt{\xi^{2} + \Delta_{mf}^{2} e^{2}(\phi)}} \right\}$$
(156)

для случая *d*-спаривания.

Из уравнений (155),(156) легко получить и соответствующие уравнения для T_c . Например, для случая *s*-спаривания имеем:

$$1 = \lambda \left\{ \tilde{\alpha} \frac{2}{W^2} \int_0^\infty dD D e^{-\frac{D^2}{W^2}} \int_0^{\omega_c} d\xi \frac{th \frac{\sqrt{\xi^2 + D^2}}{2T_c}}{\sqrt{\xi^2 + D^2}} + (1 - \tilde{\alpha}) \int_0^{\omega_c} d\xi \frac{th \frac{\xi}{2T_c}}{\xi} \right\}$$
(157)

В случае *d*-спаривания в (157) нужно заменить *α̃* на "эффективное" *α_d* из (153). Эти уравнения для *T_c* совпадают с полученными при микроскопическом выводе разложения Гинзбурга–Ландау в рассматриваемой модели в работе [56], где они были подробно исследованы. В общем случае, всегда имеем *T_{c∞}* < *T_c* < *T_c*0.

Температурные зависимости усредненной щели $< \Delta >$ и среднеполевой щели Δ_{mf} , полученные численным решением уравнений нашей модели для случая *s*-спаривания, приведены на Рис.34³³. Щель Δ_{mf} обращается в нуль при $T = T_c < T_{c0}$, а $< \Delta >$ отлична от нуля вплоть до $T = T_{c0}$, соответствующие "хвосты" в температурной зависимости $< \Delta >$ в области $T_c < T < T_{c0}$, по нашему мнению соответствуют упомянутой

³³В случае d-спаривания температурные зависимости $< \Delta >$ и Δ_{mf} качественно аналогичны случаю *s*-спаривания.



Рис. 34: Температурные зависимости сверхпроводящих щелей Δ_{mf} (кривые точками), $< \Delta >$ (сплошные кривые) и Δ_0 (пунктир) в случае *s*-спаривания. 1.— $\lambda = 0, 4; \ \tilde{\alpha} = 2/3; \omega_c/W = 3 \ (T_c/T_{c0} = 0, 42). 2.— <math>\lambda = 0, 4; \ \tilde{\alpha} = 0, 2; \ \omega_c/W = 1 \ (T_c/T_{c0} = 0, 71).$

выше картине существования сверхпроводящих "капель" в этой области, при отсутствии сверхпроводимости во всем образце. Заметим, что представленные на Рис.34 температурные зависимости $< \Delta(T) >$ напоминают соответствующие зависимости щели в недодопированных ВТСП-купратах, извлекаемые из ARPES-экспериментов [99, 118] и из измерений теплоемкости [27], если считать, что наблюдаемая T_c в этих образцах соответствует нашей среднеполевой T_c , тогда как "капли" с $< \Delta > \neq 0$ существуют и в области $T > T_c$, вплоть до T_{c0} , которая существенно превышает T_c . Такая интерпретация соответствующих данных означала-бы, что "в отсутствие" псевдощели недодопированные купраты имели-бы существенно более высокую температуру сверхпроводящего перехода.

Несмотря на то, что сверхпроводимость во всем образце при $T_c < T < T_{c0}$, по нашему мнению, отсутствует, наличие в этой области отличной от нуля усредненной $<\Delta >$ приводит, как мы увидим ниже, к появлению ряда аномалий в наблюдаемых величинах, таких, например, как туннельная плотность состояний и измеряемая в ARPES спектральная плотность.

Спектральная плотность и плотность состояний.
Запаздывающая функция Грина электрона в окрестности "горячего" участка поверхности Ферми в сверхпроводящем состоянии имеет вид:

$$G^{R}(E,\xi_{p}) = \int_{0}^{\infty} dD\mathcal{P}(D) \frac{E+\xi_{p}}{(E+i0)^{2}-\xi_{p}^{2}-D^{2}-\Delta^{2}(D)e^{2}(\phi)}$$
(158)

Соответствующая спектральная плотность:

$$A(E,\xi_p) = -\frac{1}{\pi} Im G^R(E,\xi_p) = \frac{2}{W^2} \int_0^\infty dD D e^{-\frac{D^2}{W^2}} (E+\xi_p) \delta(\xi_p^2 + D^2 + \Delta^2(D) e^2(\phi) - E^2)$$
(159)

При использовании среднеполевой процедуры, предполагающей $\Delta = \Delta_{mf}$, независящей от величины D, получаем:

$$A_{mf}(E,\xi_p) = \frac{|E| + \xi_p SignE}{W^2} \exp\left(\frac{\xi_p^2 + \Delta_{mf}^2 e^2(\phi) - E^2}{W^2}\right) \theta(E^2 - \xi_p^2 - \Delta_{mf}^2 e^2(\phi)) \quad (160)$$

В этом приближении в спектральной плотности появляется щель при $|E| < \Delta_{mf}$, исчезающая при $T \to T_c(\Delta_{mf} \to 0)$. Фактически, мы видели выше, что щель Δ существенно зависит от величины диэлектрической щели D (см. (145),(146)), поэтому, на самом деле, из (159) имеем:

$$A(E,\xi_p) = \sum_{i} \frac{|E| + \xi_p SignE}{W^2} e^{-\frac{D_i^2}{W^2}} \frac{1}{\left|1 + \frac{d\Delta^2(D)}{dD^2}\right|_{D=D_i} e^2(\phi)\right|}$$
(161)

где D_i – положительные корни уравнения $D^2 + \xi_p^2 + \Delta^2(D)e^2(\phi) - E^2 = 0$. Энергетическая зависимость спектральной плотности при $\xi_p = 0$, т.е. для импульса электрона на поверхности Ферми (ниже мы ограничимся только этим случаем) приведена на Рис.35 и Рис.36 для *s* и *d*-спаривания соответственно.

При $T_{c\infty} < T < T_{c0}$ в спектральной плотности наблюдается скачок при $E = D_{max}$, связанный со скачком производной $d\Delta^2(D)/dD^2$ при $D = D_{max}$ (т.е. при максимальной D, при которой $\Delta(D)$ отлична от нуля). Эффекты конечности корреляционной длины флуктуаций ξ неизбежно сгладят этот скачок, однако характерный провал после главного пика спектральной плотности, сохранится. Подобный провал ("dip") наблюдался в ARPES-экспериментах [24, 99], интерпретация его до сих пор неясна.

В случае *s*-спаривания величина $D^2 + \Delta^2(D)$ растет с ростом *D*, поэтому уравнение $D^2 + \Delta^2(D) - E^2 = 0$ имеет корни лишь при $|E| > \Delta_0$. Таким образом, щель



Рис. 35: Спектральная плотность на поверхности Ферми в случае *s*-спаривания для разных значений T/T_{c0} : 1.-0,8; 2.-0,4; 3.-0,1. (a) $-\lambda = 0,4$; $\tilde{\alpha} = 0,2$; $\omega_c/W = 1$ ($T_c/T_{c0} = 0,71$, $T_{c\infty}/T_{c0} = 0,54$). Точками: Среднеполевая спектральная плотность $A_{mf}(E)$ при $T/T_{c0} = 0,4$. (б) $-\lambda = 0,4$; $\tilde{\alpha} = 2/3$; $\omega_c/W = 3$ ($T_c/T_{c0} = 0,42$, $T_{c\infty}/T_{c0} = 7 \cdot 10^{-3}$). Точками: Среднеполевая спектральная плотность $A_{mf}(E)$ при $T/T_{c0} = 0,42$. Среднеполевая спектральная плотность $A_{mf}(E)$ при $T/T_{c0} = 0,42$.



Рис. 36: Спектральная плотность на поверхности Ферми в направлении $\phi = 0$ в случае *d*-спаривания. (a) $-\lambda = 0, 4$; $\tilde{\alpha} = 0, 2$; $\omega_c/W = 1$ ($T_c/T_{c0} = 0, 42, T_{c\infty}/T_{c0} = 0, 2$), $T/T_{c0} = 1$ 1.-0,8; 2.-0,6; 3.-0,1. (б) $-\lambda = 0, 4$; $\tilde{\alpha} = 2/3$; $\omega_c/W = 5$ ($T_c/T_{c0} = 0, 48, T_{c\infty}/T_{c0} \sim 10^{-18}$), $T/T_{c0} = 1.-0,8$; 2.-0,3; 3.-0,1. Точками: Среднеполевая спектральная плотность $A_{mf}(E)$ при $T/T_{c0} = 0, 1$.

в спектральной плотности наблюдается при $|E| < \Delta_0$, так что ширина этой щели определяется Δ_0 , а не Δ_{mf} . Кроме того, щель в спектральной плотности появляется при $T = T_{c0}$, а поведение спектральной плотности в точке $T = T_c$ не испытывает качественных изменений.

В случае *d*-спаривания, при достаточно малой ширине псевдощели *W* и малой доле плоских участков α_d , величина $D^2 + \Delta^2(D)e^2(\phi)$ также растет с ростом *D* и ширина щели в спектральной плотности оказывается равной $\Delta_0 e(\phi)$, аналогично случаю *s*-спаривания. Однако с ростом ширины псевдощели *W* и доли плоских участков, величина $D^2 + \Delta^2(D)e^2(\phi)$ падает с ростом *D* при достаточно малых *D*, что приводит к тому, что ширина щели в спектральной плотности становится меньше Δ_0 , а при $E = \Delta_0$ в спектральной плотности возникает скачок (скачок при $E = D_{max}$ также сохраняется).

Перейдем к рассмотрению туннельной плотности состояний N(E). В случае *s*спаривания имеем:

$$\frac{N(E)}{N_0(0)} = \frac{2}{W^2} \int_0^\infty dD D e^{-\frac{D^2}{W^2}} \left\{ \tilde{\alpha} \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - D^2 - \Delta^2(D)}} \theta(E^2 - D^2 - \Delta^2(D)) + (1 - \tilde{\alpha}) \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - \Delta^2(D)}} \theta(E^2 - \Delta^2(D)) \right\}$$
(162)

В предположении самоусредняемости $\Delta = \Delta_{mf}$ и не зависит от флуктуаций D, тогда:

$$\frac{N_{mf}(E)}{N_0(0)} = \left\{ \tilde{\alpha} \frac{2}{W^2} \int_0^{\sqrt{E^2 - \Delta_{mf}^2}} dD D e^{-\frac{D^2}{W^2}} \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - D^2 - \Delta_{mf}^2}} + (1 - \tilde{\alpha}) \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - \Delta_{mf}^2}} \right\} \theta(E^2 - \Delta_{mf}^2).$$
(163)

В этом приближении при $|E| < \Delta_{mf}$ в плотности состояний имеется щель, исчезающая при $T \to T_c(\Delta_{mf} \to 0)$, однако при этом остается особенность в виде псевдощели, вызванной AFM-флуктуациями:

$$\frac{N(E)}{N_0(0)} = \tilde{\alpha} \frac{2}{W^2} \int_0^E dD D e^{-\frac{D^2}{W^2}} \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - D^2}} + (1 - \tilde{\alpha})$$
(164)

обсуждавшаяся в [56]. На самом деле, $\Delta(D)$ в (162) существенно зависит от D, согласно (145). Из (162) и соответствующей зависимости $\Delta(D)$ видно, что при $T < T_{c\infty}$ в плотности состояний наблюдается щель при $E < \Delta_{\infty}$, а при $T > T_{c\infty}$ щель в плотности состояний отсутствует, но остается вклад в псевдощель, связанный со сверхпроводящим спариванием. При $T_c < T < T_{c0}$ щелевая функция $\Delta(D)$ отлична от нуля при $D < D_{max}$, поэтому отличия от псевдощелевого поведения, вызываемого только AFM-флуктуациями, в плотности состояний наблюдаются и при $T_c < T < T_{c0}$, и только при $T > T_{c0}$ в плотности состояний остается AFM-псевдощель (164).

На Рис.37 показано поведение плотности состояний в *s*-случае для различных температур. Излом плотности состояний наблюдается при $|E| = \Delta_0$, кроме того при $T > T_{c\infty}$ имеется второй излом при $|E| = D_{max} > \Delta_0$, однако этот излом заметен лишь при высоких температурах $T \sim T_{c0}$. Плотность состояний испытывает качественные изменения лишь при $T = T_{c0}$, среднеполевая T_c ничем не выделена.

Для *d*-спаривания выражение для плотности состояний имеет вид:

$$\frac{N(E)}{N_0(0)} = \frac{4}{\pi} \frac{2}{W^2} \int_0^\infty dD D e^{-\frac{D^2}{W^2}} \left\{ \int_0^\alpha d\phi \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - D^2 - \Delta^2(D)e^2(\phi)}} \theta(E^2 - \Delta^2(D)e^2(\phi) - D^2) + \int_\alpha^{\pi/4} d\phi \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - \Delta^2(D)e^2(\phi)}} \theta(E^2 - \Delta^2(D)e^2(\phi)) \right\}$$
(165)

В предположении самоусредняемости $\Delta = \Delta_{mf}$ и не зависит от D. Тогда ширина сверхпроводящей псевдощели в плотности состояний порядка Δ_{mf} , соответствующий вклад исчезает при $T \to T_c$, остается лишь псевдощель, связанная с AFMфлуктуациями (164). В действительности, в (165) $\Delta = \Delta(D)$, которая определяется уравнением (146).

Поведение плотности состояний в d-случае показано на Рис.38. Также, как и в случае *s*-спаривания, наблюдается существенное отличие точной плотности состояний от полученной в приближении среднего поля, что связано с флуктуациями сверхпроводящей щели (сверхпроводящими "каплями"), вызываемыми флуктуациями AFM ближнего порядка. Точная плотность состояний, фактически, не чувствует сверхпроводящий переход во всей системе, происходящий при $T = T_c$. При этом характерная ширина сверхпроводящей щели (псевдощели) в плотности состояний порядка Δ_0 , а не Δ_{mf} , как это вытекает из приближения среднего поля. Соответ-



Рис. 37: Плотность состояний в случае *s*-спаривания. (a) $-\lambda = 0, 4; \tilde{\alpha} = 0, 2; \omega_c/W = 1$ $(T_c/T_{c0} = 0, 71, T_{c\infty}/T_{c0} = 0, 54), T/T_{c0} =: 1.-0,8; 2.-0,71; 3.-0,54; 4.-0,1.$ Точками: Среднеполевая плотность состояний $N_{mf}(E)$ при $T/T_{c0} = 0, 4$ На вставке: Плотность состояний при $T/T_{c0} = 0, 4.$ (б) $-\lambda = 0, 4; \tilde{\alpha} = 2/3; \omega_c/W = 3 (T_c/T_{c0} = 0, 42, T_{c\infty}/T_{c0} = 7 \cdot 10^{-3}), T/T_{c0} =: 1.-0,8; 2.-0,42; 3.-0,2; 4.-0,05.$ Точками: Среднеполевая плотность состояний $N_{mf}(E)$ при $T/T_{c0} = 0, 1.$ Пунктир: Псевдощелевое поведение плотности состояний при $T > T_{c0}$.



Рис. 38: Плотность состояний в случае *d*-спаривания. (a) — $\lambda = 0, 4$; $\tilde{\alpha} = 0, 2$; $\omega_c/W = 1$ $(T_c/T_{c0} = 0, 42, T_{c\infty}/T_{c0} = 0, 2), T/T_{c0} =: 1.-0.8$; 2.-0.42; 3.-0.2. Точками: Среднеполевая плотность состояний $N_{mf}(E)$ при $T/T_{c0} = 0, 2$ На вставке: Плотность состояний при $T/T_{c0} = 0, 2$. (б) — $\lambda = 0, 4$; $\tilde{\alpha} = 2/3$; $\omega_c/W = 5$ $(T_c/T_{c0} = 0, 48, T_{c\infty}/T_{c0} \sim 10^{-18}), T/T_{c0} =: 1.-0.8$; 2.-0.48; 3.-0.1. Точками: Среднеполевая плотность состояний $N_{mf}(E)$ при $T/T_{c0} = 0, 1$. Пунктир: Псевдощелевое поведение плотности состояний при $T > T_{c0}$.

ствующие вклады становятся наблюдаемыми уже при $T = T_{c0} > T_c$.

Заключение

Главным упрощающим предположением рассмотренной нами модели (наряду с условием статичности флуктуаций) является использование предела $\xi \to \infty$ для корреляционной длины флуктуаций ближнего порядка AFM-типа, благодаря чему удается получить основные уравнения в достаточно наглядном виде. В частности, в этом пределе легко находится точное выражение для усредненной сверхпроводящей щели (154). В то время как сама такая модель псевдощелевого состояния, в принципе, обобщается на случай конечных корреляционных длин [63, 64, 85], пока неясно, возможно-ли в рамках данного обобщения провести рассмотрение сверхпроводимости, выходящее за рамки среднеполевого подхода, так как это было сделано выше для случая $\xi \to \infty$. Качественно ясно, что конечность ξ приводит к некоторому "размытию" особенностей типа изломов и скачков, которые были получены в модели $\xi \to \infty$, также как и в некоторой, достаточно плавной, зависимости T_c и других характеристик сверхпроводящего состояния от величины ξ .

Полученные выше результаты показывают, что псевдощелевое состояние, вызванное флуктуациями ближнего порядка AFM-типа (или аналогичными флуктуациями волн зарядовой плотности), приводит, наряду с существенными особенностями нормального состояния [63, 64, 85], также и к довольно необычным свойствам сверхпроводящего состояния, связанным с частичной диэлектризацией электронного спектра (нефермижидкостным поведением) на "горячих" участках поверхности Ферми. Эти особенности коррелируют с рядом аномалий, наблюдавшихся в сверхпроводящем состоянии недодопированных ВТСП-купратов. Естественно, что более серьезное сравнение с экспериментом может быть проведено только при более реалистическом подходе, учитывающем, прежде всего, эффекты конечности корреляционной длины ξ , которая в реальных системах относительно невелика. При низких температурах становится существенным и учет динамики флуктуаций.

4.1.2 Конечная корреляционная длина.

В работах [56, 57] и предыдушем разделе анализировались особенности сверхпроводящего состояния в точно решаемой модели псевдощелевого состояния, вызванного АГМ флуктуациями ближнего порядка с бесконечной корреляционной длиной $(\xi \to \infty)$. В частности, было показано, что AFM флуктуации могут приводить к сильным флуктуациям сверхпроводящего параметра порядка (энергетической щели Δ), нарушающим стандартное предположение о самоусредняемости щели [105, 113, 12], которое позволяет независимо усреднять (по конфигурациям случайного поля статических флуктуаций ближнего порядка) параметр порядка Δ и различные комбинации электронных функций Грина, входящие в основные уравнения теории. Обычная аргументация в пользу возможности такого независимого усреднения состоит в следующем [105, 12]: величина Δ изменяется на характерных масштабах длины порядка длины когерентности $\xi_0 \sim v_F/\Delta_0$ теории БКШ, тогда как функции Грина быстро меняются на значительно меньших масштабах порядка межатомных расстояний. Естественно, что последнее предположение становится неверным, если в электронной подсистеме появляется новая характерная длина $\xi \to \infty$. Вместе с тем, в условиях, когда AFM корреляционная длина $\xi \ll \xi_0$ (т.е. когда AFM флуктуации коррелируют на расстояниях меньше характерного размера куперовских пар), предположение о самоусредняемости Δ должно сохраняться, нарушаясь только в области $\xi > \xi_0$. Поэтому ниже все рассмотрение проводится в предположении самоусредняемости энергетической щели сверхпроводника по AFM флуктуациям, что позволяет использовать стандартный подход теории неупорядоченных сверхпроводников (среднеполевое приближение в терминологии работы [57]). При этом мы оставляем в стороне очень интересный вопрос о сверхпроводимости в отсутствие самоусредняемости параметра порядка. Заметим, что в реальных ВТСП – купратах, по видимому, всегда $\xi \sim \xi_0$, так что они попадают в область параметров наиболее сложную для теории.

Уравнения Горькова в сверхпроводнике с псевдощелью.

В сверхпроводящем состоянии теория возмущений по взаимодействию с AFM

флуктуациями (58) должна строиться на "свободных" нормальных и аномальных функциях Грина сверхпроводника:

$$G_{00}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = -\frac{i\varepsilon_n + \xi_{\mathbf{p}}}{\varepsilon_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + |\Delta|^2}; \quad F_{00}^+(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{\Delta^*}{\varepsilon_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + |\Delta|^2}$$
(166)

В рассматриваемой модели с плоскими участками на поверхности Ферми, электронный спектр на участках, ортогональных оси p_x , имеет вид: $\xi_{\mathbf{p}} = v_F(|p_x| - p_F)$, поскольку скорость электрона **v** перпендикулярна оси p_y (симметричная ситуация имеет место и на участках, ортогональных p_y). Поэтому, в случае *s*-спаривания, когда Δ не зависит от направления импульса, в модели с взаимодействием вида (58), (31) происходит полная одномеризация задачи. В случае *d*-спаривания ситуация сложнее, так как даже на плоских участках, ортогональных p_x , величина $\Delta(\phi)$ зависит от p_y (и симметрично на участках ортогональных p_y). Поэтому, при рассмотрении *d*-спаривания удобно вместо (58) выбрать коррелятор флуктуаций в виде:

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{\xi^{-1}}{(q_x \mp 2p_F)^2 + \xi^{-2}} \delta(q_y) + \frac{\xi^{-1}}{(q_y \mp 2p_F)^2 + \xi^{-2}} \delta(q_x) \right\}$$
(167)

В этом случае взаимодействие не меняет p_y , p_x на плоских участках ортогональных соответственно p_x и p_y , и задача опять полностью одномеризуется.

Теперь мы можем сформулировать аналог приближения (39) и в сверхпроводящем состоянии. Подробности обоснования формулируемых ниже соотношений приведены в Приложении С. Вклад произвольной диаграммы N-го порядка по взаимодействию (31) в полную нормальную или аномальную функцию Грина имеет вид произведения N + 1 "свободных" нормальных G_{0k_j} и аномальных $F_{0k_j}^+$ функций Грина с определенным образом перенормированными частотами и щелями (см. ниже). Здесь k_j – число линий взаимодействия, охватывающих данную *j*-ю (от начала диаграммы) электронную линию. Как и в нормальной фазе, вклад любой диаграммы определяется набором целых чисел k_j , а каждая диаграмма с пересечением линий взаимодействия оказывается равной некоторой диаграмме того же порядка без пересечения этих линий. Поэтому мы снова можем рассматривать лишь диаграммы без пересечения линий взаимодействия, учитывая вклад остальных диаграмм теми же

$$\overset{W^{2}s(k+1)}{\underset{G_{k}}{\hookrightarrow}} = \overset{W^{2}s(k+1)}{\underset{G_{0k}}{\hookrightarrow}} + \overset{W^{2}s(k+1)}{\underset{G_{k+1}}{\hookrightarrow}} + \overset{W^{2}s(k+1)}{\underset{G_{0k}}{\hookrightarrow}} + \overset{W^{2}s(k+1)}{\underset{G_{k+1}}{\hookrightarrow}} + \overset{W^{2}s(k+1)}{\underset{F_{k+1}}{\hookrightarrow}} + \overset{W^{2}s(k+1)}{\underset{F_{k+1}}{\rightthreetimes}} +$$

Рис. 39: Диаграммное представление рекуррентных соотношений для уравнений Горькова. комбинаторными множителями s(k), приписываемыми линям взаимодействия, что и в нормальной фазе. В результате получаем диаграммный аналог уравнений Горькова [119], приведенный на Рис.39. Соответственно возникает два связанных рекуррентных уравнения для нормальных и аномальных функций Грина:

$$G_{k} = G_{0k} + G_{0k}\tilde{G}G_{k} - G_{0k}\tilde{F}F_{k}^{+} - F_{0k}\tilde{G}^{*}F_{k}^{+} - F_{0k}\tilde{F}^{+}G_{k}$$

$$F_{k}^{+} = F_{0k}^{+} + F_{0k}^{+}\tilde{G}G_{k} - F_{0k}^{+}\tilde{F}F_{k}^{+} + G_{0k}^{*}\tilde{G}^{*}F_{k}^{+} + G_{0k}^{*}\tilde{F}^{+}G_{k}$$
(168)

где

$$\tilde{G} = W^2 s(k+1) G_{k+1}; \quad \tilde{F}^+ = W^2 s(k+1) F_{k+1}^+$$
(169)

$$G_{0k}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = -\frac{i\varepsilon_n + (-1)^k \xi_{\mathbf{p}}}{\tilde{\varepsilon}_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + |\tilde{\Delta}|^2}; \quad F_{0k}^+(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{\Delta^*}{\tilde{\varepsilon}_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + |\tilde{\Delta}|^2}$$
(170)

и введены перенормированные частота $\tilde{\varepsilon}$ и щель $\tilde{\Delta}$:

$$\tilde{\varepsilon}_n = \eta_k \varepsilon_n; \quad \tilde{\Delta} = \eta_k \Delta; \quad \eta_k = 1 + \frac{k\kappa}{\sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta|^2}}$$
(171)

аналогичные тем, которые возникают при рассмотрении сверхпроводников с примесями [119].

Из (168)-(171) легко получить систему рекуррентных соотношений непосредственно для действительной и мнимой частей нормальной функции Грина и для аномальной функции Грина:

$$ImG_{k} = \frac{\tilde{\varepsilon} - Im\tilde{G}}{(\tilde{\varepsilon} - Im\tilde{G})^{2} + ((-1)^{k}\xi_{\mathbf{p}} + Re\tilde{G})^{2} + |\tilde{\Delta} + \tilde{F}|^{2}}$$

$$ReG_{k} = \frac{(-1)^{k}\xi_{\mathbf{p}} + Re\tilde{G}}{(\tilde{\varepsilon} - Im\tilde{G})^{2} + ((-1)^{k}\xi_{\mathbf{p}} + Re\tilde{G})^{2} + |\tilde{\Delta} + \tilde{F}|^{2}}$$

$$F_{k}^{+} = \frac{\tilde{\Delta}^{*} + \tilde{F}^{+}}{(\tilde{\varepsilon} - Im\tilde{G})^{2} + ((-1)^{k}\xi_{\mathbf{p}} + Re\tilde{G})^{2} + |\tilde{\Delta} + \tilde{F}|^{2}}$$
(172)

Введем обозначения:

$$ImG_k = -\varepsilon_n J_k; \quad ReG_k = -(-1)^k \xi_{\mathbf{p}} R_k; \quad F_k^+ = \Delta^* f_k \tag{173}$$

Тогда оказывается, что рекуррентные соотношения для J_k и f_k полностью совпадают, так что $J_k = f_k$. Окончательно получаем следующую систему рекуррентных уравнений для J_k и R_k :

$$J_{k} = \frac{\eta_{k} + W^{2}s(k+1)J_{k+1}}{(\varepsilon_{n}^{2} + \Delta^{2})(\eta_{k} + W^{2}s(k+1)J_{k+1})^{2} + \xi_{\mathbf{p}}^{2}(1 + W^{2}s(k+1)R_{k+1})^{2}}$$

$$R_{k} = \frac{1 + W^{2}s(k+1)R_{k+1}}{(\varepsilon_{n}^{2} + \Delta^{2})(\eta_{k} + W^{2}s(k+1)J_{k+1})^{2} + \xi_{\mathbf{p}}^{2}(1 + W^{2}s(k+1)R_{k+1})^{2}}$$
(174)

Интересующие нас нормальная и аномальная функции Грина сверхпроводника определяются через R_0 и J_0 :

$$ImG = -\varepsilon_n J_0; \quad ReG = -\xi_{\mathbf{p}} R_0; \quad F^+ = \Delta^* J_0 \tag{175}$$

и представляют собой полностью просуммированный ряд теории возмущений по взаимодействию электрона в сверхпроводнике с флуктуациями AFM ближнего порядка.

Критическая температура и температурная зависимость щели.

Энергетическая щель сверхпроводника определяется уравнением:

$$\Delta(\mathbf{p}) = -T \sum_{\mathbf{p}'} \sum_{\varepsilon_n} V_{sc}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') F(\varepsilon_n \mathbf{p}')$$
(176)

На плоских участках поверхности Ферми аномальная функция Грина определяется из (175) с помощью рекуррентной процедуры (174). На остальной ("холодной") части поверхности Ферми рассеяние на AFM флуктуациях в нашей модели отсутствует и аномальная функция Грина имеет вид как в (166). В результате, для случая *s*спаривания, с учетом (143), уравнение (176) принимает вид:

$$1 = \lambda \left\{ \tilde{\alpha}T \sum_{\varepsilon_n} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} d\xi J_0(\varepsilon_n \xi) + (1 - \tilde{\alpha}) \int_0^{\omega_c} d\xi \frac{th \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2T}}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \right\}$$
(177)

где $\lambda = V N_0(0)$ – безразмерная константа спаривательного взаимодействия ($N_0(0)$ – плотность состояний свободных электронов на уровне Ферми), $\tilde{\alpha} = 4\alpha/\pi$, где α –



Рис. 40: Температурная зависимость сверхпроводящей щели в случае *s*-спаривания для различных значений корреляционной длины (параметра $\kappa = v_F \xi^{-1}$) AFM флуктуаций, рассчитанная для $\lambda = 0.4$, $\frac{\omega_c}{W} = 3$: $\frac{\kappa}{W} = 0$ (1); 1.0 (2); 10.0 (3). Пунктир — $\Delta(T)$ в отсутствие псевдощели.

угловой размер плоского участка поверхности Ферми (см. Рис.23). При численных расчетах в дальнейшем мы достаточно произвольно принимаем $\tilde{\alpha} = 2/3$, т.е. $\alpha = \pi/6$, что близко, например к данным [76].

В случае *d*-спаривания необходимо учесть угловую зависимость щели (144) и уравнение (176) принимает вид:

$$1 = \lambda \frac{4}{\pi} \left\{ T \int_0^\alpha d\phi e^2(\phi) \sum_{\varepsilon_n} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} d\xi J_0(\varepsilon_n \xi) + \int_\alpha^{\pi/4} d\phi e^2(\phi) \int_0^{\omega_c} d\xi \frac{th \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2 e^2(\phi)}}{2T}}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2 e^2(\phi)}} \right\}$$
(178)

На Рис.40 приведены рассчитанные из (177) температурные зависимости щели для случая *s*-спаривания при различных значениях корреляционной длины (параметра $\kappa = v_F \xi^{-1}$) флуктуаций. Для случая *d*-спаривания соответствующие качественные зависимости совершенно аналогичны.

Уравнение для температуры сверхпроводящего перехода T_c немедленно следует из (177), (178) при $\Delta \to 0$. В этом случае $J_0(\Delta \to 0)$ не зависит от ϕ и одинаково для



Рис. 41: Зависимость температуры сверхпроводящего перехода от ширины псевдощели W и корреляционной длины AFM флуктуаций (параметра $\kappa = v_F \xi^{-1}$): $\frac{\kappa}{W} = 0.1$ (1); 1.0 (2); 10.0 (3). Пунктир — $\kappa = 0$ [56]. На вставке: зависимость T_c от κ при $\frac{W}{T_{c0}} = 5$.

s и *d*-спаривания. Соответственно, уравнение для *T_c* имеет вид:

$$1 = \lambda \left\{ \alpha_{eff} T_c \sum_{\varepsilon_n} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} d\xi J_0(\varepsilon_n \xi; \Delta \to 0) + (1 - \alpha_{eff}) \int_0^{\omega_c} d\xi \frac{th \frac{\xi}{2T_c}}{\xi} \right\}$$
(179)

где "эффективная" доля плоских участков на поверхности Ферми определена как:

$$\alpha_{eff} = \begin{cases} \tilde{\alpha} & (s-\text{спаривание}) \\ \tilde{\alpha} + \frac{1}{\pi}\sin(\pi\tilde{\alpha}) & (d-\text{спариваниe}) \end{cases}.$$
(180)

Рассчитанные зависимости T_c от ширины псевдощели W и корреляционной длины (параметра $\kappa = v_F \xi^{-1}$) приведены на Рис.41 (T_{c0} – температура перехода в отсутствие псевдощели).

Общий качественный вывод совпадает со сделанным в работах [56, 57]: псевдощель подавляет сверхпроводимость за счет частичной "диэлектризации" электронного спектра на "горячих" участках поверхности Ферми. Эффект подавления максимален при $\kappa = 0$ (бесконечная корреляционная длина AFM флуктуаций) [56, 57] и уменьшается с уменьшением корреляционной длины, что вполне соответствует экспериментальной фазовой диаграмме ВТСП – систем. Подчеркнем еще раз, что все приведенные результаты справедливы в предположении самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка (щели) по AFM флуктуациям (среднеполевое приближение [57]), что верно при не слишком больших значениях корреляционной длины $\xi < \xi_0$, где ξ_0 – длина когерентности сверхпроводника (размер куперовских пар при T = 0). При $\xi \gg \xi_0$ возникают существенные эффекты несамоусредняемости, проявляющиеся в возникновении характерных "хвостов" температурной зависимости усредненной щели в области $T_c < T < T_{co}$ [57].

Куперовская неустойчивость. Рекуррентная процедура для вершинной части.

Хорошо известно, что критическая температура может быть определена и другим способом, а именно из уравнения для куперовской неустойчивости нормальной фазы:

$$1 - V\chi(0,0) = 0 \tag{181}$$

где обобщенная куперовская восприимчивость определяется графиком Рис.42. При этом возникает задача вычисления "треугольной" вершинной части, учитывающей взаимодействие с AFM флуктуациями. Для одномерного аналога нашей задачи (и для действительных частот, T = 0) соответствующая рекуррентная процедура была сформулирована в работах [51]. Для рассматриваемой здесь двумерной модели на этой основе были проведены расчеты оптической проводимости [85]. Данная процедура достаточно легко обобщается на случай мацубаровских частот. Ниже, для определенности, считаем $\varepsilon_n > 0$. Тогда имеем:

$$\Gamma_{k-1}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) = 1 + W^2 s(k) G_k \bar{G}_k \left\{ 1 + \frac{2ik\kappa}{2i\varepsilon_n - (-1)^k v_F q - W^2 s(k+1)(G_{k+1} - \bar{G}_{k+1})} \right\} \Gamma_k(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) \\ \Gamma(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) \equiv \Gamma_0(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) (182)$$

где $G_k = G_k(\varepsilon_n \mathbf{p} + \mathbf{q})$ и $\bar{G}_k = G_k(-\varepsilon_n, \mathbf{p})$ вычисляются согласно (64).

Для нахождения T_c нас интересует вершина при $\mathbf{q} = 0$. Тогда $\bar{G}_k = G_k^*$ и вершины Γ_k становятся вещественными, что существенно упрощает процедуру (182).



Рис. 42: Диаграмма для обобщенной куперовской восприимчивости.

Используя обозначения аналогичные (173), из (64), (182) получаем:

$$\Gamma_{k-1} = 1 + W^2 s(k) \frac{J_k}{1 + W^2 s(k+1) J_{k+1}} \Gamma_k$$
(183)

а для R_k и J_k возникают рекуррентные соотношения, совпадающие с (174) при $\Delta = 0$.

Имеет место следующее точное соотношение (доказательство которого будет приведено ниже) типа тождества Уорда:

$$G(\varepsilon_{n}\mathbf{p})G(-\varepsilon_{n}\mathbf{p})\Gamma(\varepsilon_{n},-\varepsilon_{n},0) = (\xi_{\mathbf{p}}^{2}R_{0}^{2}(\varepsilon_{n}\xi_{\mathbf{p}}) + \varepsilon_{n}^{2}J_{0}^{2}(\varepsilon_{n}\xi_{\mathbf{p}}))\Gamma_{0}(\varepsilon_{n},-\varepsilon_{n},0) \equiv$$
$$\equiv J_{0}(\varepsilon_{n}\xi_{\mathbf{p}}) = -\frac{ImG(\varepsilon_{n}\mathbf{p})}{\varepsilon_{n}} \qquad (184)$$

Численное исследование полностью подтверждает это соотношение, демонстрируя полную согласованность рекуррентных процедур для одночастичной функции Грина и вершинной части ³⁴. Поскольку $J_0(\Delta \rightarrow 0)$ совпадает с J_0 в нормальной фазе, соотношение (184) приводит к тому, что уравнение для T_c , полученное из условия куперовской неустойчивости (181):

$$1 = \lambda \left\{ \alpha_{eff} T_c \sum_{\varepsilon_n} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} d\xi (\xi_{\mathbf{p}}^2 R_0^2(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) + \varepsilon_n^2 J_0^2(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}})) \Gamma_0(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, 0) + (1 - \alpha_{eff}) \int_0^{\omega_c} d\xi \frac{th \frac{\xi}{2T_c}}{\xi} \right\}$$
(185)

³⁴Заметим, что аналитическое доказательство этого соотношения путем непосредственного сравнения самих рекуррентных процедур для функции Грина и вершинной части совершенно не очевидно.

и уравнение (179), полученное линеаризацией уравнения для щели, просто совпадают, несмотря на казалось-бы совершенно различные рекуррентные процедуры для учета AFM флуктуаций, использованные при их выводе.

Разложение Гинзбурга – Ландау.

В работе [56] было построено разложение Гинзбурга – Ландау в точно решаемой модели псевдощели с бесконечной корреляционной длиной AFM флуктуаций. Здесь мы обобщим эти результаты на случай конечных корреляционных длин.

Разложение Гинзбурга-Ландау для разности плотностей свободных энергий сверхпроводящего и нормального состояний запишем в стандартном виде:

$$F_s - F_n = A|\Delta_{\mathbf{q}}|^2 + q^2 C|\Delta_{\mathbf{q}}|^2 + \frac{B}{2}|\Delta_{\mathbf{q}}|^4,$$
(186)

где $\Delta_{\mathbf{q}}$ - амплитуда фурье-компоненты параметра порядка:

$$\Delta(\phi, \mathbf{q}) = \Delta_q e(\phi). \tag{187}$$

Разложение (186) определяется графиками петлевого разложения для свободной энергии в поле флуктуаций параметра порядка с малым волновым вектором **q** [56].

Представим коэффициенты Гинзбурга-Ландау в виде:

$$A = A_0 K_A;$$
 $C = C_0 K_C;$ $B = B_0 K_B,$ (188)

где через A_0 , C_0 и B_0 обозначены стандартные выражения для этих коэффициентов в случае изотропного *s*-спаривания:

$$A_0 = N_0(0) \frac{T - T_c}{T_c}; \qquad C_0 = N_0(0) \frac{7\zeta(3)}{32\pi^2} \frac{v_F^2}{T_c^2}; \qquad B_0 = N_0(0) \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T_c^2}, \tag{189}$$

Тогда все особенности рассматриваемой модели, связанные с появлением псевдощели, содержатся в безразмерных коэффициентах K_A , K_C и K_B . В отсутствие псевдощели все эти коэффициенты равны 1, только в случае *d*-спаривания имеем $K_B = 3/2$. Поэтому для *d*-спаривания мы будем нормировать K_B на эту величину, приводя численные результаты для $\tilde{K}_B = 2/3K_B$.

Рассмотрим обобщенную куперовскую восприимчивость Рис.42:

$$\chi(\mathbf{q}0;T) = -T\sum_{\varepsilon_n}\sum_{\mathbf{p}}G(\varepsilon_n\mathbf{p} + \mathbf{q})G(-\varepsilon_n\mathbf{p})e^2(\phi)\Gamma(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q})$$
(190)



Рис. 43: (а) – Диаграммный ряд для аномальной функции Грина, пунктирные линии – AFM флуктуации. (б) – Диаграмма, определяющая коэффициент *K*_B.

С использованием (184) нетрудно представить коэффициенты K_A и K_C в виде:

$$K_{A} = \frac{\chi(00;T) - \chi(00;T_{c})}{A_{0}} =$$

$$= \alpha_{eff} \frac{T_{c}}{T - T_{c}} \left\{ T \sum_{\varepsilon_{n} = \pi T(2n+1)} \int_{-\omega_{c}}^{\omega_{c}} d\xi J_{0}(\varepsilon_{n}\xi) - T_{c} \sum_{\varepsilon = \pi T_{c}(2n+1)} \int_{-\omega_{c}}^{\omega_{c}} d\xi J_{0}(\varepsilon_{n}\xi) \right\} + 1 - \alpha_{eff}$$

$$(191)$$

$$K_{C} = \lim_{q \to 0} \frac{\chi(\mathbf{q}0; T_{c}) - \chi(00; T_{c})}{q^{2}C_{0}} = \frac{32\pi^{2}T_{c}^{3}}{7\zeta(3)v_{F}q^{2}} \alpha_{eff} \left\{ \sum_{\varepsilon_{n} = \pi T_{c}(2n+1)} \int_{-\omega_{c}}^{\omega_{c}} d\xi J_{0}(\varepsilon_{n}\xi) - \sum_{\varepsilon = \pi T_{c}(2n+1)} \int_{-\omega_{c}}^{\omega_{c}} d\xi G(\varepsilon_{n}, \xi + \frac{1}{2}v_{F}q) \Gamma(\varepsilon_{n}, -\varepsilon_{n}, q) G(-\varepsilon_{n}, \xi - \frac{1}{2}v_{F}q) \right\} + 1 - \alpha_{eff} \quad (192)$$

Ситуация с коэффициентом B в общем случае гораздо сложнее. Существенные упрощения возникают, если ограничиться в порядке $|\Delta_q|^4$, как это обычно и делается, случаем q = 0. Тогда коэффициент B может быть определен непосредственно из аномальной функции Грина F, для которой у нас уже имеется рекуррентная процедура (174), (175). В самом деле, рассмотрим диаграммный ряд для аномальной функции Грина, показанный на Рис.43(а). Из него сразу ясно, что

$$\lim_{\Delta \to 0} \frac{F(\varepsilon_n \mathbf{p})}{\Delta} = G(\varepsilon_n \mathbf{p})G(-\varepsilon_n \mathbf{p}) + \dots = G(\varepsilon_n \mathbf{p})G(-\varepsilon_n \mathbf{p})\Gamma(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, 0)$$
(193)

что, кстати, с учетом (175) сразу доказывает соотношение (184). Поэтому, для двухчастичной петли $\chi(0,0)$ имеем:

$$\chi(0,0) = T \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\varepsilon_n} \lim_{\Delta \to 0} \frac{F(\varepsilon_n \mathbf{p})}{\Delta} = T \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\varepsilon_n} J_0(\Delta = 0)$$
(194)

Для "четыреххвостки" Рис.43(б), определяющей коэффициент *B*, аналогично получаем:

$$-T\sum_{\mathbf{p}}\sum_{\varepsilon_n}\lim_{\Delta\to 0}\frac{\frac{F(\varepsilon_n\mathbf{p})}{\Delta}-\lim_{\Delta\to 0}\frac{F(\varepsilon_n\mathbf{p})}{\Delta}}{|\Delta|^2} = -T\sum_{\mathbf{p}}\sum_{\varepsilon_n}\lim_{\Delta\to 0}\frac{J_0(\Delta)-J_0(\Delta=0)}{|\Delta|^2}$$
(195)

где $J_0(\Delta)$ определяется рекуррентной процедурой (174). В результате, для безразмерного коэффициента K_B имеем:

$$K_B = \alpha_B \frac{8\pi^2 T_c^3}{7\zeta(3)} \sum_{\varepsilon_n} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} d\xi \lim_{\Delta \to 0} \frac{J_0(\Delta = 0) - J_0(\Delta)}{|\Delta|^2} + 1 - \alpha_B$$
(196)

где

$$\alpha_B = \begin{cases} \tilde{\alpha} & (s-\text{спаривание}) \\ \tilde{\alpha} + \frac{4}{3\pi}\sin(\pi\tilde{\alpha}) + \frac{1}{6\pi}\sin(2\pi\tilde{\alpha}) & (d-\text{спариваниe}) \end{cases}.$$
(197)

Полученные выражения позволяют провести непосредственные численные расчеты коэффициентов K_A, K_C, K_B . На Рис.44, для примера, показана рассчитанная зависимость K_C от ширины псевдощели W и корреляционной длины AFM флуктуаций (параметра $\kappa = v_F \xi^{-1}$). Соответствующие зависимости K_A и K_B качественно совершенно аналогичны. В частности, при $\kappa = 0$ имеем просто $K_B = K_C$ [56].

Физические характеристики сверхпроводников с псевдощелью.

Уравнения Гинзбурга-Ландау определяют две характерные длины сверхпроводников: длину когерентности и глубину проникновения магнитного поля.

Длина когерентности при данной температуре $\xi(T)$ дает характерный масштаб неоднородностей параметра порядка Δ :

$$\xi^2(T) = -\frac{C}{A}.\tag{198}$$

В отсутствие псевдощели:

$$\xi_{BCS}^2(T) = -\frac{C_0}{A_0},\tag{199}$$

$$\xi_{BCS}(T) \approx 0.74 \frac{\xi_0}{\sqrt{1 - T/T_c}},$$
(200)



Рис. 44: Зависимость коэффициента K_C от ширины псевдощели W и корреляционной длины AFM флуктуаций (параметра $\kappa = v_F \xi^{-1}$): $\frac{\kappa}{W} = 0.1$ (1); 1.0 (2); 10.0 (3). Пунктир — $\kappa = 0$ [56]. На вставке: зависимость K_C от κ при $\frac{W}{T_{c0}} = 5$.

где $\xi_0 = 0.18 v_F/T_c$. В рассматриваемой модели:

$$\frac{\xi^2(T)}{\xi^2_{BCS}(T)} = \frac{K_C}{K_A}.$$
(201)

Соответствующие зависимости $\xi^2(T)/\xi^2_{BCS}(T)$ от ширины псевдощели W и корреляционной длины флуктуаций (параметра κ) для случая d-спаривания приведены на Рис.45. Заметим, что изменения длины когерентности относительно невелики.

Для глубины проникновения магнитного поля сверхпроводника без псевдощели имеем:

$$\lambda_{BCS}(T) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\lambda_0}{\sqrt{1 - T/T_c}},\tag{202}$$

где $\lambda_0^2 = \frac{mc^2}{4\pi ne^2}$ определяет глубину проникновения при T = 0. В общем случае:

$$\lambda^2(T) = -\frac{c^2}{32\pi e^2} \frac{B}{AC}.$$
(203)

Тогда в рассматриваемой модели:

$$\frac{\lambda(T)}{\lambda_{BCS}(T)} = \left(\frac{K_B}{K_A K_C}\right)^{1/2}.$$
(204)



Рис. 45: Зависимость длины когерентности от ширины псевдощели W и корреляционной длины AFM флуктуаций (параметра $\kappa = v_F \xi^{-1}$): $\frac{\kappa}{W} = 0.1$ (1); 1.0 (2); 10.0 (3). Пунктир $-\kappa = 0$ [56]. На вставке: зависимость длины когерентности от κ при $\frac{W}{T_{c0}} = 5$.



Рис. 46: Зависимость глубины проникновения от ширины псевдощели W и корреляционной длины AFM флуктуаций (параметра $\kappa = v_F \xi^{-1}$): $\frac{\kappa}{W} = 0.1$ (1); 1.0 (2); 10.0 (3). На вставке: зависимость глубины проникновения от κ при $\frac{W}{T_{c0}} = 5$.

Графические зависимости этой величины для для случая *d*-спаривания показаны на Рис.46.

Вблизи T_c верхнее критическое поле H_{c2} определяется через коэффициенты Гинзбурга-Ландау как:

$$H_{c2} = \frac{\phi_0}{2\pi\xi^2(T)} = -\frac{\phi_0}{2\pi}\frac{A}{C},$$
(205)

где $\phi_0 = c\pi/e$ – квант магнитного потока. Тогда наклон кривой верхнего критического поля вблизи T_c :

$$\left|\frac{dH_{c2}}{dT}\right|_{T_c} = \frac{24\pi\phi_0}{7\zeta(3)v_F^2} T_c \frac{K_A}{K_C}.$$
(206)

Графические зависимости наклона поля $\left|\frac{dH_{c2}}{dT}\right|_{T_c}$, нормированного на наклон поля при температуре T_{c0} от эффективной ширины псевдощели W и параметра корреляционной длины κ для случая d-спаривания показаны на Рис.47. Видно, что наклон поля при достаточно больших корреляционных длинах быстро убывает с шириной псевдощели. Однако, при достаточно коротких корреляционных длинах может наблюдаться слабый рост этого параметра при малых ширинах псевдощели. При фиксированной ширине псевдощели наклон H_{c2} заметно растет при уменьшении корреляционной длины флуктуаций.

Рассмотрим, наконец, скачок теплоемкости в точке перехода:

$$\frac{C_s - C_n}{\Omega} = \frac{T_c}{B} \left(\frac{A}{T - T_c}\right)^2,\tag{207}$$

где C_s , C_n – соответственно теплоемкости сверхпроводящего и нормального состояний, Ω – объем образца. При температуре T_{c0} (в отсутствие псевдощели, W = 0):

$$\left(\frac{C_s - C_n}{\Omega}\right)_{T_{c0}} = N(0)\frac{8\pi^2 T_{c0}}{7\zeta(3)}.$$
(208)

Тогда относительный скачок теплоемкости в рассматриваемой модели можно записать как:

$$\Delta C \equiv \frac{(C_s - C_n)_{T_c}}{(C_s - C_n)_{T_{c0}}} = \frac{T_c}{T_{c0}} \frac{K_A^2}{K_B}.$$
(209)

Соответствующие зависимости от эффективной ширины псевдощели W и параметра корреляционной длины κ для случая d-спаривания приведены на Рис.48. Видно, что



Рис. 47: Зависимость наклона верхнего критического поля от ширины псевдощели W и корреляционной длины AFM флуктуаций (параметра $\kappa = v_F \xi^{-1}$): $\frac{\kappa}{W} = 0.1$ (1); 1.0 (2); 10.0 (3). Пунктир — $\kappa = 0$ [56]. На вставке: зависимость наклона H_{c2} от κ при $\frac{W}{T_{c0}} = 5$.



Рис. 48: Зависимость скачка теплоемкости от ширины псевдощели W и корреляционной длины AFM флуктуаций (параметра $\kappa = v_F \xi^{-1}$): $\frac{\kappa}{W} = 0.1$ (1); 1.0 (2); 10.0 (3). Пунктир $-\kappa = 0$ [56]. На вставке: зависимость скачка теплоемкости от κ при $\frac{W}{T_{c0}} = 5$.

скачок теплоемкости быстро падает с ростом ширины псевдощели и, наоборот, растет при уменьшении корреляционной длины AFM флуктуаций.

Для сверхпроводников с *s* – спариванием зависимости рассмотренных физических величин, в принципе, вполне аналогичны, отличие состоит лишь в большем масштабе *W*, при котором происходят соответствующие изменения, что соответствует большей устойчивости изотропных сверхпроводников к частичной "диэлектризации" электронного спектра за счет образования псевдощели на "горячих" участках поверхности Ферми [56, 57].

Из рассмотренных нами физических характеристик сверхпроводника достаточно подробные экспериментальные данные имеются по скачку теплоемкости [40]. В полном качественном соответствии с нашими выводами, скачок теплоемкости системы Bi - 2212 быстро падает при переходе в область недодопированных составов, где величина псевдощели возрастает. По данным [40] ширина псевдощели (наш параметр 2W) меняется от величины порядка 700K при концентрации дырок p = 0.05 до величины порядка $T_c \sim 100K$ вблизи оптимальной концентрации p = 0.16, обращаясь в нуль при p = 0.19. При этом наблюдается четкая связь падения скачка теплоемкости с ростом эффективной ширины псевдощели. К сожалению, нам неизвестны достаточно подробные данные по концентрационным зависимостям корреляционной длины флуктуаций и, соответственно, соответствующие зависимости физических характеристик сверхпроводника. Качественно корреляционная длина возрастает при движении в область недодопированных составов, так что эффект уменьшения скачка ка теплоемкости вполне понятен и с этой точки зрения.

Заключение

В данном разделе мы продолжили изучение особенностей сверхпроводящего состояния в рамках весьма грубой модели псевдощелевого состояния двумерной электронной системы [56, 57], которая, тем не менее, качественно соответствует ряду наблюдаемых особенностей электронной структуры недодопированных ВТСП – купратов. В работах [56, 57] рассматривался мало реалистичный предел бесконечной корре-

ляционной длины флуктуаций AFM ближнего порядка, что, однако, позволило найти точное аналитическое решение задачи. Здесь проведено обобщение на реалистический случай конечных корреляционных длин, которое, также как и в [56, 57], учитывает все диаграммы теории возмущений по взаимодействию электронов с флуктуациями ближнего порядка. Рассмотрение велось в стандартном (среднеполевом в терминах работы [57]) подходе, основанном на предположении о самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка по флуктуациям случайного поля AFM флуктуаций. В работе [57] мы показали, что это предположение не является обоснованным в пределе $\xi \to \infty$. В тоже время, оно не вызывает сомнений для случая $\xi \ll \xi_0$ (где ξ_0 – длина когерентности сверхпроводника при T=0, т.е. размер куперовских пар). Таким образом, остается еще чрезвычайно сложная задача учета эффектов несамоусредняемости при $\xi > \xi_0$. Выше уже отмечалось, что в реальных ВТСП системах скорее всего $\xi \sim \xi_0$, так что эффекты несамоусредняемости сверхпроводящей щели, типа рассмотренных в [57], могут оказаться весьма существенными, проявляясь в появлении "хвостов" температурной зависимости усредненной щели при $T > T_c$ (картина сверхпроводящих "капель" [57]).

Другим существенным упрощением нашей модели является предположение о статическом (и гауссовском) характере флуктуаций ближнего порядка. Это предположение является оправданным только в пределе достаточно высоких температур $T \gg \omega_{sf}$ (где ω_{sf} – характерная частота спиновых флуктуаций) [63, 64]. Поэтому его использование в сверхпроводящей фазе при $T < T_c$ является достаточно сомнительным. Мы, однако, думаем, что проведенное выше упрощенное рассмотрение может описать наиболее существенные эффекты изменения электронного спектра (образования псевдощели на"горячих" участках поверхности Ферми) на сверхпроводимость в такой системе. При учете динамики спиновых флуктуаций нам неизбежно пришлось-бы выйти за пределы простой феноменологии модели БКШ и детально рассматривать микроскопику спаривательного взаимодействия. Вряд-ли такая программа может быть реализована в настоящее время. В частности, проблема учета всех порядков теории возмущений по AFM флуктуациям представляется совершенно безнадежной с учетом динамики спиновой подсистемы.

4.2 Сверхпроводимость в точно решаемой модели псевдощели. Эффекты несамоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка.

Одной из главных целей настоящего раздела является анализ влияния псевдощели на сверхпроводимость и исследование эффектов несамоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка в рамках очень простой (хотя, возможно, и недостаточно реалистической) одномерной модели псевдощелевого состояния, вызванного флуктуациями "диэлектрического" ближнего порядка с конечной корреляционной длиной, впервые предложенной в работе Бартоша и Копица [86]. Предложенное в этой работе точное решение этой модели, весьма близкой по духу к рассмотренным ранее моделям [48, 49, 50, 51], позволяет провести достаточно полное исследование [59, 87] интересующей нас проблемы самоусредняемости [57] в двумерной модели "горячих" участков [56, 57, 58]. Кроме того мы проанализируем температурные зависимости сверхпроводящей щели в сверхпроводнике с "диэлектрической" псевдощелью.

4.2.1 Сверхпроводимость в точно решаемой модели псевдощели Бартоша и Копица

Уравнения Горькова и их решение в псевдощелевом состоянии.

Рассмотрение сверхпроводимости в системе с псевдощелью, вызванной флуктуациями ближнего порядка "диэлектрического" типа будем вести в рамках простейшего предположения о наличии спаривательного взаимодействия типа БКШ, характеризуемого константой притяжения V, которая, как обычно, считается отличной от нуля в некотором слое шириной $2\omega_c$ в окрестности уровня Ферми (ω_c - характерная частота квантов, обеспечивающая притяжение электронов). Этот же подход использовался нами в [56, 57, 112, 58]. При этом, в данной работе мы ограничимся рассмотрением только спаривания *s*-типа. Никаких принципиальных трудностей для рассмотрения случая *d*-спаривания, характерного для ВТСП – купратов, нет, однако наличие в этом случае угловой зависимости (анизотропии) сверхпроводящей щели приводит [56, 57] к необходимости дополнительного интегрирования, что существенно увеличивает время численного счета. В тоже время, в работах [56, 57, 58] было показано, что влияние псевдощели на сверхпроводимость практически одинаково для *s* и *d* случаев, отличаясь, по существу, только масштабом параметров, приводящим к соответствующим изменениям основных характеристик сверхпроводящего состояния (*d*-спаривание менее устойчиво к диэлектризации электронного спектра, нежели *s*спаривание).

На "холодных" участках поверхности Ферми сверхпроводимость описывается стандартными уравнениями теории БКШ. Поэтому мы сосредоточимся на выводе уравнений Горькова в одномерной модели, что эквивалентно рассмотрению "горячих" участков в двумерном случае [57, 58]. Функции Грина (69), (70) одномерной системы в периодическом поле (66), фактически, образуют матрицу:

$$g_{11} = \frac{i\varepsilon_n - \xi_2}{(i\varepsilon_n - \xi_1)(i\varepsilon_n - \xi_2) - |D|^2} \qquad g_{12} = \frac{D^*}{(i\varepsilon_n - \xi_1)(i\varepsilon_n - \xi_2) - |D|^2}$$
$$g_{21} = \frac{D}{(i\varepsilon_n - \xi_1)(i\varepsilon_n - \xi_1) - |D|^2} \qquad g_{22} = \frac{i\varepsilon_n - \xi_1}{(i\varepsilon_n - \xi_1)(i\varepsilon_n - \xi_2) - |D|^2}$$
(210)

При наличии куперовского спаривания уравнения Горькова, построенные на функциях Грина вида (210), изображаются графиками, показанными на Рис.49. В аналитическом виде эта система уравнений записывается как:

$$G_{11} = g_{11} - g_{11}\Delta F_{11}^{+} - g_{12}\Delta F_{21}^{+}$$

$$F_{11}^{+} = g_{11}^{*}\Delta^{*}G_{11} + g_{12}^{*}\Delta^{*}G_{12}$$

$$G_{21} = g_{21} - g_{21}\Delta F_{11}^{+} - g_{22}\Delta F_{21}^{+}$$

$$F_{21}^{+} = g_{21}^{*}\Delta^{*}G_{11} + g_{22}^{*}\Delta^{*}G_{21}$$
(211)

где сверхпроводящая щель определяется, как обычно, из:

$$\Delta^* = VT \sum_{np} F_{11}^+(\varepsilon_n p) = \lambda T \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p F_{11}^+(\varepsilon_n \xi_p) \equiv \lambda T \sum_n \overline{F_{11}^+(\varepsilon_n)}$$
(212)



Рис. 49: Уравнения Горькова в одномерном периодическом поле.

где ввели безразмерную константу спаривательного взаимодействия $\lambda = N_0(0)V$ $(N_0(0)$ – плотность состояний свободных электронов на уровне Ферми.).

Решение системы уравнений (211) дает:

$$G_{11} = -\frac{1}{Det} [(i\varepsilon + \xi_1)(\varepsilon^2 + \xi_2^2 + D^2 + \Delta) - D^2(\xi_1 + \xi_2)] =$$

= $-\frac{1}{Det} \{(i\varepsilon + \xi)[\varepsilon^2 + (\xi + \eta)^2 + D^2 + \Delta^2] + D^2\eta\}$
$$F_{11}^+ = -\frac{1}{Det} \Delta^* (\varepsilon^2 + \xi_2^2 + D^2 + \Delta^2) =$$

= $-\frac{1}{Det} \Delta^* [\varepsilon^2 + (\xi + \eta)^2 + D^2 + \Delta^2]$ (213)

где

$$Det = (\varepsilon^{2} + \xi_{1}^{2} + D^{2} + \Delta^{2})(\varepsilon^{2} + \xi_{2}^{2} + D^{2} + \Delta^{2}) - (\xi_{1} + \xi_{2})^{2}D^{2} =$$
$$= (\varepsilon^{2} + \xi^{2} + D^{2} + \Delta^{2})(\varepsilon^{2} + (\xi + \eta)^{2} + D^{2} + \Delta^{2}) - \eta^{2}D^{2}$$
(214)

где D обозначает вещественную амплитуду поля флуктуаций (66). В соответствии с (212), горьковская функция Грина F_{11}^+ определяет энергетическую щель сверхпроводника. С учетом случайного характера поля "диэлектрических" флуктуаций, уравнение (212) следует усреднить по флуктуациям их "фазы" $\eta = v_F k$ и амплитуды D, используя распределения (71) и (для высокотемпературного режима флуктуаций) (62).

Громоздкие, но прямые вычисления интеграла в (212) методом вычетов дают:

$$\overline{F_{11}^{+}(\varepsilon)} = \frac{\pi \Delta^{*}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{\sqrt{(\tilde{\varepsilon}^{2} + D^{2} + \frac{\eta^{2}}{4})^{2} - \eta^{2}D^{2}} + \tilde{\varepsilon}^{2} + D^{2} - \frac{\eta^{2}}{4}}} \times \left\{ 1 + \frac{\tilde{\varepsilon}^{2} + D^{2} + \frac{\eta^{2}}{4}}{\sqrt{(\tilde{\varepsilon}^{2} + D^{2} + \frac{\eta^{2}}{4})^{2} - \eta^{2}D^{2}}} \right\} \equiv \pi \Delta^{*} \mathcal{F}(\varepsilon, \Delta, \eta, D)$$
(215)

где ввели

$$\tilde{\varepsilon} = \sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2} \tag{216}$$

Тогда из (212) сразу получаем уравнение для сверхпроводящей щели в двумерной модели "горячих" участков [56, 57, 58]:

$$1 = 2\pi\lambda T \sum_{n=0}^{\left[\frac{\omega_c}{2\pi T}\right]} \left\{ \tilde{\alpha}\mathcal{F}(\varepsilon, \Delta, \eta, D) + \frac{1 - \tilde{\alpha}}{\tilde{\varepsilon}} \right\}$$
(217)

где введена относительная доля "горячих" участков на поверхности Ферми $\tilde{\alpha} = \frac{4}{\pi} \alpha$. Второе слагаемое в (217) дает стандартный вклад БКШ от "холодных" участков, составляющих долю $(1-\tilde{\alpha})$ на поверхности Ферми. Суммирование по n в (217) ведется до максимального значения, определяемого целой частью отношения $\frac{\omega_c}{2\pi T}$.

Из уравнения (217), путем численных расчетов, можно найти величину щели $\Delta(\eta, D)$ при фиксированных значениях η и D (т.е. для заданного значения случайного поля флуктуаций (66)) для любой температуры. После этого можно провести усреднение по (71) и (62) и найти, таким образом, температурные зависимости усредненной щели. В частности, для "низкотемпературного" режима "диэлектрических" флуктуаций достаточно провести усреднение лишь по "фазе" η , так что сверхпроводящая щель есть:

$$<\Delta>=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\eta \frac{v_F\kappa}{\eta^2+v_F^2\kappa^2}\Delta(\eta,D)$$
 (218)

В "высокотемпературном" приближении добавляется еще усреднение по амплитуде *D* с распределением (62):

$$<\Delta>=\frac{2}{W^2}\int_0^\infty dDD\exp\left(-\frac{D^2}{W^2}\right)\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^\infty d\eta\frac{v_F\kappa}{\eta^2+v_F^2\kappa^2}\Delta(\eta,D)$$
(219)

В результате найдем температурные зависимости усредненной сверхпроводящей щели $<\Delta>$, не делая никаких статистических предположений типа предположения о самоусредняемости параметра порядка. Аналогичным образом можно рассчитать и температурные зависимости дисперсии $<\Delta^2> - <\Delta>^2$, по которым можно судить о степени случайности Δ , т.е. о наличии или отсутствии самоусредняемости.

Как уже отмечалось, в большинстве работ по сверхпроводимости в неупорядоченных системах рассмотрение ведется в предположении о самоусредняемости сверхпроводящей щели Δ . В этом случае Δ считается, фактически, неслучайной величиной, независящей от случайных характеристик поля, в котором распространяются электроны, образующие куперовские пары. В нашем случае речь идет об амплитуде Dи "фазе" η поля (66), соответственно самоусредняемость по этим параметрам можно проанализировать по отдельности.

Пусть $\Delta = \Delta_{mf}$ является самоусредняющейся по флуктуациям η . Тогда можно считать, что в (213) Δ не зависит от η . Соответственно, усредненная по флуктуациям η аномальная функция Горькова имеет вид:

$$< F_{11}^{+} >= \frac{\Delta^{*}}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \frac{v_{F}\kappa}{\eta^{2} + v_{F}^{2}\kappa^{2}} \frac{\varepsilon^{2} + (\xi + \eta)^{2} + D^{2} + \Delta^{2}}{(\varepsilon^{2} + \xi^{2} + D^{2} + \Delta^{2})[\varepsilon^{2} + (\xi + \eta)^{2} + D^{2} + \Delta^{2}] - \eta^{2}D^{2}}$$
(220)

Этот интеграл может быть непосредственно вычислен, так что после весьма громоздких расчетов получаем:

$$\langle F_{11}^{+} \rangle = \Delta^{*} \frac{\tilde{\varepsilon}^{2} \left(1 + \frac{v_{F}\kappa}{\tilde{\varepsilon}}\right)^{2} + D^{2} \left(1 + \frac{v_{F}\kappa}{\tilde{\varepsilon}}\right) + \xi^{2}}{\left[\left(1 + \frac{v_{F}\kappa}{\tilde{\varepsilon}}\right)\tilde{\varepsilon}^{2} + \xi^{2} + D^{2}\right]^{2} + v_{F}^{2}\kappa^{2}\xi^{2}}$$
(221)

где $\tilde{\varepsilon}$ введено выше в (216). Соответственно, можно вычислить и интеграл от (221), входящий в уравнение для щели:

$$\overline{\langle F_{11}^+ \rangle} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \langle F_{11}^+ \rangle = \frac{\pi \Delta^* \left(1 + \frac{v_F \kappa}{2\tilde{\varepsilon}}\right)}{\sqrt{D^2 + \tilde{\varepsilon}^2 \left(1 + \frac{v_F \kappa}{2\tilde{\varepsilon}}\right)^2}}$$
(222)

Таким образом, несмотря на громоздкий вид аномальной функции Грина (221), в уравнении на щель учет взаимодействия с флуктуациями на "горячих" (плоских) участках поверхности Ферми сводится к "стандартной" перенормировке:

$$\varepsilon \to \varepsilon \left(1 + \frac{v_F \kappa}{2\tilde{\varepsilon}} \right) = \varepsilon \left(1 + \frac{v_F \kappa}{2\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \right)$$
$$\Delta \to \Delta \left(1 + \frac{v_F \kappa}{2\tilde{\varepsilon}} \right) = \Delta \left(1 + \frac{v_F \kappa}{2\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \right) \tag{223}$$

аналогичной возникающей в задаче об учете влияния примесей на сверхпроводимость [119] и уже возникавшей в контексте рассматриваемой задачи в работе [58]. Аналогия с примесной задачей здесь довольно полная, поскольку величина $v_F \kappa = v_F \xi_{corr}^{-1}$ представляет собой характерное обратное время пробега электрона через область ближнего порядка длиной ~ ξ_{corr} . Разумеется, влияние псевдощели еще связано с появлением в (221), (222) квадрата диэлектрической щели D^2 .

В итоге, уравнение для сверхпроводящей щели в модели "горячих" участков, в предположении самоусредняемости по "фазовым" флуктуациям, имеет вид:

$$1 = 2\pi\lambda T \sum_{n=0}^{\left[\frac{\omega_c}{2\pi T}\right]} \left\{ \tilde{\alpha} \frac{1 + \frac{v_F\kappa}{2\tilde{\varepsilon}}}{\sqrt{D^2 + \tilde{\varepsilon}^2 \left(1 + \frac{v_F\kappa}{2\tilde{\varepsilon}}\right)^2}} + \frac{1 - \tilde{\alpha}}{\tilde{\varepsilon}} \right\}$$
(224)

Решать это уравнение, естественно, проще нежели уравнение (217) с последующим усреднением (218). В отсутствие флуктуаций амплитуды "диэлектрического" поля D, что справедливо для низкотемпературной области флуктуаций ближнего порядка, именно уравнение (224) определяет "среднеполевое" (в терминологии работы [57]), по отношению к флуктуациям случайного поля (66), поведение $\Delta(T)$.

В "высокотемпературной" области флуктуаций ближнего порядка, принимая для D распределение (62), в предположении самоусредняемости также и по флуктуациям D, получаем следующее уравнение для усредненной сверхпроводящей щели:

$$1 = 2\pi\lambda T \sum_{n=0}^{\left[\frac{\omega_c}{2\pi T}\right]} \left\{ \frac{2\tilde{\alpha}}{W^2} \int_0^\infty dDD \exp\left(-\frac{D^2}{W^2}\right) \frac{1 + \frac{v_F\kappa}{2\tilde{\varepsilon}}}{\sqrt{D^2 + \tilde{\varepsilon}^2 \left(1 + \frac{v_F\kappa}{2\tilde{\varepsilon}}\right)^2}} + \frac{1 - \tilde{\alpha}}{\tilde{\varepsilon}} \right\}$$
(225)

что описывает ситуацию, аналогичную рассмотренной детально в нашей работе [58], где учитывалось влияние на сверхпроводимость гауссовых флуктуаций "диэлектрического" ближнего порядка, в рамках подхода, основанного на работах [50, 51]. В



Рис. 50: Зависимость критической температуры сверхпроводящего перехода в "низкотемпературной" области диэлектрических флуктуаций. Слева – от ширины псевдощели W для разных значений корреляционной длины диэлектрических флуктуаций $\frac{v_F\kappa}{T_{c0}} =: 1.0.1; 2.1;$ 3. 10; 4. 100. Справа – от корреляционной длины этих флуктуаций для разных значений ширины псевдощели $\frac{W}{T_{c0}} =: 1.1; 2.3; 3.5; 4.10.$

данном случае, флуктуации (66) учтены точно, но Δ предполагается самоусредняющейся. Ниже мы увидим, что все результаты, следующие из (225) весьма близки к полученным в [58]. При $\kappa \to 0(\xi_{corr} \to \infty)$ это уравнение (225) переходит в аналогичное "среднеполевое" уравнение работы [57]. Найденную из (224) или (225) температуру сверхпроводящего перехода, по-видимому, можно отождествить с температурой, при которой бесконечно малая щель (сверхпроводимость) возникает однородно во всем образце [57].

Основные результаты и их обсуждение.

Рассмотрим результаты численного анализа уравнений (224), (225) в сравнении с результатами точного анализа на основе (217), (218), (219)³⁵.

На Рис.50 приведены зависимости критической температуры T_c сверхпроводящего перехода в "низкотемпературной" области диэлектрических флуктуаций (темпе-

 $^{^{35}\}Pi$ ри численном анализе полагали, что доля плоских участков на поверхности Φ ерми $\tilde{lpha}=2/3$

ратура обращения в ноль "среднеполевой" щели, определяемой уравнением (224)) от ширины псевдощели W (в данном случае совпадающей с амплитудой диэлектрической щели D) и корреляционной длины. Результаты качественно совпадают с соответствующими результатами для "высокотемпературной" области диэлектрических флуктуаций (где T_c определяется уравнением (225)), а также с результатами, полученными ранее в несколько иной модели диэлектрических флуктуаций ближнего порядка с конечной корреляционной длиной в работе [58]. С ростом ширины псевдощели W "среднеполевая" T_c подавляется. Уменьшение корреляционной длины "замывает" псевдощель [25, 50, 86] и соответственно уменьшает подавление T_c .

На Рис.51 сплошными кривыми приведены температурные зависимости сверхпроводящей щели $\langle \Delta \rangle$, усредненной и по амплитуде D и по "фазе" η ("высокотемпературная" область флуктуаций ближнего порядка, где $\langle \Delta \rangle$ описывается выражением (219)), для разных значений $v_F \kappa$. Пунктирные кривые – соответствующие "среднеполевые" температурные зависимости сверхпроводящей щели, полученные в предположении самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка, как по флуктуациям амплитуды, так и по флуктуациям фазы, определяемые уравнением (225).

Усредненная по флуктуациям сверхпроводящая щель отлична от нуля и в области температур выше температуры сверхпроводящего перехода T_c , которая соответствует обращению в нуль "среднеполевой" сверхпроводящей щели (т.е. щели однородной во всем образце). Более того, видно, что усредненная по флуктуациям сверхпроводящая щель отлична от нуля и в узкой области температур выше температуры перехода в сверхпроводящее состояние в отсутствии флуктуаций ближнего порядка T_{c0} . Это связано с тем, что существуют такие флуктуации "фазы" η , при которых уровень Ферми попадает в область пиков плотности состояний, вызванных образованием диэлектрической щели. Действительно, плотность состояний при конкретной реализации "фазы" η и амплитуды диэлектрической щели D имеет вид:

$$\frac{N(E)}{N_0(0)} = -\frac{1}{\pi N_0(0)} Im \sum_{\mathbf{p}} g_{11}^R(Epp) = \begin{cases} \frac{|E+\frac{\eta}{2}|}{\sqrt{(E+\frac{\eta}{2})^2 - D^2}} & \text{при} & |E+\frac{\eta}{2}| > D\\ 0 & \text{для остальных значений} \end{cases}$$
(226)



Рис. 51: Температурная зависимость сверхпроводящей щели в "высокотемпературной" области диэлектрических флуктуаций. Сплошные кривые – усредненная по амплитуде D и по "фазе" η сверхпроводящая щель $< \Delta >$, описываемая выражением (219). Пунктирные кривые – "среднеполевая" сверхпроводящая щель, определяемая уравнением (225). На вставке – температурная зависимость относительной среднеквадратичной флуктуации сверхпроводящая щели. Кривые приведены для $\frac{W}{T_{c0}} = 3$ и $\frac{v_F \kappa}{T_{c0}} =: 1.0.1; 2.1; 3.10; 4.100.$



Рис. 52: Области фазовой диаграммы с отличной от нуля сверхпроводящей щелью для различных температур выше T_{c0} . Области приведены для T/T_{c0} : 1. 1.05; 2. 1.1; 3. 1.2. Пунктир – прямая $D = \eta/2$.

где $g_{11}^{R}(Epp)$ – запаздывающая функция Грина, которая получается из (69) стандартным аналитическим продолжением $i\varepsilon_n \to E + i0$, $N_0(0)$ – плотность состояний на уровне Ферми в отсутствие флуктуаций ближнего порядка. Поэтому при $\frac{\eta}{2} \approx D$ уровень Ферми приходится на пики плотности состояний, что приводит к увеличению сверхпроводящей щели $\Delta(\eta, D)$. Более того, увеличение амплитуды диэлектрической щели D приводит к увеличению ширины пиков в плотности состояний (226), поэтому при сохранении условия $\frac{\eta}{2} \approx D$ сверхпроводящая щель $\Delta(\eta, D)$ растет с увеличением D. Это приводит к тому, что при любой температуре выше T_{c0} на фазовой диаграмме в осях η и D при достаточно больших амплитудах диэлектрической щели $D > D^*(T)$ всегда остается узкая область вблизи прямой $\frac{\eta}{2} = D$, где сверхпроводящая щель $\Delta(\eta, D)$ отлична от нуля (см. Рис.52). Это приводит к появлению в температурной зависимости усредненной по флуктуациям сверхпроводящей щели $< \Delta >$ бесконечного экспоненциально малого "хвоста" в области температур выше T_{c0}^{-36} .

На вставке на Рис.51 приведена температурная зависимость относительной среднеквадратичной флуктуации сверхпроводящей щели $\delta\Delta/\Delta = \sqrt{\langle \Delta^2 \rangle - \langle \Delta \rangle^2}/\langle \Delta \rangle$ для "высокотемпературного" режима диэлектрических флуктуаций. В случае больших корреляционных длин ближнего порядка ($\xi_0/\xi_{corr} \ll 1$) флуктуации сверхпроводящего параметра порядка очень сильны во всей области температур, что свидетельствует об очевидной несамоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка. Удивительным образом флуктуации сверхпроводящей щели оказываются достаточно сильными и в области малых корреляционных длин, по крайней мере, в области температур $T > T_c$. В частности, "хвост" в температурной зависимости $\langle \Delta \rangle$ при $T > T_c$ заметен даже при $v_F \kappa/T_{c0} = 100$ когда $\xi_0/\xi_{corr} \approx 30 \gg 1$.

На Рис.53 сплошными кривыми приведены температурные зависимости сверхпроводящей щели $<\Delta >$, усредненной по "фазе" η (см. (218)) в "низкотемпературном"режиме диэлектрических флуктуаций, когда флуктуации по амплитуде диэлек-

³⁶Разумеется этот эффект в рассматриваемой модели является следствием "одномерного" характера случайного поля флуктуаций, приводящего к соответствующим особенностям в плотности состояний (226). В этом смысле он может оказаться неуниверсальным и присущим только данной упрощенной модели.



Рис. 53: Температурная зависимость сверхпроводящей щели в "низкотемпературной" области диэлектрических флуктуаций. Сплошные кривые – усредненная по "фазе" η при фиксированной амплитуде D = W сверхпроводящая щель $< \Delta >$, описываемая выражением (218). Пунктирные кривые – "среднеполевая" сверхпроводящая щель, определяемая уравнением (224). На вставке А – температурная зависимость относительной среднеквадратичной флуктуации сверхпроводящей щели. Кривые приведены для $\frac{W}{T_{c0}} = 3$ и $\frac{v_F \kappa}{T_{c0}} =: 1.0.1; 2.1; 3.$ 10; 4. 100. На вставке В – зависимость критической температуры T_c^* от ширины псевдощели.

трической щели вымораживаются и D = W. Пунктирными кривыми приведены соответствующие температурные зависимости "среднеполевой" сверхпроводящей щели, полученной в предположении самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка по флуктуациям "фазы" η , определяемые уравнением (224). При достаточно больших корреляционных длинах ближнего порядка усредненная щель при $T < T_c$ очень близка к "среднеполевой" и имеет лишь относительно малый "хвост" в области $T > T_c$. Такое поведение в "низкотемпературном" режиме диэлектрических флуктуаций связано с тем, что при $\xi_{corr} \to \infty$ случайность в такой модели вообще пропадает ($\eta = 0, D = W$). Соответственно и среднеквадратичная флуктуация щели, приведенная на вставке на Рис.53 при большой корреляционной длине достаточно мала при $T < T_c$, но резко возрастает при $T > T_c$. С уменьшением корреляционной длины флуктуации сверхпроводящей щели $\delta \Delta$ при $T < T_c$ сначала возрастают, просто в связи с увеличением случайности (параметр $v_F \kappa$ определяет ширину распределения η), а затем падают в области $\xi_0/\xi_{corr} \gg 1$. В области "хвоста" усредненной сверхпроводящей щели (*T* > *T_c*) флуктуации сверхпроводящей щели очень велики. Хотя они и уменьшаются с падением корреляционной длины ближнего порядка *ξ_{corr}*, но все же остаются существенными даже при достаточно малых корреляционных длинах, т.е. и в области *ξ*₀/*ξ_{corr}* ≫ 1.

Также, как и в "высокотемпературном" режиме диэлектрических флуктуаций, "хвост" в температурной зависимости усредненной щели здесь наблюдается и при $T > T_{c0}$. Это объясняется указанными выше причинами. Однако в "низкотемпературном" режиме амплитуда диэлектрической щели уже не является случайной, а строго зафиксирована D = W. Поэтому при $T_{c0} < T < T_c^*$, где T_c^* определяется условием $D^*(T_c^*) = W$, существует узкая область "фаз" вблизи $\eta = 2W$, где сверхпроводящая щель $\Delta(\eta, W)$ отлична от нуля, а при $T > T_c^*$ такая область отсутствует (см. Рис.52). T_c^* является температурой до которой тянется "хвост" усредненной щели, т.е. критической температурой для усредненной щели $< \Delta >$. Из определения T_c^* очевидно, что она не зависит от корреляционной длины, а зависит лишь от W. Поскольку ширина пиков в плотности состояний (226), а следовательно и $\Delta(\eta, D)$ растет с увеличением D при сохранении условия $\frac{\eta}{2} \approx D$, то величина T_c^* растет с увеличением W. Зависимость T_c^* от W приведена на соответствующей вставке на Рис.53.

Заключение

В данной разделе проведено изучение особенностей сверхпроводящего состояния в рамках чрезвычайно упрощенной модели псевдощели в двумерной электронной системе, допускающей точное решение. Центральным результатом является явная демонстрация отсутствия полной самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка (энергетической щели) по случайному полю "диэлектрических" флуктуаций, приводящих к формированию псевдощелевого состояния. Этот факт является достаточно удивительным, с точки зрения стандартной теории сверхпроводимости в неупорядоченных системах [105, 113, 12]. Отсутствие самоусредняемости, проявляющееся в возникновении сильных флуктуаций щели, особенно сильно проявляется в

области температур, превышающих "среднеполевую" температуру сверхпроводящего перехода Т_c, получающуюся из стандартных уравнений, выписанных в предположении самоусредняемости параметра порядка. Эта температура отождествляется нами с температурой возникновения однородного сверхпроводящего состояния во всем образце, тогда как в реальной неупорядоченной системе сверхпроводящее состояние является неоднородным, а в области *T* > *T_c* сверхпроводящая фаза может существовать в виде отдельных областей ("капель"), возникающих из-за случайных флуктуаций локальной плотности электронных состояний. В отличие от нашей предыдущей работы [57], где такая картина рассматривалась в пределе очень больших корреляционных длин ближнего порядка $\xi_{corr} \to \infty$, использование модели [86] позволило получить полное решение для произвольных значений ξ_{corr} . Это решение показало отсутствие полной самоусредняемости сверхпроводящей щели даже при $\xi_{corr} < \xi_0$, что противоречит наивным ожиданиям стандартного подхода [25]. Как уже отмечалось выше, нам неизвестны работы, в которых вопрос о самоусредняемости Δ рассматривался - бы в рамках точно решаемых моделей беспорядка. Здесь проведено именно такое рассмотрение. Разумеется неясно, в какой мере полученные результаты сохранятся в более реалистических моделях.

В плане сравнения с экспериментальными данными по высокотемпературным сверхпроводникам отметим, что в работах [120, 121] методом сканирующей туннельной микроскопии, измеряющей локальную плотность состояний, на пленках Bi_2Sr_2Ca $Cu_2O_{8+\delta}$ было четко продемонстрировано, что в системе существуют микроскопические сверхпроводящие области, сосуществующие с преобладающими областями полупроводникового типа с типичной псевдощелью в электронном спектре. Эти наблюдения находятся в качественном соответствии с основными выводами рассмотренной модели.

4.2.2 Спектральная плотность и плотность состояний.

С точки зрения дальнейших исследований данной модели, представляет большой интерес исследовать поведение спектральной плотности электронной и туннельной
плотности состояний, аналогичное тому, которое было проведено в предыдущем разделе (см. также [57]) в пределе $\xi_{corr} \to \infty$. В частности, очень интересно исследовать вопрос о самоусредняемости плотности состояний, которая практически всегда предполагается в теории неупорядоченных систем.

