

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Обобщённая теория динамического среднего поля
в физике сильнокоррелированных систем

Э.З. Кучинский, И.А. Некрасов, М.В. Садовский

Обзор посвящён обобщению теории динамического среднего поля (DMFT) для сильнокоррелированных электронных систем (СКС) с целью учёта дополнительных взаимодействий, что необходимо для последовательного описания физических эффектов в СКС. В качестве дополнительных взаимодействий рассматриваются: 1) взаимодействие электронов с антиферромагнитными (или зарядовыми) флуктуациями параметра порядка в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП), приводящее к формированию псевдощелевого состояния; 2) рассеяние на статическом беспорядке и его роль в общей картине перехода металл–диэлектрик Андерсона–Хаббарда; 3) электрон-фононное взаимодействие и особенности электронного спектра в СКС. Предлагаемый DMFT + Σ -подход основан на учёте указанных взаимодействий путём введения в общую схему DMFT дополнительной (в общем случае зависящей от квазиимпульса) собственно-энергетической части Σ , которая вычисляется самосогласованным образом без нарушения общей структуры итерационного цикла DMFT. Формулируется общая схема расчёта как одночастичных (спектральная плотность, плотность состояний) свойств, так и двухчастичных (оптическая проводимость). Рассматриваются задачи о формировании псевдощели, включая картину "разрушения" ферми-поверхности и формирования "дуг Ферми", переход металл–диэлектрик в неупорядоченной модели Андерсона–Хаббарда, а также общая картина формирования особенностей электронной дисперсии в системах с сильными корреляциями. DMFT + Σ -подход обобщается для расчётов электронных свойств реальных СКС на основе метода LDA + DMFT. Рассматривается общая схема LDA + DMFT-подхода и его применение к ряду реальных систем. Обобщённый LDA + DMFT + Σ -подход применяется для расчёта псевдощелевого состояния в электронно- и дырочно-легированных ВТСП-купратах. Проводится сравнение с результатами экспериментов с использованием фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением.

PACS numbers: 71.10.Fd, 71.10.Hf, **71.20. – b**, **71.27. + a**, **71.30. + h**, 72.15.Rn, **74.72. – h** DOI: 10.3367/UFNr.0182.201204a.0345

Содержание

1. Введение (345).
2. Сильнокоррелированные системы и теория динамического среднего поля (DMFT) (346).
 - 2.1. Модель Хаббарда и основы DMFT. 2.2. Обобщённый DMFT + Σ -подход. 2.3. Некоторые другие обобщения DMFT.
3. Применения обобщённого DMFT + Σ -подхода к модельным задачам (350).
 - 3.1. Сильнокоррелированные системы в псевдощелевом состоянии. 3.2. Переход Мотта–Андерсона в неупорядоченных систе-

мах. 3.3. Особенности электронной дисперсии сильнокоррелированных систем в DMFT- и DMFT + Σ -подходах.

4. Электронная структура реальных сильнокоррелированных систем: LDA + DMFT и LDA + DMFT + Σ (367).
 - 4.1. Теория функционала электронной плотности (DFT). Приближение локальной электронной плотности (LDA). 4.2. Расчётная схема LDA + DMFT. 4.3. Примеры LDA + DMFT-расчётов. 4.4. Электронная структура оксидов меди в псевдощелевом состоянии: LDA + DMFT + Σ .
 5. Заключение (375).
- Список литературы (376).

Э.З. Кучинский, И.А. Некрасов. Институт электрофизики УрО РАН, ул. Амундсена 106, 620016 Екатеринбург, Российская Федерация
E-mail: kuchinsk@ier.uran.ru, nekrasov@ier.uran.ru
М.В. Садовский. Институт электрофизики УрО РАН, ул. Амундсена 106, 620016 Екатеринбург, Российская Федерация
E-mail: sadovski@ier.uran.ru
Институт физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской 18, 620219 Екатеринбург, Российская Федерация

Статья поступила 20 июня 2011 г.

1. Введение

Сильнокоррелированные электронные системы (СКС), реализующиеся главным образом в ряде соединений переходных и редкоземельных элементов с незаполненными 3d-, 4f- и 5f-оболочками, уже более полувека вызывают большой интерес исследователей ввиду их необычных физических свойств и трудностей их теоретического описания. Фазовый переход металл–диэлектрик, наблюдаемый во многих оксидах переходных металлов, системы с тяжёлыми фермионами, в которых

обнаружилось огромное разнообразие фазовых переходов и связанных с ними явлений, манганиты с гигантским магнетосопротивлением — всё это стало предметом пристального внимания и теоретиков, и экспериментаторов. Возможно, самым значительным событием в этой области явилось открытие высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) в оксидах меди, вызвавшее новую волну интереса к синтезу и описанию таких систем.

Как сказано выше, такое многообразие физических явлений во всех указанных 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. Первоначальные качественные идеи, высказанные Моттом [1], получили дальнейшее развитие во множестве последующих теоретических работ, которые составили целое направление в современной теории конденсированного состояния. Число таких работ уже составляет несколько тысяч, и продолжают выходить новые обзоры и монографии [2].

Разумеется, в одном обзоре невозможно охватить всю эту область исследований, и задача авторов настоящего обзора является достаточно скромной. Цель нашего обзора — дать описание ряда сформулированных в последние годы теоретических подходов, направленных на учёт дополнительных взаимодействий, которые необходимо принимать во внимание при последовательном рассмотрении СКС. Речь идёт как об учёте "внешних" возмущений, связанных со взаимодействием электронов с бозонными возбуждениями, такими как фононы или спиновые флуктуации, и с рассеянием электронов на беспорядке, так и о попытках усовершенствования наиболее развитых теоретических подходов, таких как широко используемая в настоящее время теория динамического среднего поля (Dynamical Mean Field Theory, DMFT) [3–6].

Задачи развития указанных подходов оказываются тесно связанными с рядом актуальных проблем, активно изучаемых в настоящее время, таких как выяснение природы псевдощелевого состояния ВТСП-купратов, в частности эволюции их поверхностей Ферми, связанной с формированием так называемых дуг Ферми, наблюдаемых в экспериментах с использованием фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (Angle Resolved Photoemission Spectroscopy, ARPES), проблема изломов (кинков) в электронном спектре, общая проблема перехода металл–диэлектрик в неупорядоченных системах, связанная со взаимным влиянием сильных корреляций и локализации Андерсона. Всем перечисленным проблемам мы уделяем определённое внимание в настоящем обзоре.

В последние годы общая теория СКС, основанная на DMFT, фактически слилась с так называемыми первопринципными (*ab initio*) подходами к расчётам электронных спектров реальных твёрдых тел в рамках приближения локальной электронной плотности (Local Density Approximation, LDA) (метод LDA + DMFT) и на этом пути уже достигнуты существенные успехи [2, 7]. Поэтому в нашем обзоре уделяется внимание и первым попыткам обобщения этих подходов с целью учёта упомянутых выше эффектов.

2. Сильнокоррелированные системы и теория динамического среднего поля (DMFT)

2.1. Модель Хаббарда и основы DMFT

Начиная с пионерских работ Хаббарда [8–13] в начале 1960-х годов простейшей моделью, позволяющей описать свойства сильнокоррелированных систем, является модель, получившая его имя. Гамильтониан однозонной модели Хаббарда имеет вид

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

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 отвечает за локализацию электрона на узле. Энергетические зоны, образуемые 3d-, 4f- и 5f-орбиталями, достаточно узки, так что довольно часто кинетическая и потенциальная энергии оказываются одного порядка ($t \sim U$). В последнем случае параметр малости отсутствует и построение теории возмущений невозможно. С этим и связаны трудности описания СКС даже в такой максимально упрощённой модели.

Почти 30 лет не удавалось найти удовлетворительный подход к анализу СКС. Казалось, что теория СКС так и останется фрагментарной и полуквантитативной. Прорыв произошёл в 1989 г. благодаря работе [14] Метцнера и Вольхардта, которые предложили формально рассматривать систему сильновзаимодействующих электронов в пространстве с большой размерностью $d \rightarrow \infty$ (или на решётке с координационным числом $z \rightarrow \infty$)¹.

В этом пределе оказывается возможным пренебречь пространственными флуктуациями в системе, оставив только динамические. В работе [14] показано, что в пределе бесконечной размерности пространства (или, точнее, в пределе бесконечно большого координационного числа) основную роль играют локальные вклады в собственно-энергетическую часть (СЭЧ) полной функции Грина (ФГ), а все нелокальные вклады пропорциональны $1/\sqrt{z} \sim 1/\sqrt{d}$, и они могут быть отброшены. Таким образом, в этом пределе СЭЧ электрона не зависит от импульса \mathbf{k} и является лишь функцией частоты (действительной (ω) или мацубаровской (ω_n , $n = 0, \pm 1, \dots$))²:

$$\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \Sigma_\sigma(\omega). \quad (2)$$

Соотношение (2) и представляет собой основное упрощение, возникающее в пределе $d \rightarrow \infty$ [3, 5–7].

¹ В гиперкубической решётке $z = 2d$ и эти два предела, по сути, совпадают, однако и для трёхмерной решётки z может быть достаточно велико: для объёмноцентрированной решётки $z = 8$, для гранецентрированной — $z = 12$. Так что правильнее говорить о пределе больших z .

² При больших координационных числах независимость СЭЧ от импульса может быть с успехом использована как приближение и при довольно небольших d .

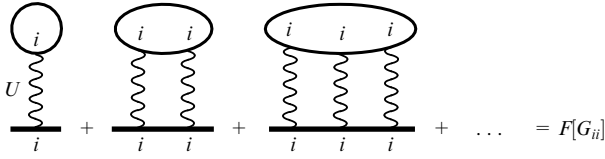


Рис. 1. "Скелетные" диаграммы для локальной собственно-энергетической части Σ DMFT.

На рисунке 1 представлены "скелетные" диаграммы для локальной СЭЧ Σ DMFT. Волнистые линии представляют локальное (хаббардовское) кулоновское взаимодействие U , сплошные линии обозначают локальные функции Грина G_{ii} . На самом деле в пределе $d \rightarrow \infty$ СЭЧ не только локальна, но и в любой "скелетной" диаграмме для неё во всех вершинах фигурирует, как показано на рис. 1, только один узел (например, i -й), т.е. СЭЧ является функционалом от локальной полной функции Грина $G_{ii,\sigma}$: $\Sigma_{ii,\sigma} = F[G_{ii,\sigma}]$. Вообще говоря, этого ещё недостаточно для того, чтобы задача стала чисто локальной, поскольку полная функция Грина $G_{ij,\sigma}$ по-прежнему нелокальна. Возникает вопрос: нельзя ли подобрать чисто локальную задачу (пусть и со сложной динамикой), которая в отсутствие взаимодействия U давала бы такую же СЭЧ? Конечно можно! Пусть $\mathcal{G}_\sigma(\omega)$ — "свободная" динамическая функция Грина такой локальной задачи в отсутствие взаимодействия U , а $G_{d\sigma}(\omega)$ и $\Sigma_{d\sigma}(\omega)$ — соответствующая полная функция Грина и СЭЧ. Если обеспечить равенство $G_{d\sigma}(\omega) = G_{ii,\sigma}(\omega)$, то равны и собственно-энергетические части, поскольку структура диаграмм теории возмущений по U полностью сохраняется, а значит, СЭЧ локальной задачи определяется тем же самым функционалом, $\Sigma_{d\sigma} = F[G_{d\sigma}]$. Но \mathcal{G}_σ , $G_{d\sigma}$ и $\Sigma_{d\sigma}$ связаны уравнением Дайсона, которое немедленно даёт интересующую нас "свободную" динамическую функцию Грина локальной задачи:

$$\mathcal{G}_\sigma^{-1}(\omega) = \Sigma_\sigma(\omega) + G_{ii,\sigma}^{-1}(\omega). \quad (3)$$

Таким образом, решёточная модель Хаббарда в пределе $d \rightarrow \infty$ сводится к чисто локальной динамической задаче. Физически она соответствует, как показано на рис. 2, рассмотрению взаимодействующих электронов на одной "примеси", помещённой в резервуар, в котором всё воздействие сводится к воздей-

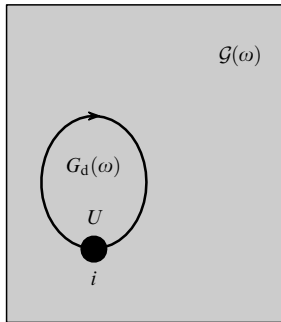


Рис. 2. В DMFT решёточная модель Хаббарда сводится к рассмотрению взаимодействующих электронов на одном узле ("примеси"), окружённой фермионным резервуаром, определяющим среднее динамическое поле Вейса $\mathcal{G}(\omega)$.

ствию динамического среднего поля $\mathcal{G}(\omega)$, достаточно часто, по аналогии с внутренним магнитным полем в теории молекулярного поля в магнетизме, называемого полем Вейса. Это и определило название соответствующего подхода — теория динамического среднего поля (DMFT).

Такая чисто динамическая задача всё ещё достаточно сложна. Однако она полностью эквивалентна однопримесной модели Андерсона (Single-Impurity Anderson Model, SIAM) [15], которая детально исследована различными методами и физически вполне понятна. Для SIAM развиты неплохо работающие приближённые аналитические методы, такие как, например, итеративная теория возмущений (Iterated Perturbation Theory, IPT) [5] и приближение непересекающихся диаграмм (Non-Crossing Approximation, NCA) [16, 17], но самое замечательное то, что эта модель поддаётся точному численному моделированию, например, квантовым методом Монте-Карло (Quantum Monte Carlo, QMC) [18–22] или методом численной ренормгруппы (Numerical Renormalization-Group, NRG) [23, 24]. Решение эффективной однопримесной модели Андерсона с помощью того или иного численного метода — "примесного решателя" (Impurity Solver, IS) — замыкает общую схему DMFT-подхода.

Сегодня DMFT, по-видимому, является вершиной современного теоретического описания СКС. В рамках DMFT впервые была получена так называемая трёхпиковая структура электронной плотности состояний СКС [5], состоящая из узкого центрального (квазичастичного) пика на уровне Ферми и двух широких боковых максимумов, соответствующих верхней и нижней хаббардовским зонам. Надёжное теоретическое описание получил и мотт-хаббардовский переход металл–диэлектрик. На рисунке 3 показаны плотности состояний, получаемые в DMFT(NRG) при половинном заполнении из "затравочной" полуэллиптической плотности состояний с шириной зоны $2D$. С возрастанием силы корреляций U в плотности состояний формируется характерная трёхпиковая структура, а при дальнейшем увеличении U при значении $U/2D \approx 1,5$ квазичастичный пик схлопывается и происходит переход металл–диэлектрик.

В рамках DMFT оказалось возможным исследовать и ряд двухчастичных свойств. В частности, может быть

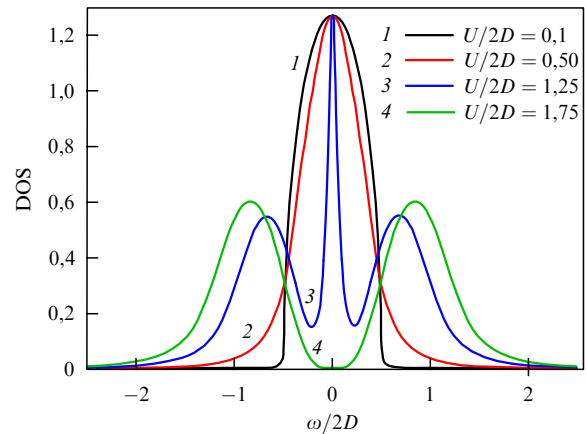


Рис. 3. Плотности состояний, получаемые в DMFT(NRG) при половинном заполнении из "затравочной" полуэллиптической плотности состояний.