Спектральная плотность определяется стандартным образом:

$$A(E\xi_p) = -\frac{1}{\pi} Im G^R(E\xi_p)$$
(227)

В выражении (213) для нормальной функции Грина перейдем от мацубаровских частот к действительным $i\varepsilon_n \to E + i\delta$. Тогда в окрестности "горячих" участков поверхности Ферми спектральная плотность для конкретных реализаций η и D имеет вид:

$$A_{\eta D}(E\xi_p) = -sign(E)\frac{(E+\xi_p)(-E^2+(\xi_p+\eta)^2+D^2+\Delta^2)+D^2\eta}{2\eta\sqrt{(\xi_p+\eta/2)^2+D^2}}$$
(228)
$$\left[\delta((\sqrt{(\xi_p+\frac{\eta}{2})^2+D^2}+\frac{\eta}{2})^2+\Delta^2-E^2)-\delta((\sqrt{(\xi_p+\frac{\eta}{2})^2+D^2}-\frac{\eta}{2})^2+\Delta^2-E^2)\right]$$

В низкотемпературном режиме "диэлектрических" флуктуаций, когда амплитуда диэлектрической щели заморожена, флуктуирует лишь "фаза" $\eta = v_F \kappa$ по которой необходимо провести усреднение с распределением (71). Усредненная спектральная плотность на поверхности Ферми ($\xi_p = 0$) имеет вид:

$$A_D(E0) = -\int_{-\infty}^{\infty} d\eta \mathcal{P}_{\eta}(\eta) |E| \frac{-E^2 + \eta^2 + D^2 + \Delta^2}{2\eta \sqrt{(\eta/2)^2 + D^2}} [\delta(f_+^2 - E^2) - \delta(f_-^2 - E^2)]$$
(229)

где

$$f_{\pm}^2 = \left(\sqrt{\left(\frac{\eta}{2}\right)^2 + D^2} \pm \frac{\eta}{2}\right)^2 + \Delta^2 \tag{230}$$

Следует учесть, что сама сверхпроводящая щель, входящая в (229), также флуктуирует, т.е. зависит от η и D. Зависимость $\Delta(\eta D)$ определяется численным образом из уравнения (217). При этом оказывается, что для $\eta > 0$ f_+ растет с ростом η и минимальна при $\eta = 0$, где $f_+ = \sqrt{D^2 + \Delta^2(0D)}$. Величина f_- падает с ростом η при $\eta \ll D$ и $\eta \gg D$, однако может иметь локальный максимум f_{max} при $\eta/2 \sim D$,



Рис. 54: Зависимость характерных энергетических параметров от "фазы" η и амплитуды D случайного поля диэлектрических флуктуаций. Все энергетические величины приведены в единицах T_{c0} . При расчете принималось: $T/T_{c0} = 0.1$; $\lambda = 0.2$; $\alpha = 2/3$.

соответствующих максимуму $\Delta(\eta D)$. В этом случае функция $f_{-}(\eta)$ имеет также минимум f_{min} . На Рис.54а приведена характерная зависимость f_{+} , f_{-} и Δ от η при фиксированных D, на Рис.54b – зависимость f_{max} , f_{min} и $\sqrt{D^2 + \Delta^2(0D)}$ от D.

При $E > \sqrt{D^2 + \Delta^2(0D)}$ вклад в (229) дает только первая δ -функция, выражение под которой имеет единственный (рассматриваем E > 0) корень η_0 ($f_+(\eta_0) = E$), который находился численно.

$$A_D(E0) = -|E| \frac{-E^2 + \eta_0^2 + D^2 + \Delta^2(\eta_0 D)}{\eta_0 \sqrt{(\eta_0/2)^2 + D^2}} \frac{\mathcal{P}_\eta(\eta_0)}{\left|\frac{df_+^2}{d\eta}\right|_{\eta=\eta_0}}$$
(231)

При $E < \sqrt{D^2 + \Delta^2(0D)}$ вклад в (229) дает только вторая δ -функция, которая может иметь несколько корней, если $f_{min} < E < f_{max}$ и вообще не имеет корней (а, следовательно, и спектральная плотность равна нулю) при $E < min(f_{min}; \Delta_0)$, где Δ_0 – щель в отсутствие "диэлектрических" флуктуаций.

$$A_D(E0) = -|E| \sum_i \frac{-E^2 + \eta_i^2 + D^2 + \Delta^2(\eta_i D)}{\eta_0 \sqrt{(\eta_i/2)^2 + D^2}} \frac{\mathcal{P}_\eta(\eta_i)}{\left|\frac{df_-^2}{d\eta}\right|_{\eta=\eta_i}}$$
(232)

где η_i корни уравнения $f_-(\eta) = E$.

Следует отметить, что при $E = f_{min}$; f_{max} ; Δ_0 спектральная плотность расходится, так как производная $\frac{df_-^2}{d\eta}$, стоящая в знаменателе (232) в точках максимума и минимума f_- , а также при $\eta \to \infty$, что соответствует $E = \Delta_0$ (см. Рис.54а), обращается в ноль.

Таким образом, в низкотемпературном режиме "диэлектрических" флуктуаций при достаточно малых амплитудах D (пока $f_{-}(\eta)$ имеет минимум и максимум) в спектральной плотности, поведение которой приведено на Рис.55³⁷, имеется три пика, соответствующих $E = f_{min}$; f_{max} ; Δ_0 . Один из пиков приходится на край щели в спектральной плотности, которая наблюдается при $E < min(f_{min}; \Delta_0)$. При достаточно больших D минимум и максимум $f_{-}(\eta)$ пропадают (см. Рис.546) и расходимость в спектральной плотности наблюдается лишь у края щели при $E = \Delta_0$. Однако, хотя максимум на кривой $f_{-}(\eta)$ и отсутствует, но существенное уменьшение $\frac{df_{-}}{d\eta}$ при η вблизи максимума $\Delta(\eta D)$ остается, поэтому в спектральной плотности наблюдается существенный дополнительный пик (см. вставку b Рис.55). При повышении температуры выше T_{c0} щель в спектральной плотности и пик, соответствующий $E = \Delta_0$, пропадают, но остается пик, соответствующий $E = f_{max}$. При переходе же через среднеполевую температуру сверхпроводящего перехода T_c , поведение спектральной плотности качественно не изменяется.

В высокотемпературном режиме флуктуаций, когда существенны и флуктуации амплитуды диэлектрической щели *D*, по ним также необходимо произвести усреднение с распределением (62)

$$A(E0) = \int_0^\infty dD \mathcal{P}_D(D) A_D(E0)$$
(233)

Поведение спектральной плотности в высокотемпературном режиме приведено на Рис.56. Щель в спектральной плотности наблюдается при $E < E_{fmin} < \Delta_0$, где $E_{fmin} = min(f_{min}(D))$ (см. Рис.54b). При $E = \Delta_0$ в спектральной плотности наблюдается расходимость, так как $A_D(E0)$ расходиться в этой точке при любом D. При увеличении температуры выше T_{c0} щель и пик в спектральной плотности пропадают,

 $^{^{37}{\}rm B}$ дальнейшем при расчетах принималось $\lambda=0.2,\,\alpha=2/3$



Рис. 55: Спектральная плотность в низкотемпературном режиме диэлектрических флуктуаций. На основной части: $D/T_{c0} = 3$, $\kappa/T_{c0} = 1$, $T_c/T_{c0} = 0.52$. Кривые соответствуют $T/T_{c0} =: 1.0.52; 2.0.8; 3.1.01; 4.1.05$. На вставке а: $D/T_{c0} = 3$, $\kappa/T_{c0} = 1$, $T/T_{c0} = 0.1$, пунктиром – приближение самоусредняемости сверхпроводящей щели, точками – чисто псевдощелевое поведение в нормальной фазе. На вставке b: $D/T_{c0} = 7$, $\kappa/T_{c0} = 1$, $T/T_{c0} = 0.1$, точками – чисто псевдощелевое поведение в нормальной фазе.



Рис. 56: Спектральная плотность в высокотемпературном режиме диэлектрических флуктуаций. На основной части: $W/T_{c0} = 3$, $\kappa/T_{c0} = 1$, $T_c/T_{c0} = 0.61$. Кривые соответствуют $T/T_{c0} =: 1.0.1; 2.0.61; 3.0.8; 4.0.99; 5.1.01$. Точками приведено чисто псевдощелевое поведение в нормальной фазе. На вставке a: $W/T_{c0} = 3$, $\kappa/T_{c0} = 1$, $T/T_{c0} = 0.1$, пунктиром – приближение самоусредняемости сверхпроводящей щели, точками – чисто псевдощелевое поведение в нормальной фазе. На вставке b: $W/T_{c0} = 7$, $\kappa/T_{c0} = 0.1$, $T/T_{c0} = 0.1$, точками – чисто псевдощелевое поведение в нормальной фазе.

но незначительные отличия от чисто псевдощелевого поведения наблюдаются даже выше T_{c0} . В данной модели псевдощелевого состояния уменьшение корреляционной длины ξ_{corr} (увеличение κ) приводит в высокотемпературном режиме флуктуаций к сильному замытию псевдощели в спектральной плотности, поэтому при выбранных для расчетов параметрах ($W/T_{c0} = 3$, $\kappa/T_{c0} = 1$ и соответственно $T_c/T_{c0} = 0.61$) псевдощелевой максимум слабо выражен и сверхпроводяший пик накладывается на него. При увеличении ширины псевдощели и корреляционной длины возможна ситуация, когда сверхпроводящий пик и псевдощелевой максимум разнесены³⁸ (вставка b Рис.56). В этом случае после главного пика спектральной плотности возникает характерный провал ("dip") ³⁹. Подобный провал наблюдался в ARPES-экспериментах [24, 25], а его интерпритация до сих пор вызывает дискуссии.

В предположении самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка сверхпроводящая щель не зависит от случайных параметров η и D и равна среднеполевой щели Δ_{mf} , полученной из уравнения (224) [59]. Сделав в (229) в интеграле по η со второй δ -функцией замену переменных $\eta \to -\eta$, получаем под интегралом одну δ функцию $\delta(f_+^2 - E^2)$, единственный корень которой:

$$\eta = \frac{E^2 - \Delta_{mf}^2 - D^2}{\sqrt{E^2 - \Delta_{mf}^2}}$$
(234)

Тогда, в предположении самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка, в низкотемпературном режиме флуктуаций спектральная плотность имеет вид:

$$A_{Dmf}(E0) = \frac{1}{\pi} \frac{\kappa}{(E^2 - \Delta_{mf}^2 - D^2)^2 + \kappa^2 (E^2 - \Delta_{mf}^2)} \frac{|E|D^2}{\sqrt{E^2 - \Delta_{mf}^2}}$$
(235)

В высокотемпературном режиме флуктуаций необходимо произвести усреднение и по случайной амплитуде *D*:

$$A_{mf}(E0) = \int_0^\infty dD \mathcal{P}_D(D) A_{Dmf}(E0)$$
(236)

³⁸В данной модели псевдощели подобное поведение наблюдается при параметрах ($W/T_{c0} = 7$, $\kappa/T_{c0} = 0.1$), приводящих к нереалистично сильному подавлению критической температуры ($T_c/T_{c0} \approx 0.1$)

³⁹В низкотемпературном режиме диэлектрических флуктуаций соответствующий провал в спектральной плотности (Рис.55) выражен даже более ярко, однако, появляется несколько пиков, не наблюдаемых в ARPES-экспериментах.

Поведение спектральной плотности в стандартном предположении самоусредняемости сверхпроводящей щели в низко и высокотемпературном режимах диэлектрических флуктуаций приведено на вставках а Рис.55 и Рис.56 соответственно. Учет флуктуаций сверхпроводящей щели приводит к существенному изменению поведения спектральной плотности в обоих режимах.

Плотность состояний в данной модели состоит из аддитивных вкладов от "холодных" и "горячих" участков. При конкретной реализации случайного поля (η и D) плотность состояний имеет вид:

$$N_{\eta D}(E) = -\frac{1}{\pi} \sum_{p} ImG^{R} = \alpha N_{0}(0) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_{p} A_{\eta D}(E\xi_{p}) + (1-\alpha)N_{BCS}(E)$$
(237)

На холодных участках, доля которых $1 - \alpha$, взаимодействия с диэлектрическими флуктуациями нет и нормальная функция Грина и вклад в плотность состояний $N_{BCS}(E)$ имеют стандартный для БКШ вид с щелью, но щель, вообще говоря, зависит от η и D.

$$N_{BCS}(E) = N_0(0) \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - \Delta^2(\eta D)}} \theta(E^2 - \Delta^2(\eta D))$$
(238)

На горячих участках $A_D(E\xi_p)$ определяется выражением (229). Интеграл по ξ_p в (237) можно взять и в низкотемпературном режиме флуктуаций усредненная плотность состояний имеет вид:

$$\frac{N_D(E)}{N_0(0)} = \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \mathcal{P}_{\eta}(\eta) \frac{|E|}{\tilde{\varepsilon}} \theta(E^2 - \Delta^2(\eta D)) \left[\alpha \frac{|\tilde{\varepsilon} + \eta/2|}{\sqrt{(\tilde{\varepsilon} + \eta/2)^2 - D^2}} \theta(|\tilde{\varepsilon} + \eta/2| - D) + (1 - \alpha) \right]$$
(239)

где $\tilde{\varepsilon}=\sqrt{E^2-\Delta^2(\eta D)}$

Если мы предполагаем самоусредняемость сверхпроводящего параметра порядка, т.е. полагаем, что $\Delta = \Delta_{mf}$ и не зависит от η и D, то в низкотемпературном режиме флуктуаций (239) можно переписать в виде:

$$\frac{N_{Dmf}(E)}{N_{0}(0)} = \frac{|E|}{\tilde{\varepsilon}} \theta(E^{2} - \Delta_{mf}^{2}) \times$$

$$\times \left[\alpha \left(\int_{D-\tilde{\varepsilon}}^{\infty} d\eta \mathcal{P}_{\eta}(\eta) \frac{|\tilde{\varepsilon} + \eta/2|}{\sqrt{(\tilde{\varepsilon} + \eta/2)^{2} - D^{2}}} + \int_{-\infty}^{-D-\tilde{\varepsilon}} d\eta \mathcal{P}_{\eta}(\eta) \frac{|\tilde{\varepsilon} + \eta/2|}{\sqrt{(\tilde{\varepsilon} + \eta/2)^{2} - D^{2}}} \right) + 1 - \alpha \right]$$
Theorem $\tilde{\varepsilon} = \sqrt{E^{2} - \Delta^{2}}$

где теперь $\tilde{\varepsilon} = \sqrt{E^2 - \Delta_{mf}^2}$

Поведение плотности состояний в низкотемпературном режиме диэлектрических флуктуаций приведено на Рис.57 Учет эффектов несамоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка качественно изменяет поведение плотности состояний (см. вставку Рис.57). Щель в плотности состояний наблюдается при $E < \Delta(0D) <$ Δ_{mf} . Введем характерную температуру T_{cc} , соответствующую обращению в ноль $\Delta(0D)$. При увеличении температуры выше T_{cc} щель в плотности состояний пропадает. Плотность состояний качественно не изменяется при переходе через среднеполевую температуру сверхпроводящего перехода T_c . Введем величину $g(\eta)$ = $\sqrt{(D - \eta/2)^2 + \Delta^2(\eta D)}$, поведение которой приведено на Рис.54а и которая имеет минимум g_{min} при $\eta/2 \sim D$. При $\Delta(0D) < E < min(g_{min}; \Delta_0)$ вклад в плотность состояний дают только "холодные" участки (второе слагаемое в (239)). Плотность состояний испытывает скачки при $E = g_{min}$ и $E = \Delta_0$, которые пропадают при температурах выше T_{c0} . Пик в плотности состояний наблюдается при $E = \Delta_{max} > g_{min}; \Delta_0$, где Δ_{max} – максимум $\Delta(\eta)$, наблюдающийся при $\eta/2 \sim D$ (см.Рис.54а). Таким образом, в низкотемпературном режиме флуктуаций сверхпроводящая щель, определенная по пикам в плотности состояний, будет соответствовать $\Delta_{max} > \Delta_0 > \Delta_{mf}$ и пики в плотности состояний сохраняются даже при $T > T_{c0}$.

В высокотемпературном режиме диэлектрических флуктуаций необходимо провести усреднение и по амплитуде диэлектрической щели D:

$$\frac{N(E)}{N_0(0)} = \int_0^\infty dD \mathcal{P}_D(D) \frac{N_D(E)}{N_0(0)}$$
(241)

В предположении самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка:

$$\frac{N_{mf}(E)}{N_0(0)} = \frac{|E|}{\tilde{\varepsilon}} \theta(E^2 - \Delta_{mf}^2) \left[\alpha \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \mathcal{P}_{\eta}(\eta) \int_{0}^{|\tilde{\varepsilon} + \eta/2|} dD \mathcal{P}_{D}(D) \frac{|\tilde{\varepsilon} + \eta/2|}{\sqrt{(\tilde{\varepsilon} + \eta/2)^2 - D^2}} + 1 - \alpha \right]$$
(242)

В пределе бесконечной корреляционной длины (*к* → 0) выражения (241) и (242) переходят в полученные в предыдущем разделе и [57] в модели псевдощелевого состояния с бесконечной корреляционной длиной диэлектрических флуктуаций.

Поведение плотности состояний в высокотемпературном режиме диэлектрических флуктуаций приведено на Рис.58 Учет эффектов несамоусредняемости сверх-



Рис. 57: Плотность состояний в низкотемпературном режиме диэлектрических флуктуаций. На основной части: $D/T_{c0} = 3$, $\kappa/T_{c0} = 1$, $T_{cc}/T_{c0} = 0.33$, $T_c/T_{c0} = 0.52$. Кривые соответствуют $T/T_{c0} =: 1.0.33$; 2.0.52; 3.0.9; 4.1; 5.1.01. Точками приведено чисто псевдощелевое поведение в нормальной фазе. На вставке: $D/T_{c0} = 3$, $\kappa/T_{c0} = 1$, $T/T_{c0} = 0.1$, пунктиром – приближение самоусредняемости сверхпроводящей щели, точками – чисто псевдощелевое поведение в нормальной фазе.



Рис. 58: Плотность состояний в высокотемпературном режиме диэлектрических флуктуаций. На основной части: $W/T_{c0} = 3$, $\kappa/T_{c0} = 1$, $T_c/T_{c0} = 0.61$. Кривые соответствуют $T/T_{c0} =: 1.0.2; 2.0.5; 3.0.61; 4.0.8; 5.1.01$. Точками приведено чисто псевдошелевое поведение в нормальной фазе. На вставке: $W/T_{c0} = 3$, $\kappa/T_{c0} = 1$, $T/T_{c0} = 0.1$, пунктиром – приближение самоусредняемости сверхпроводящей щели, точками – чисто псевдощелевое поведение в нормальной фазе.

проводящего параметра порядка сильно сказывается на поведении плотности состояний (см. вставку Рис.58). Щель в плотности состояний отсутствует⁴⁰ (хотя мы рассматриваем случай S – спаривания!). При $E < E_{gmin} = min(g_{min}(D))$ (см. Рис.54b) вклад в плотность состояний дают только "холодные" участки поверхности Ферми и при $E = E_{min}$, когда впервые появляется вклад от "горячих" участков, в плотности состояний наблюдается излом, который связан с особенностью выбранной модели поверхности Ферми (жесткое разделение на "холодные" и "горячие" участки). Максимум в плотности состояний наблюдается при $E = \Delta_0$. Таким образом, ширина сверхпроводящей щели, определяемая по расстоянию между пиками в плотности состояний, соответствует Δ_0 , а не Δ_{mf} . Плотность состояний не чувствует перехода через среднеполевую критическую температуру T_c , пики в плотности состояний пропадают лишь при $T = T_{c0} > T_c$, а незначительные отличия от чисто псевдощелевой плотности состояний в нормальной фазе наблюдаются даже при $T > T_{c0}$.

Заключение

В данном разделе проведено изучение особенностей спектральной плотности и плотности состояний сверхпроводника в рамках чрезвычайно упрощенной модели псевдощели в двумерной электронной системе, допускающей точное решение [59, 86]. Основными достоинствами данной модели является: возможность учета эффектов несамоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка, т.е. учета существенных флуктуаций сверхпроводящей щели, наблюдающихся [57, 112, 59] в присутствии сильных флуктуаций "диэлектрического" ближнего порядка, а также возможность рассмотрения корреляционной длины ближнего порядка ξ_{corr} произвольной величины (в отличие от $\xi_{corr} \rightarrow \infty$ в предыдущем разделе и [57]).

Учет эффектов несамоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка по случайному полю "диэлектрических" флуктуаций приводит к существенному изменению спектральной плотности и плотности состояний. Сверхпроводящие особенности в этих характеристиках сохраняются в широкой области температур выше

⁴⁰Щель возникает лишь при очень низких температурах $T < T_{c\infty} = T_{c0}(\tilde{\lambda} = \lambda(1 - \alpha))$, таких что $\Delta(0D \to \infty)$ отлична от нуля [57].

температуры T_c сверхпроводящего перехода однородного по образцу, где сверхпроводимость существует, по-видимому, в отдельных областях ("каплях") [57, 112, 59], возникающих из-за случайных флуктуаций локальной плотности электронных состояний. Полученные особенности коррелируют с рядом аномалий, наблюдавшихся в сверхпроводящем состоянии недодопированных ВТСП-купратов.

4.3 Сверхпроводимость в псевдощелевом состоянии в модели "горячих точек".

В предыдущих разделах этой главы была рассмотрена сверхпроводимость в упрощенной модели псевдощелевого состояния, основанной на предположении о существовании "горячих" (плоских) участков на поверхности Ферми [56, 57, 58, 59]. В рамках этой модели было построено разложение Гинзбурга – Ландау для различных типов куперовского спаривания [56, 58] и проведено исследование особенностей сверхпроводящего состояния в области $T < T_c$ на основе анализа решений уравнений Горькова [57, 58, 59] (см. раздел 4.1.2). В таком подходе в предельно упрощенной точно решаемой модели [57, 59], нам удалось в разделе 4.2 проанализировать роль эффектов несамоусредняемости [57, 59].

Целью настоящего раздела является анализ основных свойств сверхпроводящего состояния (для различных типов спаривания), возникающего "на фоне" псевдощели "диэлектрической" природы в более реалистической модели "горячих точек" на поверхности Ферми. Дальнейшие изложение в этом разделе основано на работах [122, 123, 124, 125].

В начале этой главы были проанализированы особенности сверхпроводящего состояния в точно решаемой модели псевдощелевого состояния, вызванного флуктуациями ближнего порядка с бесконечной корреляционной длиной ($\xi \rightarrow \infty$) [56, 57]. В частности, было показано, что эти флуктуации могут приводить к сильным флуктуациям сверхпроводящего параметра порядка (энергетической щели Δ), нарушающим стандартное предположение о самоусредняемости щели [105, 113, 12], которое позволяет независимо усреднять (по конфигурациям случайного поля статических флуктуаций ближнего порядка) параметр порядка Δ и различные комбинации электронных функций Грина, входящие в основные уравнения теории. Обычная аргументация в пользу возможности такого независимого усреднения состоит в следующем [105, 12]: величина Δ изменяется на характерных масштабах длины порядка длины когерентности $\xi_0 \sim v_F/\Delta_0$ теории БКШ, тогда как функции Грина быстро меняются на значительно меньших масштабах порядка межатомных расстояний. Естественно, что последнее предположение становится неверным, если в электронной подсистеме появляется новая характерная длина $\xi \to \infty$. Вместе с тем, в условиях, когда корреляционная длина ближнего порядка $\xi \ll \xi_0$ (т.е. когда флуктуации коррелируют на расстояниях меньше характерного размера куперовских пар), предположение о самоусредняемости Δ должно сохраняться, нарушаясь только в области $\xi > \xi_0$. ⁴¹ Поэтому ниже все рассмотрение проводится в предположении самоусредняемости энергетической щели сверхпроводника по флуктуациям ближнего порядка, что позволяет использовать стандартный подход теории неупорядоченных сверхпроводников [105, 113] (среднеполевое приближение в терминологии работы [57]).

Перейдем к рассмотрению сверхпроводимости в системе с развитыми флуктуациями ближнего порядка, описываемыми в более реалистичной модели "горячих точек". Предположим, что сверхпроводящее спаривание обусловлено потенциалом притяжения, действующим между электронами с противоположными спинами, следующего простейшего (БКШ) вида:

$$V_{sc}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = -Ve(\mathbf{p})e(\mathbf{p}'), \qquad (243)$$

где для множителя $e(\mathbf{p})$, определяющего симметрию спаривания, принимаем:

$$e(\mathbf{p}) = \begin{cases} 1 & (s-\text{спаривание})\\ \cos(p_x a) - \cos(p_y a) & (d_{x^2-y^2}-\text{спариваниe})\\ \sin(p_x a)\sin(p_y a) & (d_{xy}-\text{спариваниe})\\ \cos(p_x a) + \cos(p_y a) & (\text{анизотропное } s-\text{спариваниe}) \end{cases}$$
(244)

Константа притяжения V, как обычно, считается отличной от нуля в некотором слое шириной $2\omega_c$ в окрестности уровня Ферми (ω_c - характерная частота квантов, обес-

⁴¹Отсутствие самоусредняемости сверхпроводящей щели даже в области ξ < ξ₀, полученное в модели Бартоша и Копица [59] в предыдущем разделе главы, связано, по-видимому, с специфическим характером модели Бартоша и Копица, использованной для описания ближнего порядка.

печивающая притяжение электронов). В общем случае сверхпроводящая щель анизотропна и имеет вид:

$$\Delta(\mathbf{p}) = \Delta e(\mathbf{p}) \tag{245}$$

Далее мы будем рассматривать только синглетное спаривание.

4.3.1 Разложение Гинзбурга-Ландау.

Куперовская неустойчивость. Рекуррентная процедура для вершинной части.

Критическая температура может быть определена из уравнения для куперовской неустойчивости нормальной фазы (181), где обобщенная куперовская восприимчивость определяется графиком Рис. 42 и равна:

$$\chi(\mathbf{q};T) = -T \sum_{\varepsilon_n} \sum_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} e(\mathbf{p}) e(\mathbf{p}') \Phi_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q})$$
(246)

где $\Phi_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, q)$ – двухчастичная функция Грина в куперовском канале, учитывающая процессы рассеяния на флуктуациях ближнего порядка.

Рассмотрим сначала случай зарядовых (CDW) флуктуаций, когда взаимодействие не зависит от спиновых переменных. В случае *s* и d_{xy} спаривания сверхпроводящая щель при перебросе на **Q** остается неизменной, т.е. $e(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) = e(\mathbf{p})$, тогда $e(\mathbf{p}') \approx e(\mathbf{p})$. В случае анизотропного *s* и $d_{x^2-y^2}$ спаривания сверхпроводящая щель при перебросе на **Q** меняет знак ($e(\mathbf{p}+\mathbf{Q}) = -e(\mathbf{p})$), поэтому $e(\mathbf{p}') \approx e(\mathbf{p})$ при $\mathbf{p}' \approx \mathbf{p}$ и $e(\mathbf{p}') \approx -e(\mathbf{p})$ при $\mathbf{p}' \approx \mathbf{p} + \mathbf{Q}$. Таким образом для диаграмм, содержащих четное число линий взаимодействия, связывающих верхнюю (ε_n) и нижнюю ($-\varepsilon_n$) электронные линии, $\mathbf{p}' \approx \mathbf{p}$ и мы имеем точно такое же выражение для вклада в восприимчивость, как для случая *s* и d_{xy} спаривания. Для диаграмм же, содержащих нечетное число таких линий взаимодействия мы имеем выражение для вклада в восприимчивость, отличающееся знаком. Такое изменение знака можно просто приписать изменению знака взаимодействия, связывающего верхнюю и нижнюю электронные линии в петле Рис. 42. Тогда для обобщенной восприимчивости получаем:

$$\chi(\mathbf{q};T) = -T \sum_{\varepsilon_n} \sum_{\mathbf{p}} G(\varepsilon_n \mathbf{p} + \mathbf{q}) G(-\varepsilon_n, -\mathbf{p}) e^2(\mathbf{p}) \Gamma^{\pm}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q})$$
(247)

Пары	CDW	SDW - I	SDW - H
s	+	—	+
$d_{x^2-y^2}$	—	+	—
as	_	+	_
d_{xy}	+	—	+

Таблица 1: Выбор знака в рекуррентной процедуре для вершинной части.

где $\Gamma^{\pm}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q})$ – "треугольная" вершинная часть, учитывающая взаимодействие с флуктуациями ближнего порядка, где индекс \pm учитывает отмеченное выше отличие знаков взаимодействия, связывающего верхнюю и нижнюю электронные линии.

Перейдем к случаю рассеяния на спиновых (AFM(SDW)) флуктуациях. В этом случае линии взаимодействия с продольной компонентой спина S^z , охватывающей вершину, меняющую направление спина, следует приписать дополнительный множитель (-1), а у линии взаимодействия с поперечными компонентами спина такого множителя не возникает [63]. С этой точки зрения, в случае взаимодействия с изинговскими ⁴² спиновыми флуктуациями (SDW-I), рассмотренные выше типы спаривания "меняются местами" ⁴³ и обобщенная куперовская восприимчивость для *s* и d_{xy} спаривания определяется "треугольной" вершиной Γ^- , а для анизотропного *s* и $d_{x^2-y^2}$ спаривания – "треугольной" вершиной Γ^+ . В случае взаимодействия с гейзенберговскими спиновыми флуктуациями (SDW-H) ситуация снова становится спова аналогичной зарядовым флуктуациям (CDW) (детали см. в Приложении D). Набор соответствующих знаков вершины Γ^{\pm} в зависимости от типа спаривания и вида флуктуаций приведен в Таблице 1. Отметим, что в особо интересующем нас для описания купратов случае $d_{x^2-y^2}$ спаривания и гейзенберговских спиновых флуктуаций, мы имеем Γ^- .

Таким образом возникает проблема вычисления "треугольных" вершин, учитывающих взаимодействие с диэлектрическими флуктуациями. Для одномерного аналога нашей задачи (и для действительных частот, T = 0) соответствующая рекуррентная

⁴²Когда в качестве модели взаимодействия электронного и локального флуктуирующего спина используется модель Изинга.

⁴³Это связано с тем обстоятельством, что в вершине взаимодействия со сверхпроводящей щелью происходит смена знака проекции спина (рассматривается только синглетное спаривание).



Рис. 59: Рекуррентные уравнения для вершинной части.

процедура была впервые сформулирована в работах [51]. Для рассматриваемой здесь двумерной модели псевдощели с "горячими" точками на поверхности Ферми обобщение этой рекуррентной процедуры было проведено в работе [70], в связи с расчетами оптической проводимости. В этой же работе можно найти все подробности соответствующего вывода. Обобщение на нужный нам здесь случай мацубаровских частот проводится непосредственно. Ниже, для определенности, считаем $\varepsilon_n > 0$. Интересующую нас вершину удобно записать как:

$$\Gamma(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{p}, -\mathbf{p} + \mathbf{q}) \equiv \Gamma^{\pm}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q})e(\mathbf{p})$$
(248)

В итоге для такой "треугольной" вершины получаем рекуррентное соотношение, представленное графиками Рис. 59 (где волнистая линия обозначает взаимодействие со спиновыми флуктуациями), и имеющее следующий аналитический вид:

$$\Gamma_{k-1}^{\pm}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) =$$

$$= 1 \pm W^2 r(k) G_k \bar{G}_k \left\{ 1 + \frac{2ikv_k\kappa}{G_k^{-1} - \bar{G}_k^{-1} - 2ikv_k\kappa} \right\} \Gamma_k^{\pm}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q})$$
(249)

где $G_k = G_k(\varepsilon_n \mathbf{p} + \mathbf{q})$ и $\bar{G}_k = G_k(-\varepsilon_n, -\mathbf{p})$ вычисляются согласно (46), а v_k определяется (43).

Дополнительный комбинаторный множитель r(k) = s(k) для простейшего случая зарядовых (или изинговских спиновых) псевдощелевых флуктуаций рассматривав-

шихся в [122]. Для наиболее интересного случая гейзенберговских спиновых (SDW) флуктуаций этот множитель равен [63, 124] (см. также Приложение D):

$$r(k) = \begin{cases} k & \text{при четных } k \\ \frac{k+2}{9} & \text{при нечетных } k \end{cases}$$
(250)

"Физическая" вершина определяется как $\Gamma^{\pm}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) \equiv \Gamma_0^{\pm}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q}).$

Для нахождения T_c нас интересует вершины при $\mathbf{q} = 0$. Тогда $\bar{G}_k = G_k^*$ и вершины Γ_k^+ и Γ_k^- становятся вещественными, что существенно упрощает процедуры (249). Для ImG_k , ReG_k имеем следующую систему рекуррентных уравнений:

$$ImG_{k} = -\frac{\varepsilon_{n} + kv_{k}\kappa - W^{2}s(k+1)ImG_{k+1}}{D_{k}}$$
$$ReG_{k} = -\frac{\xi_{k}(\mathbf{p}) + W^{2}s(k+1)ReG_{k+1}}{D_{k}}$$
(251)

где $D_k = (\xi_k(\mathbf{p}) + W^2 s(k+1) ReG_{k+1})^2 + (\varepsilon_n + kv_k \kappa - W^2 s(k+1) ImG_{k+1})^2$, а вершинная часть при $\mathbf{q} = 0$ определяется из:

$$\Gamma_{k-1}^{\pm} = 1 \mp W^2 r(k) \frac{ImG_k}{\varepsilon_n - W^2 s(k+1)ImG_{k+1}} \Gamma_k^{\pm}$$
(252)

Влияние примесей.

Влияние рассеяния на нормальных (немагнитных) примесях легко учесть в самосогласованном борновском приближении, записав для одноэлектронной функции Грина "уравнение Дайсона", показанное графически на Рис. 60 (а), где, по сравнению с Рис. 11, добавлен стандартный вклад в собственно – энергетическую часть от примесного рассеяния [119]. В результате, рекуррентное уравнение для функции Грина записывается в виде:

$$G_k(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{1}{G_{0k}^{-1}(\varepsilon_n \mathbf{p}) - \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} G(\varepsilon_n \mathbf{p}) - W^2 s(k+1) G_{k+1}(\varepsilon_n \mathbf{p})}$$
(253)

где ρ – концентрация примесей с точечным потенциалом U, а в "примесную" собственно – энергетическую часть входит полная функция Грина $G(\varepsilon_n \mathbf{p}) = G_{k=0}(\varepsilon_n \mathbf{p})$, которая, в общем случае, должна определяться самосогласованным образом с помощью выписанной процедуры. Вклад в эту собственно – энергетическую часть от



Рис. 60: Рекуррентные уравнения для функции Грина (a) и "треугольной" вершины (b) с учетом рассеяния на примесях.

действительной части функции Грина обычным образом [119] сводится к несущественной перенормировке химического потенциала, так что (253) сводится к:

$$G_k(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{1}{i(\varepsilon_n - \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} ImG(\varepsilon_n \mathbf{p}) + kv_k \kappa) - \xi_k(\mathbf{p}) - W^2 s(k+1)G_{k+1}(\varepsilon_n \mathbf{p})} \quad (254)$$

Поэтому, по сравнению с беспримесным случаем, фактически, происходит замена (перенормировка):

$$\varepsilon_n \to \varepsilon_n - \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} ImG(\varepsilon_n \mathbf{p}) \equiv \varepsilon_n \eta_\epsilon$$
 (255)

$$\eta_{\epsilon} = 1 - \frac{\rho U^2}{\varepsilon_n} \sum_{\mathbf{p}} ImG(\varepsilon_n \mathbf{p})$$
(256)

Если не проводить полного самосогласования в собственно – энергетической части примесного рассеяния, то, в простейшем приближении, имеем просто:

$$\varepsilon_n \to \varepsilon_n - \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} Im G_{00}(\varepsilon_n \mathbf{p}) \equiv \varepsilon_n \eta_\epsilon = \varepsilon_n + \gamma_0 sign \varepsilon_n$$
 (257)

$$\eta_{\epsilon} = 1 + \frac{\gamma_0}{|\varepsilon_n|} \tag{258}$$

где $\gamma_0 = \pi \rho U^2 N_0(0)$ – стандартная борновская частота рассеяния на примесях [119] $(N_0(0)$ – плотность состояний свободных электронов на уровне Ферми).

Для интересующих нас "треугольных" вершин рекуррентное уравнение, учитывающее рассеяние на примесях, имеет графический вид, показанный на Рис. 60 (b). Для вершины, описывающей взаимодействие с флуктуацией сверхпроводящего параметра порядка (245) с симметрией $d_{x^2-y^2}$ – типа (143) это уравнение существенно упрощается, поскольку вклад второй диаграммы в правой части Рис. 60 (b), фактически равен нулю в силу условия $\sum_{\mathbf{p}} e(\mathbf{p}) = 0$ (ср. обсуждение аналогичной ситуации в [56]). Тогда рекуррентное уравнение для вершины имеет вид (182), где в качестве $G_k(\pm \varepsilon_n \mathbf{p})$ следует использовать выражения, определяемые из (253), (254), т.е. просто "одетые" примесным рассеянием функции Грина, определяемые Рис. 60 (a). Для вершины, описывающей взаимодействие с флуктуацией параметра порядка с *s* – симметрией, имеем уравнение:

$$\Gamma_{\mathbf{p}k-1}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) = 1 + \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} G(\varepsilon_n, \mathbf{p} + \mathbf{q}) G(-\varepsilon_n, \mathbf{p}) \Gamma_{\mathbf{p}}(\varepsilon, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) \pm$$
(259)

$$\pm W^2 r(k) G_k(\varepsilon_n, \mathbf{p} + \mathbf{q}) G_k(-\varepsilon_n, \mathbf{p}) \left\{ 1 + \frac{2ik\kappa v_k}{G_k^{-1}(\varepsilon_n, \mathbf{p} + \mathbf{q}) - G_k^{-1}(-\varepsilon_n, \mathbf{p}) - 2ik\kappa v_k} \right\} \times \Gamma_{\mathbf{p}k}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q})$$

где для $G_k(\pm \varepsilon_n \mathbf{p})$ снова следует использовать выражения (253), (254), а знак перед W^2 определяется в соответствии с изложенными выше правилами. Отличие от случая вершины взаимодействия с флуктуациями d – симметрии состоит в появлении второго члена в правой части (259), т.е. в замене:

$$1 \to \eta_{\Gamma} = 1 + \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} G(\varepsilon_n, \mathbf{p} + \mathbf{q}) G(-\varepsilon_n, \mathbf{p}) \Gamma_{\mathbf{p}}(\varepsilon, -\varepsilon_n, \mathbf{q})$$
(260)

Поэтому процедура самосогласованного счета выглядит теперь следующим образом. Стартуем с "нулевого" приближения $G = G_{00}$, $\Gamma_{\mathbf{p}} = 1$, тогда в уравнениях (254), (259) имеем просто $\eta_{\varepsilon} = \eta_{\Gamma} = 1 - \rho U^2 / \varepsilon_n \sum_{\mathbf{p}} Im G_{00}(\varepsilon_n \mathbf{p})$. "Прогоняем" соответствующие рекуррентные процедуры (начиная с некоторого достаточно большого значения k) и определяем новые значения $G = G_{k=0}$ и $\Gamma_{\mathbf{p}} = \Gamma_{k=0}$. Снова вычисляем η_{ε} и η_{Γ} с помощью (256) и (260), используем эти значения в (254), (259) и т. д., до достижения сходимости.

При рассмотрении вершины d – симметрии следует просто считать $\eta_{\Gamma} = 1$ на всех этапах расчета. Фактически, в этом случае нет особой нужды проводить полное самосогласование по примесному рассеянию, т.к. оно приводит к сравнительно незначительным поправкам к результатам несамосогласованного расчета с использованием простейшей замены (257) [123].

Расчеты критической температуры.

Переходя к численным расчетам удобно задать характерный масштаб энергий (температур), характеризующий сверхпроводящее состояние в нашей модели в отсутствие псевдощелевых флуктуаций (W = 0). В этом случае уравнение для соответствующей температуры сверхпроводящего перехода T_{c0} имеет стандартный вид теории БКШ (для общего случая анизотропного спаривания) и может быть записано в следующем виде:

$$1 = \frac{2VT}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\bar{m}} \int_0^{\pi} dp_x \int_0^{\pi} dp_y \frac{e^2(\mathbf{p})}{\xi_{\mathbf{p}}^2 + \varepsilon_n^2}$$
(261)

где $\bar{m} = \left[\frac{\omega_c}{2\pi T_{c0}}\right]$ – безразмерный параметр обрезания суммы по мацубаровским частотам. Все расчеты проводились для типичного спектра квазичастиц в ВТСП (35) с $\mu = -1.3t$ и t'/t = -0.4. Выбирая, достаточно произвольно, $\omega_c = 0.4t$ и $T_{c0} = 0.01t$ можно легко подобрать значения параметра спаривания V в (261), дающее такое значение T_{c0} для различных типов спаривания, перечисленных в (244). В частности, для обычного изотропного спаривания *s*-типа получаем $\frac{V}{ta^2} = 1$, а для $d_{x^2-y^2}$ спаривания имеем $\frac{V}{ta^2} = 0.55$. Для остальных типов спаривания из (244) значения спаривательной константы при таком выборе параметров оказываются нереалистически большими и мы не приводим результаты соответствующих расчетов ⁴⁴.

Типичные результаты численных расчетов температуры сверхпроводящего пере-

⁴⁴Разумеется такое описание, на основе уравнений теории слабой связи БКШ, не претендует на реалистичность и в рассматриваемых случаях *s* и $d_{x^2-y^2}$ спаривания. Нам просто нужно задать характерный масштаб T_{c0} , чтобы в дальнейшем все температуры выражать в единицах этой температуры, предполагая, что в рассматриваемой задаче имеется определенная универсальность по отношению к этому масштабу.



Рис. 61: Зависимость температуры сверхпроводящего перехода T_c/T_{c0} от эффективной ширины псевдощели W/T_{c0} . Слева – для спаривания *s*-типа и рассеяния на зарядовых (CDW) флуктуациях (кривые s1 и s2) и для спаривания $d_{x^2-y^2}$ -типа и рассеяния на изинговских спиновых (SDW-I) флуктуациях (кривые d1 и d2). Данные приведены для значений обратной корреляционной длины $\kappa a = 0.2$ (s1 и d1), $\kappa a = 0.5$ (s2 и d2). Справа – для спаривания *s*-типа и рассеяния на изинговских спиновых (SDW-I) флуктуациях (кривые d1 и d2). Данные приведены для значений обратной корреляционной $d_{x^2-y^2}$ -типа и рассеяния на зарядовых (CDW) флуктуациях (кривые s1 и s2) и для спаривания $d_{x^2-y^2}$ -типа и рассеяния на зарядовых (CDW) флуктуациях (кривые d1 и d2). Данные приведены для значений обратной корреляционной длины $\kappa a = 0.2$ (s1 и d1), $\kappa a = 1.0$ (s2 и d2).

хода T_c для системы с псевдощелью, полученные с использованием описанных выше рекуррентных уравнений непосредственно из (181) представлены на Рис. 61. Видим, что во всех случаях псевдощелевые ("диэлектрические") флуктуации приводят к существенному понижению температуры сверхпроводящего перехода. При этом $d_{x^2-y^2}$ спаривание подавляется заметно быстрее изотропного *s* спаривания. ⁴⁵ В тоже время, уменьшение корреляционной длины ξ (рост параметра κ) псевдощелевых флуктуаций способствует росту T_c . Эти результаты вполне аналогичны полученным ранее в модели "горячих участков" [56, 58]. Однако возникают и существенные качественные отличия. Из левой панели Рис. 61 видно, что для случая спаривания $d_{x^2-y^2}$ -типа и рассеяния на зарядовых (CDW) флуктуациях, также как и для спаривания $d_{x^2-y^2}$ -типа и рассеяния на изинговских спиновых (SDW-I) флуктуациях (т.е. в тех случаях, когда

 $^{^{45}}$ В случае d_{xy} спаривания и рассеяния на зарядовых флуктуациях подавление T_c незначительно. Причина в том, что сверхпроводящая щель находиться в противофазе с псевдощелью, когда сверхпроводящая щель максимальна (в направлении диагонали зоны Бриллюэна), псевдощель минимальна.

"работает" верхний знак в (249) и (252), приводящий к знакопостоянной рекуррентной процедуре для вершины), в зависимости T_c от ширины псевдощели W имеется характерная "полочка" в области $W < 10T_{c0}$, а существенное подавление T_c происходит на масштабе $W \sim 50 T_{c0}$. Качественные отличия возникают и в случае спаривания s-типа и рассеяния на изинговских спиновых (SDW-I) флуктуациях, также как и в случае $d_{x^2-y^2}$ спаривания и рассеяния на зарядовых флуктуациях. Из правой панели Рис. 61 видим, что в этом случае (когда "работает" нижний знак в (249), (252), т.е. возникает знакопеременная процедура для вершины) подавление T_c происходит на порядок быстрее. При этом, для случая $d_{x^2-y_2}$ спаривания, в области значений W/T_{c0}, соответствующих почти полному подавлению сверхпроводимости, возникает характерная неоднозначность T_c, соответствующая возможности существования на фазовой диаграмме узкой области "возвратной" сверхпроводимости ⁴⁶. Такое поведение T_c несколько напоминает аналогичные особенности, возникающие в сверхпроводниках с кондовскими примесями [126]. Однако наши дальнейшие расчеты (см. следующий раздел 4.3.2) показывают, что наиболее вероятным здесь является возникновение критического значения параметра W/T_{c0} , при котором сверхпроводимость полностью подавляется. При этом возможно возникновение здесь области, в которой переход в сверхпроводящее состояние становится фазовым переходом I рода, аналогично известной ситуации в сверхпроводниках с сильным парамагнитным эффектом во внешнем магнитном поле [127]. В любом случае, возникающие здесь эффекты заслуживает отдельного исследования, а в дальнейшем все результаты приводятся только для области однозначного поведения T_c .

Таким образом, мы видим, что можно выделить два класса систем с довольно различными свойствами в зависимости от знака в Таблице 1, т.е. от того знакопостоянная или знакопеременная рекуррентная процедура возникает для вершины. Этот вывод полностью подтверждается и дальнейшими расчетами.

Теперь заимемся наиболее интересным для купратов случаем спаривания $d_{x^2-y^2}$ -

⁴⁶Проявления такого необычного поведения *T_c* усиливаются при рассмотрении рассеяния на несоизмеримых псевдощелевых флуктуациях.



Рис. 62: Зависимость критической температуры от амплитуды псевдощели в случае $d_{x^2-y^2}$ – спаривания и рассеяния на гейзенберговских псевдощелевых флуктуациях (SDW-H). Слева — для двух значений корреляционной длины ($\kappa a = 0.2$ и $\kappa a = 0.5$). Справа — для нескольких значений частоты примесного рассеяния, приведенных на рисунке. На вставке справа показана зависимость критической температуры от степени беспорядка для трех значение $W/T_{c0} = 0, 2.8, 5.5$ и $\kappa a = 0.2$.

типа и рассеяния на гейзенберговских спиновых (SDW-H), в котором для вершины возникает знакопеременная рекуррентная процедура. На левой панели Рис. 62 показаны зависимости температуры сверхпроводящего перехода T_c от эффективной ширины псевдощели W для двух значений корреляционной длины ($\kappa a = 0.2$ и $\kappa a = 0.5$). Видно, что здесь псевдощелевые флуктуации, аналогично правой панели Рис. 61, приводят к заметному подавлению сверхпроводимости. Такое подавление T_c естественно связано с частичной "диэлектризацией" электронного спектра в окрестности "горячих точек" [63, 64]. На правой панели Рис. 62 показана зависимость температуры сверхпроводящего перехода T_c от эффективной ширины псевдощели W для нескольких значений частоты примесного рассеяния и $\kappa a = 0.2$. Видим, что беспорядок даже усиливает подавление сверхпроводимости псевдощелевыми флуктуациями и в присутствии конечного беспорядка возникает "критическое" значение W, при котором величина T_c обращается в нуль. На вставке Рис. 62 показаны зависимости температуры сверхпроводящего перехода T_c от частоты рассеяния на примесях γ_0 для нескольких значений эффективной ширины псевдощели. Видно, что при наличии пседощелевых флуктуаций подавление T_c с ростом беспорядка происходит заметно быстрее, чем это происходит в их отсутствие (W = 0), когда зависимость T_c от γ_0 в случае $d_{x^2-y^2}$ – спаривания описывается стандартной кривой Абрикосова – Горькова [56, 128]. Сверхпроводимость полностью подавляется при некотором критическом значении $\gamma_0 = \gamma_{cr} \sim T_{c0}$. Здесь частота примесного рассеяния γ_0 нормирована на $T = T_{c0}(W)$, т.е. "затравочное" значение температуры перехода при заданном значении W, но в отсутствии примесного рассеяния ($\gamma_0 = 0$).

Найденные зависимости находятся в качественном соответствии с рядом данных, полученных в экспериментах по изучению сверхпроводимости в области существования псевдощели (область недодопированных составов на фазовой диаграмме купратов). Ниже будет показано, что полученные результаты могут быть использованы для непосредственного моделирования типичной фазовой диаграммы ВТСП купратов.

Рассмотрение случая s – спаривания в присутствии SDW-H флуктуаций представляет интерес, в основном, с точки зрения выявления характерных отличий от случая спаривания $d_{x^2-y^2}$ – типа, т.к. экспериментальные данные по сверхпроводимости s – типа в системах с псевдощелью практически отсутствуют, хотя и не исключено, что соответствующие системы будут открыты в будущем.

Наши расчеты показывают, что характерный масштаб псевдощелевых флуктуации, необходимый для существенного подавления сверхпроводимости в случае s – спаривания (Рис. 63), значительно выше, чем в случае спаривания $d_{x^2-y^2}$ – типа. На Рис. 63 видно также, что при некотором значении псевдощели происходит изменение влияния примесей на T_c : сначала беспорядок подавляет сверхпроводимость, а при дальнейшем росте W способствует росту T_c . На вставке Рис. 63 показаны результаты расчетов для зависимости T_c от частоты рассеяния на примесях (беспорядка). Наряду с относительно слабым эффектом подавления T_c беспорядком, связанным [123] с размытием плотности состояний на уровне Ферми, может наблюдаться и слабый эффект повышения T_c с ростом γ_0 , связанный, по видимому, с эффектом "замытия"



Рис. 63: Зависимость критической температуры от амплитуды псевдощели в случае s – спаривания и рассеяния на SDW-H флуктуациях для разных значений частоты примесного рассеяния $\gamma_0/T_{c0} = 0, 0.18, 0.64$. На вставке показана зависимость критической температуры от степени беспорядка для трех значений $W/T_{c0} = 0, 8, 15$ и $\kappa a = 0.2$.

псевдощели в плотности состояний примесным рассеянием [124].

Разложение Гинзбурга – Ландау.

В работе [56] было построено разложение Гинзбурга – Ландау в точно решаемой модели псевдощели с бесконечной корреляционной длиной флуктуаций ближнего порядка. В работе [58] эти результаты были развиты для случая конечных корреляционных длин (см. раздел 4.1.2). В этих работах и в разделе 4.1 этой главы, фактически, рассматривался лишь случай зарядовых флуктуации и использовалась простая модель псевдощелевого состояния, основанная на представлении о существовании "горячих" (плоских) участков на поверхности Ферми. В этой модели знак сверхпроводящей щели оставался неизменным при перебросе на вектор **Q** как для *s*, так и для *d* спаривания [58]. Здесь мы проведем обобщение на более реалистичный случай рассматриваемой нами модели "горячих" точек на поверхности Ферми.

Разложение Гинзбурга-Ландау для разности плотностей свободных энергий сверхпроводящего и нормального состояний записываем в стандартном виде (186), где $\Delta_{\mathbf{q}}$



Рис. 64: Графический вид разложения Гинзбурга - Ландау.

- амплитуда фурье-компоненты параметра порядка, который для различных типов спаривания записывается в виде: $\Delta(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \Delta_q e(\mathbf{p})$. Разложение (186) определяется графиками петлевого разложения для свободной энергии в поле флуктуаций параметра порядка (обозначенных пунктирными линиями) с малым волновым вектором \mathbf{q} [56], показанными на Рис. 64.

Коэффициенты Гинзбурга-Ландау, как и при анализе в модели "горячих участков", удобно представить в виде:

$$A = A_0 K_A;$$
 $C = C_0 K_C;$ $B = B_0 K_B,$ (262)

где через A_0 , C_0 и B_0 обозначены полученные в Приложении Е выражения для этих коэффициентов в отсутствие псевдощелевых флуктуаций (W = 0) для случая произвольного спектра ξ_p и различных типов спаривания:

$$A_{0} = N_{0}(0) \frac{T - T_{c}}{T_{c}} < e^{2}(\mathbf{p}) >; \quad C_{0} = N_{0}(0) \frac{7\zeta(3)}{32\pi^{2}T_{c}^{2}} < |\mathbf{v}(\mathbf{p})|^{2}e^{2}(\mathbf{p}) >;$$

$$B_{0} = N_{0}(0) \frac{7\zeta(3)}{8\pi^{2}T_{c}^{2}} < e^{4}(\mathbf{p}) >, \qquad (263)$$

где угловые скобки обозначают обычное усреднение по поверхности Ферми: < ... >= $\frac{1}{N_0(0)} \sum_p \delta(\xi_p) \dots$, а $N_0(0)$ – плотность состояний на поверхности Ферми для свободных электронов.

Тогда все особенности рассматриваемой модели, связанные с появлением псевдощели, содержатся в безразмерных коэффициентах K_A , K_C и K_B . В отсутствие псевдощелевых флуктуаций все эти коэффициенты равны 1.

Коэффициенты K_A и K_C , как ясно из Рис. 64(а) определяются обобщенной куперовской восприимчивостью [56, 58] $\chi(\mathbf{q}; T)$, показанной на Рис. 42:

$$K_A = \frac{\chi(0;T) - \chi(0;T_c)}{A_0}$$
(264)

$$K_C = \lim_{q \to 0} \frac{\chi(\mathbf{q}; T_c) - \chi(0; T_c)}{q^2 C_0}$$
(265)

Обобщенная восприимчивость, как мы видели выше, может быть найдена из (247), где "треугольные" вершины определяются рекуррентными процедурами (249), что позволяет провести непосредственные численные расчеты коэффициентов K_A , K_C .

Ситуация с коэффициентом B в общем случае сложнее. Существенные упрощения возникают, если ограничиться в порядке $|\Delta_q|^4$, как это обычно и делается, случаем q = 0, и определить коэффициент B диаграммой, показанной на Рис. 64(b). Тогда для коэффициента K_B получаем:

$$K_B = \frac{T_c}{B_0} \sum_{\varepsilon_n} \sum_{\mathbf{p}} e^4(\mathbf{p}) (G(\varepsilon_n \mathbf{p}) G(-\varepsilon_n, -\mathbf{p}))^2 (\Gamma^{\pm}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, 0))^4$$
(266)

Следует сразу отметить, что выражение (266) приводит к положительно определенному коэффициенту *B*. Это ясно из того, что $G(-\varepsilon_n, -\mathbf{p}) = G^*(\varepsilon_n \mathbf{p})$, так что $G(\varepsilon_n \mathbf{p})G(-\varepsilon_n, -\mathbf{p})$ – вещественно, соответственно $\Gamma^{\pm}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, 0)$, определяемая рекуррентной процедурой (252), также вещественна. При наличии примесей все функции Грина и вершины, входящие в эти выражения, следует вычислять согласно выписанным выше уравнениям (254) и (259).

Численные расчеты коэффициентов K_A , K_B , K_C проводились для тех же типичных параметров модели, что и расчеты T_c , описанные выше. Сами по себе численные значения этих коэффициентов не представляют большого интереса и мы их не приводим⁴⁷.

Физические характеристики сверхпроводников с псевдощелью.

Рассмотрение физических характеристик сверхпроводников (длины когерентности, глубины проникновения, наклона верхнего критического поля и скачка теплоемкости) в псевдощелевом состоянии, описываемом в модели "горячих точек" [122], полностью аналогично уже рассмотренному в этой главе для модели "горячих участков" [58](см. выражения (198)-(209)). Только БКШ выражения для физических характеристик в отсутствие псевдощели, на которые мы нормируем, определяются в данной модели коэффициентами Гинзбурга-Ландау (263). В результате, для наклона верхнего критического поля вблизи T_c получаем:

$$\left|\frac{dH_{c2}}{dT}\right|_{T_c} = \frac{16\pi\phi_0 < e^2(\mathbf{p}) >}{7\zeta(3) < |\mathbf{v}(\mathbf{p})|^2 e^2(\mathbf{p}) >} T_c \frac{K_A}{K_C}.$$
(267)

а БКШ скачок удельной теплоемкости в точке перехода при температуре T_{c0} (в отсутствие псевдощели, W = 0):

$$(C_s - C_n)_{T_{c0}} = N(0) \frac{8\pi^2 T_{c0} < e^2(\mathbf{p}) >^2}{7\zeta(3) < e^4(\mathbf{p}) >}.$$
(268)

Тогда относительный скачок теплоемкости ΔC в рассматриваемой модели определяется выражением (209).

Все расчеты физических величин проводились для достаточно типичных значений параметров исходного электронного спектра t'/t = -0.4, $\mu/t = -1.3$.

При рассмотрении зависимостей от ширины псевдощели, все характеристики приводятся нормированными на их значение при $T = T_{c0}$, а при рассмотрении зависимостей от частоты примесного рассеяния γ_0 — нормированными на их значение при

 $^{^{47}}$ Их типичные зависимости от параметра W/T_{c0} представляют собой функции, достаточно быстро убывающие от 1 в области существования сверхпроводимости.

 $T = T_{c0}(W)$, т.е. при "затравочном" значении температуры перехода при заданном значении W, но в отсутствие примесного рассеяния ($\gamma_0 = 0$).

Результаты расчетов физических характеристик в зависимости от эффективной ширины псевдощели W для знакопостоянного случая приведены на Рис. 65, 66. Видим, что с ростом W длина когерентности $\xi(T)$ падает (Рис. 65 (a)), а глубина проникновения магнитного поля $\lambda(T)$ растет (Рис. 65 (b)), по сравнению с соответствующими значениями в теории БКШ. Обе эти характерные длины крайне слабо зависят от параметра κ , поэтому на Рис. 65 приведены результаты только для $\kappa a = 0.2$.

Наклон (производная) верхнего критического поля при $T = T_c$ (Рис. 66 (a)), нормированный на значение производной в отсутствие псевдощели, сначала растет, а потом начинает падать. Для случая спаривания d-типа и рассеяния на изинговских спиновых флуктуациях (SDW-I) максимум наблюдается при том значении W, где заканчивается "полочка" в зависимости T_c от W (см. левую панель Рис. 61). В случае s-спаривания и гейзенберговских спиновых флуктуаций (SDW-H), когда в зависимости $T_c(W)$ такой "полочки" нет (см. Рис. 63), в поведении наклона верхнего критического поля рост не наблюдается.

Наиболее характерным является падение скачка теплоемкости, по сравнению с БКШ значением, показанное на Рис. 66 (b), что находится в прямом качественном соответствии с экспериментальными данными [27]. Отметим, что и в величине скачка теплоемкости в случае *s*-спаривания и CDW флуктуаций, а также *d*-спаривания и рассеянии на SDW-I флуктуациях наблюдается характерная "полочка" в области $W/T_{c0} < 10$, аналогичная отмеченной выше в соответствующей зависимости T_c .

Поведение физических величин для знакопеременного случая приведены на Рис. 67. Данные по характерным длинам не приводятся, поскольку в этом случае как длина когерентности $\xi(T)$, так и глубина проникновения $\lambda(T)$, практически не отличаются от соответствующих значений теории БКШ, всюду в области существования сверхпроводимости. Что касается наклона верхнего критического поля и величины скачка теплоемкости в точке сверхпроводящего перехода, то они достаточно быстро



Рис. 65: Зависимость нормированных квадрата длины когерентности (а) и глубины проникновения (b) от эффективной ширины псевдощели W/T_{c0} для *s*-спаривания и рассеяния на SDW-H флуктуациях (жирная сплошная кривая), для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания и рассеяния на SDW-I флуктуациях (сплошная кривая), а также для *s*-спаривания и рассеяния на CDW флуктуациях (пунктир). Данные приведены для $\kappa a = 0.2$.



Рис. 66: Зависимость нормированных наклона верхнего критического поля (а) и скачка теплоемкости (b) от эффективной ширины псевдощели W/T_{c0} для *s*-спаривания и рассеяния на SDW-H флуктуациях (жирная сплошная кривая), для спаривания $d_{x^2-y^2}$ -типа и рассеяния на SDW-I флуктуациях (сплошная кривая), а также для *s*-спаривания и рассеяния на CDW флуктуациях (пунктир) для $\kappa a = 0.2, 0.5$.



Рис. 67: Зависимость нормированных наклона верхнего критического поля (а) и скачка теплоемкости (b) от эффективной ширины псевдощели W/T_{c0} для спаривания $d_{x^2-y^2}$ -типа и рассеяния на SDW-H флуктуациях (жирная сплошная кривая), для спаривания $d_{x^2-y^2}$ -типа и рассеяния на CDW флуктуациях (сплошная кривая), а также для *s*-спаривания и рассеяния на SDW-I флуктуациях (пунктир) для $\kappa a = 0.2, 1$.

уменьшаются по величине, как и T_c , с ростом параметра W/T_{c0} (Рис. 67).

При обсуждении роли примесного рассеяния (разупорядочения) остановимся на рассмотрении наиболее важного и интересного случая гейзенберговских спиновых (SDW-H) флуктуаций [124]. Ввиду особой важности случая $d_{x^2-y^2}$ – спаривания для физики ВТСП купратов, этот случай представляет особый интерес.

На Рис. 68, 69 показаны зависимости физических характеристик для спаривания $d_{x^2-y^2}$ -типа от W/T_{c0} для трех значений частоты примесного рассеяния γ_0/T_{c0} : 0;0.18;0.64. Характерно подавление квадрата длины когерентности (Рис. 68 (a)), наклона верхнего критического поля и скачка теплоемкости (Рис. 69) псевдощелевыми флуктуациями, которое в присутствии беспорядка происходит быстрее, т.е. примесное рассеяние усиливает аналогичный эффект от псевдощелевых флуктуаций.

На Рис. 70, 71 показаны зависимости физических характеристик для спаривания $d_{x^2-y^2}$ -типа от частоты примесного рассеяния $\gamma_0/T_{c0}(W)$ для трех значений W/T_{c0} : 0; 2.8; 5.5. При частоте примесного рассеяния заметно меньше критической γ_{cr} зависимость от беспорядка квадрата длины когерентности и глубины проникновения

магнитного поля достаточно слаба (Рис. 70). Вблизи γ_{cr} , где сверхпроводимость почти полностью подавлена, длина когерентности резко уменьшается, а глубина проникновения - растет. Наклон верхнего критического поля и скачок теплоемкости с ростом беспорядка подавляются (см. Рис. 71).

Для выявления характерных отличий от случая спаривания $d_{x^2-y^2}$ -типа на Рис. 72, 73 показано, как рассеяние на примесях (беспорядок) в случае *s*-спаривания влияет на основные физические характеристики сверхпроводника (на квадрат длины когерентности, глубину проникновения, наклон верхнего критического поля и скачок теплоемкости). Данные расчетов приведены для W = 0 и $W = 15T_{c0}$. Видим, что квадрат длины когерентности и скачок теплоемкости существенно подавляются беспорядком, наклон $H_{c2}(T)$ ведет себя качественно иным образом, чем в случае $d_{x^2-y^2}$ -спаривания: рост беспорядка приводит к заметному росту этой величины, как и в случае стандартной теории "грязных" сверхпроводников [12]. В отсутствие псевдощелевых флуктуаций, аналогичные отличия, для случая *s* и *d*-типа, в поведении наклона $H_{c2}(T)$ при разупорядочении отмечались ранее в [56].

Заключение

В данной разделе мы рассмотрели вблизи T_c особенности сверхпроводящего состояния, возникающего в псевдощелевом состоянии, обусловленном рассеянием электронов на флуктуациях "диэлектрического" ближнего порядка в рамках модели "горячих точек" на поверхности Ферми. Наш анализ был основан на микроскопическом выводе разложения Гинзбурга – Ландау, учитывающем все порядки теории возмущений по рассеянию на псевдощелевых флуктуациях. Описание "конденсированной" фазы такого сверхпроводника может быть проведено на основе соответствующего анализа уравнений Горькова для сверхпроводника с псевдощелью (ср. [58]), что будет предметом отдельного исследования в следующем разделе.

Здесь мы еще раз в более реалистичной модели продемонстрировали подавление сверхпроводимости псевдощелевыми флуктуациями CDW, AFM(SDW) типа и выделили два класса качественно различных моделей такого подавления, связанных со



Рис. 68: Зависимость нормированных квадрата длины когерентности (а) и глубины проникновения (b) от эффективной ширины псевдощели W/T_{c0} для спаривания $d_{x^2-y^2}$ -типа и рассеяния на SDW-H флуктуациях для трех значений частоты примесного рассеяния γ_0 . |dH|/dT|



Рис. 69: Зависимость нормированных наклона верхнего критического поля (а) и скачка теплоемкости (b) от эффективной ширины псевдощели W/T_{c0} для спаривания $d_{x^2-y^2}$ -типа и рассеяния на SDW-H флуктуациях для трех значений частоты примесного рассеяния γ_0 .



Рис. 70: Зависимость нормированных квадрата длины когерентности (а) и глубины проникновения (b) от частоты примесного рассеяния $\gamma_0/T_{c0}(W)$ для спаривания $d_{x^2-y^2}$ -типа и рассеяния на SDW-H флуктуациях для трех значений эффективной ширины псевдощели W.



Рис. 71: Зависимость нормированных наклона верхнего критического поля (а) и скачка теплоемкости (b) от частоты примесного рассеяния $\gamma_0/T_{c0}(W)$ для спаривания $d_{x^2-y^2}$ -типа и рассеяния на SDW-H флуктуациях для трех значений эффективной ширины псевдощели W.



Рис. 72: Зависимость нормированных квадрата длины когерентности (а) и глубины проникновения (b) от частоты примесного рассеяния $\gamma_0/T_{c0}(W)$ для спаривания *s*-типа и рассеяния на SDW-H флуктуациях для двух значений эффективной ширины псевдощели W.



Рис. 73: Зависимость нормированных наклона верхнего критического поля (а) и нормированного скачка теплоемкости (b) от частоты примесного рассеяния $\gamma_0/T_{c0}(W)$ для спаривания *s*-типа и рассеяния на SDW-H флуктуациях для двух значений эффективной ширины псевдощели W.

знакопостоянным или знакопеременным поведением в рекуррентных уравнениях для вершинной части (верхний и нижний знаки в (249) в соответствии с Таблицей 1. В то время как вариант рассеяния на спиновых флуктуациях (SDW-H) и спаривания с симметрией $d_{x^2-y^2}$ – типа реализуется в высокотемпературных сверхпроводниках на основе оксидов меди, нам неизвестны системы, в которых осуществляется необычное поведение, полученное выше для случая спаривания *s*-типа и рассеяния на спиновых (SDW-H) флуктуациях, также как и для спаривания $d_{x^2-y^2}$ -типа и рассеяния на зарядовых (CDW) флуктуациях. Поиск таких систем мог бы представлять существенный интерес.

В числе недостатков рассмотренной модели следует отнести не раз отмечавшееся выше пренебрежение динамикой флуктуаций ближнего порядка и ограничение только гауссовыми флуктуациями, что, вообще говоря, позволяет рассматривать лишь область достаточно высоких температур.

4.3.2 Уравнения Горькова. Температурная зависимость сверхпроводящей щели.

В предыдущем разделе диссертации были рассмотрены характеристики сверхпроводящего состояния вблизи температуры T_c , а сейчас, следуя работе [123], проанализируем сверхпроводящие свойства сверхпроводника (*s* и *d*-типа) с псевдощелью в широкой области температур $T < T_c$. Для этого в данном разделе диссертации будет построена система рекуррентных уравнений Горькова, с учетом всех фейнмановских диаграмм теории возмущений по взаимодействию электрона с флуктуациями ближнего порядка, вызывающими сильное рассеяние вблизи "горячих точек". Мы проанализируем влияние немагнитных примесей на сверхпроводимость в таком псевдощелевом состоянии. Будут определена критическая температура сверхпроводящего перехода и температурное поведение энергетической щели в зависимости от эффективной ширины псевдощели, величины корреляционной длины флуктуаций ближнего порядка и частоты рассеяния на примесях.

В сверхпроводящем состоянии теория возмущений по взаимодействию с AFM

флуктуациями (31) должна строиться на "свободных" нормальных и аномальных функциях Грина сверхпроводника (166.

Следуя работам [58, 123], можно сформулировать систему рекуррентных уравнений Горькова, учитывающих рассеяние на флуктуациях ближнего порядка во всех порядках теории возмущений.

Здесь, как и при рассмотрении модели "плоских участков" (см. раздел 4.1.2), можно сформулировать "анзатц", аналогичный (39), используемому в нормальном (несверхпроводящем) состоянии. ⁴⁸ Вклад произвольной диаграммы *N*-го порядка по взаимодействию (31) в полную нормальную или аномальную функцию Грина имеет вид произведения N + 1 "свободных" нормальных G_{0k_i} и аномальных $F_{0k_i}^+$ функций Грина с определенным образом перенормированными частотами и щелями (см. ниже). Здесь k_i – число линий взаимодействия, охватывающих данную *j*-ю (от начала диаграммы) электронную линию. Как и в нормальной фазе, вклад любой диаграммы определяется набором целых чисел k_i , а каждая диаграмма с пересечением линий взаимодействия оказывается равной некоторой диаграмме того же порядка без пересечения этих линий. Поэтому мы можем рассматривать лишь диаграммы без пересечения линий взаимодействия, учитывая вклад остальных диаграмм комбинаторными множителями s(k) и r(k), которые приписываются линиям взаимодействия. Линии взаимодействия, охватывающей нормальную функцию Грина приписывается s(k), а охватывающей аномальную (на которой проекция спина меняет знак) — $\pm r(k)$ 49

Где конкретный выбор знака пока определяется лишь видом флуктуаций знак "+" относится к случаю как зарядовых (CDW) так и гейзенберговских спиновых (SDW-H) флуктуаций (см. Приложение D), а "_" – к случаю изинговых спиновых (SDW-I) флуктуаций.

⁴⁸Подробности обоснования формулируемых ниже соотношений для модели "горячих точек"приведены в Приложении F.

⁴⁹Как было отмечено ранее, дополнительный комбинаторный множитель r(k) = s(k) для простейшего случая зарядовых и изинговских спиновых псевдощелевых флуктуаций рассматривавшихся в [122]. Для наиболее интересного случая гейзенберговских спиновых (SDW) флуктуаций этот множитель определяется (250).



Рис. 74: Диаграммное представление для рекуррентных уравнений Горькова (a) и уравнений для функций Грина $\bar{G}_{00}, \bar{F}_{00}$ (б).

В результате получаем диаграммный аналог уравнений Горькова [119], приведенный на Рис. 74(а). Соответственно возникает два связанных рекуррентных уравнения для нормальных и аномальных функций Грина:

$$G_{k} = G_{0k} + G_{0k}\tilde{G}G_{k} - G_{0k}\tilde{F}F_{k}^{+} - F_{0k}\tilde{G}^{*}F_{k}^{+} - F_{0k}\tilde{F}^{+}G_{k}$$

$$F_{k}^{+} = F_{0k}^{+} + F_{0k}^{+}\tilde{G}G_{k} - F_{0k}^{+}\tilde{F}F_{k}^{+} + G_{0k}^{*}\tilde{G}^{*}F_{k}^{+} + G_{0k}^{*}\tilde{F}^{+}G_{k}$$
(269)

где

$$\tilde{G} = W^2 s(k+1)G_{k+1}; \quad \tilde{F}^+ = \pm W^2 r(k+1)F_{k+1}^+$$
(270)

$$G_{0k}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = -\frac{i\tilde{\varepsilon}_n + \xi_k}{\tilde{\varepsilon}_n^2 + \xi_k^2 + |\tilde{\Delta}|^2}; \quad F_{0k}^+(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{\Delta^*}{\tilde{\varepsilon}_n^2 + \xi_k^2 + |\tilde{\Delta}|^2}$$
(271)

Здесь

$$\xi_k = \begin{cases} \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} & \text{при нечетных } k \\ \xi_{\mathbf{p}} & \text{при четных } k \end{cases}$$
(272)

и введены перенормированные частота $\tilde{\varepsilon}$ и щель $\tilde{\Delta}$:

$$\tilde{\varepsilon}_n = \eta_k \varepsilon_n; \quad \tilde{\Delta} = \eta_k \Delta_k; \quad \eta_k = 1 + \frac{k v_k \kappa}{\sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta_k|^2}}$$
 (273)
аналогичные тем, которые возникают при рассмотрении сверхпроводников с примесями [119]. Здесь $\kappa = \xi^{-1}$,

$$v_k = \begin{cases} |v_x(\mathbf{p} + \mathbf{Q})| + |v_y(\mathbf{p} + \mathbf{Q})| & \text{при нечетных } k \\ |v_x(\mathbf{p})| + |v_y(\mathbf{p})| & \text{при четных } k \end{cases}$$
(274)

где $\mathbf{v}(\mathbf{p}) = \frac{\partial \xi_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{p}}$ – скорость свободной квазичастицы, а неперенормированная щель имеет вид:

$$\Delta_k = \begin{cases} \Delta e(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) & \text{при нечетных } k \\ \Delta e(\mathbf{p}) & \text{при четных } k \end{cases}$$
(275)

Из (269)-(273) легко получить систему рекуррентных соотношений непосредственно для действительной и мнимой частей нормальной функции Грина и для аномальной функции Грина. Введя обозначения:

$$ImG_k = -\varepsilon_n J_k; \quad ReG_k = R_k; \quad F_k^+ = \Delta_k^* f_k \tag{276}$$

получаем следующую систему рекуррентных уравнений для J_k, R_k и f_k :

$$J_{k} = \frac{\eta_{k} + W^{2}s(k+1)J_{k+1}}{d_{k}}$$

$$R_{k} = -\frac{\xi_{k} + W^{2}s(k+1)R_{k+1}}{d_{k}}$$

$$f_{k} = \frac{\eta_{k} \pm W^{2}r(k+1)\frac{\Delta_{k+1}^{*}}{\Delta_{k}^{*}}f_{k+1}}{d_{k}}$$
(277)

где $d_k = \varepsilon_n^2 (\eta_k + W^2 s(k+1)J_{k+1})^2 + (\xi_k + W^2 s(k+1)R_{k+1})^2 + |\Delta_k|^2 (\eta_k \pm W^2 r(k+1)\frac{\Delta_{k+1}^*}{\Delta_k^*}f_{k+1})^2$

Интересующие нас нормальная и аномальная функции Грина сверхпроводника определяются через R_0 , J_0 и f_0 :

$$ImG = -\varepsilon_n J_0; \quad ReG = R_0; \quad F^+ = \Delta^* e(\mathbf{p}) f_0 \tag{278}$$

и представляют собой полностью просуммированный ряд теории возмущений по взаимодействию электрона в сверхпроводнике с диэлектрическими флуктуациями ближнего порядка.

В случае *s*-спаривания сверхпроводящая щель при перебросе на вектор **Q** остается неизменной, т.е. $e(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) = e(\mathbf{p})$, также как в модели с плоскими участками на поверхности Ферми рассмотренной в работе [58], тогда $\Delta_{k+1} = \Delta_k$. В частности, в случае *s*-спаривания и зарядовых (CDW) флуктуаций, когда r(k) = s(k), рекуррентные соотношения для J_k и f_k полностью совпадают, так что $J_k = f_k$. В случае $d_{x^2-y^2}$ спаривания сверхпроводящая щель при перебросе на **Q** меняет знак $(e(\mathbf{p}+\mathbf{Q}) = -e(\mathbf{p}))$, поэтому $\Delta_{k+1} = -\Delta_k$ и рекуррентные соотношения для f_k и J_k отличается знаком перед вторым слагаемым в случаи зарядовых (CDW) и гейзенберговских флуктуациях (SDW-H). Таким образом, изменение знака щели при перебросе полностью эквивалентно смене знака перед вторым слагаемым в рекуррентном уравнении для аномальной функции Грина (последнее уравнение в (277)), т.е. эквивалентно переходу к случаю изинговых спиновых (SDW-I) флуктуаций (r(k) = s(k)). Поэтому в случае изинговых спиновых (SDW-I) флуктуаций виды спаривания меняются местами. Случаю *s* спаривания, когда щель при перебросе неизменна, соответствуют рекуррентные уравнения для J_k и f_k различающиеся знаком, а в случае $d_{x^2-y^2}$ спаривания рекуррентные соотношения для этих величин совпадают и $J_k = f_k$.

Таким образом, \pm в (277) относятся к типу флуктуаций, а знак отношения $\frac{\Delta_{k+1}^*}{\Delta_k^*}$ определяется типом спаривания.

Окончательно, рекуррентное уравнение для аномальной функции Грина принимает вид:

$$f_k = \frac{\eta_k \pm W^2 r(k+1) f_{k+1}}{d_k}$$
(279)

где теперь знак перед W^2 полностью определяется Таблицей 1 из предыдущего раздела. Таким образом, снова, как и при рассмотрении разложения Гинзбурга-Ландау, выделяется два качественно различных по влиянию псевдощели на сверхпроводимость класса систем.

Сверхпроводник с примесями.

При рассмотрении сверхпроводника с примесями в псевдощелевом состоянии, считая беспорядок достаточно слабым, ограничимся классом диаграмм, в которых пунктирные линии рассеяния на примесях не пересекаются между собой и с волнистыми линиями рассеяния на диэлектрических флуктуациях ⁵⁰

Рассмотрим нормальную \bar{G}_{00} и аномальную \bar{F}_{00} функции Грина, определяемые

⁵⁰Это приближение фактический соответствует предположению о самоусредняемости плотности состояний и сверхпроводящей щели в случайном поле примесей и диэлектрических флуктуаций.

диаграммным уравнением, представленным на Рис. 74(b), где под примесной линией стоят полные "одетые" рассеянием на примесях и на диэлектрических флуктуациях нормальная G и аномальная F функции Грина. В явной форме соответствующие уравнения имеют вид:

$$\bar{G}_{00} = G_{00} + G_{00}\bar{G}\bar{G}_{00} - G_{00}\bar{F}\bar{F}_{00}^{+} - F_{00}\bar{G}^*\bar{F}_{00}^{+} - F_{00}\bar{F}^+\bar{G}_{00}$$

$$\bar{F}_{00}^{+} = F_{00}^{+} + F_{00}^+\bar{G}\bar{G}_{00} - F_{00}^+\bar{F}\bar{F}_{00}^{+} + G_{00}^*\bar{G}^*\bar{F}_{00}^{+} + G_{00}^*\bar{F}^+\bar{G}_{00}$$
(280)

где

$$\bar{G} = \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} G; \quad \bar{F}^+ = \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} F^+$$
 (281)

ρ – концентрация примесей, *U* – их потенциал.

В отсутствие диэлектрических флуктуаций $G = \bar{G}_{00}$, $F = \bar{F}_{00}$ и диаграммные уравнения на Рис. 74(b) и (280) переходят в обычные уравнения Горькова для сверхпроводников с примесями [119].

Нормальные и аномальные функции Грина \bar{G}_{00} , \bar{F}_{00} , определяемые уравнениями (280), имеют вид свободных функций Грина (166) с перенормированной примесями частотой и щелью: ⁵¹

$$\bar{G}_{00} = -\frac{i\bar{\varepsilon}_n + \xi_{\mathbf{p}}}{\bar{\varepsilon}_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + |\bar{\Delta}|^2}; \quad \bar{F}_{00}^+ = \frac{\bar{\Delta}^*}{\bar{\varepsilon}_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + |\bar{\Delta}|^2}$$
(282)

где

$$\bar{\varepsilon}_n = \varepsilon_n - \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} ImG \equiv \eta_{\varepsilon} \varepsilon_n; \quad \bar{\Delta}^* = \Delta^* + \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} F^+ \equiv \eta_{\Delta} \Delta^*$$
(283)

Ренормирующие частоту и щель множители η_{ε} и η_{Δ} , введенные в (283), зависят от рассеяния на диэлектрических флуктуациях, т.е. от W, однако эти множители не зависят от импульса. Это позволяет построить теорию возмущений по взаимодействию с диэлектрическими флуктуациями на "одетых" рассеянием на примесях нормальной

⁵¹Возникает также и перенормировка спектра $\bar{\xi}_{\mathbf{p}} = \xi_{\mathbf{p}} + \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} ReG$, которая сводится к незначительной (как показывают численные оценки) перенормировке химического потенциала и которой мы в дальнейшем пренебрегаем.

и аномальной функциях Грина \bar{G}_{00} , \bar{F}_{00} аналогично тому, как это делалось на свободных функциях Грина (166) в отсутствие примесей. Все результаты, полученные в отсутствие примесей, воспроизводятся с учетом замены $\varepsilon_n \to \eta_{\varepsilon}\varepsilon_n$, $\Delta \to \eta_{\Delta}\Delta$. В результате система рекуррентных уравнений для J_k , R_k и f_k , определяемых (276), имеет такой же вид (277), как и в отсутствие примесей. Необходимо лишь произвести замену:

$$\eta_k \to \eta_{\varepsilon k} = \left(1 + \frac{k v_k \kappa}{\sqrt{\eta_{\varepsilon}^2 \varepsilon_n^2 + \eta_{\Delta}^2 |\Delta_k|^2}}\right) \eta_{\varepsilon}$$
(284)

в уравнении для мнимой части нормальной функции Грина J_k и

$$\eta_k \to \eta_{\Delta k} = \left(1 + \frac{k v_k \kappa}{\sqrt{\eta_{\varepsilon}^2 \varepsilon_n^2 + \eta_{\Delta}^2 |\Delta_k|^2}}\right) \eta_{\Delta}$$
(285)

в уравнении для аномальной функции Грина f_k . Интересующие нас нормальная и аномальная функции Грина сверхпроводника снова определяются (278) через R_0 , J_0 и f_0 .

Рекуррентное уравнение для аномальной функции Грина f_k переписывается в виде (279) с учетом замены (285) в присутствие примесного рассеяния. Сейчас мы ограничимся анализом случаев, соответствующих знаку "+" в (279), т.е. случаев *s*спаривания и зарядовых флуктуаций и *d*-спаривания и изинговских спиновых флуктуаций.

В случае s-спаривания и зарядовых флуктуаций $\eta_{\varepsilon} = \eta_{\Delta}$ и мы имеем:

$$\eta_{\varepsilon k} = \eta_{\Delta k} = \eta_{\varepsilon} + \frac{k v_k \kappa}{\sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta_k|^2}}$$
(286)

при этом, как и в отсутствие примесей, рекуррентные уравнения для J_k и f_k просто совпадают, т.е. $J_k = f_k$

В случае *d*-спаривания и спиновых флуктуаций вследствие анизотропии сверхпроводящей щели $\sum_{\mathbf{p}} F = 0$ и $\eta_{\Delta} = 1$, соответственно (284), (285) принимают вид:

$$\eta_{\varepsilon k} = \left(1 + \frac{k v_k \kappa}{\sqrt{\eta_{\varepsilon}^2 \varepsilon_n^2 + |\Delta_k|^2}}\right) \eta_{\varepsilon}; \quad \eta_{\Delta k} = 1 + \frac{k v_k \kappa}{\sqrt{\eta_{\varepsilon}^2 \varepsilon_n^2 + |\Delta_k|^2}} \tag{287}$$

Ренормирующие коэффициенты $\eta_{\varepsilon}, \eta_{\Delta}$ должны определятся самосогласованно с

рекуррентной процедурой, так что из (283) для этих коэффициентов получаем:

$$\eta_{\varepsilon} = 1 + \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} J_0; \quad \eta_{\Delta} = 1 + \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} e(\mathbf{p}) f_0 \tag{288}$$

Такое самосогласование ренормирующих коэффициентов и рекуррентной процедуры (277) приходится проводить для каждого значения мацубаровской частоты, что сильно замедляет численный счет. Поэтому, наряду с описанной выше самосогласованной схемой учета примесей и диэлектрических флуктуаций, будем использовать и более простое не самосогласованное приближение, в котором предполагается, что под примесными линиями в диаграммных уравнениях Рис.74(b) стоят свободные функции Грина G_{00} и F_{00} . ⁵² В этом приближении определение ренормирующих частоту и щель коэффициентов не вызывает затруднения:

$$\eta_{\varepsilon} = \eta_{\Delta} = 1 + \frac{\gamma_{0}}{\sqrt{\varepsilon_{n}^{2} + |\Delta_{k}|^{2}}} \qquad \text{s-спаривание} \\ \eta_{\varepsilon} = 1 + \frac{\gamma_{0}}{\sqrt{\varepsilon_{n}^{2} + |\Delta_{k}|^{2}}}; \quad \eta_{\Delta} = 1 \qquad \text{d-спариваниe}$$
(289)

где $\gamma_0 = \pi \rho U^2 N_0(0)$ – частота рассеяния на примесях, $N_0(0)$ – плотность состояний на поверхности Ферми в отсутствие примесей и псевдощели.

Критическая температура и температурная зависимость щели.

Энергетическая щель сверхпроводника определяется уравнением:

$$\Delta(\mathbf{p}) = -T \sum_{\mathbf{p}'} \sum_{\varepsilon_n} V_{sc}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') F(\varepsilon_n \mathbf{p}')$$
(290)

Аномальная функция Грина определяется из (278) с помощью рекуррентной процедуры (277). В результате, с учетом (143), уравнение (290) принимает вид:

$$1 = VT \sum_{|\varepsilon_n| < \omega_c} \sum_{\mathbf{p}} f_0(\varepsilon_n \mathbf{p}) e^2(\mathbf{p})$$
(291)

Уравнение для температуры сверхпроводящего перехода T_c немедленно следует из (291) при $\Delta \to 0$.

$$1 = VT_c \sum_{|\varepsilon_n| < \omega_c} \sum_{\mathbf{p}} \lim_{\Delta \to 0} f_0(\varepsilon_n \mathbf{p}) e^2(\mathbf{p})$$
(292)

⁵²Такое приближение и использовалось в работе [60] для анализа влияния примесей на сверхпроводимость в предельно упрощенном варианте модели псевдощелевого состояния с бесконечной корреляционной длиной и поверхностью Ферми с полным "нестингом".

Здесь, как и в предыдущем разделе, все расчеты проводились для типичного спектра квазичастиц в ВТСП (35) с $\mu = -1.3t$ и t'/t = -0.4, а для спаривательного взаимодействия выбиралось $\frac{V}{ta^2} = 1$ в случае *s*-спаривания и $\frac{V}{ta^2} = 0.55$ для $d_{x^2-y^2}$ спаривания, что дает $T_{c0} = 0.01t$ при $\omega_c = 0.4t$.

Результаты численных расчетов температуры сверхпроводящего перехода T_c для системы с псевдощелью в отсутствие примесей, полученные с использованием описанных выше рекуррентных уравнений (277) непосредственно из (292) в случае знакопостоянной ("+" в (279)) процедуры для аномальной функции Грина, полностью совпадают ⁵³ с полученными в предыдущем разделе из куперовской неустойчивости нормальной фазы [122] (левая панель Рис. 61). В случае знакопеременной рекуррентной процедуры (см. правую панель Рис. 61) возникают незначительные количественные отличия в области, где критическая температура практически полностью подавлена псевдощелевыми флуктуациями. В частности, в случае $d_{x^2-y^2}$ спаривания и рассеяния на зарядовых (CDW) флуктуациях появляется критическая ширина псевдощели при которой сверхпроводимость полностью подавлена.

Во всех случаях псевдощелевые ("диэлектрические") флуктуации приводят к существенному понижению температуры сверхпроводящего перехода. При этом $d_{x^2-y^2}$ спаривание подавляется заметно быстрее *s* спаривания. В тоже время, уменьшение корреляционной длины ξ (рост параметра κ) псевдощелевых флуктуаций способствует росту T_c .

На Рис. 75,76 приведены результаты расчетов температуры сверхпроводящего перехода в случае *d*-спаривания с учетом рассеяния на немагнитных примесях, полученные из (292) с использованием рекуррентной процедуры (277) как в случае самосогласованного с этой процедурой расчета коэффициентов η_{ε} , η_{Δ} (288) (сплошные кривые), так и не самосогласованного (289) (пунктирные кривые).

В присутствии примесного рассеяния диэлектрические флуктуации сильнее подавляют сверхпроводимость и появляется критическое значение эффективной шири-

⁵³В этом случае, как было подчеркнуто ранее, $f_k = J_k = -ImG_k/\varepsilon_n$, а соотношение для ImG_k совпадает с рекуррентной процедурой (251).



Рис. 75: Зависимость температуры сверхпроводящего перехода от эффективной ширины псевдощели в случае d-спаривания для $\kappa a = 0.2$ и различных значений частоты рассеяния на примесях γ_0/T_{c0} : 0 – 1; 0.18 – 2; 0.64 – 3. Сплошные линии - самосогласованное решение, пунктир - не самосогласованное.



Рис. 76: Зависимость температуры сверхпроводящего перехода от частоты рассеяния на примесях в случае d-спаривания для различных значений эффективной ширины псевдощели и обратной корреляционной длины: $W/T_{c0} = 0 - 1$; $W/T_{c0} = 37$, $\kappa a = 0.5 - 2$; $W/T_{c0} = 37$, $\kappa a = 0.2 - 3$. Сплошные линии - самосогласованное решение, пунктир - не самосогласованное. На вставке представлена зависимость отношения критической частоты рассеяния на примесях к температуре сверхпроводящего перехода от эффективной ширины псевдощели для $\kappa a: 0.2 - 1; 0.5 - 2$. Пунктир - не самосогласованное решение для $\kappa a = 0.2$.

ны псевдощели при котором температура сверхпроводящего перехода T_c обращается в ноль (Рис. 75), что вполне аналогично результатам, полученным в предыдущем разделе 4.3.1.

Немагнитные примеси и в присутствии псевдощелевых флуктуаций быстро подавляют сверхпроводимость *d*-типа [60]. Зависимость температуры сверхпроводящего перехода от частоты рассеяния на примесях (Рис. 76) оказывается достаточно близкой к стандартной кривой Абрикосова-Горькова [129, 130] в отсутствие псевдощели (кривая 1). С увеличением псевдощели наблюдается лишь незначительный рост критического значения частоты рассеяния (вставка Рис. 76) от стандартного значения теории Абрикосова-Горькова $\gamma_{0c}/T_c = \frac{\pi}{2\gamma}$ в отсутствие псевдощели до значений $\gamma_{0c}/T_c \approx 1 - 1.1$ вблизи критического значения ширины псевдощели при котором сверхпроводимость полностью подавляется.

В случае *s*-спаривания рассеяние на немагнитных примесях слабо влияет на сверхпроводимость (вставка Рис. 77). Незначительное подавление T_c при $\gamma_0 \sim t$ (Рис. 77) связано в основном с общим падением плотности состояний, которое вызывается уширением зоны под действием такого сильного рассеяния на примесях.

На Рис. 78 приведены температурные зависимости сверхпроводящей щели *d*-типа, полученные из (291) с использованием рекуррентной процедуры. Качественно эти зависимости аналогичны получаемой из теории БКШ (кривая 1 Рис. 78). Однако есть и отличие, в частности, в присутствии примесного рассеяния с частотой, соответствующей кривым 2 и 4 на Рис. 78 ($\gamma_0 = 0.18T_{c0}$), с ростом ширины псевдощели Wот нуля до критического значения, при котором сверхпроводимость полностью подавляется, наблюдается двукратный рост отношения $2\Delta(T = 0)/T_c$. В случае сверхпроводимости *s*-типа $2\Delta(T = 0)/T_c$ практически не зависит ни от частоты рассеяния на примесях, ни от ширины псевдощели.

Следует отметить, что все приведенные результаты, касающиеся сверхпроводящей щели, справедливы в предположении самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка (щели) по AFM флуктуациям (среднеполевое приближение [57]),



Рис. 77: Зависимость температуры сверхпроводящего перехода от частоты рассеяния на примесях в случае s - спаривания для различных значений эффективной ширины псевдощели: $W/T_{c0} = 0 - 1$; $W/T_{c0} = 37$, $\kappa a = 0.2 - 2$. Сплошные линии - самосогласованное решение, пунктир - не самосогласованное.



Рис. 78: Температурная зависимость сверхпроводящей щели в случае d-спаривания для $\kappa a = 0.2$ и различных значений эффективной ширины псевдощели и частоты рассеяния на примесях: $W/T_{c0} = 0, \gamma_0/T_{c0} = 0 - 1; W/T_{c0} = 0, \gamma_0/T_{c0} = 0.18 - 2; W/T_{c0} = 37, \gamma_0/T_{c0} = 0 - 3; W/T_{c0} = 37, \gamma_0/T_{c0} = 0.18 - 4.$

что верно при не слишком больших значениях корреляционной длины $\xi < \xi_0$, где ξ_0 – длина когерентности сверхпроводника (размер куперовских пар при T = 0). При $\xi \gg \xi_0$ возникают существенные эффекты несамоусредняемости, проявляющиеся в возникновении характерных "хвостов" температурной зависимости усредненной щели в области $T_c < T < T_{co}$ [57, 59].

4.3.3 Моделирование фазовой диаграммы.

В данном разделе мы, оставаясь в рамках модели "горячих точек", попробуем смоделировать фазовую диаграмму ВТСП купратов и получить знаменитый "купол" для их критической температуры. Дальнейшее рассмотрение в этом разделе в основном следует работе [124].

Описанная модель влияния псевдощелевых флуктуаций на сверхпроводимость позволяет провести простое моделирование типичной фазовой диаграммы ВТСП купратов⁵⁴. Впервые попытка такого моделирования в крайне упрощенном варианте нашей модели была предпринята в работе [60]. Основная идея состоит в отождествлении параметра W с экспериментально наблюдаемой эффективной шириной псевдощели (температурой кроссовера в псевдощелевую область фазовой диаграммы) $E_g \approx T^*$, определяемой из многочисленных экспериментов [40, 25, 131]. Эта величина, как известно, практически линейно убывает с ростом концентрации легирующей примеси (носителей тока) от величин порядка 10^3 К, обращаясь в нуль при некоторой критической концентрации $x_c \approx 0.19..0.22$, слегка превышающей "оптимальное значение" $x_o \approx 0.15..0.17$ [40, 132]. Соответственно, мы можем принять аналогичную концентрационную зависимость нашего параметра ширины псевдощели $W(x)^{55}$. В этом смысле, можно считать, что зависимость W(x) определяется непосредственно из эксперимента. Тогда, единственным параметром, подлежащим определению, становится концентрационная зависимость "затравочной" температуры сверхпроводящего

⁵⁴При этом мы "пренебрегаем" существованием узкой области антиферромагнитного упорядочения в состоянии моттовского диэлектрика, существующей в области малых концентраций легирующей примеси, ограничиваясь рассмотрением широкой области существования "плохого" металла.

 $^{^{55}}$ Естественно, такое отождествление можно провести с точностью до неизвестного коэффициента пропорциональности $\sim 1.$



Рис. 79: Модельная фазовая диаграмма для случая рассеяния на псевдощелевых флуктуациях зарядового (CDW) типа (*d* – спаривание) и "затравочной" температуры сверхпроводящего перехода *T*_{c0} линейно зависящей от концентрации носителей.

перехода $T_{c0}(x)$, которая существовала бы в отсутствие псевдощелевых флуктуаций, ее знание позволит определить концентрационное поведение реальной температуры перехода $T_c(x)$, путем решения уравнений нашей модели. К сожалению, как уже отмечалось в работе [122], зависимость $T_{c0}(x)$ в общем случае неизвестна и не определяется из известных экспериментов, оставаясь подгоночным параметром теории.

Предполагая, аналогично [60], что $T_{c0}(x)$ можно описать линейной функцией x, обращающейся в нуль при x = 0.3, и подбирая значение $T_{c0}(x = 0)$ так, чтобы получить желаемое значение $T_c(x = x_o)$ можно рассчитать вид "наблюдаемой" зависимости $T_c(x)$. Пример результатов такого расчета для случая d – спаривания и рассеяния на зарядовых (CDW) псевдощелевых флуктуациях [122], с использованием



Рис. 80: Модельная фазовая диаграмма для случая рассеяния на гейзенберговских (SDW) псевдощелевых флуктуациях (d – спаривание) и "затравочной" температуры сверхпроводящего перехода T_{c0} независящей от концентрации носителей, с учетом роли внутренней неупорядоченности, линейной по концентрации легирующей примеси $\gamma(x)$.

типичной зависимости W(x), показан на Рис. 79. Видим, что даже при столь произвольных предположениях модель "горячих точек" позволяет получить зависимость $T_c(x)$ довольно близкую к экспериментально наблюдаемой. Аналогичные расчеты для изинговской модели взаимодействия со спиновыми флуктуациями (знакопостоянная рекуррентная процедура для вершинной части [122]) показывают, что разумные значения $T_c(x)$ могут быть получены только при нереалистических значениях W(x) примерно на порядок превышающих наблюдаемые.

В рамках рассматриваемой нами модели БКШ для "затравочной" T_{c0} , предположение заметной концентрационной зависимости этой величины представляется довольно нереалистическим⁵⁶. Поэтому, предположим, что величина T_{c0} вообще не зависит от концентрации носителей x, но учтем, что введение легирующей примеси неизбежно ведет к появлению примесного рассеяния (внутреннего беспорядка), что можно описать соответствующей линейной зависимостью $\gamma(x)$. Предположим, что именно такой рост неупорядоченности приводит к полному подавлению d – спаривания при x = 0.3, в соответствии с известной зависимостью Абрикосова – Горькова [128]. Результаты расчета фазовой диаграммы для системы типа $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ в нашей модели, для случая гейзенберговских псевдощелевых флуктуаций, с учетом описанной роли примесного рассеяния, показан на Рис. 80. Использованные при расчете значения параметров задачи, соответствующих данной системе, приведены на этом же рисунке. "Экспериментальные" значения $T_c(x)$, показанные на этом рисунке (также как и на Рис. 79) "ромбиками", получены с помощью эмпирической формулы [132, 133]:

$$\frac{T_c(x)}{T_c(x=x_o)} = 1 - 82.6(x-x_o)^2 \tag{293}$$

которая дает достаточно хорошее описание концентрационного поведения T_c для целого ряда ВТСП купратов. Видим, что во всей области недодопированных составов наша модель дает практически идеальное описание "экспериментальных" данных при вполне разумных значениях W(x). В конце области передопированных составов описание несколько ухудшается, однако следует иметь в виду, что выражение (293) также не дает здесь достаточно хорошего описания, да и наша модель исчезновения сверхпроводимости в области передопированных составов является очевидно весьма грубой, а какой – либо специальной подгонки параметров, улучшающей согласие с данными в этой области вообще не проводилось.

Интересно рассмотреть вопрос о поведении температуры сверхпроводящего перехода T_c при дополнительном разупорядочении системы для различных составов (концентраций носителей). Имеется довольно много экспериментальных работ, в которых такое разупорядочение производилось путем введения примесей [134, 135] или

⁵⁶В рамках такого подхода зависимость T_{c0} от x может быть обусловлена только соответствующей относительно слабой зависимостью плотности состояний на уровне Ферми.

облучением быстрыми нейтронами [136] и электронами [137, 138]. При этом специальное обсуждение роли дополнительного разупорядочения в контексте существования псевдощелевого состояния проводилось только в работе [135].

В нашей модели, такое разупорядочение можно симулировать введением дополнительного параметра рассеяния на "примесях" γ_0 , который просто добавляется к параметру внутреннего беспорядка $\gamma(x)$. Результаты расчетов температуры сверхпроводящего перехода для двух значений этого параметра также показаны на Рис. 80. Видно, что в полном соответствии с экспериментом [135], введение "примесей" (беспорядка) приводит к быстрому сужению области существования сверхпроводимости. Также, в полном соответствии со сделанным выше в связи с правой панелью Рис. 62 выводом, и с результатами экспериментов [136, 135], подавление сверхпроводимости беспорядком в области недодопированных составов (псевдощелевой области) происходит существенно быстрее, чем при оптимальном составе. Можно было бы ожидать, что введение "нормального" беспорядка, приводящее, очевидно, к некоторому подавлению псевдощели в плотности состояний могло бы привести к определенной "затяжке" подавления T_c , однако такой эффект для случая спаривания d – типа просто отсутствует.

Проблема однако в том, что во всех случаях, подавление T_c происходит быстрее, чем по стандартной кривой Абрикосова – Горькова для случая d – спаривания [128]. В тоже время, попытки соответствующей обработки большинства экспериментальных данных по разупорядочению в ВТСП купратах [134, 137, 138], приводят к выводу о том, что такое подавление в действительности происходит существенно медленнее, чем предсказывается зависимостью Абрикосова – Горькова. Эта, до сих пор нерешенная, проблема относится к числу основных проблем теории высокотемпературных сверхпроводников [12]. Один из путей ее решения может быть связан с последовательным описанием роли беспорядка в сверхпроводниках, находящихся в области перехода от "рыхлых" пар теории БКШ к "компактным" парам возникающим в пределе очень сильной связи [139]. Другая интересная возможность объяснения такой "затяжки" подавления T_c связана с анизотропией упругого рассеяния на примесях, подробно рассмотренной в [140, 141]. Такой эффект может быть относительно легко включен в нашу схему расчетов. Он представляется особенно интересным в связи с установленным фактом сильной анизотропии упругого рассеяния (с симметрией d – типа), наблюдавшейся в ARPES экспериментах на системе $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ [142, 36]. Соответствующая частота рассеяния изменяется в интервале 20 – 60meV[36], что почти на порядок превышает максимальное значение $\gamma(x)$, использованное в наших расчетах, и еще раз указывает на необычную устойчивость d – спаривания в купратах по отношению к статическому беспорядку. Следует заметить, что наша модель для собственно – энергетической части электрона фактически описывает аналогичную анизотропию упругого рассеяния, соответствующую его возрастанию в окрестности "горячих точек", однако эффект "затяжки" подавления T_c в наших расчетах не наблюдался.

Полученные результаты показывают, что несмотря на очевидную грубость сделанных предположений, модель "горячих точек" позволяет легко получить достаточно разумное (иногда даже полуколичественное) описание области существования сверхпроводимости на фазовой диаграмме ВТСП купратов⁵⁷. Основным недостатком использованного подхода остается значительная неопределенность "сценария" формирования концентрационной зависимости "затравочной" температуры сверхпроводящего перехода.

4.3.4 Выводы.

Рассмотрение, проведенное в этом разделе, показывает, что модель псевдощелевого состояния, основанная на концепции "горячих точек", может обеспечить достаточно последовательное описание основных свойств сверхпроводящей фазы ВТСП купратов и их фазовой диаграммы, при сравнительно небольшом числе "подгоночных" параметров, большая часть которых может быть определена из независимых экспе-

 $^{^{57}}$ Выше всегда подразумевались системы с дырочным легированием, для которых зависимость $T^*(x)$ является хорошо установленной [40, 132]. Для электронно допированных систем данные по псевдощелевому состоянию довольно фрагментарны.

риментов.

Следует подчеркнуть, что все рассмотрение было проведено в рамках стандартного предположения [12] о самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка (щели) в поле случайных примесей и псевдощелевых флуктуаций. Обычно это предположение оправдывается для сверхпроводников, длина когерентности которых (размер куперовских пар) существенно превышает другие микроскопические длины в системе, такие как длина свободного пробега или корреляционная длина псевдощелевых флуктуаций ξ . В рассматриваемом классе моделей псевдощелевого состояния это не обязательно так и могут возникать существенные эффекты несамоусредняемости [58, 59], которые приводят к качественной картине неоднородного сверхпроводящего состояния, с "каплями" сверхпроводящей фазы, существующими в области температур $T > T_c$. В принципе, имеются прямые экспериментальные данные, подтверждающие такую картину неоднородной сверхпроводимости в ВТСП купратах [13, 143, 144]. Разумеется, мы далеки от того, чтобы утверждать, что эти реальные эксперименты подтверждают именно картину, теоретически разрабатывавшуюся на очень упрощенных моделях в [58, 59]. Тем не менее, эти результаты подчеркивают важность последовательного анализа эффектов несамоусредняемости в относительно "реалистических" моделях псевдощелевого состояния, таких, как рассмотренная выше модель "горячих точек"⁵⁸.

⁵⁸В принципе, в рамках картины существования сверхпроводящих "капель" можно понять и ряд экспериментов, которые обычно трактуются в пользу сверхпроводящей природы псевдощели в ВТСП.

5 ПСЕВДОЩЕЛЬ В СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАН-НЫХ СИСТЕМАХ.

5.1 Сильно коррелированные системы. Теория динамического среднего поля (DMFT).

В последние десятилетия центр тяжести экспериментальных и теоретических исследований значительно сместился в область переходных и редкоземельных элементов с 3d, 4f и 5f незаполненными оболочками и их химических соединений. Проблема фазового перехода металл-диэлектрик, наблюдаемого во многих оксидах переходных металлов, системы с тяжелыми фермионами, в которых обнаружилось огромное разнообразие фазовых переходов и связанных с ними явлений, манганиты с их гигантским магнетосопротивлением – все это стало предметом пристального внимания исследователей благодаря широкому многообразию демонстрируемых такими системами физических явлений. Однако самым значительным событием стало открытие высокотемпературной сверхпроводимости в оксидах переходных металлов, вызвавшее новую волну интереса к синтезу и описанию таких систем.

Все разнообразие физических явлений во всех этих соединениях обусловлено незаполненными 3d, 4f и 5f оболочками. Сильное взаимодействие электронов из узких энергетических зон таких орбиталей между собой или с коллективизированными электронами внешних оболочек в основном и формирует уникальные свойства этих систем. Такие системы с сильным взаимодействием электронов получили название сильно коррелированных систем (СКС).

Начиная с пионерских работ Хаббарда [145] в начале 60-х простейшей моделью, позволяющей описать свойства таких систем, является модель, получившая его имя. Гамильтониан однозонной модели Хаббарда имеет вид:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \qquad (294)$$

где t > 0 – амплитуда перескока между ближайшими соседями, U – отталкивание на узле, $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma}$ – оператор числа электронов на узле, $c_{i\sigma}$ ($c_{i\sigma}^{\dagger}$) – оператор уничтожения (рождения) электрона со спином σ . Модель содержит всего два конкурирующих энергетических параметра. Параметр t определяет кинетическую энергию электрона и способствует его перескокам (делокализации), параметр U определяет потенциальную энергию и способствует локализации электрона на узле. Энергетические зоны, образуемые 3d, 4f и 5f орбиталями достаточно узки, так что достаточно часто кинетическая и потенциальная энергии оказываются одного порядка ($t \sim U$). В этом случае параметр малости отсутствует и построение теории возмущений невозможно. С этим и связаны трудности описания СКС даже в такой максимально упрощенной модели.

Почти 30 лет не удавалось найти удовлетворительный подход к анализу СКС. Казалось, что теория этих систем так и останется фрагментарной и полуколичественной. Прорыв был сделан в 1989 г. в работе [146] Метцнера и Вольхардта. Они предложили формально рассматривать систему сильно взаимодействующих электронов в пространстве с большой пространственной размерностью $d \to \infty$ (или в решетке с большим координационным числом $z \to \infty$ ⁵⁹).

В этом пределе оказывается возможным пренебречь пространственными флуктуациями в системе, оставив только динамические. В работе [146] было показано, что в пределе бесконечной размерности пространства (или более точно в пределе бесконечно большого координационного числа) основную роль играют только локальные вклады в собственно энергетическую часть (СЭЧ) полной функции Грина (ФГ), а все нелокальные вклады пропорциональны $1/\sqrt{z} \sim 1/\sqrt{d}$ и могут быть отброшены. Таким образом в этом пределе СЭЧ электрона не зависит от импульса **k**, а является лишь функцией частоты (действительной (ω) или мацубаровской (ω_n)) ⁶⁰:

$$\Sigma_{\sigma}(\mathbf{k},\omega) = \Sigma_{\sigma}(\omega) \tag{295}$$

Это утверждение и есть основное упрощение возникающее в пределе $d \to \infty$. Последовательное его доказательство приведено, следуя работам [146, 147], в Приложении

⁵⁹В гиперкубической решетке z = 2d, и эти два предела по сути совпадают, однако и для трехмерной решетки z может быть достаточно велико: для объемноцентрированной z = 8, для гранецентрированной z = 12. Так что правильнее говорить про предел больших z.

 $^{^{60} {\}rm Большие}$ координационные числа позволяют с успехом использовать это как приближение и при достаточно малых d

G. Здесь мы отметим только базовые пункты соответствующей цепочки рассуждений.

В пределе $d \to \infty$ "затравочная" плотность состояний электрона в гиперкубической решетке становится гауссианом (535), и оказывается конечной только при проведений скэлингового преобразования $t \to \frac{t^*}{\sqrt{d}}$, где t^* – конечная постоянная. Данное преобразование также делает конечными "затравочную" среднюю кинетическую энергию системы (540) и другие термодинамические величины. После такого скэлигового преобразования "свободные" функции Грина ведут себя как

$$G^0_{ij,\sigma} \sim \mathcal{O}\left(1/d^{\|i-j\|/2}\right),\tag{296}$$

где ||i-j|| – "манхеттенская" метрика, обозначающая наименьшее расстояние (в единицах *a*) между узлами *i*, *j* при движении по решетке перескоками на ближайших соседей (см. G.2). Такое поведение "свободных" функций Грина немедленно приводит к тому, что в пределе $d \to \infty$ существенны только локальные вклады в СЭЧ $\Sigma_{ii,\sigma}(\omega)$, а нелокальные вклады $\Sigma_{ij,\sigma}(\omega)$ при $j \neq i$ малы по параметру $1/\sqrt{d}$. В результате, переходя в импульсное пространство, сразу получаем (295).

На самом деле поведение (296) "свободной" функции Грина в пределе больших dприводит даже к более сильному, чем (295) утверждению. СЭЧ не только локальна, но и в любой "скелетной" диаграмме для нее в пределе $d \to \infty$ во всех вершинах фигурирует только один узел (например, *i*-ый), т.е. СЭЧ является функционалом $\Sigma_{ii,\sigma} = F[G_{ii,\sigma}]$ от локальной полной функции Грина $G_{ii,\sigma}$ (см. Приложение G.2). Отметим, что пока наша задача не стала чисто локальной, поскольку полная функция Грина $G_{ij,\sigma}$ по-прежнему нелокальна. Возникает вопрос – а нельзя-ли подобрать чисто локальную задачу пусть и со сложной динамикой в отсутствие взаимодействия U, которая давала бы такую же СЭЧ? Конечно можно! ⁶¹ Пусть $\mathcal{G}_{\sigma}(\omega)$ – "свободная" динамическая функция Грина такой локальной задачи в отсутствие взаимодействия U, а $G_{d\sigma}(\omega)$ и $\Sigma_{d\sigma}(\omega)$ ее полная функция Грина и СЭЧ. Если обеспечить равенство $G_{d\sigma}(\omega) = G_{ii,\sigma}(\omega)$, то равны и СЭЧи, поскольку структура диаграмм теории возмуще-

⁶¹Более детальный анализ см. в Приложении Н



Рис. 81: В DMFT решеточная модель Хаббарда сводится к рассмотрению взаимодействующих электронов на одном узле (примеси), окруженной фермионным резервуаром, определяющим среднее динамическое поле Вейса $\mathcal{G}(\omega)$.

ний по U полностью сохраняется, а значит СЭЧ локальной задачи определяется тем же самым функционалом $\Sigma_{d\sigma} = F[G_{d\sigma}]$. Но \mathcal{G}, G_d и Σ_d связаны уравнением Дайсона, которое немедленно дает интересующую нас "свободную" динамическую функцию Грина локальной задачи:

$$\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(\omega) = \Sigma_{\sigma}(\omega) + G_{ii,\sigma}^{-1}(\omega); \qquad (297)$$

Таким образом, решеточная модель Хаббарда в пределе $d \to \infty$ сводится к чисто локальной динамической задаче. Физически она соответствует, как показано на Рис. 81, рассмотрению взаимодействующих электронов на одной примеси, помещенной в резервуар, где все воздействие резервуара сводится к динамическому среднему полю $\mathcal{G}(\omega)$, достаточно часто, по аналогии с теорией молекулярного поля в магнетизме, называемого "полем Вейсса". Это и определило название такого подхода — теория динамического среднего поля (DMFT).

Такая чисто динамическая задача все еще достаточно сложна. Однако она полностью эквивалентна (см. Приложение G.3) однопримесной модели Андерсона (SIAM) [148]. Эта модель уже давно детально исследована различными методами, и физика, содержащаяся в ней, хорошо понятна. Для этой модели развиты неплохо работающие приближенные аналитические методы, такие как, например, итеративная теория возмущений (IPT) [149] и приближение непересекающихся диаграмм (NCA) [150, 151], но самое замечательное, что модель поддается точному численному моделированию, например, методами квантового Монте-Карло (QMC) [152] или численной ренормгруппы (NRG) [153, 154].

Решение эффективной однопримесной модели Андерсона тем или иным способом или, как часто говорят, тем или иным "impurity solver" замыкает общую схему DMFT подхода. Кратко система самосогласованных уравнений DMFT (в мацубаровской технике) выглядит следующим образом:

- 1. Задается некоторая исходная локальная СЭЧ $\Sigma(i\omega_n)$ (в большинстве случаев $\Sigma(i\omega_n) = 0$);
- 2. Вычисляется "локальная" функция Грина:

$$G_{ii,\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\sigma}(i\omega_n)};$$
(298)

3. Определяется "поле Вейсса":

$$\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) = \Sigma_{\sigma}(i\omega_n) + G_{ii,\sigma}^{-1}(i\omega_n);$$
(299)

4. С такой *G* тем или иным методом решается однопримесная модель Андерсона и полученная примесная функция Грина *G*_d определяет новое значение СЭЧ:

$$\Sigma_{\sigma}(i\omega_n) = \mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) - G_d^{-1}(i\omega_n); \qquad (300)$$

 Возвращаемся к пункту 2 и процедура повторяется до тех пор пока СЭЧ не перестает изменятся.

DMFT, по-видимому, является на сегодня вершиной современного теоретического описания СКС. В рамках такого подхода впервые была получена так называемая трехпиковая структура электронной плотности состояний СКС [149], состоящая из узкого центрального (квазичастичного) пика на уровне Ферми и двух широких боковых максимумов, соответствующих верхней и нижней хаббардовским зонам. Надежное теоретическое описание получил и мотт-хаббардовский переход металлдиэлектрик. На Рис. 82 показаны плотности состояний, получаемые в DMFT(NRG)



Рис. 82: Плотности состояний, получаемые в DMFT(NRG) при половинном заполнении из "затравочной" полуэллиптической DOS.

при половинном заполнении из "затравочной" полуэллиптической DOS с шириной зоны 2D. С ростом силы корреляций U в DOS формируется характерная трехпиковая структура, а с дальнейшим ростом U при $U/2D \approx 1.5$ квазичастичный пик схлопывается и происходит переход металл-диэлектрик.

Узкий квазичастичный пик (квазичастичная зона) достаточно часто называется Кондо-пиком или резонансом Абрикосова-Сула по аналогии с задачей электронного рассеяния на локализованных спинах. На самом деле качественно причина возникновения такого пика в DMFT достаточно ясна. В отсутствие импульсной зависимости СЭЧ согласно теореме Латтинджера [155] поверхность Ферми не перенормируется 62 . Соответственно, в предположении фермижидкостного поведения, не изменяется взаимодействием и плотность состояний на уровне Ферми $N(0) = N_0(0)$ ⁶³. Таким образом, с одной стороны U стремится разорвать зону на верхнюю и нижнюю хаббардовские подзоны, с другой стороны фермижидкостное поведение сохраняет неизменной DOS на уровне Ферми, что и приводит к формированию трехпиковой

⁶²Действительно, форма изоэнергетических поверхностей в зоне Бриллюэна с такой СЭЧ не изменяется, а по теореме Латтинджера не изменяется и объем поверхности Ферми, определяемый заполнением, следовательно поверхность Ферми остается неизменной.

 $^{^{63}}N(0) = -\frac{1}{\pi}Im \sum_{\mathbf{p}} \frac{Z}{\mu - Z\mathbf{v}_{F}^{0}\mathbf{p} + i\delta} = \frac{1}{(2\pi)^{d}} \int_{S_{F}} \frac{d\sigma}{|\mathbf{v}_{F}^{0}|} = N_{0}(0),$ где Z – фермижидкостный фактор перенормировки, \mathbf{v}_{F}^{0} – "свободная" скорость Ферми, $\int_{S_{F}} d\sigma$ – интегрирование по поверхности Ферми.

структуры.

В рамках DMFT оказалось возможным исследовать и ряд двухчастичных свойств. В частности легко может быть получена оптическая (динамическая) проводимость [156, 149]. В последние годы DMFT была обобщена для "*ab initio*" расчетов "реалистичных" СКС путем ее объединения с первопринципной одноэлектронной теорией функционала плотности в приближении локальной плотности (DFT/LDA) в единую комбинированную расчетную схему LDA+DMFT [157, 158, 159, 160, 161].

При всех несомненных достоинствах DMFT этот подход имеет и ряд недостатков. В частности он полностью пренебрегает нелокальными флуктуациями (каковыми являются, например, интересующие нас псевдощелевые флуктуации). За последние годы для преодоления этого недостатка предложен ряд кластерных обобщений DMFT [162, 163]. Однако такие методы требуют существенных затрат численных ресурсов и вследствие этого сильно ограничены как по размерам кластера, так и по возможности обобщения на многоорбитальный случай. В следующем разделе диссертации будет предложен подход, позволяющий, оставаясь в эффективной однопримесной картине DMFT и полностью сохраняя ее систему самосогласованных уравнений, учесть нелокальные флуктуации, вносящие характерный масштаб длины в DMFT.

5.2 Введение масштаба длины в DMFT. DMFT+ Σ_k .

В этом разделе диссертации будет предложено обобщение теории динамического среднего поля (DMFT), включающее в уравнения DMFT характерный масштаб длины через зависящую от импульса "внешнюю" собственно-энергетическую часть $\Sigma_{\mathbf{k}}$, вызванную нелокальными поправками от SDW - подобных антиферромагнитных спиновых или CDW - типа зарядовых флуктуаций ближнего порядка. При достаточно высоких температурах эти флуктуации можно рассматривать, как "замороженное" гауссово случайное поле с конечной корреляционной длиной. Такой обобщенный DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ подход используется для численного решения слабо легированной двумерной однозонной модели Хаббарда на квадратной решетке с интегралами перескока на первых и вторых ближайших соседей. Эффективная примесная задача в DMFT решается методом численной ренормгруппы (NRG). Рассмотрены случаи сильно коррелированного металла ($B \leq U$) и легированного моттовского диэлектрика, где U - параметр кулоновского отталкивания, а B - ширина зоны проводимости. Плотность состояний, спектральная плотность и ARPES спектры, полученные в таком DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ подходе, демонстрируют формирование псевдощели вблизи уровня Ферми квазичастичной зоны. Дальнейшее рассмотрение в этом разделе в основном следует работам [66, 67, 68].

Основным недостатком традиционного DMFT подхода [146, 147, 156, 149, 164] является пренебрежение импульсной зависимостью собственно-энергетической части. Это приближение, в принципе, позволяет точно исследовать коррелированные электронные системы, полностью сохраняя локальную часть динамики, вызываемой электронными корреляциями. Для включения нелокальных эффектов, оставаясь в рамках обычной "примесной аналогии", мы предлагаем следующую процедуру. Для определенности, будем в дальнейшем рассматривать стандартную однозонную модель Хаббарда. Обобщение на многоорбитальную или многозонную модели также возможно. Главным предположением нашего подхода является выбор решеточной мацубаровской одночастичной функции Грина в виде:

$$G_{\mathbf{k}}(i\omega) = \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega) - \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)}, \qquad \omega = \pi T(2n+1), \tag{301}$$

где $\Sigma(i\omega)$ – локальный вклад в собственно-энергетическую часть (СЭЧ), выживающий в DMFT, а $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ – некоторая импульсно зависящая часть. Мы предполагаем, что последний вклад возникает вследствие взаимодействия электронов с некоторыми "добавочными" коллективными модами или флуктуациями параметра порядка или, может быть, вследствие аналогичного нелокального вклада в рамках самой модели Хаббарда.

Во избежание путаницы, необходимо подчеркнуть, что $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ также может содержать локальный (импульсно независящий) вклад, который *ucчeзaem* в пределе бесконечной размерности пространства $d \to \infty$ и не учитывается в DMFT. Вследствие этого в нашем подходе не существует проблемы двойного учета диаграмм даже если нелокальный вклад рассматривать в рамках самой модели Хаббарда. Этот вопрос вообще не возникает, если мы рассматриваем $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$, возникающее вследствие некоторого "добавочного" взаимодействия. Более важным является то, что предположение о аддитивной форме СЭЧ $\Sigma(i\omega) + \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ неявно соответствует пренебрежению интерференцией этого локального (DMFT) и нелокального вкладов. Кроме того, оба вклада в полную СЭЧ $\Sigma(i\omega) + \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ по построению обладают правильными спектральными свойствами. Таким образом, их сумма и соответственно полный пропагатор (301) также имеют правильные спектральные свойства.

Самосогласованные уравнения нашего обобщенного DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ подхода имеют следующий вид:

- 1. Стартуем с некоторой начального предположения для локальной собственноэнергетической части $\Sigma(i\omega)$, например, $\Sigma(i\omega) = 0$.
- Строим Σ_k(*iω*) в рамках некоторой (приближенной) схемы, учитывающей взаимодействие с коллективными модами или флуктуациями параметра порядка, которая, в общем случае, сама может зависеть от Σ(*iω*) и μ.
- 3. Вычисляем локальную функцию Грина

$$G_{ii}(i\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega) - \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)}.$$
(302)

4. Определяем "поле Вейса"

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) = \Sigma(i\omega) + G_{ii}^{-1}(i\omega).$$
(303)

5. Используя некоторый "impurity solver" вычисляем одночастичную функцию Грина эффективной задачи Андерсона

$$G_d(\tau - \tau') = \frac{1}{Z_{\text{eff}}} \int Dc_{i\sigma}^+ Dc_{i\sigma} c_{i\sigma}(\tau) c_{i\sigma}^+(\tau') \exp(-S_{\text{eff}})$$
(304)

с эффективным действием для фиксированного узла ("примеси") *i*:

$$S_{\text{eff}} = -\int_{0}^{\beta} d\tau_{1} \int_{0}^{\beta} d\tau_{2} c_{i\sigma}(\tau_{1}) \mathcal{G}_{0}^{-1}(\tau_{1} - \tau_{2}) c_{i\sigma}^{+}(\tau_{2}) + \int_{0}^{\beta} d\tau U n_{i\uparrow}(\tau) n_{i\downarrow}(\tau) , \quad (305)$$
$$Z_{\text{eff}} = \int D c_{i\sigma}^{+} D c_{i\sigma} \exp(-S_{\text{eff}}), \text{ } \mathbf{\mu} \ \beta = T^{-1}.$$

6. Определяем новую локальную собственно-энергетическую часть

$$\Sigma(i\omega) = \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) - G_d^{-1}(i\omega).$$
(306)

7. Используя эту собственно-энергетическую часть, как "начальную" на шаге 1, продолжаем процедуру до тех пор пока с достаточной точностью не получим

$$G_{ii}(i\omega) = G_d(i\omega). \tag{307}$$

В итоге, мы получаем желаемую функцию Грина в виде (301), где Σ(*i*ω) и Σ_k(*i*ω) – собственно-энергетические части, получаемые в конце нашей итерационной процедуры. Более детальное обоснование этой схемы в рамках диаграммного подхода дано в Приложении Н.

5.2.1 Построение k-зависящей собственно-энергетической части

Для импульсно зависящей СЭЧ мы сейчас сосредоточимся на случае рассеяния электронов на SDW-подобных антиферромагнитных спиновых (или CDW-подобных зарядовых) флуктуациях ближнего порядка. Для расчета $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ для электронов, движущихся в замороженном случайном поле гауссовых спиновых (или зарядовых) флуктуаций с доминирующим импульсом рассеяния вблизи характерного вектора **Q** (модель "горячих точек" [25]), мы используем немного обобщенную версию рекуррентной процедуры, предложенной в работах [50, 63, 64], которая позволяет учесть *все* фейнмановские диаграммы, описывающие рассеяние электронов этим случайным полем. Это становится возможным вследствие замечательного свойства нашей упрощенной модели "горячих точек": *вклад произвольной диаграммы с пересечением линий взаимодействия равен вкладу некоторой диаграммы такого же порядка без пересечения этих линий* [50]. Таким образом, мы можсем ограничиться рассмотрением только диаграмм, без пересечения линий взаимодействия, учтя вклад других *диаграмм с помощью комбинаторных множителей*, приписываемых "начальным" *вершинам или линиям взаимодействия* [50]. В результате получаем следующее рекуррентное соотношение (представление непрерывной дробью [50]) для СЭЧ:

$$\Sigma_n(i\omega\mathbf{k}) = W^2 \frac{s(n)}{i\omega + \mu - \Sigma(i\omega) - \varepsilon_n(\mathbf{k}) + inv_n\kappa - \Sigma_{n+1}(i\omega,\mathbf{k})} \quad . \tag{308}$$

Член $\Sigma_n(i\omega, \mathbf{k})$ рекуррентной процедуры содержит все вклады диаграмм с числом линий взаимодействия $\geq n$. Тогда

$$\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega) = \Sigma_{n=1}(i\omega, \mathbf{k}) \tag{309}$$

является суммой всех диаграммных вкладов. Поскольку эта рекуррентная процедура для $\Sigma_n(i\omega, \mathbf{k})$ сходится достаточно быстро, можно положить $\Sigma_n(i\omega, \mathbf{k})$ для достаточно больших n равным нулю и, используя рекуррентную процедуру, при n = 1 получаем желаемую физическую СЭЧ [64].

Величина W характеризует энергетическую шкалу, $\kappa = \xi^{-1}$ – обратная корреляционная длина SDW (CDW) флуктуаций, $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ и $v_n = |v_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^x| + |v_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^y|$ для нечетных n, а $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k})$ и $v_n = |v_{\mathbf{k}}^x| + |v_{\mathbf{k}}^y|$ для четных n. Проекции скорости $v_{\mathbf{k}}^x$ и $v_{\mathbf{k}}^y$ определяются обычной производной по импульсу "голой" электронной энергетической дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$. Наконец, s(n) представляет комбинаторные множители, определенные в разделе 3.1.1 для случая соизмеримых (47) и несоизмеримых (48) (когда **Q** не связан с периодом обратной решетки) зарядовых (CDW тип) флуктуаций, а также (49) в случае гейзенберговских спиновых флуктуаций, когда мы хотим учесть спиновую структуру взаимодействия с AFM флуктуациями в модели "почти антиферромагнитной фермижидкости" (спин–фермионная модель [63]).

Очевидно, что с этой процедурой мы вводим важный масштаб длины ξ , не присутствующий в стандартном DMFT. Физически, этот масштаб отражает влияние флуктуаций ближнего порядка (SDW or CDW) на электронный "резервуар", окружающий эффективную андерсоновскую примесь в DMFT. Мы ожидаем, что такой масштаб длины приведет к конкуренции между локальной и нелокальной физикой

Важной стороной теории является также то, что оба параметра W и ξ могут быть, в принципе, вычислены из микроскопической модели. Например, используя двухчастичный самосогласованный подход работы [165] совместно с приближениями, вводимыми в работах [63, 64], можно получить в рамках стандартной модели Хаббарда следующее микроскопическое выражение для W:

$$W^{2} = \frac{1}{4}U^{2} \frac{\langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rangle}{\langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle} [\langle n_{i\uparrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle - 2 \langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rangle] =$$

= $U^{2} \frac{\langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rangle}{n^{2}} \langle (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^{2} \rangle = U^{2} \frac{\langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rangle}{n^{2}} \frac{1}{3} \langle \vec{S}_{i}^{2} \rangle,$ (310)

где мы рассматриваем рассеяние только на антиферромагнитных спиновых флуктуациях. Различные локальные величины – спинфлуктационное $\langle \vec{S}_i^2 \rangle$, заполнение n и двойная заселенность $\langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rangle$ – могут быть легко вычислены в стандартной DMFT [149]. Более детальное получение (310) и численные результаты для W, полученные в DMFT, с использованием алгоритма квантового Монте–Карло (QMC) для решения эффективной однопримесной задачи, представлены в Приложении I. Соответствующее микроскопическое выражение для корреляционной длины $\xi = \kappa^{-1}$ также может быть получено в двухчастичном самосогласованном подходе [165]. Однако, мы ожидаем, что такие результаты для ξ не будут достаточно надежными, поскольку этот подход действителен только для относительно малых (или промежуточных) величин U/t. Таким образом, далее мы будем рассматривать W и особенно ξ , как феноменологические параметры, подлежащие определению из эксперимента.

Наше схема может быть легко обобщена для включения других видов взаимодействий. В частности, рассеяние на случайных примесях с точечным потенциалом V легко может быть учтено в самосогласованном борновском приближении [124]. Тогда, в сравнении с безпримесным случаем, необходимо лишь провести замену (перенормировку) [68]:

$$\varepsilon_n \to \varepsilon_n - \rho V^2 \sum_{\mathbf{p}} ImG(\varepsilon_n \mathbf{p}) \equiv \varepsilon_n \eta_\epsilon$$
 (311)

$$\eta_{\epsilon} = 1 - \frac{\rho V^2}{\varepsilon_n} \sum_{\mathbf{p}} ImG(\varepsilon_n \mathbf{p})$$
(312)

Если не проводить полностью самосогласованный расчет примесной СЭЧ, тогда в

простейшем приближении мы имеем:

$$\varepsilon_n \to \varepsilon_n \eta_\epsilon = \varepsilon_n + \gamma sign \varepsilon_n$$
 (313)

$$\eta_{\epsilon} = 1 + \frac{\gamma}{|\varepsilon_n|} \tag{314}$$

где $\gamma = \pi \rho V^2 N_0(0)$ – стандартная борновская частота рассеяния на примесях ($N_0(0)$ – плотность состояний "свободных" электронов на уровне Ферми).

5.2.2 Результаты и обсуждение

Детали вычислений

Далее мы хотим обсудить результаты для стандартной однозонной модели Хаббарда на квадратной решетке с интегралами перескоков на первых (t) и вторых (t') ближайших соседей, что приводит к электронной дисперсии:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a) - 4t' \cos k_x a \cos k_y a \quad (315)$$

где *а* – постоянная решетки. Корреляции вводятся отталкивательным локальным двухчастичным взаимодействием *U*. В качестве шкалы энергий мы выбираем интеграл перескока на ближайших соседей *t*, а для шкалы длин – постоянную решетки *a*.

Для квадратной решетки невозмушенная ширина зоны – B = 8t. Для изучения сильно коррелированного металлического состояния, получаемого допированием моттовского диэлектрика, мы берем величину кулоновского взаимодействия U = 40t и заполнение n = 0.8 (дырочное допирование). Выбор такого значения U мотивирован двумя причинами. Во-первых, такая величина U приводит к диэлектрическому решению в DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ при половинном заполнении. Во-вторых, оценки U для стехиометрического La₂CuO₄ ("родительский" состав), основанные на "констрейнт" LDA[166] расчетах, обычно дают U порядка 0 eV[167], которое соответствует 40t при нашем выборе параметров. Случай коррелированных металлов с $B \gtrsim U$ реализуем выбором U = 4t (величину, используемую в ряде теоретических работ при обсуждении псевдощелевого состояния) и двух вариантов заполнения: половинное (n = 1.0) и

n = 0.8 (дырочное допирование). В качестве типичных величин для W мы выбираем W = t и W = 2t (фактически, как приближенные пределы этой величины — см. Приложение I) и для корреляционной длины $\xi = 2a$ и $\xi = 10a$ (мотивируя выбор, в основном, экспериментальными данными для купратов [25, 63]).

DMFT сводит решеточную задачу к эффективной однопримесной, определяемой выражениями (304) и (305). Мы используем как "impurity solvers" два надежных численно точных метода — квантовый Монте–Карло (QMC) [152] и численную ренормализационную группу (NRG) [153, 154]. Вычисления проводились для случая t' = 0и t'/t=-0.4 (более или менее типичного для купратов) и двух значений температур T = 0.088t и T = 0.356t (для NRG вычислений) ⁶⁴. QMC вычисления двойного заполнения как функции заполнения проводились для температур T = 0.1t и T = 0.4t⁶⁵. Ниже мы представляем результаты только для наиболее типичных зависимостей и параметров, большее число рисунков можно найти в работе [65].

Обобщенный DMFT+ Σ_k подход: плотность состояний

Начнем обсуждение результатов, получаемых в нашем обобщенном DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ подходе, с плотностей состояний (DOS) для случая малого (относительно ширины зоны) кулоновского взаимодействия U = 4t. Как уже обсуждалось во введении, характерной чертой сильно коррелированного металлического состояния является сосуществование нижних и верхних хаббардовских зон, расщепленных кулоновским взаимодействием U с квазичастичным пиком на уровне Ферми [156, 149]. Поскольку при половинном заполнении невозмушенная DOS на квадратной решетке имеет сингулярность Ван–Хова на уровне Ферми (t' = 0) или вблизи него (t'/t = -0.4) невозможно трактовать пик на уровне Ферми просто как квазичастичный пик. Фактически, имеется два вклада в этот пик: (i) от квазичастичного пика, появляющегося в сильно коррелированных металлах вследствие многочастичных эффектов, и (ii) сглаженной ванхововской сингулярности в невозмущенной DOS⁶⁶.

⁶⁴Параметр дискретизации NRG Λ=2, число нижних энергетических состояний – 1000, обрезание вокруг энергии Ферми !)⁻⁶, уширяющий параметр b=0.6.

⁶⁵Число переворотов спинов на разогреве – 30000, число QMC переворотов спинов – 200000, число срезов мнимого времени – 40.

⁶⁶Нами проверялось, что с увеличением кулоновского отталкивания сингулярность Ван-Хова



Рис. 83: Сравнение плотностей состояний, полученных DMFT(NRG)+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ расчетами для различных комбинаторных множителей (SF — спин-фермионная модель, соизмеримые флуктуации), обратных корреляционных длин (ξ^{-1}) в единицах постоянной решетки, температур (T) с псевдощелевой амплитудой W = 2t. Левая колонка соответствует t'/t = -0.4, правая — t' = 0. Для всех графиков кулоновское взаимодействие U = 4t и n = 1. Уровень Ферми соответствует нулю энергии.



Рис. 84: Сравнение плотностей состояний, полученных DMFT(NRG)+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ расчетами для заполнения n = 0.8, другие параметры как на Рис. 83.

На Рис. 83 и 84 показаны соответствующие DMFT(NRG) плотности состояний для n = 1 и n = 0.8 в случае t'/t = -0.4 (левая панель) и t' = 0 (правая панель) для двух различных температур T = 0.356t (нижняя панель) и T = 0.088t (верхняя панель). Черные кривые получены в отсутствие флуктуаций. Остальные кривые на Рис. 83 и 84 представляют результаты для DOS с нелокальными флуктуациями с амплитудой W = 2t. Для всех наборов параметров мы видим, что введение нелокальных флуктуаций приводит к формированию псевдощели на квазичастичном пике.

Поведение псевдощелей в плотностях состояний имеет ряд общих черт. Например, для t'=0 при половинном заполнении (Рис. 83, правая колонка) мы видим, что щель наиболее ярко выражена. Для n = 0.8 (Рис. 84, правая колонка) картина очень похожа, но слегка асимметричная. Ширина псевдощели (расстояние между пиками вблизи уровня Ферми) порядка $\sim 2W$. Уменьшение величины W от 2t до t приводит к двухкратному уменьшению ширины псевдощели и уменьшению ее глубины. При использовании комбинаторных факторов, соответствующих спин-фермионной модели (см. (49)), псевдощель оказывается более выраженной, чем в случае соизмеримых зарядовых флуктуаций (комбинаторные факторы (48)). Влияние корреляционной длины соответствует ожидаемому. Изменение ξ^{-1} от $\xi^{-1} = 0.1$ до $\xi^{-1} = 0.5$, т.е. уменьшение корреляционной длины, слегка замывает псевдощель. Увеличение температуры с T = 0.088t до T = 0.356t приводит к общему уширению структур в плотностях состояний. Эти наблюдения качественно сохраняются и для t'/t = -0.4(Рис. 83 и 84, левые колонки) с дополнительной асимметрией кривых DOS, вследствие возможности прыжков на вторых ближайших соседей. Необходимо обратить внимание, что для t'/t = -0.4 и $\xi^{-1} = 0.5$ псевдощель почти исчезает. Следует отметить, что результаты, получаемые в обобщенном DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ подходе с U = 4t(меньшем ширины зоны B), качественно похожи на полученные ранее в отсутствие хаббардовского взаимодействия [63, 64].

Сейчас рассмотрим случай допированного моттовского диэлектрика с силой кулоновского взаимодействия U = 40t, t'/t = -0.4 и заполнение n = 0.8. Характернынепрерывно трасформируется в квазичастичный пик при $U = (6 \div 8)t$.



Рис. 85: Сравнение плотностей состояний, полученных DMFT(NRG)+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ расчетами для t'/t = -0.4, T = 0.088t, U = 40t, W = 2t и заполнения n = 0.8.

ми чертами в DOS (Рис. 85) для таких сильно коррелированных металлов является сильное разделение нижней и верхней хаббардовских зон и уровень Ферми, пересекающий нижнюю хаббардовскую зону (дырочное допирование). В отсутствие нелокальных флуктуаций квазичастичный пик опять формируется на уровне Ферми, но верхняя хаббардовская зона сейчас далеко справа и не касается квазичастичного пика (в отличие от случая малого кулоновского взаимодействия). DOS в отсутствие нелокальных флуктуаций опять показана черной линией на Рис. 85. Результаты для случая t' = 0 представлены в более подробной нашей работе [65].

Для достаточно сильных нелокальных флуктуаций W = 2t, псевдощель возникает в середине квазичастичного пика. Кроме того, мы наблюдаем, что нижняя хаббардовская зона слегка уширена флуктуационными эффектами. Качественно поведение псевдощелевых аномалий опять похоже на описанное выше в случае U = 4t, т.е. уменьшение ξ замывает псевдощель, делает ее менее выраженной, уменьшение W с W = 2t до W = t сужает псевдощель и делает ее более мелкой (см.. [65]). Заметим также, что для допированного моттовского диэлектрика псевдощель заметно более выраженна для спиновых SDW-подобных флуктуаций, чем для зарядовых CDW-



Рис. 86: Сравнение плотностей состояний, полученных DMFT(NRG)+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ расчетами для t'/t = -0.4, T = 0.088t, U = 40t, n = 0.8 и для частоты примесного рассеяния $\gamma = 1.2t$.

подобных.

Имеются, однако, и вполне заметные отличия от случая U = 4t. Например, ширина псевдощели в DOS оказывается существенно меньше, чем 2W (см. Рис. 85), что мы связываем с заметным сужением самого квазичастичного пика локальными корреляциями.

Рассеяние на случайных примесях в общем случае приводит к заполнению псевдощели с ростом частоты примесного рассеяния и для коррелированного металла и для допированного моттовского диэлектрика. В качестве типичного примера на Рис. 86 показан результат расчетов плотности состояний в присутствие примесей для допированного моттовского диэлектрика. Здесь для учета примесей применялась не самосогласованная процедура (используя (313), (314), полностью самосогласованная по примесям процедура приводит лишь к весьма незначительным количественным отличиям.

Обобщенный DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ подход: спектральная плотность $A(\omega, \mathbf{k})$

В предыдущем разделе мы обсуждали плотности состояний, получаемые самосогласованно DMFT+Σ_k подходом. Получив самосогласованное решение DMFT+Σ_k



Рис. 87: 1/8 невозмущенных поверхностей Ферми для различных заполнений n и комбинаций (t, t'), использованных для расчета спектральной плотности $A(\mathbf{k}, \omega)$. Диагональная линия соответствует границе антиферромагнитной зоны Бриллюэна Черным кругом отмечены так называемые "горячие точки".

уравнений с нелокальными флуктуациями мы можем также сосчитать и спектральные плотности $A(\omega, \mathbf{k})$:

$$A(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(\omega) - \Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)},$$
(316)

где локальная СЭЧ $\Sigma(\omega)$ и химический потенциал μ вычислены самосогласованно, как описано в части 5.2. Для представления $A(\omega, \mathbf{k})$ мы выбирали \mathbf{k} -точки вдоль "затравочных" поверхностей Ферми для различных типов решеточного спектра и заполнения n = 0.8. На Рис. 87 можно видеть соответствующую форму этих "затравочных" поверхностей Ферми (представлена только 1/8 часть поверхности Ферми в первом квадранте зоны Бриллюэна).

Первой величиной, которую мы сейчас исследуем будет СЭЧ $\Sigma(\mathbf{k}, \omega + i\delta)$, показанная на Рис. 88 для t'/t = -0.4, n = 0.8, U = 4t (левая колонка) и U = 40t (правая колонка). В качестве **k**-точек мы выбираем центр первой зоны Бриллюэна (Г), "горячую точку" и "холодную точку" (точка "В" на Рис. 87). Результаты получены с использованием NRG при температуре T = 0.088t. Характерные структуры в СЭЧ для U = 4t заметно шире, но обнаруживают после внимательного рассмотрения черты похожие на случай U = 40t. Поведение в Г и "В" точках очень отличается от структур в "горячей точке" В частности, в первых двух **k**-точках Im $\Sigma(\mathbf{k}, \omega + i\delta)$ демонстрирует параболический максимум вблизи энергии Ферми, а в последней – развивается мини-

мум. Такая структура в СЭЧ приводит к достаточно ясно выраженной псевдощели в спектральной плотности в этой k-точке и слабому псевдощелевому поведению в плотности состояний. Ее появление с очевидностью связано с наличием спиновых флуктуаций в "горячей точке". Заметим, что похожее поведение наблюдается и в весьма затратных (по компьютерным ресурсам) кластерных среднеполевых расчетах с интерпретацией, как вызываемое спиновыми флуктуациями, основанной лишь на физических ожиданиях. Наши расчеты, полученные при минимальных численных затратах, действительно показывают, что включение короткодействующих флуктуаций приводит к этим нефермижидкостным структурам в одночастичной СЭЧ. Такое поведение вполне типично для этой задачи и наблюдалось разными группами с использованием различных методов[168, 169, 170, 171]. В ряде работ был получен пик в центре псевдощели, что связывалось со специфической формой СЭЧ вблизи уровня Ферми[170, 169, 172].

Дальше мы займемся спектральной плотностью и сосредоточимся в основном на случае U = 4t и заполнении n = 0.8 (поверхность Ферми на Рис. 87(а)). Соответствующая спектральная плотность $A(\omega, \mathbf{k})$ изображена на Рис. 89. Когда t'/t = -0.4(верхний ряд), спектральная плотность вблизи диагонали зоны Бриллюзна (точка В) имеет типичное фермижидкостное поведение – достаточно острый пик вблизи уровня Ферми. В случае спиновых SDW-подобных флуктуаций этот пик сдвинут вниз по энергии приблизительно на -0.5t (левая верхняя панель). Вблизи "горячих точек" форма $A(\omega, \mathbf{k})$ полностью изменяется. $A(\omega, \mathbf{k})$ становится двухпиковой и нефермижидкостной. Непосредственно в "горячей точке" для спиновых флуктуаций $A(\omega, \mathbf{k})$ имеет два одинаковых по интенсивности пика, расположенных симметрично относительно уровня Ферми и разнесенных на $\sim 1.5W$ (аналогично [63, 64]). Для соизмеримых зарядовых флуктуаций спектральная плотность в области "горячей точки" имеет один широкий пик центрированный на уровне Ферми с шириной $\sim W$. Такое слияние двух пиков в "горячей точке" для соизмеримых флуктуаций прежде наблюдалось в работе [64]. Однако, вблизи точки А и этот тип флуктуаций также приводит


Рис. 88: Действительная (пунктир) и мнимая (сплошная линия) часть СЭЧ $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ для t/t' = -0.4, U = 4t (левая колонка) и U = 40t (правая колонка) для характерных **k**-точек: Г, "горячая точка" (см. Рис. 87) и "холодная точка" (точка "В" на Рис. 87). Для всех графиков заполнение n = 0.8, температура T = 0.088t, обратная корреляционная длина $\xi^{-1} = 0.1$, псевдощелевой потенциал W = 2t и спин-фермионная (SF) комбинаторика.



Рис. 89: Спектральная плотность $A(\mathbf{k}, \omega)$, полученная из DMFT(NRG)+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ расчетов вдоль поверхностей Ферми, показанных на Рис. 87. Модельные параметры: U = 4t, n = 0.8, W = 2t, $\xi^{-1} = 0.1$ и температура T = 0.088t. **k**-точка соответствующая "горячей" отмечена пунктирной линией. Уровень Ферми соответствует нулю энергии.



Рис. 90: Спектральная плотность $A(\mathbf{k}, \omega)$, полученная из DMFT(NRG)+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ расчетов для U = 40t, другие параметры как на Рис. 89.

к двухпиковой структуре в спектральной плотности.

Спектральные плотности для случая U = 4t при половинном заполнении (n = 1)и t'/t = -0.4 похожи на только что обсужденные для n = 0.8. Однако, псевдощель в данном случае более выраженная и для SDW флуктуаций остается открытой везде вблизи границ антиферромагнитной зоны Бриллюэна [65].

На нижней панели Рис. 89 показаны спектральные плотности для 20% дырочного допирования (n = 0.8) и t' = 0 (Поверхность Ферми на Рис. 87(b)). Поскольку вся поверхность Ферми близка к границе антиферромагнитной зоны Бриллюэна, псевдощелевые аномалии достаточно сильны и почти не изменяются вдоль поверхности. При половинном заполнении (Рис. 89, нижняя панель) и t' = 0 поверхность Ферми фактически совпадает с границей антиферромагнитной зоны Бриллюэна. В этом случае вся поверхность Ферми является "горячей областью" (полный "нестинг") и спектральная плотность симметрична относительно уровня Ферми. Для SDW флуктуаций имеются два пика расщепленных на ~ 1.5W. CDW флуктуации опять дают один пик на уровне Ферми с шириной ~ W. Для случая допированного моттовского диэлектрика (U = 40t, n = 0.8), спектральные плотности, получаемые в DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ подходе, представлены на Рис. 90. Качественно форма этих спектральных плотностей похожа на показанное на Рис. 89 для случая не очень сильных корреляций U = 4t. Как уже отмечалось выше, сильные кулоновские корреляции приводят к сужению квазичастичного пика и соответствующему уменьшению ширины псевдощели. Как видно на Рис. 90 структуры, связанные с псевдощелью, здесь занимают интервал энергий $\sim t$, в то время как для U = 4t этот интервал был $\sim 4t$. Необходимо также отметить, что, в отличие от случая U = 4t, спектральные плотности здесь менее интенсивные вследствие переноса части спектрального веса в верхнюю хаббардовскую зону, расположенную на энергиях $\sim 40t$ и отделенную от квазичастичного пика.

Используя другой довольно общий выбор **k**-точек, мы можем вычислить $A(\omega, \mathbf{k})$ вдоль высоко симметричных направлений первой зоны Бриллюэна: $\Gamma(0, 0) - X(\pi, 0) - M(\pi, \pi) - \Gamma(0, 0)$. Спектральные плотности для таких **k**-точек для SDW флуктуаций собраны на Puc. 91. Характерные кривые для допированного моттовского диэлектрика можно найти в статье .[65]. Для всего набора параметров можно видеть характерную двухпиковую псевдощелевую структуру вблизи X точки зоны Бриллюэна. В центре $M - \Gamma$ направления (так называемая "нодальная" точка) можно видеть возникновение псевдощели, как память о AFM щели, имеющей здесь максимум в случае полного AFM упорядочения. Таким образом, такое "кинк"-подобное поведение в нодальной точке вызывается рассеянием коррелированных электронов на псевдощелевых флуктуациях. Изменение заполнения приводит в основном к общему смещению спектральных плотностей относительно уровня Ферми.

Имея спектральные плотности, мы можем рассчитать спектры фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES), которая является наиболее прямым экспериментальным способом наблюдения псевдощели в реальных составах. Для этого мы должны просто умножить наши результаты для спектральных плотностей на функцию Ферми при интересующей нас температуре T = 0.088t. Типичный пример полученного



Рис. 91: Спектральная плотность $A(\mathbf{k}, \omega)$, полученная из DMFT(NRG)+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ расчетов вдоль высокосимметричных направлений первой зоны Бриллюэна $\Gamma(0, 0)$ - $X(\pi, 0)$ - $M(\pi, \pi)$ - $\Gamma(0, 0)$, спин-фермионная комбинаторика (SF) (левая колонка) и соизмеримая комбинаторика (правая колонка). Модельные параметры: U = 4t, n = 0.8, W = 2t, $\xi^{-1} = 0.1$ и температура T = 0.088t. Уровень Ферми соответствует нулю энергии.



Рис. 92: Спектр ARPES, полученный из DMFT(NRG)+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ расчетов для U = 4t и n = 0.8 вдоль поверхностей Ферми, показанных на Рис. 87, все другие параметры как на Рис. 89.

DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ ARPES спектра вдоль поверхности Ферми представлен на Рис. 92. Более подробно ARPES спектры, полученные в DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ подходе, для различных параметров можно найти в статье [65]. Отметим, что для t'/t = -0.4 (верхняя панель Рис. 92) при изменении \mathbf{k} от точки "A" до точки "B" пик, расположенный немного ниже уровня Ферми, изменяет свое положение и движется вниз по энергии. Одновременно он уширяется и становится меньше по интенсивности. Движение максимума пика показано точечной линией. Такое поведение пика в ARPES очень напоминает наблюдаемое экспериментально в купратах [25, 63, 74].

5.2.3 Выводы

Предложен обобщенный DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ подход, который предназначен для учета весьма существенных эффектов от нелокальных корреляций (в принципе любого типа) в дополнение к (фактически точному) описанию локальных динамических корреляций в DMFT. В стандартной DMFT "резервуар", окружающий андерсоновскую примесь, пространственно однороден, поскольку DMFT СЭЧ зависит лишь от энергии. Основная идея нашего подхода — оставаясь в рамках обычной андерсоновской однопримесной аналогии, ввести масштаб длины, возникающий вследствие нелокальных корреляций, в эффективную среду – "резервуар", окружающий примесь, т.е. сделать его пространственно неоднородным. Такое обобщение DMFT позволяет дополнить ее **k**-зависимой СЭЧ $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$, т.е. преодолеть хорошо известный недостаток стандартной DMFT, связанный с локальностью СЭЧ. Это открывает возможность доступа к физике низкоразмерных сильно коррелированных систем, где наряду с различными типами пространственных флуктуаций (например, некоторого параметра порядка), становится важным непертурбативное описание, по крайней мере, в отношении существенных локальных динамических корреляций Однако, необходимо подчеркнуть, что наша процедура не служит некоторым способом проведения систематического 1/д-разложения, являясь только качественным методом для включения масштаба длины в DMFT. Тем не менее, мы полагаем, что такая техника может давать весьма полезное понимание физических процессов, приводящих к вызываемым корреляциями *k*-зависимым структурам в одночастичных свойствах.

В этом разделе мы моделируем такие эффекты для двумерной модели Хаббарда, включив в "резервуар" процессы рассеяния электронов на нелокальных коллективных SDW-подобных антиферромагнитных спиновых (или CDW-подобных, зарядовых) флуктуациях. Соответствующая **k**-зависимая СЭЧ $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ получается из непертурбативной итеративной схемы [63, 64]. Такой выбор $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$ позволяет обратится к проблеме формирования псевдощели в сильно коррелированном металлическом состоянии. Мы показываем, что псевдощель возникает на уровне Ферми внутри квазичастичного пика, вводя новый малый энергетический масштаб порядка W в DOS и, более выражено, в спектральную плотность $A(\omega, \mathbf{k})$. Подчеркнем, что наше обобщение DMFT приводит к нетривиальной и, по нашему мнению, физически разумной **k**-зависимости спектральной плотности. Важно, что этот этот конкретный выбор $\Sigma(\mathbf{k},\omega)[63, 64]$ не приводит к сложностям с проблемой "двойного учета" в нашем комбинированном $DMFT + \Sigma_k$ подходе. Кроме того комбинация диаграммно корректной техники, подобной DMFT[146, 147, 156, 149, 164], и анзаца работ [63, 64] сохраняет правильными аналитические свойства для объединенной СЭЧ $\Sigma(i\omega)+\Sigma_{\bf k}(i\omega),$ а значит и для соответствующего одноэлектронного пропагатора (301).

Конечно, наше наблюдение псевдощели не является совершенно новым. Похожие результаты по формированию псевдощели в 2d модели Хаббарда уже получались в рамках кластерных обобщений DMFT, т.е. динамического кластерного приближения (DCA)[162, 173] и клеточного DMFT (CDMFT) [168, 174], CPT [175, 176, 177] и подхода с двумя узлами с хаббардовским взаимодействием самосогласованно встроенными в "резервуар" [169]. Однако, эти методы имеют характерные ограничения относительно размера кластера, температур или доступных заполнений, а в случае QMC – величин локального кулоновского взаимодействия. Недавно также и EDMFT применялось для демонстрации формирования псевдощели в DOS, вследствие динамических кулоновских корреляций[178]. Заметим, однако, что в рамках EDMFT не существует способа получения **k**-зависимости спектральной плотности сверх возникающей от невозмущенной электронной энергетической дисперсии. Заметный прогресс был достигнут в приближении слабой связи для модели Хаббарда [179] и с использованием функциональной ренормализационной группы [170, 171]. В нескольких статьях формирование псевдощели описывалось в рамках t-J модели [180]. Более общая схема для включения нелокальных корреляций была также сформулирована в так называемом GW расширении DMFT [181, 182].

Хотя на первый взгляд введение дополнительных феноменологических параметров (корреляционной длины ξ и W) через определение $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ кажется шагом назад относительно методов отмеченных выше, оно фактически открывает возможность для систематизации различных типов нелокальных флуктуаций и их эффектов, а также оказывает помощь в анализе экспериментальных и теоретических данных, полученных в более продвинутых схемах в терминах интуитивно ясной физической картины. Заметим, однако, что в принципе параметры ξ и W могут быть также вычислены в рамках исходной (2d хаббардовской) модели[165].

Существенным преимуществом предложенной комбинации двух непертурбативных методов (DMFT и $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ из [63, 64]) является отсутствие ограничений на модельные параметры, как, например, в кластерных среднеполевых теориях. Наша схема работает для любых значений кулоновского взаимодействия U, амплитуды псевдощели W, корреляционной длины ξ , заполнения n и невозмущенной электронной дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$ на двумерной квадратной решетке для произвольного выбора **k**-точек. Хотя здесь был представлен только случай достаточно высоких температур, использование вильсоновской NRG, что пока невозможно в DCA или CDMFT для больших кластеров, для решения эффективной однопримесной задачи открывает возможность изучения свойств и при $T \rightarrow 0$ Кроме того, DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ подход может быть легко обобщен для учета орбитальных степеней свободы, фононов, примесей и т.д.

5.3 Эволюция поверхности Ферми в псевдощелевом состоянии.

Данный раздел будет целиком посвящен проблеме эволюции поверхности Ферми под воздействием псевдощелевых флуктуаций. В первой части раздела мы рассмотрим проблему частичного "разрушения" поверхности Ферми и формирования "дуг Ферми", наблюдаемого в ARPES экспериментах на купратах. Этой проблемы мы уже частично касались в разделе 89 Главы 3. Однако, здесь мы с помощью развитого в предыдущем разделе DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ подхода исследуем влияние пседощели на поверхность Ферми в сильно коррелированных системах, каковыми и являются ВТСП купраты.

Вторая часть раздела будет посвящена возможной существенной перестройке поверхности Ферми с образованием малых дырочных и электронных "карманов" в псевдощелевом состоянии при достаточно низких температурах. Именно такую картину дают недавние эксперименты по магнитным квантовым осцилляциям в купратах, находясь в разительном противоречии с ARPES данными. В этой части раздела мы представим точно решаемую упрощенную модель псевдощели, которая способна описать плавный переход от картины "ферми дуг" при высоких температурах (типичных для большинства ARPES экспериментов) к малым "карманам" поверхности Ферми при низких температурах (типичных для экспериментов по магнитным квантовым осцилляциям).

5.3.1 "Разрушение" поверхности Ферми псевдощелевыми флуктуациями в сильно коррелированных системах.

В данном параграфе, в рамках развитого в этой главе обобщенного DMFT+Σ_k подхода, мы проанализируем проблему "разрушения" поверхности Ферми псевдощелевыми флуктуациями в ВТСП соединениях. Рассчитывая профили спектральной плотности для различных параметров модели, как для коррелированного металла, так и для допированного моттовского диэлектрика, мы продемонстрируем качественную картину "разрушения" поверхности Ферми и формирования "Ферми дуг" под воздействием псевдощелевых флуктуаций в качественном согласии с ARPES экспериментами. Дальнейшее рассмотрение в этом параграфе в основном следует работам [66, 183].

Наш обобщенный DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ подход, позволяющий ввести характерный масштаб длины ξ , не присутствующий в стандартной DMFT, развит в предыдущем разделе. Физически этот масштаб длины эмитирует короткодействующие (SDW или CDW) корреляции в фермионном термостате, окружающем эффективную андерсоновскую примесь. Полная СЭЧ в одночастичной функции Грина (301) выбирается в виде аддитивной суммы вкладов локальной кулоновской СЭЧ $\Sigma(\omega)$ и нелокальной $\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)$, связанной с рассеянием на псевдощелевых флуктуациях и определяемой рекуррентной процедурой (308,309). Такой выбор СЭЧ пренебрегает интерференцией между этими вкладами, но позволяет сохранить неизменной общую структуру самосогласованных уравнений DMFT (302-307).

Далее мы будем обсуждать стандартную однозонную модель Хаббарда на квадратной решетке с интегралами перескока на первых (t) и вторых (t') ближайших соседей с "голой" дисперсией (315). Корреляции вводятся локальным отталкивательным кулоновским взаимодействием U. Рассеяние на псевдощелевых флуктуациях, характеризуемых амплитудой псевдощели W и корреляционной длиной ξ , вводится с помощью нелокальной СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)$. Оба параметра W и ξ могут быть в принципе рассчитаны непосредственно из микроскопической модели (см. предыдуший раздел и [65, 67]). Однако, здесь мы будем рассматривать и W и особенно ξ как некоторые феноменологические параметры, определяемые из эксперимента. В дальнейшем, в качестве энергетической шкалы выбираем интеграл перескока на ближайших соседей t, масштаба длины – постоянную решетки a.

Для квадратной решетки ширина затравочной зоны B = 8t. Для изучения сильно коррелированного металлического состояния, получаемого допированием моттовского диэлектрика, мы выбираем U = 40t для величины хаббардовского взаимодействия и заполнение n = 0.8 (дырочное допирование). Коррелированный металл ($B \gtrsim U$) рассматривается для случая U = 4t и фактора заполнения n = 0.8. Для амплитуды псевдощели W мы выбираем достаточно типичные величины W = t и W = 2t(фактически, приближенные пределы для величины W, полученной в [65, 67]), а для корреляционной длины мы используем $\xi = 10a$ (мотивируя, главным образом, экспериментальными данными для купратов [50, 63]).

DMFT сводит решеточную задачу к эффективной самосогласованной однопримесной задаче Андерсона, определяемой уравнениями (304,305), для решения которой в качестве "impurity solver" мы здесь также будем использовать надежный метод численной ренормгруппы (NRG) [153, 154].

После получения самосогласованного решения системы DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ уравнений (302-307), учитывающих и нелокальные флуктуации, мы можем рассчитать спектральную плотность $A(\omega, \mathbf{k})$:

$$A(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(\omega) - \Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)},$$
(317)

где СЭЧи $\Sigma(\omega)$, $\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)$ и химический потенциал μ уже самосогласованно вычислены. Плотность состояний может быть рассчитана интегрированием (317) по зоне Бриллюэна.

Обширные расчеты плотностей состояний, спектральных плотностей и ARPES спектров в таком подходе представлены в предыдущем разделе этой Главы. В общем случае псевдощель появляется в плотностях состояний на квазичастичном пике (коррелированной зоне проводимости). Качественное поведение псевдощелевых аномалий аналогично некоррелированному случаю U = 0 [50, 64](см. также Главу 3), например, уменьшение ξ делает псевдощель менее выраженной, а уменьшение W сужает псевдощель и делает ее более мелкой. Для допированного моттовского диэлектрика мы получали, что псевдощель заметно более выражена для SDW–подобных флуктуаций по сравнению с CDW. Поэтому ниже мы представляем в основном результаты полученные с использованием комбинаторики (49) спин-фермионной модели.

Как отмечалось выше в рамках стандартной DMFT поверхность Ферми не перенормируется взаимодействием, т.е. остается такой же как для "голых" квазичастиц



Рис. 93: Поверхности Ферми, получаемые для не коррелированного случая U = 0 и заполнения n = 0.8. Показана диаграмма интенсивности спектральной плотности (317) для $\omega = 0$. (a) – W = 0.1t; (b) – W = 0.3t; (c) – W = t; (d) – "поверхности Ферми", получаемые решением ур. (318). Пунктир – "голая" поверхность Ферми.

[147]. Однако, в случае нетривиальной импульсной зависимости СЭЧ, может возникать существенная перенормировка поверхности Ферми вследствие формирования псевдощели [63]. Существует несколько способов определения поверхности Ферми в сильно коррелированных системах с псевдощелевыми флуктуациями. В дальнейшем мы будем использовать диаграмму интенсивности (в зоне Бриллюэна) для спектральной плотности (317), взятой при $\omega = 0$, часто называемую картой поверхности Ферми. Такая карта непосредственно определяется ARPES и положение максимума интенсивности на ней определяет поверхность Ферми в обычном фермижидкостном случае.

На Рис. 93 (a-c) показаны такие карты для не коррелированного металла (U = 0) с псевдощелевыми флуктуациями, полученные из функции Грина напрямую определяемых рекуррентной процедурой (308),(309)

Для сравнения на Рис. 93 показаны перенормированные поверхности Ферми, полученные в этой модели достаточно формальным определением поверхности Ферми как решения уравнения:

$$\omega - \varepsilon(\mathbf{k}) + \mu - Re\Sigma(\omega) - Re\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega) = 0 \tag{318}$$



Рис. 94: "Разрушение" поверхности Ферми, полученное DMFT(NRG)+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ расчетами для U = 4t и n = 0.8. Обозначения такие же как на Рис. 93. (a) – W = 0.2t; (b) – W = 0.4t; (c) – W = t; (d) – W = 2t. Черными линиями показаны решения ур. (318).

при $\omega = 0$, используемого, например, в работе [63]. Очевидно, что последнее определение дает поверхность Ферми близкую к получаемой из диаграммы интенсивности при малых W, но не учитывает существенное ее размытие, особенно важное при больших W. Диаграмма интенсивности спектральной плотности ясно демонстрирует "разрушение" поверхности Ферми в "горячих точках" с формированием "Ферми дуг" с ростом W, аналогично наблюдаемому в пионерских ARPES экспериментах Нормана и др. [118] и подтвержденных впоследствии в огромном числе работ.

На Рис. 94 показаны результаты для случая коррелированного металла с U = 4t, а на Рис. 95 для допированного моттовского диэлектрика. Снова мы наблюдаем качественное поведение ясно демонстрирующее "разрушение" хорошо определенной поверхности Ферми в сильно коррелированных металлах с ростом псевдощелевой амплитуды W.

Роль конечных U сводится к уменьшению интенсивности спектральной плотности в сравнении с случаем U = 0 и приводит к дополнительному "размытию", деляющему "горячие точки" менее заметными. Опять "разрушение" поверхности Ферми начинается в окрестности "горячих точек" для малых величин W, но практически сразу



Рис. 95: Поверхности Ферми, полученные DMFT(NRG)+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ расчетами для U = 40t и n = 0.8. Другие параметры и обозначения такие же как на Рис. 94.

она пропадает во всей антинодальной области (окрестность точек $X(\pi,0)$, $Y(0,\pi)$) зоны Бриллюэна, а сохраняются только "Ферми дуги" в нодальной области достаточно близкие к "затравочной" поверхности Ферми. Эти результаты дают естественное объяснение наблюдаемому в ARPES поведению и тому факту, что существование области "горячих точек" наблюдается только в достаточно редких случаях [39]. Более подробно вопрос о возможности наблюдения области "горячих точек" (с примерами таких систем) будет рассмотрен в разделе 5.5 этой Главы, посвященном рассмотрению реальных систем методом LDA+DMFT+ Σ_k .

Для случая допированного моттовского диэлектрика, показанного на Рис. 95, мы видим, что "поверхность Ферми" достаточно плохо определена для всех величин W. Профиль спектральной плотности гораздо более "размыт", чем в случае меньших величин U, отражая важную роль корреляций.

На Рис. 94, 95 мы снова видим, что "поверхность Ферми", полученная решением уравнения (318), дает качественное представление о поведении реальной поверхности Ферми лишь при достаточно малых W. При большой амплитуде псевдощели такое определение поверхности Ферми качественно адекватно реальному поведению, следующему из анализа спектральной плотности, лишь в нодальной области. В заключение подведем некоторые итоги. Здесь мы интересовались в основном проблемой перенормировки ("разрушения") поверхности Ферми сильно коррелированных систем псевдощелевыми флуктуациями. Наше обобщение DMFT приводит к нетривиальной и, по нашему мнению, физически разумной **k**-зависимости спектральной плотности, ведущей к перенормировке поверхности Ферми весьма похожей на наблюдаемую в ARPES экспериментах.

Аналогичные результаты были получены в последнее время с использованием кластерных теорий среднего поля [162]. Основное преимущество нашего подхода в сравнении с такими теориями является то, что мы остаемся в рамках эффективной однопримесной картины, а значит наш подход требует существенно меньших численных затрат и легко обобщается для учета дополнительных взаимодействий.

5.3.2 "Реконструкция" поверхности Ферми псевдощелевыми флуктуациями.

В этом параграфе мы проанализируем перестройку поверхности Ферми ВТСП купратов в псевдощелевом состоянии в точно решаемой модели псевдощели, вызываемой флуктуациями антиферромагнитного (AFM, волн спиновой плотности (SDW) или волн зарядовой плотности (CDW)) ближнего порядка, конкурирующего со сверхпроводимостью. Мы продемонстрируем эволюцию поверхности Ферми от "Ферми дуг" (на "большой" поверхности Ферми), наблюдаемых в ARPES экспериментах при достаточно высоких температурах (когда и амплитуда и фаза волны плотности случайно флуктуируют), к формированию "малых"электронных и дырочных "карманов" поверхности Ферми, которые наблюдаются в экспериментах по магнитным осцилляциям (де Гааз-ван Альфен, Шубников - де Гааз, осцилляции холловского сопротивления) при низких температурах (когда флуктуирует только фаза волны плотности и корреляционная длина ближнего порядка достаточно велика). Будет также приведен качественный критерий наблюдаемости магнитных осцилляций в псевдощелевом состоянии, сформулированный в терминах циклотронной частоты, корреляционной длины флуктуаций и скорости Ферми. Дальнейшее рассмотрение в этом параграфе в основном следует работе [23].

Псевдощелевое состояние недодопированных купратов [24, 25, 184, 185] является, по-видимому, главной аномалией нормального состояния высокотемпературных сверхпроводников. Особенно поразительно наблюдение в ARPES экспериментах "дуг Ферми", т.е. частей "большой" поверхности Ферми вблизи диагоналей зоны Бриллюэна (BZ) с более или менее хорошо определенными квазичастицами, в то время как части поверхности Ферми вблизи границ ВZ полностью "разрушены" [32, 16, 37].

Однако, недавнее наблюдение эффектов квантовых осцилляций холловского сопротивления [18], осцилляций Шубникова - де Гааза [19] и де Гааза - ван Альфена (dHvA) [19, 20] в недодопированных YBCO купратах свидетельствуют о достаточно маленьких [21] дырочных или электронных "карманах" поверхности Ферми, что кажется находящимся в противоречии с хорошо установленными ARPES данными о поверхности Ферми в купратах.

Качественное объяснение этого явного противоречия было дано в работе [22] в очень упрощенной модели дырочной поверхности Ферми, эволюционирующей под влиянием флуктуации AFM ближнего порядка. Здесь мы представим точно решаемую модель такой эволюции, которая способна описать непрерывную трансформацию "большой" ARPES поверхности Ферми с типичными "дугами Ферми" при достаточно высокой температуре в набор "маленьких" дырочных и электронных "карманов", которые формируются вследствие взаимодействия электронов с флуктуациями SDW (CDW) ближнего порядка при низких температурах (в отсутствие какого-либо AFM (или зарядового) дальнего порядка). Мы также сформулируем качественный критерий наблюдаемости квантовых осцилляций в сильных магнитных полях в такой, достаточно необычной, ситуации.