легко получена оптическая (динамическая) проводимость [4, 5]. В последние годы DMFT была обобщена для *ab-initio*-расчётов "реалистичных" СКС посредством её объединения с первопринципной одноэлектронной теорией функционала плотности в приближении локальной электронной плотности (DFT/LDA) в единую расчётную схему LDA + DMFT [25–31], о чём ещё пойдет речь в разделе 4.

При всех своих несомненных достоинствах LDA + DMFT-подход имеет и ряд недостатков. В частности, в нём полностью пренебрегается нелокальными корреляциями. За последние годы для преодоления этого недостатка был предложен ряд кластерных обобщений DMFT [32, 33]. Однако предложенные обобщения требуют существенных вычислительных ресурсов, вследствие чего они сильно ограничены как по размерам кластера, так и по возможности их распространения на многоорбитальный случай. Кроме того, в таких подходах крайне затруднено исследование двухчастичных свойств. Для преодоления указанных недостатков нами было предложено [35–37] новое обобщение DMFT, позволяющее рассматривать нелокальные корреляции или дополнительные (по отношению к хаббардовскому) взаимодействия (в принципе, любого типа), оставаясь в рамках однопримесной картины DMFT и сохраняя неизменной самосогласованную систему её уравнений.

2.2. Обобщённый DMFT + Σ -подход

Основная идея предлагаемого обобщённого DMFT + Σ -подхода состоит в том, чтобы рассматривать точное в пределе $d \rightarrow \infty$ DMFT-решение в качестве нулевого "высокоэнергетического" приближения, описывающего электронный спектр на достаточно больших масштабах энергии (порядка ширины зоны или величины U), а более "мелкомасштабные" детали, связанные с эффектами нелокальности и разнообразными эффектами взаимодействия с коллективными модами (например, с фононами или спиновыми флуктуациями), учитывать по теории возмущений, сохраняя по возможности структуру основных уравнений DMFT. Оказывается, такую схему рассмотрения можно реализовать довольно просто [35–37].

Для определённости в дальнейшем будем рассматривать стандартную однозонную модель Хаббарда. Её обобщение для многоорбитального или многозонного случаев также возможно. Главным предположением нашего подхода является выбор решёточной мацубаровской одночастичной функции Грина в виде

$$G_{\mathbf{k}}(i\omega) = \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega) - \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)}, \quad (4)$$

$$\omega = \pi T(2n + 1),$$

где μ — химический потенциал; $\Sigma(i\omega)$ — локальная собственно-энергетическая часть DMFT-типа, обусловленная хаббардовским взаимодействием; $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ — неко-

торая "внешняя" (в общем случае нелокальная, зависящая от импульса) СЭЧ; T — температура, $n = 0, \pm 1, \dots$. Внешний вклад может быть обусловлен взаимодействием электронов с некоторыми "дополнительными" коллективными модами или флуктуациями параметра порядка, возникающими в рамках самой модели Хаббарда, но он может быть также связан и с любыми другими взаимодействиями (флуктуациями), внешними по отношению к стандартной модели Хаббарда, например фононами или рассеянием на примесях, когда он тоже фактически является локальным (независящим от импульса).

Необходимо подчеркнуть, что $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ может содержать локальный (независящий от импульса) вклад, даже если СЭЧ рассматривать в рамках самой модели Хаббарда, однако указанный вклад *исчезает* в пределе бесконечной размерности пространства $d \rightarrow \infty$ и он не учитывается в DMFT, вследствие чего в нашем подходе не существует проблемы двойного учёта диаграмм даже в этом случае. Данный вопрос вообще не возникает, если мы рассматриваем $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$, появляющуюся вследствие некоторого "добавочного" взаимодействия.

Более важным является то, что предположение об аддитивной форме СЭЧ $\Sigma(i\omega) + \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ неявно соответствует пренебрежению интерференцией локального (DMFT) и нелокального вкладов. На рисунке 4 приведены типичные "скелетные" диаграммы для СЭЧ в DMFT + Σ -подходе. Первые два члена — диаграммы (1, 2) для локальной СЭЧ DMFT; диаграммы 3 и 4 показывают вклады в нелокальную часть СЭЧ от "добавочного" взаимодействия с коллективными модами или флуктуациями параметра порядка; диаграмма 5 — пример приводящих к интерференции между локальной и нелокальной частями диаграмм, которыми пренебрегают. Действительно, при пренебрежении такой интерференцией (т.е. диаграммами, подобными диаграмме 5) полная СЭЧ определяется, как показано на рис. 4, простой суммой вкладов, представленных диаграммами 1–4. Диаграммы 3 и 4 — пример скелетных диаграмм для нелокальной СЭЧ, на которых сплошная линия обозначает функцию Грина $G_{\mathbf{k}}$, определяемую выражением (4), а штриховыми линиями обозначено "добавочное" взаимодействие с коллективными модами или флуктуациями параметра порядка.

В результате структура диаграмм для локальной СЭЧ оказывается такой же, как в стандартной DMFT, и возникает самосогласованная система уравнений нашего обобщённого DMFT + Σ -подхода [35–37], которая решается посредством следующей итерационной процедуры.

1. Выбираем некоторое начальное приближение для локальной СЭЧ $\Sigma(i\omega)$, например $\Sigma(i\omega) = 0$.

2. Строим нелокальную СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ в рамках той или иной (приближённой) схемы, учитывающей взаимодействие с коллективными модами или флуктуациями

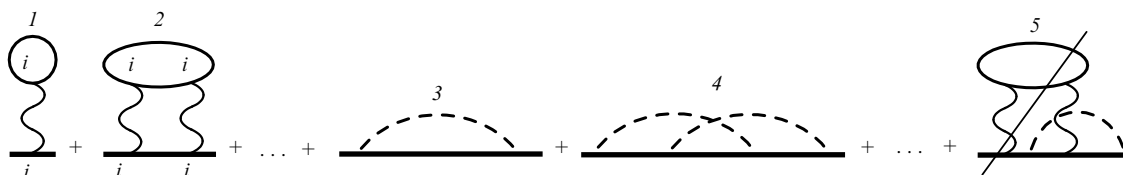


Рис. 4. Типичные скелетные диаграммы для СЭЧ в DMFT + Σ -подходе.

параметра порядка, которая в общем случае сама может зависеть от $\Sigma(i\omega)$ и μ .

3. Вычисляем локальную функцию Грина

$$G_{ii}(i\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega) - \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)}. \quad (5)$$

4. Определяем поле Вейса:

$$\mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) = \Sigma(i\omega) + G_{ii}^{-1}(i\omega). \quad (6)$$

5. Используя какой-либо метод решения примесной задачи (IS), вычисляем одночастичную функцию Грина эффективной однопримесной задачи Андерсона, т.е. фактически вычисляем следующий интеграл по грасмановым переменным $c_{i\sigma}^\dagger$ и $c_{i\sigma}$:

$$G_d(\tau - \tau') = \frac{1}{Z_{\text{eff}}} \int Dc_{i\sigma}^\dagger Dc_{i\sigma} c_{i\sigma}(\tau) c_{i\sigma}^\dagger(\tau') \exp(-S_{\text{eff}}), \quad (7)$$

где эффективное действие для фиксированного узла (андерсоновской примеси) i имеет вид

$$S_{\text{eff}} = - \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 c_{i\sigma}(\tau_1) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau_1 - \tau_2) c_{i\sigma}^\dagger(\tau_2) + \int_0^\beta d\tau U n_{i\uparrow}(\tau) n_{i\downarrow}(\tau) \quad (8)$$

и вводится "статическая сумма" $Z_{\text{eff}} = \int Dc_{i\sigma}^\dagger Dc_{i\sigma} \times \exp(-S_{\text{eff}})$; верхний предел интегрирования $\beta = T^{-1}$.

6. Определяем новую локальную СЭЧ как

$$\Sigma(i\omega) = \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega) - G_d^{-1}(i\omega). \quad (9)$$

7. Используя СЭЧ (9) как начальную на шаге 1, продолжаем процедуру до тех пор, пока с достаточной точностью не получим

$$G_{ii}(i\omega) = G_d(i\omega). \quad (10)$$

В итоге мы находим функцию Грина в виде (4), где $\Sigma(i\omega)$ и $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ — собственно-энергетические части, получаемые в конце нашей итерационной процедуры.

Успех такого обобщённого подхода (и его основной недостаток) связан с аддитивной формой полной СЭЧ (пренебрежение интерференцией между разными вкладками) в уравнении (4). Это позволяет сохранить систему самосогласованных уравнений стандартной DMFT. Однако имеется два существенных отличия от традиционной DMFT. Во-первых, локальная функция Грина эффективной однопримесной задачи имеет вид (5) на каждом шаге стандартной DMFT-процедуры. Во-вторых, на каждой DMFT-итерации мы пересчитываем соответствующую "внешнюю" СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ с помощью некоторой (приближённой) схемы, учитывающей взаимодействие, например, с коллективными модами (фононы, магноны и т.д.) или некоторыми флуктуациями параметра порядка. Для определения нелокального вклада $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ удобно ввести функцию

$$\mathcal{G}_{0\mathbf{k}}(i\omega) = \frac{1}{G_{\mathbf{k}}^{-1}(i\omega) + \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)} = \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega)}, \quad (11)$$

играющую роль "голой" функции Грина при построении теории возмущений по "внешнему" взаимодействию.

Выбор "голой" функции Грина в виде (11) гарантирует, что "одетая" таким взаимодействием 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 совпадёт с полной функцией Грина $G_{\mathbf{k}}(i\omega)$.

Замечательной особенностью нашего подхода является возможность его обобщения для исследования ряда двухчастичных свойств, таких, например, как оптическая проводимость [38, 39]. Проводимость системы выражается через запаздывающую функцию отклика плотность — плотность $\chi^R(\omega, \mathbf{q})$ [40–42]:

$$\sigma(\omega) = - \lim_{q \rightarrow 0} \frac{ie^2\omega}{q^2} \chi^R(\omega, \mathbf{q}), \quad (12)$$

где e — заряд электрона, которая находится аналитическим продолжением на действительные частоты полной поляризационной петли в мацубаровском представлении [40, 41]. Отметим, что проводимость полностью определяется первой производной по q^2 при $q \rightarrow 0$ от функции отклика (12). Данное обстоятельство, а также то, что в DMFT + Σ -приближении пренебрегается интерференцией между локальным хаббардовским и "внешним" взаимодействиями, а неприводимые вершины от хаббардовского взаимодействия являются локальными, позволяют провести частичное пересуммирование интересующих нас для нахождения проводимости диаграмм, воспользовавшись точным (при $q \rightarrow 0$!) тождеством Уорда. В результате для действительной части оптической проводимости в DMFT + Σ -подходе получаем [38, 39]

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma(\omega) = & \frac{e^2\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon [f(\varepsilon_-) - f(\varepsilon_+)] \times \\ & \times \text{Re} \left\{ \phi_{\varepsilon}^{0\text{RA}}(\omega) \left[1 - \frac{\Sigma^R(\varepsilon_+) - \Sigma^A(\varepsilon_-)}{\omega} \right]^2 - \right. \\ & \left. - \phi_{\varepsilon}^{0\text{RR}}(\omega) \left[1 - \frac{\Sigma^R(\varepsilon_+) - \Sigma^R(\varepsilon_-)}{\omega} \right]^2 \right\}, \quad (13) \end{aligned}$$

где

$$\phi_{\varepsilon}^{0\text{RR(RA)}}(\omega) = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\Phi_{\varepsilon}^{0\text{RR(RA)}}(\omega, \mathbf{q}) - \Phi_{\varepsilon}^{0\text{RR(RA)}}(\omega, 0)}{q^2} \quad (14)$$

и введены двухчастичные функции Грина

$$\begin{aligned} \Phi_{\varepsilon}^{0\text{RR(RA)}}(\omega, \mathbf{q}) = & \sum_{\mathbf{k}} G^R(\varepsilon_+, \mathbf{k}_+) G^{\text{R(A)}}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-) \times \\ & \times \Gamma^{\text{RR(RA)}}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-; \varepsilon_+, \mathbf{k}_+), \quad (15) \end{aligned}$$

диаграммное представление которых приведено на рис. 5. Здесь $\mathbf{k}_{\pm} = \mathbf{k} \pm \mathbf{q}/2$, $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon \pm \omega/2$. Вершины

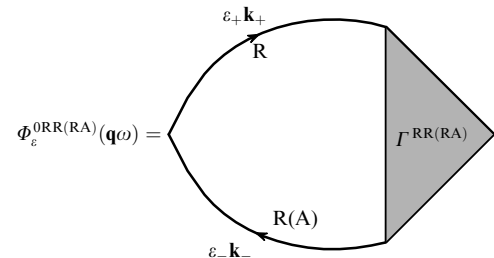


Рис. 5. Диаграммное представление $\Phi_{\varepsilon}^{0\text{RA}}(\omega, \mathbf{q})$ и $\Phi_{\varepsilon}^{0\text{RR}}(\omega, \mathbf{q})$.

$\Gamma^{RR(RA)}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-; \varepsilon_+, \mathbf{k}_+)$ содержат все вершинные поправки от внешнего взаимодействия (флуктуации параметра порядка, примеси, фононы и т.п.), но не включают в себя вершинных поправок от хаббардовского взаимодействия.

Таким образом, наша задача существенно упрощается. 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 или внешних возмущений входит через "блоки" (14), которые могут быть вычислены в подходящем приближении, учитывающем только внешнее взаимодействие, с использованием в качестве "свободной" функции Грина функции (11), включающей в себя локальную СЭЧ, уже определённую в DMFT + Σ -процедуре. Фактически (13) обеспечивает также эффективный алгоритм для вычисления оптической проводимости в рамках стандартной DMFT (при пренебрежении всеми "внешними" нелокальными корреляциями). Тогда (14) 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 самой DMFT, что впервые было показано при рассмотрении петли с векторными вершинами в работах [4, 5].

В разделах 3 и 4 мы достаточно подробно обсудим применение обобщённого DMFT + Σ -подхода к решению конкретных физических задач.

2.3. Некоторые другие обобщения DMFT

К настоящему времени предложен ещё целый ряд теоретических подходов к учёту нелокальных эффектов в DMFT. Мы ограничимся лишь их кратким обзором.

Прежде всего речь идёт об упоминавшихся в разделе 2.1 кластерных методах. Вместо изолированной андерсоновской примеси можно рассмотреть кластер из нескольких таких примесей, учитывая одноузельные корреляции в рамках DMFT, а межузельные — с привлечением некоторого дополнительного метода. Это является базовой идеей так называемых кластерных DMFT-методов [5, 43–45].

Недостаток таких подходов заключается в том, что нелокальные корреляции внутри кластера и между кластерами описываются по-разному, хотя согласно физическим соображениям (например, исходя из трансляционной симметрии) они должны быть одинаковыми. Для устранения этого недочёта было предложено усреднять самосогласованную "кластерную" СЭЧ по парам узлов, которые связаны векторами трансляции [43, 44]. К сожалению, процедуру такого усреднения не удаётся провести внутри самосогласованного цикла DMFT, так как при этом нарушаются аналитические свойства функции Грина.

В каком-то смысле альтернативный подход, названный приближением динамического кластера (Dynamical Cluster Approximation, DCA), был предложен в работах [45–50]. Данный подход не нарушает трансляционной инвариантности и даёт физическое поведение функции Грина. В DCA зона Бриллюэна разбивается на несколько ячеек, центры которых определяются соответствующими векторами \mathbf{K} . При этом СЭЧ предполагается

постоянной в каждой такой ячейке, $\Sigma_{\mathbf{K}}(\omega) = \Sigma_{\mathbf{K}}(\omega)$, но различной для разных \mathbf{K} . После перехода в прямое пространство отличие DCA от кластерной DMFT заключается в том, что в DCA DMFT-кластер удовлетворяет периодическим (а не открытым, как в кластерной DMFT) граничным условиям.