Мы, как и прежде, полагаем, что предпочтительным является сценарий формирования псевдощелевого состояния, основанный на картине сильного рассеяния носителей заряда на короткодействующих антиферромагнитных (AFM, SDW) спиновых флуктуациях, т.е. флуктуациях параметра порядка, конкурирующего со сверхпроводимостью. В импульсном представлении это рассеяние с импульсами переноса порядка вектора антиферромагнитизма $\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \pi \\ a \end{pmatrix}, \frac{\pi}{a} \end{pmatrix}$ (*a* – постоянная квадратной решетки). Это ведет к формированию структур в одночастичном спектре, являющихся предчувствием изменений в спектре вследствие дальнего AFM порядка (удвоения периода). В результате мы получаем нефермижидкостное поведение спектральной плотности в окрестности так называемых "горячих точек" поверхности Ферми, возникающих на ее пересечении с границами антиферромагнитной зоны Бриллюэна, которое при низких температурах (большой корреляционной длине ближнего порядка) может приводить к существенной перестройке поверхности Ферми, похожей на возникающую в случае AFM дальнего порядка.

В рамках такого подхода мы уже демонстрировали [66, 101] (см. предыдущий параграф и раздел 3.3) формирование "дуг Ферми" при достаточно высоких температурах, когда AFM флуктуации можно эффективно рассматривать как статические и гауссовы [64, 63]. Здесь мы представим точно решаемую модель, довольно похожую на качественно анализируемую в [22], которая способна описать плавный переход от картины "ферми дуг" при высоких температурах (типичных для большинства ARPES экспериментов) к малым "карманам" поверхности Ферми при низких температурах (типичных для экспериментов по магнитным квантовым осцилляциям).

Мы рассмотрим двумерное обобщение точно решаемой модели Бартоша - Копица, предложенной в одномерном случае в работе [86] (а также проанализированной в упрощенном двумерном подходе в [59](см. также раздел 3.1.3)), которая физически эквивалентна модели работы [22], но позволяет получить полную картину реконструкции поверхности Ферми с формированием дырочных и электронных "карманов".

Мы рассматриваем электроны в двумерной квадратной решетке с интегралами перескока на первых (t) и вторых (t') ближайших соседа, что приводит к обычной "затравочной" дисперсии:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a) - 4t' \cos k_x a \cos k_y a - \mu \quad , \tag{319}$$

где *а* – постоянная решетки, *µ* – химический потенциал, и предполагаем, что эти электроны рассеиваются на следующем статическом случайном поле, имитирующем AFM(SDW) (или аналогичный CDW) ближний порядок:

$$V(\mathbf{l}) = D \exp(i\mathbf{Q}\mathbf{l} - i\mathbf{q}\mathbf{l}) + D^* \exp(-i\mathbf{Q}\mathbf{l} + i\mathbf{q}\mathbf{l})$$
(320)

где $\mathbf{l} = (n_x a, n_y a)$ нумерует узлы решетки и $D = |D|e^{i\phi}$ обозначает комплексную амплитуду флуктуирующего SDW (или CDW) параметра порядка, а $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$ – малое отклонение от основного вектора рассеяния $\mathbf{Q} = (Q_x, Q_y) = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}).$

Обобщая подход работ [86, 59] (см. параграф 3.1.3 и сравни с [22]), мы рассмотрим специфическую модель беспорядка, где и q_x и q_y случайны, а их распределения имеют вид:

$$\mathcal{P}(q_x, q_y) = \frac{1}{\pi^2} \frac{\kappa}{q_x^2 + \kappa^2} \frac{\kappa}{q_y^2 + \kappa^2}$$
(321)

где $\kappa = \xi^{-1}$ определяется обратной корреляционной длиной ближнего порядка . Фаза ϕ также рассматривается случайной и распределенной равномерно в интервале $[0, 2\pi]$.

Факторизованная форма (321) не очень существенна физически, но позволяет получить аналитическое решение для функции Грина, которое имеет вид [59]:

$$G_D(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) + iv\kappa}{(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k}))(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) + iv\kappa) - |D|^2}$$
(322)

где $v = |v_x(\mathbf{k} + \mathbf{Q})| + |v_y(\mathbf{k} + \mathbf{Q})|, c v_{x,y}(\mathbf{k}) = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k_{x,y}}.$

Спектральная плотность $A(\varepsilon, \mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi} Im G_D(\varepsilon, \mathbf{k})$ на уровне Ферми ($\varepsilon = 0$), показанная на Рис. 96, демонстрирует формирование маленьких "карманов" вместо большой "затравочной" поверхности Ферми. Здесь и в дальнейшем выбиралось достаточно типичное (для купратов) значение t'/t = -0.4 и заполнение n = 0.9 (10% дырочное допирование), соответствующее $\mu = -1.08t$.

Полюсы функции Грина (322), определяющие квазичастичную дисперсию и затухание в пределе достаточно большой корреляционной длины ($v\kappa \ll t$, низкая температура), имеют вид:

$$\tilde{E}^{(\pm)} = E_{\mathbf{k}}^{(\pm)} - i\frac{v\kappa}{2}\left(1 \mp \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(-)}}{E_{\mathbf{k}}}\right)$$
(323)



Рис. 96: Перестройка поверхности Ферми при низкотемпературном режиме (большой корреляционной длине) псевдощелевых флуктуаций (n = 0.9, t'/t = -0.4). Показана интенсивность спектральной плотности при $\varepsilon = 0$. (a) -D = 0.2t, $\kappa a = 0.01$; (b) -D = 0.7t, $\kappa a = 0.01$; (c) -D = 1.5t, $\kappa a = 0.01$; (d) -D = 0.7t, $\kappa a = 0.1$; Пунктир – "затравочная" поверхность Ферми, точечная линия – теневая поверхность Ферми.

c
$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\pm)} = \frac{1}{2} [\varepsilon(\mathbf{k}) \pm \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q})], E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(-)2} + |D|^2}, a$$

$$E_{\mathbf{k}}^{(\pm)} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{(+)} \pm \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(-)2} + |D|^2}$$
(324)

просто совпадают с дисперсией в случае присутствия AFM дальнего порядка. Уравнение $E_{\mathbf{k}}^{(-)} = 0$ определяет дырочный "карман" поверхности Ферми окружающий точку $(\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a})$ зоны Бриллюэна, а $E_{\mathbf{k}}^{(+)} = 0$ определяет электронные "карманы", центрированные в точках $(\frac{\pi}{a}, 0)$ и $(0, \frac{\pi}{a})$, как показано на Рис. 96 (а).

Затухание квазичастиц, определяемое мнимой частью (323) оказывается сильно неоднородным при движении вдоль "карманов" поверхности Ферми. Изменяясь от практически нуля в ближней к $\Gamma(0,0)$ нодальной (лежащей на диагонали зоны Бриллюэна) точке дырочного "кармана" до $\approx v_F^n \kappa$ в дальней от Γ нодальной точке этого "кармана". Здесь введена $v_F^n = |v_x(\mathbf{k}|) + |v_y(\mathbf{k})||_{\varepsilon(\mathbf{k})=0,k_x=k_y}$ – скорость в нодальной точке "затравочной" поверхности Ферми. Вдоль электронного "кармана" затухание изменяется от нуля в точках, где электронный "карман" пересекает границу зоны Бриллюэна до $\approx v_F^a \kappa$ в точках вблизи пересечения этой границы теневой поверхностью Ферми. Здесь $v_F^a = |v_x(\mathbf{k}|) + |v_y(\mathbf{k})||_{\varepsilon(\mathbf{k})=0, k_x=\frac{\pi}{a}}$ — скорость в антинодальной точке "затравочной" поверхности Ферми.

Конечно, полная теория магнитных квантовых осцилляций (Шубникова - де Гааза или де Гааза - ван Альфена) в такой особой ситуации может быть достаточно сложной. Однако, грубый качественный критерий возможности наблюдения квантовых осцилляций в нашей модели может быть легко сформулирован. Эффективную ширину спектральной плотности в нашей модели, которая определяет размытие поверхности Ферми, можно грубо сравнить с вкладом примесного рассеяния в температуру Дингла и оценить как $\tau^{-1} \sim \frac{\langle v_F \rangle}{\xi}$, где $\langle v_F \rangle$ – скорость, усредненная по поверхности Ферми. Тогда наш критерий принимает очевидный вид:

$$\omega_H \frac{\xi}{\langle v_F \rangle} \sim \frac{\omega_H}{t} \frac{\xi}{a} \gg 1 \tag{325}$$

где ω_H – обычная циклотронная частота.

В качестве жесткого критерия наблюдаемости осциляций (завысив эффективное затухание вдоль "карманов") следует положить:

$$\langle v_F \rangle > = \begin{cases} v_F^n$$
для дырочного "кармана" v_F^a для электронного "кармана" (326)

Экспериментально осцилляции становятся наблюдаемыми в магнитных полях больше 50 Т [18, 19, 20, 21]. Полагая корреляционную длину $\xi = 100a$, а магнитное поле H = 50T, получаем $\omega_H \tau \approx 0.8$ для дырочных и $\omega_H \tau \approx 1.3$ для электронных "карманов". Таким образом, наблюдаемость осцилляций в таком магнитном поле в нашей модели требует достаточно больших корреляционных длин $\xi \sim 50-100a$. Однако, это величина может быть и меньше в случае, когда циклотронная масса больше массы свободного электрона, использованной в приведенных выше оценках.

Коротко остановимся на вопросе о возможности определения плотности носителей из частоты магнитных осцилляций, т.е. из площадей "карманов" поверхности Ферми. Из теоремы Латтинджера следует, что число электронов на ячейку есть $n = 2a^2 \frac{S_{fs}}{\pi^2}$, где S_{fs} — площадь "затравочной" поверхности Ферми ($\varepsilon(\mathbf{k}) = 0$) в четвертинке зоны Бриллюэна. С другой стороны, можно определить $n = 2a^2 \frac{S_{sh}}{\pi^2}$, отсчитывая площадь



Рис. 97: Доля дырочного $(a^2 \frac{S_h}{\pi^2})$ и электронных $(a^2 \frac{S'_e}{\pi^2})$ "карманов" в четверти зоны Бриллюэна и "допирование" $p = a^2 \frac{(S_h - S'_e)}{\pi^2}$ $(n = 0.9 \ (\mu = -1.08t), t'/t = -0.4).$

Ssh в четвертинке зоны Бриллюэна от теневой поверхности Ферми ($\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = 0$) в сторону точки $M(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$. Безусловно по величине $S_{sh} = S_{fs}$. Складывая и деля пополам оба выражения для *n* получаем в пределе $|D| \to 0$ для дырочного допирования [186, 187]:

$$p = 1 - n = a^2 \frac{S_h - S'_e}{\pi^2} = a^2 \frac{S_h - S_e/2}{\pi^2}$$
(327)

где S_h — площадь дырочного "кармана", S'_e — площадь частей электронного "кармана" в четвертинке зоны Бриллюэна, составляющая половину от полной площади электронного "кармана" S_e .

Однако, такова ситуация лишь при $|D| \rightarrow 0$. С ростом амплитуды псевдощели |D|площадь как дырочного, так и электронного, "карманов" уменьшается (см. Рис.96 и Рис.97). В присутствии электронного "кармана" уменьшение площадей обоих видов "карманов" компенсируется, оставляя допирование, посчитанное по (327) практически неизменным (Рис.97). С исчезновением электронного "кармана", происходящем при $|D| = \mu - 4t' = 0.52t$ (т.е. когда $E_{\mathbf{k}=(\pi/a,0)}^{(+)} = 0$), компенсировать уменьшение площади дырочного кармана с ростом |D| нечему и число носителей, посчитанное по (327) будет уменьшатся и обратится в ноль с исчезновением дырочного кармана, которое происходит при $|D| = -\mu = 1.08t$ (что определяется условием $E_{\mathbf{k}=(\pi/2a,\pi/2a)}^{(-)} = 0$) и диэлектрическая щель закрывает всю поверхность Ферми (Рис.96(с)). Таким образом, допирование, посчитанное по (327) при достаточно большой амплитуде псевдо-



Рис. 98: Формирование "дуг Ферми" в высокотемпературном режиме псевдощелевых флуктуаций (n = 0.9 ($\mu = -1.08t$), t'/t = -0.4, $\kappa a = 0.01$). Показана интенсивность спектральной плотности при $\varepsilon = 0$. (a) – W = 0.2t; (b) – W = 0.4t; (c) – W = 0.7t; (d) – W = 1.5t. Пунктир – "затравочная" поверхность Ферми.

щели (в отсутствие электронного "кармана"), окажется существенно заниженным.

Экспериментально наблюдается лишь одна частота магнитных осцилляций $F \approx 540T$ в YBCO [19]. Это, по-видимому, говорит о присутствии лишь дырочного "кармана". Такая частота магнитных осцилляций дает для доли дырочного "кармана" в четверти зоны Бриллюэна $a^2S_h/\pi^2 = 0.078$, чему по Рис. 97 соответствует $|D| \approx 0.7t$.

Функция Грина (322) описывает "низкотемпературный" режим диэлектрических флуктуаций, когда флуктуации амплитуды случайного поля (320) "выморожены". В "высокотемпературном" режиме у поля (320) флуктуирует не только фаза, но и амплитуда |D|. Предполагая эти флуктуации гауссовыми, мы берем в качестве распределения амплитуды флуктуаций распределение Рэлея [59] (см. также параграф 3.1.3):

$$\mathcal{P}_D(|D|) = \frac{2|D|}{W^2} exp\left(-\frac{|D|^2}{W^2}\right)$$
(328)

Тогда усредненная функция Грина имеет вид:

$$G_W(\varepsilon, \mathbf{k}) = \int_0^\infty d|D|\mathcal{P}_D(|D|)G_D(\varepsilon, \mathbf{k})$$
(329)

Плотность состояний, соответствующая функции Грина (329), обладает характер-

ной "размытой" псевдощелью в окрестности уровня Ферми. Диаграммы интенсивности спектральной плотности на уровне Ферми ($\varepsilon = 0$), соответствующей (329), для разных значений ширины псевдощели W приведены на Рис.98. С ростом псевдощели наблюдается разрушение поверхности Ферми вблизи границ зоны Бриллюэна и формирование "Ферми дуг" в полном качественном согласии с результатами более последовательной модели псевдощели [66, 101] (см. предыдущий параграф и раздел 3.3) в "высокотемпературном" режиме и с результатами ARPES экспериментов, проводимых обычно при температурах много выше, чем эксперименты по квантовым осцилляциям.

5.4 Оптическая проводимость в псевдощелевом состоянии сильно коррелированных систем.

В предыдущих разделах этой главы рассмотрен предложенный нами обобщенный $DMFT+\Sigma_{p}$ подход [66, 67, 68], который, с одной стороны, сохраняет однопримесное описание DMFT со свойственным ему учетом локальных корреляций и возможностью использовать "impurity solvers", например, NRG[153, 154], а, с другой стороны, включает нелокальные корреляции в непертурбативный базис модели, позволяя учесть характерный масштаб и вид таких нелокальных флуктуаций. Этот подход позволяет систематически изучать влияние нелокальных флуктуаций на электронные свойства, обеспечивая разумность результатов и возможность их интерпретировать. В таком подходе нами изучались одночастичные свойства, такие как: формирование псевдощели в в плотности состояний квазичастичной зоны для случаев как коррелированного металла, так и допированного моттовского диэлектрика, эволюция нефермижидкостной спектральной плотности и ARPES спектра [67], "разрушение" поверхности Ферми и формирование Ферми "дуг" [66], а также эффекты примесного рассеяния [68]. Этот формализм может быть также объединен с современными LDA+DMFT расчетами электронной структуры "реалистичных" сильно коррелированных систем. Такой LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ подход будет развит в последнем разделе этой Главы.



Рис. 99: Полная поляризационная петля (a) с вершинной частью (b), которая включает и свободное распространение частицы и дырки в дополнение к стандартной вершине, содержащей все взаимодействия. Здесь $\mathbf{p}_{\pm} = \mathbf{p} \pm \frac{\mathbf{q}}{2}$, $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon \pm \frac{\omega}{2}$.

В этом разделе мы разовьем наш DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ подход для расчетов двухчастичных свойств, таких как оптическая (динамическая) проводимость, которая легко вычисляется в рамках стандартной DMFT [156, 149]. Мы покажем, что включение нелокальных корреляций (псевдощелевых флуктуаций) с характерным масштабом длины ξ позволяет описывать псевдощелевые эффекты в продольной проводимости двумерной хаббардовской плоскости. Дальнейшее рассмотрение в этом разделе в основном следует работе [71].

5.4.1 Основные выражения для оптической проводимости

Одночастичные характеристики системы (одночастичная функция Грина и собственноэнергетическая часть) в приближении DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ определяются из расчетной схемы (301,302–307). Для вычисления оптической проводимости будем использовать обшее выражение, связывающее ее с запаздывающей корреляционной функцией плотность– плотность $\chi^{R}(\omega, \mathbf{q})$ [69, 55]:

$$\sigma(\omega) = -\lim_{q \to 0} \frac{ie^2 \omega}{q^2} \chi^R(\omega, \mathbf{q}), \qquad (330)$$

где е – заряд электрона.

Рассмотрим полную поляризационную петлю в мацубаровском представлении,

показанную на Рис. 99(a), которая (с суммированием по частотам) имеет вид:

$$\Phi(i\omega, \mathbf{q}) = \sum_{\varepsilon\varepsilon'} \Phi_{i\varepsilon i\varepsilon'}(i\omega, \mathbf{q}) \equiv \sum_{\varepsilon} \Phi_{i\varepsilon}(i\omega, \mathbf{q})$$
(331)

и содержит все возможные взаимодействия нашей модели, описываемые полной вершиной Рис.99(b). Заметим, что мы используем немного необычное определение вершинной части, включающее петлевой вклад, не содержащий вершинных поправок, для сокращения последующих диаграммных выражений. Запаздывающий коррелятор плотность-плотность определяется аналитическим продолжением на действительные частоты этой петли и может быть записан следующим образом[69]:

$$\chi^{R}(\omega, \mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi i} \left\{ \left[f(\varepsilon_{+}) - f(\varepsilon_{-}) \right] \Phi_{\varepsilon}^{RA}(\mathbf{q}, \omega) + f(\varepsilon_{-}) \Phi_{\varepsilon}^{RR}(\mathbf{q}, \omega) - f(\varepsilon_{+}) \Phi_{\varepsilon}^{AA}(\mathbf{q}, \omega) \right\},$$
(332)

где $f(\varepsilon)$ – функция Ферми, $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon \pm \frac{\omega}{2}$, а двухчастичные петли $\Phi_{\varepsilon}^{RA}(\mathbf{q},\omega)$, $\Phi_{\varepsilon}^{RR}(\mathbf{q},\omega)$, $\Phi_{\varepsilon}^{AA}(\mathbf{q},\omega)$ определяются соответствующим аналитическим продолжением ($i\varepsilon + i\omega \rightarrow \varepsilon + \omega + i\delta$, $i\varepsilon \rightarrow \varepsilon \pm i\delta$, $\delta \rightarrow +0$) в (331). Тогда мы можем записать оптическую проводимость в виде:

$$\sigma(\omega) = \lim_{q \to 0} \left(-\frac{e^2 \omega}{2\pi q^2} \right) \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left\{ [f(\varepsilon_+) - f(\varepsilon_-)] \left[\Phi_{\varepsilon}^{RA}(\mathbf{q},\omega) - \Phi_{\varepsilon}^{RA}(0,\omega) \right] + f(\varepsilon_-) \left[\Phi_{\varepsilon}^{RR}(\mathbf{q},\omega) - \Phi_{\varepsilon}^{RR}(0,\omega) \right] - f(\varepsilon_+) \left[\Phi_{\varepsilon}^{AA}(\mathbf{q},\omega) - \Phi_{\varepsilon}^{AA}(0,\omega) \right] \right\}, \quad (333)$$

где полный вклад от добавленных членов с нулевым q, как можно легко убедится (используя обычное тождество Уорда [188]), равен нулю.

В DMFT+ Σ приближении, которое пренебрегает интерференцией между локальным хаббардовским взаимодействием и нелокальными вкладами, связанными с дополнительным рассеянием, например, на SDW псевдощелевых флуктуациях, будем рассматривать $\Phi_{i\varepsilon i\varepsilon'}(i\omega, \mathbf{q})$, введенную под суммой по мацубаровским частотам в (331), для которой запишем уравнение Бете–Солпитера, показанное диаграммами на Рис. 100. Здесь мы ввели неприводимую локальную DMFT вершинную часть $U_{i\varepsilon i\varepsilon'}(i\omega)$ и "прямоугольную" вершину, приведенную на Рис. 99(b) и содержащую все взаимодействия с флуктуациями. Аналитически это уравнение имеет вид:

$$\Phi_{i\varepsilon i\varepsilon'}(i\omega,\mathbf{q}) = \Phi^0_{i\varepsilon}(i\omega,\mathbf{q})\delta_{\varepsilon\varepsilon'} + \Phi^0_{i\varepsilon}(i\omega,\mathbf{q})\sum_{\varepsilon''}U_{i\varepsilon i\varepsilon''}(i\omega)\Phi_{i\varepsilon''i\varepsilon'}(i\omega,\mathbf{q}), \qquad (334)$$



Рис. 100: Уравнение Бете–Солпитера для поляризационной петли в DMFT+ Σ подходе. Круги представляют неприводимую вершинную часть DMFT в канале частица–дырка, которая содержит только локальное хаббардовское взаимодействие, выживающее в пределе $d \to \infty$. Незаштрихованная прямоугольная вершина представляет нелокальные взаимодействия, например, с SDW (псевдощелевыми) флуктуациями, и определяется аналогично вершине Рис. 99(b).

где $\Phi^0_{i\varepsilon}(i\omega, \mathbf{q})$ – искомая функция, вычисленная пренебрегая вершинными поправками от хаббардовского взаимодействия (но с учетом всех нелокальных поправок от рассеяния на флуктуациях). Заметим что вся *q*-зависимость здесь определяется $\Phi^0_{i\varepsilon}(i\omega, \mathbf{q})$ поскольку неприводимая вершина $U_{i\varepsilon i\varepsilon'}(i\omega)$ локальна и от *q* не зависит.

Из (333) очевидно, что для вычисления проводимости требуется знать только q^2 -вклад в $\Phi(i\omega, \mathbf{q})$, определенной в (331) при $q \to 0$, которые легко находятся следующим образом. Отметим, что все петли в (334) содержат q-зависимость, начинающуюся с членов порядка q^2 . Тогда мы можем взять произвольную петлю в разложении (334) (см. Рис. 100), вычислить даваемый ею вклад порядка q^2 и произвести пересуммирование всех вкладов слева и справа от этой петли, полагая q = 0 для всех этих графиков. Это эквивалентно простому q^2 -дифференцированию уравнения (334). Эта процедура немедленно приводит к следующему выражению для q^2 -вклада в (331):

$$\phi(i\omega) \equiv \lim_{q \to 0} \frac{\Phi(i\omega, \mathbf{q}) - \Phi(i\omega, 0)}{q^2} = \sum_{\varepsilon} \gamma_{i\varepsilon}^2 (i\omega, \mathbf{q} = 0) \phi_{i\varepsilon}^0 (i\omega)$$
(335)

где

$$\phi_{i\varepsilon}^{0}(i\omega) \equiv \lim_{q \to 0} \frac{\Phi_{i\varepsilon}^{0}(i\omega, \mathbf{q}) - \Phi_{i\varepsilon}^{0}(i\omega, 0)}{q^{2}}$$
(336)

где $\Phi_{i\varepsilon}^0(i\omega, \mathbf{q})$ содержит вершинные поправки только от нелокальных псевдощелевых флуктуаций, однако одночастичные функции Грина, входящие в эти петли содержат



Рис. 101: Эффективная вершина $\gamma_{i\varepsilon}(i\omega, \mathbf{q} = 0)$, используемая в расчетах проводимости.

собственно-энергетические части и от этих флуктуаций и от локального хаббардовского взаимодействия, как в выражении (301).

Вершина $\gamma_{i\varepsilon}(i\omega, \mathbf{q}=0)$ определяется диаграммами, показанными на Рис. 101 или аналитически:

$$\gamma_{i\varepsilon}(i\omega, \mathbf{q}=0) = 1 + \sum_{\varepsilon'\varepsilon''} U_{i\varepsilon i\varepsilon''}(i\omega) \Phi_{i\varepsilon'' i\varepsilon'}(i\omega, \mathbf{q}=0).$$
(337)

Тогда, используя уравнение Бете-Солпитера (334) мы можем записать:

$$\gamma_{i\varepsilon}(i\omega, \mathbf{q} = 0) = 1 + \sum_{\varepsilon'} \frac{\Phi_{i\varepsilon i\varepsilon'}(i\omega, \mathbf{q} = 0) - \Phi^0_{i\varepsilon}(i\omega, \mathbf{q} = 0)}{\Phi^0_{i\varepsilon}(i\omega, \mathbf{q} = 0)} = \frac{\sum_{\varepsilon'} \Phi_{i\varepsilon i\varepsilon'}(i\omega, \mathbf{q} = 0)}{\Phi^0_{i\varepsilon}(i\omega, \mathbf{q} = 0)}.$$
(338)

Для **q** = 0 мы имеем следующее тождество Уорда, которое может быть получено прямым обобщением доказательства, приведенного в [69, 188] (см. Приложение J):

$$(-i\omega)\Phi_{i\varepsilon}(i\omega,\mathbf{q}=0) = (-i\omega)\sum_{\varepsilon'}\Phi_{i\varepsilon i\varepsilon'}(i\omega,\mathbf{q}=0) = \sum_{\mathbf{p}}G(i\varepsilon+i\omega,\mathbf{p}) - \sum_{\mathbf{p}}G(i\varepsilon,\mathbf{p}).$$
(339)

Знаменатель (338) содержит вершинные поправки только от нелокальных корреляций (например, псевдощелевых флуктуаций), а функция Грина здесь "одета" и этими корреляциями и локальным (DMFT) хаббардовским взаимодействием Таким образом мы можем рассматривать петлю, входящую в знаменатель, как одетую только (псевдощелевыми) флуктуациями, но со "свободной" функцией Грина:

$$\tilde{G}_0(i\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{i\varepsilon + \mu - \varepsilon(\mathbf{p}) - \Sigma(i\varepsilon)},\tag{340}$$

где $\Sigma(i\varepsilon)$ – локальный вклад в собственно-энергетическую часть от DMFT. В этом случае мы имеем тождество Уорда аналогичное (339) (см. Приложение J):

$$\sum_{\mathbf{p}} G(i\varepsilon + i\omega, \mathbf{p}) - \sum_{\mathbf{p}} G(i\varepsilon, \mathbf{p}) = \Phi^{0}_{i\varepsilon}(i\omega, \mathbf{q} = 0) \left[\Sigma(i\varepsilon + i\omega) - \Sigma(i\varepsilon) - i\omega \right] \equiv \\ \equiv \Phi^{0}_{i\varepsilon}(i\omega, \mathbf{q} = 0) \left[\Delta \Sigma(i\omega) - i\omega \right], \quad (341)$$

где мы ввели

$$\Delta\Sigma(i\omega) = \Sigma(i\varepsilon + i\omega) - \Sigma(i\varepsilon). \tag{342}$$

Таким образом, используя (339), (341) в (338) мы получаем окончательное выражение для $\gamma_{i\varepsilon}(i\omega, \mathbf{q} = 0)$:

$$\gamma_{i\varepsilon}(i\omega, \mathbf{q}=0) = 1 - \frac{\Delta\Sigma(i\omega)}{i\omega}.$$
 (343)

Тогда (335) принимает вид:

$$\phi(i\omega) = \sum_{\varepsilon} \phi_{i\varepsilon}^{0}(i\omega) \left[1 - \frac{\Delta\Sigma(i\omega)}{i\omega}\right]^{2}.$$
(344)

Аналитическое продолжение на действительные частоты здесь очевидно и, используя (335), (344) в (333), мы можем записать окончательное выражение для действительной части оптической проводимости в виде:

$$\operatorname{Re}\sigma(\omega) = \frac{e^2\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left[f(\varepsilon_{-}) - f(\varepsilon_{+})\right] \operatorname{Re}\left\{\phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega) \left[1 - \frac{\Sigma^R(\varepsilon_{+}) - \Sigma^A(\varepsilon_{-})}{\omega}\right]^2 - \phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega) \left[1 - \frac{\Sigma^R(\varepsilon_{+}) - \Sigma^R(\varepsilon_{-})}{\omega}\right]^2\right\}.$$
 (345)

Таким образом достигается существенное упрощение нашей задачи. Для вычисления оптической проводимости в DMFT+ Σ приближении мы должны решить только одночастичную задачу определения локальной СЭЧ $\Sigma(\varepsilon_{\pm})$ с помощью DMFT+ Σ процедуры, описанной выше, а нетривиальный вклад от нелокальных корреляций входит посредством (336), которая может быть вычислена в подходящем приближении, учитывая только взаимодействие с нелокальными (например, псевдощелевыми) флуктуациями, но используя в качестве "свободной" гриновскую функцию (340), включающую локальную СЭЧ, уже определенную в DMFT+∑ процедуре. Фактически (345) обеспечивает также эффективный алгоритм для вычисления оптической проводимости в рамках стандартного DMFT (пренебрегая всеми нелокальными корреляциями). Тогда (336) легко находится из простой петлевой диаграммы, определяемой двумя функциями Грина и свободными *скалярными*вершинами. Таким образом, для определения проводимости нет необходимости вычислять вершинные поправки в рамках самого DMFT, как это было впервые показано при рассмотрении петли с *векторными* вершинами [156, 149].

5.4.2 Рекуррентные соотношения для собственно-энергетической и вершинной частей.

Поскольку наш основной интерес псевдощелевое состояние в медных оксидах, мы в дальнейшем сосредоточимся на эффектах рассеяния электронов на SDW-подобных антиферромагнитных спиновых флуктуациях ближнего порядка. В несколько упрощенном подходе, обоснованном только для достаточно высоких температур [63, 64], мы рассчитаем $\Sigma_{\mathbf{p}}(i\omega)$ для электронов, движущихся в замороженном (статическом) случайном поле гауссовых спиновых флуктуаций с доминирующим импульсом рассеяния вблизи характерного вектора **Q** (модель "горячих точек" [25]). Мы используем (как делалось в [66, 67, 68]и предыдущих разделах этой главы) немного обобщенную версию рекуррентной процедуры, предложенной в работах [63, 64, 50](см. также [55]), которая позволяет учесть *все* фейнмановские диаграммы, описывающие рассеяние электронов этим случайным полем. Тогда, импульсно-зависящая СЭЧ определяется рекуррентной процедурой (308,309) Вообще говоря, пренебрежение динамикой флуктуаций приводит к переоценке псевдощелевых эффектов.

Как подчеркивалось в работах [67, 68]и предыдущих разделах главы эта процедура вводит важный масштаб длины ξ , не присутствующий в стандартном DMFT. Физически, этот масштаб отражает влияние флуктуаций ближнего порядка (SDW or CDW) на электронный "резервуар", окружающий эффективную андерсоновскую примесь в DMFT.



Рис. 102: Диаграммное представление $\Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})$ и $\Phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega, \mathbf{q})$.

Важной стороной теории является также то, что оба параметра W и ξ могут быть, в принципе, вычислены непосредственно из микроскопической модели [67], но здесь мы рассматриваем их как феноменологические параметры теории, подлежащие определению из эксперимента.

Для вычисления оптической проводимости необходимо найти основной блок $\Phi_{i\varepsilon}^{0}(i\omega, \mathbf{q})$, входящий в (336), или, точнее, соответствующие функции аналитически продолженные на действительные частоты $\Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})$ и $\Phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega, \mathbf{q})$, которые определяют $\phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega)$ и $\phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega)$, входящие в (345), определяемые соотношением аналогичным (336):

$$\phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega) = \lim_{q \to 0} \frac{\Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega, \mathbf{q}) - \Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega, 0)}{q^2}, \qquad (346)$$

$$\phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega) = \lim_{q \to 0} \frac{\Phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega, \mathbf{q}) - \Phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega, 0)}{q^2}.$$
(347)

По определению мы имеем:

$$\Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega, \mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{p}} G^{R}(\varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+}) G^{A}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-}) \Gamma^{RA}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-}; \varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+})$$
(348)

$$\Phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega, \mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{p}} G^{R}(\varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+}) G^{R}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-}) \Gamma^{RR}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-}; \varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+}),$$

которые диаграммами показаны на Рис. 102. Здесь функции Грина $G^R(arepsilon_+, \mathbf{p}_+)$ и $G^A(\varepsilon_-,{f p}_-)$ определены аналитическим продолжением ($i\varepsilon \to \varepsilon \pm i\delta$) маубаровских гриновских функций (301) определенных нашим DMFT+ Σ алгоритмом (302–307), а вершины $\Gamma^{RA}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-}; \varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+})$ и $\Gamma^{RR}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-}; \varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+})$ содержат все вершинные поправки от псевдощелевых флуктуаций и также определяются рекуррентной процедурой, впервые полученной (для одномерного случая) в работе [52] (см. также [55]) и обобщенной для двумерных задач в работе [70] (см. также [63]). Основная идея, используемая здесь, в том, что произвольная диаграмма для вершинной части может быть получена вставкой линии "внешнего поля" в соответствующую диаграмму для СЭЧ [48, 52, 70]. В нашей модели мы можем ограничится диаграммами с непересекающимися линиями взаимодействия, учтя вклад остальных диаграмм комбинаторными множителями *s*(*k*), приписываемыми "начальным" вершинам взаимодействий (или линиям взаимодействия) [50, 63, 64]. Таким образом, все диаграммы для вершинной части порождаются простыми "лестничными" диаграммами с дополнительными s(k)-множителями, связанными с линиями взаимодействия [52, 70] (см. также [55]). Тогда мы получаем систему рекуррентных соотношений для вершинной части $\Gamma^{RA}(\varepsilon_{-},\mathbf{p}_{-};\varepsilon_{+},\mathbf{p}_{+})$ показанную диаграммами на Рис. 103. Аналитически это имеет следующий вид [70], где мы также включили вклад от локальной (DMFT) СЭЧ, получаемой из DMFT+ Σ_p процедуры:

$$\Gamma_{k-1}^{RA}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-}; \varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+}) = 1 + W^{2}s(k)G_{k}^{A}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-})G_{k}^{R}(\varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+}) \times \\
\times \left\{ 1 + \frac{2iv_{k}\kappa k}{\omega - \varepsilon_{k}(\mathbf{p}_{+}) + \varepsilon_{k}(\mathbf{p}_{-}) - \Sigma^{R}(\varepsilon_{+}) + \Sigma^{A}(\varepsilon_{-}) - \Sigma^{R}_{k+1}(\varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+}) + \Sigma^{A}_{k+1}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-})} \right\} \times \\
\times \Gamma_{k}^{RA}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-}; \varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+}),$$
(349)

И

$$G_k^{R,A}(\varepsilon_{\pm}, \mathbf{p}_{\pm}) = \frac{1}{\varepsilon_{\pm} - \varepsilon_k(\mathbf{p}_{\pm}) \pm ikv_k\kappa - \Sigma^{R,A}(\varepsilon_{\pm}) - \Sigma^{R,A}_{k+1}(\varepsilon_{\pm}, \mathbf{p}_{\pm})}.$$
 (350)

"Физическая" вершина $\Gamma^{RA}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-}; \varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+})$ определяется как $\Gamma^{RA}_{k=0}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-}; \varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+})$. Рекуррентная процедура (349) учитывает *все* диаграммы теории возмущений для вершинной части. Для $\kappa \to 0$ ($\xi \to \infty$) (349) сводится к ряду исследованному в работе [48] (см. также [63]), который может быть точно просуммирован в аналитической



Рис. 103: Рекуррентное соотношение для вершинной части. Пунктирные линии обозначают $W^2.$

форме. Стандартное "лестничное" приближение соответствует в нашей схеме случаю комбинаторных множителей s(k) в (349) равных 1 [52].

Рекуррентная процедура для $\Gamma^{RR}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{+}; \varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+})$ отличается от (349) только очевидной заменой $A \to R$, а также все выражение в фигурных скобках в правой части (349) заменяется 1:

$$\Gamma_{k-1}^{RR}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-}; \varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+}) = 1 + W^{2}s(k)G_{k}^{R}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-})G_{k}^{R}(\varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+})\Gamma_{k}^{RR}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}; \varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+}).$$
(351)

Заметим, что хаббардовское (DMFT) взаимодействие входит в эти уравнения только через локальные СЭЧ $\Sigma^{R,A}(\varepsilon_{\pm})$, самосогласованно вычисленные в нашей DMFT+ Σ_p процедуре.

Уравнения (301), (308), (349), (351) совместно с (346), (347) и (345) дают полностью самосогласованную процедуру для расчета оптической проводимости в нашей модели в рамках DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ подхода.

5.4.3 Результаты и обсуждение

Детали вычислений

Далее мы обсудим наши результаты для стандартной однозонной модели Хаббарда на квадратной решетке (a – постоянная решетки). "Невозмущенная" электронная дисперсия берется в приближении сильной связи с интегралами перескоков на первых (t) и вторых (t') ближайших соседей (315). Ниже мы представляем результаты для t = 0.25eV (более или менее типичный для купратов) и t'/t=-0.4 (что дает поверхность Ферми похожую на наблюдаемую во многих купратах).

Для квадратной решетки невозмущенная ширина зоны – B = 8t. Для изучения сильно коррелированного металлического состояния, получаемого допированием моттовского диэлектрика, мы берем величину кулоновского взаимодействия U = 40tи заполнение n = 1.0 (половинное) и n = 0.8 (дырочное допирование). Для коррелированных металлов с $B \gtrsim U$ выбираются типичные величины U = 4t, U = 6t and U = 10t и различные заполнения: половинное (n = 1.0) и n = 0.8, 0.9 (дырочное допирование). В качестве типичных величин для W выбирались W = t и W = 2t и для корреляционной длины $\xi = 2a$ и $\xi = 10a$ (мотивируя выбор, в основном, экспериментальными данными для купратов [25, 63]).

Для решения эффективной андерсеновской однопримесной задачи DMFT мы использовали надежный численно точный метод численной ренормализационной группы (NRG) [153, 154], который, фактически, позволяет работать с самого начала с действительными частотами, обходя возможные сложности численного аналитического продолжения. Расчеты выполнялись для двух температур: T = 0.088t и T = 0.356t.

Непосредственно численно производились все необходимые интегрирования, например, по всей зоне Бриллюэна (с учетом явных симметрий) или по достаточно широкой области частот. Импульсы интегрирования обезразмеривались естественным образом с помощью постоянной решетки *a*. Проводимость измерялась в единицах универсальной двумерной проводимости $\sigma_0 = \frac{e^2}{\hbar} = 2.5 \ 10^{-4} \ \mathrm{Ohm}^{-1}$.

Оптическая проводимость в стандартной DMFT



Рис. 104: Действительная часть оптической проводимости для коррелированного металла (U = 4t, t' = -0.4t, t = 0.25 eV) в DMFT приближении для двух величин заполнения: n = 1 и n = 0.8. Температура T = 0.088t.

Оптическая проводимость вычислялась для различных комбинаций параметров нашей модели. Ниже мы представим только часть наших результатов, которые, возможно, наиболее соответствуют купратам. Мы начнем с представления типичных результатов, получаемых в нашем формализме для обычного DMFT приближения в отсутствие псевдощелевых флуктуаций, чтобы ввести в основную физическую картину и продемонстрировать эффективность нашего подхода.

Характерной чертой сильно коррелированного металлического состояния является сосуществование нижних и верхних хаббардовских зон, расщепленных величиной $\sim U$ с квазичастичным пиком на уровне Ферми [156, 149]. Для случая сильно коррелированного металла с $B \gtrsim U$, как можно видеть на Рис. 104 (где показана действительная часть проводимости $\text{Re}\sigma(\omega)$), почти не наблюдается вклада от возбуждений в верхнюю хаббардовскую зону. Этот вклад почти полностью маскируется типичным друдевским частотным поведением с некоторым слегка немонотонным поведение при $\omega \sim U$, которое полностью пропадает с ростом температуры.

Ситуация изменяется в допированном моттовском диэлектрике с $U \gg B$. На Рис. 105 мы ясно наблюдаем дополнительный максимум оптического поглощения при $\omega \sim U$, однако на малых частотах мы опять наблюдаем типично друдевское поведение



Рис. 105: Действительная часть оптической проводимости для допированного моттовского диэлектрика (U = 40t, t' = -0.4t, t = 0.25 eV) в DMFT приближении. Заполнение: n = 0.8 и n = 0.9, температура T = 0.088t. Низкочастотное поведение более детально показано на вставке.

немного немонотонное для малых частот вследствие формирования квазичастичной зоны (см. вставку Рис. 105).

Эти и похожие результаты более или менее известны из предыдущих исследований [156, 149] и приводятся здесь только с целью демонстрации эффективности нашего формализма и подготовки читателя к новым результатам, показывающим псевдощелевое поведение.

Оптическая проводимость в $\mathbf{DMFT} + \Sigma_{\mathbf{p}}$

1. Коррелированный металл

Приступим к обсуждению результатов получаемых в нашем DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ подходе для случая $B \gtrsim U$.

На Рис. 106 показаны DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ результаты для действительной части проводимости в коррелированном металле (U = 4t) при двух значениях температуры и амплитудой псевдощели W = t в сравнении с аналогичными данными в отсутствие псевдощелевых флуктуаций (чистая DMFT). Мы ясно наблюдаем формирование типичной псевдощелевой аномалии на "плече" друдевского пика, которая частично "замывается" с ростом температуры. Такое поведение довольно похоже на "mid-infrared



Рис. 106: Действительная часть оптической проводимости для коррелированного металла (U = 4t, t' = -0.4t, t = 0.25 eV и n = 0.8) в DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ приближении для двух различных температур: T = 0.088t и T = 0.356t. Амплитуда псевдощели W = t, корреляционная длина $\xi = 10a$, заполнение n = 0.8.

feature", которая наблюдается в оптической проводимости купратных сверхпроводников [202, 189].

На Рис. 107 показано поведение $\text{Re}\sigma(\omega)$ для различных величин амплитуды псевдощели W. Мы видим, что, как и следовало ожидать, псевдощелевые аномалии растут с ростом W. Рис. 108 иллюстрирует зависимость $\text{Re}\sigma(\omega)$ от корреляционной длины псевдощелевых (AFM, SDW) флуктуаций. Снова мы наблюдаем естественное поведение — псевдощелевая аномалия "замывается" для малых корреляционных длин, т.е. когда флуктуации становятся более короткодействующими. Наконец, на Рис. 109 мы демонстрируем зависимость псевдощелевой аномалии в оптической проводимости от силы корреляций, т.е. от хаббардовского взаимодействия U. Видим, что область частот, где наблюдается псевдощелевая аномалия, становится уже с ростом силы корреляций. Такая связь общего сужения псевдощелевых аномалий с в плотности состояний и спектральной плотности с ростом силы корреляций наблюдалась и в наших предыдущих работах [67, 68]. Для больших величин U псевдощелевые аномалии практически подавлены. Это является основным качественным результатом представленного подхода в сравнении с нашей более ранней работой [70] по оптиче-



Рис. 107: Действительная часть оптической проводимости для коррелированного металла (U = 4t, t' = -0.4t, t = 0.25 eVu n = 0.8) в DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ приближении — W зависимость. Параметры такие же как на Рис. 106, но для различных величин W: W = 0, W = t, W = 2t, и температуры T = 0.088t.

ской проводимости в псевдощелевом состоянии в отсутствие корреляций.

Сравнивая данные представленной работы для U = 0 с аналогичными в работе [70], необходимо отметить, что в этой ранней работе выполнены расчеты оптической проводимости только для T = 0 и для ускорения счета использовано упрощенное выражение, пренебрегающее вкладами RR, AA-петель в проводимость и работающее только для достаточно малых частот (проведено разложение по малой частоте [69]). Это упрощение приводит к некоторому количественному отличию с результатами представленной работы, где все расчеты проведены точно, используя общее выражение (345), хотя качественно частотное поведение проводимости такое же.

2. Допированный моттовский диэлектрик

Сейчас обсудим наши результаты для случая допированного моттовского диэлектрика с $U \gg B$. Этот случай не имеет прямого отношения к купратам, но он интересен с общей точки зрения и мы представим некоторые наши результаты.

Действительная часть оптической проводимости в случае U = 40t показана на Рис. 110 и 111.

На Рис. 110 приведена ${
m Re}\sigma(\omega)$ допированного моттовского диэлектрика в DMFT+ $\Sigma_{f p}$


Рис. 108: Действительная часть оптической проводимости для коррелированного металла (U = 4t, t' = -0.4t, t = 0.25 eV и n = 0.8) в DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ приближении — зависимость от корреляционной длины. Параметры такие же как на Рис. 106, но для различных величин обратной корреляционной длины $\kappa = \xi^{-1}$: $\kappa a = 0.1$ и $\kappa a = 0.5$, и температуры T = 0.088t.



Рис. 109: Действительная часть оптической проводимости для коррелированного металла в DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ приближении — U зависимость. Параметры такие же как на Рис. 106, но для различных величин U: U = 0, U = 4t, U = 6t, U = 10t и U = 40t. Температура T = 0.088t.



Рис. 110: Действительная часть оптической проводимости для допированного моттовского диэлектрика (U = 40t, t' = -0.4t, t = 0.25 eV) в DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ приближении для различных величин W: W = 0, W = t, W = 2t и температуры T = 0.088t. Корреляционная длина $\xi = 10a$, заполнение n = 0.8. Вставка: проводимость в широком частотном интервале, включающем переходы в верхнюю хаббардовскую зону.



Рис. 111: Действительная часть оптической проводимости для допированного моттовского диэлектрика (U = 40t, t = 0.25 eV, t' = 0) в DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ приближении для различных величин обратной корреляционной длины $\kappa = \xi^{-1}$: $\kappa a = 0.1$ и $\kappa a = 0.5$, температуры T = 0.356t и заполнения n = 1.

подходе для нескольких величин амплитуды псевдощели W. Достаточно очевидно, что псевдощелевые флуктуации приводят к заметному изменению оптической проводимости только для относительно малых частот порядка W, а для высоких частот (например, порядка U, где есть вклад от переходов в верхнюю хаббардовскую зону) псевдощелевых эффектов не наблюдается (см. вставку Рис. 110). Для малых частот мы наблюдаем подавление друдевского пика с достаточно слабой аномалией при $\omega \sim W$, которая пропадает для малых величин W или коротких корреляционных длин.

На Рис. 111 показаны аналогичные данные для выделенного случая t' = 0 и n = 1, т.е. половинного заполнения (моттовский диэлектрик) для различных величин обратной корреляционной длины $\kappa = \xi^{-1}$. Проводимость на малых частотах определяется только термическими возбуждениями и псевдощелевые флуктуации подавляют ее значительно. Более короткие корреляционные длины очевидно приводят к большим величинам проводимости на малых частотах. Переходы в верхнюю хаббардовскую зону вообще не затрагиваются влиянием этих флуктуаций

5.4.4 Выводы

Данный раздел является прямым продолжением предыдущего и работ [66, 67, 68], где был предложен обобщенный DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ подход, учитывающий важные эффекты нелокальных корреляций (в принципе любого типа) в дополнение к (по существу точной) обработке локальных динамических корреляций DMFT. Здесь мы используем обобщенный DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ подход для расчета оптической проводимости в двумерной хаббардовской модели с псевдощелевыми флуктуациями. Наши результаты демонстрируют, что псевдощелевые аномалии, наблюдаемые в оптической проводимости медных оксидов могут, в принципе, быть объяснены в этой модели. Основным преимуществом в сравнении с предыдущей работой [70] является здесь возможность изучения роли сильных электронных корреляций, которые имеют решающее значение в формировании электронной структуры систем подобных купратам. Фактически, нами продемонстрировано существенное подавление псевдощелевых аномалий в оптической проводимости с ростом силы корреляций.

Как мы уже отмечали в предыдущем разделе качественно похожие результаты по формированию псевдощели в одночастичных характеристиках для двумерной модели Хаббарда также получены в кластерных обобщениях DMFT [162, 163]. Однако, эти методы имеют характерные ограничения на размер кластера и до сих пор широко не применялись для вычисления двухчастичных свойств, таких как общие функции отклика, и, в частности, для вычислений оптической проводимости.

Наш подход свободен от этих ограничений, хотя и ценой введения дополнительных (полу)феноменологических параметров (корреляционная длина ξ и псевдощелевая амплитуда W). Он требует существенно меньших затрат счетного времени, таким образом, его преимущество при вычислении двухчастичных функций отклика очевидно. Это также открывает возможности для систематического сравнения различных типов нелокальных флуктуаций и их влияния на электронные свойства, обеспечивая более интуитивно ясный путь к анализу экспериментов или теоретических данных, полученных в рамках более продвинутых схем. Снова отметим, что в принципе и ξ и W могут быть вычислены из оригинальной модели[67].Наша схема работает для любой силы кулоновского взаимодействия U, псевдощелевой амплитуды W, корреляционной длины ξ , заполнения n и невозмущенной электронной дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$.

Представленный формализм может быть легко обобщен в рамках недавно предложенного LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ подхода, который позволяет проводить расчеты псевдощелевых аномалий в оптической проводимости для реалистичных систем. Он также может быть легко обобщен на учет орбитальных степеней свободы, фононов, примесей и т.д.

5.5 Анализ реалистичных систем.

5.5.1 Купраты. LDA+DMFT+ Σ_k .

Псевдощель наблюдается в нормальной недодопированной фазе различных ВТСП купратов. В этом разделе мы рассмотрим новый обобщенный LDA+DMFT+ Σ_k под-

ход и используем его для описания электронной структуры в псевдощелевом состояний нескольких прототипов высокотемпературных сверхпроводящих составов: дырочно допированных $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8-\delta}$ (Bi2212) и $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (LSCO) систем и электронно допированных $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ (NCCO) и $Pr_{2-x}Ce_xCuO_4$ (PCCO). LDA/DFT (теория функционала электронной плотности в приближении локальной плотности) обеспечивает получение модельных параметров (величин интегралов перескока, силы локального кулоновского взаимодействия) для однозонной модели Хаббарда, которая решается DMFT (приближением динамического среднего поля). Для учета псевдощелевых флуктуаций в LDA+DMFT схеме добавляется "внешняя зависящая от импульса собственно-энергетическая часть Σ_k , которая описывает взаимодействие коррелированных электронов проводимости с нелокальными антиферромагнитными (гейзенберговского типа) спиновыми флуктуациями. В рамках LDA+DMFT+ Σ_k подхода мы продемонстрируем формирование ярко выраженных "горячих точек" на карте поверхности Ферми в электронно допированных системах (NCCO, PCCO), в противоположность дырочно допированным (Bi2212,LSCO), где мы имеем Ферми дуги нодальном направлении и достаточно широкую область разрушения поверхности Ферми вблизи границ зоны Бриллюэна. Сравнение наших теоретических данных с результатами экспериментов по фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES) демонстрирует хорошее, часто даже полуколичественное, согласие. В LDA+DMFT+ Σ_k подходе будет также расчитана оптическая проводимость для Bi2212 и NCCO, которая демонстрирует неплохое согласие с экспериментальными данными. Дальнейшее рассмотрение в этом разделе является кратким самообзором работ [190, 191, 192, 193, 194, 195, 196].

Введение

Псевдощелевое состояние является одной из основных аномалией нормального состояния купратов и обычно считается наиболее значимым для понимания физической природы ВТСП [24, 25, 184]. Наиболее мощным инструментом исследования такого состояния является фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES). В течении последнего десятилетия наблюдался огромный прогресс в экспериментальной технике ARPES. На сегодня, некоторые важные экспериментальные характеристики могут быть получены из ARPES данных, например, поверхность Ферми (FS), квазичастичная дисперсия и затухание и даже поведение СЭЧ [16, 33]. Это позволило открыть целый ряд интересных физических аномалий в недодопированной фазе купратов: формирование псевдощели, "теневые" зоны, дуги Ферми, двухплоскостное расщепление (bilayer splitting) поверхности Ферми в двуслойных системах и т.д. [16, 33] Эти явления в изобилии имеются в разных теориях и до сих пор нет определеной точки зрения о их физической природе. Полагается, что многие из них достаточно значимы для физики ВТСП. Проблема сильно усложняется имеющимися в этих системах сильными электронными корреляциями, делающими сомнительной стандартную зонную теорию и фермижидкостный подход.

В данной разделе мы покажем, что учета короткодействующих AFM флуктуаций, приводящих к формированию псевдощели достаточно, в принципе, для описания целого ряда ARPES экспериментов. Для этой цели мы используем новую гибридную *ab initio* расчетную схему LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ [66, 67, 68]. С одной стороны эта схема унаследовала все преимущества LDA+DMFT [157, 158, 159, 160, 161], т.е. объединения первопринципной одноэлектронной теории функционала плотности в приближении локальной плотности (DFT/LDA) [197, 198] и теории динамического среднего поля (DMFT) для сильно коррелированных электронов [146, 147, 156, 149, 164]. С другой стороны наша схема позволяет учесть нелокальных корреляций, вводя (аддитивно) импульсно зависимую СЭЧ с сохранением обычной системы самосогласованных DMFT уравнений [66, 67, 68]. Для решения однопримесной задачи DMFT мы здесь снова используем надежный метод численной ренормгруппы (NRG) [153, 154].

Такая комбинированная схема очень подходит для описания электронных свойств ВТСП купратов в нормальном недодопированном состоянии. Во-первых, все определяемые спецификой конкретных систем модельные параметры для физически значимой Cu-3d $x^2 - y^2$ орбитали могут быть получены из LDA расчетов. Во-вторых, недопированные купраты являются антиферромагнитными моттовскими диэлектриками с $U \gg B$ (U — локальное кулоновское взаимодействие, B — ширина невзаимодействующей зоны), так что корреляционные эффекты очень важны. Таким образом, при конечном допировании (вплоть до оптимального) купраты являются типичными сильно коррелированными металлами. DMFT этап нашей расчетной схемы позволяет учесть такие сильные электронные корреляции. Наконец, для изучения "антиферромагнитного сценария" формирования псевдощели в купратах мы включаем в LDA+DMFT **k**-зависимую СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{k}}$, описывающую нелокальные корреляции, вызываемые (квази) статическими гейзенберговскими спиновыми флуктуациями AFM ближнего порядка [63, 64].

В таком LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ подходе мы изучим ряд высокотемпературных составов: дырочно допированные Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8- $\delta}$} (Bi2212) [190] и La_{2-x}Sr_xCuO₄ (LSCO) [195],а также электронно допированные Nd_{2-<math>x}Ce_xCuO₄ (NCCO) [192, 193] и Pr_{2-x}Ce_xCuO₄ (PCCO) [194]. Поскольку наиболее мощным экспериментальным инструментом для исследования электронных свойств является фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES) [16, 199, 200, 201] мы проведем сравнение расчитанных LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ спектральных функций и поверхностей Ферми с полученными ARPES квазичастичными зонами и картами поверхности Ферми. Двухчастичные свойства (например, оптическая проводимость) также могут быть описаны в нашем подходе [71]. Сравнение рассчитанных с помощью LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ оптических спектров в псевдощелевом состоянии с экспериментальными данными для Bi2212 [190] и NCCO [192, 193] дает неплохое качественное согласие.</sub>

Детали LDA+DMFT+ Σ расчетов

Кристаллическая структура Bi2212 [190], NCCO [192, 193] и РССО [194] имеет тетрагональную симметрию с пространственной группой I4/mmm, а LSCO омеет орторомбически искаженную структуру Bmab [195]. Другие кристаллографические данные, использованные в наших LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ расчетах смотри в работах [190, 192, 193, 194, 195]. Хорошо известна квазидвумерная природа купратов, во многом

Таблица 2: Рассчитанные энергетические модельные параметры (eV) и экспериментальная корреляционная длина ξ . Первые четыре интеграла перескока Cu-Cu в плоскости t, t', t'', t'''; эффективный межплоскостной интеграл перескока t_{\perp} , локальное кулоновское взаимодействие U и амплитуда псевдощели W.

	t	t'	<i>t''</i>	<i>t'''</i>	t_{\perp}	U	W	ξ
Bi2212	-0.627	0.133	0.061	-0.015	0.083	1.51	0.21	10a
NCCO	-0.44	0.153	0.063	-0.01		1.1	0.36	50a
PCCO	-0.438	0.156	0.098	_		1.1	0.275	50a
LSCO	-0.476	0.077	-0.025	-0.015		1.1	0.21	10a

определяющая их физические свойства. Физически наиболее интересны плоскости CuO₂. Эти плоскости дают частично заполненную антисвязывающую Cu-3d(x²-y²) орбиталь с дисперсией пересекающей уровень Ферми. В приближении сильной связи такая дисперсия имеет вид:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a) - 4t' \cos k_x a \cos k_y a \qquad (352)$$
$$- 2t''(\cos 2k_x a + \cos 2k_y a) - 2t'''(\cos k_x a \cos 2k_y a + \cos 2k_y a \cos k_y a).$$

Здесь t, t', t'', t''' – интегралы перескока Сu-Сu в первых четырех координационных сферах плоскости, a – постоянная решетки Соответствующие эффективные интегралы перескока, полученные в рамках метода линеаризованных muffin-tin орбиталей (LMTO) [203]с использованием N-го порядка LMTO (NMTO) подхода [204], приведены в Таблице 2. Таким образом, мы просто используем рассчитанную в LDA эффективную антисвязывающую Cu- $3d(x^2 - y^2)$ зону как "затравочную" в дальнейших LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ вычислениях.

В двуслойных системах, например в Bi2212, существенны также перескоки на соседнюю плоскость. "Tight-binding" выражение для межплоскостной дисперсии, полученное в [205], имеет вид:

$$t_{\perp}(\mathbf{k}) = \frac{t_{\perp}}{4} (\cos k_x a - \cos k_y a)^2 \tag{353}$$

Амплитуда двухплоскостного расщепления (bilayer splitting (BS)) равна $2t_{\perp}$. Величина t_{\perp} приведена в Таблице 2. Учет межплоскостного перескока и возникающего BS требует некоторого легкого обобщения DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ схемы, используемой в дальнейших расчетах. Необходимые подробности приведены в Приложении L

Для проведения DMFT расчетов необходимо также установить величину одноузельного кулоновского взаимодействия. Величина такого кулоновского взаимодействия U для эффективной Cu- $3d(x^2 - y^2)$ орбитали, полученная "constrained LDA" расчетами [206], также представлена в Таблице 2.

Для учета AFM спиновых флуктуаций применялась двумерная модель псевдощелевого состояния [63, 64], обобщенная в подходе DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ для сильно коррелированных систем [67, 68]. Дополнительная "внешняя" **k**-зависимая СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ [67, 68] описывает нелокальные корреляции, вызываемые (квази)статическими ⁶⁷ AFM спиновыми флуктуациями.

Для определения $\Sigma_{\mathbf{k}}$ необходимо знание двух важных параметров – амплитуды псевдощели W, представляющей энергетический масштаб флуктуирующей SDW, и корреляционной длины флуктуаций ξ . Величины W рассчитывались как описано в работах [67, 68, 190] Величины корреляционной длины оценивались из эксперимента, т.е. брались в соответствии величинами, получаемыми из экспериментов по нейтронному рассеянию для NCCO [207] и LSCO [209]. Используемые величины W и ξ для всех рассматриваемых систем приведены в Таблице 2. Для решения эффективной андерсоновской однопримесной задачи в DMFT использовалась численная ренормгруппа (NRG [153, 154]). Температура DMFT(NRG) расчетов выбиралась 0.011 eV, а электронная или дырочная концентрация (допирование) – 15%.

Результаты и обсуждение

Основываясь на широком анализе LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ результатов и экспериментальных ARPES данных нами было установлено существование четко выраженных "горячих точек" (пересечение поверхности Ферми с границами антиферромагнитной зоны Бриллюэна) в поведении спектральной плотности и на картах поверхности Ферми в электронно допированных системах [192, 193, 194], в то время как в дырочно допированные системах имеются только дуги Ферми [190, 195].

⁶⁷Квазистатическое приближение для AFM флуктуаций с необходимостью ограничивает наш подход областью достаточно высоких температур (и энергий не слишком близких к уровню Ферми)[63, 64], так что фактически мы не можем судить, например о природе низкотемпературного(энергетического) затухания в нашей модели.



Рис. 112: LDA поверхности Ферми для Bi2212 (слева) и NCCO (справа) в четверти зоны Бриллюэна. Диагональная линия – граница AFM зоны Бриллюэна.

На Рис. 112 приведены невзаимодействующие LDA поверхности Ферми (FS) в четверти первой зоны Бриллюэна (BZ) (левая панель – Bi, правая – Nd системы). Форма этих FS определяется интегралами перескока модели сильной связи из Таблицы 2. Диагональная линия соответствует границе AFM зоны Бриллюэна. На левой панели для Bi2212 можно видеть две ветви поверхности Ферми, связанные с конечным интегралом перескока t_{\perp} между ближайшими CuO₂ плоскостями — так называемым двухплоскостным расщеплением (bilayer splitting).

Важно отметить здесь положение "горячих точек" (пересечение FS и границы AFM BZ) для обеих систем. Для Bi2212 – $(0.47,2.66)\pi/a$ и для NCCO $(0.95,2.19)\pi/a$. Легко видеть, что для NCCO "горячие точки" расположены гораздо дальше от границ BZ, чем в Bi2212. Напомним, что псевдощелевые флуктуации рассеивают электрон из окрестности одной "горячей точки" в окрестность другой, связанной с первой AFM вектором **Q**. Размер "окрестности" определяется обратной корреляционной длиной ξ^{-1} . Напомним также, что точка (π/a ,0) окружена с разных сторон четырьмя BZ. Следовательно, если "горячая точка" близка к (π/a ,0) и ξ^{-1} достаточно велика, разрушение FS усиливается за счет соседних BZ. Таким образом, можно ожидать в NCCO более выраженных "горячих точек" и менее разрушенной FS вблизи границ BZ в отличие от Bi2212.

На Рис. 113 приведены LDA+DMFT+Σ_к спектральные плотности вдоль 1/8 части невзаимодействующей поверхности Ферми от нодальной точки на диагонали зоны Бриллюэна (верхняя кривая) к антинодальной на границе этой зоны (нижняя кривая). Результаты для Bi2212 даны на левой панели, для NCCO — на правой



Рис. 113: LDA+DMFT+Σ_k спектральные плотности для Bi2212 (левая панель) и NCCO (правая панель) вдоль "затравочной" поверхности Ферми в 1/8 зоны Бриллюэна. Пунктирная черная кривая соответствует "горячей точке" [192, 193]

панели Рис. 113. Для обоих составов в нодальном направлении квазичастицы хорошо определены — острый пик спектральной плотности, расположенный практически на уровне Ферми. При движении к антинодальной точке квазичастичное затухание растет, достигая максимума в "горячей точке" (пунктир), а пик сдвигается от уровня Ферми. Такое поведение подтверждается и экспериментами [208, 210] (сравнение с экспериментом см. [192, 193]). Непосредственно из LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ результатов на Рис. 113 видим, что для Bi2212 антинодальные квазичастицы формируются низкоэнергетическим краем псевдощели ⁶⁸, а для NCCO — высокоэнергетическим. Для Bi2212 мы также наблюдаем межплоскостное расщепление (BS) на квазичастичном пике, что связано с двуслойным характером этой системы.

"Горячие точки" для NCCO расположены ближе к диагонали зоны Бриллюэна [192, 193], что можно видеть по черным пунктирным линиям Рис. 113(см. также Рис. 112), соответствующим "горячим точкам". Кроме того корреляционная длина в NCCO гораздо больше, чем в Bi2212. Поэтому для NCCO (в отличие от Bi2212) в антино-

 $^{^{68}}$ особенно четко это видно при меньшей корреляционной длине $\xi=5a,$ рассмотренной в работе [190]



Рис. 114: LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ карты поверхности Ферми для Bi2212 (верхняя левая панель) и NCCO (верхняя правая панель) в 1/4 оf BZ (k_x, k_y в единицах π/a). Экспериментальные FS для Bi2212 (нижняя левая панель [38]) и NCCO (нижняя правая панель [208]).

дальном направлении квазичастицы снова хорошо определены Для Bi2212 рассеяние вблизи границ зоны Бриллюэна сильно везде и вместо "горячих точек" мы наблюдаем достаточно сильное "разрушение" поверхности Ферми вблизи этих границ. Качественно такая же картина наблюдается также в LSCO (см. Рис. 115).

На Рис. 114 на верхней панели представлена LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ карта поверхности Ферми в четверти BZ для Bi2212 (слева) и NCCO (справа). Коротко говоря, верхняя панель Рис. 114 это цветные карты в обратном пространстве интенсивности LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ спектральной плотности на уровне Ферми. В Bi2212 наблюдается существенное "разрушение" FS рассеянием на псевдощелевых флуктуациях вблизи границ BZ. Напротив, NCCO поверхность Ферми, как и предсказывалось нами, почти полностью восстанавливается вблизи границ BZ. С другой стороны Ферми дуга в нодальном направлении Bi2212 достаточно четко выражена, а в NCCO заметно размыта. Это еще одно последствие того, что "горячие точки" в NCCO расположены ближе к диагонали BZ. Немного большая величина амплитуды псевдощели W также



Рис. 115: Поверхности Ферми LSCO. Эксперимент для x=0.14 (левая панель) и LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ расчеты (правая панель). Красные крестики на левой панели соответствуют экспериментальной поверхности Ферми. (из [195])

способствует большему размытию Ферми дуг в NCCO. Необходимо отметить появление "теневой" поверхности Ферми, которая заметно более интенсивная для NCCO.

Качественно такие же формы FS наблюдались экспериментально и для Bi [38] и для Nd [208] составов (нижняя панель Рис. 114). По нашему мнению, такое различие карт FS для этих систем связано лишь со спецификой материалов. В частности, LDA поверхности Ферми NCCO более искривленные (левая панель Рис. 112) и, таким образом, вблизи границ BZ почти не испытывают рассеяния. А Bi2212 FS подходят к границам BZ достаточно близко к точке (π/a ,0) (правая панель Рис. 112), близки к ней и "горячие точки". Поэтому в Bi2212 они спрятаны общим сильным псевдощелевым рассеянием вблизи точки (π/a ,0) и не видны. Более выраженному характеру "горячих точек" в NCCO способствует также гораздо большая корреляционная длина в этой системе.

Недавно полученные экспериментальные и теоретические LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ карты поверхности Ферми LSCO [195] показаны на Рис. 115. Обе карты демонстрируют сильное рассеяние вокруг (π/a ,0)-точки, которое мы связываем с рассеянием на AFM флуктуациях вблизи "горячих точек", которые (как и в Bi2212) близки к (π/a ,0) [190, 192, 193]. Вблизи нодального направления мы наблюдаем типичные дуги Ферми, которые хорошо видны из теоретических данных, а в эксперименте мы наблюдаем лишь их узкий след.

Другой возможностью сравнения LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ результатов с ARPES данны-

ми являются диаграммы интенсивности спектральной плотности построенные вдоль симметричных направлений зоны Бриллюэна. На Рис. 116 мы представляем такую LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ диаграмму интенсивности для NCCO (верхняя панель) в сравнении с данными высокоэнергетической объемночувствительной фотоэмиссии с угловым разрешением в Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO₄ (нижняя панель).[192, 193] Мы видим достаточно хорошее согласие LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ и экспериментальных данных. Наиболее ярко наблюдаются и теоретически и экспериментально очень интенсивные квазичастичные зоны. Слабо интенсивные теневые зоны экспериментально разрешаются далеко не всегда, как, например, в направлении $M-\Gamma$.

Более интересная ситуация наблюдается в $\Gamma - X - M$ направлениях. Если рассматривать только экспериментальные данные, то в Г-точке энергия зоны порядка -1.2 eV. Она достаточно интенсивная и растет по энергии, падая по интенсивности, при движении к точке X. На энергиях порядка -0.3 eV интенсивность становится практически нулевой, а затем растет опять в окрестности точки Х. В направлении X–М интенсивность опять падает вблизи энергий порядка -0.3 eV. На первый взгляд можно подумать, что это одна и та же зона, а интенсивность управляется эффектами матричных элементов. Однако, основываясь на $LDA+DMFT+\Sigma_{\mathbf{k}}$ результатах (верхняя панель Рис. 116), можно заключить, что область с низкой интенсивностью является запрещенной зоной (щелью) между теневой и квазичастичными зонами. "Подкова" вокруг Х-точки формируется теневой зоной для левой ветви и квазичастичной зоной для правой. Таким образом, разумно предположить, что высокую интенсивность при -0.3 eV в точке X необходимо интерпретировать не как особенность ван-Хова в затравочной дисперсии [211], а, скорее, как высокоэнергетическую ветвь псевдощели [192, 193]. Достаточно интенсивная бездисперсионная зона при -1.0 eV в экспериментальных данных может предположительно быть связанной с нижней хаббардовской зоной с возможным подмешиванием некоторых кислородных состояний.

Еще большее согласие LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ результатов с экспериментальными ARPES



Рис. 116: Сравнение для NCCO LDA+DMFT+Σ_k спектральной плотности вдоль симметричных направлений зоны Бриллюэна (верхняя панель) с ARPES экспериментом [192, 193](нижняя панель).

данными недавно получено нами для РССО в работе [194]. На Рис. 117 представлена карта поверхности Ферми РССО (панель (а) — LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ результаты, панель (b) — экспериментальные ARPES данные). Поверхность Ферми ясно различима, как воспоминание о невзаимодействующей зоне, лишь вблизи границ первой зоны Бриллюэна и вокруг точки ($\pi/a/2, \pi/a/2$) (так называемая Ферми дуга). Опять, как и в NCCO, наблюдается "разрушение" поверхности Ферми в "горячих точках", расположенных на пересечении поверхности Ферми и ее AFM теневой реплики Такое "разрушение" поверхности Ферми возникает вследствие сильного электронного рассеяния на AFM спиновых (псевдощелевых) флуктуациях на медных атомах. Таким образом, "теневая" поверхность Ферми становится наблюдаемой, как происходит при AFM удвоении периода. Однако, поскольку дальнего порядка в интересующей нас недодопированной области нет, "теневая" поверхность Ферми имеет интенсивность меньше в сравнении с обычной FS. Поверхность Ферми РССО очень похожа на наблюдаемую в Nd_{2-x}Ce_xCuO₄ (NCCO), который принадлежит тому же семейству сверхпроводников [192, 193, 208].

Давайте сравним (см. Рис. 118) теоретические (верхняя панель) и экспериментальные (нижняя панель) энергетические квазичастичные дисперсии для наиболее



Рис. 117: Карта поверхности Ферми для РССО. (а) — LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ результаты. Белый прямоугольник на панели (а) схематически показывает часть обратного пространства, измеренного экспериментально (панель b). Нижний левый угол является X-точкой $(\pi/a, 0).(\text{Ref. [194]})$



Рис. 118: Энергетически-импульсные распределения интенсивности на характерных разрезах, приведенных на Рис. 117 (верхние панель — теоретические данные, нижние панели экспериментальная интенсивность фотоэмиссиии). Чтобы судить о абсолютных интенсивностях "теневой" (1) и основной зоны (2) на первом разрезе приведена кривая импульсного распределения (MDC), проинтегрированная по энергетическому окну 60 meV, центрированному на уровне Ферми (FL). Аналогичная интегральная кривая энергетического распределения (EDC) для разреза 2 (через "горячую точку") показывает подавление интенсивности на FL в сравнении с аналогичным для разреза 3, который расположен достаточно далеко от "горячей точки". Уровню Ферми соответствует ноль энергии. (Из [192, 193])

характерных сечений, введенных на Рис. 117. Теоретические данные домножены на функцию Ферми с температурой 30К и свернуты (по энергии) с распределением Гаусса для имитации экспериментального разрешения.

Разрез 1 пересекает квазичастичную и "теневую" поверхности Ферми вблизи границ зоны Бриллюэна. Соответственно, на нем можно обнаружить "вилко"-подобную структуру, сформированную подавленной "теневой" зоной (-0.5-0 arb.u.) и лучше определенной квазичастичной зоной (0.5-1 arb.u.). Такая структура соответствует началу формирования цилиндра поверхности Ферми вокруг ($\pi/a,0$) точки. Разрез 2 проходит точно через "горячую точку". Здесь мы видим сильное подавление квазичастичной зоны вокруг уровня Ферми, аналогичное показанному на Рис. 116для NCCO. Разрез 3 пересекает дугу Ферми и мы можем видеть очень хорошо определенную квазичастичную зону. Однако, слабо интенсивная "теневая" зона также присутствует. В случае дальнего AFM порядка и полного удвоения периода, поверхность Ферми и ее "тень" должны сформировать замкнутый "карман" поверхности Ферми вокруг $(\pi/2a, \pi/2a)$ точки, а в данном случае часть кармана, формируемая "теневой" зоной, не столь хорошо определена в импульсном пространстве. Как можно видеть наблюдается хорошее соответствие между расчетными и экспериментальными данными, которые также похожи на результаты, полученные для Nd_{2-x}Ce_xCuO₄ (NCCO) в нашей более ранней работе [192, 193].

Как уже отмечалось, в рамках LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ схемы можно анализировать и двухчастичные свойства [71](см. также раздел 5.4), что позволило нам исследовать оптическую проводимость Bi и Nd составов. На Рис. 119 проведено сравнение экспериментальных данных с LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ результатами по оптической проводимости для NCCO (левая панель) и Bi2212 (правая панель) Детали расчетов проводимости описаны в разделе 5.4. Можно отметить качественное согласие нашей теоретической кривой для NCCO, полученной с рассчитанной W=0.36 eV (solid line), с экспериментом [212]. Однако, мы обнаруживаем, что вычисленная величина псевдощели явно переоценена. Для улучшения согласия мы также сосчитали оптическую про-



Рис. 119: Сравнение LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ оптической проводимости для NCCO (левая панель) с экспериментальными данными (кружки) [212]. Сплошная линия – теоретический результат для рассчитанной W=0.36 eV, пунктир соответствует экспериментальной W=0.2 eV. На правой панели тоже для Bi2212 и эксперимент из работы [213].

водимость для экспериментальной величины W=0.2 eV [212] (пунктир на Рис. 119). Возможный источник такого различия может быть также связан с переоценкой величины U, рассчитанной нами. Относительно оптической проводимости в Bi2212 (правая панель Рис.119) можно отметить, что характерной псевдощелевой структуры не возникает ни в теории ни в эксперименте [213], что связано с достаточно малыми W и корреляционной длиной. Для Bi2212 согласие между теорией и экспериментом вполне удовлетворительное.

Заключение

Здесь мы резюмируем наши недавние результаты по LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ исследованиям псевдощелевого состояния для ряда медных ВТСП составов: дырочно допированных – Bi2212 [190] и LSCO [195]; электронно допированных – РССО [194] и NCCO [192, 193]. Для всех составов LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ расчеты показывают, что фермижидкостное поведение сохраняется лишь достаточно далеко от "горячих точек" (нодальное направление), а "разрушение" поверхности Ферми наблюдается вблизи "горячих точек". Такое разрушение происходит вследствие сильного рассеяния коррелированных электронов на AFM (псевдощелевых) флуктуациях ближнего порядка. Основываясь на широком анализе LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ результатов и экспериментальных ARPES данных нами установлено существование четко выраженных "горячих точек" в поведении спектральной плотности и на картах поверхности Ферми в электронно допированных системах, в отличие от дырочно допированных систем, где наблюдается сильное разрушение поверхности Ферми вблизи границ зоны Бриллюэна и остаются только дуги Ферми. Существует несколько причин для этого результата: (i) "горячие точки" в электронно допированных системах расположены ближе к центру зоны Бриллюэна; (ii) корреляционная длина AFM флуктуаций в электронно допированных системах больше; (iii) ширина псевдощели в электроных также больше, чем в дырочных. Сравнение между экспериментальными и LDA+DMFT+ $\Sigma_{\bf k}$ данными выявляет хорошее полуколичественное соответствие. Экспериментальные и теоретические результаты, рассмотренные здесь еще раз подтверждают AFM сценарий формирования псевдощели как в дырочно допированных системах [190, 195], так и в электронно допированных [192, 193, 194].

5.5.2 Электронная структура и возможное псевдощелевое поведение в сверхпроводниках на основе железа.

В предыдущих разделах в качестве систем на которых отрабатывались наши подходы к описанию псевдощелевого состояния рассматривались купраты. В этих системах псевдощелевое состояние является, по-видимому, одной из основных аномалий и именно для них впервые остро встал вопрос о необходимости описания такого состояния. В этом разделе мы применим наш подход к описанию возможного псевдощелевого состояния в недавно открытых высокотемпературных сверхпроводниках на основе железа. Стартуя с упрощенной аналитической модели электронного спектра вблизи уровня Ферми для таких сверхпроводников, мы обсудим влияние антиферромагнитного рассеяния, как в стехиометрическом случае, так и в области возможных флуктуаций антиферромагнитного ближнего порядка в допированных составах. Будет представлена качественная картина эволюции электронного спектра и поверхностей Ферми при различном допировании, как электронном так и дырочном, в целях сравнения с существующими и будушими ARPES экспериментами. Мы продемонстрируем возможное псевдощелевое поведение, связанное с частичным "разрушением" поверхности Ферми и объясняющее некоторые недавние эксперименты. Дальнейшее рассмотрение в этом параграфе в основном следует работе [214].

Недавнее открытие нового класса высокотемпературных сверхпроводников на основе железа [41] стимулировало широкие экспериментальные и теоретические исследования их свойств (см. для обзора [42, 43]). Несмотря на достигнутый огромный прогресс в понимании этих систем, природа сверхпроводящего спаривания и аномалии нормального состояния все еше активно обсуждаются.

Выяснение структуры электронного спектра новых сверхпроводников является ключевым для объяснения их свойств. Соответственно, начиная с первых дней, различные группы начали детальные зонные расчеты, базирующиеся в основном на различных реализациях общего LDA подхода, для всех классов этих составов. Эти расчеты в основном выполнялись для парамагнитных тетрагональных FeAs 1111 систем [215, 216, 217, 218], для 122 [219, 220, 221], для 111 [221, 222, 223] и α -FeSe [224]. Можно привести еще много похожих работ других авторов. Фактически, все эти расчеты демонстрировали почти универсальную LDA зонную структуру в относительно узком энергетическом интервале ($\pm 0.1eV$) вокруг уровня Ферми, который и существенен для сверхпроводимости [42].

В этом энергетическом интервале электронный спектр может быть смоделирован аналитически следующим образом. Три "дырочных" ветви спектра, пересекающие уровень Ферми в окрестности Г точки зоны Бриллюэна (Рис.120а), полагаем изотропными и моделируем квадратичным законом дисперсии:

$$\varepsilon_i(\mathbf{p}) = \varepsilon_i - \frac{p^2}{2m_i} \tag{354}$$

где параметры m_i , ε_i (i = 1, 2, 3) легко определяются из LDA расчетов (например, для 122 системы из результатов работы [219]).

Две "электронных" ветви спектра, пересекающие уровень Ферми в окрестности $M(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ точки сокращенной зоны Бриллюэна, являются заметно анизотропными и образуют в изоэнергетическом сечении (например, на уровне Ферми) два одинако-

вых "эллипса" (см. Рис.120b), один из которых вытянут в направлении $M\Gamma$, а второй в перпендикулярном направлении. Будем отсчитывать импульс от M точки зоны Бриллюэна (т.е. $\mathbf{p} - \mathbf{Q} \rightarrow \mathbf{p}$). В качестве осей проектирования для вектора импульса \mathbf{p} выберем ось вдоль направления $M\Gamma$ и перпендикулярного ему (Рис.120b). От соответствующих проекций p_1 и p_2 импульса на эти оси легко перейти к привычным проекциям на оси x, y ($p_1 = \frac{p_y + p_x}{\sqrt{2}}$, $p_2 = \frac{p_y - p_x}{\sqrt{2}}$). Выберем один из "эллипсов", например, вытянутый вдоль направления перпендикулярного $M\Gamma$. Сечение дисперсии вдоль направления $M\Gamma$ моделируем квадратичным законом дисперсии $\varepsilon_{p1}(p) = \frac{p^2}{2m_4} - \varepsilon_4$. Сечение дисперсии в направлении перпендикулярном $M\Gamma$ определяется верхней (по энергии) ветвью спектра, возникающей от гибридизации двух "затравочных" дисперсий (см. Рис.120а), которые также полагаем квадратичными. В результате, пренебрегая малой шириной гибридизационной щели, для этого сечения получаем $\varepsilon_{p2}(p) = max(-\frac{p^2}{2m_0} - \varepsilon_4; \frac{p^2}{2m_5} - \varepsilon_5)$ Параметры $m_4, \varepsilon_4, m_5, \varepsilon_5, m_0$ могут быть взяты из LDA расчетов. Таким образом, для анизотропного "электронного" спектра

$$\varepsilon_4(\mathbf{p}) = \cos^2(\phi)\varepsilon_{p1}(p) + \sin^2(\phi)\varepsilon_{p2}(p) \tag{355}$$

где $p^2 = p_1^2 + p_2^2$, а ϕ – полярный угол с осью **р**₁. Такая модель обеспечивает правильные сечения спектра в направлении $M\Gamma$ и перпендикулярном ему, а также изотропность спектра при $\varepsilon_{p1}(p) = \varepsilon_{p2}(p)$. Дисперсия $\varepsilon_5(\mathbf{p})$ для другой "электронной" зоны также определяется (355) с учетом замены $\phi \to \frac{\pi}{2} + \phi$ Окончательно, для спектра "электронных" зон в такой модели получаем:

$$\varepsilon_4(\mathbf{p}) = \begin{cases} \frac{p_1^2}{2m_4} - \frac{p_2^2}{2m_0} - \varepsilon_4 & \text{при } p^2 = p_1^2 + p_2^2 < p_0^2 \\ \frac{p_1^2}{2m_4} + \frac{p_2^2}{2m_5} - \frac{p_1^2}{p^2} \varepsilon_4 - \frac{p_2^2}{p^2} \varepsilon_5 & \text{при } p^2 > p_0^2 \end{cases}$$
(356)

где $p_0^2 = 2(\varepsilon_5 - \varepsilon_4)/(\frac{1}{m_5} + \frac{1}{m_0})$ – квадрат импульса в месте пересечения двух затравочных гибридизующихся зон.

Качественная картина электронного спектра и поверхностей Ферми показана на Рис. 120. По существу такой вид электронного спектра и поверхностей Ферми качественно подтверждается экспериментами по фотоэмиссии с угловым разрешением



Рис. 120: Качественный вид зонной структуры в направлении *М*Г сокращенной зоны Бриллюэна (а) и поверхности Ферми (b).

(ARPES), начиная с ранних работ [225, 226, 227, 228, 229, 230, 231, 232] и многими последующими исследованиями этих и других авторов. Большинство таких экспериментов выполнялись на монокристаллах систем 122, поскольку для других составов до настоящего времени не удается вырастить монокристаллы хорошего качества. Несмотря на общее качественное согласие с результатами LDA расчетов, эти эксперименты показывают довольно разные результаты касательно тонких деталей, таких как точное число дырочных цилиндров поверхности Ферми вокруг Г точки, так же как топологию электронных цилиндров вокруг М – точки.

В общем случае LDA расчеты недооценивают роль электронных корреляций. ARPES эксперименты показывают, что эти системы по-видимому принадлежат к классу средне коррелированных систем с вызываемым корреляциями сужением зоны, определяемым фактором порядка двойки [227]. Это подтверждается и рядом LDA+DMFT расчетов [233], хотя теоретическая ситуация здесь остается достаточно противоречивой. В дальнейшем, мы будем учитывать корреляции простым изменением шкалы энергий на фактор 2 в сравнении с LDA [227].

Не легированные FeAs составы являются антиферромагнитно упорядоченными с AFM вектором $\mathbf{Q} = (0, \pi)$ в расширенной зоне Бриллюэна, соответствующем $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ в сокращенной зоне [42, 43]. Электронное или дырочное допирование подавляет AFM упорядочение и приводит к сверхпроводимости, аналогично хорошо известной ситуации в купратах. Недавние эксперименты по нейтронному рассеянию [234, 235]



Рис. 121: Рекуррентное "уравнение Дайсона" для функции Грина.