Выбор конкретного кластерного метода определяется физической задачей, которая должна быть решена. Естественно, общим недостатком кластерных подходов является существенно бо́льшая их вычислительная затратность (по сравнению с таковой для стандартной DMFT), связанная с необходимостью решения соответствующей кластерной задачи. Тем не менее на этом пути достигнут ряд существенных успехов. Кластерные обобщения DMFT применялись как к различным модельным задачам, так и к исследованиям целого ряда реальных систем. Хороший обзор соответствующих работ можно найти в [32].

В последние годы предложен ряд диаграммных обобщений DMFT, в которых предприняты попытки более или менее последовательного построения теории возмущений по обратным степеням размерности пространства, а стандартная DMFT рассматривается в качестве нулевого приближения. Упомянем в связи с этим работу [51], а также развитое в [52] так называемое приближение динамической вершины (DGA — Dynamical Gamma (Γ) Approximation). Особенно многообещающим в этом направлении представляется развитый в работах [53, 54] метод дуальных фермионов, который претендует на последовательную реализацию такой теории возмущений. К сожалению, пока с использованием этих подходов решены лишь простейшие модельные задачи, к реальным системам они практически не применялись.

3. Применения обобщённого DMFT + Σ -подхода к модельным задачам

3.1. Сильнокоррелированные системы в псевдощелевом состоянии

3.1.1. Псевдощелевые флуктуации. Ярким примером сильнокоррелированных систем служат ВТСП-купраты. "Родительские" стехиометрические соединения купратов являются антиферромагнитными (AFM) диэлектриками с хорошо определённой оптической щелью и антиферромагнетизмом, обусловленным упорядочением локализованных спинов на медных ионах, с температурой Нееля несколько сотен градусов Кельвина. Это диэлектрическое состояние быстро разрушается при введении небольшого количества легирующих примесей. Таким образом, ВТСП-купраты можно отнести к разряду легированных моттовских диэлектриков с сильными электронными корреляциями.

Среди многочисленных аномалий нормальной фазы высокотемпературных сверхпроводников особый интерес вызывает наличие псевдощели в электронном спектре недодопированных купратов [55, 56]. Несмотря на продолжающиеся дискуссии о природе псевдощели, предпочтительным, с нашей точки зрения, сценарием её формирования является модель сильного рассеяния носителей заряда на антиферромагнитных спиновых (SDW — Spin Density Wave) флуктуациях ближнего порядка [56, 57]. В импульсном представлении такое

рассеяние характеризуется импульсами переброса порядка $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ (где a — параметр двумерной решётки). Это приводит к формированию структур в одночастичном спектре, которые являются предвестником изменений в спектре вследствие возникновения дальнего АФМ-порядка (удвоения периода). В результате мы получаем неферми-жидкостное поведение (дизэлектризацию) спектральной плотности вблизи так называемых горячих точек на поверхности Ферми, возникающих на пересечении поверхности Ферми с границей антиферромагнитной зоны Бриллюэна [56].

В рамках такого спин-флуктационного сценария в работах [56, 58–60] изучалась упрощённая модель псевдощелевого состояния, основанная на предположении о том, что при достаточно высоких температурах динамикой спиновых флуктуаций можно пренебречь и рассматривать рассеяние на статическом гауссовом случайном поле (замороженный беспорядок) псевдощелевых флуктуаций (ближнего АФМ-порядка). Интенсивность рассеяния на флуктуациях характеризуется узким пиком вблизи векторов рассеяния порядка \mathbf{Q} с шириной, определяемой обратной корреляционной длиной ближнего порядка $\kappa = \xi^{-1}$, и соответствующим энергетическим масштабом Δ (порядка температуры кроссовера T^* в псевдощелевое состояние).

Поэтому для импульсно-зависящей СЭЧ мы сосредоточимся на случае рассеяния электронов на таких (SDW-подобных) антиферромагнитных спиновых флуктуациях (аналогичное рассмотрение справедливо и для зарядово-подобных (Charge-Density Wave, CDW) флуктуаций) ближнего порядка. Для расчёта $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ в случае электронов, движущихся в замороженном случайном поле гауссовых спиновых (или зарядовых) флуктуаций с доминирующим импульсом рассеяния вблизи характерного вектора \mathbf{Q} (модель горячих точек [56]), используем обобщённую версию рекуррентной процедуры, предложенной в работах [58–61], которая позволяет учесть все фейнмановские диаграммы, описывающие рассеяние электронов указанным случайным полем. Это становится возможным вследствие замечательного свойства упрощённой модели горячих точек: вклад произвольной диаграммы с пересечением линий взаимодействия равен вкладу некоторой диаграммы такого же порядка без пересечения таких линий [61]. Таким образом, мы можем ограничиться рассмотрением только диаграмм без пересечения линий взаимодействия, учитывая вклад других диаграмм с помощью комбинаторных множителей, приписываемых линиям взаимодействия [60, 61]. В результате получим следующее рекуррентное соотношение (представляющее собой непрерывную дробь [60, 61]) для СЭЧ:

$$\Sigma_n(i\omega, \mathbf{k}) = \Delta^2 \frac{s(n)}{i\omega + \mu - \Sigma(i\omega) - \varepsilon_n(\mathbf{k}) + i\nu_n \kappa - \Sigma_{n+1}(i\omega, \mathbf{k})}. \quad (16)$$

Член $\Sigma_n(i\omega, \mathbf{k})$ рекуррентной процедуры содержит все вклады диаграмм с числом линий взаимодействия $\geq n$. Рекуррентная процедура для $\Sigma_n(i\omega, \mathbf{k})$ сходится достаточно быстро; можно положить $\Sigma_n(i\omega, \mathbf{k})$ при достаточно больших n равной нулю и, проводя прямые вычисления, получить желаемую физическую СЭЧ при $n = 1$ [60] и использовать её в расчётной схеме DMFT + Σ :

$$\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega) = \Sigma_{n=1}(i\omega, \mathbf{k}). \quad (17)$$

Величина Δ характеризует энергетический масштаб (ширину) псевдощели; $\kappa = \xi^{-1}$ — обратная корреляционная длина SDW-флуктуаций (CDW-флуктуаций), $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ и $\nu_n = |v_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^x| + |v_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^y|$ для нечётных n , $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k})$ и $\nu_n = |v_{\mathbf{k}}^x| + |v_{\mathbf{k}}^y|$ для чётных n , где проекции скоростей $v_{\mathbf{k}}^x$ и $v_{\mathbf{k}}^y$ определяются обычными производными по соответствующим проекциям импульса от "голой" электронной дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$. Наконец, $s(n)$ — комбинаторные множители, определяющие число совпадающих диаграмм,

$$s(n) = n \quad (18)$$

для случая соизмеримых зарядовых (CDW-типа) флуктуаций с $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ [61]. Для несоизмеримых CDW-флуктуаций [61] (когда \mathbf{Q} не связан с периодом обратной решётки)

$$s(n) = \begin{cases} \frac{n+1}{2} & \text{при нечётных } n, \\ \frac{n}{2} & \text{при чётных } n. \end{cases} \quad (19)$$

Если мы хотим учесть спиновую (гейзенберговскую) структуру взаимодействия со спиновыми флуктуациями в "почти антиферромагнитной" ферми-жидкости (спин-фермионная (SF) модель [58, 59]), то комбинаторика диаграмм становится более сложной. Сохраняющие проекцию спина процессы рассеяния подчиняются соизмеримой комбинаторике, а рассеяние с переворотом спина описывается диаграммами несоизмеримого типа ("заряженное" случайное поле в терминах работ [58, 59]). В такой модели рекуррентное соотношение (16) для одночастичной функции Грина сохраняется, но комбинаторный множитель $s(n)$ имеет вид [58, 59]

$$s(n) = \begin{cases} \frac{n+2}{3} & \text{при нечётных } n, \\ \frac{n}{3} & \text{при чётных } n. \end{cases} \quad (20)$$

Очевидно, что с этой процедурой мы вводим в рассмотрение важный масштаб длины ξ , отсутствующий в стандартной DMFT. Физически масштаб длины ξ отражает влияние флуктуаций ближнего порядка (SDW или CDW) на электронный "резервуар", окружающий эффективную андерсоновскую примесь в DMFT.

После получения самосогласованного решения системы DMFT + Σ -уравнений (5)–(10), учитывающих и нелокальные флуктуации, мы можем рассчитать спектральную плотность $A(\omega, \mathbf{k})$:

$$A(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(\omega) - \Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)}, \quad (21)$$

где $\Sigma(\omega)$, $\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)$ и химический потенциал μ уже вычислены самосогласованным образом. Плотность состояний может быть рассчитана интегрированием (21) по зоне Бриллюэна.

Подобный подход может быть развит и для нахождения двухчастичных вершин. Основная идея, используемая здесь, состоит в том, что произвольная диаграмма для вершинной части может быть получена вставкой линии "внешнего поля" в соответствующую диаграмму

для СЭЧ [62–64]. В рассматриваемой модели можно ограничиться диаграммами с непересекающимися линиями взаимодействия, учитывая вклад остальных диаграмм с помощью комбинаторных множителей $s(n)$, приписываемых линиям взаимодействия [58–61]. Таким образом, все диаграммы для вершинной части порождаются простыми лестничными диаграммами с дополнительными $s(n)$ -множителями, связанными с линиями взаимодействия [63, 64] (см. также [42]). Тогда получается следующая система рекуррентных соотношений для вершинной части $\Gamma^{\text{RA}}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-; \varepsilon_+, \mathbf{k}_+)$ [64], в которую также включён вклад от локальной (DMFT) СЭЧ, получаемой в рамках DMFT + Σ -процедуры:

$$\begin{aligned} \Gamma_{n-1}^{\text{RA}}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-; \varepsilon_+, \mathbf{k}_+) = & 1 + \Delta^2 s(n) G_n^{\text{A}}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-) G_n^{\text{R}}(\varepsilon_+, \mathbf{k}_+) \times \\ & \times \left\{ 1 + 2iv_n \kappa k [\omega - \varepsilon_n(\mathbf{k}_+) + \varepsilon_n(\mathbf{k}_-) - \Sigma^{\text{R}}(\varepsilon_+) + \right. \\ & + \Sigma^{\text{A}}(\varepsilon_-) - \Sigma_{n+1}^{\text{R}}(\varepsilon_+, \mathbf{k}_+) + \Sigma_{n+1}^{\text{A}}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-)]^{-1} \Big\} \times \\ & \times \Gamma_n^{\text{RA}}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-; \varepsilon_+, \mathbf{k}_+), \end{aligned} \quad (22)$$

где

$$\begin{aligned} G_n^{\text{R,A}}(\varepsilon_{\pm}, \mathbf{k}_{\pm}) = \\ = \frac{1}{\varepsilon_{\pm} - \varepsilon_n(\mathbf{k}_{\pm}) \pm inv_n \kappa - \Sigma^{\text{R,A}}(\varepsilon_{\pm}) - \Sigma_{n+1}^{\text{R,A}}(\varepsilon_{\pm}, \mathbf{k}_{\pm})}. \end{aligned} \quad (23)$$

"Физическая" вершина $\Gamma^{\text{RA}}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-; \varepsilon_+, \mathbf{k}_+)$ определяется как $\Gamma_{n=0}^{\text{RA}}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-; \varepsilon_+, \mathbf{k}_+)$. Рекуррентная процедура (22) учитывает все диаграммы теории возмущений для вершинной части. При $\kappa \rightarrow 0$ ($\xi \rightarrow \infty$) (22) сводится к ряду, исследованному в работе [62] (см. также [58, 59]), который может быть точно просуммирован аналитически. Стандартное лестничное приближение получается, если положить комбинаторные множители $s(n)$ в (22) равными единице при всех n [63]. Рекуррентная процедура для $\Gamma^{\text{RR}}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-; \varepsilon_+, \mathbf{k}_+)$ отличается от (22) только очевидной заменой $\text{A} \rightarrow \text{R}$, а также заменой всего выражения в фигурных скобках в правой части (22) единицей.

Уравнения (4), (16), (22) совместно с (13) и (14) дают полностью самосогласованную процедуру для расчёта оптической проводимости в нашей модели в рамках DMFT + Σ -подхода.

Важной стороной теории является также то, что оба эффективных параметра, Δ и ξ , в принципе могут быть вычислены из микроскопической теории. Например, с использованием двухчастичного самосогласованного подхода работы [65] совместно с приближениями, вводимыми в работах [58–60], для двумерной модели Хаббарда получено [35] микроскопическое выражение для Δ , которое можно рассчитать в рамках стандартной DMFT. В частности, продемонстрировано, что в широком диапазоне уровня дырочного допирования амплитуда псевдощели Δ лежит в интервале от t до $2t$ (t — интеграл переноса между ближайшими соседями).

3.1.2. Основные электронные свойства в псевдощелевом состоянии. Обсудим результаты для стандартной однозонной модели Хаббарда на квадратной решётке с интегралами переноса между ближайшими (t) и вторыми ближайшими соседями (t'), что приводит к электронной дисперсии

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a) - 4t' \cos k_x a \cos k_y a. \quad (24)$$

В качестве единицы измерения энергии выберем интеграл переноса между ближайшими соседями t , а для шкалы длин — постоянную решётки a . В качестве "примесного решателя" использовался метод NRG [23, 24]. Подробные результаты расчётов одночастичных свойств, демонстрирующих псевдощелевые аномалии, можно найти в работах [35–37], а оптической проводимости — в работе [38]. Здесь мы остановимся только на наиболее типичных результатах, в основном соответствующих случаю $t'/t = -0,4$ (характерному для купратов) и заполнению $n = 0,8$ (дырочное допирование).

Плотность состояний и спектральная плотность. Начнём обсуждение результатов, получаемых в обобщённом DMFT + Σ -подходе, с плотностей состояний (Density Of States, DOS) в случае относительно малого (по сравнению с шириной зоны) кулоновского взаимодействия $U = 4t$. Характерной чертой сильнокоррелированного металлического состояния является сосуществование нижних и верхних хаббардовских зон, расщеплённых кулоновским взаимодействием U с квазичастичным пиком на уровне Ферми [4, 5]. Поскольку невозмущённая DOS на квадратной решётке имеет сингулярность Ван Хова вблизи уровня Ферми, невозможно трактовать пик на уровне Ферми просто как квазичастичный пик. Фактически имеется два вклада в этот пик, обусловленных: 1) квазичастичным пиком, появляющимся в сильнокоррелированных металлах вследствие многочастичных эффектов, и 2) сглаженной сингулярностью Ван Хова в невозмущённой DOS³.

На рисунке 6 показаны DMFT + Σ -плотности состояний при $n = 0,8$ в случае $t'/t = -0,4$ и $t' = 0$ для температур $T = 0,356t$ и $T = 0,088t$. Тёмные сплошные кривые получены в отсутствие флуктуаций. Остальные кривые на рис. 6 представляют результаты для DOS с нелокальными флуктуациями амплитудой $\Delta = 2t$. Для всех наборов параметров мы видим, что введение нелокальных флуктуаций приводит к формированию псевдощели на квазичастичном пике. Ширина псевдощели (расстояние между пиками DOS) порядка 2Δ . Уменьшение Δ от $2t$ до t приводит к двукратному уменьшению ширины псевдощели и уменьшению её глубины. При использовании комбинаторных факторов, соответствующих спин-фермионной модели (см. (20)), псевдощель оказывается более выраженной, чем в случае соизмеримых зарядовых флуктуаций (комбинаторные факторы (19)). Влияние корреляционной длины соответствует ожидаемому. Увеличение обратной корреляционной длины от $\xi^{-1} = 0,1$ до $\xi^{-1} = 0,5$, т.е. уменьшение корреляционной длины, слегка размывает псевдощель. Увеличение температуры от $T = 0,088t$ до $T = 0,356t$ приводит к общему уширению структур в плотностях состояний. Следует отметить, что результаты, получаемые в обобщённом DMFT + Σ -подходе с $U = 4t$ (меньшим ширины зоны W), качественно похожи на полученные ранее в отсутствие хаббардовского взаимодействия [58–60].

Рассмотрим теперь случай допированного моттовского диэлектрика с хаббардовским взаимодействием $U = 40t$, $t'/t = -0,4$ и заполнением $n = 0,8$ (рис. 6д). Характерными чертами DOS для таких сильнокоррели-

³ С увеличением кулоновского отталкивания сингулярность Ван Хова непрерывно трансформируется в квазичастичный пик при $U = (6-8)t$.

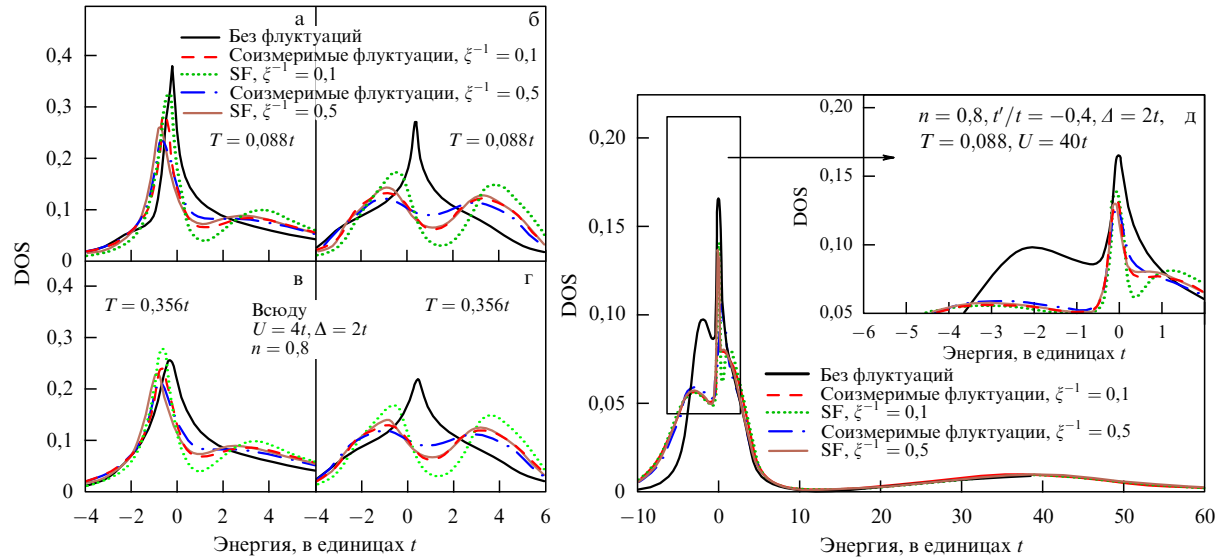


Рис. 6. Сравнение плотностей состояний (число состояний на энергетический интервал t на одну ячейку и одну проекцию спина), полученных DMFT(NRG) + Σ -расчётами [35] для различных комбинаторных множителей (SF — спин-фермионная модель, соизмеримые флуктуации), обратных корреляционных длин ξ^{-1} (выраженных в единицах постоянной решётки) с псевдощелевой амплитудой $\Delta = 2t$ и заполнением $n = 0,8$: (а–г) $U = 4t$ при $t'/t = -0,4$ (на рис. а, в) и $t' = 0$ (на рис. б, г) для двух значений температуры, указанных на рисунке; (д) $U = 40t$, $T = 0,088t$. Уровень Ферми соответствует нулю энергии.

рованных металлов являются 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 теперь находится далеко справа от уровня Ферми и не касается квазичастичного пика (в отличие от случая малого кулоновского взаимодействия).

При достаточно сильных нелокальных флуктуациях, $\Delta = 2t$, псевдощель возникает в середине квазичастичного пика. Кроме того, нижняя хаббардовская зона оказывается слегка уширенной вследствие флуктуационных эффектов. Качественно поведение псевдощелевых аномалий опять похоже на описанное выше для случая $U = 4t$ — уменьшение ξ размывает псевдощель, делая её менее выраженной, уменьшение Δ от $2t$ до t сужает псевдощель и уменьшает её глубину (см. [35]). (Заметим, что в случае допированного моттовского диэлектрика псевдощель сильнее выражена для SDW-подобных флуктуаций, чем для CDW-подобных.)

Имеются, однако, и вполне заметные отличия от случая $U = 4t$. Например, ширина псевдощели в DOS оказывается существенно меньшей, чем 2Δ , что мы связываем со значительным сужением самого квазичастичного пика вследствие локальных корреляций.

На рисунке 7 приведена спектральная плотность $A(\omega, \mathbf{k})$, рассчитанная в DMFT + Σ -подходе вдоль высокосимметричных направлений первой зоны Бриллюэна: $\Gamma(0,0) - X(\pi,0) - M(\pi,\pi) - \Gamma(0,0)$. По сути, на рисунке представлена квазичастичная зона в многочастичной системе — положение пиков спектральной плотности описывает дисперсию квазичастиц, а ширина пиков определяет затухание квазичастиц. Причём ясно наблюдается частичная перестройка ("разрушение") этой зоны псевдощелевыми флуктуациями. Видна характерная двухпиковая псевдощелевая структура вблизи точки X зоны Бриллюэна. В центре М– Γ -направления (так называемая

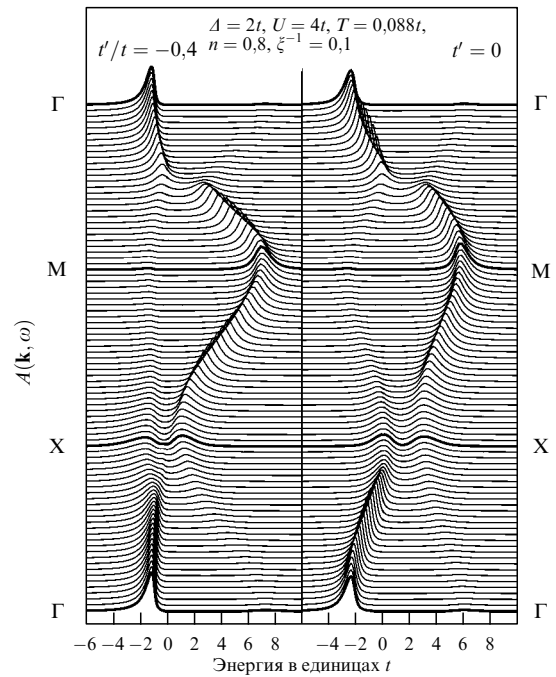


Рис. 7. Спектральная плотность $A(\mathbf{k}, \omega)$, полученная в [35] из DMFT(NRG) + Σ -расчётов вдоль высокосимметричных направлений первой зоны Бриллюэна $\Gamma(0,0) - X(\pi,0) - M(\pi,\pi) - \Gamma(0,0)$ для спин-фермионной комбинаторики диаграмм. Уровень Ферми равен нулю энергии.

нодальная точка) можно увидеть возникновение псевдощели, т.е. наличие "памяти" об AFM-щели, имеющей здесь максимум в случае полного AFM-упорядочения. Изменение заполнения приводит в основном к общему смещению спектральных плотностей относительно уровня Ферми.

"Разрушение" поверхности Ферми. В рамках стандартной DMFT поверхность Ферми не перенормируется взаимодействием, т.е. остаётся такой же, как и для

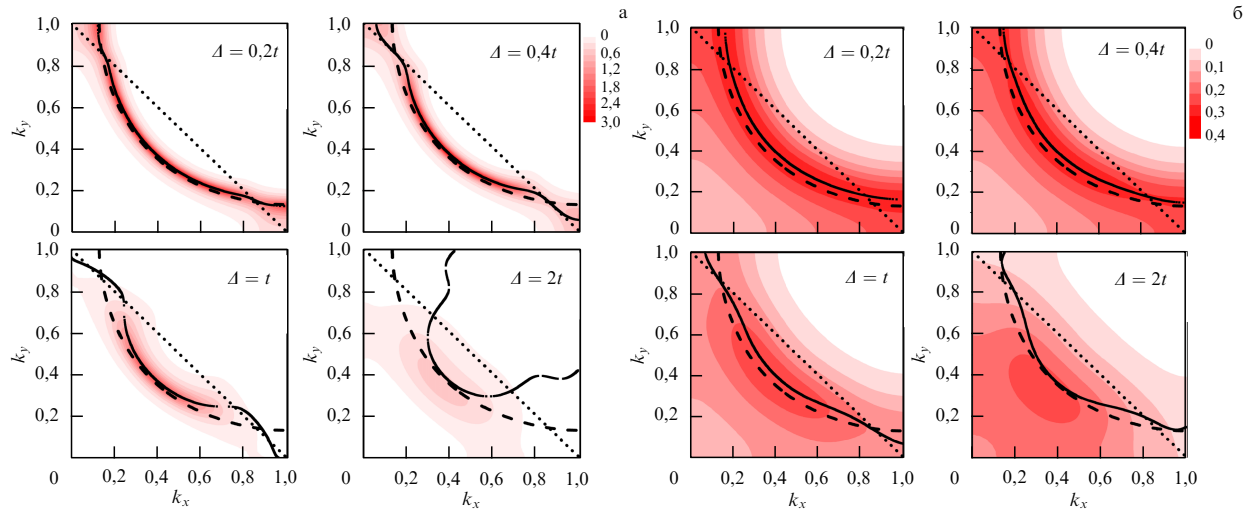


Рис. 8. Картина "разрушения" поверхности Ферми, полученная [36] в DMFT(NRG)+ Σ -расчётах при (а) $U = 4t$ и (б) $U = 40t$ для различных значений Δ , указанных на рисунке. Заполнение $n = 0.8$. Штриховые кривые — "голая" поверхность Ферми, пунктирные линии — границы магнитной зоны Бриллюэна. Сплошными кривыми показаны решения (25).

"голых" квазичастиц [3]. Однако в случае нетривиальной импульсной зависимости СЭЧ может возникнуть существенная перенормировка поверхности Ферми вследствие формирования псевдощели [58, 59]. Существует несколько способов определения поверхности Ферми в СКС. Далее мы будем использовать диаграмму интенсивности для взятой при $\omega = 0$ спектральной плотности (21), часто называемую картой поверхности Ферми. Такая карта непосредственно определяется в ARPES-экспериментах, и положение максимума интенсивности на ней определяет поверхность Ферми в обычном ферми-жидкостном случае (когда затухание квазичастиц становится пренебрежимо малым).

На рисунке 8а показаны карты поверхности Ферми для коррелированного металла с $U = 4t$. Диаграмма интенсивности спектральной плотности ясно демонстрирует "разрушение" поверхности Ферми в горячих точках с формированием ферми-дуг при возрастании Δ , аналогично тому, как это наблюдалось в пионерских ARPES-экспериментах Нормана и др. [66], подтверждённых впоследствии во множестве работ. Следует отметить, что качественно аналогичное псевдощелевое поведение наблюдается и в отсутствие электронных корреляций ($U = 0$) [36, 67]. Роль конечных U сводится к уменьшению интенсивности спектральной плотности по сравнению с таковой в случае $U = 0$ и приводит к дополнительному размытию, делающему горячие точки менее заметными. "Разрушение" поверхности Ферми начинается в окрестности горячих точек при малых величинах Δ , но практически сразу же поверхность Ферми исчезает во всей антинодальной области (окрестность точек $X(\pi, 0)$, $Y(0, \pi)$) зоны Бриллюэна, и сохраняются только ферми-дуги в нодальной области, достаточно близкие к "затраченной" поверхности Ферми. Эти результаты дают естественное объяснение наблюдаемому в ARPES-экспериментах поведению поверхности Ферми и тому факту, что существование области горячих точек наблюдается достаточно редко [68]. Более подробно вопрос о возможности наблюдения области горячих точек (с примерами таких систем) обсуждается в разделе 4.4, посвящённом рассмотрению реальных купратов с использованием метода LDA + DMFT + Σ .

В случае допированного моттовского диэлектрика с $U = 40t$ (рис. 8б) мы видим, что "поверхность Ферми" довольно плохо определена для всех величин Δ . Профиль спектральной плотности является гораздо более размытым, чем в случае меньших величин U , отражая важную роль корреляций.

Для сравнения на рис. 8 показаны перенормированные поверхности Ферми, полученные в этой модели с помощью формального определения поверхности Ферми как решения уравнения:

$$\omega - \varepsilon(\mathbf{k}) + \mu - \text{Re} \Sigma(\omega) - \text{Re} \Sigma_{\mathbf{k}}(\omega) = 0 \quad (25)$$

при $\omega = 0$, используемого, например, в работах [58, 59]⁴. Очевидно, что такое определение даёт поверхность Ферми, близкую к получаемой из диаграммы интенсивности при малых Δ , но не учитывает её существенного размытия, особенно важного при больших Δ . При большой амплитуде псевдощели определённая таким способом поверхность Ферми ведёт себя качественно адекватно её реальному поведению, следующему из анализа спектральной плотности, лишь в нодальной области. Именно диаграмма интенсивности спектральной плотности (при $\omega = 0$) даёт наиболее полное и естественное представление о поверхности Ферми в системах с сильными корреляциями и нелокальными флуктуациями того или иного параметра порядка, которые присутствуют в широкой области фазовой диаграммы систем типа ВТСП-купратов вследствие их пониженной размерности. Результаты, получаемые в таком подходе, находятся в прямом соответствии с

⁴ Такое определение ферми-поверхности принято в стандартной теории ферми-жидкости. В данном случае влияние нелокальных псевдощелевых флуктуаций фактически приводит к качественным изменениям простой ферми-жидкостной картины. При этом мы оставляем в стороне вопрос о выполнении условий применимости теории ферми-жидкости на определённой таким образом поверхности Ферми или в температурном пределе $T \rightarrow 0$, поскольку используемое статическое приближение для псевдощелевых флуктуаций является принципиально высокотемпературным — флуктуации ближнего AFM-порядка можно считать квазистатическими только при $T \gg \omega_{\text{SF}}$, где ω_{SF} — характерная частота спиновых флуктуаций [58–60].

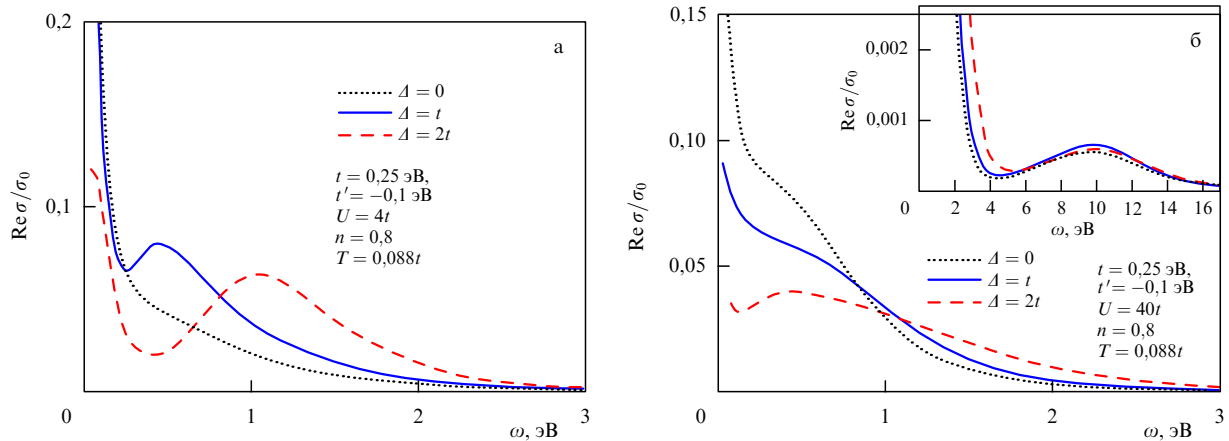


Рис. 9. Действительная часть оптической проводимости ($t' = -0.4t$, $t = 0.25$ эВ), полученная в [38] в DMFT + Σ -приближении при различных величинах Δ , указанных на рисунке, температуре $T = 0.088t$, заполнении $n = 0.8$ и корреляционной длине $\xi = 10a$ для коррелированного металла, $U = 4t$ (а) и для допированного моттовского диэлектрика, $U = 40t$ (б). На вставке — проводимость в широком частотном интервале, содержащем переходы в верхнюю хаббардовскую зону.