ясно показали, что в значительной части фазовой диаграммы FeAs систем в нормальном парамагнитном состоянии сохраняются достаточно сильные флуктуации AFM ближнего порядка, как и предсказывается, например, моделью "почти антиферромагнитной ферми жидкости" [236, 72, 73]. Такие флуктуации могут, в принципе, вызывать псевдощелевое поведение электронного спектра, аналогичное наблюдаемому в купратах [25, 184].

Эффективное взаимодействие электронов со спиновыми флуктуациями, определяемое в этой модели динамической спиновой восприимчивостью и имеющее максимум на импульсах рассеяния электронов вблизи вектора антиферромагнитизма $\mathbf{Q} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$, мы предполагаем одинаковым для электронов из разных зон. Ограничимся пределом достаточно высоких температур, когда спиновой динамикой AFM флуктуаций можно пренебречь и считать их гауссовыми [25, 184]. Тогда для нахождения функции Грина электронов, движущихся в таком "замороженном" случайном поле статических гауссовых спиновых (зарядовых) флуктуаций ближнего порядка получаем рекуррентное "уравнение Дайсона", диаграммное представление для которого приведено на Рис.121 и которое является прямым обобщение на случай многих зон процедуры, предложенной и активно используемой в [50, 55, 63, 64], учитывающей *все* фейнмановские диаграммы для электрона, рассеивающегося на таком случайном поле.

Аналитически это "уравнение Дайсона" может быть записано в виде:

$$G_{ij}^{n} = G_{0i}^{n} \delta_{ij} + G_{0i}^{n} W^{2} s(n+1) \sum_{km} G_{km}^{n+1} \sum_{l} G_{lj}^{n}$$
(357)

где *i*, *j* – индексы зон, *W* характеризует ширину AFM псевдощели (порядка AFM расщепления зон (щели)),

$$G_{0i}^{n}(E\mathbf{p}) = \frac{1}{E - \varepsilon_{i}^{n}(\mathbf{p}) + inv_{i}^{n}\kappa}$$
(358)

 $\kappa = \xi^{-1}$ – обратная корреляционная длина SDW (CDW) флуктуаций ближнего порядка, $\varepsilon_j^n(\mathbf{p}) = \varepsilon_j(\mathbf{p} + \mathbf{Q})$ и $v_j^n = |v_j^x(\mathbf{p} + \mathbf{Q})| + |v_j^y(\mathbf{p} + \mathbf{Q})|$ для нечетных n, а $\varepsilon_j^n(\mathbf{p}) = \varepsilon_j(\mathbf{p})$ and $v_j^n = |v_j^x(\mathbf{p})| + |v_j^y(\mathbf{p})|$ для четных n. Проекции скоростей $v_j^x(\mathbf{p})$ и $v_j^y(\mathbf{p})$ определяются производной по импульсу энергетической дисперсии в j-ой зоне $\varepsilon_j(\mathbf{p})$. Комбинаторные множители s(n) в рассматриваемом нами случае гейзенберговских AFM флуктуаций (спин-фермионная модель [63]) имеют вид (49). Физическая функция Грина соответствует n = 0. Тогда, из (357) после простых преобразований, получаем:

$$G_{ij}(E\mathbf{p}) = G_{0i}^{0}(E\mathbf{p})\delta_{ij} + \frac{G_{0i}^{0}(E\mathbf{p})G_{0j}^{0}(E\mathbf{p})\Sigma(E\mathbf{p})}{1 - G_{0}^{0}(E\mathbf{p})\Sigma(E\mathbf{p})}$$
(359)

где физическая СЭЧ

$$\Sigma(E\mathbf{p}) = \Sigma^{n=1}(E\mathbf{p}) \tag{360}$$

определяется из рекуррентной процедуры (представление непрерывной дробью):

$$\Sigma^{n}(E\mathbf{p}) = \frac{W^{2}s(n)}{(G_{0}^{n}(E\mathbf{p}))^{-1} - \Sigma^{n+1}(E\mathbf{p})}$$
(361)

где $G_0^n(E\mathbf{p}) = \sum_j G_{0j}^n(E\mathbf{p})$. Используя эти общие уравнения, мы также можем легко анализировать электронный спектр в случае дальнего AFM порядка, обрывая непрерывную дробь в (361) на n = 1 и взяв предел $\kappa \to 0$. Спектральная плотность и плотность состояний определяются как обычно:

$$A(E\mathbf{p}) = -\frac{1}{\pi} ImSpG_{ii}^{R}(E\mathbf{p}); \ N(E) = \sum_{\mathbf{p}} A(E, \mathbf{p})$$
(362)

Мы провели расчеты для различных параметров модели, используя для спектра LDA данные для системы 122 из работы [219], масштабированные по энергии на фактор два для учета корреляций Ниже мы представляем результаты для W = 50meV, что примерно соответствует оценкам AFM расщепления зон из данных ARPES [237, 238] и нейтронного рассеяния [239] (изменяется в интервале 50-100 meV), и корреляционной длины AFM флуктуаций $\xi = 10a$ (a - параметр решетки), что также в примерном соответствии с данными нейтронного рассеяния [234, 235]. В дальнейшем, все импульсы даются в единицах обратного параметра решетки, энергии – в



Рис. 122: Энергетические зоны. На верхней панели (а) – "затравочные" (суженные LDA) зоны в парамагнитном состоянии в отсутствие AFM флуктуаций. На панели (b) – антиферромагнитная фаза со щелью W = 0.05eV. Панель (c) – зоны в псевдощелевом состоянии, вызванном флуктуациями AFM ближнего порядка с $\xi = 10a$ и W = 0.05eV. Все зоны размыты на экспериментальную погрешность $\gamma = 0.01eV$. Точечными линиями обозначены уровни Ферми, отвечающие различным уровням допирования.

eV. Чтобы сделать результаты сопоставимыми с ARPES экспериментами мы также введем эффективное уширение для эмитации конечного энергетического разрешения ARPES, заменяя $E \to E + i\gamma$ с $\gamma = 10$ meV (в соответствии с лучшим разрешением ARPES).

На Рис. 122 показаны "ARPES" энергетические зоны системы 122, раскрываемые диаграммой интенсивности спектральной плотности вдоль симметричных направлений зоны Бриллюэна, начиная со случая нормальных (парамагнитных) LDA зон (суженных в два раза корреляциями)(верхняя панель) через состояние с AFM дальним порядком (средняя панель) и заканчивая "псевдощелевым" состоянием, характеризуемым рассеянием электронов на флуктуациях AFM ближнего порядка (нижняя панель). Видим, как AFM расщепление зон трансформируется в псевдощели от AFM ближнего порядка.

На Рис. 123 показаны диаграммы интенсивности спектральной плотности на уровне Ферми (карты поверхностей Ферми) для различных степеней допирования – слева направо от незначительно допированного электронами через недопированный к недо-



Рис. 123: "ARPES" поверхности Ферми при различных уровнях допирования, обозначенных точечными линиями на Рис.122: колонка 1 – электронное допирование с $E_F = 0.02eV$, 2 – недопированный случай с $E_F = 0$, 3 – дырочное допирование с $E_F = -0.035eV$ (недодопированные системы), 4 – оптимальное дырочное допирование с $E_F = -0.085eV$. На верхней панели (а) – "затравочная" поверхность Ферми, отвечающая парамагнитному состоянию в отсутствие AFM флуктуаций. На панели (b) – AFM фаза со щелью W = 0.05eV. Панель (с) – псевдощелевое состояние с $\xi = 10a$ и W = 0.05eV.

допированному дырками и оптимально дырочно допированному случаю. Такие диаграммы, по существу, воспроизводят "ARPES" поверхности Ферми для системы 122 при различном уровне допирования. Фактически система всегда остается металлической – при любом допировании мы наблюдаем "открытую" поверхность Ферми, тем не менее мы также можем видеть достаточно сложную серию трансформаций поверхности Ферми, когда некоторые цилиндры оказываются почти "разрушены" (размыты) или AFM дальним порядком или флуктуациями AFM ближнего порядка. Из этих карт мы отождествляем последнюю в третьем ряду (4c) как более или менее соответствующую оптимально дырочно допированному случаю в достаточном согласии с ARPES данными, например, в [227, 229, 231, 44], а третью в этом ряду (3c) – как достаточно хорошо соответствующую дырочно недодопированному случаю, изучаемому, например, в [44]и демонстрирующую заметное размытие внутреннего дырочного цилиндра псевдощелевыми флуктуациями с характерным волновым вектором порядка вектора AFM **Q**. Заметная псевдощель формируется и в парциальной плотности состояний этого цилиндра в качественном согласии с [44]. Вообще говоря, доступные ARPES данные страдают достаточно плохим разрешением, так что псевдощелевые флуктуации достаточно тяжело наблюдаемы на всех цилиндрах поверхности Ферми и требуется большая работа для выявления достаточно сложной картины эволюции поверхности Ферми, проиллюстрированной на Рис. 123. Необходимо учитывать, что рисунки, показанные во втором ряду (b) Рис. 123 разумны только в части фазовой диаграммы с AFM дальним порядком, а третий ряд (c) применим в парамагнитной области, где и появляется при низких температурах сверхпроводимость.

Наши расчеты показывают, что псевдощель формируется только в (парциальных) плотностях состояний, соответствующих тем цилиндрам, где велико влияние флуктуаций AFM ближнего порядка, и она, в общем случае, не "привязана" к уровню Ферми. Псевдощель в полной плотности состояний всегда достаточно слабая и проблема ее выявления остается, хотя возможно этого достаточно для объяснения ряда заявок о псевдощелевом поведении, наблюдаемом в некоторых NMR экспериментах [42, 43].

6 ДРУГИЕ ТИПЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В СИЛЬ-НО КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ. ОБОБ-ЩЕННЫЙ DMFT $+\Sigma$ ПОДХОД.

Развитый в предыдущей главе для исследования псевдощели в сильно коррелированных системах обобщенный подход DMFT+Σ легко может быть обобщен на учет других видов дополнительных взаимодействий: фононов, примесей и т.д. Именно такому исследованию в рамках DMFT+Σ приближения и посвящена данная глава.

6.1 Переход Мотта-Хаббарда и андерсоновская локализация.

Важность учета электронного взаимодействия и неупорядоченности при исследовании конденсированного состояния хорошо известна [240]. Кулоновские корреляции и беспорядок являются двумя движущими силами, приводящими к переходам металл-диэлектрик, связанными с локализацией и делокализацией носителей заряда. В частности, переход Мотта-Хаббарда вызывается электронным отталкиванием [241], а андерсоновский переход металл-диэлектрик связан с примесным рассеянием не взаимодействующих частиц [242]. Как известно, тонкая конкуренция эффектов беспорядка и взаимодействия имеет много проявлений [240, 243] и наиболее полно эта проблема возникает в случае сильных электронных корреляций и сильного беспорядка, определяя физические механизмы перехода металл-диэлектрик Мотта-Андерсона [240].

Одной из основных моделей, позволяющих учесть как электронные корреляции, приводящие к моттовскому переходу металл-диэлектрик [241], так и эффекты сильного беспорядка, приводящие к андерсоновскому переходу металл-диэлектрик, является модель Андерсона-Хаббарда, интенсивно исследуемая в последнее время [244, 245, 246, 247, 248, 249, 250].

В работах [244, 245, 246] трехмерная модель Андерсона-Хаббарда рассматривалась в рамках теории динамического среднего поля (DMFT) [146, 147, 156, 149]. В таком подходе влияние локального беспорядка обычно учитывается с помощью усредненной плотности состояний (DOS)[251]. В отсутствие взаимодействия такой подход соответствует хорошо известному приближению когерентного потенциала [252] и не описывает физики локализации Андерсона. Для преодоления этой проблемы Добросавлевич и Котляр [244] предложили вариант DMFT, где из решения самосогласованных стохастических уравнений DMFT рассчитывалась геометрически усредненная локальная плотность состояний. Этот подход был развит в работах [245, 246] путем включения хаббардовских корреляций через DMFT, что приводит к весьма нетривиальной фазовой диаграмме трехмерной парамагнитной модели Андерсона-Хаббарда [246] с фазами: коррелированного металла, моттовского изолятора и коррелированного андерсоновского изолятора. Главная проблема подхода, используемого в работах [244, 245, 246] — невозможность напрямую считать измеряемые физические свойства, такие как проводимость, которая собственно и определяет переход металл-диэлектрик.

В тоже время, существует хорошо развитый подход самосогласованной теории андерсоновской локализации, базирующийся на решении уравнений для обобщенного коэффициента диффузии. Эффективность этого подхода в отсутствие взаимодействия известна достаточно давно [25, 55, 69, 253, 254, 255] предпринимались и некоторые попытки включить эффекты взаимодействия в рамках такого подхода с достаточно обещающими результатами [254, 256]. Однако, не было попыток включить этот подход в современную теорию сильно коррелированных электронных систем. Впервые такое исследование было проведено нами в работе [247]для трехмерных систем и развито на двумерные в работе [257].

Здесь мы, следуя этим работам, также проведем такое исследование, изучая и мотт-хаббардовский и андерсоновский переход металл-диэлектрик путем прямых вычислений и усредненной плотности состояний и оптической проводимости.

Наш подход основан на рассмотренном в предыдущей главе обобщенном приближении DMFT+ Σ [66, 67, 68, 71], которое, с одной стороны, сохраняет однопримесное описание DMFT, с характерным учетом локальных хаббардовских корреляций и с возможностью использования "impurity solvers" типа NRG[153, 154, 258], с другой стороны позволяет включить дополнительные (как локальные, так и нелокальные) взаимодействия (флуктуации) в непертурбативный базис модели.

В рамках такого подхода мы в предыдущей главе исследовали одно и двухчастичные свойства двумерной модели Хаббарда концентрируясь на проблеме формирования псевдощели в плотности состояний квазичастичной зоны в коррелированных металлах и допированных моттовских диэлектриках в применении к описанию сверхпроводящих купратов. Нами анализировалась эволюция нефермижидкостного поведения спектральной плотности и ARPES спектров [67], "разрушение" поверхности Ферми и формирование Ферми дуг [66], а также псевдощелевые аномалии в оптической проводимости [71]. Кратко нами рассматривались и эффекты рассеяния на примесях [68].

В этом разделе мы применим наш DMFT+Σ подход для расчета плотности состояний, оптической проводимости, радиуса локализации и фазовой диаграммы сильно коррелированной и сильно неупорядоченной парамагнитной модели Андерсона– Хаббарда. Сильные корреляции учтем посредством DMFT, а сильный беспорядок путем подходящего обобщения самосогласованной теории локализации. Дальнейшее рассмотрение в этом разделе в основном следует работам [247, 257].

6.1.1 Основы DMFT+ Σ подхода

Будем рассматривать немагнитную неупорядоченную модель Андерсона-Хаббарда при половинном заполнении (в основном) для произвольной силы взаимодействия и беспорядка. Такая модель на равных правах включает и мотт-хаббардовский и андерсоновский переходы металл-диэлектрик. Гамильтониан рассматриваемой модели имеет вид:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} a^{\dagger}_{i\sigma} a_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} \epsilon_i n_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \qquad (363)$$

где t > 0 – амплитуда перескока между ближайшими соседями, U – отталкивание на узле, $n_{i\sigma} = a^{\dagger}_{i\sigma}a_{i\sigma}$ – оператор числа электронов на узле, $a_{i\sigma}$ $(a^{\dagger}_{i\sigma})$ – оператор уничтожения (рождения) электрона со спином σ , локальные энергии ϵ_i полагаются независимыми случайными величинами на разных узлах решетки. Для упрощения диаграммной техники, в дальнейшем мы предполагаем для ϵ_i распределение Гаусса:

$$\mathcal{P}(\epsilon_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta}} \exp\left(-\frac{\epsilon_i^2}{2\Delta^2}\right) \tag{364}$$

Параметр Δ здесь служит мерой силы беспорядка и гауссовское случайное поле ("белый" шум) энергетических уровней ϵ_i на различных узлах решетки вызывает "примесное" рассеяние, приводя к стандартной диаграммной технике для вычисления усредненных функций Грина [55].

 $DMDF+\Sigma$ подход, изначально предложенный [66, 67, 68] как простой метод для включения нелокальных флуктуаций в стандартную схему DMFT, оказался очень удобен для аналогичного включения дополнительного взаимодействия (локального или нелокального) любой природы. Работая при конечной температуре T запишем мацубаровскую одночастичную функцию Грина в следующем виде:

$$G(i\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{i\varepsilon + \mu - \epsilon(\mathbf{p}) - \Sigma(i\varepsilon) - \Sigma_{\mathbf{p}}(i\varepsilon)}, \qquad \varepsilon = \pi T(2n+1), \tag{365}$$

где $\varepsilon(\mathbf{p})$ – спектр "свободного" электрона, μ – химический потенциал, определяющийся электронной концентрацией $\Sigma(\varepsilon)$ – локальная собственно-энергетическая часть (СЭЧ) DMFT типа, возникающая от хаббардовского взаимодействия, $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)$ – некоторая "внешняя" (в общем случае зависящая от импульса) собственно-энергетическая часть. Этот последний вклад может происходить от взаимодействия электронов с некоторыми "дополнительными" коллективными модами или флуктуациями параметра порядка, возникающими в рамках самой модели Хаббарда, но может быть вызван и любыми другими взаимодействиями (флуктуациями) внешними по отношению к стандартной модели Хаббарда, например, фононами или рассеянием на примесях, когда он тоже является фактически локальным (не зависящим от импульса). Этот последний вид взаимодействия и будет интересовать нас сейчас. Основным приближением в таком подходе является пренебрежение любыми процессами интерференции локального хаббардовского взаимодействия и "внешнего" добавочного рассеяния (приближение непересекающихся диаграмм) [67], как показано на диаграммах Рис.172 приложения Н. Одночастичные характеристики системы (одночастичная функция Грина и СЭ-Чи) в приближении DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ определяются из самосогласованной расчетной схемы (302–307), рассмотренной в предыдущей Главе. В итоге, мы получаем желаемую функцию Грина в виде (365), где $\Sigma(i\varepsilon)$ и $\Sigma_{\mathbf{p}}(i\varepsilon)$ — собственно-энергетические части, получаемые в конце нашей итерационной процедуры.

Для $\Sigma_{\mathbf{p}}(i\varepsilon)$, возникающей вследствие рассеяния на беспорядке, мы будем использовать простой однопетлевой вклад, приведенный на третьей диаграмме Рис.172 (a), пренебрегающий "перекрестными" диаграммами, т.е. самосогласованное борновское приближение[55], которое в случае гауссовского беспорядка (364) приводит к обычному выражению:

$$\Sigma_{\mathbf{p}}(i\varepsilon) = \Delta^2 \sum_{\mathbf{p}} G(i\varepsilon, \mathbf{p}) \equiv \Sigma_{imp}(i\varepsilon)$$
(366)

и "внешняя" СЭЧ также оказывается р-независимой (локальной).

6.1.2 Оптическая проводимость в $DMFT+\Sigma$ подходе.

Основные выражения для оптической проводимости.

Очевидно, что вычисление оптической проводимости наиболее прямой путь для исследования переходов металл-диэлектрик, частотная зависимость проводимости вместе с ее статической величиной при нулевой частоте внешнего поля позволяет ясно различать металлическую и диэлектрическую фазы (при T = 0).

Локальный характер неприводимой вершины в DMFT, как мы видели в предыдущей главе, позволяет свести задачу определения оптической проводимости к проблеме нахождения двухчастичной функции Грина без учета DMFT вершинных поправок от локального кулоновского взаимодействия [71, 247]. Окончательное выражение для действительной части оптической проводимости, полученное в таком подходе в работах [71, 247] и разделе 5.4 предыдущей главы, имеет вид:

$$\operatorname{Re}\sigma(\omega) = \frac{e^{2}\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left[f(\varepsilon_{-}) - f(\varepsilon_{+})\right] \operatorname{Re}\left\{\phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega) \left[1 - \frac{\Sigma^{R}(\varepsilon_{+}) - \Sigma^{A}(\varepsilon_{-})}{\omega}\right]^{2} - \phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega) \left[1 - \frac{\Sigma^{R}(\varepsilon_{+}) - \Sigma^{R}(\varepsilon_{-})}{\omega}\right]^{2}\right\}, \quad (367)$$

где $f(\varepsilon)$ – распределение Ферми, $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon \pm \frac{\omega}{2}$ и

$$\phi_{\varepsilon}^{0RR(RA)}(\omega) = \lim_{q \to 0} \frac{\Phi_{\varepsilon}^{0RR(RA)}(\omega, \mathbf{q}) - \Phi_{\varepsilon}^{0RR(RA)}(\omega, 0)}{q^2},$$
(368)

где введены двухчастичные функции Грина:

$$\Phi_{\varepsilon}^{0RR(RA)}(\omega, \mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{p}} G^{R}(\varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+}) G^{R(A)}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-}) \Gamma^{RR(RA)}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-}; \varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+}),$$
(369)

диаграммное представление для которых приведено на Рис. 102 и $\mathbf{p}_{\pm} = \mathbf{p} \pm \frac{\mathbf{q}}{2}$. Здесь функцииГрина $G^{R}(\varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+})$ и $G^{A}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-})$ определены аналитическим продолжением ($i\varepsilon \rightarrow \varepsilon \pm i\delta$) маубаровских гриновских функций (365) определенных нашим DMFT+ Σ алгоритмом (302)–(307), (366), а вершины $\Gamma^{RR(RA)}(\varepsilon_{-}, \mathbf{p}_{-}; \varepsilon_{+}, \mathbf{p}_{+})$ содержат все вершинные поправки от примесного рассеяния, но не включают вершинных поправок от хаббардовского взаимодействия.

Таким образом, достигается существенное упрощение нашей задачи. Для расчета оптической проводимости в DMFT+Σ приближении мы должны решить только одночастичную задачу определения самосогласованной локальной собственно-энергетической части $\Sigma(\varepsilon_{\pm})$ с помощью DMFT+ Σ процедуры, описанной выше, а нетривиальный вклад от примесного рассеяния входит посредством $\phi^{0RR(RA)}$ из (368), которые могут быть рассчитаны в подходящем приближении. $\phi^{0RR(RA)}$ учитывают только рассеяние на беспорядке, но используют затравочную, "голую" функцию Грина, которая включает локальную DMFT собственно-энергетическую часть, уже найденную с помощью DMFT+ Σ процедуры. Фактически (367) обеспечивает также эффективный алгоритм для вычисления оптической проводимости в рамках стандартного DMFT (в отсутствие примесного рассеяния). Тогда (369) легко находится из простой петлевой диаграммы, определяемой двумя функциями Грина и свободными скалярными вершинами. Таким образом, для определения проводимости нет необходимости вычислять вершинные поправки в рамках самого DMFT, как это было впервые показано при рассмотрении петли с векторными вершинами [156, 149]. Уравнение (367) обеспечивает эффективную интерполяцию между случаем сильных корреляций в отсутствие беспорядка и случаем чистого беспорядка, в отсутствие хаббардовских

корреляций. В последующем мы увидим, что вычисления, основанные на выражении (367), дают разумную полную картину перехода металл-диэлектрик в модели Андерсона-Хаббарда.

Самосогласованные уравнения для обобщенного коэффициента диффузии и проводимости

Наиболее важный блок $\Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})$ может быть вычислен, используя основной подход самосогласованной теории локализации [25, 55, 69, 253, 254, 255] с некоторыми обобщениями, учитывающими роль хаббардовского взаимодействия с помощью DMFT+ Σ подхода [247, 257]. Основное отличие от стандартного подхода в том, что уравнения самосогласованной теории здесь выводятся, используя

$$G^{R,A}(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon + \mu - \epsilon(\mathbf{p}) - \Sigma^{R,A}(\varepsilon) - \Sigma^{R,A}_{imp}(\varepsilon)}$$
(370)

содержащие DMFT вклад $\Sigma^{R,A}(\varepsilon)$ в дополнение к примесному рассеянию, содержащемуся в:

$$\Sigma_{imp}^{R,A}(\varepsilon) = \Delta^2 \sum_{\mathbf{p}} G^{R,A}(\varepsilon, \mathbf{p}) = \operatorname{Re}\Sigma_{imp}(\varepsilon) \pm i\gamma(\varepsilon)$$
(371)

где $\gamma(\varepsilon) = \pi \Delta^2 N(\varepsilon)$ и $N(\varepsilon)$ – плотность состояний, перенормированная хаббардовским взаимодействием, учтенным через DMFT+ Σ приближение, и определяемая обычным выражением:

$$N(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{p}} \operatorname{Im} G^{R}(\varepsilon, \mathbf{p})$$
(372)

Следуя стандартному рассмотрению [25, 55, 69, 253, 254, 255], мы получаем диффузионоподобный (при малых ω и q) вклад в $\Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})$, имеющий вид:

$$\Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\mathbf{q},\tilde{\omega}) = \frac{2\pi i N(\varepsilon)}{\tilde{\omega} + i D(\omega)q^2}$$
(373)

где важное отличие от одночастичного случая заключено в:

$$\tilde{\omega} = \varepsilon_{+} - \varepsilon_{-} - \Sigma^{R}(\varepsilon_{+}) + \Sigma^{A}(\varepsilon_{-}) = \omega - \Sigma^{R}(\varepsilon_{+}) + \Sigma^{A}(\varepsilon_{-}) \equiv \omega - \Delta\Sigma^{RA}(\omega)$$
(374)

которая заменяет обычный ω член в знаменателе стандартного выражения для $\Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})$. Из общих соображений ясно, что в металлической фазе для $\omega \to 0$ мы имеем $\Delta \Sigma^{RA}(\omega =$ 0) = 2iIm $\Sigma(\varepsilon) \sim Max\{T^2, \varepsilon^2\}$, что отражает фермижидкостное поведение в DMFT (сохраняемое упругим примесным рассеянием). При конечных T это приводит к обычному нарушению когерентности фазы вследствие электрон – электронного рассеяния [240, 243]. Обобщенный коэффициент диффузии $D(\omega)$ будет определен решением основного самосогласованного уравнения, вводимого ниже.

Используя (373) в (368) мы легко получаем:

$$\phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega) = \frac{2\pi N(\varepsilon)D(\omega)}{\omega^2 \left(1 - \frac{\Delta \Sigma^{RA}(\omega)}{\omega}\right)^2}$$
(375)

Тогда используя (375) в (367), для $\omega \to 0$ и T = 0 мы получаем обычное соотношение Эйнштейна для статической проводимости

$$\sigma(0) = e^2 N(0) D(0) \tag{376}$$

Весь вклад от хаббардовского взаимодействия сводится к перенормировке плотности состояний на уровне Ферми, а также коэффициента диффузии D(0).

Тогда (367) принимает вид:

$$\operatorname{Re}\sigma(\omega) = \frac{e^2\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left[f(\varepsilon_{-}) - f(\varepsilon_{+}) \right] \operatorname{Re}\left\{ \frac{2\pi N(\varepsilon)D(\omega)}{\omega^2} - \phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega) \left[1 - \frac{\Delta\Sigma^{RR}(\omega)}{\omega} \right]_{(377)}^2 \right\},$$

где вторым членом в фигурных скобках при малых ω фактически можно пренебречь или в широком интервале частот точно рассчитывать из (347), взяв $\Phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega, \mathbf{q})$ даваемое обычным лестничным приближением (586).

Сейчас мы сформулируем наше основное самосогласованное уравнение, определяющее обобщенный коэффициент диффузии $D(\omega)$. Мы снова следуем основным шагам самосогласованной теории локализации (см. детали в Приложении К), учитывая вид нашей одночастичной функции Грина (370) и не ограничивая анализ пределом малых ω . Тогда можно записать обобщенный коэффициент диффузии в виде:

$$D(\omega) = \frac{\langle v \rangle^2}{d} \frac{i}{\tilde{\omega} + M(\omega)}$$
(378)

где *d* – размерность пространства и средняя скорость $\langle v \rangle$ определена в (581) Приложения K) (хорошим приближением для нее является скорость Ферми), а релаксационное ядро $M(\omega)$ удовлетворяет самосогласованному уравнению, которое аналогично полученному в работах [25, 55, 69, 253, 254, 255] при использовании "максимально перекрестных" диаграмм для примесной неприводимой вершины (но построено на гриновских функциях(370)):

$$M(\omega) = -\Delta \Sigma_{imp}^{RA}(\omega) + \Delta^4 \sum_{\mathbf{p}} (\Delta G_{\mathbf{p}})^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\tilde{\omega} + iD(\omega)q^2}$$
(379)

 \mathbf{c}

$$\Delta G_{\mathbf{p}} = G^R(\varepsilon_+, \mathbf{p}) - G^A(\varepsilon_-, \mathbf{p})$$
(380)

и $\Delta \Sigma_{imp}^{RA}(\omega) = \Sigma_{imp}^{R}(\varepsilon_{+}) - \Sigma_{imp}^{A}(\varepsilon_{-})$, связанного с примесным рассеянием. Необходимо еще раз подчеркнуть, что вкладов от вершинных поправок, определяемых локальным хаббардовским взаимодействием, в этом уравнении не содержится. Используя определение (378) уравнение (379) может быть переписано, как самосогласованное уравнение непосредственно для обобщенного коэффициента диффузии:

$$D(\omega) = i \frac{\langle v \rangle^2}{d} \left\{ \tilde{\omega} - \Delta \Sigma_{imp}^{RA}(\omega) + \Delta^4 \sum_{\mathbf{p}} (\Delta G_{\mathbf{p}})^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\tilde{\omega} + iD(\omega)q^2} \right\}^{-1}$$
(381)

которое и необходимо решать в совокупности с нашей DMFT+Σ процедурой (302– 307, 366).

Вследствие существующего предела применимости диффузионного приближения, суммирование по q в (381) должно быть ограничено [254, 55]:

$$q < k_0 = Min\{l^{-1}, p_F\}$$
(382)

где $l = \langle v \rangle /2\gamma(0)$ – упругая длина свободного пробега, $\gamma(0)$ – частота рассеяния на примесях, p_F – импульс Ферми. Как мы увидим в дальнейшем в нашей модели в двумерной системе андерсоновская локализация происходит при сколь угодно слабом беспорядке. Однако, при таком беспорядке радиус локализации экспоненциально велик, поэтому существенную роль начинают играть размеры образца. Размер образца L может быть введен в самосогласованную теорию локализации обрезанием диффузионного полюса при малых q [69, 253], т.е. при:

$$q \sim k_L = 1/L. \tag{383}$$
Уравнение (381) для обобщенного коэффициента диффузии фактически является трансцендентным и легко решается итерациями для каждого значения $\tilde{\omega}$. Решая (381) для различных значений параметров нашей модели и используя затем в (377) вместе с регулярным вкладом от (586), мы можем вычислить оптическую проводимость в различных фазах модели Андерсона-Хаббарда.

При $\omega \to 0$ (а на поверхности Ферми ($\varepsilon = 0$) очевидно и $\tilde{\omega} \to 0$) в фазе андерсоновского диэлектрика мы имеем локализационное поведение обобщенного коэффициента диффузии [69, 253, 55]:

$$D(\omega) = -i\tilde{\omega}R_{loc}^{2}.$$
(384)

При подстановке (384) в (381) получаем уравнение, определяющее радиус локализации R_{loc} :

$$R_{loc}^{2} = -\frac{\langle v \rangle^{2}}{d\Delta^{4}} \left\{ \sum_{\mathbf{p}} (\Delta G_{\mathbf{p}})^{2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{1 + R_{loc}^{2} q^{2}} \right\}^{-1}.$$
 (385)

где сумма по *q* определяется (583) и (584) для трехмерных и двумерных систем соответственно.

6.1.3 Трехмерные системы.

Сейчас мы представим результаты обширных численных расчетов для трехмерной модели Андерсона-Хаббарда на кубической решетке с модельной полуэллиптической плотностью состояний в "затравочной" зоне шириной B = 2D:

$$N_0(\varepsilon) = \frac{2}{\pi D^2} \sqrt{D^2 - \varepsilon^2} \tag{386}$$

Плотность состояний всегда приводится в единицах числа состояний на энергетический интервал, на элементарную ячейку объема a^3 (a – параметр решетки), на один спин. Некоторые, связанные с выбором модельной плотности состояний, технические детали даны в Приложении М.

Мы, в основном, сосредоточимся на случае половинного заполнения, хотя некоторые результаты для конечного допирования будут также представлены. Ферми уровень всегда расположен на нулевой энергии.



Рис. 124: Плотность состояний в модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ и U = 2.5D, типичным для коррелированного металла.

В качестве "impurity solver" для примесной задачи DMFT мы использовали надежный численно точный метод численной ренормализационной группы (NRG) [153, 154, 258]. Расчеты проводились для достаточно малой температуры $T \sim 0.001D$, при которой температурные эффекты в плотности состояний и проводимости пренебрежимы. Параметр дискретизации NRG всегда выбирался $\Lambda=2$, число нижних энергетических состояний – 1000, обрезание вокруг энергии Ферми !)⁻⁶, уширяющий параметр b=0.6.

Ниже мы представим только часть наиболее типичных результатов.

Эволюция плотности состояний

В рамках стандартного DMFT подхода плотность состояний в модели Хаббарда с половинным заполнением имеет типичную трехпиковую структуру [156, 149, 258]: узкая квазичастичная зона (центральный пик), располагающаяся на уровне Ферми и широкие верхняя и нижняя хаббардовские зоны, формирующиеся на $\varepsilon \sim \pm U/2$. Квазичастичная зона сужается с ростом U в металлической фазе, исчезая в точке мотт-хаббардовского перехода металл-диэлектрик при критическом $U_{c2} \approx 1.5B$. При дальнейшем увеличении U на уровне Ферми открывается диэлектрическая щель.

На Рис. 124 представлены наши DMFT+ Σ результаты для плотности состояний



Рис. 125: Плотность состояний в модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ и U = 4.5D, типичным для моттовского диэлектрика.

(DOS), полученные при U = 2.5D = 1.25B типичного для коррелированного металла в отсутствие беспорядка, для различных значений беспорядка Δ , включая достаточно сильный, переводящий коррелированный металл в коррелированный андерсоновский диэлектрик (см следующий параграф, посвященный проводимости). Как и можно было ожидать наблюдается типичное уширение и подавление плотности состояний беспорядком.

Более неожиданным оказался результат, полученный в для величины U = 4.5D = 2.25B типичной для моттовского диэлектрика в отсутствие беспорядка и показанный на Рис. 125. Мы видим восстановление центрального пика (квазичастичной зоны) в DOS с ростом беспорядка, что переводит моттовский диэлектрик в коррелированный металл или коррелированный андерсоновский изолятор. Подобное поведение DOS было недавно получено в работе [246]. Однако, в наших вычислениях присутствие отдельных хаббардовских зон наблюдается даже при достаточно большой величине беспорядка, в отличие от наблюдаемого исчезновения хаббардовской структуры в DOS в работе [246]. Возможно это связано с нашим очень простым способом учета беспорядка для получения DOS, хотя это отличие может быть связано и с другой моделью беспорядка, используемой в [246], т.е. плоское распределение ϵ_i в (363) вме-



Рис. 126: Восстановление беспорядком квазичастичной зоны в области сосуществования (гистерезиса) при U = 2.5D, полученное уменьшением U из фазы моттовского диэлектрика.

сто нашего гауссова (364). Несущественный для физики андерсоновского перехода тип беспорядка может быть важен для поведения DOS.

В отсутствие беспорядка, хорошо известно гистерезисное поведение DOS, получаемое для перехода Мотта–Хаббарда если проводить DMFT вычисления с U, уменьшающимся из диэлектрической фазы [149, 258]. Фаза моттовского диэлектрика сохраняется для величин U достаточно далеко внутри фазы коррелированного металла, получаемой с увеличением U. Металлическая фаза восстанавливается только при $U_{c1} \approx 1.0B$. Интервал $U_{c1} < U < U_{c2}$ обычно рассматривают как область сосуществования металлической и моттовской диэлектрической фазы, где металлическая фаза является термодинамически более стабильной [149, 258, 259].

На Рис. 126 представлены результаты для DOS с различной степенью беспорядка и той же величиной U = 2.5D = 1.25B, как на Рис. 124, но для области гистерезиса, полученные уменьшением U из фазы моттовского диэлектрика. Снова мы наблюдаем восстановление центрального пика (квазичастичной зоны) в DOS при разупорядочении. Отметим также специфическую форму DOS в окрестности уровня Ферми в течении этого перехода – узкая энергетическая щель сохраняется пока не закроется беспорядком и центральный пик формируется из двух симметричных максимумов в DOS, объединяющихся в квазичастичную зону. Это напоминает аналогичное поведение, наблюдаемое в периодической модели Андерсона [149]. По-видимому этот эффект оказался незамеченным в предшествующих расчетах DOS в области сосуществования [258] (в отсутствие беспорядка), в то время как в нашем случае он был получен в основном вследствие использования нами достаточно густой сетки величин беспорядка Δ.

Физическая причина для такого, достаточно неожиданного, восстановления квазичастичного пика вполне ясна. Контролирующим параметром перехода металлдиэлектрик в DMFT является отношение хаббардовского взаимодействия U и ширины затравочной зоны B = 2D. При разупорядочении мы получаем новую эффективную ширину зоны B_{eff} (в отсутствие хаббардовского взаимодействия), которая растет с беспорядком, в то время как полуэллиптическая форма DOS с хорошо определенными границами зоны сохраняется в самосогласованном борновском приближении (366). Это приводит к уменьшению отношения U/B_{eff} , что и вызывает восстановление квазичастичной зоны в нашей модели. Более детально, такой качественный подход будет проанализирован в параграфе, где наши расчеты плотности состояний в широком интервале параметров будут использованы для изучения фазовой диаграммы модели Андерсона-Хаббарда.

Оптическая проводимость: переходы Мотт-Хаббарда и Андерсона

Действительная часть оптической проводимости вычислялась для различных комбинаций параметров нашей модели непосредственно из выражений (377), (381), (586) и (381), используя результат DMFT+ Σ процедуры (302 – 307, 366) для одночастичных характеристик. Величины проводимости ниже даются в естественных единицах $e^2/\hbar a$ (a – параметр решетки).

В отсутствие беспорядка мы воспроизводим результаты стандартной DMFT [156, 149] с оптической проводимостью, характеризующейся обычным друдевским пиком, лежащим на нулевой частоте, и широким максимумом при $\omega \sim U$, соответствующим переходам в верхнюю хаббардовскую зону. С ростом U друдевский пик уменьшает-



Рис. 127: Действительная часть оптической проводимости в модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ и U = 2.5D, типичным для коррелированного металла. Кривые 1,2 – металлическая фаза, кривая 3 соответствует порогу подвижности (переход Андерсона), кривые 4,5 соответствуют коррелированному андерсоновскому диэлектрику.

ся и исчезает при моттовском переходе, когда остается только вклад от переходов через мотт-хаббардовскую щель. Введение беспорядка приводит к качественному изменению частотной зависимости проводимости. Ниже мы в основном покажем результаты, полученные для тех же значений U и Δ , какие использовались выше для иллюстрации эволюции плотности состояний.

На Рис.127 мы приводим действительную часть оптической проводимости в модели Андерсона-Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ и U = 2.5D, типичного для коррелированного металла. Переходы в верхнюю Хаббардовскую зону при $\omega \sim U$ практически не наблюдаемы в этих данных. Однако, ясно видно, что металлический друдевский пик, обычно лежащий на нулевой частоте, уширяется и подавляется беспорядком, постепенно трансформируясь в пик при конечной частоте вследствие эффектов андерсоновской локализации. Переход Андерсона происходит при $\Delta_c \approx 0.74D = 0.37B$ (что соответствует кривой 3 на всех наших графиках, в том числе и для DOS). Отметим, что эта величина зависит от величины обрезания (382), которая определена с точностью до коэффициента порядка единицы [254, 55]. Наивные ожидания могут приводить к заключению, что узкая квазичастичная зона на уровне Ферми, формирующаяся в сильно коррелированном металле, может быть локализована значительно легче, чем обычная зона проводимости. Однако, мы видим, что эти ожидания ошибочны и эта зона локализуется только при достаточно сильном беспорядке $\Delta_c \sim D$, таком же как всей зоны проводимости с шириной $\sim B$. Это согласуется с предшествующим анализом локализации в двухзонной модели [260].

Более важным является тот факт, что в DMFT+ Σ приближении величина критического беспорядка Δ_c не зависит от U поскольку все эффекты взаимодействия входят в уравнение Eq. (381) только через $\Delta \Sigma^{RA}(\omega) \rightarrow 0$ при $\omega \rightarrow 0$ (для T = 0), поэтому влияние взаимодействия при $\omega = 0$ припадает. Это, фактически, основной недостаток нашего приближения, являющийся следствием пренебрежения эффектами интерференции между взаимодействием и примесным рассеянием. Существенная роль таких интерференционных эффектов известна достаточно давно [240, 243]. Однако, пренебрегая этими эффектами, нам удается провести физически разумную интерполяцию между двумя основными пределами – чистый переход Андерсона за счет беспорядка и переход Мотта–Хаббарда вследствие сильных корреляций. Таким образом, мы рассматриваем наше приближение, как разумный первый шаг к будущей полной теории перехода металл-диэлектрик в сильно коррелированных неупорядоченных системах.

На Рис. 128 приведена действительная часть оптической проводимости при различных степенях беспорядка Δ и U = 4.5D, типичного для мотт-хаббардовского диэлектрика. На вставке показаны данные для малых частот, которые позволяют ясно разделять различные типы поведения проводимости, особенно вблизи перехода Андерсона или в фазе моттовского диэлектрика. На основной части рисунка ясно видно вклад в проводимость от переходов в верхнюю хаббардовскую зону при $\omega \sim U$. Мы наблюдаем, что рост беспорядка приводит к конечной проводимости в области частот мотт-хаббардовской щели, что коррелирует с возникновением квазичастичной зоны в DOS внутри этой щели, как показано на Рис. 125. Эта проводимость



Рис. 128: Действительная часть оптической проводимости в модели Андерсона-Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ и U = 4.5D, типичным для моттовского диэлектрика. Кривые 1,2 соответствуют моттовскому диэлектрику кривая 3 соответствует порогу подвижности (переход Андерсона), кривые 4,5 – коррелированному андерсоновскому диэлектрику. Вставка – увеличенная область малых частот.

является металлической (конечной в статическом пределе $\omega = 0$) для $\Delta < \Delta_c$, а при $\Delta > \Delta_c$ на малых частотах мы получаем $\operatorname{Re}\sigma(\omega) \sim \omega^2$, что является типичным для андерсоновского диэлектрика [25, 55, 69, 253, 254, 255]. Следует заметить, что вследствие конечной внутренней точности NRG расчетов, всегда возникает малый, но конечный, фиктивный вклад [258]в $\operatorname{Im}\Sigma^{R,A}(\varepsilon = 0)$, формально растущий с ростом U. Этот вклад несущественен в расчетах проводимости в металлическом состоянии. Однако, в андерсоновском диэлектрике этот фиктивный член входит через $\tilde{\omega}$ в уравнение (381) и приводит к нефизическим эффектам разфазировки (сбоя фазы) при $\omega = 0$ (T = 0), что порождает малую конечную статическую проводимость. Для исключения этих фиктивных эффектов мы делали подходящее вычитание в наших данных для $\operatorname{Im}\Sigma^{R,A}(\varepsilon)$, обеспечивая их обращение в ноль при $\varepsilon = 0$.

Несколько необычным является возникновение в $\text{Re}\sigma(\omega)$ пика на малой, но конечной, частоте даже в металлической фазе. Это происходит вследствие важности слабых локализационных эффектов, как можно ясно видеть из Рис. 129, где мы сравниваем действительную часть оптической проводимости для разных степеней беспорядка и U = 1.5D, полученную путем нашего самосогласованного подхода (учи-



Рис. 129: Действительная часть оптической проводимости в модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ и U = 1.5D, в сравнении результатов самосогласованной теории локализации (сплошные кривые) с "лестничным" приближением (точечные линии).

тывающего локализационные эффекты через "максимально перекрестные" диаграммы), с полученной используя "лестничное" приближение для $\Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})$ (аналогично (586)), которое пренебрегает всеми локализационными эффектами. Видим, что в этом простом приближении мы получаем обычный друдевский пик при $\omega = 0$, а учет эффектов локализации смещает пик в $\text{Re}\sigma(\omega)$ на малые (конечные) частоты. Металлическое состояние определяется [241] конечностью величины статической ($\omega = 0$) проводимости при нулевой температуре.

Выше мы представляли только данные по проводимости, полученные при увеличении U от металлической до моттовкой диэлектрической фазы. При уменьшении U из фазы моттовского диэлектрика наблюдается гистерезис проводимости в области сосуществования, определяемой (в отсутствие беспорядка) условием $U_{c1} < U < U_{c2}$. На Рис. 130 мы представляем типичные данные для реальной части оптической проводимости при различных степенях беспорядка Δ и U = 2.5D, полученные при уменьшении U из фазы моттовского диэлектрика (аналогичные данные, но полученными ростом U из металла, были приведены на Рис. 127). Переход в металлическое состояние происходит путем закрытия узкой щели, лежащей внутри значительно бо-



Рис. 130: Действительная часть оптической проводимости в модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ и U = 2.5D, полученная уменьшением U из фазы моттовского диэлектрика.

лее широкой мотт-хаббардовской шели, что с очевидностью полностью коррелирует с данными по плотности состояний, показанными на Рис. 126.

Фазовая диаграмма модели Андерсона-Хаббарда с половинным заполнением

Фазовая диаграмма модели Андерсона-Хаббарда с половинным заполнением изучалась в работе [246], используя подход, базирующийся на прямых DMFT вычислениях для сетки узлов со случайными реализациями энергий ϵ_i в (363) с последующим усреднением, для получения стандартной усредненной DOS, а также геометрически усредненной локальной DOS, которая использовалась для определения перехода в фазу андерсоновского диэлектрика. Сейчас мы представим результаты для фазовой диаграммы парамагнитной модели Андерсона-Хаббарда с половинным заполнением, полученные из общирных расчетов плотности состояний и оптической проводимости в DMFT+Σ приближении. Необходимо отметить, что анализ проводимости есть наиболее прямой способ различия металлической и диэлектрической фаз [241].

Наша фазовая диаграмма в плоскости беспорядок – корреляции (Δ, U) приведена на Рис.131. Линия перехода Андерсона $\Delta_c \approx 0.37B = 0.74D$ определялась, как



Рис. 131: Фазовая диаграмма парамагнитной модели Андерсона-Хаббарда при нулевой температуре. Границы фазы моттовского диэлектрика $U_{c1,c2}(\Delta)$ получены из выражения (389), различными символами показаны точки этих границ, полученные из поведения DOS или проводимости. Точечная кривая определяет границу области сосуществования, полученную уменьшением U из фазы моттовского диэлектрика. Линия перехода Андерсона определяется сосчитанной величиной $\Delta_c = 0.37$.

величина беспорядка для которого статическая проводимость обращается в ноль при T = 0. Переход Мотта–Хаббарда может быть определен по исчезновению центрального пика (квазичастичной зоны) в DOS или по проводимости, например, наблюдая закрытие щели в оптической проводимости в диэлектрической фазе, или по исчезновению статической проводимости в металлической. Использовались все эти методы и соответствующие результаты показаны для сравнения на Рис. 131.

Мы уже отмечали, DMFT+ Σ приближение дает универсальную (U-независимую) величину критического беспорядка Δ_c вследствие пренебрежения интерференцией между рассеянием на беспорядке и хаббардовским взаимодействием, что приводит к основному упрощению нашей фазовой диаграммы по сравнению с полученной в работе [246]. Отметим, что прямое сравнение нашей величины критического беспорядка с аналогичным в [246] осложнено различием типа распределений для случайных энергий на узлах, используемых нами (Гауссиан) и в работе [246] (прямоугольное распределение). Согласно простейшим оценкам (см. вторую сноску в [261]) нашу гауссовскую величину Δ_c необходимо умножить на $\sqrt{12}$ для получения величины критического беспорядка для прямоугольного распределения. Это дает $\Delta_c \approx 1.28B$ в достаточно хорошем согласии с величиной $\Delta_c(U=0) \approx 1.35B$ из работы [246], что дополнительно оправдывает наш выбор обрезания (382).

Влияние рассеяния на беспорядке на переход Мотта–Хаббарда весьма нетривиально и качественно совпадает с результатами [246]. Основное отличие состоит в сохранении в нашем приближении хаббардовских зон в DOS даже в пределе достаточно сильного беспорядка, в то время как в работе [246] они пропадают. Кроме того мы получаем область сосуществования плавно расширяющуюся с ростом беспорядка и не исчезающую в некоторой "критической" точке, как в [246]. Границы нашей области сосуществования, которые фактически определяются границами фазы моттовского диэлектрика, получаемыми с ростом или уменьшением U, определяются кривыми $U_{c1}(\Delta)$ и $U_{c2}(\Delta)$, показанными на Рис. 131, которые получаются из простых уравнений:

$$\frac{U_{c1,c2}(\Delta)}{B_{eff}} = \frac{U_{c1,c2}}{B}$$
(387)

с эффективной шириной зоны в присутствии беспорядка, вычисленной для U = 0 в самосогласованном борновском приближении (366):

$$B_{eff} = B\sqrt{1 + 16\frac{\Delta^2}{B^2}} \tag{388}$$

Таким образом, границы области сосуществования, определяющие и границы фазы моттовского диэлектрика, имеют вид:

$$U_{c1,c2}(\Delta) = U_{c1,c2}\sqrt{1 + 16\frac{\Delta^2}{B^2}}$$
(389)

и показаны на Рис. 131 точечной и сплошной линиями. Точки, определяемые из условия исчезновения квазичастичного пика, а также точки, следующие из качественных изменений в поведении проводимости, показаны на Рис. 131 различными символами, и демонстрируют очень хорошее согласие с этими линиями, подтверждая выбор отношения (387), как параметра, контролирующего переход Мотта в присутствии беспорядка



Рис. 132: Зависимость статической проводимости от беспорядка, полученная для нескольких нескольких значений U и демонстрирующая вызываемый беспорядком переход моттовский диэлектрик – металл. На вставке – зависимость статической проводимости от Uдля различных степеней беспорядка, включая типичное гистерезисное поведение (пунктир), полученное уменьшением U из фазы моттовского диэлектрика.

Наиболее удивительным результатом нашего анализа (также качественно продемонстрированный в [246]) является возможность восстановления металлического состояния из диэлектрика Мотта–Хаббарда с ростом беспорядка. Это ясно из фазовой диаграммы и наглядно демонстрируют наши результаты для статической проводимости, показанные на Рис. 132 для различных значений $U > U_{c2}$ и величин беспорядка $\Delta < \Delta_c$. На вставке Рис. $\Delta < \Delta_c$ мы также иллюстрируем гистерезис статической проводимости, наблюдающийся в области сосуществования фазовой диаграммы, и получаемый с уменьшением U из фазы моттовского диэлектрика.

Допированный моттовский диэлектрик

Все результаты, представленные выше, получены для случая половинного заполнений. Сейчас мы кратко рассмотрим отклонение от половинного заполнения. В металлической фазе, допирование не ведет качественным изменениям в поведении проводимости, которое только демонстрирует переход Андерсона с ростом беспорядка. Поэтому мы сосредоточимся только на случае допированного моттовского изолятора. Строго говоря, при отклонении от половинного заполнения мы никогда не получим



Рис. 133: Плотность состояний в модели Андерсона–Хаббарда с электронной концентрацией n = 0.8 для различных степеней беспорядка Δ и U = 6.0D, соответствующая допированному моттовскому диэлектрику.



Рис. 134: Действительная часть оптической проводимости в модели Андерсона–Хаббарда с электронной концентрацией n = 0.8 для различных степеней беспорядка Δ и U = 6.0D, соответствующая допированному моттовскому диэлектрику. Вставка – высокочастотное поведение, демонстрирующее переходы в верхнюю хаббардовскую зону.

мотт-хаббардовский диэлектрик в рамках DMFT. На Рис. 133 показана плотность состояний в модели Андерсона–Хаббарда с электронной концентрацией n = 0.8 для различных степеней беспорядка Δ и U = 6.0D, что соответствует типичному случаю допированного моттовского диэлектрика. Квазичастичная зона перекрывается здесь с нижней хаббардовской зоной и размазывается беспорядком, как можно было бы ожидать в металлическом состоянии. Ничего существенного не происходит и с проводимостью, которая при тех же параметрах показана на Рис. 134. Она демонстрирует типичное поведение, связанное с вызываемым беспорядком андерсоновским переходом металл-диэлектрик. Весьма слабый вклад от переходов в верхнюю хаббардовскую зону можно наблюдать при $\omega \sim U$ (см. вставку Рис. 134). Таким образом, допированный моттовский диэлектрик с беспорядком качественно вполне похож на случай неупорядоченного коррелированного металла, обсуждавшийся выше.

6.1.4 Двумерные системы.

Согласно скэйлинговой теории локализации [262] не существует металлического состояния в двумерных системах, они локализованы при сколь угодно слабом беспорядке. Несмотря на то, что данное предсказание было сделано для 2D систем невзаимодействующих частиц, вскоре было показано, что слабое взаимодействие между электронами скорее лишь усиливает локализацию [263]. Эксперименты, проведенные в начале 80-х на различных двумерных системах [264], подтверждали это предсказание. Однако, появлялись и теоретические работы [243], указывающие, что общепринятая точка зрения неверна и в пределе слабого беспорядка и достаточно сильного взаимодействия 2D системы имеют конечную ненулевую проводимость при нулевой температуре. Экспериментальное получение перехода металл-диэлектрик (MIT) в двумерных слабонеупорядоченных системах с низкой концентрацией носителей тока [265], отсутствующего в одночастичной теории локализации Андерсона, породило целый ряд теоретических исследований (обзор в [266]).

В работе [249] модель Андерсона-Хаббарда исследовалась как для трехмерных, так и для двумерных систем. В качестве главного эффекта, приводящего к делокализации, рассматривалась "экранировка" случайного потенциала локальным кулоновским взаимодействием [248]. Модель Андерсона-Хаббарда сводилась к эффективной одночастичной модели Андерсона, с перенормированным эффективным распределением энергии локального уровня, которое рассчитывалось в атомном пределе. Все прочие эффекты электронных корреляций фактически отбрасывались. Сильный беспорядок учитывался в рамках самосогласованной теории локализации. В таком подходе удается получить заметное возрастание радиуса локализации с ростом локального хаббардовского взаимодействия в двумерных системах. Однако, даже в таком подходе радиус локализации продолжает оставаться конечным, система локализована при сколь угодно слабом беспорядке и андерсоновский переход металл-диэлектрик для двумерной системы отсутствует. Аналогичный результат имел место и при более прямом численном моделировании двумерной модели Андерсона-Хаббарда [250].

В нашем DMFT+ Σ приближении, как мы сейчас увидим, для бесконечной двумерной системы $(L \to \infty)$ радиус локализации, определяемый (385), остается конечным (хотя и экспоненциально большим) для сколь угодно слабого беспорядка, что говорит об отсутствии перехода Андерсона в такой системе. Однако, в системах конечного размера радиус локализации расходится при некотором критическом беспорядке, определяемом характерным размером L. Качественно критический беспорядок определяется условием, что радиус локализации бесконечной системы становится сравним с характерным размером образца $R_{loc}^{L\to\infty} \sim L$. Таким образом, в конечных двумерных системах существует переход Андерсона и металлическая фаза, для беспорядка ниже критического. В дальнейшем, под фазой "коррелированного металла" мы будем подразумевать именно такую фазу для конечных двумерных систем.

Сейчас мы представим результаты обширных численных расчетов для двумерной модели Андерсона-Хаббарда на квадратной решетке с модельной прямоугольной (плоской) плотностью состояний в "затравочной" зоне шириной B = 2D:

$$N_0(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2D} & |\varepsilon| \le D\\ 0 & |\varepsilon| > D \end{cases}.$$
(390)



Рис. 135: Плотность состояния в модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением для различных значений U и $\Delta = 0$.

Выбор такой модельной плотности состояний определяется ее двумерным характером (константа) вблизи краев зоны.

Плотность состояний всегда приводится в единицах числа состояний на энергетический интервал, на элементарную ячейку объема a^2 (a – параметр решетки), на один спин, а проводимость – в единицах универсальной двумерной проводимости e^2/\hbar .

Мы сосредоточимся на случае половинного заполнения. Ферми уровень всегда расположен на нулевой энергии.

В качестве "impurity solver" для примесной задачи DMFT мы использовали надежный численно точный метод численной ренормализационной группы (NRG) [153, 154, 258]. Расчеты проводились для достаточно малой температуры $T \sim 0.001D$, при которой температурные эффекты в плотности состояний и проводимости пренебрежимы.

Ниже мы представим только часть наиболее типичных результатов.

Эволюция плотности состояний

На Рис.135 приведена эволюция плотности состояний в отсутствие беспорядка с ростом хаббардовского взаимодействия U. При малом U (кривая 1 на Рис.135) имеем



Рис. 136: Плотность состояния в модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ и U/2D = 1.25, типичным для коррелированного металла в отсутствие беспорядка.

практически прямоугольную "затравочную" плотность состояний. С увеличением Uв плотности состояния наблюдается типичная трехпиковая структура [156, 149, 258] (кривые 3,4,5 на Рис.135): узкий квазичастичный пик на уровне Ферми с верхней и нижней хаббардовскими зонами при $\varepsilon \sim \pm U/2$. Квазичастичный пик сужается с увеличением U в металлической фазе, исчезая в точке моттовского перехода металлдиэлектрик при $U = U_{c2} \approx 1.83B$. При дальнейшем увеличении U (кривые 6,7 на Рис.135) на уровне Ферми открывается диэлектрическая щель.

На Рис.136 показаны результаты для плотности состояний, полученные при сравнительно небольшой силе корреляций U = 1.25B (B = 2D), такой, что система достаточно далека от моттовского перехода, для различных значений беспорядка Δ. Наблюдается типичное уширение, с соответствующим уменьшением величины, плотности состояний с ростом беспорядка.

На Рис.137 показана эволюция плотности состояний с ростом степени беспорядка Δ , полученная при U = 2B, типичном для моттовского диэлектрика в отсутствие беспорядка. Видно, что с увеличением беспорядка происходит восстановление квазичастичного пика в плотности состояний. Подобное необычное поведение плотности



Рис. 137: Плотность состояния в модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ и U/2D = 2, типичным для моттовского изолятора в отсутствие беспорядка. Вставка: Восстановление квазичастичного пика в плотности состояний с ростом беспорядка в области сосуществования (U/2D = 1.5), полученное из моттовского диэлектрика с уменьшением U

состояний (закрытие диэлектрической щели беспорядком) отмечалось и для трехмерных систем [247]. Однако, в данном случае, такое поведение не означает, в общем случае, переход в состояние коррелированного металла и, по крайней мере, для бесконечных систем мы имеем дело с коррелированным диэлектриком Андерсона.

Физическая причина для такого, достаточно неожиданного, восстановления квазичастичного пика в плотности состояний вполне ясна. Параметром, контролирующим его появление или исчезновение в DMFT в отсутствие беспорядка, является отношение хаббардовского взаимодействия U и ширины "затравочной" зоны B = 2D. Разупорядочение приводит к росту эффективной ширины зоны B_{eff} (в отсутствие хаббардовского взаимодействия) и уменьшению отношения U/B_{eff} , что и вызывает восстановление квазичастичной зоны в нашей модели. Более детально, такой качественный подход будет проанализирован в параграфе, где наши расчеты плотности состояний будут использованы для изучения фазовой диаграммы двумерной модели Андерсона-Хаббарда.

В отсутствие беспорядка, хорошо известно гистерезисное поведение плотности со-

стояний, наблюдаемое для перехода Мотт-Хаббарда, если DMFT вычисления проводить с уменьшением U из диэлектрической фазы [149, 258]. Фаза моттовского диэлектрика сохраняется даже для тех величин U, где при расчетах с ростом U из металлической фазы был-бы еще коррелированный металл. Металлическая фаза возникает лишь при $U_{c1} \approx 1.42B$. Интервал $U_{c1} < U < U_{c2}$ обычно рассматривают, как область сосуществования металлической и диэлектрической фаз, и металлическая фаза считается термодинамически более стабильной [149, 258]. В области сосуществования рост степени беспорядка также приводит к восстановлению квазичастичного пика в плотности состояний (см. вставку Рис.137).

Оптическая проводимость: переходы Мотта-Хаббарда и Андерсона.

Действительная часть оптической проводимости вычислялась для различных комбинаций параметров нашей модели непосредственно из выражений (377) и (381), используя результат DMFT+Σ процедуры для одночастичных характеристик. Величины проводимости ниже даются в естественных единицах e^2/\hbar .

В отсутствие беспорядка мы воспроизводим результаты стандартной DMFT с оптической проводимостью, характеризующейся обычным друдевским пиком, лежащим на нулевой частоте, и широким максимумом при $\omega \sim U$, соответствующим переходам в верхнюю хаббардовскую зону. С ростом U друдевский пик уменьшается и исчезает при моттовском переходе, когда остается только вклад от переходов через мотт-хаббардовскую щель.

Введение беспорядка приводит к качественному изменению частотной зависимости проводимости. Ниже мы в основном покажем результаты, полученные для тех же значений U и Δ , какие использовались выше для иллюстрации эволюции плотности состояний.

На Рис.138 мы приводим действительную часть оптической проводимости в двумерной модели Андерсона-Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ и U = 1.25B, такого что система далека от моттовского перехода. Тонкими пунктирными линиями на Рис. 138 (как и на дальнейших рисунках для



Рис. 138: Реальная часть динамической проводимости в модели Андерсона-Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ и U/2D = 1.25, типичным для коррелированного металла в отсутствие беспорядка. На вставке – тоже в широкой области частот. Тонкими линиями приведен результат от "лестничного" приближения.

проводимости) приведен результат "лестничного" приближения. В рассматриваемой двумерной модели проводимость на нулевой частоте обращается в нуль, и, в отличии от d = 3 [247], даже при очень слабом беспорядке пик оптической проводимости лежит на конечной частоте. В "лестничном" приближении, которое не содержит локализационных поправок, проводимость при $\omega = 0$ конечна. Переходы в верхнюю Хаббардовскую зону при $\omega \sim U$ практически не наблюдаемы в этих данных, лишь на вставке Рис.138, где показана область широких частот, на кривых 1 и 2 виден слабый максимум, связанный с рассеянием в верхнюю хаббардовскую зону.

На Рис.139 мы приводим действительную часть оптической проводимости для различных степеней беспорядка Δ и U = 2B, типичного для мотт-хаббардовского диэлектрика. Как видно из Рис. 139 при малом беспорядке мы находимся в фазе моттовского диэлектрика (кривые 1,2), по мере увеличения беспорядка, в отсутствии андерсоновской локализации (см. тонкие кривые, соответствующие "лестничному" приближению), мы попали бы в металлическую фазу. Но в нашей модели локализация происходит при сколь угодно слабом беспорядке, поэтому мы оказываемся в фазе андерсоновского диэлектрика, с проводимостью обращающейся в нуль на нуле-



Рис. 139: Реальная часть динамической проводимости в модели Андерсона-Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ и U/2D = 2, типичным для моттовского изолятора в отсутствии беспорядка. Линии 1,2 соответствуют моттовскому изолятору, линии 3-6 – коррелированному андерсоновскому диэлектрику. Вставка – локализационное поведение проводимости. Тонкими линиями приведен результат от "лестничного" приближения.

вой частоте. Область частот с локализационным поведением проводимости $\sigma(\omega) \sim \omega^2$ показана на вставке Рис.139 для кривых 5 и 6, с достаточно большим беспорядком. При малом беспорядке область локализационного поведения оптической проводимости экспоненциально мала ⁶⁹ (что связано с экспоненциальным ростом радиуса локализации на малых беспорядках, см. Рис.141) и в следствии этого не наблюдается.

Зависимость оптической проводимости от U приведена на Рис.140. Основной эффект от увеличения U связан со смещением пика проводимости в область низких частот, с соответствующим уменьшением его ширины, что связано с уменьшением ширины квазичастичного пика в плотности состояний.

Радиус локализации и фазовая диаграмма двумерной модели Андерсона-Хаббарда с половинным заполнением.

На левой шкале Рис. 141 приведена зависимость проводимости на конечной, но достаточно малой, частоте $\omega = 0.00005D$ от степени беспорядка Δ . Кружочками по-

⁶⁹Эта область наблюдается при частотах [69, 253] $\omega \ll \omega_c \sim \frac{D^3}{\Delta^2} / (\frac{R_{loc}}{a})^2$.



Рис. 140: Реальная часть динамической проводимости в модели Андерсона-Хаббарда с половинным заполнением для различных величин U и $\Delta = 0.19$. Тонкими линиями приведен результат от "лестничного" приближения.



Рис. 141: На левой шкале рисунка – зависимость проводимости на конечной частоте $\omega = 0.00005D$ и U/2D = 1 от степени беспорядка Δ . Кружочками (кривая 1) дано лестничное приближение, треугольниками (кривая 2) - результат самосогласованной теории локализации. Кривая 3, практически совпадающая с лестничным приближением, получена из формулы Друде (391). Кривые 4 и 5 – статическая проводимость в конечных образцах с размерами $L = 10^8 a$ и $L = 10^5 a$ соответственно. На правой шкале рисунка – зависимость логарифма радиуса локализации от степени беспорядка Δ : для бесконечного образца – кривая 1, для образцов с размерами $L = 10^8 a$ и $L = 10^8 a$ и $L = 10^5 a$ – кривые 2 и 3 соответственно.

казан результат "лестничного" приближения, треугольниками - результат самосогласованной теории локализации. Кривая 3, практически совпадающая с "лестничным" приближением, получена из качественной формулы Друде:

$$\sigma(\omega) = \sigma(0) \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + \omega^2},\tag{391}$$

где статическая проводимость $\sigma(0) = e^2 N(0) D_0 \approx \frac{e^2}{\hbar} \frac{\varepsilon_F}{2\pi\gamma}$, N(0) – плотность состояний на уровне Ферми, D_0 – друдевский коэффициент диффузии, $\varepsilon_F \approx D$ – энергия Ферми. Для частоты рассеяния на примесях принималось $\gamma = \pi N(0) \Delta^2 \approx \frac{\pi}{2D} \Delta^2$. Заметный вклад локализационных поправок в проводимость на конечной частоте (заметное отличие кривой 2 от 1 и 3) возникает лишь при достижении проводимостью значений порядка минимальной металлической проводимости $\sigma_0 = \frac{e^2}{\hbar}$ (на которую и нормировалась проводимость на рисунках). Следует заметить, что именно в этой области беспорядка, как мы увидим ниже, и происходит андерсоновский переход металл-диэлектрик (расходится радиус локализации) в двумерных системах разумных конечных размеров.

На правой шкале Рис.141 показаны кривые зависимости логарифма радиуса локализации, полученного из уравнения (385), от степени беспорядка для бесконечного образца (кривая 1) и для образцов конечных размеров $L = 10^8 a$ и $L = 10^5 a$ (кривые 2 и 3 соответственно). Видно, что радиус локализации экспоненциально растет с уменьшением беспорядка, оставаясь конечным в бесконечной двумерной системе, где андерсоновский переход отсутствует. В конечных же системах радиус локализации *расходится* при критическом беспорядке, определяемом размером системы, демонстрируя существование эффективного перехода Андерсона. Как видно из Рис.141, качественно критический беспорядок определяется условием, что радиус локализации бесконечной системы становится сравним с характерным размером образца $R_{loc}^{L\to\infty} \sim L$. Следует заметить, что в нашем подходе, в отличие от [249], радиус локализации практически не зависит от U, что приводит к независимости от силы корреляций U и критического беспорядка в двумерных системах конечного размера.



Рис. 142: Фазовая диаграмма двумерной парамагнитной модели Андерсона-Хаббарда при нулевой температуре. Граница области моттовского диэлектрика $U_{c2}(\Delta)$ и граница области сосуществования $U_{c1}(\Delta)$ полученные из поведения плотности состояния, $U_{c2}^*(\Delta)$ рассчитана из выражения (393). Заштрихованная область между пунктирными кривыми соответствует эффективному андерсоновскому переходу металл-диэлектрик в конечных системах.

Аналогичная ситуация ⁷⁰ наблюдалась в нашем подходе и для трехмерных систем [247].

На левой шкале Рис.141 приведена также зависимость от степени беспорядка статической проводимости в конечных образцах с размерами $L = 10^8 a$ и $L = 10^5 a$ (кривые 4 и 5 соответственно). В конечных системах при малом беспорядке статическая проводимость отлична от нуля (металл) и непрерывно уменьшается с ростом беспорядка, обращаясь в ноль при критическом беспорядке, при котором расходится радиус локализации в образце соответствующего размера. Статическая проводимость конечных образцов в нашем подходе также практически не зависит от силы корреляций U. Существенное отличие статической проводимости от проводимости на малой конечной частоте, наблюдаемое на Рис.141, связано с уже отмечавшейся выше экспоненциальной малостью области частот с локализационным поведением проводимости.

Сейчас мы представим результаты для фазовой диаграммы двумерной парамаг-

⁷⁰Радиус локализации в трехмерной модели, который исследовался нами уже после выхода работы [247], оказался также практически независим от хаббардовского взаимодействия U

нитной модели Андерсона-Хаббарда с половинным заполнением, полученные из обширных расчетов плотности состояний в DMFT+Σ приближении и анализа поведения радиуса локализации конечных двумерных систем в нашем подходе. Наша фазовая диаграмма в плоскости беспорядок – корреляции (Δ, U) приведена на Рис.142.

Заштрихованная полоса соответствует области эффективного перехода "металл"андерсоновский диэлектрик. Её границы определяются расходимостью радиуса локализации в конечных образцах с характерными размерами $L = 10^5 a$ (верхняя граница) и $L = 10^8 a$ (нижняя граница) (см. Рис.141). Следует подчеркнуть, что дальнейшее увеличение размеров системы, например в 10 раз до $L = 10^9 a$, лишь очень незначительно сдвигает вниз (уменьшает критический беспорядок) нижнюю границу заштрихованной полосы на Рис. 142 – характерной области эффективного перехода Андерсона в конечных системах.

Кривая $U_{c2}(\Delta)$, полученная из расчетов плотности состояний, определяет границу моттовского перехода. Критерием перехода является исчезновение центрального квазичастичного пика в плотности состояний $N(\varepsilon)$ с открытием щели на уровне Ферми (см. Рис.135,137).

Как уже отмечалось выше, при уменьшении U из диэлектрической фазы моттовский переход наступает при $U = U_{c1}(\Delta) < U_{c2}(\Delta)$ и наблюдается область сосуществования фаз (гистерезиса), лежащая между кривыми $U_{c1}(\Delta)$ и $U_{c2}(\Delta)$. на фазовой диаграмме Рис.142.

В нашей работе [247]и в предыдущем параграфе при анализе фазовой диаграммы трехмерной модели Андерсона-Хаббарда были предложены простые качественные соображения, позволяющие оценить зависимости $U_{c1,c2}(\Delta)$. Считая, что отношение величины хаббардовского взаимодействия к эффективной ширине зоны $\frac{U_{c1,c2}(\Delta)}{B_{eff}(\Delta)}$, контролирующее моттовский переход металл-диэлектрик, есть универсальная константа, не зависящая от беспорядка, получаем:

$$\frac{U_{c1,c2}(\Delta)}{B_{eff}(\Delta)} = \frac{U_{c1,c2}(0)}{B},$$
(392)

где $B_{eff}(\Delta)$ - эффективная ширина зоны в присутствии беспорядка, рассчитанная

при U = 0 в самосогласованном борновском приближении (366). В трехмерной модели [247] зависимости критической силы корреляций от беспорядка $U_{c1,c2}(\Delta)$, полученные непосредственно из анализа эволюции плотности состояний, хорошо совпадали ⁷¹ с соответствующими качественными зависимостями, определяемыми уравнением (392).

В интересующей нас сейчас двумерной модели, решение уравнения (392) дает:

$$U_{c1,c2}^{*}(\Delta) = U_{c1,c2}(0)\frac{B_{eff}(\Delta)}{B} = U_{c1,c2}(0)\left(\frac{2\Delta^{2}}{B^{2}}ln\left(\frac{c+1}{c-1}\right) + c\right),$$
(393)

где $c = \sqrt{4 \left(\frac{\Delta}{B}\right)^2 + 1}$. В отличие от случая d = 3 [247], зависимость $U_{c2}(\Delta)$, полученная из расчетов плотностей состояний, существенно отличается от качественной $U_{c2}^*(\Delta)$ (точки на Рис. 142), определяемой (393). Это, по-видимому, связано с заметным изменением формы плотности состояний (при U = 0) с ростом степени беспорядка Δ , которое отсутствует для полуэллиптической зоны в случае d = 3.

6.1.5 Выводы

Мы используем обобщенный DMFT+ Σ подход для вычисления основных свойств неупорядоченной хаббардовской модели. Наш метод дает достаточно простую схему интерполяции между вполне изученным случаем сильно коррелированных систем в отсутствие беспорядка (DMFT и переход Мотта-Хаббарда) и случаем сильно неупорядоченного металла без хаббардовских корреляций, претерпевающего андерсоновский переход металл-диэлектрик. Несомненно, эта интерполяционная схема отражает большинство качественных особенностей модели Андерсона-Хаббарда, таких как общее поведение плотности состояний и оптической проводимости. Общая картина фазовой диаграммы при нулевой температуре также вполне разумна и находится в удовлетворительном согласии с результатами численного моделирования работы [250]. Однако, наш DMFT+ Σ подход требует существенно меньших затрат счетного времени и позволяет вычислять все основные измеряемые физические свойства модели Андерсона-Хаббарда.

⁷¹Более точные расчеты, проведенные уже после выхода работы [247], показали фактически полное совпадение.

Основным недостатком нашего подхода является пренебрежение интерференцией между рассеянием на беспорядке и хаббардовским взаимодействием, что приводит к независимости критического беспорядка андерсоновского перехода Δ_c от взаимодействия U. Важность интерференционных эффектов известна давно [240, 243], но их учет был успешен лишь частично, в случае слабых корреляций. В тоже время пренебрежение интерференцией есть главное приближение DMFT+ Σ подхода, позволяющее получить достаточно простую и физичную интерполяционную схему, дающую возможность анализа предела сильных корреляций. Попытки включить интерференционные эффекты в нашу схему — хорошая тема для будущей работы.

Другим упрощением является, конечно, предположение о немагнитном характере основного состояния (парамагнетик) модели Андерсона-Хаббарда. Важность магнитных (спиновых) эффектов в сильно коррелированных системах хорошо известна, также как проблема конкуренции основных состояний с разным типом магнитного порядка [149]. Важность беспорядка при исследовании взаимодействия этих возможных основных состояний также вполне очевидна. Это также может быть темой нашей дальнейшей работы.

Несмотря на эти недостатки, наши результаты выглядят вполне надежными, особенно в отношении влияния сильного беспорядка на мотт-хаббардовский переход металл-диэлектрик и общей формы фазовой диаграммы при нулевой температуре. Изменения в фазовой диаграмме при конечной температуре будут темой для дальнейшего изучения. Предсказания нашего подхода, такие как общее поведение оптической проводимости и, особенно, переход моттовский диэлектрик – металл, вызываемый беспорядком, могут быть объектом для прямой экспериментальной проверки.

6.2 Оптическое правило сумм в сильно коррелированных системах.

В данном разделе мы обсудим проблему возможного "нарушения" оптического правила сумм (ОПС) в нормальном (несверхпроводящем) состоянии сильно коррелированных электронных систем, используя рассмотренный нами в Главе 5 DMFT+ Σ подход и примененяя его к двум типичным моделям: модели "горячих точек" для псевдощелевого состояния и неупорядоченной модели Андерсона – Хаббарда. Будет детально показано, что общее однозонное правило сумм Кубо выполняется для обеих моделей, что может служить дополнительным подтверждением самосогласованности нашего DMFT+ Σ подхода к анализу оптической проводимости. Однако, сам оптический интеграл в общем случае зависит от температуры и характерных параметров моделей, таких как ширина псевдощели, корреляционная длина, примесное рассеяние, приводя к эффективному "нарушению" ОПС, которое может наблюдается в экспериментах. Дальнейшее рассмотрение в этом разделе в основном следует работе [267].

6.2.1 Однозонное оптическое правило сумм

В 1957 году Кубо [268] доказал общее правило сумм (ПС) для диагональной динамической (зависящей от частоты) проводимости $\sigma(\omega)$, которое работает для любой системы заряженных частиц независимо от взаимодействия, температуры или статистики. Это ПС обычно записывается в виде:

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\infty Re\sigma(\omega) d\omega = \sum_r \frac{n_r e_r^2}{m_r}$$
(394)

где n_r и e_r – плотность и заряд частиц сорта r.

Для системы электронов в твердом теле (394) принимает вид:

$$\int_0^\infty Re\sigma(\omega)d\omega = \frac{\omega_{pl}^2}{8} \tag{395}$$

где $\omega_{pl}^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}$ - плазменная частота , а n - плотность электронов.

Однако, в любом реальном эксперименте мы имеем дело не с бесконечной областью частот. Если рассматривать электроны в кристалле и ограничится электронами в зоне проводимости, пренебрегая межзонными переходами, то общее ПС (395) сводится к однозонному правилу сумм Кубо [268, 269]:

$$I = \int_{0}^{\omega_{c}} Re\sigma(\omega) d\omega = f(\omega_{c}) \frac{\pi e^{2}}{2} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial^{2} \varepsilon_{p}}{\partial p_{x}^{2}} n_{p}$$
(396)

где ε_p – "голая" дисперсия, определяемая эффективным однозонным гамильтонианом, а n_p функция распределения по импульсам (числа заполнения), которая в общем случае определяется *взаимодействующей* запаздывающей электронной функцией Грина $G^R(\varepsilon, \mathbf{p})$ [270, 271]:

$$n_p = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon n(\varepsilon) Im G^R(\varepsilon, \mathbf{p})$$
(397)

где $n(\varepsilon)$ обычная функция распределения Ферми. В выражении (396) ω_c представляет ультрафиолетовую частоту обрезания, которая предполагается больше, чем ширина нижней энергетической зоны, но меньше чем щель до других зон. Функция $f(\omega_c)$ эффективно учитывает зависимость от обрезания, которая возникает вследствие присутствия друдевского спектрального веса за пределами ω_c [272], и равна единице, если формально положить $\omega_c \to \infty$, продолжая пренебрегать межзонными переходами.

Для гамильтониана с перескоком только между ближайшими соседями (t'=0) правая часть уравнения (396) будет выражаться [273] через кинетическую энергию электронов $E_{kin} \equiv 2 \sum_{p} \varepsilon_{p} n_{p}$, но в общем случае эти величины количественно различны [274].

Хотя общее ПС безусловно сохраняется, оптический интеграл $I(\omega_c, T)$ не является константой, т.к. и $f(\omega_c)$ [272] и n_p [271, 275] зависят от температуры T, а также от деталей взаимодействия [270]. Эта зависимость I от температуры T и от других параметров исследуемой системы часто называется "нарушением правила сумм". "Нарушением правила сумм" активно изучалось экспериментально, особенно в купратах, где выраженные аномалии наблюдались для оптической проводимости и вдоль с-оси и в проводящей плоскости, как в нормальном, так и в сверхпроводящем состоянии [276, 277, 278, 279, 280, 281].

Эффекты конечного обрезания всесторонне изучались в нескольких теоретических работах, исследующих зависимость от T оптического интеграл [271, 272, 282]. В [272, 282], эффект обрезания рассматривался в контексте электрон-фононного взаимодействия. В простой модели Друде $\sigma(\omega) = (\omega_{pl}^2/4\pi)/(1/\tau - i\omega)$ и ПС может "нарушатся" только вследствие присутствия $f(\omega_c)$. Интегрируя по частоте ω и разлагаясь при $\omega_c \tau >> 1$, имеем:

$$f(\omega_c) = \left(1 - \frac{2}{\pi} \frac{1}{\omega_c \tau}\right) \tag{398}$$

Для бесконечного обрезания $f(\omega_c) = 1$ и $I = \omega_{pl}^2/8$, но для конечного обрезания $f(\omega_c)$ содержит член пропорциональный $1/\omega_c \tau$. Если $1/\tau$ изменяется с T,тогда получаем "нарушение" ПС даже если ω_{pl} не зависит от T [272, 282]. Другие аспекты зависимости от обрезания детально обсуждались в недавней статье [269].

В этом исследовании мы изначально пренебрегаем эффектами обрезания в оптическом интеграле. Наша цель - анализ зависимости I от T и от ряда параметров взаимодействия, определяющих электронные свойства сильно коррелированных систем, таких как купраты. В этом контексте мы обсудим проблему возможного "нарушения" ОПС в нормальном (несверхпроводящем) состоянии сильно коррелированных систем, используя наше недавно предложенное DMFT+ Σ приближение [66, 67, 68], применительно к оптической проводимости в двух типичных моделях таких систем: в модели "горячих точек" псевдощелевого состояния и в неупорядоченной модели Андерсона-Хаббарда [71, 247]. Нашей целью является, как проверка согласованности DMFT+ Σ подхода в применении к вычислениям оптической проводимости, так и демонстрация весьма существенной зависимости оптического интеграла I не только от T, но также от таких важных характеристик как ширина псевдощели, корреляционная длина, беспорядок и кулоновское взаимодействие, делающих "нарушение" (однозонного) ПС скорее повсеместным для любых сильно коррелированных систем, даже в пренебрежении эффектами обрезания.

6.2.2 Оптическое ПС в обобщенном DMFT+ Σ приближении

Характерной чертой общего ПС, определяемого уравнениями (396), (397), является то, что интеграл I по частоте в левой части вычисляется через двухчастичные свойства (динамическую проводимость, определяемую двухчастичной функцией Грина, в общем случае, с соответствующими вершинными поправками), тогда как правая часть определяется одночастичными характеристиками, таких как голая дисперсия и числа заполнения (397) (определяемые одночастичной функцикй Грина). Таким образом, проверяя выполнение этих ПС мы фактически проверяем согласованность всех теоретических приближений, использованных в наших модельных расчетах.

Наш, обобщающий теорию динамического среднего поля, $(DMFT+\Sigma)$ подход [66, 67, 68], дополняет стандартную теорию динамического среднего поля (DMFT) [156, 149] добавочной "внешней" собственно энергетической частью Σ (являющейся следствием любого вида взаимодействия за пределами DMFT, которая является точной только для бесконечной размерности), и дает эффективный метод вычисления, как одночастичных, так и двухчастичных свойств [71, 247]. Проверка согласованности этого нового подхода с очевидностью интересна сама по себе. Мы также увидим, что это дает несколько новое понимание проблемы "нарушения" ПС.

Псевдощелевое состояние и модель "горячих точек"

Псевдощелевые явления в сильно коррелированных системах имеет существенную зависимость от пространственного масштаба длины [25]. Для соединения физики псевдощели и сильных электронных корреляции, мы обобщили теорию динамического среднего поля [156, 149] путем включения зависимости от корреляционной длины псевдощелевых флуктуаций через дополнительную (импульсно зависимую) СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)$. Эта СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)$ описывает нелокальные динамические корреляции, вызываемые флуктуациями ближнего порядка либо антиферромагнитными спиновыми (SDW типа), либо зарядовыми (CDW типа) [63, 64].

Для вычисления $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)$ в двумерной модели "горячих участков" [25] для электрона движущего в случайном поле псевдощелевых флуктуаций (рассматриваем статические и гауссовы) с импульсами рассеяния в окрестности характерного вектора $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ (*a* параметр решетки), мы использовали [67, 68] рекуррентную процедуру, полученную в [63, 64], которая контролируется с помощью двух главных физических характеристик псевдощелевого состояния: *W* (амплитуда псевдощели), которая характеризует энергетический масштаб псевдощели, и $\kappa = \xi^{-1}$ – обратная корреляционная длина SDW (CDW) флуктуаций ближнего порядка. Оба параметра *W* и *ξ*, определяющие псевдощелевое поведение, в принципе могут быть вычислены из микроскопической модели [67].

Слабо допированная модель Хаббарда с отталкивающим кулоновским взаимодействием U на квадратной решетке с перескоками между ближайшими и вторыми ближайшими соседями была численно исследована в рамках этого обобщенного DMFT+ Σ самосогласованного приближения, которое детально описано в [66, 67, 68].