данными ARPES-экспериментов, в которых используется именно такое определение поверхности Ферми.

Оптическая проводимость. Обсудим результаты, получаемые для оптической проводимости в псевдощелевом состоянии в нашем DMFT + Σ -подходе. На рисунке 9а показаны DMFT + Σ -результаты для действительной части проводимости в коррелированном металле ($U = 4t$) при разных амплитудах псевдощели. Ясно видно формирование типичной псевдощелевой аномалии на "плече" друдевского пика, и, как и следовало ожидать, псевдощелевые аномалии возрастают с увеличением Δ . Такое поведение указанных аномалий довольно похоже на особенность, которая наблюдается в оптической проводимости купратных сверхпроводников в средней инфракрасной области спектра (в англоязычной литературе такая особенность получила название mid-infrared feature) [69, 70]. Возрастание температуры и уменьшение корреляционной длины флуктуаций размывают псевдощель, делая псевдощелевую аномалию менее выраженной [38].

На рисунке 9б показаны DMFT + Σ -результаты для действительной части проводимости в допированном моттовском диэлектрике ($U = 40t$) при разных амплитудах псевдощели. Видно, что область частот, в которой наблюдается псевдощелевая аномалия, становится уже с возрастанием силы корреляций и при больших U псевдощелевые аномалии оказываются сильно подавленными. Псевдощелевые флуктуации приводят к заметному изменению оптической проводимости только для относительно малых, порядка Δ , частот, а для высоких частот (например, порядка U , при которых имеется вклад от переходов в верхнюю хаббардовскую зону) псевдощелевые эффекты не проявляются (см. вставку на рис. 9б). При малых частотах мы наблюдаем подавление друдевского пика с достаточно слабой аномалией в области $\omega \sim \Delta$, которая исчезает при малых Δ или малых корреляционных длинах.

3.2. Переход Мотта – Андерсона в неупорядоченных системах

Важность учёта электронного взаимодействия и неупорядоченности при исследовании конденсированного состояния хорошо известна [71, 72]. Кулоновские корре-

кции и беспорядок являются двумя приводящими к переходам металл – диэлектрик движущими силами, связанными с локализацией и делокализацией носителей заряда. В частности, переход Мотта – Хаббарда обусловлен электронным отталкиванием [1, 73], а андерсоновский переход металл – диэлектрик связан с примесным рассеянием невзаимодействующих частиц [74]. Как известно, тонкая конкуренция эффектов беспорядка и взаимодействия имеет много проявлений [71, 72, 75, 76], и наиболее ярко это выражается в случае сильных электронных корреляций и сильного беспорядка, определяя физические механизмы перехода металл – диэлектрик Мотта – Андерсона [71, 72].

Одной из основных моделей, позволяющих учесть как электронные корреляции, приводящие к моттовскому переходу металл – диэлектрик [1, 73], так и эффекты сильного беспорядка, приводящие к андерсоновскому переходу металл – диэлектрик, является модель Андерсона – Хаббарда [39, 77–82].

В работах [77–79] трёхмерная модель Андерсона – Хаббарда рассматривалась в рамках теории динамического среднего поля [3–5, 14]. Влияние локального беспорядка учитывалось через усреднённую плотность состояний [83, 84] в рамках хорошо известного приближения когерентного потенциала, которое не описывает локализацию Андерсона. Для решения этой проблемы Добросавлевич и Котляр [77] предложили вариант DMFT, в котором из решения самосогласованных стохастических уравнений DMFT для ансамбля систем с заданными реализациями беспорядка рассчитывалась средняя логарифмическая (средняя геометрическая) плотность состояний, дающая информацию о критическом беспорядке для андерсоновского перехода. Этот подход далее был развит в работах [78, 79], где получена весьма нетривиальная фазовая диаграмма трёхмерной парамагнитной модели Андерсона – Хаббарда [79] с фазами коррелированного металла, моттовского диэлектрика и коррелированного андерсоновского диэлектрика. Главная проблема подхода, используемого в работах [77–79], — это невозможность непосредственно рассчитать измеряемые физические свойства, такие как проводимость, которая, собственно, и определяет переход металл – диэлектрик.

В то же время существует хорошо развитый подход самосогласованной теории андерсоновской локализации, основанный на решении уравнений для обобщённого коэффициента диффузии. Эффективность этого подхода в отсутствие взаимодействия известна достаточно давно [40–42, 56, 85–87]; предпринимались и попытки учесть эффекты взаимодействия в рамках такого подхода с достаточно обещающими результатами [86, 88, 89]. Однако до сих пор этот подход не распространялся на современную теорию сильнокоррелированных электронных систем. Впервые такое исследование было проведено в работе [39] для трёхмерных систем и в работе [90] для двумерных.

Будем рассматривать немагнитную неупорядоченную модель Андерсона–Хаббарда при половинном (в основном) заполнении при произвольных силе взаимодействия и беспорядке. Эта модель очевидным образом содержит в себе как мотт-хаббардовский, так и андерсоновский переходы металл–диэлектрик. Гамильтониан модели имеет вид

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} \epsilon_i n_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (26)$$

где $t > 0$ — амплитуда перескока между ближайшими соседями, U — хаббардовское отталкивание на узле, $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$ — оператор числа электронов на узле, $a_{i\sigma}$ ($a_{i\sigma}^\dagger$) — оператор уничтожения (рождения) электрона со спином σ . Локальные энергии ϵ_i на разных узлах решётки полагаются независимыми случайными величинами. Для упрощения диаграммной техники далее мы предполагаем для ϵ_i распределение Гаусса:

$$\mathcal{P}(\epsilon_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta} \exp\left(-\frac{\epsilon_i^2}{2\Delta^2}\right). \quad (27)$$

Параметр Δ здесь служит мерой величины беспорядка. Такое гауссово случайное поле (белый шум) энергетических уровней ϵ_i на различных узлах решётки эквивалентно "примесному" рассеянию, и оно может быть учтено с помощью стандартной диаграммной техники для вычисления усреднённых функций Грина [42].

Для $\Sigma_{\mathbf{p}}(i\epsilon)$, возникающей вследствие рассеяния на беспорядке, мы будем рассматривать простой однопетлевой вклад, пренебрегая перекрёстными диаграммами, т.е. самосогласованное борновское приближение [42], которое в случае гауссова беспорядка (27) приводит к обычному выражению:

$$\Sigma_{\mathbf{p}}(i\epsilon) = \Delta^2 \sum_{\mathbf{p}} G(i\epsilon, \mathbf{p}) \equiv \Sigma_{\text{imp}}(i\epsilon), \quad (28)$$

так что "внешняя" СЭЧ оказывается независимой от \mathbf{p} (локальной).

Для анализа оптической проводимости будем использовать общее DMFT + Σ -выражение (13). Наиболее важный блок $\Phi_{\epsilon}^{\text{ORA}}(\omega, \mathbf{q})$ может быть вычислен на основе идеологии самосогласованной теории локализации [40–42, 56, 85–87] с некоторыми обобщениями, учитывающими роль хаббардовского взаимодействия с помощью DMFT + Σ -подхода [39, 90]. Основное отличие от стандартного подхода состоит в том, что уравнения самосогласованной теории выводятся здесь с использованием функции Грина (4), содержащей локальный вклад в СЭЧ от хаббардовского взаимодействия.

Следуя стандартному рассмотрению [40–42, 56, 85–87], мы получаем диффузионно-подобный (при малых ω и q) вклад в $\Phi_{\epsilon}^{\text{ORA}}(\omega, \mathbf{q})$, имеющий вид

$$\Phi_{\epsilon}^{\text{ORA}}(\tilde{\omega}, \mathbf{q}) = \frac{2\pi i N(\epsilon)}{\tilde{\omega} + iD(\omega)q^2}, \quad (29)$$

где $D(\omega)$ — обобщённый коэффициент диффузии. Важное отличие (29) от аналогичного выражения в одночастичном случае заключено в члене

$$\begin{aligned} \tilde{\omega} &= \epsilon_+ - \epsilon_- - \Sigma^{\text{R}}(\epsilon_+) + \Sigma^{\text{A}}(\epsilon_-) = \\ &= \omega - \Sigma^{\text{R}}(\epsilon_+) + \Sigma^{\text{A}}(\epsilon_-) \equiv \omega - \Delta\Sigma^{\text{RA}}(\omega), \end{aligned} \quad (30)$$

который заменяет обычный член ω в знаменателе стандартного выражения для $\Phi_{\epsilon}^{\text{ORA}}(\omega, \mathbf{q})$. Из общих соображений ясно, что в металлической фазе при $\omega \rightarrow 0$ мы имеем $\Delta\Sigma^{\text{RA}}(\omega = 0) = 2i \text{Im}\Sigma(\epsilon) \sim \max\{T^2, \epsilon^2\}$, что отражает ферми-жидкостное поведение в DMFT (которое не нарушается упругим примесным рассеянием). При конечных T это приводит к обычному нарушению фазовой когерентности вследствие электрон-электронного (неупругого) рассеяния [71, 72, 75, 76].

Тогда (13) принимает вид

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma(\omega) &= \frac{e^2 \omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon (f(\epsilon_-) - f(\epsilon_+)) \times \\ &\times \text{Re} \left[\frac{2\pi N(\epsilon) D(\omega)}{\omega^2} - \phi_{\epsilon}^{\text{ORR}}(\omega) \left(1 - \frac{\Delta\Sigma^{\text{RR}}(\omega)}{\omega} \right)^2 \right], \end{aligned} \quad (31)$$

где вторым членом в квадратных скобках при малых ω фактически можно пренебречь, а при необходимости описания широкого интервала частот рассчитать его из (14), взяв $\Phi_{\epsilon}^{\text{ORR}}(\omega, \mathbf{q})$ в обычном лестничном приближении.

Далее, следуя стандартной схеме самосогласованной теории локализации [40–42, 56, 85–87], получаем замкнутое самосогласованное уравнение для обобщённого коэффициента диффузии:

$$\begin{aligned} D(\omega) &= i \frac{\langle v \rangle^2}{d} \left(\tilde{\omega} - \Delta\Sigma_{\text{imp}}^{\text{RA}}(\omega) + \right. \\ &\left. + \Delta^4 \sum_{\mathbf{p}} (\Delta G_{\mathbf{p}})^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\tilde{\omega} + iD(\omega)q^2} \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (32)$$

где d — размерность пространства, $\Delta G_{\mathbf{p}} = G^{\text{R}}(\epsilon_+, \mathbf{p}) - G^{\text{A}}(\epsilon_-, \mathbf{p})$, $\Delta\Sigma_{\text{imp}}^{\text{RA}}(\omega) = \Sigma_{\text{imp}}^{\text{R}}(\epsilon_+) - \Sigma_{\text{imp}}^{\text{A}}(\epsilon_-)$, а средняя скорость $\langle v \rangle$, хорошим приближением для которой является просто скорость Ферми, определяется выражением

$$\langle v \rangle = \frac{\sum_{\mathbf{p}} |\mathbf{v}_{\mathbf{p}}| \Delta G_{\mathbf{p}}}{\sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}}}, \quad (33)$$

где $\mathbf{v}_{\mathbf{p}} = \partial \epsilon(\mathbf{p}) / \partial \mathbf{p}$. Уравнение (32), которое необходимо решать совместно с самосогласованной DMFT + Σ -процедурой (5)–(10), (28), фактически является трансцендентным, и его решение можно легко найти итерациями для каждого значения $\tilde{\omega}$.

В соответствии с обычным пределом применимости диффузионного приближения суммирование по q в (32) должно быть ограничено [42, 86]:

$$q < k_0 = \min \{l^{-1}, p_F\}, \quad (34)$$

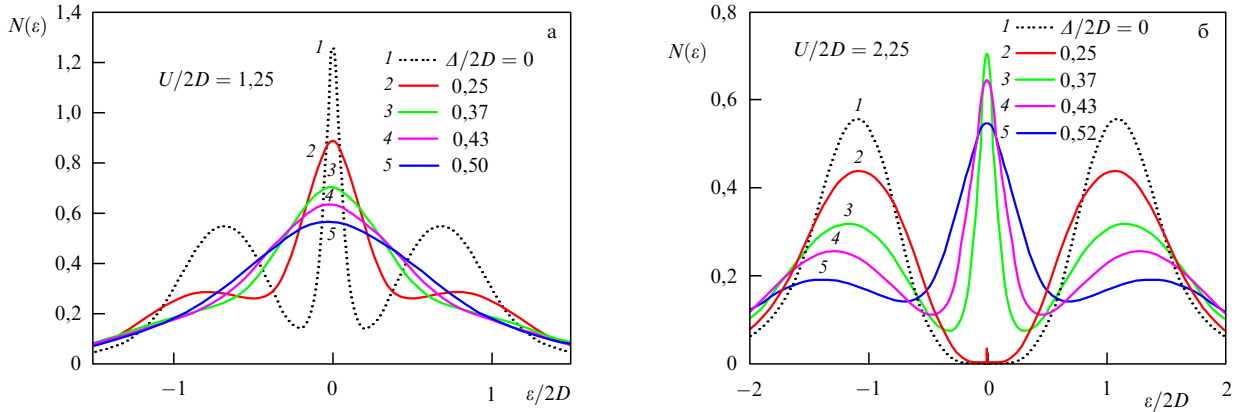


Рис. 10. Плотность состояний в модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ [39] при (а) $U = 2,5D$, типичном для коррелированного металла, (б) $U = 4,5D$, типичном для моттовского диэлектрика.

где $l = \langle v \rangle / 2\gamma$ — упругая длина свободного пробега, γ — борновская частота рассеяния на примесях, p_F — импульс Ферми. Как известно, в двумерном случае андерсоновская локализация происходит при сколь угодно малом беспорядке. Однако радиус локализации при этом экспоненциально велик, вследствие чего существенную роль начинают играть размеры образца. Размер образца L может быть введён в самосогласованную теорию локализации обрезанием интегрирования диффузионного полюса при малых q [40, 41, 85], т.е. при

$$q \sim k_L = \frac{1}{L}. \quad (35)$$

При $\omega \rightarrow 0$ (очевидно, что тогда на поверхности Ферми ($\varepsilon = 0$) и $\tilde{\omega} \rightarrow 0$) в фазе андерсоновского диэлектрика имеем локализационное поведение обобщённого коэффициента диффузии [40–42, 85]:

$$D(\omega) = -i\tilde{\omega}R_{\text{loc}}^2. \quad (36)$$

При подстановке (36) в (32) получаем уравнение, определяющее радиус локализации R_{loc} :

$$R_{\text{loc}}^2 = -\frac{\langle v \rangle^2}{d\Delta^4} \left\{ \sum_{\mathbf{p}} (\Delta G_{\mathbf{p}})^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{1 + R_{\text{loc}}^2 q^2} \right\}^{-1}. \quad (37)$$

3.2.1. Трёхмерные системы. Ниже представлены наиболее интересные результаты для трёхмерной модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением на квадратной решётке с модельной полуэллиптической плотностью состояний в "затравочной" зоне шириной $W = 2D$:

$$N_0(\varepsilon) = \frac{2}{\pi D^2} \sqrt{D^2 - \varepsilon^2}. \quad (38)$$

Плотность состояний всегда приводится в единицах числа состояний на энергетический интервал для элементарной ячейки объёмом a^3 и для одной проекции спина. Величины проводимости даются в естественных единицах $e^2/\hbar a$. Для более подробного ознакомления с численными результатами (в том числе при отклонении от половинного заполнения) отсылаем читателя к работе [39].

Эволюция плотности состояний. В рамках стандартного DMFT-подхода плотность состояний в модели Хаббарда с половинным заполнением имеет типичную трёхпиковую структуру [5, 4, 91, 92]: узкая квазичастич-

ная зона (центральный пик), располагающаяся на уровне Ферми, и широкие верхняя и нижняя хаббардовские зоны, формирующиеся при $\varepsilon \sim \pm U/2$. Квазичастичная зона сужается с возрастанием U в металлической фазе, исчезая в точке мотт-хаббардовского перехода металл–диэлектрик при критическом $U_{c2} \approx 1,5W$. При дальнейшем увеличении U на уровне Ферми открывается диэлектрическая щель.

На рисунке 10 представлены DMFT + Σ -результаты для плотности состояний, полученные при $U = 2,5D = 1,25W$, типичном для коррелированного металла в отсутствие беспорядка, и различных значениях беспорядка Δ , включая достаточно сильный, переводящий коррелированный металл в коррелированный андерсоновский диэлектрик (см. также ниже относительно проводимости). Как и ожидалось, наблюдается типичное уширение и подавление плотности состояний беспорядком.

Неожиданным оказался результат, полученный для величины $U = 4,5D = 2,25W$, типичной для моттовского диэлектрика в отсутствие беспорядка (рис. 10б). Мы видим восстановление центрального пика (квазичастичной зоны) в DOS при возрастании беспорядка, что переводит моттовский диэлектрик в коррелированный металл или коррелированный андерсоновский диэлектрик. Подобное поведение DOS обнаружено также в работе [79].

Физическая причина такого, достаточно неожиданного, восстановления квазичастичного пика вполне ясна. Контролирующим параметром перехода металл–диэлектрик в DMFT является отношение хаббардовского взаимодействия U и ширины затравочной зоны $W = 2D$. При разупорядочении возникает новая эффективная ширина зоны W_{eff} (в отсутствие хаббардовского взаимодействия), которая возрастает при увеличении беспорядка. Причём полуэллиптическая форма DOS с хорошо определёнными границами зоны в самосогласованном борновском приближении сохраняется (см. (28)). Всё это приводит к уменьшению отношения U/W_{eff} , что и вызывает восстановление квазичастичной зоны. Более детально данный вопрос обсуждается ниже при описании фазовой диаграммы модели Андерсона–Хаббарда.

В отсутствие беспорядка характерной особенностью перехода Мотта–Хаббарда является гистерезисное поведение DOS, возникающее при уменьшении U от значений, соответствующих диэлектрической фазе [5, 91,

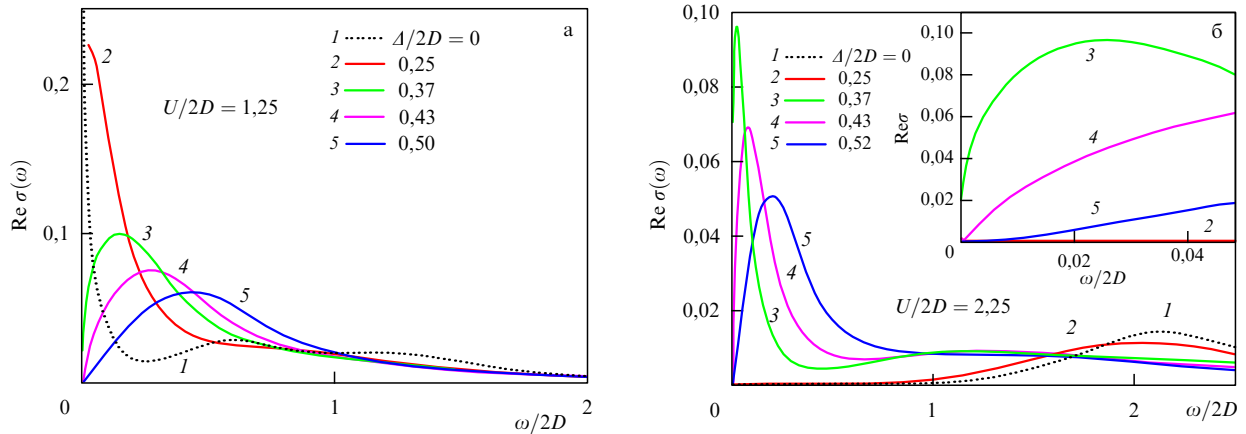


Рис. 11. Действительная часть оптической проводимости в модели Андерсона – Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ [39]. (а) При $U = 2,5D$, типичном для коррелированного металла, кривые 1, 2 отвечают металлической фазе, кривая 3 соответствует порогу подвижности (переход Андерсона), кривые 4, 5 соответствуют коррелированному андерсоновскому диэлектрику. (б) При $U = 4,5D$, типичном для моттовского диэлектрика, кривые 1, 2 соответствуют моттовскому диэлектрику, кривая 3 соответствует порогу подвижности (переход Андерсона), кривые 4, 5 соответствуют коррелированному андерсоновскому диэлектрику; на вставке — увеличенный фрагмент рисунка для области малых частот.

92]. Фаза моттовского диэлектрика сохраняется для величин U , "вклинивающих" достаточно глубоко в диапазон значений, отвечающих фазе коррелированного металла, возникающей с увеличением U . Металлическая фаза восстанавливается только при $U_{c1} \approx 1,0W$. Соответствующий интервал $U_{c1} < U < U_{c2}$ обычно рассматривают как область сосуществования металлической и моттовской диэлектрической фаз, в которой металлическая фаза является термодинамически более стабильной [5, 91–93]. Такое гистерезисное поведение DOS (см. [39]) сохраняется и при наличии беспорядка (см. также описание этого поведения ниже при обсуждении фазовой диаграммы модели Андерсона – Хаббарда).

Оптическая проводимость: переходы Мотта – Хаббарда и Андерсона. В отсутствие беспорядка расчёты воспроизводят результаты стандартной DMFT [4, 5], в которой оптическая проводимость характеризуется обычным друдевским пиком на малых частотах и широким максимумом при $\omega \sim U$, соответствующим переходам в верхнюю хаббардовскую зону. С возрастанием U друдевский пик уменьшается и исчезает при моттовском переходе, когда остаётся только вклад от переходов через мотт-хаббардовскую щель. Введение беспорядка приводит к качественному изменению частотной зависимости проводимости.

На рисунке 11а приведена действительная часть оптической проводимости в модели Андерсона – Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ и значения $U = 2,5D$, типичного для коррелированного металла. При этом переходы в верхнюю хаббардовскую зону при $\omega \sim U$ практически не наблюдаемы. 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 $\Delta_c \approx 0,74D = 0,37W$ (что соответствует кривым 3 не только на рис. 11, но и на рис. 10 для DOS). Отметим, что величина Δ_c зависит от величины обрезания (34), которая определена с точностью до коэффициента порядка единицы [42, 86]. На

первый взгляд может показаться, 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 такое заключение ошибочно и эта зона локализуется только при достаточно сильном беспорядке, $\Delta_c \sim D$, таком же, как для всей зоны проводимости с шириной $\sim W$. Последнее согласуется с результатами известного анализа локализации в двухзонной модели [94].

В DMFT + Σ -приближении величина критического беспорядка Δ_c не зависит от U , поскольку все эффекты взаимодействия входят в уравнение (32) только через $\Delta\Sigma^{\text{RA}}(\omega) \rightarrow 0$ при $\omega \rightarrow 0$ (для $T=0$, $\varepsilon=0$), поэтому влияние взаимодействия при $\omega=0$ исчезает, что фактически представляет собой основной недостаток DMFT + Σ -приближения, являющийся следствием пренебрежения эффектами интерференции между взаимодействием и примесным рассеянием. То, что такие интерференционные эффекты играют существенную роль, известно достаточно давно [71, 72, 75, 76]. Однако пренебрежение этими эффектами позволяет провести физически разумную интерполяцию между двумя основными пределами — переходом Андерсона, обусловленным беспорядком, и переходом Мотта – Хаббарда вследствие сильных корреляций. Таким образом, это приближение можно рассматривать как разумный первый шаг к будущей полной теории перехода металл – диэлектрик в сильнокоррелированных неупорядоченных системах.

На рисунке 11б приведена действительная часть оптической проводимости при различных степенях беспорядка Δ и значении $U = 4,5D$, типичном для мотт-хаббардовского диэлектрика. На вставке показаны данные для малых частот, которые позволяют чётко различать разные типы поведения проводимости, особенно вблизи перехода Андерсона или в фазе моттовского диэлектрика. На рисунке 11б ясно виден вклад в проводимость от переходов в верхнюю хаббардовскую зону при $\omega \sim U$. Возрастание беспорядка приводит к возникновению конечной проводимости в области частот внутри мотт-хаббардовской щели, что коррелирует с

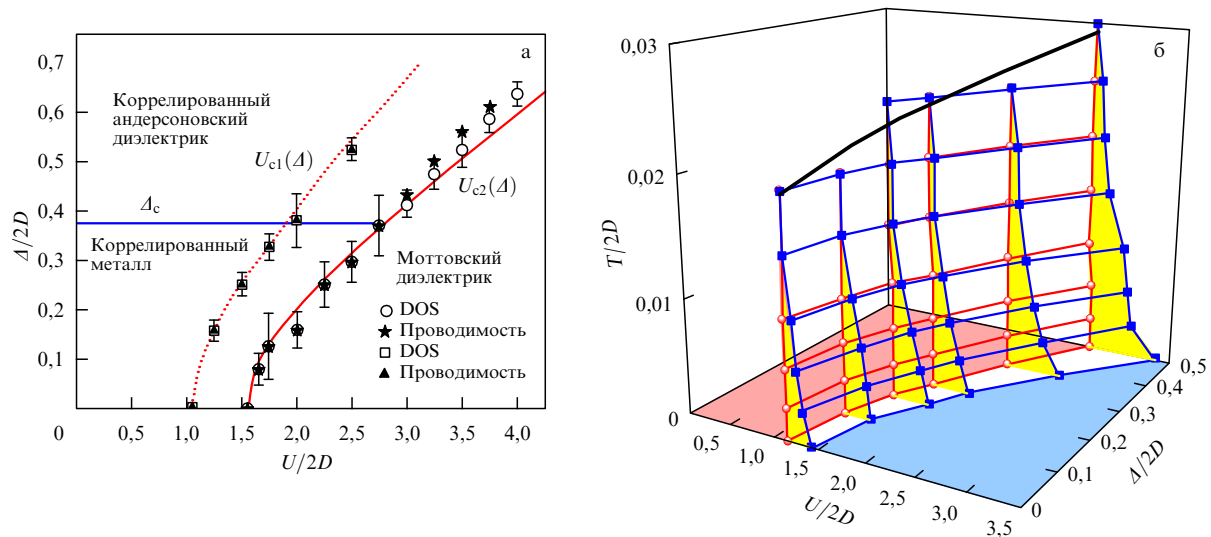


Рис. 12. Фазовая диаграмма парамагнитной модели Андерсона–Хаббарда. (а) Случай нулевой температуры [39]. Кривая для границы фазы моттовского диэлектрика $U_{c1,c2}(\Delta)$ получена из аналитической оценки (41), различными символами показаны значения этой границы, полученные из расчётов DOS и проводимости. Линия перехода Андерсона $\Delta_c = 0,37$. (б) Границы фаз моттовского диэлектрика и области сосуществования фаз при различных температурах. Точки получены из расчётов DOS. Жирная кривая — линейная подгонка ($T_c/2D = 0,02(1 + \Delta/2D)$) к точкам критической температуры T_c исчезновения области сосуществования.

появлением квазичастичной зоны в DOS внутри этой щели, как показано на рис. 10б. Эта проводимость является металлической (конечной в статическом пределе $\omega = 0$) при $\Delta < \Delta_c$, а при $\Delta > \Delta_c$ и малых частотах мы получаем $\text{Re } \sigma(\omega) \sim \omega^2$, что является типичным для андерсоновского диэлектрика [40–42, 56, 85–87].

Несколько необычным является возникновение в $\text{Re } \sigma(\omega)$ пика на малой, но конечной частоте даже в металлической фазе. Это происходит вследствие важности локализационных эффектов. В лестничном приближении для $\Phi_e^{\text{ORA}}(\omega, \mathbf{q})$, в котором пренебрегается всеми локализационными поправками, мы получаем обычный друдевский пик при $\omega = 0$ [39], а учёт эффектов локализации смещает пик в $\text{Re } \sigma(\omega)$ в область малых (но конечных) частот. Металлическое состояние определяется, как известно [1], отличием от нуля статической ($\omega = 0$) проводимости при нулевой температуре.

Выше были представлены только данные по проводимости, полученные при увеличении U от значений, свойственных металлической фазе, до значений, характерных для моттовской диэлектрической фазы. При уменьшении U от значений, характерных для фазы моттовского диэлектрика, наблюдается гистерезис проводимости в области сосуществования фаз, определяемой (в отсутствие беспорядка) условием $U_{c1} < U < U_{c2}$. Гистерезис проводимости в области сосуществования фаз наблюдается и при наличии беспорядка (подробности соответствующего поведения оптической проводимости можно найти в [39]).

Фазовая диаграмма модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением изучалась в работе [79] с применением подхода, основанного на прямых DMFT-вычислениях на конечной решётке узлов со случайными реализациями энергий ϵ_i в (26) и последующем усреднении для получения стандартной усреднённой DOS, а также геометрически усреднённой локальной DOS, которая использовалась для определения точки перехода в фазу андерсоновского диэлектрика. Ниже представлены результаты для фазовой диаграммы парамагнитной

модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением, полученные посредством расчётов плотности состояний и оптической проводимости в DMFT+ Σ -приближении. Необходимо подчеркнуть, что анализ проводимости — это наиболее прямой способ провести различие между металлической и диэлектрической фазами [1].

Расчитанная фазовая диаграмма в плоскости беспорядок–корреляции (Δ, U) при нулевой температуре приведена на рис. 12а. Линия перехода Андерсона $\Delta_c \approx 0,37W = 0,74D$ определялась как величина беспорядка, при которой статическая проводимость обращается в нуль при $T = 0$. Переход Мотта–Хаббарда может быть определён по исчезновению центрального пика (квазичастичной зоны) в DOS или из анализа поведения проводимости, например по данным наблюдения закрытия щели в оптической проводимости в диэлектрической фазе или исчезновения статической проводимости в металлической фазе.