Коротко говоря, DMFT+ Σ самосогласованная итерационная процедура выглядит следующим образом. Во-первых, мы задаем некоторую исходную локальную (DMFT) электронную СЭЧ $\Sigma(\varepsilon)$. Во-вторых, мы рассчитываем, как описано выше, **р**-зависящую "внешнюю" СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)$, которая, в общем случае, является функционалом от $\Sigma(\varepsilon)$. Потом, пренебрегая интерференционными эффектами между собственно энергетическими частями (что, фактически, является главным предположением нашего подхода) мы можем поставить и решить решеточную проблему DMFT [156, 149]. Наконец, мы определяем эффективную андерсоновскую однопримесную проблему, которая решается любым "impurity solver", замыкая систему DMFT+ Σ уравнений. На итерации, когда входящая и выходящая функции Грина (или СЭЧи) совпадут друг с другом (с требуемой точностью) мы считаем, что получено самосогласованное решение.

Аддитивная форма полной СЭЧ является, по сути дела, преимуществом нашего подхода [66, 67, 68]. Она позволяет сохранить набор самосогласованных уравнений стандартной DMFT [156, 149]. Однако, существует два отличия от традиционной DMFT. На каждой DMFT итерации мы пересчитываем соответствующую **p**- зависимую СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{p}}(\mu, \varepsilon, [\Sigma(\varepsilon)])$ с помощью приближенной схемы, учитывающей взаимодействие с коллективными модами или флуктуациями параметра порядка, и локальная функция Грина $G_{ii}(\varepsilon)$ "одета" $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)$ на каждом шаге стандартной DMFT процедуры. Физически это соответствует учету некоторых "внешних" (например, псевдощелевых) флуктуации, характеризующихся масштабом длины ξ , в фермионном термостате, окружающем эффективную андесоновскую примесь обычной DMFT. Нами были рассмотрены, как сильно коррелированные металлы, так и допированные моттовские диэлектрики [67, 68]. Энергетическая дисперсия, квазичастичное затухание, спектральные функции и ARPES спектр, вычисленные в DMFT+Σ подходе демонстрируют псевдощелевые эффекты вблизи уровня Ферми квазичастичной зоны.

В [71] DMFT+ Σ схема была обобщена для расчета двухчастичных свойств, таких как оптическая проводимость, используя ранее развитую нами рекуррентную процедуру для вершинных поправок от псевдощелевых флуктуаций [70]. Такая схема воспроизводит типичные псевдощелевые аномалии оптической проводимости и зависимость этих аномалий от корреляционной длины и силы корреляции U. Ниже мы используем подход [71] для исследования ПС в модели "горячих точек".

Для вычисления оптического интеграла I мы использовали данные для проводимости из [71] (расширив их на область больших частот, необходимых для расчета I), а правая часть (396) вычислялась с использованием рекуррентного соотношения для $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)$ и полностью самосогласованной DMFT+ Σ процедуры. Все вычисления проводились для спектра в модели сильной связи на квадратной решетке, с учетом интегралов перескока на первых t и вторых t' ближайших соседей.

На левой панели Рис. 143 представлены наши типичные данные для действительной части проводимости (t' = -0.4t, t = 0.25 eV, заполнение зоны n = 0.8, температура T = 0.088t) для различных величин хаббардовского взаимодействия U = 4t, 6t, 10t, 40t и амплитуды псевдощели W = t (корреляционная длина $\xi = 10a$). Из этих данных очевидно, что оптический интеграл I различен для всех этих кривых, фактически, его величина падает с ростом U (вместе с ослаблением псевдощелевых аномалий [71]). Однако, однозонное оптическое ПС (396), как видно из Таблицы 3, выполняется в пределах нашей численной точности.

На правой панели Рис. 143 показана действительная часть оптической проводимости для допированного моттовского изолятора (U = 40t, t' = -0.4t, t = 0.25 eV, T = 0.088t) для различных величин амплитуды псевдощели W = 0, W = t, W = 2t.



Рис. 143: Действительная часть оптической проводимости сильно коррелированных систем в псевдощелевом состоянии (t' = -0.4t, t = 0.25 eV, T = 0.089t) в DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{p}}$ приближении. Слева — для различных величин U при W = t. Справа —допированный моттовский диэлектрик (U = 40t) для различных величин псевдощели W = 0, W = t, W = 2t. Заполнение зоны n = 0.8, корреляционная длина $\xi = 10a$. Проводимость дана в единицах $\sigma_0 = \frac{e^2}{\hbar}$.

U	$\frac{\pi e^2}{2} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial^2 \varepsilon_p}{\partial p_x^2} n_p$	$I = \int_0^\infty Re\sigma(\omega)d\omega$
U = 4t	0.456	0.408
U = 6t	0.419	0.387
U = 10t	0.371	0.359
U = 40t	0.323	0.306

Таблица 3: Проверка однозонного ПС в модели "горячих точек". Зависимость от U. Оптический интеграл приведен в единицах $\frac{e^2}{\hbar}t$.

Таблица 4: Проверка однозонного ПС в модели "горячих точек". Зависимость от W. Оптический интеграл в единицах $\frac{e^2}{\hbar}t$.

W	$\frac{\pi e^2}{2} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial^2 \varepsilon_p}{\partial p_x^2} n_p$	$I = \int_0^\infty Re\sigma(\omega)d\omega$
W = 0	0.366	0.36
W = t	0.314	0.304
W = 2t	0.264	0.252



Рис. 144: Зависимости нормированного оптического интеграла от кулоновского взаимодействия U в псевдощелевом состоянии. На вставке – зависимость от обратной корреляционной длины. Все параметры приведены на рисунке.

Корреляционная длина $\xi = 10a$ и заполнение зоны n = 0.8. "Нарушение" ПС здесь значительное — оптический интеграл заметно уменьшается с ростом W. Не смотря на это, однозонное правило сумм (396) выполняется в пределах численной точности, что видно из Таблицы 4.

При детальном изучении "нарушения" ПС, т.е. зависимости оптического интеграла I от параметров модели, мы провели обширные вычисления соответствующих зависимостей правой части уравнения (396) и оптического интеграла I от температуры T, допирования, амплитуды псевдощели W, корреляционной длины псевдощелевых флуктуаций $\xi = \kappa^{-1}$ и корреляционной силы U. Некоторые из результатов показаны на Рис. 144 – 146.


Рис. 145: Зависимости нормированного оптического интеграла от амплитуды псевдощели *W*. Все параметры приведены на рисунке.



Рис. 146: Зависимости нормированного оптического интеграла от допирования в псевдощелевом состоянии. На вставке — температурная зависимость. Все параметры приведены на рисунке.

В отношении зависимости *I* от корреляционной длины, было обнаружено, что она очень слабая (практически пренебрежимая) во всей области реалистичных величин ξ , поэтому мы не будем обсуждать ее в дальнейшем. Типичная зависимость (нормированного) оптического интеграла от силы корреляций *U* показана на Рис. 144 для двух величин *W*. Мы видим весьма значительно падение *I* с ростом *U*.

Похожая зависимость I от амплитуды псевдощели W (для нескольких величин U) показана на Рис.145, а типичная зависимость от допирования дана на Рис.146. Во всех случаях, изменение значимых параметров модели ведет к весьма значительному падению величины I.

Что касается температурной зависимости *I* (показанной на вставке на Рис. 146), она достаточно слабая, квадратичная по *T* и вполне аналогична полученной в [271].

Данные результаты показывают, что величина *I* зависит от всех основных параметров модели и, в этом смысле, эта величина не универсальна, так что оптическое ПС, с очевидностью "нарушается", если мы ограничиваемся однозонным вкладом.

Примесная модель Андерсона-Хаббарда

В предыдущих разделах этой главы (см. также [247, 257]) мы применили DMFT+Σ подход для расчета плотности состояний, оптической проводимости и фазовой диаграммы парамагнитной модели Андерсона-Хаббарда с сильными электронными корреляциями и с сильным гауссовским узельным беспорядком. Сильные корреляции рассматривались с помощью DMFT, а беспорядок учитывался с помощью подходящего обощения самосогласованной теории локализации [69, 253, 261, 254]. Рассматривались, как трехмерные системы с полуэллиптической плотностью состояний, так и двумерные с прямоугольной DOS. Фазы коррелированного металла, моттовского диэлектрика и коррелированного андерсоновского диэлектрика определялись по эволюции плотности состояний и динамической проводимости, которые демонстрируют, как переход Мотта-Хаббарда, так и андерсоновский переход металл-изолятор и позволяют построить полную фазовую диаграмму модели Андерсона-Хаббарда при нулевой температуре.

110					
$\Delta/2D$	$rac{\pi e^2}{2} \sum_{\mathbf{p}} rac{\partial^2 \varepsilon_p}{\partial p_x^2} n_p$	$I = \int_0^\infty Re\sigma(\omega)d\omega$			
0	0.063	0.064			
0.25	0.068	0.07			
0.37	0.06	0.056			
0.5	0.049	0.05			

Таблица 5: Проверка однозонного ПС в трехмерной модели Андерсона-Хаббарда. Зависимость от Δ . Оптический интеграл в единицах $\frac{2e^2}{\hbar a}D$.

Для "внешней" СЭЧ, входящей в DMFT+ Σ цикл, мы использовали самое простое приближение, пренебрегающее "пересекающимися" диаграммами для примесного рассеяния, т.е. самосогласованное борновское приближение (366), где Δ обозначает амплитуду гауссовского узельного беспорядка.

Вычисление оптической проводимости значительно упрощаются [247] вследствие отсутствия вкладов в проводимость от вершинных поправок, определяемых локальным хаббардовским взаимодействием. В конечном счете, проводимость главным образом определяется обобщенным коэффициентом диффузии, который получается из подходящего обобщения самосогласованного уравнения [69, 253, 261, 254], которое и решалось в совокупности с DMFT+Σ процедурой.

Приступим к рассмотрению трехмерных систем. На Рис. 147 показаны типичные результаты для действительной части оптической проводимости коррелированного металла, описываемого трехмерной моделью Андерсона-Хаббарда с половинным заполнением, для различных степеней беспорядка Δ и U = 2.5D (2D – ширина зоны), демонстрирующие непрерывный переход в коррелированный андерсоновский диэлектрик с ростом степени беспорядка.

Здесь опять прямая проверка показывает, что однозонное ПС (396) выполняется в пределах численной точности, что видно из Таблицы 5. В тоже время как сам оптический интеграл *I* заметно изменяется с беспорядком.

Для всестороннего изучения "нарушения" ПС, т.е. зависимости оптического интеграла I от параметров трехмерной модели Андерсона-Хаббарда, мы провели детальные расчеты его зависимости от температуры T, амплитуды беспорядка Δ и корреляционной силы U. Некоторые из результатов представлены на Рис. 148 – 150.



Рис. 147: Действительная часть оптической проводимости в трехмерной модели Андерсона-Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ . U = 2.5D, типичное для коррелированного металла. Кривые 1,2 – металлическая фаза, кривая 3 соответствует порогу подвижности (переход Андерсона), кривые 4,5 – коррелированный андерсоновский диэлектрик. Проводимость в единицах $\frac{e^2}{ha}$.

На Рис. 148 показана зависимость нормированного оптического интеграла от хаббардовского взаимодействия *U*, для различных степеней беспорядка (для сильно неупорядоченного металла и коррелированного андерсоновского диэлектрика). Видно, что во всех случаях рост *U* ведет к весьма резкому падению *I*.

На Рис. 149 показаны аналогичные зависимости от беспорядка Δ . В металлической фазе оптический интеграл как правило уменьшается с ростом беспорядка, тогда как для моттовского диэлектрика наблюдается противоположное поведение (как для диэлектрика, полученного с увеличением U из металлической фазы, так для диэлектрика, полученного при уменьшении U в области гистерезиса фазовой диаграммы [247]). Отметим отсутствие каких-либо существенных изменений в непосредственной близости к критическому беспорядку $\Delta_c/2D = 0.37$, соответствующему андерсоновскому переходу металл-диэлектрик. Вместе с тем, необходимо отметить значительный рост оптического интеграла при переходе системы в сильно неупорядоченный (андерсоновская локализация) моттовский диэлектрик.



Рис. 148: Зависимость от U нормированного оптического интеграла в трехмерной модели Андерсона-Хаббарда для различных величин беспорядка Δ (1,2 – сильно неупорядоченный металл, 3 – коррелированный андерсоновский диэлектрик).



Рис. 149: Зависимость от беспорядка нормированного оптического интеграла в трехмерной модели Андерсона-Хаббарда для различных величин кулоновского взаимодействия U. Кривые 1, 2, 3 – коррелированный металл, переходящий в андерсоновский диэлектрик. Кривая 4 – диэлектрик Мотта, полученный с ростом U из коррелированного металла, кривая 5 – диэлектрик Мотта, полученный с уменьшением U в области гистерезиса фазовой диаграммы.



Рис. 150: Температурная зависимость нормированного оптического интеграла в трехмерной модели Андерсона-Хаббарда для различных степеней беспорядка. На вставке – аналогичная зависимость при фиксированном беспорядке, но для различных величин кулоновского взаимодействия U, кривая 3 здесь соответствует неупорядоченному моттовскому диэлектрику.



Рис. 151: Зависимость нормированного оптического интеграла в двумерной модели Андерсона-Хаббарда от силы корреляций U для различных степеней беспорядка Δ . На вставке – зависимость нормированного оптического интеграла от степени беспорядка для различных значений хаббардовского взаимодействия U. Линии 1,2 – "коррелированный металл" переходящий в андерсоновский изолятор. Линии 3,4 – моттовский изолятор, получаемый с ростом U из "коррелированного металла" или андерсоновского изолятора.

$\Delta/2D$	$\frac{\pi e^2}{2} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial^2 \varepsilon_p}{\partial p_x^2} n_p$	$I_{opt} = \int_0^\infty Re\sigma(\omega)d\omega$		
0.19	0.099	0.098		
0.25	0.099	0.098		
0.37	0.092	0.091		
0.5	0.081	0.082		

Таблица 6: Проверка однозонного оптического правила сумм в двумерной модели Андерсона-Хаббарда. Оптический интеграл приведен в единицах $\frac{2e^2}{\kappa}D$.

На Рис. 150 показана температурная зависимость нормированного оптического интеграла в трехмерной модели Андерсона-Хаббарда для различных степеней беспорядка. В модели Андерсона-Хаббарда температурная зависимость значительно сильнее, чем в чистой модели Хаббарда [271] или в модели "горячих точек" (см. выше), и усиливается с ростом беспорядка. Более того, если в относительно слабо коррелированном состоянии зависимость качественно аналогичная – оптический интеграл уменьшается с ростом T, то в неупорядоченном моттовском диэлектрике он растет, как видно из кривой 3 на вставке Рис. 150.

Опять, как и в случае псевдощелевой модели "горячих точек эти результаты для трехмерной модели Андерсона-Хаббарда ясно демонстрируют, что величина оптического интеграла не универсальна и зависит от всех основных параметров модели и поэтому однозонное ОПС сильно "нарушается".

Перейдем к рассмотрению двумерных систем. В Таблице 6 приведена правая и левая часть формулы (396) для двумерного сильно коррелированного металла с U/2D = 1.5. Видно, что однозонное правило сумм (396) опять выполняется в пределах численной точности.

Однако, оптический интеграл зависит от параметров модели, например, от хаббардовского взаимодействия и от беспорядка (Рис. 151). Рост корреляций U существенно уменьшает оптический интеграл. Зависимость от степени беспорядка Δ также существенна, в частности, при индуцированном беспорядком переходе моттовский диэлектрик – андерсоновский диэлектрик наблюдается скачек оптического интеграла (кривые 3,4 вставки Рис. 151).

Заключение

Основываясь на DMFT+Σ подходе, мы изучили однозонной ПС для двух типичных моделей сильно коррелированных систем, которые выходят за рамки стандартной DMFT: (i) модель "горячих точек" псевдощелевого состояния, которая учитывает нелокальные корреляции благодаря AFM(CDW) флуктуациям ближнего порядка и (ii) модель Андерсона-Хаббарда, которая включает эффекты сильного беспорядка , ведущего к вызываемому беспорядком переходу металл-диэлектрик (Андерсена), наряду с переходом Мотта.

Мы подробно продемонстрировали, что однозонное ОПС (396) выполняется для обеих моделей, что подтверждает самосогласованность DMFT+Σ подхода при вычислении 2-х частичных свойств.

Однако, оптический интеграл $I = 2 \int_0^\infty Re\sigma(\omega) d\omega$, входящий в однозонное правило сумм (396) не является универсальной константой и зависит от параметров рассматриваемых моделей. Большинство предыдущих исследований посвящалось его (относительно слабой) температурной зависимости. Здесь мы проанализировали зависимость от существенных параметров нашей модели и показали, что изменение этих параметров может приводить к сильному "нарушению" ОПС Большая часть обсуждаемых параметров может варьироваться в различного рода экспериментах и эту зависимость необходимо принимать во внимание при анализе оптических экспериментов в сильно коррелированных системах.

6.3 Электрон-фононное взаимодействие. Особенности электронной дисперсии.

В данном разделе мы будем исследовать модель Хаббарда с взаимодействием между сильно коррелированными электронами проводимости и решеткой с дебаевскими фононами. Исследование проводится в рамках обобщенной теории динамического среднего поля DMFT+Σ с "внешней"собственно-энергетической частью Σ_{ph}, соответствующей электрон-фононному взаимодействию. Будут представлены DMFT+Σ_{ph} результаты для плотностей состояний и "кинков"в энергетической дисперсии при различных параметрах модели и проанализировано взаимовлияние недавно открытых "кинков" чисто электронной природы и обычных фононных "кинков" в электронном спектре. Дальнейшее рассмотрение в этом разделе в основном следует работам [283, 284].

Проблема взаимовлияния сильных электронных корреляций и электрон-фононного взаимодействия – одна из центральных в физике сильно коррелированных систем. Фактически история таких исследований достаточно долгая, например, одной из наиболее популярных моделей для электрон-фононного взаимодействия (EPI) в сильно коррелированных системах является модель Хаббарда-Холстейна (HHM). Сама модель Хаббарда 1[145] описывает локальное кулоновское взаимодействие на решетке, включая, например мотт-хаббардовский переход металл-диэлектрик. С другой стороны, модель Холстейна содержит локальное линейное по отклонениям плотности взаимодействие электронов проводимости с локальными (эйнштейновскими) фононными модами [285].

Активные исследования свойств ННМ проводились в рамках теории динамического среднего поля (DMFT) [149], являющейся непертурбативным подходом по отношению к параметрам взаимодействия в модели Хаббарда. Среди многих других подходов остановимся на DMFT решении ННМ в случае, когда в качестве "impurity solver" использовалась численная ренормализационная группа (NRG) (для обзора применений DMFT(NRG) см. [286]). Сведение ННМ к проблеме андерсоновско-холстейновской примеси было впервые сделано Хевсоном и Майером [287]. Они показали, что, используя NRG, возможно (численно точно) рассчитать полный электрон-фононный вклад в собственно-энергетическую часть (СЭЧ) задачи, таким образом сделав решение ННМ непертурбативным также и в отношении силы электрон-фононного взаимодействия. Отметим , что система самосогласованных уравнений DMFT в таком подходе сохраняется.

Однако, до настоящего времени, по-видимому, не исследовались сильно коррелированные электроны, взаимодействующие с дебаевскими фононами. Это является тем более удивительным ввиду широкого обсуждения физики "кинков" (переломов) в электронной дисперсии, наблюдаемых в ARPES экспериментах в ВТСП на 40-70 meV ниже уровня Ферми [288], происхождение которых часто приписывается EPI [289]. Проблема формирования кинков в электронной дисперсии, вызываемых EPI в сильно коррелированных системах кратко обсуждалась в рамках HHM в статьях [290, 291]

В данном разделе мы представляем результаты DMFT+ Σ подхода для модели Хаббарда, дополненной взаимодействием с дебаевскими (или эйнштейновских) фононами, в предположении выполнения теоремы Мигдала (адиабатическое приближение). Такое приближение разумно для константы EPI взаимодействия $\lambda < E_F/\omega_{ph} \sim$ 10, где E_F - энергия Ферми, ω_{ph} - дебаевская или эйнштейновская частота. Мы рассматриваем влияние дебаевских (или эйнштейновских) фононов на слабо и сильно коррелированные электроны, в том числе и в окрестности мотт-хаббардовского перехода металл-диэлектрик, изучая электронную дисперсию и плотность состояний (DOS). Мы детально анализируем как EPI изменяет электронную дисперсию в коррелированном металле и обсуждаем взаимовлияние недавно открытых кинков чисто электронной природы в электронной дисперсии [292] и обычных фононных кинков в электронном спектре.

6.3.1 Детали DMFT+ Σ расчетов

Основным предположением нашего DMFT+Σ подхода является следующий вид одночастичной функции Грина:

$$G_{\mathbf{p}}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon + \mu - \varepsilon(\mathbf{p}) - \Sigma(\varepsilon) - \Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)}$$
(399)

где $\varepsilon(\mathbf{p})$ – "затравочная" электронная дисперсия, $\Sigma(\varepsilon)$ – локальная СЭЧ DMFT, а $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)$ – некоторая "внешняя" (в общем случае импульсно зависимая) СЭЧ. Успех нашего обобщенного подхода (и его основной недостаток) связан с аддитивной формой полной СЭЧ (пренебрежение интерференцией между разными вкладами) в уравнении (399) [66, 67, 71]. Это позволяет сохранить систему самосогласованных уравнений стандартной DMFT [149]. Однако, существует два отличия от традиционной DMFT.



Рис. 152: Вклад в электрон-фононную СЭЧ в адиабатическом приближении, включаемый в DMFT+ Σ_{ph} схему.

Во-первых, на каждой DMFT итерации мы пересчитываем соответствующую "внешнюю" СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{p}}(\mu, \varepsilon, [\Sigma(\varepsilon)])$ с помощью некоторой (приближенной) схемы, учитывающей взаимодействие, например, с коллективными модами (фононы, магноны и т.д.) или некоторыми флуктуациями параметра порядка. Во-вторых, локальная функция Грина эффективной однопримесной задачи имеет следующий вид:

$$G_{ii}(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{\varepsilon + \mu - \varepsilon(\mathbf{p}) - \Sigma(\varepsilon) - \Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)},$$
(400)

на каждом шаге стандартной DMFT процедуры.

В итоге, мы получаем требуемую функцию Грина в форме (399), где $\Sigma(\varepsilon)$ и $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)$ – те, что получены в конце нашей итерационной процедуры.

Для рассмотрения электрон-фононного взаимодействия в сильно коррелированной системе мы введем $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon) = \Sigma_{ph}(\varepsilon, \mathbf{p})$, возникающую от EPI в рамках обычной фрелиховской модели. Для решения однопримесной андерсоновской задачи мы используем NRG [286]. Все расчеты проводятся для почти нулевой температуры при половинном заполнении. Для "голых" электронов мы принимаем полуэллиптическую плотность состояний с полушириной зоны D.

В соответствии с теоремой Мигдала в адиабатическом приближении мы можем ограничится простейшим вкладом первого порядка для $\Sigma_{ph}(\varepsilon, \mathbf{p})$, показанным диаграммой на Рис. 152. Главным преимущество адиабатического приближения – возможность пренебрегать любыми вершинными поправками от электрон-фононного взаимодействия, которые являются малыми по адиабатическому параметру $\frac{\omega_D}{\varepsilon_F} \ll 1$ [293]. Вклад, показанный на Рис. 152, имеет вид:

$$\Sigma_{ph}(\varepsilon, \mathbf{p}) = ig^2 \sum_{\omega, \mathbf{k}} \frac{\omega_0^2(\mathbf{k})}{\omega^2 - \omega_0^2(\mathbf{k}) + i\delta} \frac{1}{\varepsilon + \omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{k}) - \Sigma(\varepsilon + \omega) - \Sigma_{ph}(\varepsilon + \omega, \mathbf{p} + \mathbf{k})}$$
(401)

где *g* – обычная константа электрон-фононного взаимодействия. $\omega_0(\mathbf{k})$ – фононная дисперсия, которая в нашем случае берется в стандартной модели Дебая или Эйнштейна:

$$\omega_0(\mathbf{k}) = \begin{cases} u|\mathbf{k}|, & |\mathbf{k}| < \frac{\omega_D}{u} \\ \omega_0, & |\mathbf{k}| < k_0 \end{cases}$$
(402)

Здесь *u* – скорость звука, ω_D , ω_0 – частоты Дебая и Эйнштейна, обрезание k_0 порядка импульса Ферми p_F .

Фактически $\Sigma_{ph}(\varepsilon, \mathbf{p})$, определенная выражением (401), имеет слабую импульсную зависимость, которой мы можем пренебречь и учитывать только существенную частотную зависимость. Прямые вычисления (см., например, [55]) в случае дебаевского спектра (402) позволяют переписать выражение (401) в виде:

$$\Sigma_{ph}(\varepsilon) = \frac{-ig^2}{4\omega_c^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left\{ \omega_D^2 + \omega^2 ln \left| \frac{\omega_D^2 - \omega^2}{\omega^2} \right| + i\pi\omega^2 \theta(\omega_D^2 - \omega^2) \right\} I(\varepsilon + \omega), \quad (403)$$

а в случае эйнштейновского спектра:

$$\Sigma_{ph}(\varepsilon) = \frac{ig^2}{16\pi} \frac{k_0^2}{p_F^2} \Big\{ -i\pi (I(\varepsilon + \omega_0) + I(\varepsilon - \omega_0)) + (404) + \int_0^\infty d\omega - \frac{I(\varepsilon + \omega_0 + \omega) + I(\varepsilon - \omega_0 - \omega) - I(\varepsilon + \omega_0 - \omega) - I(\varepsilon - \omega_0 + \omega)}{\omega} \Big\}$$

$$I(\epsilon) = \int_{-D}^{+D} d\xi \frac{N_0(\xi)}{E_{\varepsilon} - \xi}.$$
(405)

где $E_{\varepsilon} = \varepsilon - \Sigma(\varepsilon) - \Sigma_{ph}(\varepsilon)$ и $\omega_c = p_F u$ – характерная частота порядка ω_D . В случае полуэллиптической "затравочной" DOS $N_0(\varepsilon)$ с полушириной зоны D мы получаем:

$$I(\epsilon) = \frac{2}{D^2} (E_{\varepsilon} - \sqrt{E_{\varepsilon}^2 - D^2}), \qquad (406)$$

Теперь мы можем ввести безразмерную константу электрон-фононного взаимодействия, которая в такой модели принимает вид [55]:

$$\lambda = g^2 N_0(\varepsilon_F) \frac{\omega_D^2}{4\omega_c^2}.$$
(407)



Рис. 153: Сравнение плотностей состояний, полученных в стандартной DMFT (пунктир) и DMFT+ Σ_{ph} (сплошные кривые) методом для сильного (верхняя панель, U/2D = 1.25) и слабого (нижняя панель, U/2D = 0.625) хаббардовского взаимодействия. Безразмерная константа EPI $\lambda = 0.8$.

Для упрощения нашего анализа мы не проводим полностью самосогласованные расчеты, пренебрегая перенормировкой фононов вследствие EPI [55], поскольку предполагаем, что фононный спектр (402) фиксируется экспериментом.

6.3.2 Результаты и обсуждение

Начнем с сравнения между чисто DMFT и DMFT+ Σ_{ph} плотностями состояний для сильного (U/2D=1.25) и слабого (U/2D=0.625) хаббардовского взаимодействия, представленного соответственно на верхней и нижней панелях Рис. 153. Безразмерная константа EPI (407), использованная в этих расчетах, была λ =0.8 и частота Дебая ω_D =0.125D. В обоих случаях мы наблюдаем некоторое перераспределение спектрального веса вследствие EPI. Для U/2D=1.25 (верхняя панель Рис. 153) мы видим хорошо развитую трехниковую структуру типичную для сильно коррелированных металлов. В энергетическом интервале $\pm \omega_D$ вокруг энергии Ферми (которая выбирается за ноль энергии на всех рисунках) практически нет отличия в форме квазичастичного пика в DOS, полученного чистой DMFT и DMFT+ Σ_{ph} . Однако, вне этого интервала DMFT+ Σ_{ph} квазичастичный пик становится значительно шире за счет переноса части спектрального веса из хаббардовских зон. Это уширение DMFT+ Σ_{ph} квазича-



Рис. 154: Последовательность плотностей состояний, получаемых в стандартной DMFT (пунктир) и DMFT+ Σ_{ph} (сплошные кривые) методом вблизи перехода металл-диэлектрик. Безразмерная константа EPI λ =0.8.

стичного пика ведет, как мы покажем ниже, к задержке перехода металл-диэлектрик.

В случае U/2D=0.625 ясно различимых хаббардовских зон не формируется, наблюдаются лишь некоторые "боковые крылья" DOS. Перераспределение спектрального веса на нижней панели Рис. 153 не драматично, несмотря на качественное отличие от случая U/2D=1.25. Основное отличие между результатами чистой DMFT и DMFT+ Σ_{ph} возникает здесь в интервале $\pm \omega_D$, где наблюдается образование "шапочки" в DMFT+ Σ_{ph} DOS. Соответствующий спектральный вес уходит на энергии в окрестности \pm U, где пытаются сформироваться хаббардовские зоны.

На Рис. 154 мы сравниваем поведение плотностей состояний, полученных чистой DMFT и DMFT+ Σ_{ph} , для различных величин U/2D вблизи мотт-хаббардовского перехода металл-диэлектрик. При U/2D=1.56, как стандартная DMFT, так и DMFT+ Σ_{ph} , приводят к диэлектрическому решению. Однако, есть некоторые различия между этими решениями. DMFT+ Σ_{ph} хаббардовские зоны ниже и шире чем DMFT, поскольку включают дополнительное (EPI) взаимодействие. С уменьшением U при U/2D=1.51 и 1.47 мы наблюдаем, что DMFT+ Σ_{ph} результаты соответствуют металлическому состоянию (с узким квазичастичным пиком на уровне Ферми), а обычная DMFT все еще приводит к диэлектрическому решению. Только вблизи U/2D=1.43



Рис. 155: (Color online) Верхняя панель — сравнение кулоновской СЭЧ $\Sigma(\varepsilon)$ в стандартной DMFT (пунктир) с перенормированной фононами, получаемой в DMFT+ Σ_{ph} приближении (сплошные кривые). Нижняя панель — сравнение ЕРІ СЭЧ $\Sigma_{ph}(\varepsilon)$ в отсутствие корреляций (пунктир) с получаемой в DMFT+ Σ_{ph} приближении (сплошные кривые). Черные линии — действительная часть, красные — мнимая. λ =0.8, U/2D=1.25.

и DMFT и DMFT+ Σ_{ph} результаты для DOS соответствуют металлическому состоянию и все формы кривых плотностей состояний становятся такими же как описано выше Таким образом при увеличении U конечное EPI слегка задерживает моттхаббардовский переход от металлической в диэлектрическую фазу. Этот результат аналогичен тому, что наблюдается для HHM в слабом EPI режиме [294, 295, 296].

Для более глубокого понимания этого результата проанализируем структуру соответствующих СЭЧей $\Sigma(\varepsilon)$ и $\Sigma_{ph}(\varepsilon)$. На Рис. 155 мы приводим действительную и мнимую часть этих СЭЧей. ЕРІ изменяет $\Sigma(\varepsilon)$ весьма значительно (см. верхнюю панель Рис. 155). В тоже время в энергетическом интервале $\pm \omega_D$ мы находим, что наклон действительных частей обеих СЭЧ (который определяет квазичастичный вес в теории Ферми жидкости) практически одинаков, а мнимые части очень близки к нулю Таким образом, квазичастичные пики должны быть практически идентичны в этой области, что мы и наблюдали выше (Рис. 153). На энергиях выше, чем дебаевская частота $\text{Re}\Sigma(\varepsilon)$ в чистой DMFT поднимается и падает круче, также как и $\text{Re}(\Sigma + \Sigma_{ph})$, делая DMFT квазичастичный пик в DOS уже при энергиях выше ω_D , что приводит к более быстрому переходу металл-диэлектрик при $\lambda=0$. В случае



Рис. 156: Схематическая картина чисто электронных кинков (а) и фононных кинков (b) в электронной энергетической дисперсии вблизи уровня Ферми. ε^0 – "голая" энергетическая дисперсия в отсутствие взаимодействия; ε_{Fl} – дисперсия вблизи уровня Ферми перенормированная корреляциями или электрон-фононным взаимодействием; ω^* – энергия электрон-ного кинка; ω_D – энергия (дебаевская) фононного кинка; δp_e и δp_{ph} – импульсный сдвиг дисперсии при электронных кинках.

U/2D=0.625 (не показанном здесь) чисто DMFT кулоновская СЭЧ и аналогичная с учетом EPI практически идентичны. Соответствующая Σ_{ph} (сплошные линии) вместе с аналогичной, получаемой только за счет фононов (пунктир), показана на нижней панели Рис. 155. Она приводит только к "шапочке" в DOS вокруг уровня Ферми уже упоминаемой выше. Можно сказать также, что такая "шапочка" появляется в DOS, когда энергетический интервал $2\omega_D$ много меньше ширины квазичастичного пика.

Сейчас мы перейдем к исследованию источника резких изменений наклона (переломов) электронной дисперсии, так наываемых кинков. Хорошо известно, что взаимодействие электронов с некоторой бозонной модой вызывает такой кинк. В случае EPI типичная энергия кинка есть просто дебаевская (или эйнштейновская) частота. Недавно в работе. [292] были открыты кинки чисто электронной природы

Энергия чисто электронного кинка, как показано в работе [292], для полуэллиптической "голой" DOS имеет вид:

$$\omega^* = Z_{FL}(\sqrt{2} - 1)D, \tag{408}$$

где D – полуширина "затравочной" зоны и $Z_{FL} = (1 - \frac{\partial Re\Sigma}{\partial \varepsilon} \Big|_{\varepsilon = \varepsilon_F})^{-1}$ –фермижидкостной квазичастичный вес. Грубая оценка ω^* дает полуширину квазичастичного пика в DOS на половине его высоты. Схематичная картина кинков обоих видов вблизи уровня Ферми показана на Рис. 156.

Электронный кинк (левая сторона рисунка) достаточно гладок и обычно его на-

блюдение затруднено. Этот кинк формируется дисперсией с малым наклоном (малой скоростью) на энергиях меньших ω^* вокруг уровня Ферми, соединяющей две расщепленных ветви дисперсии с начальным углом наклона (пунктир) Обе этих ветви возвращаются к начальной дисперсии только достаточно далеко от уровня Ферми. В отличие от этого фононный кинк (правая сторона Рис. 156) вызывается достаточно сильным отклонением от начальной дисперсии при $\varepsilon(\mathbf{p}) \sim \pm \omega_D$, но вне энергетического интервала $\pm \omega_D$ энергетическая дисперсия быстро возвращается к начальной.

Наши расчеты ясно показывают, что электронные кинки плохо наблюдаемы на фоне фононных кинков (см., например, верхнюю панель Рис. 155), и требуется тонкая настройка параметров нашей модели для их выделения. Для прояснения этой ситуации мы введем дополнительную характеристику кинка – сдвиг в импульсном пространстве *бр* электронной дисперсии от начальной на энергии кинка. Простые геометрические оценки для фононного кинка дают:

$$\delta p_{ph} = \frac{\omega_D}{v_F} \lambda \tag{409}$$

где v_F – "затравочная" скорость Ферми, λ – безразмерная константа EPI, определяемая уравнением (407). Для электронного кинка аналогичная оценка дает:

$$\delta p_e = \frac{\omega^*}{v_F^*} \left(\frac{Z_0}{Z_{FL}} - 1 \right) \equiv \frac{\omega^*}{v_F^*} \lambda_e, \tag{410}$$

где Z_0 – квазичастичный вес в случае отсутствия электронного кинка (такой же как Z_{cp} , определенный в [292]), $v_F^* = Z_0 v_F$ – скорость Ферми начальной дисперсии, которая, в общем случае, не совпадает с "затравочной" скоростью Ферми v_F . Как указывалось в [292] электронные кинки могут наблюдаться только для достаточно сильного хаббардовского взаимодействия, когда трехпиковая структура в DOS хорошо развита и электронная дисперсия сильно перенормирована корреляционными эффектами. Эта перенормировка характеризуется (по аналогии с фононами) λ_e , определенной в (410), которую можно интерпретировать, как некоторую безразмерную константу взаимодействия, определяющую силу электронного кинка. В случае, когда наклон дисперсии на уровне Ферми и вне энергетического интервала $\pm \omega^*$ совпадают электронные кинки вообще отсутствуют.



Рис. 157: Квазичастичный пик в плотности состояний (полную DOS см. на верхней панели Рис. 153) (красная кривая) и соответствующая действительная часть полной СЭЧ $\text{Re}(\Sigma + \Sigma_{ph})$ с выключенным (левая панель) и включенным (правая панель) EPI. λ =2.0, U/2D=1.

Сейчас мы постараемся выбрать параметры нашей модели так, чтобы оба типа кинков были наблюдаемы. Прежде всего мы должны обеспечить $\omega_D \ll \omega^*$ (в других случаях плавные электронные кинки будут практически неразличимы на фоне фононных). Для U/2D=1 при U=3.5 eV мы получаем $\omega^* \sim 0.1D$ и разумной величиной частоты Дебая является $\omega_D \sim 0.01D$. Чтобы сделать фононный кинк достаточно выраженным при такой относительно малой дебаевской частоте (величина кинка (409)) пропорциональна ω_D) мы увеличим константу EPI до величины $\lambda=2.0$. Соответствующий квазичастичный пик в DOS вместе с действительной частью полной СЭЧ Re($\Sigma + \Sigma_{ph}$) показаны на Puc. 157: на левой панели EPI выключено, на правой – включено. Положение электронных кинков по энергии обозначено стрелками. Мы можем видеть, что $2\omega^*$ составляет приближенно полуширину квазичастичного пика в хорошо развитой трехпиковой структуре (см. верхнюю панель Puc. 153) На правой части Puc. 157, где EPI включено, ясно различимы фононные кинки на энергиях $\pm\omega_D$ и они хорошо разделены по энергии с электронными кинками.

Для демонстрации сосуществования обоих типов кинков в спектре мы рассмотрели энергетическую дисперсию простой кубической решетки с интегралом переноса только на ближайших соседей. Наиболее удобным для рассмотрения является высокосимметричное направление $\Gamma - (\pi, \pi, \pi)$ зоны Бриллюэна [292]. На Рис. 158 показа-



Рис. 158: Квазичастичная дисперсия, полученная в стандартной DMFT (черная кривая с ромбами) и в DMFT+ Σ_{ph} (красная кривая с кружками) вблизи уровня Ферми вдоль высоко симметричного направления $\Gamma - (\pi, \pi, \pi)$ зоны Бриллюэна.

на электронная дисперсия вблизи уровня Ферми вдоль этого направления. Черные линии с ромбами – электронный спектр в чистой DMFT, а красные линии с кружками представляют результат DFMT+ Σ_{ph} расчетов. Электронные и фононные кинки отмечены стрелками.

В заключение мы рассмотрим поведение фононных кинков в электронном спектре, как функцию хаббардовского взаимодействия U. С ростом отношения U/2Dвеличина скорости Ферми падает и положение кинка сдвигается по импульсной оси все дальше от p_F , в то время как энергия кинка сохраняет величину ω_D . Такое поведение подтверждается нашими прямыми DMFT+ Σ_{ph} расчетами. Соответствующая общая картина эволюции фононных кинков в спектре показана на Рис. 159.

6.3.3 Выводы

Подход, развитый в этом разделе, является первой попыткой анализа сильно коррелированных электронов, рассматриваемых в рамках DMFT подхода к модели Хаббарда, взаимодействующих с дебаевскими фононами. EPI рассматривается в простейшем адиабатическом приближении (теорема Мигдала), позволяющем пренебрегать вершинными поправками. Такое приближение разумно для константы EPI взаимодействия $\lambda < E_F/\omega_{ph} \sim 10$, где E_F - энергия Ферми, ω_{ph} - дебаевская или эйнштейновская частота. DMFT+ Σ_{ph} подход позволяет нам использовать стандартное



Рис. 159: Квазичастичная дисперсия с фононными кинками вблизи уровня Ферми, полученная DMFT+ Σ_{ph} расчетами для различных величин хаббардовского взаимодействия $U/2D = 0.5, 0.75, 1.0; \lambda = 0.8, \omega_D = 0.1D.$

импульсное представление для электрон-фононной СЭЧ (401), а общая структура DMFT уравнений сохраняется.

Умеренное EPI приводит к довольно незначительным изменениям электронной плотности состояний и в коррелированном металле и в состоянии моттовского диэлектрика, лишь слегка затягивая переход от металла к диэлектрику с увеличением U.

Однако, кинки в электронной дисперсии от EPI доминируют для наиболее типичных величин модельных параметров, затрудняя наблюдение кинков чисто электронной природы, предсказанных в [292]. Для определенной области модельных параметров сосуществование фононных "кинков" в электронной дисперсии с чисто электронными "кинками"может наблюдаться и мы формулируем некоторые простые критерии такого сосуществования.

Нами также изучалась эволюция фононных кинков с изменением силы корреляций, которая демонстрирует значительное падение наклона электронной дисперсии вблизи уровня Ферми с ростом хаббардовского взаимодействия U. Мы надеемся, что эти результаты могут быть важны для дальнейшего изучения эволюции электронного спектра сильно коррелированных систем, таких как, например, купраты. В заключение сформулируем основные результаты, полученные в диссертации:

7 ЗАКЛЮЧЕНИЕ. Основные результаты

- 1. Предложена новая, основанная на представлении о "горячих точках" на поверхности Ферми, двумерная модель псевдощелевого состояния, вызываемого флуктуациями ближнего порядка с конечной корреляционной длиной, в которой можно просуммировать все фейнмановские диаграммы теории возмущений по взаимодействию с псевдощелевыми флуктуациями. Получено рекуррентное уравнение для одноэлектронной функции Грина. Исследовано поведение плотности состояний и спектральной плотности, демонстрирующее псевдощелевые аномалии.
- 2. На широком классе одно и двумерных моделей псевдощели, исследована квазичастичная перенормировка (Z – фактор) одночастичной функции Грина, демонстрирующая нефермижидкостное поведение, характерное для "маргинальной" ферми жидкости или латтинджеровской жидкости. Исследована эффективная картина "разрушения" поверхности Ферми, как в модели "горячих точек" для диэлектрических (SDW, CDW) псевдощелевых флуктуаций, так и в качественно отличном случае сверхпроводящих d - волновых флуктуаций.
- 3. В рамках двух моделей ("горячих точек" и "горячих участков" на поверхности Ферми) псевдощелевого состояния, вызываемого флуктуациями ближнего порядка с конечной корреляционной длиной, исследовано влияние псевдощели на свойства сверхпроводящей фазы. Дан микроскопический вывод разложения Гинзбурга-Ландау и построена система рекуррентных уравнений Горькова для куперовского спаривания s- и d-типа. Исследовано влияние псевдощели на температуру сверхпроводящего перехода, на основные свойства сверхпроводника вблизи T_c и на температурное поведение сверхпроводящей щели. Выявлены два возможных типа взаимодействия сверхпроводящего параметра порядка с псевдощелевыми флуктуациями, приводящих к существенно различным энер-

гетическим масштабам подавления сверхпроводимости псевдощелью. Исследовано влияние немагнитных примесей на сверхпроводимость в псевдощелевом состоянии и проведено полуколичественное моделирование фазовой диаграммы ВТСП-купратов.

- 4. В рамках двух точно решаемых моделей псевдощели впервые удалось точно исследовать эффекты несамоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка в гауссовом случайном поле псевдощелевых флуктуаций. Исследовано поведение усредненной по этому полю сверхпроводящей щели и ее флуктуации, а также сверхпроводящих особенностей в плотности состояний и спектральной плотности квазичастиц, которые демонстрируют существование сверхпроводимости (по-видимому, в отдельных областях – "каплях") и в области температур выше среднеполевой температуры T_c однородного сверхпроводящего перехода во всем образце.
- 5. Предложено новое DMFT+Σ обобщение теории динамического среднего поля (DMFT), позволяющее рассматривать нелокальные корреляции или дополнительные (по отношению к Хаббардовскому) взаимодействия (в принципе любого типа), и сохраняющее однопримесную картину DMFT и структуру самосогласованной системы ее уравнений. В DMFT+Σ подходе проведено широкое исследование одночастичных электронных свойств (плотность состояний, спектральная плотность, ARPES спектры, эффективная картина "разрушения" поверхности Ферми) сильно коррелированных систем в псевдощелевом состоянии.
- 6. Предложена точно решаемая упрощенная модель псевдощели, которая способна описать плавный переход от картины "дуг Ферми" при высоких температурах (типичных для большинства ARPES экспериментов) к малым "карманам" поверхности Ферми (наблюдаемым в экспериментах по магнитным квантовым осцилляциям) при низких температурах. Предложен качественный критерий наблюдаемости магнитных осцилляций в псевдощелевом состоянии.

- DMFT+Σ подход развит для расчетов двухчастичных свойств, таких как оптическая проводимость. Исследована продольная оптическая проводимость двумерных сильно коррелированных систем в псевдощелевом состоянии.
- 8. Предложена новая комбинированная расчетная схема LDA+DMFT+ Σ , позволяющая ввести нелокальные псевдощелевые флуктуации в первопринципный подход LDA+DMFT. В таком обобщенном LDA+DMFT+ Σ подходе исследована электронная структура (плотность состояний, спектральная плотность, квазичастичные зоны и затухание, карта поверхности Ферми, оптическая проводимость) в псевдощелевом состояний ряда ВТСП купратов ((Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8- δ}, La_{2-x}Sr_xCuO₄, Nd_{2-x}Ce_xCuO₄, Pr_{2-x}Ce_xCuO₄) и проведено детальное сравнение с экспериментом.
- 9. Предложена простая аналитическая модель многозонного электронного спектра вблизи уровня Ферми для новых ВТСП на основе железа, в рамках которой исследовано влияние на электронную структуру антиферромагнитного рассеяния, как в условиях дальнего порядка в стехиометрическом случае, так и в области возможных флуктуаций антиферромагнитного ближнего порядка в допированных составах. Продемонстрировано возможное псевдощелевое поведение, связанное с частичным "разрушением"поверхности Ферми и перестройкой квазичастичных зон.
- 10. Обобщенный DMFT+Σ подход развит для исследования сильно неупорядоченной модели Хаббарда (модели Андерсона - Хаббарда). В таком подходе исследованы плотность состояний, оптическая проводимость, радиус локализации и построена фазовая диаграмма трехмерной и двумерной сильно коррелированной и сильно неупорядоченной парамагнитной модели Андерсона - Хаббарда. Продемонстрирована возможность восстановления металлического состояния из диэлектрика Мотта - Хаббарда с ростом беспорядка. Показана возможность существования эффективного андерсоновского перехода металл-диэлектрик для

конечных двумерных систем.

- 11. В DMFT+Σ подходе проанализировано оптическое правило сумм. Показано, что общее однозонное правило сумм Кубо выполняется как в модели "горячих точек" для псевдощелевого состояния, так и модели Андерсона–Хаббарда, однако сам оптический интеграл в общем случае зависит от температуры и характерных параметров моделей, таких как ширина псевдощели, корреляционная длина, примесное рассеяние, приводя к эффективному "нарушению" оптического правила сумм. Получены такие зависимости оптического интеграла.
- 12. В DMFT+∑ подходе исследована модель Хаббарда с взаимодействием между сильно коррелированными электронами проводимости и решеткой с дебаевскими или эйнштейновскими фононами. Получены результаты для плотностей состояний и изломов ("кинков") в энергетической дисперсии при различных параметрах модели. Проанализировано взаимовлияние недавно открытых "кинков"чисто электронной природы и обычных фононных "кинков" в электронном спектре. Показано, что наличие фононов сильно затрудняет наблюдение чисто электронных "кинков".

В заключение выражаю глубокую благодарность за постоянную помощь и поддержку М.В.Садовскому, высокая научная требовательность и эрудиция которого во многом определила содержание диссертации.

Автор признателен М.В.Медведеву за постоянный интерес к работе и возможность обсуждения результатов. Автор признателен И.А.Некрасову за введение в широкий круг проблем "ab-initio" расчетов и плодотворное сотрудничество.

Автор признателен также руководству Института электрофизики УрО РАН за создание благоприятных условий для работы.

8 ПРИЛОЖЕНИЯ

А Анализ одномерной модели.

Рассмотрим более подробно использование "анзатца" (39) для оценки вкладов диаграмм высших порядков. Ограничимся анализом одномерной модели [50, 51, 52], поскольку именно в одномерном случае проблема стоит наиболее остро [75]. Нас интересует окрестность "точек" Ферми $+p_F$ и $-p_F$, а гауссовы флуктуации ближнего порядка рассеивают электроны на импульс $Q \sim_{-}^{+} 2p_F$, перебрасывая их с одного конца "линии" Ферми на противоположный, с точностью порядка $\xi^{-1} = \kappa$ [48, 49, 50, 51, 52]. Электронный спектр рассмотрим в линеаризованном приближении: $\xi_{p_+p_F} =_{-}^{+} v_F p$ и, для краткости, полагаем в дальнейшем $v_F = 1$. При этом система состоит из "двух типов" электронов — движущихся "влево" и "вправо". Удобно провести рассмотрение в координатном представлении [75], когда уравнение движения для электронов в рассматриваемой модели принимает вид [297, 75]:

$$\left(i\hat{1}\frac{\partial}{\partial t} - i\hat{\sigma}_3\frac{\partial}{\partial x}\right)\hat{\Psi}(t,x) = \left(\begin{array}{cc}0 & \Delta(x)\\\Delta^{\star}(x) & 0\end{array}\right)\hat{\Psi}(t,x) \tag{411}$$

Ограничимся случаем несоизмеримых флуктуаций, когда $\Delta^{\star}(x) \neq \Delta(x)$. Спинор $\hat{\Psi} = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$ описывает "правые" и "левые" электроны. Флуктуации $\Delta(x)$ считаются гауссовыми с $\langle \Delta(x) \rangle = 0$ и $\langle \Delta^{\star}(x)\Delta(x') \rangle = W^2 exp(-\kappa |x-x'|)$. Свободный пропагатор в частотно-координатном представлении имеет вид:

$$G_0(\varepsilon x) = i\theta(\varepsilon\sigma_3 x)sign(\varepsilon)exp(i\varepsilon\sigma_3 x)$$
(412)

где $\sigma_3 = +1$ для "правых" частиц, $\sigma_3 = -1$ для "левых". Частица, пролетевшая путь длиной l, дает набег фазы $e^{i\varepsilon l}$. При вычислении конкретных диаграмм удобно перейти от интегрирования по координатам вершин взаимодействия x_k к длинам путей l_k , проходимым частицей между актами рассеяния [75]. При этом важно учесть, что эти длины не являются независимыми, поскольку для данной диаграммы всегда фиксировано полное смещение частицы x - x'. Возникающие при этом правила диаграммной техники для вычисления $G(\varepsilon, x - x')$ выглядят следующим образом [75]:

- 1. Сплошной линии длины l_k сопоставляется множитель $-ie^{il_k(\varepsilon-(-1)^kp)}$.
- 2. Волнистой линии (взаимодействия), связывающей вершины *m* и *n* сопоставляется множитель:

$$W^{2}exp(-\kappa|x_{m}-x_{n}|) = W^{2}exp(-\kappa|\sum_{k=m}^{n-1}(-1)^{k}l_{k}|)$$

- 3. По всем l_k проводится интегрирование в пределах от 0 до ∞ .
- 4. По *р* проводится интегрирование с весом $e^{ip(x-x')}/2\pi$.

При вычислении $G(\varepsilon p)$ последнее правило можно просто опустить. Из этих правил видно, что учет конечности корреляционной длины $\xi = \kappa^{-1}$ приводит в каждой диаграмме к некоторому затуханию соответствующей амплитуды перехода с расстоянием, проходимым частицей. Точный учет этого эффекта сложен, но можно провести его оценку как сверху, так и снизу. С одной стороны, имеет место очевидное неравенство:

$$exp\left(-\kappa|\sum_{k=m}^{n-1}(-1)^{k}l_{k}|\right) > exp\left(-\kappa\sum_{k=m}^{n-1}l_{k}\right)$$

$$(413)$$

и используя для линии взаимодействия выражение в правой части (413), мы преувеличиваем величину упомянутого затухания амплитуды перехода (т.е. эффективно преувеличиваем κ). Легко убедиться, что подобное приближение при расчете функции Грина в импульсном представлении соответствует добавлению лишнего слагаемого $i\kappa$ в знаменателе каждой функции Грина, охватываемой линией взаимодействия, и приводит к выражению для любой поправки высшего порядка вида (39) (ср.[75]).

Например, диаграмме Рис.160 соответствует (полагаем $\varepsilon > 0, \ \delta = 0^+$):

$$\Delta G(\varepsilon p) = W^4 \frac{1}{\varepsilon - p + i\delta} \Big(\frac{1}{\varepsilon + p + i\kappa} \frac{1}{\varepsilon - p + 2i\kappa} \frac{1}{\varepsilon + p + i\kappa} \Big) \frac{1}{\varepsilon - p + i\delta}$$
(414)

что аналогично (36),(38). С другой стороны, можно воспользоваться неравенством:

$$exp\left(-\kappa |\sum_{k=m}^{n-1} (-1)^k l_k|\right) < exp\left(-\kappa \sum_{k=m}^{n-1} (-1)^{k-m} l_k\right)$$
(415)



Рис. 160: Диаграмма второго порядка для поправки к функции Грина одномерной модели в координатном представлении.

Использование для линии взаимодействия выражения в правой части (415) приводит к преуменьшению величины затухания соответствующей амплитуды перехода (т.е. эффективно преуменьшает к). В частности, для диаграммы Рис.160 вклад от линий взаимодействия:

$$e^{-\kappa l_2} e^{-\kappa |l_1 - l_2 - l_3|} \to e^{-\kappa l_2} e^{-\kappa (l_1 - l_2 + l_3)} = e^{-\kappa (l_1 + l_3)}$$
(416)

В импульсном представлении это дает:

$$\Delta G(\varepsilon p) = W^4 \frac{1}{\varepsilon - p + i\delta} \left(\frac{1}{\varepsilon + p + i\kappa} \frac{1}{\varepsilon - p + i\delta} \frac{1}{\varepsilon + p + i\kappa} \right) \frac{1}{\varepsilon - p + i\delta}$$
(417)

Анализ любых диаграмм высших порядков показывает, что в этом случае вклады всех диаграмм порядка N равны и в импульсном представлении равны ("анзатц чередующихся κ "):

$$G_N(\varepsilon p) = W^{2N} \frac{1}{(\varepsilon - p + i\delta)^{N+1}} \frac{1}{(\varepsilon + p + i\kappa)^N}$$
(418)

Тогда весь ряд легко суммируется аналогично случаю $\kappa = 0$ [48, 49] и для функции Грина получаем:

$$G^{R}(\varepsilon p) = \sum_{N=0}^{\infty} N! G_{N}(\varepsilon p) = \int_{0}^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} \frac{\varepsilon + p + i\kappa}{(\varepsilon - p + i\delta)(\varepsilon + p + i\kappa) - \zeta W^{2}}$$
(419)

Отсюда легко рассчитать соответствующую спектральную плотность или одночастичную плотность состояний:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N(E_F)} = \frac{v_F \kappa}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} \frac{\zeta W^2}{(\varepsilon^2 - \xi_p^2 - \zeta W^2)^2 + (v_F \kappa)^2 (\varepsilon - \xi_p)^2}$$
(420)

где восстановили в явном виде v_F. На Рис.161 проводится сравнение плотностей состояний при различных значениях κ (корреляционной длины), рассчитанных с помощью "анзатца чередующихся κ " и рекуррентного соотношения типа (39) в одномерной модели [50, 51, 52]. Видим, что результаты количественно близки практически во всей области изменения κ . Поскольку, как отмечено выше, наш основной "анзатц" (39),(414) несколько преувеличивает роль конечности κ , а "анзатц чередующихся κ " (417) недооценивает ее, нетрудно понять, что точное значение плотности состояний мало отличается от полученных с помощью этих двух аппроксимаций вкладов диаграмм высших порядков. Аналогичная ситуация имеет место и для спектральных плотностей. Фактически, это означает, что результаты для основных физических величин, определяющихся одноэлектронной функции Грина, не очень сильно зависят от того, как конечные κ входят в выражения для диаграмм высших порядков. Главное — это учет (хотя-бы приближенный) всех диаграмм теории возмущений с учетом различной их комбинаторики. В принципе, это не очень удивительно, поскольку основной эффект образования псевдощели связан с рассеянием "назад" на вектор $Q \sim 2p_F$, которое учитывается точно в пределе $\xi \to \infty$, тогда как эффект конечных к сводится к учету некоторой дополнительной слабой модуляции случайного поля, приводящей к затуханию его коррелятора и замытию псевдощели.

Естественно, что "анзатц чередующихся к" может быть записан в виде рекуррентного соотношения типа (41) и для двумерных моделей, обсуждавшихся в основной части статьи. Например, в модели "горячих точек" имеем:

$$\Sigma_k(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) = W^2 \frac{s(k)}{i\varepsilon_n - \xi_k + i\alpha_k v_k \kappa - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}})}$$
(421)

где $\alpha_k = 1$ для нечетных k и $\alpha_k = 0$ для четных k. Остальные обозначения приведены в основном тексте. Данные для плотности состояний, полученные с помощью (421)



Рис. 161: Одноэлектронная плотность состояний в одномерной модели при различных значениях параметра $v_F \kappa / W$: (1)—0.1; (2)—0.8; (3)—1.2. Сплошные линии — результат расчета по формулам типа (39),(41) [50], пунктирные кривые — результат расчета по (420).

приведены выше на Рис.22 и подтверждают сделанные здесь утверждения. Выражение, аналогичное (421), легко выписать и для модели SC-флуктуаций.

Подчеркнем, что "анзатц чередующихся κ " является достаточно формальным и используется нами только для того, чтобы показать, что это достаточно произвольное "приближение", недооценивающее роль конечности κ в диаграммах высших порядков, приводит к результатам, количественно мало отличающимся от полученных с помощью "анзатца накапливающихся κ " (39),(414), который эту роль в общем случае переоценивает. Это последнее приближение, использованное в [50, 51, 52, 297], и в основной части данной статьи, имеет гораздо более глубокий смысл. Как уже отмечалось выше, это приближение является просто точным в окрестности "горячих точек" при значениях параметров "затравочного" спектра t,t' и μ (топологиях поверхности Ферми), обеспечивающих равенство знаков проекций скоростей в "горячих точках", связанных вектором **Q**. Аналогичным образом, в одномерной модели не представляет труда получить для вклада диаграмм высших порядков выражение типа (39) или (414), если рассмотреть модель коррелятора флуктуаций ближнего порядка с максимумом при произвольном векторе рассеяния Q, существенно меньшим p_F , так чтобы (при достаточно больших корреляционных длинах ξ) электроны рассеивались флуктуациями, оставаясь все время на одной ("правой" или "левой") ветви спектра. При этом выражения типа (414) являются точными. После этого в полученных *ответах* для вкладов диаграмм высших порядков можно провести *продолжение* на интересующие нас $Q \sim 2p_F$, поскольку зависимость от Q входит уже только через исходный спектр электронов. Такой же подход легко осуществить меняя подходящим образом химпотенциал μ (заполнение зоны).

В Комбинаторика фейнмановских диаграмм в задачах с гауссовым случайным полем.

Методы суммирования фейнмановских диаграмм широко используются при рассмотрении обширного класса задач теоретической физики, в которых изучается распространение элементарных возбуждений (квазичастиц) в статических случайных полях, создаваемых теми или иными неоднородностями. Простейший пример такой системы представляет электрон, распространяющийся в системе примесных атомов. Именно для этой задачи, по-видимому впервые, была сформулирована диаграммная техника, рассматриваемая в данной работе [298, 119]. Аналогичная техника используется при рассмотрении задач статистической радиофизики и оптики, связанных с распространением электромагнитных волн в неупорядоченных средах [299]. Эквивалентный математический подход применим для ряда задач теории критических явлений в неупорядоченных системах [300], в задаче о полимерной цепи с "исключенным объемом" и других проблемах физики полимерных систем [301]. Точно такая же диаграммная техника описывает регулярную модель критических явлений с нулькомпонентным параметром порядка [300].

При рассмотрении задач, связанных с суммированием фейнмановских диаграмм, чрезвычайно полезной является любая информация о комбинаторике графиков, то



Рис. 162: Диаграмный ряд для усредненной одночастичной функции Грина (а) и собственно-энергетической части (b). Пунктирной линии соответствует среднеквадратичный коррелятор случайного поля. G₀ – свободная функция Грина.

есть о числе диаграмм того или иного типа в данном порядке теории возмущений. В настоящей работе мы подробно исследуем вопрос о комбинаторике диаграмм в упомянутом классе задач.

В.1 Производящая функция числа "скелетных" диаграмм. Рекуррентное соотношение.

Для определенности будем обсуждать задачу об электроне с энергией *E* и импульсом **p**, распространяющемся в гауссовском случайном поле (системе случайных примесей) [298, 119]. Усредненная одночастичная функция Грина определяется диаграммным рядом, показанным на Рис. 162(а). Стандартным образом это разложение сводится к дайсоновскому виду:

$$G(E,p) = \frac{1}{E - \varepsilon_p - \Sigma(E,p)}$$
(422)

где $\varepsilon_p = \frac{p^2}{2m}$ спектр свободного электрона, а собственно-энергетическая часть $\Sigma(E, p)$ определяется "скелетными" графиками Рис. 162(b), в которых внутренняя электронная линия представляет полную ("одетую") функцию Грина G(E, p).

Полное число графиков в *N*-м порядке теории возмущений в разложении Рис. 162(а), как легко видеть, равно:

$$G_N = (2N-1)!! = \frac{(2N-1)!}{2^{N-1}(N-1)!}$$
(423)

что просто определяется числом способов соединить 2N вершин N примесными линиями. Задача определения аналогичного числа графиков Σ_N в разложении Puc. 162(b) существенно сложнее и точный ответ, насколько нам известно, в литературе отсутствует. В работе [302] было найдено простое неравенство:

$$(2N-1)!! > \Sigma_N > (2N-3)!! \tag{424}$$

которое дает лишь достаточно грубую оценку величины Σ_N . Как мы увидим задача может быть решена точно. Это сразу же следует из точного решения задачи об электроне в случайном потенциале $V(\mathbf{r}) = V$, где величина V не зависит от пространственной координаты \mathbf{r} , но распределена по Гауссу с шириной распределения $\langle V^2 \rangle = W^2$. Естественно, что в этом случае диаграммная техника имеет стандартный вид Рис. 162, а каждая линия примесного взаимодействия передает нулевой импульс, то есть ей сопоставляется (в импульсном представлении) коррелятор $(2\pi)^d W^2 \delta(\mathbf{q})$ (d – размерность пространства) [303, 304]. Все вклады одного порядка в разложении Рис. 162(а) оказываются одинаковыми и ряд для функции Грина представляется в виде [303]:

$$G(E,p) = G_0(E,p) \left\{ 1 + \sum_{N=1}^{\infty} (2N-1)!! G_0^{2N}(E,p) W^{2N} \right\}$$
(425)

Тогда с использованием представления:

$$(2N-1)!! = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt t^{2N-2} e^{-\frac{t^2}{2}}$$
(426)

ряд (425) элементарно суммируется и мы получаем: ⁷²

$$G(E,p) = \frac{1}{W}\Psi\left(\frac{1}{WG_0(E,p)}\right)$$
(427)

где ввели функцию:

$$\Psi(z) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{t^2}{2}} \frac{1}{t-z}$$
(428)

⁷²С математической точки зрения это означает суммирование по Борелю.

Рассмотрим собственно-энергетическую часть, соответствующую функции Грина (427). Поскольку добавление примесной линии приводит в этой задаче просто к дополнительному множителю W^2G^2 , собственно-энергетическая часть, определяемая разложением Рис. 162(b) может быть записана в виде:

$$\Sigma = Q(W^2 G^2) W^2 G \tag{429}$$

где Q(x) – некоторая функция. Мы увидим, что эта функция является производящей функцией числа "скелетных" графиков для собственно-энергетической части, то есть ее коэффициенты разложения в ряд Тейлора дают искомые числа Σ_N.

Запишем уравнение Дайсона для рассматриваемой задачи:

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G = G_0 \left(1 + Q(W^2 G^2) W^2 G^2 \right)$$
(430)

Вводя $z = (WG_0)^{-1}$ и $y = W^2G^2$ из (427) и (430) получаем следующее параметрическое представление Q(y):

$$1 + yQ(y) = z\Psi(z) = z\sqrt{y}$$
$$y = \Psi^{2}(z)$$
(431)

Такое представление функции Q является достаточно неудобным. Покажем, что для нее можно получить дифференциальное уравнение. Нетрудно убедиться, что функция $\Psi(z)$ удовлетворяет обычному дисперсионному соотношению:⁷³

$$Re\Psi(z) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{Im\Psi(t)}{t-z}; \qquad \frac{1}{\pi} Im\Psi(t) = \mp \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{t^2}{2}}$$
(432)

из которого немедленно следует, что $\Psi(z)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению:

$$\frac{d\Psi}{dz} = 1 - z\Psi \tag{433}$$

⁷³Знак мнимой части определяется рассмотрением запаздывающей или опережающей функции Грина.

с начальным условием:

$$\Psi(z=\pm i0) = \mp i\sqrt{\frac{\pi}{2}} \tag{434}$$

Дифференцируя первое уравнение в (431) по у, получаем:

$$\frac{dz}{dy} = \frac{1}{2}y^{-\frac{3}{2}} \left\{ 2y^2 \frac{dQ(y)}{dy} + yQ(y) - 1 \right\}$$
(435)

Дифференцируя второе уравнение в (431) по z, с использованием (433), имеем:

$$\frac{dy}{dz} = 2\Psi(z)\frac{d\Psi(z)}{dz} = 2\Psi(z)(1 - z\Psi(z)) = -2y^{\frac{3}{2}}Q(y)$$
(436)

Сравнивая (435) и (436) получаем нелинейное дифференциальное уравнение для Q(y):

$$\frac{dQ(y)}{dy} = \frac{1}{2y^2} \left\{ 1 - Q^{-1}(y) + yQ(y) \right\}$$
(437)

Используя (431) и (434), получаем $y = \Psi^2(z)|_{z=\pm i0} = -\frac{\pi}{2}$, так что

$$Q(-\frac{\pi}{2}) = \left. \frac{z\Psi(z) - 1}{y} \right|_{z=\pm i0} = \frac{2}{\pi}$$
(438)

что является начальным условием для уравнения (437). Заметим, что точка Q(0) = 1, с очевидностью следующая из диаграммного представления для Σ , является для уравнения (437) особой и не может служить начальным условием.

Уравнение (437) можно переписать в виде более удобном для дальнейшего анализа:

$$Q(y) = 1 + y\frac{d}{dy}yQ^2(y) \tag{439}$$

Нас интересует разложение Q(y) в ряд Тейлора:

$$Q(y) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n y^n \tag{440}$$

N	$\Gamma_N = a_N$	$b_N = a_N/(2N+1)!!$	$\Sigma_N = a_{N-1}$	$\mathbf{U}_N = (2N-1)a_{N-1}$
1	1	0.3333	1	1
2	4	0.2667	1	3
3	27	0.2571	4	20
4	248	0.2624	27	189
5	2830	0.2722	248	2232
6	38232	0.2829	2830	3130
7	593859	0.2930	38232	497016
8	10401712	0.3019	593859	8907885
9	202601898	0.3158	10401712	176829104
10	4342263000	0.3211	202601898	3849436062
$N \gg 1$	$\frac{1}{e}\left[1-\frac{5}{4N}\right](2N+1)!!$	$\frac{1}{e}[1-\frac{5}{4N}]$	$\frac{1}{e}\left[1-\frac{5}{4N}\right](2N-1)!!$	$\frac{1}{e}\left[1-\frac{9}{4N}\right](2N+1)!!$

Таблица 7: *а*_N и числа графиков различного типа.

Поскольку число "скелетных" диаграмм N-го порядка для собственно-энергетической части является просто коэффициентом при W^{2N} в разложении Σ в ряд по степеням W^2 , легко видеть, что выражение (429) дает искомое Σ_N в виде:

$$\Sigma_N = a_{N-1} \tag{441}$$

Это и означает, что функция Q(y) является производящей функцией для интересующих нас комбинаторных факторов Σ_N .

Подстановка (440) в (439) приводит к следующему рекуррентному соотношению для коэффициентов *a_n*:

$$a_n = n \sum_{m=0}^{n-1} a_m a_{n-1-m} \tag{442}$$

где $a_0 = 1$. Из равенства $a_0 = 1$ сразу следует Q(0) = 1. Именно в этом смысле данная точка является особой – равенство Q(0) = 1 выполняется для любых начальных условий, при которых уравнение (439) имеет решение.

Из (442) нетрудно найти значения a_n при малых n, соответствующие результаты приведены в Таблице 7.

Зная комбинаторику диаграмм для собственно-энергетической части нетрудно воспроизвести и комбинаторику для двухчастичной функции Грина – как для полной вершинной части Г, так и для неприводимой вершины U, диаграммное разложение для которых приведено на Рис. 163. Действительно собственно-энергетическая часть



Рис. 163: Диаграммный ряд для полной вершинной части Γ (a), для неприводимой вершины U (b), и уравнение Бете-Солпитера, связывающее Γ и U (c)



Рис. 164: Уравнение, связывающее собственно-энергетическую часть с полной вершиной.

Σ связана с полной вершиной Г уравнением, графически представленным на Рис. 164. Для задачи с нулевым передаваемым импульсом [303, 304] это уравнение имеет вид:

$$\Sigma = W^2 G (1 + G^2 \Gamma) \tag{443}$$

Поэтому для числа диаграмм N-го порядка в полной вершине Γ_N сразу же получаем:

$$\Gamma_N = \Sigma_{N+1} = a_N \tag{444}$$

Таким образом, функция Q(y) является производящей функцией и для числа диаграмм полной вершинной части.

Число диаграмм *N*-го порядка для неприводимой вершины *U_N* может быть легко



Рис. 165: Разрыв любой из 2*N* – 1 внутренних линий функций Грина в "скелетной" диаграмме *N*-го порядка для собственно-энергетической части порождает соответствующую диаграмму для *U*.
получено, если заметить, что разрыв любой из 2N - 1 внутренних линий Грина в диаграмме для собственно-энергетической части *N*-го порядка порождает соответствующую диаграмму для вклада *N*-го порядка в неприводимую вершину *U* (Рис. 165). Поэтому:

$$U_N = (2N - 1)\Sigma_N = (2N - 1)a_{N-1} \tag{445}$$

В Приложении I. В мы еще раз выводим дифференциальное уравнение (439) для производящей функции Q(y), используя только уравнение Бете-Солпитера, связывающее U и Г, и тождество Уорда, без использования явного вида функции Грина (427).

В.2 Асимптотика для числа диаграмм при больших *N*.

В пределе высоких порядков $N \gg 1$ использование рекуррентного соотношения (442) становится неудобным, ввиду факториального роста числа диаграмм [302]. В тоже время, факт факториального роста можно использовать для существенного упрощения задачи. Перепишем (442) в виде:

$$a_n = 2na_0a_{n-1} + 2na_1a_{n-2} + 2na_2a_{n-3} + \cdots$$
(446)

где $a_0 = 1, a_1 = 1, a_2 = 4$. Естественно предположить, что в пределе больших nимеем $a_n \approx (2n + \beta)a_{n-1}$, тогда $a_{n-2} \approx \frac{a_{n-1}}{2n-2+\beta}$ и т.д. Подстановка этих выражений в (446) сразу дает $\beta = 1$ и

$$a_n = (2n+1+O(\frac{1}{n}))a_{n-1} \tag{447}$$

Это означает, что в пределе больших n число $a_n \sim (2n+1)!!$. Определим b_n как:

$$b_n = \frac{a_n}{(2n+1)!!} \tag{448}$$

Подставляя (448) в (442) получаем рекуррентное соотношение для b_n :

$$b_n = n \sum_{m=0}^{n-1} \frac{(2m+1)!!(2n-2m-1)!!}{(2n+1)!!} b_m b_{n-1-m}$$
(449)

причем $b_0 = 1$. В пределе больших n и с учетом $b_1 = \frac{1}{3}$, $b_2 = \frac{4}{15}$, ограничиваясь точностью порядка b/n^2 (где $b \sim b_n \sim b_{n-1} \sim b_{n-2} \sim b_{n-3}$), получаем:

$$\Delta b_n = b_n - b_{n-1} = \frac{5}{4} \frac{b_{n-1}}{n^2} + O(\frac{b}{n^3}) \tag{450}$$

Таким образом, для b_n в пределе больших n можно написать следующее дифференциальное уравнение:

$$\frac{db_n}{dn} = \frac{5}{4}\frac{b_n}{n^2} + O(\frac{b}{n^3}) \tag{451}$$

из которого сразу же следует:

$$b_n = b \cdot exp\left(-\frac{5}{4}\frac{1}{n} + O(\frac{1}{n^2})\right) = b\left\{1 - \frac{5}{4}\frac{1}{n} + O(\frac{1}{n^2})\right\}$$
(452)

Естественно, что на основании такого анализа невозможно определить константу $b = \lim_{n\to\infty} b_n$. Численный анализ поведения b_n с использованием рекуррентного соотношения (449) полностью подтверждает зависимость (452) (см.Рис. 166) и дает $b = \frac{1}{e} = 0.36787944 \cdots$ (вычисления проводились до n = 5000, что обеспечивает указанную точность). Нам неизвестен аналитический способ получения этого любопытного результата.

Окончательно, асимптотики числа диаграмм разных типов при больших Nимеют вид:74

$$\Sigma_N = a_{N-1} = b_{N-1}(2N-1)!! = \frac{1}{e} \left\{ 1 - \frac{5}{4} \frac{1}{N} + O(\frac{1}{N^2}) \right\} (2N-1)!! = \frac{1}{\sqrt{\pi}e} \left\{ 1 - \frac{5}{4} \frac{1}{N} + O(\frac{1}{N^2}) \right\} 2^N \Gamma(N + \frac{1}{2})$$
(453)

⁷⁴ Асимптотика типа (453) $\Sigma_N \approx c 2^N \Gamma(N + \beta)$ была получена в работе [302] методом Липатова, однако коэффициенты *с* и β не были найдены.



Рис. 166: Поведение b_n с ростом n. Точки соответствуют значениям b_n , полученным из рекуррентного соотношения (449), кривая соответствует асимптотической зависимости $\frac{1}{e}\left(1-\frac{5}{4}\frac{1}{n}\right)$, пунктир – асимптотике $\frac{1}{e}$.

$$\Gamma_{N} = a_{N} = \frac{1}{e} \left\{ 1 - \frac{5}{4} \frac{1}{N} + O(\frac{1}{N^{2}}) \right\} (2N+1)!! = \frac{1}{\sqrt{\pi}e} \left\{ 1 - \frac{5}{4} \frac{1}{N} + O(\frac{1}{N^{2}}) \right\} 2^{N+1} \Gamma(N + \frac{3}{2})$$
(454)

$$U_{N} = (2N-1)a_{N-1} = \frac{1}{e} \left\{ 1 - \frac{5}{4} \frac{1}{N} + O(\frac{1}{N^{2}}) \right\} (2N-1)(2N-1)!! = \frac{1}{e} \left\{ 1 - \frac{9}{4} \frac{1}{N} + O(\frac{1}{N^{2}}) \right\} (2N+1)!! = \frac{1}{\sqrt{\pi}e} \left\{ 1 - \frac{9}{4} \frac{1}{N} + O(\frac{1}{N^{2}}) \right\} 2^{N+1} \Gamma(N + \frac{3}{2}) (455)$$

Интересно отметить, что:

$$\frac{\Sigma_N}{G_N} = b_{N-1} = \frac{1}{e} \left\{ 1 - \frac{5}{4} \frac{1}{N} + O(\frac{1}{N^2}) \right\} \to \frac{1}{e}$$
(456)

$$\frac{U_N}{\Gamma_N} = 1 - \frac{1}{N} + O(\frac{1}{N^2}) \to 1$$
(457)

В Таблице 7 приведена сводка основных результатов для числа графиков различного типа.

В.3 Электрон в гауссовом случайном поле с коррелятором типа "белого шума".

В качестве примера практического использования полученных выше результатов рассмотрим задачу об электроне в гауссовском случайном поле с коррелятором типа "белого шума", когда примесной линии взаимодействия сопоставляется выражение [298, 119, 305]:

$$w(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) = W^2 \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4)$$
(458)

где $W^2 = \rho V^2$, ρ – плотность примесных атомов, V – борновская амплитуда рассеяния на точечной примеси. Хорошо известно, что основные трудности в этой задаче возникают в области энергий, определяемой условием [305]:

$$|E| \stackrel{<}{\sim} \gamma(E)$$
 или $|E| \stackrel{<}{\sim} E_{sc}$ (459)

где $\gamma(E) = \pi \rho V^2 N(E)$ – борновское "затухание" (N(E) – плотность состояний, соответствующих энергии E), $E_{sc} \sim m^{\frac{d}{4-d}} (\rho V^2)^{\frac{2}{4-d}}$ – характерный размер "критической" области вблизи края зоны, где возникает сильное рассеяние. Эти трудности связаны, главным образом, с невозможностью отбора какой-либо доминирующей последовательности фейнмановских диаграмм, аналогично тому, как это делается в области слабого рассеяния $E \gg \gamma(E)$, $E \gg E_{sc}$ [298, 119] ⁷⁵. Фактически все диаграммы для собственно-энергетической части становятся в области $|E| \stackrel{<}{\sim} E_{sc}$ одного порядка и должны учитываться.

В терминах "скелетных" графиков ряд теории возмущений для собственно - энергетической части представлен на Рис. 162(b). Все графики 3-го порядка в этом разложении оказываются равными друг другу (Приложение II. В). Несмотря на то, что такое равенство нарушается уже в следующем порядке, представляется разумным сформулировать приближение, в котором *предполагается равенство* всех графиков

⁷⁵В этом случае доминирующими являются "неперекрещивающиеся" графики, так что можно учесть только первую диаграмму на Рис. 162(b).



Рис. 167: Плотность состояний в одномерной системе при различных значениях среднего квадрата случайного поля $\frac{W^2(2m)^{\frac{1}{2}}}{E_0^{\frac{3}{2}}}$: 1. 0.25; 2. 2; 3. 16. Непрерывные кривые точное решение, пунктирные – самосогласованное борновское приближение (478). Энергия приведена в единицах E_0 , плотность состояний в единицах $\frac{\sqrt{2m}}{\sqrt{E_0}}$, где E_0 – произвольное.

такого типа в каждом порядке теории возмущений. Такое приближение должно давать неплохие результаты, прежде всего, в "критической области" $|E| \stackrel{<}{\sim} E_{sc}$, где все вклады имеют, по крайней мере, один и тот же порядок величины. Выберем в качестве "базового" графика в каждом порядке "максимально перекрестный" типа показанного последним на Рис. 163(b). Входящая в него последовательность линий взаимодействия, для систем, инвариантных относительно обращения времени, может быть преобразована в "лестницу" разворотом одной из электронных линий (например, нижней). Тогда полный ряд для собственно-энергетической части, в нашем приближении, представляется в виде ⁷⁶:

⁷⁶Отметим, что стандартное приближение когерентного потенциала (CPA), в котором собственноэнергетическая часть локальна и является функционалом лишь от $\tilde{G} = \sum_{\mathbf{p}} G(\mathbf{p})$, на таком языке сводится к выражению $\Sigma = W^2 \tilde{G}Q(W^2 \tilde{G}^2)$

$$\Sigma(p) = \sum_{n=1}^{\infty} W^2 \Sigma_n \sum_{\mathbf{p}_1} \sum_{\mathbf{p}_2} \left[W^2 G(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}) G(-\mathbf{p}_2) \right]^{n-1} G(\mathbf{p}_1) = = \sum_{\mathbf{p}_1} W^2 Q \left[W^2 \sum_{\mathbf{p}_2} G(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}) G(\mathbf{p}_2) \right] G(\mathbf{p}_1)$$
(460)

где воспользовались определениями (440) и (441), а также тем, что в изотропной системе $G(\mathbf{p}) = G(-\mathbf{p})$. Соответственно, получаем замкнутое уравнение для усредненной одночастичной функции Грина в виде:

$$G^{-1}(p) = G_0^{-1}(p) - W^2 \sum_{\mathbf{q}} Q \left[W^2 \sum_{\mathbf{p}_1} G(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}) G(\mathbf{p}_1) \right] G(\mathbf{p} + \mathbf{q})$$
(461)

где $G_0^{-1}(p) = E - \frac{p^2}{2m}$. Вся нетривиальная часть рассматриваемой задачи выражается теперь с помощью рассмотренной выше производящей функции Q(y), которая определяет "ядро" сложного нелинейного интегрального уравнения (461). Естественно, ограничение первым членом разложения (440) дает Q = 1 и (461) сводится к стандартной задаче суммирования "неперекрещивающихся" графиков [298, 119]. Очевидным преимуществом результата (461) по сравнению со стандартным подходом [298, 119], основанным на выделении доминирующей последовательности диаграмм (например, учет лишь первого графика на Рис. 162(b)), является формальный учет *всех* диаграмм, сделанный, однако, в приближении равенства всех "скелетных" графиков для собственно-энергетической части в данном порядке теории возмущений.

Уравнение (461) является чрезвычайно сложным нелинейным интегральным уравнением, решение его в общем виде невозможно, тем более, что мы не знаем общий вид функции Q(y) (которая к тому же входит в (461) как функция комплексного аргумента). Ниже мы ограничимся некоторым качественным анализом возникающих из (461) следствий. Запишем (461) в компактном виде как:

$$G^{-1}(p) = G_0^{-1}(p) - W^2 Q \left[W^2 G \otimes G \right] \otimes G$$
(462)

где ввели обобщенное произведение (свертку) функций:

$$F \otimes \Phi = \sum_{\mathbf{p}} F(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \Phi(\mathbf{p})$$
(463)

и вернемся к системе уравнений (431), определяющей функцию Q параметрически. Второе уравнение в (431) записывается теперь как:

$$G \otimes G = \frac{1}{W^2} \Psi^2(z) \tag{464}$$

Выше мы видели, что в задаче с нулевым передаваемым импульсом $z = W^{-1}G_0^{-1}$. Рассмотрим в (464) предел $W \to 0$. Тогда левая часть (464) сводится к $G_0 \otimes G_0$, а в правой части можно по аналогии с задачей с нулевым передаваемым импульсом предположить $z \sim W^{-1}$ и воспользоваться легко устанавливаемой асимптотикой $\Psi(z) \approx \frac{1}{z}$ при $|z| \gg 1$. Здесь есть некоторая некорректность, поскольку точный вид $\Psi(z)$:

$$\Psi(z) = R(z) \mp i \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-\frac{z^2}{2}}$$
(465)

где для R(z) имеется асимптотическое разложение вида:

$$R(z) = e^{-\frac{z^2}{2}} \int_{0}^{z} e^{\frac{t^2}{2}} dt = \frac{1}{z} + \frac{1}{z^3} + \frac{3}{z^5} + \dots \qquad \left(-\frac{\pi}{4} < \arg z < \frac{\pi}{4}\right)$$
(466)

Мы пользуемся асимптотикой $\Psi(z) \approx \frac{1}{z}$, что не вполне верно, однако результаты, получающиеся при использовании этого приближения, подтверждаются при более корректном, но гораздо более громоздком анализе. Таким образом, в пределе $W \to 0$, (464) сводится к:

$$G_0 \otimes G_0 = \frac{1}{W^2 z^2}$$
 или $z = \frac{1 + O(W^2)}{W\sqrt{G_0 \otimes G_0}}$ (467)

Соответственно, в пределе $W \to 0$ вместо (464) можно написать:

$$G \otimes G = \frac{1}{W^2} \Psi^2 \left(\frac{1}{W\sqrt{G_0 \otimes G_0}} \right) \tag{468}$$

Рассмотрим область энергий E < 0, где возникает флуктуационный "хвост" плотности состояний [305, 306]. В этом случае из (467) очевидно имеем $z \in Re$. С помощью (465) и (467) из (468) получаем:

$$G \otimes G \approx G_0 \otimes G_0 - i \frac{2}{W} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sqrt{G_0 \otimes G_0} exp \left\{ -\frac{1}{2W^2 G_0 \otimes G_0} \right\}$$
(469)

где, как мы сейчас увидим, второе слагаемое и порождает флуктуационный "хвост" плотности состояний. Воспользовавшись $\sum_{\mathbf{q}} G \otimes G = \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{q}} G(\mathbf{p}-\mathbf{q})G(\mathbf{p}) = \left(\sum_{\mathbf{p}} G(p)\right)^2$, из (469) немедленно получаем плотность состояний в виде:

$$N(E) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{p}} ImG^{R}(E, p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}W} \frac{\sum_{\mathbf{q}} \sqrt{G_{0} \otimes G_{0}} exp\left\{-\frac{1}{2W^{2}G_{0} \otimes G_{0}}\right\}}{\left|\sum_{\mathbf{p}} G_{0}(E, p)\right|}$$
(470)

Далее все определяется конкретным видом $G_0 \otimes G_0$ в пространствах различной размерности, знаменатель в (470) легко вычисляется в общем случае как:

$$\left|\sum_{\mathbf{p}} G_0(E,p)\right| = S_d \int_0^{p_0} dp p^{d-1} \frac{1}{|E| + \frac{p^2}{2m}}$$
(471)

где $S_d = 2^{-(d-1)} \pi^{d/2} \frac{1}{\Gamma(d/2)}$, а величина p_0 – параметр обрезания, порядка обратного межатомного расстояния [305], который необходимо ввести для $d \ge 2$ (для d = 1 в (471) можно продлить интегрирование до бесконечности). Величина E в (471) обозначает перенормированную энергию, отсчитанную от края зоны, рассчитанного в "однопетлевом" приближении [305], учитывающем расходящийся в пределе $p_0 \to \infty$ (для $d \ge 2$) сдвиг этого края. Интеграл в (471) элементарно вычисляется для любых значений d.