Как мы отмечали, DMFT+ Σ -приближение даёт универсальную (U -независимую) величину критического беспорядка Δ_c вследствие пренебрежения интерференцией между рассеянием на беспорядке и хаббардовским взаимодействием, что приводит к соответствующему отличию фазовой диаграммы, приведённой на рис. 12, от полученной в работе [79]. В то же время влияние рассеяния на беспорядке на переход Мотта–Хаббарда оказывается весьма нетривиальным и в целом качественно согласуется с результатами [79]. Основное отличие состоит в сохранении хаббардовских зон в DOS даже в пределе достаточно сильного беспорядка, в то время как в работе [79] хаббардовские зоны исчезают. Кроме того, область сосуществования на рис. 12 плавно расширяется с возрастанием беспорядка и не исчезает в некоторой критической точке, как на фазовой диаграмме, приведённой в работе [79]. Границами области сосуществования, которые определяются границами фазы моттовского диэлектрика, получаемыми при увеличении или уменьшении U , являются показанные на

рис. 12 кривые $U_{c1}(A)$ и $U_{c2}(A)$, которые находятся из простого уравнения:

$$\frac{U_{c1,c2}(A)}{W_{\text{eff}}} = \frac{U_{c1,c2}}{W}, \quad (39)$$

где эффективная ширина зоны при наличии беспорядка вычислялась при $U = 0$ в самосогласованном борновском приближении (28):

$$W_{\text{eff}} = W \sqrt{1 + 16 \frac{A^2}{W^2}}. \quad (40)$$

Таким образом, границы области сосуществования, определяющие и границы фазы моттовского диэлектрика, имеют вид

$$U_{c1,c2}(A) = U_{c1,c2} \sqrt{1 + 16 \frac{A^2}{W^2}}. \quad (41)$$

Кривые $U_{c1}(A)$ и $U_{c2}(A)$ показаны на рис. 12а соответственно пунктирной и сплошной кривыми. Точки, определяемые из условия исчезновения квазичастичного пика, а также точки, следующие из качественных изменений в поведении проводимости (показаны на рис. 12а различными символами), демонстрируют очень хорошее согласие с аналитическими результатами, подтверждая правильность выбора отношения (39) как параметра, контролирующего переход Мотта при наличии беспорядка.

На рисунке 12б приведена температурная зависимость границ фаз моттовского диэлектрика $U_{c2}(A)$ (квадраты) и области сосуществования $U_{c1}(A)$ (кружки)⁵. Хорошо известно, что в "чистой" DMFT (в отсутствие беспорядка) ширина области сосуществования уменьшается с возрастанием температуры T , исчезая при некоторой критической температуре T_c . В DMFT + Σ -приближении возрастание беспорядка при $T = 0$ приводит к уширению области сосуществования; такое поведение сохраняется и при конечных температурах. Видно также, что возрастание беспорядка приводит к увеличению, практически линейному (сплошная жирная кривая), критической температуры T_c . Следует отметить также очень слабую зависимость от температуры границы области сосуществования $U_{c1}(A)$.

3.2.2. Двумерные системы. Согласно скейлинговой теории локализации [95], металлического состояния в двумерных (2D) системах не существует — электроны в них локализованы при сколь угодно слабом беспорядке. Несмотря на то что данное предсказание сделано для 2D-систем невзаимодействующих частиц, оказалось, что и слабое взаимодействие между электронами при простейшем рассмотрении лишь способствует локализации [96]. Эксперименты, проведённые в начале 1980-х годов на различных 2D-системах [97–99], в целом подтверждали это предсказание. Однако появлялись теоретические работы [75, 76], указывающие на то, что такая точка зрения в общем случае неверна, так что в пределе слабого беспорядка и достаточно сильного взаимодействия 2D-системы могут иметь конечную проводимость при нулевой температуре. Экспериментальное открытие в двумерных слабонеупорядоченных системах с низкой

концентрацией носителей тока перехода металл–диэлектрик, отсутствующего в одночастичной теории, породило целое направление теоретических исследований (см. введение в эту проблематику в обзорах [100, 101]).

В DMFT + Σ -приближении для бесконечной двумерной системы ($L \rightarrow \infty$) радиус локализации, определяемый (37), остаётся конечным (хотя и экспоненциально большим) для сколь угодно малого беспорядка, что говорит об отсутствии перехода Андерсона в такой системе, как и в обычной одночастичной теории. Однако, как будет показано ниже, в системах с конечным размером радиус локализации расходится при некотором критическом беспорядке, определяемом характерным размером системы L . Качественно критический беспорядок определяется условием, что радиус локализации бесконечной системы становится сравнимым с характерным размером образца $R_{\text{loc}}^{L \rightarrow \infty} \sim L$. Таким образом, в конечных двумерных системах переход Андерсона фактически существует, как и металлическая фаза, при беспорядке, меньшем некоторого критического значения. В дальнейшем под фазой "коррелированного металла" будет подразумеваться именно такая фаза для конечных двумерных систем.

Ниже рассматриваются наиболее существенные результаты DMFT + Σ -расчётов для двумерной модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением на квадратной решётке с модельной прямоугольной плотностью состояний "затравочной" зоны шириной $W = 2D$:

$$N_0(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2D}, & |\varepsilon| \leq D, \\ 0, & |\varepsilon| > D, \end{cases} \quad (42)$$

что качественно соответствует именно двумерному случаю.

Плотность состояний и оптическая проводимость. Результаты расчётов показали, что поведение плотности состояний качественно полностью аналогично таковому в рассмотренном в разделе 3.2.1 трёхмерном случае. Некоторые количественные отличия связаны с другой моделью "затравочной" плотности состояний (42), что, в частности, приводит к большему, чем в трёхмерной модели, критическому хаббардовскому взаимодействию $U_{c2} \approx 1,83W$, отвечающему моттовскому переходу металл–диэлектрик в отсутствие беспорядка, и $U_{c1} \approx 1,42W$, ограничивающему снизу область сосуществования металлической и диэлектрической фаз. Так же как и в трёхмерной модели, при $U > U_{c2}$ (т.е. для моттовского диэлектрика в отсутствие беспорядка) увеличение беспорядка приводит к "восстановлению" квазичастичного пика в плотности состояний. Однако в данном случае такое поведение в общем не означает перехода в состояние коррелированного металла — по крайней мере для бесконечных систем мы имеем дело с коррелированным диэлектриком Андерсона.

Поведение оптической проводимости в широком интервале частот также качественно вполне аналогично её поведению в трёхмерной модели. Однако в бесконечной двумерной модели проводимость на нулевой частоте всегда исчезает (в пределе нулевой температуры) и даже при очень слабом беспорядке пик оптической проводимости, в отличие от такового в случае $d = 3$ [39], лежит на конечной частоте. В лестничном приближении, которое не содержит локализационных поправок, наблюдается

⁵ Приводятся данные расчётов, выполненных Н.А. Кулеевой для различных температур.

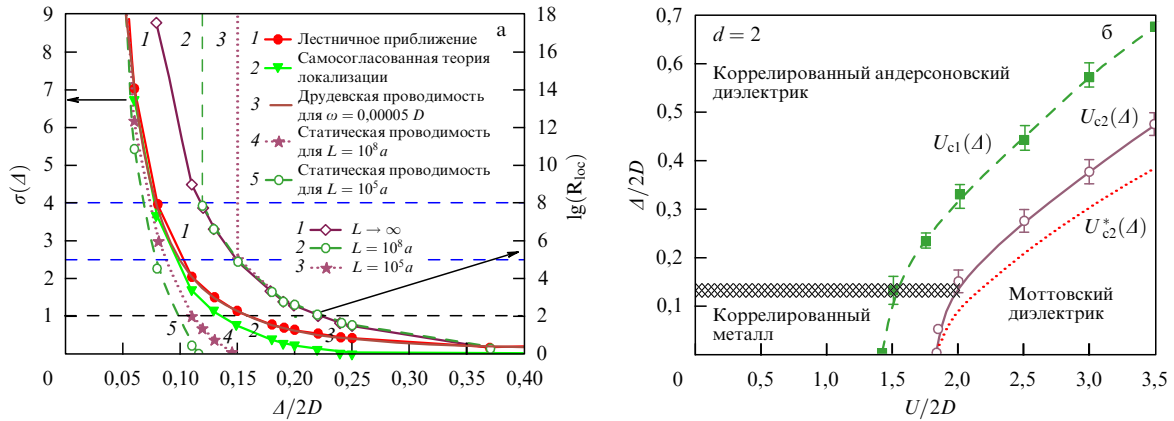


Рис. 13. (а) Зависимость проводимости от степени беспорядка Δ при малой частоте $\omega = 0,00005D$ и $U/2D = 1$. Кружками (кривая 1) показан результат лестничного приближения, треугольниками (кривая 2) — результат самосогласованной теории локализации. Кривая 3, практически совпадающая с кривой 1, получена из формулы Друде (43). Кривые 4 и 5 — статические проводимости в конечных образцах с размерами $L = 10^8a$ и $L = 10^5a$ соответственно. Зависимость логарифма радиуса локализации (правая шкала) от степени беспорядка Δ для бесконечного образца — кривая 1, для образцов с $L = 10^8a$ и $L = 10^5a$ — кривые 2 и 3 соответственно. (б) Фазовая диаграмма двумерной парамагнитной модели Андерсона–Хаббарда при нулевой температуре. Граница области моттовского диэлектрика $U_{c2}(\Delta)$ и граница области сосуществования $U_{c1}(\Delta)$ получены исходя из поведения плотности состояний. Область эффективного андерсоновского перехода металл–диэлектрик в конечных системах показана штриховкой. (Из работы [90]).

обычный друдевский пик на нулевой частоте и проводимость при $\omega = 0$ является конечной.

Подробно с результатами для DOS и оптической проводимости двумерной модели можно ознакомиться в работе [90].

Радиус локализации и фазовая диаграмма двумерной модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением. На рисунке 13а приведена зависимость проводимости от степени беспорядка Δ при конечной, но достаточно малой частоте $\omega = 0,00005D$. Кружками показан результат лестничного приближения, треугольниками — результат самосогласованной теории локализации. Кривая 3, практически совпадающая с результатами для лестничного приближения, получена из формулы Друде, часто используемой для качественного описания проводимости:

$$\sigma(\omega) = \sigma(0) \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + \omega^2}, \quad (43)$$

где статическая проводимость $\sigma(0) = e^2 N(0) D_0 \approx (e^2/\hbar) \varepsilon_F / (2\pi\gamma)$, $N(0)$ — плотность состояний на уровне Ферми, D_0 — друдевский коэффициент диффузии. Для частоты рассеяния на примесях принималось $\gamma = \pi N(0) \Delta^2 \approx (\pi/2D) \Delta^2$. Заметный вклад локализационных поправок в проводимость на конечной частоте (значительное отличие кривой 2 от кривых 1 и 3) возникает лишь при достижении проводимостью величины порядка минимальной металлической проводимости $\sigma_0 = e^2/\hbar$ (на которую и нормирована проводимость на рис. 13). Следует заметить, что именно в этой области беспорядка, как мы увидим ниже, и происходит андерсоновский переход металл–диэлектрик (расходится радиус локализации) в двумерных системах с разумными конечными размерами.

На рисунке 13а показаны также кривые зависимости логарифма радиуса локализации (правая шкала), полученного из уравнения (37), от степени беспорядка для бесконечного образца (кривая 1) и для образцов с размерами $L = 10^8a$ и $L = 10^5a$ (кривые 2 и 3 соответственно). Видно, что радиус локализации экспоненциально

возрастает с уменьшением беспорядка, оставаясь конечным в бесконечной двумерной системе, где андерсоновский переход отсутствует. Напротив, в конечных системах радиус локализации *расходится* при критическом беспорядке, определяемом размером системы, демонстрируя существование эффективного перехода Андерсона. Как видно из рис. 13, качественно критический беспорядок определяется условием, что радиус локализации бесконечной системы становится сравнимым с характерным размером образца, $R_{loc}^{L \rightarrow \infty} \sim L$. Отметим, что в данном подходе радиус локализации, в отличие, например, от такового в [81], практически не зависит от U , что приводит к независимости от силы корреляций U и критического беспорядка в двумерных системах с конечным размером. Аналогичная ситуация имеет место и для трёхмерных систем [39]. В целом, это, конечно, является недостатком используемых приближений.

На рисунке 13а приведена, кроме того, зависимость от степени беспорядка статической проводимости в конечных образцах с размерами $L = 10^8a$ и $L = 10^5a$ (кривые 4 и 5 соответственно). В конечных системах при малом беспорядке статическая проводимость является отличной от нуля (металл) и непрерывно уменьшается с возрастанием беспорядка, обращаясь в нуль при критическом беспорядке, при котором расходится и радиус локализации в образце с соответствующим размером. Статическая проводимость конечных образцов в нашем приближении также практически не зависит от силы корреляций U . Существенное отличие статической проводимости от проводимости при малой конечной частоте, наблюдаемое на рис. 13, связано с отмечавшейся выше экспоненциальной малостью области частот, в которой реализуется локализационное поведение проводимости.

Рассмотрим теперь результаты для фазовой диаграммы двумерной парамагнитной модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением, найденные из расчётов плотности состояний в DMFT + Σ -приближении и анализа поведения радиуса локализации конечных двумерных систем. Полученная таким образом фазовая

диаграмма в плоскости беспорядок–корреляции (Δ , U) приведена на рис. 136.

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) (рис. 13а). Следует подчеркнуть, что дальнейшее увеличение размеров системы, например в 10 раз, до $L = 10^9 a$, лишь незначительно сдвигает вниз (уменьшает критический беспорядок) нижнюю границу заштрихованной полосы на рис. 13б — характерной области эффективного перехода Андерсона в конечных системах.

Кривая $U_{c2}(\Delta)$, полученная из расчётов плотности состояний, определяет границу моттовского перехода. Критерием перехода является исчезновение центрального квазичастичного пика в плотности состояний $N(\epsilon)$ с открытием щели на уровне Ферми. Как и в трёхмерной модели, при уменьшении U от значений, характерных для 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. 13б. Считая, как и в трёхмерном случае, что отношение величины хаббардовского взаимодействия к эффективной ширине зоны $U_{c1,c2}(\Delta)/W_{\text{eff}}(\Delta)$, контролирующее моттовский переход металл–диэлектрик, является универсальной константой, независимой от беспорядка, можно получить соответствующие качественные зависимости и для двумерной модели — рассчитанная таким образом величина $U_{c2}^*(\Delta)$ показана пунктирной кривой на рис. 13б. Видно, что зависимость $U_{c2}(\Delta)$, полученная из прямых расчётов плотностей состояний, в отличие от таковой в случае $d = 3$ [39] существенно отклоняется от качественной кривой $U_{c2}^*(\Delta)$. Это, по-видимому, связано с заметным изменением при возрастании степени беспорядка Δ формы плотности состояний (при $U = 0$), которое отсутствует для полуэллиптической зоны в случае $d = 3$.

3.3. Особенности электронной дисперсии сильнокоррелированных систем в DMFT- и DMFT + Σ -подходах

3.3.1. Изломы (кинки) в электронном спектре. Электронные свойства кристаллических твёрдых тел определяются одночастичными и коллективными возбуждениями электронной подсистемы и взаимодействиями между ними. Эти возбуждения характеризуются энергией E и квазиимпульсом \mathbf{k} , которые связаны между собой через дисперсию (спектр) $E_{\mathbf{k}}$. Взаимодействие одночастичных и коллективных возбуждений может привести к достаточно резким изменениям (изломам) дисперсии $E_{\mathbf{k}}$ — так называемым кинкам. Форма и величина кинков характеризуют взаимодействия в многочастичной системе. Например, обнаруженные в экспериментах с использованием ARPES кинки в оксидах меди с энергиями на 40–70 мэВ ниже уровня Ферми в электронных дисперсиях являются свидетельством электрон-фононного [102–108] или электрон-магнонного (спин-флуктуационного) [109, 110] взаимодействия.

В то же время, согласно результатам ARPES-экспериментов, в ряде систем наблюдаются кинки в электронной дисперсии при существенно больших энергиях (до

800 мэВ) [111–113]. Физическая природа этих кинков остаётся неясной. В попытках найти объяснение таких аномалий электронного спектра был предложен существенно новый, чисто электронный, механизм их возникновения [114], применимый к сильнокоррелированным металлам, в которых спектральная функция содержит хорошо выделенные хаббардовские подзоны, а также центральный пик, как, например, в оксидах переходных металлов. При этом энергетическое положение кинков определяет, по-видимому, границы применимости обычной теории ферми-жидкости Ландау.