В одномерном (d = 1) случае все интегралы, входящие в (470) вычисляются точно. После довольно громоздких, но достаточно элементарных, расчетов получаем (Приложение III. В)

$$N(E) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2m}{|E|}} exp\left\{-\sqrt{2}\frac{|E|^{\frac{3}{2}}}{m^{\frac{1}{2}}W^{2}}\right\}$$
(472)

Величина показателя экспоненты в (472) отличается от известного точного результата Гальперина [307] (см. также Гл.II в [306]) отсутствием множителя $\frac{4}{3}$. Предэкспонента в (472) также отличается от точной, которая $\sim \frac{|E|}{W^2}$ [307]. Тем не менее, качественно поведение "хвоста" плотности состояний воспроизводится в нашем приближении достаточно удовлетворительно. Напомним, в связи с этим, распространенное мнение, что "хвост" плотности состояний вообще не может быть получен по теории возмущений.

Аналогичные (но уже приближенные) вычисления плотности состояний согласно (470) для *d* = 3 (Приложение IV. В) дают:

$$N(E) = \frac{\pi^2}{12} (2m)^{\frac{3}{4}} \frac{|E|^{\frac{5}{4}}}{E_0^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{W} exp\left\{-\sqrt{2\pi} \frac{|E|^{\frac{1}{2}}}{m^{\frac{3}{2}}W^2}\right\}$$
(473)

где ввели "энергию обрезания" $E_0 = \frac{p_0^2}{2m}$ [305]. Показатель экспоненты здесь опять с точностью до константы совпадает с известными результатами непертурбативного инстантонного подхода [305, 308, 309, 310]. Предэкспонента (473) не совпадает ни с одним из известных вариантов, полученных в цитированных работах. Тем не менее, в целом результат (473) также достаточно удовлетворительный, с учетом приближенного характера уравнения (461).

Особый интерес представляет анализ следствий из уравнения (461) в области "сильной связи" [305], определяемой условием (459), то есть в окрестности края исходной зоны, где происходит переход от распространенных к локализованным состояниям. В этой области есть все основания полагать, что приближение равных вкладов в собственно-энергетическую часть в данном порядке теории возмущений может оказаться хорошим просто в силу известного факта их равенства по порядку величины. Сильное условие типа (459), очевидно, эквивалентно переходу к пределу $W \rightarrow \infty$. В этом пределе, в "нулевом" приближении, в уравнении (462) можно пренебречь первым слагаемым в правой части, по сравнению со вторым, и записать:

$$G^{-1}(p) = -W^2 Q \left[W^2 G \otimes G \right] \otimes G \tag{474}$$

Убедимся, что это соответствует пределу $z = \pm i0$ в (464) или $y = -\frac{\pi}{2}$ в (431). В этом случае (464) сводится к:

$$W^2 G \otimes G = \Psi(z = \pm i0) = -\frac{\pi}{2} \tag{475}$$

а из (438) имеем:

$$Q\left[W^2 G \otimes G\right] = \frac{2}{\pi} \tag{476}$$

Формальное решение (475) имеет вид:

$$G = \pm i \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{W\sqrt{\aleph}} \tag{477}$$

где $\aleph = \sum_{\mathbf{p}} 1$ – число состояний в зоне. Прямой подстановкой (477) и (476) в (474) легко убедится, что это уравнение удовлетворяется. Таким образом в "первом" приближении, в пределе $W \to \infty$ можно записать функцию Грина (462) в виде:

$$G(p) = \frac{1}{G_0^{-1}(p) - \frac{2}{\pi} W^2 \sum_{\mathbf{p}} G(p)}$$
(478)

что удивительным образом совпадает с результатом самосогласованного борновского приближения (первая диаграмма на Рис. 162(b) или Рис. 164) [298, 119], с точностью до "лишнего" множителя $\frac{2}{\pi}$. Очевидным образом (478) приводит к плотности состояний борновского приближения $N_0(E)$ практически совпадающей для d = 3 с плотностью состояний модели свободных электронов (с учетом однопетлевого сдвига края зоны). На Рис. 167 приведено сравнение результатов, следующих из (478), для плотности состояний в одномерной (d = 1) системе с точным результатом Гальперина [307], демонстрирующее удовлетворительное совпадение этих результатов в области "сильной связи" $|E| < E_{sc} \sim m^{\frac{1}{3}}W^{\frac{4}{3}}$, ширина которой растет с ростом W. Следует отметить, что хотя "хвост" плотности состояний подавляется с ростом W (см.(472)), однако растет промежуточная область, где $|E| \sim E_{sc}$.

Возможно, что результат типа (478) позволяет качественно оправдать использование простейшего борновского приближения для одноэлектронной функции Грина

в подходах типа самосогласованной теории локализации [305, 255] – порог подвижности возникает в области "сильной связи" $|E| \stackrel{<}{\sim} E_{sc}$ (459), где приближение (478) оказывается достаточно удовлетворительным и функция Грина действительно имеет простой борновский вид.

Приведенные результаты демонстрируют эффективность использования комбинаторики графиков, рассмотренной в данной работе, для формулировки новых приближений в реальных физических задачах.

Приложение I. В

Приведем вывод уравнения (439) для производящей функции Q(y) без использования явного вида одночастичной функции Грина (427). В задачах с нулевым передаваемым импульсом уравнение Бете-Солпитера Рис. 163(с) имеет вид:

$$\Gamma = U + UG^2 \Gamma \tag{479}$$

Так, что

$$\Gamma = \frac{U}{1 - UG^2} \tag{480}$$

Используя (480) и (443) получаем уравнение, связывающее собственно-энергетическую часть с неприводимой вершиной *U*:

$$\Sigma = \frac{W^2 G}{1 - U G^2} \tag{481}$$

Воспользуемся "тождеством Уорда":

$$W^2 \left. \frac{\partial}{\partial W} \right|_G \frac{\Sigma}{W} = UG \tag{482}$$

в справедливости которого нетрудно убедиться с помощью (429) и (445), и уравнением (481), чтобы записать:

$$W^{2} \frac{\partial}{\partial W} \bigg|_{G} \frac{\Sigma}{W} = UG = \frac{1}{G} \left\{ 1 - W^{2} \frac{G}{\Sigma} \right\}$$

или $\Sigma = W^{2}G + W^{2}G\Sigma \frac{\partial}{\partial W} \bigg|_{G} \frac{\Sigma}{W}$ (483)

Используя (429), получаем искомое дифференциальное уравнение для Q:

$$\begin{split} Q(W^2 G^2) &= 1 + W^2 G Q(W^2 G^2) \left. \frac{\partial}{\partial W} \right|_G W G Q(W^2 G^2) = \\ &= 1 + W^2 G^2 \frac{d}{d(W^2 G^2)} W^2 G^2 Q^2 (W^2 G^2) \end{split}$$

что переписывается как:

$$Q(y) = 1 + y\frac{d}{dy}yQ^2(y) \tag{484}$$

Заметим, однако, что из этих рассуждений невозможно найти правильное граничное условие (438), которое тесно связано с соотношением (432), отражающим принцип причинности.

Приложение II. В

Покажем, что все графики 3-го порядка на Рис. 162(b) равны между собой. Рассмотрим "максимально перекрестный" график Рис. 162(b 1.). Ему соответствует вклад:

Рис. 162(b 1.) =
$$W^6 \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4, \mathbf{p}_5} G(p_1) G(p_2) G(p_3) G(p_4) G(p_5) \times \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4) \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_4 - \mathbf{p}_5) \delta(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_5 - \mathbf{p})$$
485)

В изотропной системе функция Грина зависит только от модуля импульса и G(**p**) = G(-**p**). Проведем в (485) следующую замену переменных интегрирования (от чего величина этого вклада, очевидно, не изменится): **p**₁ ≓ -**p**₃; **p**₂ ≓ -**p**₂. При этом:

$$\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_3-\mathbf{p}_4)\delta(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2+\mathbf{p}_4-\mathbf{p}_5)\delta(\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_3+\mathbf{p}_5-\mathbf{p}) \rightarrow$$

$$\rightarrow \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4)\delta(\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4 - \mathbf{p}_5)\delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_5 - \mathbf{p})$$
(486)

и возникает вклад графика Рис. 162(b 2.). Аналогичным образом, замена $\mathbf{p}_2 \rightleftharpoons -\mathbf{p}_4$; $\mathbf{p}_3 \rightleftharpoons -\mathbf{p}_3$ дает вклад графика Рис. 162(b 4.), а замена $\mathbf{p}_3 \rightleftharpoons -\mathbf{p}_5$; $\mathbf{p}_4 \rightleftharpoons -\mathbf{p}_4$ дает Рис. 162(b 3.). Таким образом вклады всех "скелетных" графиков 3-го порядка для собственно-энергетической части равны между собой.

Более того, аналогичная замена переменных интегрирования приводит к тому, что под любой примесной линией в "скелетной" диаграмме любого порядка можно развернуть электронную линию вместе с подходящими к ней примесными и полученная диаграмма будет давать такой же вклад, как и начальная. Подобная симметрия приводит к выделению широких классов равных по вкладу диаграмм в любом порядке теории возмущений.

Приложение III. В

Приведем подробности расчетов, ведущих от (470) к (472) для одномерного (d = 1) случая. Для E < 0 свертка функций Грина, входящая в (470) вычисляется методом вычетов:

$$G_0 \otimes G_0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{1}{|E| + p^2 - 2pq + q^2} \frac{1}{|E| + p^2} = \frac{1}{\sqrt{|E|}(q^2 + 4|E|)}$$
(487)

(Для краткости здесь и ниже полагаем 2m = 1.) Тогда:

$$\sum_{\mathbf{q}} \sqrt{G_0 \otimes G_0} exp \left\{ -\frac{1}{2W^2 G_0 \otimes G_0} \right\} = \frac{1}{\pi |E|^{\frac{1}{4}}} \int_0^\infty \frac{dq}{\sqrt{q^2 + 4|E|}} exp \left\{ -\frac{\sqrt{|E|}}{2W^2} (q^2 + 4|E|) \right\} = \frac{1}{2\pi |E|^{\frac{1}{4}}} exp \left\{ -\frac{|E|^{\frac{3}{2}}}{W^2} \right\} K_0 \left(\frac{|E|^{\frac{3}{2}}}{W^2} \right) = \frac{W}{2\sqrt{2\pi |E|}} exp \left\{ -\frac{2|E|^{\frac{3}{2}}}{W^2} \right\}$$
(488)

Далее, элементарно получаем:

$$\left|\sum_{\mathbf{p}} G_0(p)\right| = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dp \frac{1}{|E| + p^2} = \frac{1}{2\sqrt{|E|}}$$
(489)

Собирая все эти выражения в (470) и восстанавливая 2m, получим (472).

Приложение IV. В

Приведем подробности перехода от (470) к (473) для d = 3. Вычисления в этом случае довольно громоздкие, в ходе их удобно использовать координатное представление для функции Грина. В области E < 0, в конце концов, получаем

$$G_0 \otimes G_0 = \begin{cases} \frac{1}{8\pi\sqrt{|E|}} & q \ll 2\sqrt{|E|} \\ \frac{1}{8q} & q \gg 2\sqrt{|E|} \end{cases}$$

$$(490)$$

В неравенствах в (490) удобно заменить 2 на π , что обеспечивает сшивку двух предельных выражений (490) в области промежуточных q. Используя (490) можно записать:

$$\sum_{\mathbf{q}} \sqrt{G_0 \otimes G_0} exp \left\{ -\frac{1}{2W^2 G_0 \otimes G_0} \right\} = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\pi\sqrt{|E|}} dqq^2 \sqrt{\frac{1}{8\pi\sqrt{|E|}}} exp \left\{ -\frac{4\pi\sqrt{|E|}}{W^2} \right\} + \frac{1}{2\pi^2} \int_{\pi\sqrt{|E|}}^{\infty} dqq^2 \sqrt{\frac{1}{8q}} exp \left\{ -\frac{4q}{W^2} \right\} \approx \frac{\sqrt{\pi}}{12\sqrt{2}} |E|^{\frac{5}{4}} \{1 + O(W^2)\} exp \left\{ -\frac{4\pi\sqrt{|E|}}{W^2} \right\}$$
(491)

Фактически, основной вклад здесь дает первый интеграл. Далее:

$$\left|\sum_{\mathbf{p}} G_0(p)\right| = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{p_0} dp \frac{p^2}{|E| + p^2} \approx \frac{1}{2\pi^2} \left(p_0 - \frac{\pi}{2}\sqrt{|E|}\right) \approx \frac{p_0}{2\pi^2}$$
(492)

Собирая все эти выражения в (470) и восстанавливая 2m, получим (473).

С Координатное представление. Нормальные и аномальные функции Грина. Модель "плоских участков".

Рассмотрим некоторые технические детали вывода рекуррентных соотношений для уравнений Горькова (168) – (171). Ограничимся рассмотрением двух плоских участков поверхности Ферми, ортогональных оси p_x и связанных вектором рассеяния $\mathbf{Q} = (\pm 2p_F, 0)$. Тогда задача становится чисто одномерной, поскольку проекция скорости $v_y = 0$ и электронный спектр в линеаризованном виде $\xi_{p_x \mp p_F} = \pm v_F p_x$ от *у*-компоненты импульса вообще не зависит. Для краткости в дальнейшем полагаем $v_F = 1$. Вычисления оказывается удобным провести в координатном представлении [75], рассмотрев движение электрона в поле гауссовых AFM флуктуаций $W(x) \neq W^*(x)$ (несоизмеримый случай) с коррелятором:

$$\langle W^*(x)W(x') \rangle = W^2 e^{-\kappa |x-x'|}$$
(493)

Тогда пропагаторы, соответствующие нормальной и аномальной функциям Грина сверхпроводника (166) принимают вид:

$$G_{00}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi} e^{ip_x x} G_{00}(p_x) = -\frac{i}{2} \left(\frac{\varepsilon_n}{\sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta|^2}} + \sigma_3 sign(x) \right) e^{-\sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta|^2}|x|}$$
$$F_{00}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x}{2\pi} e^{ip_x x} F_{00}^+(p_x) = \frac{\Delta^*}{\sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta|^2}} e^{-\sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta|^2}|x|}$$
(494)

где $\sigma_3 = 1$ для частиц движущихся вправо, и $\sigma_3 = -1$ для частиц движущихся влево. Рассеяние на флуктуациях переводит "правые" частицы в "левые" и наоборот. Из (494) видно, что частица, преодолевая путь длиной *l* дает множитель $e^{-\sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta|^2 l}}$.

При расчете конкретных диаграмм удобно [75] перейти от интегрирования по координатам вершин взаимодействия x_k к интегрированию по длинам путей l_k , проходимым частицей между отдельными актами рассеяния, зафиксировав полное смещение x - x'. Линии взаимодействия, соединяющей вершины m и n на электронной линии, сопоставляется тогда фактор:

$$W^{2}exp(-\kappa|x_{m}-x_{n}|) = W^{2}exp(-\kappa|\sum_{k=m}^{n-1}(-1)^{k}l_{k}|)$$
(495)

Интегрирование по всем l_k проводится от 0 до ∞ .

Таким образом, учет конечности корреляционной длины флуктуаций приводит в каждой диаграмме к возникновению некоторого "затухания" соответствующей амплитуды перехода с расстоянием, проходимым электроном. Точный учет этого эффекта сложен, но в работе [64] мы воспользовались очевидным неравенством:

$$exp\left(-\kappa|\sum_{k=m}^{n-1}(-1)^{k}l_{k}|\right) > exp\left(-\kappa\sum_{k=m}^{n-1}l_{k}\right)$$

$$(496)$$

и заменили экспоненту в (495) на экспоненту из правой части (496). Это эквивалентно замене коррелятора случайных полей (493) на аналогичное выражение, где в экспоненте расстояние |x - x'| заменено на полный путь, проходимый частицей между актами рассеяния в точках x и x'. Согласно (496) мы, таким образом, несколько переоцениваем роль фактора затухания κ в каждой диаграмме ряда теории возмущений. В результате такой замены диаграммы всех порядков легко вычисляются и в точности воспроизводят *Ansatz* (39) для нормальной фазы [75]. Выше уже указывалось, что получаемые таким образом результаты, например для плотности состояний, очень хорошо согласуются с результатами точного численного моделирования рассматриваемой задачи [62, 84], что является дополнительным аргументом в пользу используемого приближения, усиливающим качественные оценки работы [64].

Воспользуемся этим же приближением при рассмотрении диаграмм теории возмущений в сверхпроводящей фазе, построенных на пропагаторах (494). Тогда роль взаимодействия с флуктуациями сводится лишь к добавлению множителя $e^{-\kappa l_k}$ к каждой нормальной или аномальной функции Грина (494), охватываемой данной линией взаимодействия или, что тоже самое, к добавлению κ к $\sqrt{\varepsilon_n + |\Delta|^2}$ в экспоненте каждой такой функции Грина. Переходя обратно в импульсное представление, нетрудно убедиться, что вклад любой диаграммы высшего порядка определяется произведением соответствующего числа нормальных и аномальных функций Грина вида:

$$G_{0k}(p) = -\frac{i\varepsilon_n \frac{\varepsilon_k}{\sqrt{\varepsilon_n + |\Delta|^2}} + (-1)^k \xi_p}{\varepsilon_k^2 + \xi_p^2}; \quad F_{0k}^+(p) = \frac{\Delta^* \frac{\varepsilon_k}{\sqrt{\varepsilon_n + |\Delta|^2}}}{\varepsilon_k^2 + \xi_p^2}; \quad (497)$$

где $\varepsilon_k = \sqrt{\varepsilon_n + |\Delta|^2} + k\kappa$, причем k – число линий взаимодействия, охватывающих данную функцию Грина. Множитель $(-1)^k$ связан с тем, что рассеяние переводит "правые" частицы в "левые" и наоборот. Вводя перенормированную частоту и щель согласно (171), убеждаемся, что (497) сводится к стандартному виду (170), что и завершает оправдание рекуррентной процедуры (168), (171).

D Комбинаторика диаграмм в модели гейзенберговских псевдощелевых флуктуаций.

Для анализа комбинаторики диаграмм рассмотрим предел бесконечной корреляционной длины спиновых флуктуаций. В этом случае спиновая плотность на которой рассеивается электрон имеет вид:

$$\mathbf{S}_{\mathbf{q}} = \mathbf{S}\delta(\mathbf{q} - \mathbf{Q}) \tag{498}$$

а усреднение по гауссовым спиновым флуктуациям сводится к обычному интегрированию [63]:

$$< \ldots > = \frac{g^3}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}W^3} \int d\mathbf{S}e^{-\frac{g^2\mathbf{S}^2}{2W^2}}\dots$$
 (499)

Следовательно, в этом пределе можно сначала решать задачу о электроне в когерентном поле спиновой плотности (498), а затем производить усреднение (499) по ее флуктуациям. Для дальнейшего рассмотрения удобно ввести флуктуирующее поле $\delta = \frac{g}{\sqrt{3}}\mathbf{S}$ – "потенциал" на котором и рассеивается электрон. Тогда усреднение (499) по спиновым флуктуациям сводится к усреднению по флуктуациям этого поля:

$$<\ldots>= \left(\frac{3}{2\pi W^2}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\delta_l e^{-\frac{3\delta_l^2}{2W^2}} \frac{3}{2\pi W^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} d|\delta_t| |\delta_t| e^{-\frac{3|\delta_t|^2}{2W^2}} \dots$$
(500)

Таким образом имеем два флуктуирующих поля на которых рассеиваются свободные носители: вещественное продольное $\delta_l = \frac{g}{\sqrt{3}}S_z$ и комплексное поперечное δ_t , характеризуемое амплитудой $|\delta_t|$ и фазой φ и связанное с двумя поперечными компонентами **S**.

Такое усреднение порождает диаграммную технику в которой есть два вида эффективных взаимодействий [63]. Изображаемое пунктирной линией

$$V_{eff1} = \frac{g^2}{3} < S_{z\mathbf{q}}S_{z-\mathbf{q}} > = \pm \frac{W^2}{3}\delta(\mathbf{q} - \mathbf{Q})$$
(501)

где знак "—" относится к случаю изменения проекции спина под данной линией (например, когда пунктирная линия охватывает нечетное число операторов S_+ , S_- , переворачивающих спин), и изображаемое волнистой линией

$$V_{eff2} = \frac{g^2}{3} < S_{+\mathbf{q}}S_{--\mathbf{q}} >= 2\frac{W^2}{3}\delta(\mathbf{q} - \mathbf{Q})$$
(502)



Рис. 168: Двухчастичные вершины с разной комбинаторикой диаграмм.

Средние $< S_+S_+ > u < S_-S_- >$ равны нулю вследствие усреднения по фазе в (500).

Приступим к решению задачи о электроне в когерентном поле спиновой плотности (498). В этом случае матричная одночастичная функция Грина имеет 4 независимых компоненты⁷⁷, которые могут быть определены из следующей системы уравнений:

$$G_{1\uparrow;1\uparrow} = G_1 + G_1 \delta_l G_{2\uparrow;1\uparrow} + G_1 \delta_t G_{2\downarrow;1\uparrow}$$

$$G_{2\uparrow;1\uparrow} = G_2 \delta_l G_{1\uparrow;1\uparrow} + G_2 \delta_t G_{1\downarrow;1\uparrow}$$

$$G_{2\downarrow;1\uparrow} = -G_2 \delta_l G_{1\downarrow;1\uparrow} + G_2 \delta_t^* G_{1\uparrow;1\uparrow}$$

$$G_{1\downarrow;1\uparrow} = -G_1 \delta_l G_{2\downarrow;1\uparrow} + G_1 \delta_t^* G_{2\uparrow;1\uparrow}$$
(503)

где введены короткие обозначения $(\varepsilon_n, \mathbf{p}) \to 1$, $(\varepsilon_n, \mathbf{p} + \mathbf{Q}) \to 2$ и $G_1 = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}}}, G_2 = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}}$. Отсюда получаем:

$$G_{1\uparrow;1\uparrow} = \frac{G_2^{-1}}{G_1^{-1}G_2^{-1} - |\delta|^2}; \qquad G_{2\uparrow;1\uparrow} = \frac{\delta_l}{G_1^{-1}G_2^{-1} - |\delta|^2}$$
$$G_{1\downarrow;1\uparrow} = 0; \qquad G_{2\downarrow;1\uparrow} = \frac{\delta_t^*}{G_1^{-1}G_2^{-1} - |\delta|^2} \qquad (504)$$

где $|\delta| = \sqrt{\delta_l^2 + |\delta_t|^2}$ амплитуда поля δ

Усредненная по флуктуациям одночастичная функция Грина в этом случае имеет вид:

$$G = \langle G_{1\uparrow;1\uparrow} \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{(W^2/3)^{\frac{3}{2}}} \int_0^{+\infty} d|\delta| |\delta|^2 e^{-\frac{3|\delta|^2}{2W^2}} \frac{G_2^{-1}}{G_1^{-1}G_2^{-1} - |\delta|^2}$$
(505)

Данное интегральное представление легко представимо [63] в виде цепной дроби (46), (41) с $\kappa = 0$ и комбинаторными коэффициентами s(k), определяемыми (49).

⁷⁷компоненты, отличающиеся от данных изменением знака всех проекций спина, могут быть получены заменой $\delta_l \to -\delta_l, \, \delta_t \leftrightarrow \delta_t^*$

Несколько сложней обстоит дело с определением комбинаторных коэффициентов r(k) для двухчастичных вершин. Могут быть рассмотрены 4 типа вершин, представленных на Рис. 168. Для всех четырех типов вершин рекуррентная процедура имеет вид (182), однако знаки в процедуре и комбинаторные коэффициенты r(k) могут быть различными. Рассмотрим все вершины в когерентном поле δ .

1. Зарядовая вершина (в вершине сохраняется проекция спина) в диффузионном канале (частица – дырка) (Рис. 168 (a)):

$$\Gamma_{d}^{ch} = \sum_{i,\sigma} G_{1\uparrow;i\sigma} G_{i'\sigma;1'\uparrow} = \frac{(G_2 G_{2'})^{-1} + |\delta|^2}{d_{\delta}}$$
(506)

где i и σ пробегают значения 1,2 и \uparrow, \downarrow , введено обозначение $(\varepsilon'_n, \mathbf{p}') \to 1', (\varepsilon'_n, \mathbf{p}' + \mathbf{Q}) \to 1'$ 2' и $d_{\delta} = [(G_1G_2)^{-1} - |\delta|^2][(G_{1'}G_{2'})^{-1} - |\delta|^2]$

2. Зарядовая вершина в куперовском канале (частица – частица)⁷⁸ (Рис. 168 (b)):

$$\Gamma_c^{ch} = \sum_{i,\sigma} G_{1\uparrow;i\sigma} G_{1\uparrow;i'\sigma} = \frac{(G_2 G_{2'})^{-1} + \delta_l^2}{d_\delta}$$
(507)

3. Спиновая вершина (в вершине проекция спина меняет знак) в диффузионном канале (частица – дырка) (Рис. 168 (с)):

$$\Gamma_{d}^{sp} = \sum_{i,\sigma} G_{1\uparrow;i\sigma} G_{i'-\sigma;1'\downarrow} = \frac{(G_2 G_{2'})^{-1} - \delta_l^2}{d_\delta}$$
(508)

4. Спиновая вершина в куперовском канале (частица – частица) (Рис. 168 (d)):

$$\Gamma_{c}^{sp} = \sum_{i,\sigma} G_{1\uparrow;i\sigma} G_{1'\downarrow;i'-\sigma} = \frac{(G_2 G_{2'})^{-1} + (|\delta_t|^2 - \delta_l^2)}{d_\delta}$$
(509)

Физические вершины получаются из данных вершин с когерентным полем δ усреднением (500) по флуктуациям соответствующего поля.

Итак, мы видим, что вершина Γ_d^{ch} определяется выражением (506), а все другие вершины имеют вид⁷⁹:

$$\Gamma = \frac{(G_2 G_{2'})^{-1} \pm \frac{1}{3} |\delta|^2}{d_\delta}$$
(510)

где знак "+" соответствует вершинам Γ_c^{ch} и Γ_c^{sp} , знак "-" — вершине Γ_d^{sp} .

⁷⁸Возникает при описании триплетного спаривания ⁷⁹Этот вид эквивалентен (507),(508),(509) при проведении усреднения

В случае вершины Γ_d^{ch} очевидно, что r(k) = s(k). Действительно, разложение для физической вершины $< \Gamma_d^{ch} >$ может быть получено вставкой соответствующей свободной вершины во все электронные линии произвольной диаграммы для одночастичной функции Грина. При этом вставка данной вершины не изменяет ни направления электронной линии, ни проекции спина, соответственно не изменяется и комбинаторика диаграмм.

В пределе бесконечной корреляционной длины любая "скелетная" диаграмма для вершины отличатся от лестничной диаграммы того же порядка с взаимодействием $\frac{W^2}{3}\delta(\mathbf{q}-\mathbf{Q})$ лишь знаком и множителем 2^p , где p — число волнистых линий. Таким образом сумма всех "скелетных" диаграмм данного порядка может быть заменена соответствующей лестничной диаграммой с взаимодействием $\frac{W^2}{3}\delta(\mathbf{q}-\mathbf{Q})$, домноженной на комбинаторный множитель, который мы будем называть "числом" "скелетных" диаграмм данного порядка.

Первый член в выражениях (506)-(509) для всех вершин одинаков и порождает при усреднении "числа" "скелетных" диаграмм четного порядка по W^2 (так как этот член соответствует слагаемым с i = 1 в данных выражениях). Таким образом "числа" "скелетных" диаграмм четного порядка для всех четырех вершин одинаковы. Второй член в этих выражениях порождает "числа" диаграмм нечетного порядка (он соответствует слагаемым с i = 2). Следовательно "числа" "скелетных" диаграмм нечетного порядка для трех вершин, определяемых выражением (510) составляют $\pm \frac{1}{3}$ от соответствующих "чисел" для вершины Γ_d^{ch} . Знак "—", соответствующий вершине Γ_d^{sp} , может быть компенсирован изменением знака в рекуррентной процедуре для этой вершины. Следовательно знак перед вторым слагаемым в (510) определяет знак в рекуррентной процедуре (182) для данных вершин, а комбинаторные коэффициенты r(k) для этих трех вершин одинаковы. "Число" "скелетных" диаграмм порядка L имеет вид⁸⁰:

$$3^L \prod_{1 \le k \le L} r(k) \tag{511}$$

Таким образом для четных L = 2n получаем:

$$\prod_{1 \le k \le 2n} r(k) = \prod_{1 \le k \le 2n} s(k) \tag{512}$$

Для нечетных L = 2n + 1:

$$\prod_{1 \le k \le 2n+1} r(k) = \frac{1}{3} \prod_{1 \le k \le 2n} s(k)$$
(513)

Откуда, с учетом (49), немедленно следует (250).

В данной работе нас в основном интересовала вершина Γ_c^{sp} . Проведенный выше анализ, который показывает, что для данной вершины возникает знакопостоянная процедура, для случая *s* – спаривания, когда симметрийный множитель $e(\mathbf{p})$, который должен стоять в вершине, равен 1. В случае же *d* – спаривания, когда сверхпроводящая щель при перебросе на **Q** меняет знак (т.е. $e(\mathbf{p}) = -e(\mathbf{p} + \mathbf{Q})$)), знак рекуррентной процедуры необходимо сменить на противоположный [122] и процедура становится знакопеременной. Отметим, что в случае изинговских спиновых флуктуаций, рассмотренных в работе [122], ситуация со знаками рекуррентной процедуры для вершины строго противоположная. Этот несколько удивительный факт нетрудно понять из выражения (509) для вершины Γ_c^{sp} . В изинговской модели пропадают две поперечные компоненты (т.е. поле δ_t), что и приводит к смене знака перед вторым слагаемым в (509), а значит и в рекуррентной процедуре.

⁸⁰Множитель 3^L возникает вследствие того, что рекуррентная процедура (182) и комбинаторные коэффициенты r(k) соответствуют разложению по степеням W^2 , а "число" "скелетных" диаграмм определено для разложения по степеням $\frac{W^2}{3}$.

Е Коэффициенты Гинзбурга-Ландау для анизотропного спаривания в отсутствие псевдощели.

В отсутствие флуктуаций (W = 0) обобщенная куперовская восприимчивость, определяемая диаграммой Рис. 42 принимает вид:

$$\chi_0(\mathbf{q};T) = -T \sum_{\varepsilon_n} \sum_{\mathbf{p}} e^2(\mathbf{p}) \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}} \frac{1}{-i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}}}$$
(514)

Тогда для восприимчивости при **q** = 0, определяющей коэффициент A₀, получаем:

$$\chi_{0}(0;T) = -T \sum_{\varepsilon_{n}} \sum_{\mathbf{p}} e^{2}(\mathbf{p}) \frac{1}{\varepsilon_{n}^{2} + \xi_{\mathbf{p}}^{2}} = -T \sum_{\varepsilon_{n}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{\varepsilon_{n}^{2} + \xi^{2}} \sum_{\mathbf{p}} \delta(\xi - \xi_{\mathbf{p}}) e^{2}(\mathbf{p}) \approx$$
$$\approx -N_{0}(0)T \sum_{\varepsilon_{n}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{\varepsilon_{n}^{2} + \xi^{2}} \frac{\sum_{\mathbf{p}} \delta(\xi_{\mathbf{p}}) e^{2}(\mathbf{p})}{N_{0}(0)} = \chi_{BCS}(0;T) < e^{2}(\mathbf{p}) > (515)$$

где угловые скобки обозначают усреднение по поверхности Ферми и введена стандартная восприимчивость в модели БКШ для изотропного s спаривания $\chi_{BCS}(0;T)$

В результате, коэффициент А₀ имеет вид:

$$A_0 = \chi_0(0;T) - \chi_0(0;T_c) = A_{BCS} < e^2(\mathbf{p}) >$$
(516)

где

$$A_{BCS} = \chi_{BCS}(0;T) - \chi_{BCS}(0;T_c) = N_0(0) \frac{T - T_c}{T_c}$$
(517)

стандартное выражение для коэффициента A в случае изотропного s спаривания.

Коэффициент C₀ разложения Гинзбурга-Ландау определяется обобщенной восприимчивостью (514) при малых **q**:

$$C_0 = \lim_{q \to 0} \frac{\chi_0(\mathbf{q}; T_c) - \chi_0(0; T_c)}{q^2}$$
(518)

Разлагая выражение (514) для $\chi_0(\mathbf{q};T_c)$ в ряд по малым q имеем:

$$\chi_0(\mathbf{q}; T_c) = \chi_0(0; T_c) + T_c \sum_{\varepsilon_n} \sum_{\mathbf{p}} \frac{3\varepsilon_n^2 - \xi_{\mathbf{p}}^2}{4(\varepsilon_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2)^3} e^2(\mathbf{p}) (\mathbf{v}(\mathbf{p})\mathbf{q})^2$$
(519)

так что для коэффициента С₀ получаем:

$$C_{0} = T_{c} \sum_{\varepsilon_{n}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{3\varepsilon_{n}^{2} - \xi^{2}}{4(\varepsilon_{n}^{2} + \xi^{2})^{3}} \sum_{\mathbf{p}} \delta(\xi - \xi_{\mathbf{p}}) e^{2}(\mathbf{p}) |\mathbf{v}(\mathbf{p})|^{2} cos^{2}(\phi) \approx$$
$$\approx T_{c} \sum_{\varepsilon_{n}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{3\varepsilon_{n}^{2} - \xi^{2}}{4(\varepsilon_{n}^{2} + \xi^{2})^{3}} \sum_{\mathbf{p}} \delta(\xi_{\mathbf{p}}) e^{2}(\mathbf{p}) |\mathbf{v}(\mathbf{p})|^{2} cos^{2}(\phi) =$$
$$= N_{0}(0) \frac{7\zeta(3)}{16\pi^{2}T_{c}^{2}} < e^{2}(\mathbf{p}) |\mathbf{v}(\mathbf{p})|^{2} cos^{2}(\phi) >$$
(520)

где ϕ – угол между векторами $\mathbf{v}(\mathbf{p})$ и $\mathbf{q}, \zeta(3) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} \approx 1,202$

Для квадратной решетки поверхность Ферми, а значит и $|\mathbf{v}(\mathbf{p})|$, обладает симметрией относительно поворота на угол $\frac{\pi}{2}$, такой же симметрией обладает и $e(\mathbf{p})$ для рассматриваемых нами типов спаривания. Поэтому легко получить:

$$< e^{2}(\mathbf{p})|\mathbf{v}(\mathbf{p})|^{2}cos^{2}(\phi) > = \frac{1}{2} < e^{2}(\mathbf{p})|\mathbf{v}(\mathbf{p})|^{2}(1+cos(2\phi)) > = \frac{1}{2} < e^{2}(\mathbf{p})|\mathbf{v}(\mathbf{p})|^{2} > (521)$$

так как $cos(2\phi)$ при повороте **p** на угол $\frac{\pi}{2}$ изменяет знак. Действительно, направление скорости **v**(**p**) при таком повороте изменяется на перпендикулярное, соответственно $cos(2\phi) \rightarrow -cos(2\phi)$. В результате, для коэффициента C_0 получаем изотропное выражение:

$$C_0 = N_0(0) \frac{7\zeta(3)}{32\pi^2 T_c^2} < |\mathbf{v}(\mathbf{p})|^2 e^2(\mathbf{p}) >,$$
(522)

которое в случае изотропного *s* спаривания и сферической поверхности Ферми приобретает стандартный вид:

$$C_{BCS} = N_0(0) \frac{7\zeta(3)v_F^2}{32\pi^2 T_c^2}$$
(523)

Коэффициент B, определяемый диаграммой, представленной на Рис. 64(b), в отсутствие псевдощелевых флуктуаций (W = 0) и при $\mathbf{q} = 0$ имеет вид:

$$B_{0} = T_{c} \sum_{\varepsilon_{n}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{(\varepsilon_{n}^{2} + \xi_{\mathbf{p}}^{2})^{2}} e^{4}(\mathbf{p}) = T_{c} \sum_{\varepsilon_{n}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{(\varepsilon_{n}^{2} + \xi^{2})^{2}} \sum_{\mathbf{p}} \delta(\xi - \xi_{\mathbf{p}}) e^{4}(\mathbf{p}) \approx$$
$$\approx N_{0}(0) T_{c} \sum_{\varepsilon_{n}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \frac{1}{(\varepsilon_{n}^{2} + \xi^{2})^{2}} \frac{\sum_{\mathbf{p}} \delta(\xi_{\mathbf{p}}) e^{4}(\mathbf{p})}{N_{0}(0)} = B_{BCS} < e^{4}(\mathbf{p}) > \quad (524)$$

где

$$B_{BCS} = N_0(0) \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T_c^2}$$
(525)

стандартное выражение для коэффициента *B* в случае изотропного *s* спаривания.

F Координатное представление. Нормальные и аномальные функции Грина. Модель "горячих точек".

В отсутствие диэлектрических флуктуаций в сверхпроводящем состоянии действуют нормальная G_{00} и аномальная F_{00} функции Грина с сверхпроводящей щелью Δ (166). В случае диэлектрических флуктуаций с бесконечной корреляционной длиной $\xi \rightarrow \infty$, когда эффективное взаимодействие с флуктуациями имеет вид $V_{eff} = W^2 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{Q})$, диаграмма порядка N по эффективному взаимодействию представляет собой произведение 2N + 1 функций Грина G_{00} , F_{00} . N + 1 функций Грина с $\xi_{\mathbf{p}} = \xi_1$ и Nфункций Грина с $\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} = \xi_2$.

В случае конечной корреляционной длины линеаризуем спектр вблизи характерных значений ξ_1, ξ_2 :

$$\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} = \xi_1 + \mathbf{v}_1 \mathbf{q}; \qquad \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}+\mathbf{q}} = \xi_2 + \mathbf{v}_2 \mathbf{q}$$
(526)

где $\mathbf{v}_1 = \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{d\mathbf{p}}, \mathbf{v}_2 = \frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{d\mathbf{p}}\Big|_{\mathbf{p}=\mathbf{p}+\mathbf{Q}}$ – скорости частиц "сорта" 1 и 2 соответственно. Оставаясь в рамках данного приближения, необходимо линеаризовать и импульсную зависимость сверхпроводящей щели:

$$\Delta(\mathbf{p}+\mathbf{q}) = \Delta(\mathbf{p}) + \frac{d\Delta(\mathbf{p})}{d\mathbf{p}}\mathbf{q}, \qquad \Delta(\mathbf{p}+\mathbf{Q}+\mathbf{q}) = \Delta(\mathbf{p}+\mathbf{Q}) + \left.\frac{d\Delta(\mathbf{p})}{d\mathbf{p}}\right|_{\mathbf{p}=\mathbf{p}+\mathbf{Q}}\mathbf{q} \quad (527)$$

Однако, производная $\frac{d\Delta(\mathbf{p})}{d\mathbf{p}}$ много меньше производной $\frac{d\xi_{\mathbf{p}}}{d\mathbf{p}}$. Действительно, изменение $\xi_{\mathbf{p}}$ в зоне Бриллюэна составляет 8t, в то время как характерный масштаб изменения сверхпроводящей щели $\Delta(\mathbf{p}) = \Delta e(\mathbf{p})$ порядка ~ Δ . Таким образом отношение скоростей изменения Δ и $\xi_{\mathbf{p}}$ оказывается ~ $\frac{\Delta}{8t} \ll 1$. Поэтому мы будем полагать сверхпроводящую щель равной $\Delta_1 = \Delta(\mathbf{p})$ для частиц "сорта" 1 и $\Delta_2 = \Delta(\mathbf{p} + \mathbf{Q})$ для частиц "сорта" 2.

Теперь мы можем обобщить результаты Приложения С на чисто двумерную модель "горячих точек". Перейдем, следуя [75, 58], в координатное представление и рассмотрим движение электрона в поле действительных (соизмеримый случай) гауссовых диэлектрических флуктуаций $W(\mathbf{r})$ с коррелятором:

$$\langle W(\mathbf{r})W(\mathbf{r}')\rangle = W^2 e^{-\kappa(|x-x'|+|y-y'|)}$$
(528)

рассеяние на которых переводит частицы "сорта" 1 в 2 и наоборот. Данный коррелятор в координатном представлении эквивалентен модельному факторизованному эффективному взаимодействию (31) в импульсном пространстве.

Пропагаторы, соответствующие нормальной и аномальной функциям Грина сверхпроводника (166) для частиц "сорта" 1 принимают вид:

$$G_{00}(x,y) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_x}{2\pi} e^{iq_x x} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_y}{2\pi} e^{iq_y y} G_{00}(\mathbf{q}) =$$

$$= -\frac{i}{2|v_{1y}|} \left(\frac{\varepsilon_n}{\varepsilon_\Delta} + sign(\frac{y}{v_{1y}})\right) exp(-i\frac{\xi_1 y}{v_{1y}} - \frac{\varepsilon_\Delta|y|}{|v_{1y}|}) \delta(x - \frac{v_{1x}}{v_{1y}}y);$$

$$F_{00}^+(x,y) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_x}{2\pi} e^{iq_x x} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_y}{2\pi} e^{iq_y y} F_{00}^+(\mathbf{q}) =$$

$$= \frac{\Delta^*}{2|v_{1y}|\varepsilon_\Delta} exp(-i\frac{\xi_1 y}{v_{1y}} - \frac{\varepsilon_\Delta|y|}{|v_{1y}|}) \delta(x - \frac{v_{1x}}{v_{1y}}y)$$
(529)

где $\varepsilon_{\Delta} = \sqrt{\varepsilon_n^2 + |\Delta_1|^2}$, а δ -функция, входящая в (529) фиксирует скорость $\mathbf{v}_1 = (v_{1x}, v_{1y})$ с которой летят частицы "сорта" 1. Для частиц "сорта" 2 в выражении (529) для пропагаторов следует просто заменить $\xi_1, \mathbf{v}_1, \Delta_1$ на $\xi_2, \mathbf{v}_2, \Delta_2$.

Линии взаимодействия, соединяющей вершины *m* и *n* на электронной линии, сопоставляется тогда фактор:

$$W^{2}exp(-\kappa(|x_{m} - x_{n}| + |y_{m} - y_{n}|))$$
(530)

Учет конечности корреляционной длины флуктуаций приводит, таким образом, в каждой диаграмме к возникновению некоторого дополнительного "затухания" соответствующей амплитуды перехода с расстоянием, проходимым электроном. Точный учет этого эффекта сложен, но также как в работах [64, 58] и Приложении С мы можем воспользоваться очевидным неравенством:

$$exp\Big(-\kappa(|x_m - x_n| + |y_m - y_n|)\Big) > exp\Big(-\kappa\sum_{k=m}^{n-1}|x_{k+1} - x_k| + |y_{k+1} - y_k|\Big) \equiv exp\Big(-\kappa\sum_{k=m}^{n-1}l_k\Big)$$
(531)

и заменить экспоненту в (530) на экспоненту из правой части (531). Это эквивалентно замене коррелятора случайных полей (528) на аналогичное выражение, где в экспоненте "расстояние" |x - x'| + |y - y'| заменено на полный "путь" (сумма модулей изменения координаты по оси x и по оси y), проходимый частицей между актами рассеяния в точках (x, y) и (x', y'). Согласно (531) мы, аналогично одномерному случаю Приложения С, несколько переоцениваем роль фактора затухания κ в каждой диаграмме ряда теории возмущений. В результате такой замены диаграммы всех порядков легко вычисляются и в точности воспроизводят рекуррентную процедуру для одночастичной функции Грина в нормальной фазе и в двумерной модели "горячих точек" [64].

Воспользуемся таким приближением при рассмотрении диаграмм теории возмущений в сверхпроводящей фазе, построенных на пропагаторах (529). Тогда роль взаимодействия с флуктуациями сводится лишь к добавлению множителя $e^{-\kappa l_k}$ к каждой нормальной или аномальной функции Грина (529), охватываемой данной линией взаимодействия или, что тоже самое, к добавлению $\kappa(|v_x| + |v_y|)$ к $\varepsilon_{\Delta} = \sqrt{\varepsilon_n + |\Delta|^2}$ в экспоненте каждой такой функции Грина. Переходя обратно в импульсное представление, нетрудно убедиться, что вклад любой диаграммы высшего порядка определяется произведением соответствующего числа нормальных и аномальных функций Грина вида:

$$G_{0k}(p) = -\frac{i\varepsilon_n \frac{\varepsilon_k}{\sqrt{\varepsilon_n + |\Delta_k|^2}} + \xi_k}{\varepsilon_k^2 + \xi_k^2}; \quad F_{0k}^+(p) = \frac{\Delta_k^* \frac{\varepsilon_k}{\sqrt{\varepsilon_n + |\Delta_k|^2}}}{\varepsilon_k^2 + \xi_k^2}; \tag{532}$$

где $\varepsilon_k = \sqrt{\varepsilon_n + |\Delta_k|^2} + k v_k \kappa$, причем k – число линий взаимодействия, охватывающих данную функцию Грина. Если k четно, то функция Грина соответствует частицам "сорта" 1, если нечетно – частицам "сорта" 2, так как каждое рассеяние меняет "сорт" частиц. Вводя перенормированную частоту и щель согласно (171), убеждаемся, что (532) сводится к стандартному виду (170) (с учетом замены $(-1)^k \xi_{\mathbf{p}} \to \xi_k$), что и завершает оправдание рекуррентной процедуры (168), (171) и в случае двумерной модели "горячих точек".

G Предел $d \to \infty$. Сведение модели Хаббарда к эффективной однопримесной модели Андерсона.

G.1 Масштабное преобразование в пределе $d \to \infty$

Следуя работе Метснера и Фолльхарда [146] запишем энергетическую дисперсию электрона в d мерной гиперкубической решётке с перескоками только на ближайших соседей:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{i=1}^{d} \cos k_i.$$
(533)

где импульс ${f k}$ здесь и далее в единицах обратной постоянной решётки 1/a

Плотность состояний, соответствующая $\varepsilon_{\mathbf{k}}$:

$$N_d(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}).$$
(534)

Таким образом, в пределе $d \to \infty$ плотность состояний формируется бесконечным числом независимых источников, тогда по центральной предельной теореме она переходит в гауссиан:

$$N_d(\omega) \xrightarrow{d \to \infty} \frac{1}{2t\sqrt{\pi d}} \exp\left[-\left(\frac{\omega}{2t\sqrt{d}}\right)^2\right].$$
 (535)

Для того, чтобы плотность состояний стала конечной мы должны провести масштабное преобразование:

$$t \to \frac{t^*}{\sqrt{d}}, \ t^* = \text{const.}$$
 (536)

Которое приводит к нетривиальной плотности состояний при $d \to \infty$ с характерной шириной t^* и не имеющей особенностей ван-Хова, существующих лишь при конечных d:

$$N_{\infty}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}t^*} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\omega}{t^*}\right)^2\right],\tag{537}$$

Не представляет труда получить и разложение по степеням 1/d для $d \gg 1$. Для этого разложим δ -функцию из (534) в ряд Фурье и используем интегральное представление функции Бесселя:

$$N_d(\omega) = \prod_{i=1}^d \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\tau(\omega-\varepsilon_{\mathbf{k}})} = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \ e^{i\omega\tau} [\ J_0(2\tau t) \]^d, \tag{538}$$



Рис. 169: Плотность состояний в в гиперкубических решётках с различными размерностями d = 1, 2, 3, 4, 5 (сплошные линии) в сравнении с результатом $d = \infty$ (пунктир) [147].

здесь $J_0(x) = 1 - x^2 + \mathcal{O}(x^4), x \ll 1 - функция Бесселя нулевого порядка. Используя (536), получим для <math>d \gg 1$:

$$N_d(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} t^*} e^{-\frac{1}{2}(\omega/t^*)^2} \left\{ 1 - \frac{1}{16d} \left[\left(\frac{\omega}{t^*}\right)^4 - 6\left(\frac{\omega}{t^*}\right)^2 + 3 \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{d^2}\right) \right\}.$$
 (539)

Сравнение $N_d(\omega)$ для различных конечных d (t^* -константа!) с $N_{\infty}(\omega)$ показано на Рис. 169. Видим, что уже для $d \ge 3$ форма DOS быстро приближается к N_{∞} . Основное различие для конечных d связано с конечной шириной зоны и наличием особеностей ван-Хова быстро ослабевающих с ростом d.

Несмотря на то, что скейлинговое соотношение (536) фактически сохраняет расходимость $\varepsilon_{\mathbf{k}} \sim \mathcal{O}(\sqrt{d})$ при $d \to \infty$, однако средняя кинетическая энергия невзаимодействующих электронов становится конечной:

$$E_{\rm kin}^0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} = -2N t^{*2} N_{\infty}(E_F), \qquad (540)$$

где $n_{\mathbf{k}\sigma}$ – числа заполнения, N – число узлов решётки.

Таким образом, мы видим, что квантовое скэйлинговое преобразование (536) делает в пределе $d \to \infty$ конечными и плотность состояний и среднюю энергию системы без взаимодействия, а также другие термодинамические характеристики такой системы.

G.2 Локальность СЭЧ в пределе $d \to \infty$.

Скейлинговое соотношение (536) приводит к значительным упрощениям в исследовании модели Хаббарда [146, 147, 311, 312]. Для иллюстрации этого рассмотрим теорию возмущения по U. При T = 0 и U = 0 кинетическая энергия (540) может быть переписана в виде:

$$E_{\rm kin}^0 = -t \sum_{\langle i,j\rangle\sigma} g_{ij,\sigma}^0, \tag{541}$$

где $g_{ij,\sigma}^0 = \langle c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} \rangle_0$ – одночастичная матрица плотности, чей квадрат модуля пропорционален вероятности частицы перепрыгнуть с узла *i* на узел *j*, т.е. $|g_{ij,\sigma}^0|^2 \sim 1/z \sim$ 1/d для ближайших соседей. Сумма от $|g_{ij,\sigma}^0|^2$ по всем ближайшим соседям должна давать константу ($\mathcal{O}(d^0)$). Тогда в пределе $d \to \infty$ получаем:

$$g_{ij,\sigma}^0 \sim \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{d}}\right)$$
, для ближайших соседей. (542)

Так как сумма по ближайшим соседям в (541) имеет порядок $\mathcal{O}(d)$, а для t производится масштабирование (536), то $E_{\rm kin}^0$ действительно остаётся конечной в пределе $d, z \to \infty$.

Одночастичная функция Грина $G^0_{ij,\sigma}(\omega)$ для невзаимодействующей системы имеет такой же порядок по d как и $g^0_{ij,\sigma}$ поскольку можно записать:

$$E_{\rm kin}^0 = -\frac{t}{2\pi i} \sum_{\langle i,j\rangle\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \ G_{ij,\sigma}^0(\omega).$$
(543)

Важно отметить, что хотя $G^0_{ij,\sigma} \sim 1/\sqrt{d} \to 0$ при $d \to \infty$, электроны не локализованы и имеют возможность двигаться по решётке, поскольку могут прыгать на d ближайших соседей. Для произвольных i, j аналогичным образом можно получить [311, 312]:

$$G_{ij,\sigma}^0 \sim \mathcal{O}\left(1/d^{\|i-j\|/2}\right),\tag{544}$$

где ||i-j|| – "манхеттенская" метрика, обозначающая наименьшее расстояние (в единицах постоянной решетки *a*), проходимое электроном между узлами *i*, *j* при дви-



Рис. 170: СЭЧ в модели Хаббарда. (а) – компактная диаграмма во втором порядке теории возмущения по U и стягивание ее в один узел в пределе $d \to \infty$, (b) – простейшая диаграмма для СЭЧ с собственно-энергетической вставкой.

жении по решетке перескоками на ближайших соседей. Такое поведение "свободных" функций Грина приводит к тому, что в пределе $d \to \infty$ все компактные ⁸¹ диаграммы стягиваются в один узел, как показано на Рис. 170(а) для диаграммы СЭЧ $\Sigma_{ij}^{(2)}$ второго порядка теории возмущений по U.

Действительно, порядок малости $\Sigma_{ij}^{(2)} \sim 1/\sqrt{d}$, если *i* и *j* ближайшие соседи. Три электронные линии, соответствующие $G_{ij,\sigma}^0$, дают множитель $1/d^{3/2}$, а суммирование по всем *j* ближайшим к *i* дает множитель *d*. Таким образом, в пределе $d \to \infty$ остается только вклад $\Sigma_{ii}^{(2)}$, не зависящий от *d*, т.е. происходит стягивание компактных диаграмм в один узел. Компактные диаграммы становятся локальными.

Собственно-энергетические вставки во внутренних электронных линиях диаграмм для СЭЧ (см. Рис. 170(b)) могут соответствовать другим узлам, поскольку, как уже отмечалось выше, и в пределе $d \to \infty$ частицы не локализуются на узлах и соответственно полная функция Грина не является локальной. На Рис. 170(b) показана простейшая диаграмма для СЭЧ с собственно-энергетической вставкой. Как легко видеть, несмотря на собственно-энергетическую вставку, соответствующую ближайшему соседу $j \neq i$, вклад этой диаграммы $\Sigma_{ii} \sim d^0$ и сохраняется в пределе $d \to \infty$.

В конечном счёте, полностью стягиваются в один узел в пределе $d \to \infty$ все

⁸¹не содержащие собственно-энергетических вставок во внутренних электронных линиях

"скелетные" ⁸² диаграммы для СЭЧ. Таким образом, СЭЧ становиться полностью локальной при $d \to \infty$ [146]:

$$\Sigma_{ij,\sigma}(\omega) \stackrel{d \to \infty}{=} \Sigma_{ii,\sigma}(\omega) \delta_{ij} \tag{545}$$

и является некоторым функционалом от локальной функции Грина:

$$\Sigma_{ii,\sigma}(\omega) = F[G_{ii,\sigma}]. \tag{546}$$

В парамагнитной фазе $\Sigma_{ii,\sigma}(\omega) \equiv \Sigma(\omega)$. Переходя в импульсное пространство, взяв Фурье образ от $\Sigma_{ij,\sigma}$, получаем импульсно независимую СЭЧ:

$$\Sigma_{\sigma}(\mathbf{k},\omega) \stackrel{d\to\infty}{\equiv} \Sigma_{\sigma}(\omega).$$
(547)

G.3 Однопримесная модель Андерсона и ее связь с DMFT

Однопримесная модель Андерсона (SIAM⁸³) описывает N-кратно вырожденную примесь, на которой электроны взаимодействуют посредством локального кулоновского взаимодействия U, и которая связана гибридизацией с проводящей эффективной средой, играющей роль резервуара носителей заряда [148]. Гамильтониан, интересующей нас ниже двухкратно (N=2) вырожденной (по спину) однопримесной модели Андерсона, имеет вид:

$$\hat{H}_{SIAM} = \sum_{\sigma} (\varepsilon_d - \mu) d^{\dagger}_{\sigma} d_{\sigma} + U d^{\dagger}_{\uparrow} d_{\uparrow} d^{\dagger}_{\downarrow} d_{\downarrow} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} V_{\mathbf{k}} d^{\dagger}_{\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} + V^*_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} d_{\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} .$$
(548)

 $d_{\sigma}^{\dagger} / d_{\sigma}$ – операторы рождения/уничтожения электрона со спином σ на примесном уровне с энергией ε_d , U – параметр кулоновского взаимодействия на примеси. $c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}/c_{\mathbf{k},\sigma}$ операторы рождения/уничтожения электронов с импульсом \mathbf{k} и спином σ в зоне проводимости с дисперсией $\varepsilon_{\mathbf{k}}$. $V_{\mathbf{k}}$ - сила гибридизации, μ – химический потенциал.

⁸²Компактные диаграммы в которых все внутренние электронные линии "одеты" взаимодействием, т.е. соответствуют полным функциям Грина.

⁸³SIAM - Single Impurity Anderson Model.

"Свободная" (в отсутствие взаимодействия) одночастичная примесная функция Грина имеет следующий вид:

$$G_d(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \varepsilon_d - \Delta(\omega) - \Sigma(\omega)}, \qquad (549)$$

где

$$\Delta(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{\omega + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}}$$
(550)

- функция гибридизации.

Полная примесная функция Грина записывается следующим образом:

$$G_d(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \varepsilon_d - \Delta(\omega) - \Sigma_d(\omega)}, \qquad (551)$$

Структура "скелетных" диаграмм для СЭЧ теории возмущений по U абсолютно такая же, как в модели Хаббарда в пределе $d \to \infty$, когда СЭЧ становится локальной. Таким образом, Σ_d определяется тем же самым функционалом $\Sigma_d(\omega) = F[G_d(\omega)]$, как и в модели Хаббарда в пределе $d \to \infty$. Отметим, что для определения СЭЧ и функции Грина (551) SIAM нет необходимости знать явный вид гибридизации $V_{\mathbf{k}}$, а достаточно лишь функции гибридизации (550). В результате, интересующая нас в DMFT локальная динамическая задача полностью эквивалентна SIAM с точностью до переобозначений:

$$\omega + \mu - \varepsilon_d - \Delta(\omega) = \mathcal{G}^{-1}(\omega) \tag{552}$$

Н Обоснование обобщенного $\mathbf{DMFT} + \Sigma_{\mathbf{k}}$ подхода

В этом приложении мы представим обоснование обобщенной DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ схемы для модели Хаббарда

$$H = -\sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \qquad (553)$$

используя диаграммный подход. Одночастичная функция Грина в мацубаровском представлении, как обычно, имеет вид:

$$G_{\mathbf{k}}(i\omega) = \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega, \mathbf{k})}$$
(554)



Рис. 171: "Скелетные" диаграммы для локальной собственно-энергетической части DMFT Σ . Волнистые линии представляют локальное (хаббардовское) кулоновское взаимодействие U, сплошные линии обозначают локальные функции Грина G_{ii} .

Фундаментом стандартной DMFT является рассмотрение предела бесконечной пространственной размерности $d \to \infty$. В этом пределе сохраняются только локальные вклады в электронную собственно-энергетическую часть [147, 149], т.е. $\Sigma_{ij} \to \delta_{ij} \Sigma_{ii}$ или, в обратном пространстве, $\Sigma(i\omega, \mathbf{k}) \to \Sigma(i\omega)$.

На Рис. 171 показаны примеры "скелетных" диаграмм для локальной СЭЧ, дающие вклад в пределе *d* → ∞. Полный набор этих и похожих диаграмм определяет СЭЧ как функционал локальной функции Грина

$$\Sigma = F[G_{ii}] , \qquad (555)$$

где

$$G_{ii}(i\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega)}.$$
(556)

Теперь определим "поле Вейса"

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) = \Sigma(i\omega) + G_{ii}^{-1}(i\omega)$$
(557)

которое требуется для постановки эффективной однопримесной задачи с эффективным действием, определяемым (305). С помощью уравнения Дайсона функция Грина (304) для этой эффективной задачи может быть записана в виде:

$$G_d(i\omega) = \frac{1}{\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) - \Sigma_d(i\omega)}$$
(558)

и "скелетные" диаграммы для СЭЧ Σ_d оказываются точно такими же, как показанные на Рис. 171 для решеточной СЭЧ, но с заменой $G_{ii} \to G_d$. Таким образом мы получаем:

$$\Sigma_d = F[G_d],\tag{559}$$

$$\underbrace{i}_{i} + \underbrace{j}_{i} + \underbrace{j}_{i}$$

Рис. 172: Типичные "скелетные" диаграммы для СЭЧ в DMFT+Σ_k подходе. Первые два члена – диаграммы для локальной СЭЧ DMFT ; средние две диаграммы показывают вклады в нелокальную часть СЭЧ от спиновых флуктуаций, рассеяние на которых представлено пунктиром; последняя диаграмма (b) – пример диаграмм, приводящих к интерференции между локальной и нелокальной частями, которыми пренебрегают.

где F – такой же функционал, как в (555). Два уравнения (558) и (559) полностью определяют G_d и Σ_d для данного "поля Вейса" \mathcal{G}_0 . С другой стороны, для локальных Σ и G_{ii} начальной (хаббардовской) задачи мы имели точно такую же пару уравнений (555) и (557), а \mathcal{G}_0 в обеих задачах одинакова, следовательно:

$$\Sigma = \Sigma_d; \qquad G_{ii} = G_d. \tag{560}$$

Таким образом, нахождение локальной СЭЧ модели Хаббарда в пределе (*d* → ∞) в конечном счете сводится к вычислению СЭЧ в эффективной квантовой примесной задаче, определяемой эффективным действием (305).

Сейчас рассмотрим нелокальный вклад в СЭЧ. Если мы пренебрегаем интерференцией между локальным и нелокальным вкладами (такими, например, как диаграмма, показанная на Рис. 172(b)), тогда полная СЭЧ определяется простой суммой этих двух вкладов. "Скелетные" диаграммы для нелокальной СЭЧ функции Грина $G_{\mathbf{k}}$ (301) показаны на Рис. 172(a), где сплошная линия обозначает функцию Грина $G_{\mathbf{k}}$, определяемую (301), а пунктиром обозначено взаимодействие со статическими гауссовыми спиновыми (зарядовыми) флуктуациями. Подчеркнем, что эти диаграммы отсутствуют в стандартной DMFT, поскольку любой вклад от флуктуаций Орнштейн–Церниковского типа пропадает в пределе $d \to \infty$. Таким образом проблемы двойного учета диаграмм вообще не возникает.

Локальный вклад в СЭЧ опять определяется функционалом (555) от локальной функции Грина G_{ii}, которая сейчас дается выражением (302). Снова вводя "поле Вейса" (557) и повторяя все предыдущие аргументы, мы опять сводим задачу нахождения локальной части СЭЧ к решению "примесной" проблемы с эффективным действием (305).

Для определения нелокального вклада $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ введем

$$\mathcal{G}_{0\mathbf{k}}(i\omega) = \frac{1}{G_{\mathbf{k}}^{-1}(i\omega) + \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)} = \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega)},$$
(561)

играющую роль "голой" функции Грина для электронного рассеяния на статических гауссовых спиновых (зарядовых) флуктуациях. Предполагаемая статичность этих флуктуаций позволяет использовать метод работ[50, 63, 64] и вычисление нелокальной части СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ сводится к рекуррентной процедуре, определяемой уравнениями (308) и (309). Выбор "голой" функции Грина в виде (561) гарантирует, что "одетая" флуктуациями функция Грина $G_{\mathbf{k}}^{-1}(i\omega) = \mathcal{G}_{0\mathbf{k}}^{-1}(i\omega) - \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$, которая входит в "скелетные" диаграммы для $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$, точно совпадает с полной функцией Грина $G_{\mathbf{k}}(i\omega)$.

Таким образом, мы получаем полностью самосогласованную схему для вычисления и локального (возникающего вследствие сильных одноузельных корреляций) и нелокального (возникающего от флуктуаций ближнего порядка) вкладов в электронную СЭЧ.

I W в модели Хаббарда.

В этом приложении мы получим явное микроскопическое выражение (310) для псевдощелевой амплитуды W. В рамках двухчастичного самосогласованного подхода работы [165], работающего для промежуточных величин U, и пренебрегающего зарядовыми флуктуациями, мы можем записать выражение для электронной СЭЧ в форме, используемой в (46) с локальным вкладом в низшем порядке по одноузельному хаббардовскому взаимодействию

$$\Sigma_{\sigma}(i\omega) = Un_{-\sigma},\tag{562}$$

который сохраняется в пределе $d \to \infty$ и точно учитывается в DMFT (со всеми вкладами высшего порядка). Нелокальный вклад в СЭЧ (исчезающий при $d \to \infty$ и не учитываемый в DMFT), возникающий от взаимодействия со спиновыми флуктуациями, имеет вид:

$$\Sigma_{\vec{k}}(i\omega) = \frac{U}{4} \frac{T}{N} \sum_{m} \sum_{\mathbf{q}} U_{sp} \chi_{sp}(\mathbf{q}, \nu_m) G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega + i\nu_m) , \qquad (563)$$

где

$$U_{sp} = g_{\uparrow\downarrow}(0)U, \qquad g_{\uparrow\downarrow}(0) = \frac{\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle}{\langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle}$$
(564)

с $\langle n_{\sigma}^2 \rangle = \langle n_{\sigma} \rangle$ и $\langle n_{i\uparrow} \rangle = \langle n_{i\downarrow} \rangle = \frac{1}{2}n$ в парамагнитной фазе. Для динамической спиновой восприимчивости $\chi_{sp}(\mathbf{q},\nu_m)$ мы используем стандартную форму Орштейна–Цернике [165], аналогичную использованной в спин–фермионной модели [63], которая описывает усиление рассеяния на импульсах переноса вблизи вектора антиферромагнитизма $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$. В этом приближении мы можем написать следующее выражение для нелокального вклада в СЭЧ [63, 64]:

$$\Sigma_{\vec{k}}(i\omega) = \frac{1}{4}UU_{sp}\frac{T}{N}\sum_{m}\sum_{\vec{q}}\chi_{sp}(\mathbf{q},\nu_{m})\frac{1}{i\omega+i\nu_{m}+\mu-\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{q})} \approx$$

$$\approx \frac{1}{4}UU_{sp}\frac{T}{N}\sum_{m}\sum_{\vec{q}}\chi_{sp}(\mathbf{q},\nu_{m})\sum_{\vec{q}}S(\vec{q})\frac{1}{i\omega+\mu-\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{q})} \equiv$$

$$\equiv W^{2}\sum_{\vec{q}}S(\mathbf{q})\frac{1}{i\omega+\mu-\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{q})} =$$

$$= \frac{W^{2}}{i\omega+\mu-\varepsilon(\mathbf{p}+\mathbf{Q})+i(|v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^{x}|+|v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^{y}|)\kappa\text{sign}\omega}.$$
(565)

Здесь введен статический форм-фактор [64]

$$S(\vec{q}) = \frac{2\xi^{-1}}{(q_x - Q_x)^2 + \xi^{-2}} \frac{2\xi^{-1}}{(q_y - Q_y)^2 + \xi^{-2}}$$
(566)

и квадрат псевдощелевой амплитуды

$$W^{2} = \frac{1}{4}UU_{sp}\frac{T}{N}\sum_{m}\sum_{\vec{q}}\chi_{sp}(\mathbf{q},\nu_{m}) =$$

= $\frac{1}{4}UU_{sp}[\langle n_{i\uparrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle -2 \langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rangle] =$
= $\frac{1}{4}UU_{sp}\frac{1}{3} \langle \vec{S}_{i}^{2} \rangle,$ (567)

где использовано точное правило сумм для восприимчивости [63, 165]. Учтя (564),мы немедленно получаем (310).


Рис. 173: Зависимость от заполнения псевдощелевой амплитуды W, вычисленной в DMFT(QMC, NRG) на двумерной квадратной решетке. Слева — вычисленное в DMFT(QMC) для дырочного заполнения при различных U, T и соотношениях t, t'. Справа — вычисленное в DMFT(NRG) для дырочного и электронного заполнения при различных U, t'/t = -0.4, T = 0.4t.

Фактически, приближения, сделанные в (565) и (566) позволяют точно просуммировать весь фейнмановский ряд для электронного взаимодействия со спиновыми флуктуациями, замененными статическим гауссовым случайным полем. Таким образом обобщенное однопетлевое приближение (565) в итоге приводит к основной рекуррентной процедуре (308), (309) [63, 64].

Используя DMFT(QMC) и DMFT(NRG) подход мы расчитали заполнения $\langle n_{i\uparrow} \rangle$, $\langle n_{i\downarrow} \rangle$ и двойное заполнение $\langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rangle$, требующиеся для вычисления псевдощелевой амплитуды W в выражении (567).

На левой панели Рис. 173 представлены соответствующие величины W в случае дырочного допирования, полученные DMFT(QMC). Как легко видеть W в основном растет с ростом n (уменьшение дырочного допирования). Пока U меньше 8t (ширины зоны для квадратной решетки) W как функция n растет монотонно. Когда U становится больше B = 8t (когда произошел переход металл-диэлектрик) можно наблюдать локальный минимум для n = 0.9, который становится все более выраженным с дальнейшим увеличением U. Для t'/t = -0.4 при обеих температурах разброс величин W больше, чем в случае t' = 0. Также при этом W имеет более слабую температурную зависимость. Все величины W лежат в интервале $\sim 0.75t \div 2t$. Поэтому для наших вычислений мы использовали только две характерные величины W = tи W = 2t.

На правой панели Рис. 173 показаны результаты для W, полученные в DMFT(NRG) как для дырочного, так и для электронного допирования. Видим, что результаты для дырочного допирования сохраняются и наблюдается существенная (на порядок по величине) асимметрия частицы-дырки для больших величин U. Для U меньше или порядка 8t (соответствующим слабым или средним по силам корреляциям) такая асимметрия частицы-дырки для W соответствует фактору порядка двойки. В основном такая асимметрия связана с двойным заполнением $\langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rangle$, резко растуцим при переходе через половинное заполнение (n = 1) и увеличивающимся с ростом U. Этот результат находится в полном согласии экспериментальным фактом более сильных псевдощелевых эффектов в электронно допированных системах.

J Тождество Уорда

В этом приложении мы представляем обоснование тождеств Уорда, использованных в основном тексте. Начнем с общего выражения для вариации электронной СЭЧ вследствии произвольной вариации полной функции Грина, которое верно для любой взаимодействующей Ферми системы [104]:

$$\Delta \Sigma_p = \sum_{p'} U_{pp'}(q) \Delta G_{p'}, \qquad (568)$$

где $U_{pp'}(q)$ – неприводимая вершина в канале частица–дырка, и мы использовали 4-мерные обозначения $p = (i\varepsilon, \mathbf{p}), q = (i\omega, \mathbf{q})$ и т.д. В дальнейшем мы берем:

$$\Delta \Sigma_p = \Sigma_+ - \Sigma_- \equiv \Sigma(i\varepsilon_+, \mathbf{p}_+) - \Sigma(i\varepsilon_-, \mathbf{p}_-)$$
(569)

и (в таких же обозначениях):

$$\Delta G_p = G_+ - G_- = (G_+ G_-)_p (\Delta \Sigma_p - \Delta (G_0^{-1})_p), \tag{570}$$

где $\Delta(G_0^{-1})_p = G_{0+}^{-1} - G_{0-}^{-1}$, и последнее выражение было получено с использованием стандартного уравнения Дайсона.

Отметим, что уравнение (568) аналогично тождеству Уорда для невзаимодействующих электронов в неупорядоченных системах, введенному в работе [255].

Подставляя последнее выражение в (568) мы получаем:

$$\Delta \Sigma_p = \sum_{p'} U_{pp'}(q) (G_+ G_-)_{p'} (\Delta \Sigma_{p'} - \Delta (G_0^{-1})_{p'}).$$
(571)

Решая итерациями это уравнение, мы получаем:

$$\Delta \Sigma_{p} = \sum_{p'} U_{pp'}(G_{+}G_{-})_{p'}(-\Delta(G_{0}^{-1})_{p'}) + \sum_{p''p'} U_{pp''}(G_{+}G_{-})_{p'}(-\Delta(G_{0}^{-1})_{p'}) + \dots$$
(572)

Умножая обе части (572) на $(G_+G_-)_p$ and прибавляя

$$\sum_{p'} (G_+G_-)_p \delta_{pp'}(-\Delta(G_0^{-1})_{p'}) = (G_+G_-)_p(-\Delta(G_0^{-1})_p)$$

мы получаем:

$$(G_{+}G_{-})_{p}(\Delta\Sigma_{p} - \Delta(G_{0}^{-1})_{p}) = \sum_{p'} [(G_{+}G_{-})_{p}\delta_{pp'} + (G_{+}G_{-})_{p}U_{pp'}(G_{+}G_{-})_{p'} + (G_{+}G_{-})_{p}\sum_{p''}U_{pp''}(G_{+}G_{-})_{p'} + \dots](-\Delta(G_{0}^{-1})) = \sum_{p} \Phi_{pp'}(q)(-\Delta(G_{0}^{-1})_{p'}), \quad (573)$$

где $\Phi_{pp'}(q)$ – полная двухчастичная функция Грина, определяемая следующим уравнением Бете–Солпитера [104]:

$$\Phi_{pp'}(q) = (G_+G_-)_p \delta_{pp'} + (G_+G_-)_p \sum_{p'} U_{pp'} \Phi_{pp'}(q).$$
(574)

Окончательно мы получаем уравнение:

$$\Delta G_p = \sum_{p'} \Phi_{pp'}(q) (-\Delta (G_0^{-1})_{p'}), \tag{575}$$

которое является общей формой нашего тождества Уорда.

Суммируя обе стороны (575) по **р** и взяв **q** = 0, мы получаем тождество (339), использованное выше. Аналогично,взяв "голую" функцию Грина (340), мы получаем (341).

К Уравнение для релаксационного ядра

Будем следовать стандартному подходу в самосогласованной теории локализации[69, 253, 25, 254, 255, 55], но учтем появление DMFT вклада $\Sigma^{R,A}(\varepsilon)$ в одночастичных функциях Грина (370) и постараемся не ограничивать рассмотрение пределом малой частоты ω .

Рассмотрим уравнение Бете-Солпитера, связывающее полную двухчастичную функцию Грина $\Phi_{\mathbf{pp}'}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})$ с соответствующей неприводимой вершиной $U_{\mathbf{pp}'}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})$. Обе вершины учитывают только примесное рассеяние, но построены на гриновских функциях (370). Уравнение Бете-Солпитера может быть записано в виде кинетического уравнения[69, 253, 25, 254, 255, 55]:

$$\left(\tilde{\omega} - \epsilon(\mathbf{p}) - \Delta \Sigma_{imp}^{RA}(\omega)\right) \Phi_{\mathbf{pp}'}^{0RA}(\omega, \mathbf{q}) = -\Delta G_{\mathbf{p}} \left(\delta_{\mathbf{pp}'} + \sum_{\mathbf{p_1}} U_{\mathbf{pp_1}}^{0RA}(\omega, \mathbf{q}) \Phi_{\mathbf{p_1p}'}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})\right)$$
(576)

где $\Delta G_{\mathbf{p}} = G^R(\varepsilon_+, \mathbf{p}_+) - G^A(\varepsilon_-, \mathbf{p}_-)$. Основное отличие от аналогичного уравнения в работах[69, 253, 25, 254, 255, 55] выражается заменой $\omega \to \tilde{\omega}$.

Суммируем (576) по **р** и **р**' с домножением на 1 и ($\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{q}}$), где $\hat{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}$, с учетом точного тождества Уорда:

$$\Delta \Sigma_{imp}^{RA}(\omega) = \sum_{\mathbf{p}'} U_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{0RA}(\omega, \mathbf{q}) \Delta G_{\mathbf{p}'}$$
(577)

и приближенного представления:

$$\sum_{\mathbf{p}'} \Phi_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}^{0RA}(\omega, \mathbf{q}) \approx \frac{\Delta G_{\mathbf{p}}}{\sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}}} \Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega, \mathbf{q}) + \frac{\Delta G_{\mathbf{p}}(\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{q}})}{\sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}}(\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{q}})^2} \Phi_{1\varepsilon}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})$$
(578)

где $\Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega, \mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{pp}'} \Phi_{\mathbf{pp}'}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})$ – интересующая нас петля (348), $\Phi_{1\varepsilon}^{0RA}(\omega, \mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{pp}'} (\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{q}}) \Phi_{\mathbf{pp}'}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})$. Данное представление является двумя первыми членами разложения $\sum_{\mathbf{p}'} \Phi_{\mathbf{pp}'}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})$ по полиномам Лежандра $P_l(\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{q}})$. Важное отличие (578) от

аналогичного представления в работах [69, 253, 25, 254, 255, 55] связано с тем, что частоту ω мы не полагаем малой.

В результате, получаем при $q \to 0$ замкнутую систему уравнений на определение $\Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})$ и $\Phi_{1\varepsilon}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})$:

$$\tilde{\omega}\Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega,\mathbf{q}) - \langle v \rangle q\Phi_{1\varepsilon}^{0RA}(\omega,\mathbf{q}) = -\sum_{\mathbf{p}}\Delta G_{\mathbf{p}}$$

$$(\tilde{\omega} + M(\omega))\Phi_{1\varepsilon}^{0RA}(\omega,\mathbf{q}) - \frac{\langle v \rangle}{d}q\Phi_{1\varepsilon}^{0RA}(\omega,\mathbf{q}) = 0$$
(579)

где релаксационное ядро имеет вид:

$$M(\omega) = -\Delta \Sigma_{imp}^{RA}(\omega) + d \frac{\sum_{\mathbf{pp'}} (\hat{\mathbf{p}} \hat{\mathbf{q}}) \Delta G_{\mathbf{p}} U_{\mathbf{pp'}}^{0RA}(\omega, \mathbf{q}) \Delta G_{\mathbf{p'}}(\hat{\mathbf{p'}} \hat{\mathbf{q}})}{\sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}}},$$
(580)

а средняя скорость определяется выражением:

$$\langle v \rangle = \frac{\sum_{\mathbf{p}} |\mathbf{v}_{\mathbf{p}}| \Delta G_{\mathbf{p}}}{\sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}}}; \ \mathbf{v}_{\mathbf{p}} = \frac{\partial \epsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}},$$
 (581)

Из (579) получаем:

$$\Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\mathbf{q},\tilde{\omega}) = \frac{-\sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}}}{\tilde{\omega} + iD(\omega)q^2}$$
(582)

что в пределе малых ω дает выражение (373). Здесь обобщенный коэффициент диффузии определяется выражением (378).

Используя приближение "максимально перекрестных" диаграмм для неприводимой вершины $U_{\mathbf{pp}'}^{0RA}(\omega, \mathbf{q})$ и проводя процедуру самосогласования[69, 253, 25, 254, 255, 55] (заменяя друдевский коэффициент диффузии в куперовском полюсе неприводимой вершины обобщенным (378)), из (580) получаем выражение (379) для релаксационного ядра. Тогда выражение (378) сводится к самосогласованному уравнению (381) на обобщенный коэффициент диффузии.

Уравнение (381) на обобщенный коэффициент диффузии (в общем случае комплексный) является обычным трансцедентным уравнением. Оно численно решалось итерациями для каждого значения $\tilde{\omega}$ с учетом того, что для рассматриваемой нами трехмерной системы и обрезания (382), входящая в (381) сумма имеет вид:

$$\sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\tilde{\omega} + iD(\omega)q^2} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_0^3}{iD(\omega)k_0^2} \int_0^1 \frac{y^2 dy}{y^2 + \frac{\tilde{\omega}}{iD(\omega)k_0^2}} =$$
(583)

$$=\frac{1}{2\pi^2}\frac{k_0^3}{iD(\omega)k_0^2}\left\{1-\left(\frac{\tilde{\omega}}{iD(\omega)k_0^2}\right)^{\frac{1}{2}}arctg\left(\left(\frac{iD(\omega)k_0^2}{\tilde{\omega}}\right)^{\frac{1}{2}}\right)\right\}$$

Для двумерной системы (d = 2) при малом беспорядке, когда радиус локализации экспоненциально велик, существенную роль может играть характерный размер системы L и кроме обрезания на больших q, определяемого (382), необходимо учитывать обрезание на малых q (383) и сумма по q в (381) принимает вид:

$$\sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\tilde{\omega} + iD(\omega)q^2} = \frac{1}{i2\pi D(\omega)} \int_{\frac{k_L}{k_0}}^{1} \frac{ydy}{y^2 + \frac{\tilde{\omega}}{iD(\omega)k_0^2}} =$$
(584)
$$= \frac{1}{i4\pi D(\omega)} \ln\left(\frac{1 - \frac{i\tilde{\omega}}{D(\omega)k_0^2}}{(\frac{k_L}{k_0})^2 - \frac{i\tilde{\omega}}{D(\omega)k_0^2}}\right)$$

Для конечных частот ω выражение для $\Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\mathbf{q},\tilde{\omega})$ определяется (582) в результате выражение (345) для оптической проводимости принимает вид:

$$\operatorname{Re}\sigma(\omega) = \frac{e^2\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left[f(\varepsilon_{-}) - f(\varepsilon_{+}) \right] \operatorname{Re}\left\{ \frac{i\sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}} D(\omega)}{\omega^2} - \phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega) \left[1 - \frac{\Delta \Sigma^{RR}(\omega)}{\omega} \right]^2 \right\}$$
(585)

Второе слагаемое в фигурной скобке определялось из "лестничного" приближения:

$$\Phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{\sum_{\mathbf{p}} G^R(\varepsilon_+, \mathbf{p}_+) G^R(\varepsilon_-, \mathbf{p}_-)}{1 - \Delta^2 \sum_{\mathbf{p}} G^R(\varepsilon_+, \mathbf{p}_+) G^R(\varepsilon_-, \mathbf{p}_-)}$$
(586)

Этот вклад (не сингулярный при малых ω) не существенен при $\omega \to 0$, но приводит к конечным поправкам с увеличением ω . Выражение (585) является нашим окончательным результатом и численно и анализировалось в широкой области частот, а при $\omega \to 0$ оно переходит в (377).

L Влияние двухплоскостного расщепления.

Поскольку учет эффектов двухплоскостного расщепления (BS) в Bi2212 требует существенно двузонной модели, мы введем "затравочный" гамильтониан в обратном пространстве, как следущую матрицу по зонным (связывающая и антисвязывающая зона) индексам:

$$\hat{\mathbf{H}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon(\mathbf{k}) & t_{\perp}(\mathbf{k}) \\ t_{\perp}(\mathbf{k}) & \varepsilon(\mathbf{k}) \end{pmatrix}.$$
(587)

где дисперсия в плоскости $\varepsilon(\mathbf{k})$ и межплоскостной перескок $t_{\perp}(\mathbf{k})$ определяются (352) и (353) соответственно. Тогда, локальная функция Грина также становится матрицей:

$$\hat{\mathbf{G}}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(i\omega - \hat{\mathbf{H}}(\mathbf{k}) - (\Sigma(\omega) + \Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)) \hat{\mathbf{I}} \right)^{-1}.$$
(588)

где мы предположили диагональность СЭЧей. В дальнейшем рассмотрении мы хотим сохранить однозонной DMFT часть задачи. Это можно достигнуть рассматривая лишь диагональные элементы (588):

$$\widetilde{G}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{G^{-1}(\omega, \mathbf{k})}{(G^{-1}(\omega, \mathbf{k}))^2 - (t_{\perp}(\mathbf{k}))^2},$$
(589)

где $G(\omega, \mathbf{k})$ полная функция Грина однозонной задачи (301). Такая локальная функция Грина $\widetilde{G}(\omega)$ (которая включает аддитивно и вклады СЭЧей) и будет определять сейчас эффективную андерсоновскую однопримесную задачу. Необходимо также отметить, что поскольку в DMFT мы работаем с однозонной задачей поправок на двойной учет взаимодействия от LDA и DMFT не возникает.[159]

М "Затравочная" электронная дисперсия и скорость для зоны с полуэллиптической DOS

В качестве невозмущенной мы выбираем зону с полуэллиптической плотностью состояний (386). Предполагая спектр изотропным $\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon(|\mathbf{p}|) \equiv \epsilon(p)$ и приравнивая число состояний в элементе фазового объема числу состояний в области энергий $[\epsilon, \epsilon + d\epsilon]$, получаем дифференциальное уравнение на определение $\epsilon(p)$:

$$\frac{4\pi p^2 dp}{(2\pi)^3} = N_0(\epsilon) d\epsilon \tag{590}$$

Предполагая квадратичность закона дисперсии $\epsilon(p)$ вблизи левого края зоны, получаем начальное условие к (590) $p \to 0$ при $\epsilon \to -D$. В результате:

$$p = \left[6\pi \left(\pi - \varphi + \frac{1}{2}sin(2\varphi)\right)\right]^{\frac{1}{3}}$$
(591)

где $\varphi = \arccos(\frac{\epsilon}{D})$, а импульс дан в единицах обратного параметра решетки. Данное выражение неявным образом определяет закон дисперсии $\epsilon(p)$ на электронном участке спектра $\epsilon \in [-D, 0]$. В случае половинного заполнения легко определить импульс Ферми:

$$p_F = p(\epsilon = 0) = (3\pi^2)^{\frac{1}{3}}$$
 (592)

Нас интересует также скорость $|\mathbf{v}_{\mathbf{p}}| = \left|\frac{\partial \epsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}\right| = \frac{\partial \epsilon(p)}{\partial p}$, входящая, например, в выражение (581) для средней скорости. Из (590) получаем:

$$|\mathbf{v}_{\mathbf{p}}| = \frac{d\epsilon}{dp} = \frac{p^2}{2\pi^2} \frac{1}{N_0(\epsilon)}$$
(593)

где р определяется выражением (591).

На дырочном участке спектра ($\epsilon \in [0, D]$), для получения квадратичного закона дисперсии вблизи правого края зоны ($\epsilon \to D$), вводим дырочный импульс $\tilde{p} = 2p_F - p$ и приравниваем число состояний в фазовом пространстве $d^3\tilde{p}$ и в энергетической полосе [$\epsilon, \epsilon + d\epsilon$]

$$\frac{4\pi\tilde{p}^2d\tilde{p}}{(2\pi)^3} = -N_0(\epsilon)d\epsilon \tag{594}$$

Требуя $\tilde{p} \to 0$ на правом краю зоны $\epsilon \to 0,$ получаем:

$$\tilde{p} = \left[6\pi \left(\varphi - \frac{1}{2}sin(2\varphi)\right)\right]^{\frac{1}{3}}$$
(595)

Для скорости на дырочном участке спектра получаем:

$$|\mathbf{v}_{\mathbf{p}}| = \frac{d\epsilon}{dp} = -\frac{d\epsilon}{d\tilde{p}} = \frac{\tilde{p}^2}{2\pi^2} \frac{1}{N_0(\epsilon)}$$
(596)

Выражения (593), (596) определяют зависимость $|\mathbf{v_p}|$ от энергии. Легко убедится что скорость оказывается четной по энергии и обращается в ноль на краях зоны. Данные выражения позволяют, например в (581), перейти от суммирования по импульсам к интегрированию по энергии.

Список литературы

- [1] Мотт Н, Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. (М.: Мир, 1974)
- [2] Bednordz J.C., Muller K.A. Possible high- T_c superconductivity in the Ba La Cu O.— Z.Phys.B., **64**, 189-193 (1986).
- [3] Е.Г.Максимов. Проблема высокотемпературной сверхпроводимости. Современное состояние. УФН **170**, No 10, 1033–1061 (2000)
- [4] M.Kuliĉ. Interplay of electron-phonon interaction and strong correlations: the possible way to high-temperature superconductivity. Phys. Reports 338, 1 (2000)
- [5] M.Kuliĉ. Electron Phonon Interaction and Strong Correlations in High-Temperature Superconductors: One can not avoid unavoidable. ArXiv: cond-mat/0404287
- [6] D.J.Scalapino. The case for $d_{x^2-y^2}$ pairing in the cuprate superconductors. Phys. Reports **250**, 329-365 (1995)
- [7] T.Moriya, K.Ueda. Spin fluctuations and high temperature superconductivity. Adv. Phys. 49, No 5, 555–606 (2000)
- [8] A.V.Chubukov, D.Pines, J.Schmalian. The Physics of Superconductors. (Ed. K.-H.Bennemann and J.B.Ketterson), Springer 2002.; ArXiv: cond-mat/0201140
- [9] Y.Yanase, T.Jugo, T.Nomura, H.Ikeda, T.Hotta, K.Yamada. Theory of Superconductivity in Strongly Correlated Electron Systems. Phys. Reports 387, 1 (2004).; ArXiv: cond-mat/0309094
- [10] P.W.Anderson. The Theory of Superconductivity in the High $-T_c$ Cuprates. Princeton University Press, Princeton, 1997
- [11] E.Demler, W.Hanke, Shou-Cheng Zhang. SO(5) Theory of Antiferromagnetism and Superconductivity. Rev. Mod. Phys. 76, No 3, 909–974 (2004); ArXiv: condmat/0405038

- [12] M.V.Sadovskii. Superconductivity and Localization. World Scientific, Singapore 2000; Phys.Reports 282, 225 (1997); CΦXT 8, 337 (1995)
- [13] S.H.Pan, J.P.O'Neil, R.L.Badzey, C.Chamon, H.Ding, J.R.Engelbrecht, Z.Wang,
 H.Eisaki, S.Uchida, A.K.Gupta. Microscopic electronic inhomogeneity in the high Tc superconductor Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+x}. Nature 413, 282-284 (2001)
- [14] K.McElroy, D.-H.Lee, J.E.Hoffman, K.M.Lang, E.W.Hudson, H.Eisaki, S.Uchida, J.Lee, J.C.Davis. Homogenous nodal superconductivity coexisting with inhomogeneous charge order in strongly underdoped Bi-2212. ArXiv: condmat/0404005
- [15] Z.-X.Shen, D.S.Dessau. Electronic structure and photoemission studies of late transition-metal oxides — Mott insulators and high-temperature superconductors. Phys. Reports 253, 1 (1995)
- [16] A.Damascelli, Z.Hussain, Z.-X.Shen. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors. Rev. Mod. Phys. 75, No 2, 473–541 (2003)
- [17] X.J.Zhou, T.Yoshida, D.-H.Lee, W.L.Yang, V.Brouet, F.Zhou, W.X.Ti, J.W.Xiong,
 Z.X.Zhao, T.Sasagawa, T.Kakeshita, H.Eisaki, S.Uchida, A.Fujimori, Z.Hussain, Z. X.Shen. Dichotomy between Nodal and Antinodal Quasiparticles in Underdoped
 (La_{2-x}Sr_x)CuO₄ Superconductors. Phys. Rev. Lett. **92**, 187001-187004 (2004).
- [18] N. Doiron-Leyraud, C. Proust, D. LeBoeuf, J. Levallois, J.-B. Bonnemaison, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, L. Taillefer. Quantum oscillations and the Fermi surface in an underdoped high-Tc superconductor. Nature 447, 565-568 (2007)
- [19] A. F. Bangura, J. D. Fletcher, A. Carrington, J. Levallois, M. Nardone, B. Vignolle,
 P. J. Heard, N. Doiron-Leyraud, D. LeBoeuf, L. Taillefer, S. Adachi, C. Proust,
 N. E. Hussey. Small Fermi Surface Pockets in Underdoped High Temperature
 Superconductors: Observation of Shubnikov-de Haas Oscillations in YBa₂Cu₄O₈.
 Phys. Rev. Lett. 100, 047004-047007 (2008)

- [20] C. Jaudet, D. Vignolles, A. Audouard, J. Levallois, D. LeBoeuf, N. Doiron-Leyraud,
 B. Vignolle, M. Nardone, A. Zitouni, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, L.
 Taillefer, C. Proust. Phys. de Haas-van Alphen oscillations in the underdoped cuprate YBa₂Cu₃O_{6.5}. Phys. Rev. Lett. **100**, 187005 (2008)
- [21] D. LeBoeuf, N. Doiron-Leyraud, J. Levallois, R. Daou, J.-B. Bonnemaison, N. E. Hussey, L. Balicas, B. J. Ramshaw, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, S. Adachi, C. Proust, L. Taillefer. Electron pockets in the Fermi surface of hole-doped high-Tc superconductors. Nature 450, 533 (2007)
- [22] N. Harrison, R. D. McDonald, J. Singleton. Cuprate Fermi Orbits and Fermi Arcs: The Effect of Short-Range Antiferromagnetic Order. Phys. Rev. Lett.99, 206406-206409 (2007)
- [23] E.Z. Kuchinskii, M.V. Sadovskii. Reconstruction of the Fermi surface in the pseudogap state of cuprates. Письма ЖЭТФ 88, No 3, 224-228 (2008); ArXiv: 0806.3826
- [24] T.Timusk, B.Statt. The pseudogap in high-temperature superconductors: an experimental survey. Rep.Progr.Phys. 62, No 1, 61-122 (1999)
- [25] М.В.Садовский. Псевдощель в высокотемпературных сверхпроводниках. УФН
 171, No 5, 539-564 (2001); ArXiv: cond-mat/0102111; ArXiv: cond-mat/0408489
- [26] J.W.Loram, K.A.Mirza, J.R.Cooper, J.L.Tallon. Superconducting and normal state energy gaps in Y_{0.8}Ca_{0.2}Ba₂Cu₃O_{7?δ} from the electronic specific heat. Physica C 282-287, 1405-1406 (1997);
- [27] Loram J W, Mirza K A, Cooper J R, Liang W Y, Wade J M Electronic specific heat of YBa₂Cu₃O_{6+x} from 1.8 to 300 K. Journal of Superconductivity 7, No 1, 243-249 (1994)

- [28] C.Renner, B.Revaz, J.Y.Genoud, K.Kadowaki, Ø.Fisher. Pseudogap Precursor of the Superconducting Gap in Under- and Overdoped Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+δ}. Phys.Rev.Lett. 80, 149 (1998)
- [29] V.M.Krasnov, A.Yurgens, D.Winkler, P.Delsing, T.Claeson. Evidence for Coexistence of the Superconducting Gap and the Pseudogap in Bi-2212 from Intrinsic Tunneling Spectroscopy. Phys.Rev.Lett. 84, 5860-5863 (2000); Preprint cond-mat/0006479
- [30] V.M.Krasnov, A.E.Kovalev, A.Yurgens, D.Winkler, Magnetic Field Dependence of the Superconducting Gap and the Pseudogap in Bi2212 and HgBr₂-Bi2212, Studied by Intrinsic Tunneling Spectroscopy. Phys. Rev. Lett. 86, 2657–2660 (2001)
- [31] Batlogg B., Varma C. The underdoped phase of cuprate superconductors. Physics World 13, 33–38 (2000)
- [32] M. R. Norman, H. Ding, M. Randeria, J. C. Campuzano, T. Yokoya, T. Takeuchi, T. Takahashi, T. Mochiku, K. Kadowaki, P. Guptasarma, D. G. Hinks. Destruction of the Fermi surface in underdoped high-Tc superconductors. Nature **392**, 157 (1998)
- [33] J.C. Campuzano, M.R. Norman, M. Randeria, In "Physics of Superconductors Vol. II, ed. K. H. Bennemann and J. B. Ketterson (Springer, Berlin, 2004), p. 167-273; J. Fink, S. Borisenko, A. Kordyuk, A. Koitzsch, J. Geck, V. Zabalotnyy, M. Knupfer, B. Buechner, H. Berger. Dressing of the charge carriers in high-Tc superconductors. ArXiv: cond-mat/0512307; X. J. Zhou, T. Cuk, T. Devereaux, N. Nagaosa, Z.-X. Shen. Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy on Electronic Structure and Electron-Phonon Coupling in Cuprate Superconductors. ArXiv: cond-mat/0604284.
- [34] E.M. Motoyama, G. Yu, I.M. Vishik, O.P. Vajk, P.K. Mang, M. Greven. Spin correlations in the electron-doped high-transition-temperature superconductor Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4±δ}. Nature 445, 186 (2007); ArXiv: cond-mat/0609386

- [35] T. R. Thurston, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, N. W. Preyer, G. Shirane, Y. Fujii,
 K. Yamada, Y. Endoh, K. Kakurai, M. Matsuda, Y. Hidaka, T. Murakami. Neutron
 scattering study of the magnetic excitations in metallic and superconducting
 La_{2-x}Sr_xCuO_{4-y}. Phys. Rev. B 40, No 7, 4585–4595 (1989)
- [36] A.Kaminski, H.M.Fretwell, M.R.Norman, M.Randeria, S.Rosenkranz, J.C.Campuzano, J.Mesot, T.Sato, T.Takahashi, T.Terashima, M.Takano, K.Kadowaki, Z.Z.Li, H.Raffy. Momentum anisotropy of the scattering rate in cuprate superconductors. Phys. Rev. B 71, 014517-014523 (2005); Arxiv: cond-mat/0404385
- [37] J. C. Campuzano, M. R. Norman, M. Randeria. In "Physics of Superconductors", Vol. II, Ed. by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson, Springer, Berlin 2004, p.p. 167-273
- [38] S. V. Borisenko, M. S. Golden, S. Legner, T. Pichler, C. DΓjrr, M. Knupfer, J. Fink, G. Yang, S. Abell, H. Berger. Joys and Pitfalls of Fermi Surface Mapping in Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+δ} Using Angle Resolved Photoemission. Phys. Rev. Lett. 84, 4453 (2000).
- [39] N.P.Armitage, D.H.Lu, C.Kim, A.Damascelli, K.M.Shen, F.Ronning, D.L.Feng,
 P.Bogdanov, Z.-X.Shen. Anomalous electronic structure and pseudogap effects in Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO₄. Phys.Rev.Lett. 87, 147003 (2001)
- [40] J.L.Tallon, J.W.Loram, The doping dependence of T* what is the real high-Tc phase diagram? Physica C349, 53 (2001); ArXiv: cond-mat/0005063
- [41] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, H. Hosono. Iron-Based Layered Superconductor $La[O_{1-x}F_x]FeAs$ (x = 0.05-0.12) with Tc = 26 K. J. Am. Chem. Soc. **130**, No 11, 3296-3297 (2008)

- [42] М.В. Садовский, Высокотемпературная сверхпроводимость в слоистых соединениях на основе железа. УФН 178, 1243 (2008) [Physics Uspekhi 51, No. 12 (2008)]; arXiv: 0812.0302
- [43] K. Ishida, Y. Nakai, H. Hosono. To What Extent Iron-Pnictide New Superconductors Have Been Clarified: A Progress Report. Journal of the Physical Society of Japan, 78, No 6, 062001 (2009)
- [44] Y.-M. Xu, P. Richard, K. Nakayama, T. Kawahara, Y. Sekiba, T. Qian, M. Neupane,
 S. Souma, T. Sato, T. Takahashi, H. Luo, H.-H. Wen, G.-F. Chen, N.-L. Wang, Z.
 Wang, Z. Fang, X. Dai, H. Ding, Fermi surface dichotomy of superconducting gap and pseudogap in underdoped pnictides. arXiv: 0905.4467
- [45] S. V. Borisenko , A. A. Kordyuk, A. N. Yaresko, V. B. Zabolotnyy, D. S. Inosov, R. Schuster, B. Buchner, R. Weber, R. Follath, L. Patthey, H. Berger. Pseudogap and charge density waves in two dimensions. Phys. Rev. Lett. 100, 196402-196405 (2008)
- [46] S. V. Borisenko, A. A. Kordyuk, V. B. Zabolotnyy, D. S. Inosov, D. Evtushinsky,
 B. Buchner, A. N. Yaresko, A. Varykhalov, R. Follath, W. Eberhardt, L. Patthey,
 H. Berger. Two Energy Gaps and Fermi-Surface "Arcs" in NbSe₂. Phys. Rev. Lett.
 102, 166402-166405 (2009)
- [47] D. S. Inosov, D. V. Evtushinsky, V. B. Zabolotnyy, A. A. Kordyuk, B. Buchner, R. Follath, H. Berger, S. V. Borisenko. Temperature-dependent Fermi surface of 2H - -TaSe₂ driven by competing density wave order fluctuations. Phys. Rev. B 79, 125112-125116 (2009)
- [48] М.В.Садовский. Об одной модели неупорядоченной системы (к теории "жидких полупроводников"). ЖЭТФ **66**, вып.5, 1720-1733(1974)
- [49] М.В.Садовский. Теория квазиодномерных систем, испытывающих пайерлсовский переход. ФТТ **16**, вып.9, 2504-2511(1974)

- [50] М.В.Садовский. Точное решение для электронной плотности состояний в одной модели неупорядоченной системы. ЖЭТФ 77, вып.5(11), 2070-2079(1979);
 [Sov.Phys.-JETP 50, 989 (1979)]
- [51] М.В.Садовский, А.А.Тимофеев. Оптическая проводимость высокотемпературных сверхпроводников в модели "спиновых мешков": точное решение? СФХТ
 4, вып.1, 11-23(1991)
- [52] M.V.Sadovskii, A.A. Timofeev. The two-particle Green function in a model of a one-dimensional disordered system: An exact solution? J.Moscow Phys.Soc. 1, 391-406(1991)
- [53] W.Wonneberger, R.Lautensschlager. Theory of infrared absorption of linear conductors J.Phys. C 9, No 15, 2865-2878 (1976)
- [54] С.М.Рытов. Введение в статистическую радиофизику. Часть І. "Наука", М, 1976.
- [55] М. V. Sadovskii. Diagrammatics. World Scientific, Singapore 2006; М.В.Садовский. Диаграмматика (Лекции по избранным задачам теории конденсированного состояния). Москва – Ижевск, 2004.
- [56] А.И.Посаженникова, М.В.Садовский. Разложение Гинзбурга-Ландау в простой модели сверхпроводника с псевдощелью. ЖЭТФ 115, 632 (1999); ArXiv: condmat/9806199
- [57] Э.З.Кучинский, М.В.Садовский. Сверхпроводимость в простой модели псевдощелевого состояния. ЖЭТФ 117, вып.3, 613-623 (2000); ArXiv: condmat/9910261
- [58] Э.З.Кучинский, М.В.Садовский. Сверхпроводимость в псевдощелевом состоянии, вызванном флуктуациями ближнего порядка. ЖЭТФ 119, вып.3, 553-566 (2001); ArXiv: cond-mat/0008377

- [59] Э.З.Кучинский, М.В.Садовский. Сверхпроводимость в точно решаемой модели псевдощелевого состояния: отсутствие самоусредняемости. ЖЭТФ 121, 758-769 (2002); ArXiv: cond-mat/0110013
- [60] A.Posazhennikova, P.Coleman. Quenched disorder formulation of the pseudogap problem. Phys.Rev. B 67, 165109-165120 (2003)
- [61] П.В.Елютин. Оптика и спектроскопия **43**, 542 (1977)
- [62] L.Bartosch, P.Kopietz. Exact Numerical Calculation of the Density of States of the Fluctuating Gap Model Phys.Rev. B60, 15488 (1999); ArXiv: cond-mat/9908065
- [63] J.Schmalian, D.Pines, B.Stojkovic. Microscopic theory of weak pseudogap behavior in the underdoped cuprate superconductors I: General theory and quasiparticle properties. Phys.Rev.Lett. 80, 3839(1998); Preprint cond-mat/9804129; Phys.Rev. B60, 667 (1999)
- [64] Э.З.Кучинский, М.В.Садовский. Модели псевдощелевого состояния двумерных систем. ЖЭТФ 115, вып.5, 1765-1785 (1999), [(JETP 88, 347 (1999)]; ArXiv: cond-mat/9808321
- [65] M.V. Sadovskii, I.A. Nekrasov, E.Z. Kuchinskii, Th. Prushke, V.I. Anisimov. Pseudogaps in Strongly Correlated Metals. ArXiv: cond-mat/0502612.
- [66] E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii. "Destruction" of the Fermi Surface due to Pseudogap Fluctuations in Strongly Correlated Systems. Письма в ЖЭТФ
 82, вып. 4, 217–222 (2005); ArXiv: cond-mat/0506215 [JETP Lett. 82, 198 (2005)].
- [67] M.V. Sadovskii, I.A. Nekrasov, E.Z. Kuchinskii, Th. Prushke, V.I. Anisimov. Pseudogaps in Strongly Correlated Metals: a Generalized Dynamical Mean - Field Theory Approach. Phys. Rev. B 72, No 15, 155105-155115 (2005); ArXiV: condmat/0508585

- [68] E.Z. Kuchinskii, I.A. Nekrasov, M.V. Sadovskii. Pseudogaps: Introducing the Length Scale into DMFT. ФНТ **32**, вып. 4/5, 528-537 (2006) [Low Temp. Phys. **32**, 398 (2006)]; ArXiv: cond-mat/0510376
- [69] D. Vollhardt and P. Wölfle, Diagrammatic, self-consistent treatment of the Anderson localization problem in d ≤ 2 dimensions. Phys. Rev. B 22, 4666-4679 (1980);
 Scaling Equations from a Self-Consistent Theory of Anderson Localization. Phys. Rev. Lett. 48, 699 (1982)
- [70] М. V. Sadovskii, N. A. Strigina.Оптическая проводимость в двумерной модели псевдощелевого состояния. ЖЭТФ 122, 610-623(2002) [JETP 95, 526 (2002)];
 ArXiv: cond-mat/0203479
- [71] E.Z. Kuchinskii, I.A. Nekrasov, M.V. Sadovskii. Pseudogaps in Strongly Correlated Metals: Optical Conductivity within the Generalized Dynamical Mean-Field Theory Approach. Phys. Rev. B 75, 115102-115112 (2007); ArXiv: cond-mat/0609404.
- [72] P.Monthoux, A.Balatsky, D.Pines. Weak coupling theory of high-temperature superconductivity in the antiferromagnetically correlated copper oxides. Phys.Rev. B46, 14803-14817 (1992)
- [73] P.Monthoux, D.Pines. YBa₂Cu₃O₇: A nearly antiferromagnetic Fermi liquid.Phys.Rev. B47, 6069-6081 (1993); Spin-fluctuation-induced superconductivity and normal-state properties of YBa₂Cu₃O₇. Phys.Rev. B49, 4261-4278 (1994)
- [74] A.P.Kampf, J.R.Schrieffer. Pseudogaps and the spin-bag approach to high-Tc superconductivity. Phys.Rev. B 41,6399 (1990); Spectral function and photoemission spectra in antiferromagnetically correlated metals. Phys.Rev. B 42,7967 (1990)
- [75] O.Tchernyshyov. Pseudogap in 1d revisited. Phys. Rev. B 59, 1358-1368 (1999);
 Preprint cond-mat/9804318

- [76] R.Gatt, S.Christensen, B.Frazer, Y.Hirai, T.Schmauder, R.J.Kelley, M.Onellion, I.Vybornik, L.Perfetti, G.Margaritondo, A.Morawski, T.Lada, A.Paszewin, C.Kendziora. Superconducting Gap vs. Wave Vector: Evidence for Hot Regions on the Fermi Surface. Preprint cond-mat/9906070
- [77] D.L.Feng, W.J.Zheng, K.M.Shen, D.H.Lu, F.Ronning, J.Shimoyama, K.Kishio, G.Gu, D.Van der Marel, Z.X.Shen. Fermi Surface of Bi2212: a Systematic Revisit and Identification of Almost Perfectly Nested Fermi Surface Segments. Preprint cond-mat/9908056
- [78] A.Virosztek, J.Ruvalds. Nested-Fermi-liquid theory. Phys.Rev. B 42, No 7, 4064-4074 (1990)
- [79] J.Ruvalds, C.T.Rieck, S.Tewari, J.Thoma, A.Virosztek. Nesting mechanism for dsymmetry superconductors. Phys.Rev. B 51, No 6, 3797-3805 (1995)
- [80] A.T.Zheleznyak, V.M.Yakovenko, I.E.Dzyaloshinskii. Parquet solution for a flat Fermi surface. Phys.Rev. B 55, No 5, 3200-3215 (1997)
- [81] P.Monthoux, A.V.Balatsky, D.Pines. Weak-coupling theory of high-temperature superconductivity in the antiferromagnetically correlated copper oxides. Phys.Rev. B 46, 14803 (1992)
- [82] P.Monthoux, D.Pines. YBa₂Cu₃O₇: A nearly antiferromagnetic Fermi liquid. Phys.Rev. B 47, 6069 (1993); Spin-fluctuation-induced superconductivity and normal-state properties of YBa₂Cu₃O₇. Phys.Rev. B 49, 4261 (1994)
- [83] M.V.Sadovskii. Models of the Pseudogap State in Cuprates. Physica C341-348, 811 (2000); ArXiv: cond-mat/9912318
- [84] A.J.Millis, H.Monien. On Pseudogaps in One-Dimensional Models with Quasi-Long-Ranged-Order. Phys.Rev. B 61, 12496 (2000); ArXiv: cond-mat/9907223

- [85] М.В.Садовский. Optical Conductivity in a Simple Model of Pseudogap State in Two-Dimensional System. Письма ЖЭТФ 69, 447 (1999); preprint condmat/9902192
- [86] L.Bartosch, P.Kopietz. Exactly solvable toy model for the pseudogap state. Eur.
 Phys. J. B17, 555 (2000); ArXiv: cond-mat/0006346
- [87] Э.З.Кучинский. Спектральная плотность и плотность состояний сверхпроводника в точно решаемой модели псевдощелевого состояния. ФТТ 45, вып.6, 972-979 (2003)
- [88] P.A.Lee, T.M.Rice, P.W.Anderson. Fluctuation Effects at a Peierls Transition. Phys.Rev.Lett. **31**, 462 (1973)
- [89] L.Bartosch. Fluctuation effects in disordered Peierls systems. Ann. der Physik 10, 799-857 (2001); ArXiv: cond-mat/0102160
- [90] V.M.Loktev, R.M.Quick, S.G.Sharapov. Phase Fluctuations and Pseudogap Phenomena. Phys. Reports 349, 2 (2001); ArXiv: cond-mat/0012082
- [91] С.А.Бразовский, И.Е.Дзялошинский. ЖЭТФ 71, 2338 (1976)
- [92] J.Tranquada. Charge Stripes and Antiferromagnetism in Insulating Nickelates and Superconducting Cuprates. J.Phys.Chem.Sol. 59, 2150 (1998); ArXiv: condmat/9802043
- [93] M.Randeria. Precursor Pairing Correlations and Pseudogaps. Varenna Lectures 1997; Preprint cond-mat/9710223
- [94] V.B.Geshkenbein, L.B.Ioffe, A.I.Larkin. Superconductivity in a system with preformed pairs. Phys.Rev. B55, 3173–3180(1997)
- [95] V.Emery, S.A.Kivelson, O.Zachar. Spin-gap proximity effect mechanism of hightemperature superconductivity. Phys.Rev. B56, 6120-6147(1997)

- [96] J.Maly, B.Janko, K.Levin. Superconductivity from a pseudogapped normal state: a mode coupling approach to precursor superconductivity. Preprint condmat/9710187; Pairing Correlations and the Pseudo-Gap State: Application of the Pairing Approximation Theory. Preprint cond-mat/9805018
- [97] L.S.Borkovski, P.J.Hirschfeld. Distinguishing d-wave superconductors from highly anisotropic s-wave superconductors. Phys.Rev. B49, 15404–15407 (1994)
- [98] R.Fehrenbacher, M.R.Norman. Gap renormalization in dirty anisotropic superconductors: Implications for the order parameter of the cuprates. Phys.Rev. B50, 3495 (1994)
- [99] M.Randeria, J.C.Campuzano, High Tc Superconductors: New Insights from Angle-Resolved Photoemission. Varenna Lectures 1997; Preprint cond-mat/9709107
- [100] M.R.Norman, H.Ding, M.Randeria, J.C.Campuzano, T.Yokoya, T.Takeuchi, T.Takahashi, T.Mochiki, K.Kadowaki, P.Guptasarma, D.G.Hinks. Destruction of the Fermi Surface in Underdoped High Tc Superconductors. Nature **392**, 157 (1998); Preprint cond-mat/9710163
- [101] E.Z.Kuchinskii, M.V.Sadovskii. Non-Ferm Liquid Behavior in the Fluctuating Gap Model: From Pole to Zero of the Green's Function. ЖЭΤΦ 130, No 3(9), 477-490 (2006); ArXiv: cond-mat/0602406
- [102] R. H. McKenzie, D. Scarratt. Non-Fermi-liquid behavior due to short-range order. Phys.Rev. 54, R12709-R12712 (1996)
- [103] G. E. Volovik. Momentum space topology and quantum phase transitions. ArXiv: cond-mat/0505089; Quantum phase transitions from topology in momentum space. ArXiv: cond-mat/0601372
- [104] A.B. Migdal. Theory of Finite Fermi Systems and Applications to Atomic Nuclei. Interscience Publishers. NY 1967.

- [105] Л.П.Горьков. К теории сверхпроводящих сплавов в сильном магнитном поле вблизи критической температуры. ЖЭТФ 37, вып.5, 1407-1416 (1959)
- [106] I. E. Dzyaloshinskii, A. I. Larkin. ЖЭТФ 65, 411 (1973) [Sov. Phys.-JETP 38, 202 (1974)]
- [107] C. M. Varma, P. B. Littlewood, S. Schmitt-Rink, E. Abrahams, A. E. Ruckenstein. Phenomenology of the normal state of Cu-O high-temperature superconductors. Phys. Rev. Lett. 63, 1996–1999 (1989)
- [108] M. V. Sadovskii. Models of the pseudogap state in cuprates. Physica C 341-348 , 811 (2000)
- [109] A. A. Kordyuk, S. V. Borisenko, M. S. Golden, S. Legner, K. A. Nenkov, M. Knupfer, J. Fink, H. Berger, L. Forro, R. Follath. Doping dependence of the Fermi surface in (Bi, Pb)₂Sr₂CaCu₂O_{8+δ}. Phys. Rev. B 66, 014502 (2002)
- [110] I. E. Dzyaloshinskii. Some consequences of the Luttinger theorem: The Luttinger surfaces in non-Fermi liquids and Mott insulators. Phys. Rev. B 68, 085113 (2003)
- [111] Э.З.Кучинский, М.В.Садовский. Комбинаторика фейнмановских диаграмм в задачах с гауссовым случайным полем. ЖЭТФ, **113**, вып.2, 664-678 (1998)
- [112] E.Z.Kuchinskii, M.V.Sadovskii. Superconductivity in a Toy Model of the Pseudogap State. Physica C341-348, 879-882 (2000)
- [113] П. Де Жен. Сверхпроводимость металлов и сплавов. "Мир", М, 1968
- [114] Ю.В.Копаев. Труды ФИАН 86, 3 (1975)
- [115] Проблема высокотемпературной сверхпроводимости. Под ред. В.Л.Гинзбурга и Д.А.Киржница. Гл.5, "Наука", М, 1977
- [116] G.Bilbro, W.L.McMillan. Theoretical model of superconductivity and the martensitic transformation in A15 compounds. Phys.Rev. B14, 1887–1892 (1976)

- [117] Л.Н.Булаевский, С.В.Панюков, М.В.Садовский. Неоднородная сверхпроводимость в неупорядоченных металлах. ЖЭТФ 92, вып.2, 672 (1987)
- [118] H.Ding, T.Yokoda, J.C.Campuzano, T.Takahashi, M.Randeria, M.R.Norman, T.Mochiku, K.Kadowaki, J.Giapintzakis. Spectroscopic evidence for a pseudogap in the normal state of underdoped high-Tc superconductors. Nature 382, 51(1996)
- [119] А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. Физматгиз, М, 1963
- [120] T.Cren, D.Roditchev, W.Sacks, J.Klein, J.-B.Moussy, C.Deville-Cavellin, M.Lagues. Influence of Disorder on the Local Density of States in High- Tc Superconducting Thin Films. Phys.Rev.Lett. 84, 147–150 (2000)
- [121] T.Cren, D.Roditchev, W.Sacks, J.Klein. Nanometer scale mapping of the density of states in an inhomogeneous superconductor Europhys. Lett.54, No 1, 84(2001)
- [122] Э.З.Кучинский, М.В.Садовский, Н.А.Стригина. Сверхпроводимость в псевдощелевом состоянии в модели горячих точек – разложение Гинзбурга - Ландау. ЖЭТФ 125, вып.4, 854-867 (2004); ArXiv: cond-mat/0305278
- [123] Н.А.Кулеева, Э.З.Кучинский. Сверхпроводимость в псевдощелевом состоянии в модели "горячих точек" –уравнения Горькова. ФТТ 46, 1557-1565 (2004)
- [124] Н.А.Кулеева, Э.З.Кучинский, М.В.Садовский. Сверхпроводимость в псевдощелевом состоянии в модели "горячих точек": влияние примесей и фазовая диаграмма. ЖЭТФ 126, вып.6(12), 1446-1464 (2004); ArXiv: cond-mat/0406156
- [125] N.A.Kuleeva, E.Z.Kuchinskii, M.V.Sadovskii, Superconductivity in the "hot spots" model of the pseudogap state. Preprint cond-mat/0405691.
- [126] E.Müller-Hartmann, J.Zittartz. Kondo Effect in Superconductors. Phys.Rev.Lett.
 26, 428–432 (1971)

- [127] Д.Сан-Жам, Г.Сарма, Е.Томас. Сверхпроводимость второго рода. "Мир", М 1970
- [128] R.J.Radtke, K.Levin, H.-B.Schüttler, M.R.Norman. Predictions for impurityinduced Tc suppression in the high-temperature superconductors. Phys.Rev. B 48, 653-656 (1993)
- [129] А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков. К теории сверхпроводящих сплавов с магнитными примесями. ЖЭТФ **39**, No 6, 1781-1796 (1960)
- [130] А.И.Ларкин. Векторное спаривание в сверхпроводниках малых размеров. Письма в ЖЭТФ 2, No 5, 205-208 (1965)
- [131] D.Pines. Pseudogap Behavior in Underdoped Cuprates. ArXiv: cond-mat/0404151
- [132] S.H.Naqib, J.R.Cooper, J.L.Tallon, R.S.Islam, R.A.Chakalov. The doping phase diagram of $Y_{1-x}Ca_xBa_2(Cu_{1-y}Zn_y)_3O_{7-\delta}$ from transport measurements: tracking the pseudogap below Tc. ArXiv: cond-mat/0312443
- [133] M.R.Presland, J.L.Tallon, R.G.Buckley, R.S.Liu, N.E.Flower. General trends in oxygen stoichiometry effects on Tc in Bi and Tl superconductors. Physica C 176, 95-105 (1991)
- [134] Y.Fukuzumi, K.Mizuhashi, K.Takenaka, S.Uchida. Universal Superconductor-Insulator Transition and Tc Depression in Zn-Substituted High- Tc Cuprates in the Underdoped Regime. Phys.Rev.Lett. 76, 684–687 (1996)
- [135] J.L.Tallon, C.Bernhard, G.V.M.Williams, J.W.Loram. Zn-induced Tc Reduction in High- Tc Superconductors: Scattering in the Presence of a Pseudogap. Phys.Rev.Lett. 79, 5294-5297 (1997)
- [136] А.Е.Карькин, С.А.Давыдов, Б.Н.Гощицкий, С.В.Мошкин, М.Ю.Власов. Кинетические свойства радиационно-разупорядоченных монокристаллов YBa₂Cu₃O_x (x = 6,4-6,95). ФММ 76, No 5, 103-113 (1993)

- [137] S.K.Tolpygo, J.-Y.Lin, M.Gurvitch, S.Y.Hou, J.M.Phillips. Universal Tc suppression by in-plane defects in high-temperature superconductors: Implications for pairing symmetry. Phys.Rev. B 53, 12454–12461 (1996); Effect of oxygen defects on transport properties and Tc of YBa₂Cu₃O_{6+x}: Displacement energy for plane and chain oxygen and implications for irradiation-induced resistivity and Tc suppression. Phys.Rev. B 53, 12462–12474 (1996)
- [138] F.Rullier-Albenque, H.Alloul, R.Tourbot. Influence of Pair Breaking and Phase Fluctuations on Disordered High Tc Cuprate Superconductors. Phys.Rev.Lett. 91, 047001 (2003)
- [139] А.И.Посаженникова, М.В.Садовский. Эффекты разупорядочения в сверхпроводниках с анизотропным спариванием: от куперовских пар к компактным бозонам. Письма ЖЭТФ 65, No 3, 258 (1997)
- [140] А.И.Посаженникова, М.В.Садовский. Разложение Гинзбурга Ландау и наклон верхнего критического поля в неупорядоченных сверхпроводниках. Письма ЖЭТФ 63, 347 (1996); Разложение Гинзбурга-Ландау и наклон верхнего критического поля в сверхпроводниках с анизотропным рассеянием на нормальных примесях. ЖЭТФ 112, 2124 (1997)
- [141] G.Haran, A.D.S.Nagy. Role of anisotropic impurity scattering in anisotropic superconductors. Phys.Rev. B 54, 15463–15467 (1996)
- [142] T.Valla, A.V.Fedorov, P.D.Johnson, Q.Li, G.D.Gu, N.Koshizuka. Temperature Dependent Scattering Rates at the Fermi Surface of Optimally Doped $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$. Phys.Rev.Lett. **85**, 828–831 (2000)
- [143] K.McElroy, D.-H.Lee, J.E.Hoffman, K.M.Lang, E.W.Hudson, H.Eisaki, S.Uchida, J.Lee, J.C.Davis. Homogenous nodal superconductivity coexisting with inhomogeneous charge order in strongly underdoped Bi-2212. ArXiv: condmat/0404005

- [144] A.Fang, C.Howald, N.Kanenko, M.Greven, A.Kapitulnik. Periodic Coherence Peak Height Modulations in Superconducting BSCCO. Phys. Rev. B 70, 214514-214521 (2004); ArXiv: cond-mat/0404452
- [145] Hubbard J. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. Proc. Roy. Soc. London Ser. A 276, 238-257 (1963); Electron Correlations in Narrow Energy Bands. II. The Degenerate Band Case. Proc. Roy. Soc. London Ser. A 277, 237-259 (1964); Electron Correlations in Narrow Energy Bands. III. An Improved Solution. Proc. Roy. Soc. London Ser. A 281, 401-419 (1964); Electron Correlations in Narrow Energy Bands. IV. The Atomic Representation. Proc. Roy. Soc. London Ser. A 285, 542-560 (1965); Electron Correlations in Narrow Energy Bands. V. A Perturbation Expansion About the Atomic Limit. Proc. Roy. Soc. London Ser. A 296, 82-99 (1967); Electron Correlations in Narrow Energy Bands. VI. The Connexion with Many-Body Perturbation Theory. Proc. Roy. Soc. London Ser. A 296, 100-112 (1967);
- [146] W. Metzner and D. Vollhardt, Correlated Lattice Fermions in d = ∞ Dimensions.
 Phys. Rev. Lett.62, 324–327 (1989).
- [147] D. Vollhardt. Investigation of Correlated Electron Systems Using the Limit of High Dimensions. in *Correlated Electron Systems*, edited by V. J. Emery, World Scientific, Singapore, 1993, p. 57.
- [148] P.W. Anderson. Localized magnetic states in metals. Phys. Rev. 124, 41-53 (1961)
- [149] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. Rev. Mod. Phys. 68, 13 (1996).
- [150] Th. Pruschke and N. Grewe. The Anderson model with finite Coulomb repulsion.Z. Phys. B, 74, No 4, 439-449 (1989)

- [151] Th. Pruschke and D.L. Cox and M. Jarrell. Hubbard model at infinite dimensions: Thermodynamic and transport properties. Phys. Rev. B, 47, 3553–3565 (1993)
- [152] J. E. Hirsch and R. M. Fye, Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals. Phys. Rev. Lett. 56, 2521-2524 (1986); M. Jarrell, Hubbard model in infinite dimensions: A quantum Monte Carlo study. Phys. Rev. Lett. 69, 168-171 (1992); M. Rozenberg, X. Y. Zhang, and G. Kotliar, Mott-Hubbard transition in infinite dimensions. Phys. Rev. Lett. 69, 1236-1239 (1992); A. Georges and W. Krauth, Numerical solution of the d = ∞ Hubbard model: Evidence for a Mott transition. Phys. Rev. Lett. 69, 1240-1243 (1992); M. Jarrell in Numerical Methods for lattice Quantum Many-Body Problems, edited by D. Scalapino, Addison Wesley, 1997.
- [153] K.G. Wilson, The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. Rev. Mod. Phys. 47, 773-840 (1975); H.R. Krishna-murthy, J.W. Wilkins, and K.G. Wilson, Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. I. Static properties for the symmetric case. Phys. Rev. B 21, 1003-1043 (1980); Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. II. Static properties for the asymmetric case. Phys. Rev. B 21, 1044-1083 (1980); for a comprehensive introduction to teh NRG see e.g. A.C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, 1993).
- [154] R. Bulla, A.C. Hewson and Th. Pruschke, Numerical renormalization group calculations for the self-energy of the impurity Anderson model. J. Phys. – Condens. Matter 10, No 37, 8365-8380 (1998); R. Bulla, Zero Temperature Metal-Insulator Transition in the Infinite-Dimensional Hubbard Model. Phys. Rev. Lett. 83, 136-139 (1999).
- [155] Luttinger J. M. and Ward J. C. Ground-State Energy of a Many-Fermion System.
 II. Phys. Rev, 118, 1417–1427 (1960)

- [156] Th. Pruschke, M. Jarrell, and J. K. Freericks, Anomalous normal-state properties of high-Tc superconductors: intrinsic properties of strongly correlated electron systems? Adv. in Phys. 44, No 2, 187–210 (1995).
- [157] V. I. Anisimov, A. I. Poteryaev, M. A. Korotin, A. O. Anokhin, and G. Kotliar, Firstprinciples calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: dynamical mean-field theory. J. Phys. Cond. Matter 9, No 35, 7359-7368 (1997).
- [158] A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, Ab initio calculations of quasiparticle band structure in correlated systems: LDA++ approach. Phys. Rev. B 57, 6884-6895 (1998).
- [159] I. A. Nekrasov, K. Held, N. Blümer, A. I. Poteryaev, V. I. Anisimov, and D. Vollhardt, Calculation of photoemission specta of the doped Mott insulator La_{1-x}Sr_xTiO₃ using LDA+DMFT(QMC). Euro. Phys. J. B 18, No 1, 55-62 (2000).
- [160] K. Held, I. A. Nekrasov, G. Keller, V. Eyert, N. Blumer, A. K. McMahan, R. T. Scalettar, Th. Pruschke, V. I. Anisimov, and D.Vollhardt, Realistic investigations of correlated electron systems with LDA+DMFT. Psi-k Newsletter 56, 65 (2003).
- [161] K. Held, I. A. Nekrasov, N. Blümer, V. I. Anisimov, and D. Vollhardt, Realistic Modeling of Strongly Correlated Electron Systems: An Introduction to the LDA+DMFT Approach. Int. J. Mod. Phys. B 15, 2611 (2001); K. Held, I.A. Nekrasov, G. Keller, V. Eyert, N. Blümer, A.K. McMahan, R.T. Scalettar, T. Pruschke, V.I. Anisimov, and D. Vollhardt, The LDA+DMFT Approach to Materials with Strong Electronic Correlations. ArXiv: cond-mat/0112079 (Published in *Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms*, eds. J. Grotendorst, D. Marks, and A. Muramatsu, NIC Series Volume 10 (NIC Directors, Forschunszentrum Jülich, 2002) p. 175-209; A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, G. Kotliar, in *Electron Correlations and Materials*

Properties 2nd ed., edited by A. Gonis, Nicholis Kioussis and Mikael Ciftan, Kluwer Academic/Plenum, p. 428, New York (2002), available as cond-mat/0112079.

- [162] Th. Maier, M. Jarrell, Th. Pruschke and M. Hettler, Quantum cluster theories. Rev. Mod. Phys. 77, 1027–1080 (2005); ArXiv: cond-mat/0404055).
- [163] G. Kotliar, S.Y. Savrasov, G. Palsson, G. Biroli. Cellular Dynamical Mean Field Approach to Strongly Correlated Systems. Phys. Rev. Lett. 87, 186404 (2001); For periodized version (PCDMFT) see M. Capone, M. Civelli, S.S. Kancharla, C. Castellani, and G. Kotliar, Cluster-dynamical mean-field theory of the densitydriven Mott transition in the one-dimensional Hubbard model. Phys. Rev. B 69, 195105-195109 (2004).
- [164] G. Kotliar and D. Vollhardt, Strongly Correlated Materials: Insights from Dynamical Mean-Field Theory. Physics Today 57, No. 3 (March), 53 (2004).
- [165] Y. M. Vilk, A.-M. S. Tremblay, Non-Perturbative Many-Body Approach to the Hubbard Model and Single-Particle Pseudogap. J. Phys. I France 7, No 11, 1309-1368 (1997).
- [166] O. Gunnarsson, O. K. Andersen, O. Jepsen, and J. Zaanen. Density-functional calculation of the parameters in the Anderson model: Application to Mn in CdTe. Phys. Rev. B 39, 1708-1722 (1989).
- [167] M. T. Czyzyk and G. A. Sawatzky. Local-density functional and on-site correlations: The electronic structure of La₂CuO₄ and LaCuO₃. Phys. Rev. B49, 14211–14228 (1994).
- B. Kyung, S.S. Kancharla, D. Senechal, A.-M.S. Tremblay, M. Civelli, G. Kotliar.
 Pseudogap induced by short-range spin correlations in a doped Mott insulator. Phys.
 Rev. B 73, 165114-165119 (2006); ArXiv: cond-mat/0502565.
- [169] T.D. Stanescu and P. Phillips. Pseudogap in Doped Mott Insulators is the Near-Neighbor Analogue of the Mott Gap. Phys. Rev. Lett. 91, 017002-017005 (2003).

- [170] A.A. Katanin and A.P. Kampf. Quasiparticle Anisotropy and Pseudogap Formation from the Weak-Coupling Renormalization Group Point of View. Phys. Rev. Lett.
 93, 106406-106409 (2004)
- [171] D. Rohe, W. Metzner, Pseudogap at hot spots in the two-dimensional Hubbard model at weak coupling. Phys. Rev. B71, 115116-115122 (2005).
- [172] D.K. Sunko, S. Barisic, Central peak in the pseudogap of high T_c superconductors.
 Eur. Phys. J. B 46, 269-279 (2005); ArXiv: cond-mat/0407800.
- [173] Th.A. Maier, Th. Pruschke, and M. Jarrell, Angle-resolved photoemission spectra of the Hubbard model. Phys. Rev. B 66, 075102-075109 (2002).
- [174] M. Civelli, M. Capone, S.S. Kancharla, O. Parcollet, G. Kotliar. Dynamical Breakup of the Fermi Surface in a doped Mott Insulator. Phys. Rev. Lett. 95, 106402 (2005); ArXiv: cond-mat/0411696.
- [175] C. Gros, and R. Valenti, A self-consistent cluster study of the Emery model. Annalen der Phys. 506, No 6, 460–466 (1994).
- [176] D. Senechal, D. Perez, and M. Pioro-Ladriare. Spectral Weight of the Hubbard Model through Cluster Perturbation Theory. Phys. Rev. Lett. 84, 522-525 (2000);
 D. Senechal, D. Perez, and D. Plouffe, Phys. Rev. B 66, 075129-075139 (2002).
- [177] D. Senechal and A.-M.S. Tremblay. Hot Spots and Pseudogaps for Hole- and Electron-Doped High-Temperature Superconductors. Phys. Rev. Lett. 92, 126401-126404 (2004).
- [178] K. Haule, A. Rosch, J. Kroha, P. Wölfle, Pseudogaps in an Incoherent Metal. Phys. Rev. Lett. 89, 236402 (2002); Pseudogaps in the t-J model:?An extended dynamical mean-field theory study. Phys. Rev. B 68, 155119-155137 (2003).

- [179] B. Kyung, V. Hankevich, A.-M. Dare, A.-M.S. Tremblay. Pseudogap and Spin Fluctuations in the Normal State of the Electron-Doped Cuprates. Phys. Rev. Lett. 93, 147004-147007 (2004).
- [180] P. Prelovsek and A. Ramsak. Spectral functions and the pseudogap in the t-J model. Phys. Rev. B 63, 180506 (2001); Spin-fluctuation mechanism of superconductivity in cuprates. Phys. Rev. B 72, 012510-012513 (2005); ArXiv: cond-mat/0502044.
- [181] S. Biermann, F. Aryasetiawan, A. Georges. First-Principles Approach to the Electronic Structure of Strongly Correlated Systems: Combining the GW Approximation and Dynamical Mean-Field Theory. Phys. Rev. Lett. 90, 086402-086405 (2003).
- [182] P. Sun, G. Kotliar. Many-Body Approximation Scheme beyond GW. Phys. Rev. Lett. 92, 196402-196405 (2004).
- [183] M.V.Sadovskii, E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov. Destruction of the Fermi Surface due to Pseudogap Fluctuations in Correlated Systems. Physica C 460-462, 1084-1086 (2007)
- [184] Садовский М В Модели псевдощелевого состояния в высокотемпературных сверхпроводниках. В сб. Струны, браны, решетки, сетки, псевдощели и пылинки (Москва: Научный Мир, 2007) с. 357; arXiv: cond-mat/0408489
- [185] M. R. Norman, D. Pines, C. Kallin. The Pseudogap: Friend or Foe of High Temperature Superconductivity Adv. Phys. 54, No 8, 715–733 (2007)
- [186] S. Chakravarty, H.-Y. Kee. Fermi pockets and quantum oscillations of the Hall coefficient in high temperature superconductors. arXiv: 0710.0608
- [187] T. Morinari. Pseudogap and short-range antiferromagnetic correlation controlled Fermi surface in underdoped cuprates: From Fermi arc to electron pocket. arXiv: 0805.1977

- [188] V. Janiš, J. Kolorenč, V. Špička. Density and current response functions in strongly disordered electron systems: diffusion, electrical conductivity and Einstein relation. Eur. J. Phys. B 35, No 1, 77-92 (2003).
- [189] J. Hwang, T. Timusk, G.D. Gu. Doping dependent optical properties of Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+δ}. J. Phys. Cond. Matter **19**, 125208 (2007); ArXiv: condmat/0607653.
- [190] E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov, Z.V.Pchelkina, M.V.Sadovskii. Pseudogap Behavior in Bi₂Ca₂SrCuO₈: Results of Generalized Dynamical Mean-Field Approach. ЖЭТФ 131, вып. 5, 908-921 (2007); ArXiv: cond-mat/0606651
- [191] I.A.Nekrasov, E.Z.Kuchinskii, Z.V.Pchelkina, M.V.Sadovskii. Pseudogap Behavior in Normal Underdoped Phase of Bi2212: LDA+DMFT+Σ_k. Physica C 460-462, 997-999 (2007)
- [192] I.A.Nekrasov, E.E.Kokorina, E.Z.Kuchinskii, Z.V.Pchelkina, M.V.Sadovskii Comparative study of electron and hole doped high-Tc compounds in pseudogap regime: LDA+DMFT+ Σ_k approach. J. Phys. Chem. Solids **69**, 3269-3272 (2008); Arxiv: 0708.2313
- [193] E.E.Kokorina, E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov, Z.V.Pchelkina, M.V.Sadovskii,
 A.Sekiyama, S.Suga, M.Tsunekawa. Origin of "hot-spots" in the pseudogap regime of Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO₄: LDA+DMFT+Σ study ЖЭТФ **134**, No 5(11), 968-979 (2008); ArXiv: 0804.2732
- [194] I.A.Nekrasov, N.S.Pavlov, E.Z.Kuchinskii, M.V.Sadovskii, Z.V.Pchelkina,
 V.B.Zabolotny, J.Geck, B.Buechner, S.V.Borisenko, D.S.Inosov, A.A.Kordyuk,
 M.Lambacher, A.Erb. Electronic structure of Pr_{2-x}Ce_xCuO₄ studied via ARPES and LDA+DMFT+Σ. Phys Rev B 80, 140510-140513 (2009); ArXiv: 0906.4413
- [195] I.A.Nekrasov, E.E.Kokorina, E.Z.Kuchinskii, M.V.Sadovskii, S.Kasai, A.Sekiyama, S.Suga. ARPES spectral functions and Fermi surface for $La_{1.86}Sr_{0.14}CuO_4$ compared

with LDA+DMFT+Σ calculations. ЖЭТФ **137**, No 6, 1133-1138 (2010); ArXiv: 0911.1196

- [196] I.A.Nekrasov, E.Z.Kuchinskii, M.V.Sadovskii. Pseudogap phase of high-Tc compunds described within the LDA+DMFT+Σ approach. J.Phys.Chem.Solids DOI: 10.1016/j.jpcs.2010.10.081; ArXiv: 1006.0295
- [197] W. Kohn and L. J. Sham. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. Phys. Rev. 140, A1133-A1138 (1965); L. J. Sham and W. Kohn.
 One-Particle Properties of an Inhomogeneous Interacting Electron Gas. Phys. Rev. 145, 561-567 (1966).
- [198] L. Hedin and B. I. Lundqvist, Explicit local exchange-correlation potentials. J. Phys. C 4, No 14, 2064-2083 (1971); U. von Barth and L. Hedin, A local exchange-correlation potential for the spin polarized case. J. Phys. C 5, No 13, 1629-1642 (1972).
- [199] K. Held, Electronic structure calculations using dynamical mean field theory. Adv. Phys. 56, No 6, 829–926 (2007).
- [200] M. Tsunekawa, A. Sekiyama, S. Kasai, S. Imada, H. Fujiwara, T. Muro, Y. Onose, Y. Tokura and S. Suga, Bulk electronic structures and strong electron-phonon interactions in an electron-doped high-temperature superconductor. New J. Phys. 10, 073005 (2008).
- [201] T. Yoshida, X. J. Zhou, K. Tanaka, W. L. Yang, Z. Hussain, Z.-X. Shen, A. Fujimori, S. Sahrakorpi, M. Lindroos, R. S. Markiewicz, A. Bansil, Seiki Komiya, Yoichi Ando, H. Eisaki, T. Kakeshita, and S. Uchida. Systematic doping evolution of the underlying Fermi surface of La_{2-x}Sr_xCuO₄. Phys. Rev. B 74, 224510-224514 (2006).
- [202] D.N. Basov, T. Timusk. Electrodynamics of high-Tc superconductors. Rev. Mod. Phys. 77, 721–779 (2005).

- [203] O. K. Andersen. Linear methods in band theory. Phys. Rev. B 12, 3060-3083 (1975);
 O. K. Andersen and O. Jepsen. Explicit, First-Principles Tight-Binding Theory. Phys. Rev. Lett. 53, 2571-2574 (1984).
- [204] O. K. Andersen and T. Saha-Dasgupta. Muffin-tin orbitals of arbitrary order. Phys. Rev. B 62, R16219-R16222 (2000); O. K. Andersen *et al.* Third-generation MTOs. Psi-k Newsletter 45, 86 (2001); O. K. Andersen, T. Saha-Dasgupta, S. Ezhov, Third-generation muffin-tin orbitals. Bull. Mater. Sci. 26, 19 (2003).
- [205] Andersen O.K., Liechtenstein A.I., Jepsen O., Paulsen F., LDA energy bands, lowenergy hamiltonians, t, t', t_⊥ (k), and J_⊥. J. Phys. Chem. Solids, 56, No 12, 1573-1591 (1995).
- [206] O. Gunnarsson, O. K. Andersen, O. Jepsen, and J. Zaanen. Density-functional calculation of the parameters in the Anderson model: Application to Mn in CdTe. Phys. Rev. B 39, 1708–1722 (1989).
- [207] I. A. Zobkalo, A. G. Gukasov, S. Yu. Kokovin, S. N. Barilo and, D. I. Zhigunov, Polarized neutron scattering investigation of successive magnetic phase transitions in Nd₂CuO₄ and Nd_{1.87}Ce_{0.19}CuO₄. Solid State Comm. **80**, No 11, 921-924 (1991); E. M. Motoyama, G. Yu, I. M. Vishik, O. P. Vajk, P. K. Mang, M. Greven, Spin correlations in the electron-doped high-transition-temperature superconductor Nd_{2-x}Ce_xCuO_{4±δ}. Nature **445**, 186 (2007).
- [208] N. P. Armitage, F. Ronning, D. H. Lu, C. Kim, A. Damascelli, K. M. Shen, D. L. Feng, H. Eisaki, Z.-X. Shen, P. K. Mang, N. Kaneko, M. Greven, Y. Onose, Y. Taguchi, Y. Tokura, Doping Dependence of an n-Type Cuprate Superconductor Investigated by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy. Phys. Rev. Lett. 88, 257001-257004 (2002).

- [209] M. HΓjcker, Young-June Kim, G. D. Gu, J. M. Tranquada, B. D. Gaulin, J. W. Lynn. Neutron scattering study on La_{1.9}Ca_{1.1}Cu₂O_{6+δ} and La_{1.85}Sr_{0.15}CaCu₂O_{6+δ}. Phys. Rev. B **71**, 094510-094521 (2005).
- [210] A. Kaminski, H. M. Fretwell, M. R. Norman, M. Randeria, S. Rosenkranz, U. Chatterjee, J. C. Campuzano, J. Mesot, T. Sato, T. Takahashi, T. Terashima, M. Takano, K. Kadowaki, Z. Z. Li, H. Raffy, Momentum anisotropy of the scattering rate in cuprate superconductors. Phys. Rev. B 71, 014517-014523 (2005)
- [211] S. Massidda, N. Hamada, Jaejun Yu and A. J. Freeman, Electronic structure of Nd-Ce-Cu-O, a Fermi liquid superconductor. Physica C 157, No 3, 571-574 (1989); Matsuno S., Kanimura H., Electronic structure of Nd₂CuO₄ and its physical properties. J. of Superconductivity 7, No 3, 517-519 (1994).
- [212] Y. Onose, Y. Taguchi, K. Ishizaka, Y. Tokura. Doping Dependence of Pseudogap and Related Charge Dynamics in Nd_{2-x}Ce_xCuO₄. Phys. Rev. Lett. 87, 217001-217004 (2001).
- [213] M. A. Quijada, D. B. Tanner, R. J. Kelley, M. Onellion, H. Berger, G. Margaritondo. Anisotropy in the ab-plane optical properties of Bi₂Sr₂CaCu₂O₈ single-domain crystals. Phys. Rev. B 60, 14917–14934 (1999).
- [214] E.Z.Kuchinskii, M.V.Sadovskii. Electronic structure and possible pseudogap behavior in iron based superconductors. Письма ЖЭТФ 91, No 12, 729-733 (2010); ArXiv: 1005.0884
- [215] L. Boeri, O.V. Dolgov, A.A. Golubov. Is $LaFeAsO_{1-x}F_x$ an Electron-Phonon Superconductor? Phys. Rev. Lett. **101**, 026403-026406 (2008)
- [216] I.I. Mazin, D.J. Singh, M.D. Johannes, M.H. Du. Unconventional Superconductivity with a Sign Reversal in the Order Parameter of LaFeAsO_{1-x}F_x. Phys. Rev. Lett.101, 057003-057006 (2008)

- [217] G. Xu, W. Ming, Y. Yao, Xi Dai, S.-C. Zhang, Z. Fang. Doping-dependent phase diagram of LaOMAs (M=V-Cu) and electron-type superconductivity near ferromagnetic instability. Europhys. Lett. 82, No 6, 67002 (2008)
- [218] I.A. Nekrasov, Z.V. Pchelkina, M.V. Sadovskii. High temperature superconductivity in transition metal oxypnictides: a rare-earth puzzle? Письма в ЖЭТФ 87, No 10, 647-651 (2008) [JETP Letters 87, 620 (2008)]
- [219] I.A. Nekrasov, Z.V. Pchelkina, M.V. Sadovskii. Electronic structure of prototype AFe₂As₂ and ReOFeAs high-temperature superconductors: a comparison. Письма в ЖЭТФ 88, No 2, 155-160 (2008) [JETP Letters 88, 144 (2008)]
- [220] I.R. Shein, A.L. Ivanovskii. Electronic structure of new oxygen-free 38 K superconductor Ba_{1-x}K_xFe₂As₂ in comparison with BaFe₂As₂ from first principles. Письма в ЖЭТФ 88, No 2, 115-118 (2008)
- [221] D.J. Singh. Electronic structure and doping in BaFe₂As₂ and LiFeAs: Density functional calculations. Phys. Rev. B 78, 094511-094517 (2008)
- [222] I.A. Nekrasov, Z.V. Pchelkina, M.V. Sadovskii. Electronic Structure of New LiFeAs High-Tc Superconductor. Письма в ЖЭТФ 88, No 8, 621-623 (2008) [JETP Letters 88, 543 (2008)]
- [223] И. Р. Шеин, А. Л. Ивановский, Зонная структура нового 16-18 К сверхпроводника LiFeAs в сравнении с Li_{0.5}FeAs и LiCoAs. Письма в ЖЭТФ 88, No 5, 377-381 (2008)
- [224] A. Subedi, L. Zhang, D.J. Singh, M.H. Du. Density functional study of FeS, FeSe, and FeTe: Electronic structure, magnetism, phonons, and superconductivity. Phys. Rev. B 78, 134514-134519 (2008)
- [225] L.X. Yang, H.W. Ou, J.F. Zhao, Y. Zhang, D.W. Shen, B. Zhou, J. Wei, F. Chen, M. Xu, C. He, X.F. Wang, T. Wu, G. Wu, Y. Chen, X.H. Chen, Z.D. Wang, D.L.

Feng. Electronic Structure and Unusual Exchange Splitting in the Spin-Density-Wave State of the $BaFe_2As_2$ Parent Compound of Iron-Based Superconductors. Phys. Rev. Lett. **102**, 107002-107005 (2009)

- [226] C. Liu, G.D. Samolyuk, Y. Lee, N. Ni, T. Kondo, A.F. Santander-Syro, S.L. Bud'ko, J.L. McChesney, E. Rotenberg, T. Valla, A.V. Fedorov, P.C. Canfield, B.N. Harmon, A. Kaminski. K-Doping Dependence of the Fermi Surface of the Iron-Arsenic Ba_{1-x}K_xFe₂As₂ Superconductor Using Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy. Phys. Rev. Lett. **101**, 177005-177008 (2008)
- [227] H. Liu, W. Zhang, L. Zhao, X. Jia, J. Meng, G. Liu, X. Dong, G.F. Chen, J.L. Luo, N.L. Wang, W. Lu, G. Wang, Y. Zhou, Y. Zhu, X. Wang, Z. Xu, C. Chen, X.J. Zhou. Fermi surface and band renormalization of Sr_{1-x}K_xFe₂As₂ from angle-resolved photoemission spectroscopy. Phys. Rev. B 78, 184514-184519 (2008)
- [228] L. Zhao, H. Liu, W. Zhang, J. Meng, X. Jia, G. Liu, X. Dong, G.F. Chen, J.L. Luo, N.L. Wang, W. Lu, G. Wang, Y. Zhou, Y. Zhu, X. Wang, Z. Zhao, Z. Xu, C. Chen, X.J. Zhou, Multiple Nodeless Superconducting Gaps in (Ba_{0.6}K_{0.4})Fe₂As₂ Superconductor from Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy. Chin. Phys. Lett. 25, 4402-4405(2008)
- [229] H. Ding, P. Richard, K. Nakayama, T. Sugawara, T. Arakane, Y. Sekiba, A. Takayama, S. Souma, T. Sato, T. Takahashi, Z. Wang, X. Dai, Z. Fang, G.F. Chen, J.L. Luo, N.L. Wang. Observation of Fermi-surface-dependent nodeless superconducting gaps in Ba_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂. Europhys. Lett. 83, No 4, 47001 (2008)
- [230] V.B. Zabolotnyy, D.S. Inosov, D.V. Evtushinsky, A. Koitzsch, A.A. Kordyuk, J.T. Park, D. Haug, V. Hinkov, A.V. Boris, D.L. Sun, G.L. Sun, C.T. Lin, B. Keimer, M. Knupfer, B. Büchner, A. Varykhalov, R. Follath, S.V. Borisenko, (π, π) electronic order in iron arsenide superconductors. Nature **457**, 569 (2009)
- [231] D.V. Evtushinsky, D.S. Inosov, V.B. Zabolotnyy, A. Koitzsch, M. Knupfer, B. Büchner, G.L. Sun, V. Hinkov, A.V. Boris, C.T. Lin, B. Keimer, A. Varykhalov, A.A. Kordyuk, S.V. Borisenko. Momentum dependence of the superconducting gap in Ba_{1-x}K_xFe₂As₂. Phys. Rev. B 79, 054517-054529 (2009)
- [232] T. Sato, K. Nakayama, Y. Sekiba, P. Richard, Y.-M. Xu, S. Souma, T. Takahashi, G.F. Chen, J.L. Luo, N.L. Wang, H. Ding, Band Structure and Fermi Surface of an Extremely Overdoped Iron-Based Superconductor KFe₂As₂. Phys. Rev. Lett. **103**, 047002-047005 (2009)
- [233] S.L. Skornyakov, A.V. Efremov, N.A. Skorikov, M.A. Korotin, Yu.A. Izyumov, V.I. Anisimov, A.V. Kozhevnikov, D. Vollhardt. Classification of the electronic correlation strength in the iron pnictides: The case of the parent compound BaFe₂As₂. Phys. Rev. B 80, 092501-092504 (2009)
- [234] D.S. Inosov, J.T. Park, P. Bourges, D.L. Sun, Y. Sidis, A. Schneidewind,
 K. Hradil, D. Haug, C.T. Lin, B. Keimer, V. Hinkov. Normal-state spin dynamics and temperature-dependent spin-resonance energy in optimally doped BaFe_{1.85}Co_{0.15}As₂. Nature Physics 6, No 3, 178-181 (2010)
- [235] S.O. diallo, D.K. Pratt, R.M. Fernandes, W. Tian, J.L. Zaretsky, M. Lumsden, T.G. Perring, C.L. Broholm, N. Ni, S.L. Bud'ko, P.C. Canfield, H.-F. Li, D. Vaknin, A. Kreyssig, A.I. Goldman, R.J. McQueeney. Paramagnetic Spin Correlations in CaFe₂As₂ Single Crystals. Phys. Rev. B 81, 214407 (2010); arXiv:1001.2804
- [236] T. Moriya. Spin Fluctuations in Itinerant Electrom Magnetism. Springer, 1985
- [237] L.X. Yang, Y. Zhang, H.W. Ou, J.F. Zhao, D.W. Shen, B. Zhou, J. Wei, F. Chen, M. Xu, C. He, Y. Chen, Z.D. Wang, T. Wu, G. Wu, X.H. Chen, M. Arita, K. Shimada, M. Taniguchi, Z.Y. Lu, T. Xiang, D.L. Feng. Electronic Structure and Unusual Exchange Splitting in the Spin-Density-Wave State of the BaFe₂As₂

Parent Compound of Iron-Based Superconductors. Phys. Rev. Lett. **102**, 107002-107005 (2009)

- [238] Y. Zhang, J. Wei, H.W. Ou, J.F. Zhao, B. Zhou, F. Chen, M. Xu, C. He, G. Wu, H. Chen, M. Arita, K. Shimada, H. Namatame, M. Taniguchi, X.H. Chen, D.L. Feng. Unusual Doping Dependence of the Electronic Structure and Coexistence of Spin-Density-Wave and Superconductor Phases in Single Crystalline Sr_{1-x}K_xFe₂As₂. Phys. Rev. Lett. **102**, 127003-127006 (2009)
- [239] J. Knolle, I. Eremin, A.V. Chubukov, R. Moessner. Theory of itinerant magnetic excitations in the spin-density-wave phase of iron-based superconductors. Phys. Rev. B 81, 140506-140509 (2010)
- [240] P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan. Disordered electronic systems. Rev. Mod. Phys. 57, 287–337 (1985); D. Belitz and T. R. Kirkpatrick. The Anderson-Mott transition. Rev. Mod. Phys. 66, 261–380 (1994).
- [241] N. F. Mott, The Basis of the Electron Theory of Metals, with Special Reference to the Transition Metals. Proc. Phys. Soc. A 62, No 7, 416 (1949); *Metal-Insulator Transitions*, 2nd edn. (Taylor and Francis, London 1990).
- [242] P. W. Anderson Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. Phys. Rev. 109, 1492–1505 (1958).
- [243] A.M. Finkelshtein, Influence of Coulomb interaction on the properties of disordered metals. ЖЭТФ 84, вып.1, 168 (1983) [Sov. Phys. JEPT 57, No 1, 97 (1983)]; C. Castellani, C. Di Castro, P. A. Lee, and M. Ma. Interaction-driven metal-insulator transitions in disordered fermion systems. Phys. Rev. B 30, 527–543 (1984).
- [244] V. Dobrosavljević and G. Kotliar. Mean Field Theory of the Mott-Anderson Transition. Phys. Rev. Lett. 78, 3943–3946 (1997).

- [245] V. Dobrosavljević, A. A. Pastor, and B. K. Nikolić, Typical medium theory of Anderson localization: A local order parameter approach to strong-disorder effects. Europhys. Lett. 62, No 1, 76-82 (2003).
- [246] K. Byczuk, W. Hofstetter, D. Vollhardt. Mott-Hubbard Transition versus Anderson Localization in Correlated Electron Systems with Disorder. Phys. Rev. Lett. 94, 056404-056407 (2005)
- [247] E.Z. Kuchinskii, I.A. Nekrasov, M.V. Sadovskii, Mott-Hubbard Transition and Anderson Localization: Generalized Dynamical Mean - Field Theory Approach. ЖЭТФ 133, вып.3, 670-686 (2008); ArXiv: 0706.2618.
- [248] P. Henseler, J. Kroha, and B. Shapiro. Static screening and delocalization effects in the Hubbard-Anderson model. Phys. Rev. B 77, 075101-075106 (2008).
- [249] P. Henseler, J. Kroha, B. Shapiro. Self-consistent study of Anderson localization in the Anderson-Hubbard model in two and three dimensions. Phys. Rev. B 78, 235116-235121 (2008)
- [250] M.E. Pezzoli, F. Becca. Ground-state properties of the disordered Hubbard model in two dimensions. Physical Review B 81, 075106-075116 (2010); arXiv: 0906.4870
- [251] M. Ulmke, V. Janiš, and D. Vollhardt. Anderson-Hubbard model in infinite dimensions. Phys. Rev. B 51, 10411–10426 (1995).
- [252] R. Vlaming and D. Vollhardt. Controlled mean-field theory for disordered electronic systems: Single-particle properties. Phys. Rev. B 45, 4637–4649 (1992).
- [253] P. Wölfle and D. Vollhardt, in Anderson Localization, eds. Y. Nagaoka and H. Fukuyama, Springer Series in Solis State Sciences, vol. 39, p.26. Springer Verlag, Berlin 1982.

- [254] M.V. Sadovskii, The Theory of Electron Localization in Disordered Systems. Soviet Scientific Reviews – Physics Reviews, ed. I.M. Khalatnikov, vol. 7, p.1. Harwood Academic Publ., NY 1986.
- [255] D. Vollhardt, P. Wölfle, in *Electronic Phase Transitions*, eds. W. Hanke and Yu.V. Kopaev, vol. 32, p. 1. North-Holland, Amsterdam 1992.
- [256] Э.З. Кучинский, М.В. Садовский, В.Г. Суворов, М.А. Эркабаев. Самосогласованная теория перехода металл-диэлектрик в неупорядоченных системах. ЖЭТФ, 107, 2027 (1995) [JETP 80, 1122 (1995)]; Э.З. Кучинский, М.А. Эркабаев. Переход металл-диэлектрик в самосогласованной теории. ФТТ, 39, 412 (1997).
- [257] E.Z.Kuchinskii, N.A.Kuleeva, I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii. Two dimensional Anderson-Hubbard model in DMFT+Σ approximation. ЖЭТФ 137, No 2, 368-379 (2010); ArXiv: 0908.3747
- [258] R. Bulla. Zero Temperature Metal-Insulator Transition in the Infinite-Dimensional Hubbard Model. Phys. Rev. Lett. 83, 136–139 (1999); R. Bulla, T.A. Costi and D. Vollhardt. Phys. Rev. B Finite-temperature numerical renormalization group study of the Mott transition. Phys. Rev. B 64, 045103-045111 (2001).
- [259] N. Blümer. Mott-Hubbard Metal-Insulator Transition and Optical Conductivity, Thesis, München 2002.
- [260] M.A. Erkabaev, M.V. Sadovskii. Self-Consistent Localization Teory in the Two-Band Model. J. Moscow Phys. Soc. 2, 233 (1992)
- [261] Мясников А.В., Садовский М.В. Самосогласованная теория локализации в пространстве с размерностью 2 ≤ d < 4. ФТТ 24, 3569 (1982) [Sov. Phys.-Solid State 24, 2033 (1982)]; E.A. Kotov, M.V. Sadovskii. Self-consistent theory of localization for the Anderson model. Zs. Phys. B 51, No 1, 17-23 (1983).

- [262] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T.V. Ramakrishnan. Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions. Phys. Rev. Lett. 42, 673–676 (1979).
- [263] B. L. Altshuler, A. G. Aronov and P. A. Lee. Interaction Effects in Disordered Fermi Systems in Two Dimensions. Phys. Rev. Lett. 44, 1288–1291 (1980).
- [264] G. J. Dolan and D. D. Osheroff. Nonmetallic Conduction in Thin Metal Films at Low Temperatures. Phys. Rev. Lett. 43, 721–724 (1979); D. J. Bishop, D. C. Tsui, and R. C. Dynes. Nonmetallic Conduction in Electron Inversion Layers at Low Temperatures. Phys. Rev. Lett. 44, 1153–1156 (1980); M. J. Uren, R. A. Davies, and M. Pepper, The observation of interaction and localisation effects in a twodimensional electron gas at low temperatures. J. Phys. C 13, No 33, L985 (1980).
- [265] S. V. Kravchenko and M. P. Sarachik, Metal-insulator transition in two-dimensional electron systems. Rep. Prog. Phys. 67, No 1, 1 (2004).
- [266] E. Abrahams, S. V. Kravchenko and M. P. Sarachik. Metallic behavior and related phenomena in two dimensions. Rev. Mod. Phys. 73, 251–266 (2001)
- [267] E.Z.Kuchinskii, N.A.Kuleeva, I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii. Optical sum rule in strongly correlated systems. ЖЭΤΦ 134, No 2(8), 330-337 (2008); ArXiv: 0803.3869.
- [268] R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan 12, 570 (1957).
- [269] M.R. Norman, A.V. Chubukov, E. van Heumen, A.B. Kuzmenko, D. van der Marel.
 Optical integral in the cuprates and the question of sum-rule violation. Phys. Rev.
 B 76, 220509(R)-220512(R) (2007)
- [270] M.R. Norman, C. Pepin. Quasiparticle formation and optical sum rule violation in cuprate superconductors. Phys. Rev. B 66, 100506(R)-100509(R) (2002)

- [271] A. Toschi, M. Capone, M. Ortolani, P. Calvani, S. Lupi and C. Castellani. Temperature Dependence of the Optical Spectral Weight in the Cuprates: Role of Electron Correlations. Phys. Rev. Lett. 95, 097002-097005 (2005); A. Toshi, M. Capone. Optical sum rule anomalies in the cuprates: Interplay between strong correlation and electronic band structure. Phys. Rev. B 77, 014518-014525 (2008)
- [272] A. E. Karakozov, E. G. Maksimov and O. V. Dolgov, Electromagnetic response of superconductors and optical sum rule. Solid State Comm. **124**, No 4, 119-124 (2002); A. E. Karakozov and E. G. Maksimov, Optical sum rule in metals with a strong interaction. Solid State Comm. **139**, No 2, 80-85 (2006).
- [273] J. E. Hirsch and F. Marsiglio. Optical sum rule violation, superfluid weight, and condensation energy in the cuprates. Physica C 331, 150 (2000); Phys. Rev. B 62, 15131–15150 (2000).
- [274] F. Marsiglio, F. Carbone, A. Kuzmenko and D. van der Marel. Intraband optical spectral weight in the presence of a van Hove singularity: Application to Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+δ}. Phys. Rev. B 74, 174516-174525 (2006).
- [275] M. R. Norman, M. Randeria, B. Janko and J. C. Campuzano. Condensation energy and spectral functions in high-temperature superconductors. Phys. Rev. B 61, 14742-14750 (2000).
- [276] D. N. Basov, S. I. Woods, A. S. Katz, E. J. Singley, R. C. Dynes, M. Xu, D. G. Hinks, C. C. Homes and M. Strongin, Sum Rules and Interlayer Conductivity of High-Tc Cuprates. Science 283, 49-52 (1999).
- [277] H. J. A. Molegraaf, C. Presura, D. van der Marel, P. H. Kes and M. Li, Superconductivity-Induced Transfer of In-Plane Spectral Weight in Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+δ}. Science **295**, 2239-2241 (2002).
- [278] A. F. Santander-Syro, R. P. S. M. Lobo, N. Bontemps, Z. Konstantinovic, Z. Z. Li and H. Raffy, Pairing in cuprates from high-energy electronic states. Europhys.

Lett. **62**, No 4, 568-574 (2003); A. F. Santander-Syro, R. P. S. M. Lobo, N. Bontemps, W. Lopera, D. Girata, Z. Konstantinovic, Z. Z. Li and H. Raffy. Inplane electrodynamics of the superconductivity in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ Energy scales and spectral weight distribution. Phys. Rev. B **70**, 134504-134517 (2004).

- [279] F. Carbone, A. B. Kuzmenko, H. J. A. Molegraaf, E. van Heumen, E. Giannini and D. van der Marel. In-plane optical spectral weight transfer in optimally doped Bi₂Sr₂Ca₂Cu₃O₁₀. Phys. Rev. B 74, 024502-024511 (2006).
- [280] E. van Heumen, R. Lortz, A. B. Kuzmenko, F. Carbone, D. van der Marel, X. Zhao, G. Yu, Y. Cho, N. Barisic, M. Greven, C. C. Homes and S. V. Dordevic. Optical and thermodynamic properties of the high-temperature superconductor HgBa₂CuO_{4+δ}. Phys. Rev. B **75**, 054522-054531 (2007).
- [281] D. N. Basov and T. Timusk. Electrodynamics of high-Tc superconductors. Rev. Mod. Phys. 77, 721–779 (2005).
- [282] А.Е. Karakozov, E.G. Maksimov. Оптическое правило сумм в металлах с сильным электрон-фононным взаимодействием. ЖЭТФ **132**, вып.4, 852 (2007)
- [283] E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii. Interplay of electron-phonon interaction and strong correlations: DMFT+Σ study. Phys Rev B 80, 115124-115128 (2009); ArXiv: 0906.3865
- [284] M.V.Sadovskii, E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov. Interplay of electron-phonon interaction and strong correlations: DMFT+Σ approach. J. Phys. Chem. Solids DOI: 10.1016/j.jpcs.2010.10.082; ArXiv: 1006.0294
- [285] T. Holstein, Studies of polaron motion : Part I. The molecular-crystal model. Ann. Phys. (N.Y.) 8, No 3, 325-342 (1959).
- [286] R. Bulla, T.A. Costi, T. Pruschke, Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. Rev. Mod. Phys. 80, 395–450 (2008).

- [287] A.C. Hewson and D. Mayer, Non-equilibrium differential conductance through a quantum dot in a magnetic field. J. Phys.: Condens. Matter 17, No 35, 5413-5422 (2002).
- [288] A. Lanzara, P. V. Bogdanov, X. J. Zhou, S. A. Kellar, D. L. Feng, E. D. Lu, T. Yoshida, H. Eisaki, A. Fujimori, K. Kishio, J.-I. Shimoyama, T. Noda, S. Uchida, Z. Hussain and Z.-X. Shen Evidence for ubiquitous strong electron-phonon coupling in high-temperature superconductors. Nature 412, 510 (2001)
- [289] Z.-X. Shen, A.Lanzara, S. Isihara, N. Nagaosa. Role of the electron-phonon interaction in the strongly correlated cuprate superconductors. Phil. Mag. B 82, 1349–1368 (2002)
- [290] W. Koller, A.C. Hewson, and D.M. Edwards. Polaronic Quasiparticles in a Strongly Correlated Electron Band. Phys. Rev. Lett. 95, 256401-256404 (2006).
- [291] J.P. Hague, Electron and phonon dispersions of the two-dimensional Holstein model: effects of vertex and non-local corrections. J. Phys.: Condens. Matter 15, No 17, 2535-2550 (2003).
- [292] K. Byczuk, M. Killar, K. Held, Y.-F. Yang, I.A. Nekrasov, Th. Pruschke and D. Vollhardt, Kinks in the dispersion of strongly correlated electrons. Nature Phys. 3, No 3, 168 (2007).
- [293] A. D. Migdal, $M \ni T \Phi$ 34, 1438 (1958) [Sov. Phys. JETP 7, 999 (1958)].
- [294] W. Koller, D. Mayer, and A.C. Hewson. Dynamic response functions for the Holstein-Hubbard model. Phys. Rev. B 70, 155103-155114 (2004).
- [295] G.S. Jeon T.-H. Park, J.H. Han H.C. Lee, and H.-Y. Choi, Dynamical meanfield theory of the Hubbard-Holstein model at half filling:?Zero temperature metalinsulator and insulator-insulator transitions. Phys. Rev. B 70, 125114-12519 (2004).

- [296] W. Koller, D. Mayer, Y. Õno, and A.C. Hewson, First- and second-order phase transitions in the Holstein-Hubbard model. Europhys. Lett. 66, No 4, 559-564 (2004).
- [297] R.H.McKenzie, D.Scarratt. Non-Fermi-liquid behavior due to short-range order. Phys.Rev.B 54, R12709-R12712 (1996)
- [298] S.F.Edwards. A new method for the evaluation of electric conductivity in metals. Phil.Mag. 3, No 33, 1020–1031 (1958)
- [299] С.М.Рытов, Ю.А.Кравцов, В.Н.Татарский. Введение в статистическую радиофизику. Часть II, "Наука", М., 1978, Гл.VIII.
- [300] Ш.Ма. Современная теория критических явлений. "Мир", М., 1980, Гл.10.
- [301] А.Ю.Гросберг, А.Р.Хохлов. Статистическая физика макромолекул. "Наука", М., 1989, Гл.2.
- [302] И.М.Суслов. Density of states of a disordered system in d > 4 dimensions. ЖЭТФ,
 102, вып.6, 1951 (1992)
- [303] Л.В.Келдыш. Диссертация. ФИАН. 1965.
- [304] А.Л.Эфрос, Б.И.Шкловский. Электронные свойства легированных полупроводников. "Наука", М., 1979, Гл.11.
- [305] M.V.Sadovskii. Sov.Sci.Rev.A-Phys.Rev. 7, 1 (1986)
- [306] И.М.Лифшиц, С.А.Гредескул, Л.А.Пастур. Введение в теорию неупорядоченных систем. "Наука", М., 1982, Гл.IV.
- [307] B.I.Halperin. Green's Functions for a Particle in a One-Dimensional Random Potential. Phys.Rev. 139, A104–A117 (1965)
- [308] J.Cardy. Electron localisation in disordered systems and classical solutions in Ginzburg-Landau field theory. J.Phys. C11, No 8, L321-L328 (1978)

- [309] М.В.Садовский. ФТТ, **21**, 743 (1979)
- [310] И.М.Суслов. Плотность состояний вблизи перехода Андерсона в пространстве размерности d = 4 - \epsilon. ЖЭТФ, вып.5, **111**, 1896 (1997)
- [311] P. G. J. van Dongen, F. Gebhard, and D. Vollhardt. Variational evaluation of correlation functions for lattice electrons in high dimensions. Z. Phys.. B 76, No 2, 199-210 (1989).
- [312] W. Metzner. Variational theory for correlated lattice fermions in high dimensions.Z. Phys. B 77, No 2, 253-266 (1989).