В общем случае, как известно [115], взаимодействие приводит к тому, что возбуждения в системе имеют конечное время жизни, так что $E_{\mathbf{k}}$ становится комплексной функцией. Для электронных систем с кулоновским взаимодействием теория ферми-жидкости Ландау обосновывает существование слабозатухающих фермионных квазичастиц при достаточно низкой температуре в малой окрестности поверхности Ферми [115]. Вне ферми-жидкостного режима понятие квазичастиц с хорошо определённой дисперсией, строго говоря, неприменимо, поскольку время жизни квазичастиц слишком мало. Однако ARPES-эксперименты последних лет убедительно показывают наличие в различных системах одночастичной спектральной функции, существенно зависящей от \mathbf{k} (с достаточно размытыми максимумами) вдали от уровня Ферми, несмотря на то что ни о каких хорошо определённых квазичастицах в соответствующей области энергий говорить уже нельзя. В этом случае под дисперсией мы понимаем именно такую \mathbf{k} -зависимость (максимумов) спектральной плотности, которая приходит на смену обычным представлениям о спектре квазичастиц.

3.3.2. Кинки чисто электронной природы. Рассмотрим более подробно новый механизм формирования кинков в электронной дисперсии СКС, который не предполагает наличия взаимодействия электронов с фононами или другими возбуждениями [114]. Для того чтобы понять природу данного механизма, рассмотрим сначала слабобкоррелированную систему, описываемую стандартной теорией ферми-жидкости. Вследствие достаточно большого времени жизни квазичастиц вблизи уровня Ферми и слабости корреляций, в первом приближении взаимодействие приводит к простой перенормировке исходной дисперсии квазичастиц (невзаимодействующих) $\epsilon_{\mathbf{k}}$, которая заменяется величиной $E_{\mathbf{k}} = Z_{\text{FL}} \epsilon_{\mathbf{k}}$, где Z_{FL} — ферми-жидкостной коэффициент перенормировки массы электрона, что меняет наклон дисперсии в окрестности уровня Ферми по сравнению с таковым в "свободном" случае. Если рассмотреть электрон с энергией, далеко отстоящей от уровня Ферми, то при слабом взаимодействии можно ожидать, что его дисперсия практически не изменится, так что $E_{\mathbf{k}} \approx \epsilon_{\mathbf{k}}$, хотя затухание может быть уже достаточно большим. В этом смысле можно говорить о том, что межэлектронное взаимодействие само по себе может приводить к образованию кинков в обобщённой дисперсии (спектральной плотности), а положение такого кинка на шкале энергий как раз и определяется значением энергии, при котором простая ферми-жидкостная картина становится неприменимой. Однако в слабобкоррелированных металлах $Z_{\text{FL}} \lesssim 1$, соответственно угол наклона $E_{\mathbf{k}}$ будет изменяться незначительно, что делает такие кинки малозаметными.

Данная картина может сильно отличаться от таковой для сильнокоррелированных систем, в которых Z_{FL} может быть много меньше единицы и, следовательно, кинки будут более явными. Сильные корреляционные взаимодействия приводят к существенному перераспределению спектрального веса в одночастичной спектральной функции — происходит формирование хаббардовских подзон. Кроме того, как мы знаем, в сильнокоррелированных металлах также имеется квазичастичный пик, который возникает вблизи уровня Ферми, между хаббардовскими подзонами. Ниже будет показано, что "обычные" ферми-жидкостные квазичастицы существуют в таких системах только в очень малой окрестности уровня Ферми, тогда как за пределами ферми-жидкостного режима, но всё ещё "внутри" квазичастичного пика, реализуется некий промежуточный режим с дисперсией $E_k \approx Z_{CP}\epsilon_k$, где перенормировочный множитель Z_{CP} определяется спектральным весом центрального пика и по величине существенно отличается от Z_{FL} . При таких промежуточных энергиях, много меньших энергии взаимодействия, электроны или дырки сильно взаимодействуют, а их дисперсия отличается как от ферми-жидкостной дисперсии, так и от дисперсии невзаимодействующих квазичастиц. В этой области энергий можно говорить о "промежуточно-коррелированной" ситуации, когда $Z_{FL} < Z_{CP} < 1$. Соответственно, при некоторых энергиях $\pm\omega_*$ внутри квазичастичного пика происходит переход от перенормировки Z_{FL} к перенормировке Z_{CP} , что и приводит к появлению кинков в дисперсии электронов, причём энергетическое положение этих кинков непосредственно связано с энергетической границей применимости обычной теории ферми-жидкости. Подчёркнём, что данный механизм приводит к образованию кинков в отсутствие дополнительного взаимодействия с фононами или другими коллективными модами, а единственным необходимым условием формирования кинков является наличие в системе сильных межэлектронных корреляций.

Для микроскопического описания электронных кинков воспользуемся моделью Хаббарда, которая будет анализироваться в рамках стандартной DMFT, причём для решения эффективной однопримесной задачи Андерсона опять будем использовать метод численной ренормгруппы. Для простоты рассмотрим однозонную модель Хаббарда в случае половинного заполнения. Сильнокоррелированный режим для модели Хаббарда возникает, когда величина взаимодействия становится порядка ширины исходной зоны, $U \approx W$. В качестве примера рассмотрим результаты расчётов, представленные на рис. 14. Ясно видно, как дисперсия переходит из ферми-жидкостного режима (кривая 1) в описанный выше "промежуточный" режим (кривая 2), а при энергиях $\pm\omega_* = \pm 0,03$ эВ образуются хорошо заметные кинки в дисперсии. В некоторых направлениях высокой симметрии (например, около точки X (см. рис. 14)) дисперсия имеет достаточно малый угол наклона вблизи уровня Ферми, что делает кинки менее заметными.

Рассмотрим эту ситуацию с точки зрения поведения одночастичной функции Грина. Из общих соображений ясно, что любые изломы дисперсии, вызванные взаимодействием, возникают вследствие соответствующего поведения собственно-энергетической части, точнее $\text{Re } \Sigma_k(\omega)$. В большинстве реальных физических систем

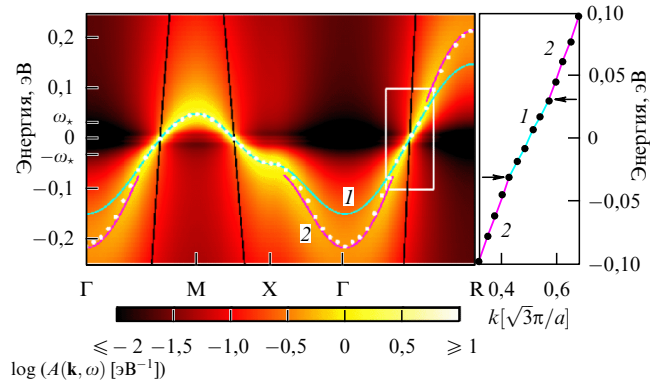


Рис. 14. Изломы (кинки) в электронной дисперсии E_k в СКС. На контурной карте градиацией цвета показана величина логарифма спектральной функции $A(\mathbf{k}, \omega)$, полученная из DMFT-решения модели Хаббарда для кубической решётки. Величина хаббардовского взаимодействия $U = 3,5$ эВ, ширина зоны $W \approx 3,64$ эВ, заполнение зоны $n = 1$, рассчитанная величина ферми-жидкостной перенормировки $Z_{FL} = 0,086$, температура $T = 5$ К. Вблизи уровня Ферми максимумы $A(\mathbf{k}, \omega)$ (светлые точки) соответствуют перенормированной зоне $E_k = Z_{FL}\epsilon_k$ (кривая 1). При энергиях $|\omega| > \omega_*$ дисперсия $A(\mathbf{k}, \omega)$ имеет ту же форму, но соответствует другой перенормировке, $E_k = Z_{CP}\epsilon_k - c \text{sgn}(E_k)$ (кривая 2). Значения $\omega_* = 0,03$ эВ, $Z_{CP} = 0,135$ и $c = 0,018$ эВ вычислены в [114] исходя из величин Z_{FL} и ϵ_k , соответствующих тёмной кривой. Чёрные линии — спектр "затраваженных" (невзаимодействующих) квазичастиц. В правой части рисунка приведён увеличенный фрагмент, выделенный на карте белым прямоугольником в направлении Γ -R, кинки (изломы дисперсии) при энергиях $\pm\omega_*$ показаны стрелками.

\mathbf{k} -зависимость СЭЧ, по-видимому, менее важна по сравнению с ω -зависимостью, поэтому пренебрежение \mathbf{k} -зависимостью в $\Sigma_k(\omega) = \Sigma(\omega)$ является довольно хорошим приближением. В DMFT соотношение $\Sigma_k = \Sigma(\omega)$ является точным. Самосогласованное выражение для СЭЧ в модели Хаббарда в рамках DMFT часто записывают как

$$\Sigma(\omega) = \omega + \mu - \frac{1}{G(\omega)} - \Delta(G(\omega)), \quad (44)$$

где $G(\omega) = (1/N) \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, \omega)$ — локальная (усреднённая по \mathbf{k}) функция Грина, $\Delta(G)$ — частотно-зависящая функция гибридизации⁶, выраженная через $G(\omega)$. Функция гибридизации описывает квантово-механическую связь между электроном на данном выделенном узле и другими узлами системы.

На рисунке 15а показана рассчитанная частотная зависимость спектральной функции (DOS) $A(\omega) = -\text{Im } G(\omega)/\pi$ для тех же параметров модели, что и на рис. 14, демонстрирующая типичную трёхпиковую структуру. Соответствующие вещественные части локальной функции Грина $G(\omega)$ и $\Sigma(\omega)$ приведены на рис. 15б и в.

Кинки в $\text{Re } \Sigma(\omega)$, непосредственно связанные с трёхпиковой структурой спектральной функции (DOS) $A(\omega)$ (её минимумы расположены при энергиях $\pm\Omega$), определяют некоторый новый (достаточно малый) энергетический масштаб. Таким образом, $\text{Re } G(\omega)$ должна иметь максимум и минимум на интервале энергий $\pm\omega_{\text{max}}$, т.е. "внутри" центрального пика (рис. 15б), что в свою

⁶ В DMFT $\Delta(G)$ определяется из условия $G(\omega) = G_0(\omega + \mu - \Sigma(\omega))$, т.е. $G_0(\Delta(G) + 1/G) = G$, где $G_0(\omega)$ — невзаимодействующая локальная функция Грина.

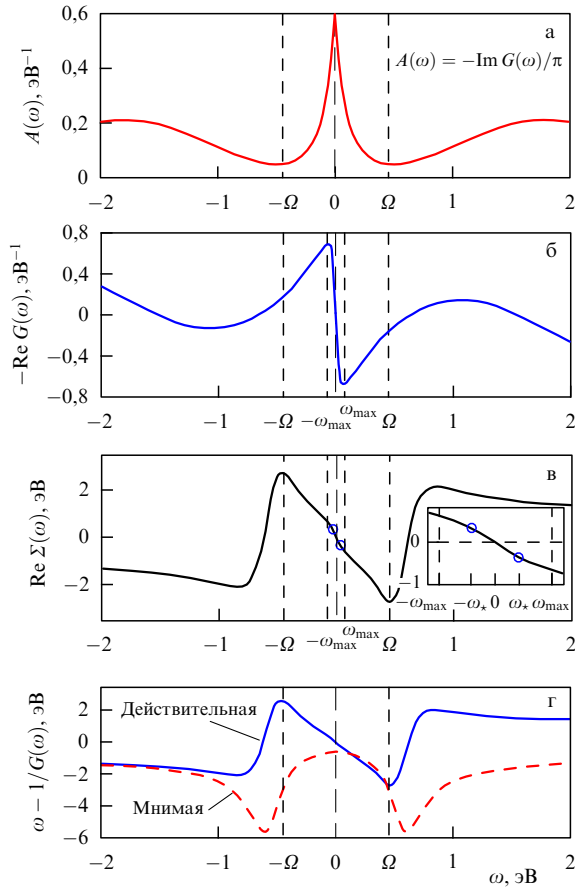


Рис. 15. Характеристики функции Грина для СКС с параметрами, указанными в подписи к рис. 14. (а) Трёхпиковая структура спектральной функции $A(\omega) = -\text{Im } G(\omega)/\pi$ с минимумами при энергиях $\pm\Omega = 0,45$ эВ. (б) Действительная часть функции Грина с локальными минимумами и максимумами при энергиях $\pm\omega_{\text{max}}$, расположенных "внутри" центрального пика. (в) Действительная часть СЭЧ с изломами при энергиях $\pm\omega_*$ (кружки), расположенных в точках, где $\text{Re } G(\omega)$ имеет наибольшую кривизну ($\omega_* = 0,4\omega_{\text{max}} = 0,03$ эВ). (г) Вещественная часть $\omega - 1/G(\omega)$ (сплошная кривая), дающая вклад в СЭЧ, в общем случае линейна в интервале энергий $|\omega| < \Omega$. Изменение энергетической зависимости в $-\text{Re } G(\omega)$ при энергиях $\pm\omega_*$ определяет местоположение кинков электронной дисперсии.

очередь непосредственно ведёт к образованию кинков в $\text{Re } \Sigma(\omega)$. Величина СЭЧ $\Sigma(\omega)$ имеет два вклада: $\omega + \mu - 1/G(\omega)$ и $-\Delta(G(\omega))$. Выражение $\text{Re}[\omega + \mu - 1/G(\omega)]$ линейно в достаточно большой области энергий $|\omega| < \Omega$ (рис. 15г), тогда как величина $-\text{Re}[\Delta(G(\omega))]$ пропорциональна $-\text{Re } G(\omega)$, по крайней мере в первом порядке соответствующего разложения по моментам, только в малом энергетическом интервале $|\omega| < \omega_{\text{max}}$. Сумма этих двух вкладов приводит к изломам в вещественной части СЭЧ при энергиях $\pm\omega_*$, где $\omega_* = (\sqrt{2} - 1)\omega_{\text{max}}$. При энергиях $\pm\omega_*$ зависимость $\text{Re } G(\omega)$ имеет максимальную кривизну (эти точки выделены кружками на рис. 15в). Таким образом, ферми-жидкостный режим, при котором угол наклона вещественной части СЭЧ на уровне Ферми определяется соотношением $\partial \text{Re } \Sigma(\omega)/\partial \omega = 1 - 1/Z_{\text{FL}}$, существует только в небольшой части центрального пика, а именно в энергетическом интервале $|\omega| < \omega_*$. При больших (промежуточных) энергиях угол наклона $\text{Re } \Sigma(\omega)$ будет определяться выражением $\partial \text{Re } \Sigma(\omega)/\partial \omega = 1 - 1/Z_{\text{CP}}$. Вследствие этого эффективная дисперсия E_k будет демонстрировать кинки при энергиях $\pm\omega_*$.

Данный анализ также помогает понять, почему вне ферми-жидкостной области E_k демонстрирует дисперсию с другой величиной перенормировки спектра невзаимодействующих электронов — Z_{CP} , с небольшим сдвигом s . Такое поведение определяется величиной основного вклада в СЭЧ $\omega + \mu - 1/G(\omega)$ при энергиях $\omega_* < |\omega| < \Omega$, т.е. в границах центрального пика DOS. Величины ω_* , Z_{CP} и s могут быть выражены через Z_{FL} и характеристики плотности состояний невзаимодействующих электронов. Можно показать, что $\omega_* = Z_{\text{FL}}(\sqrt{2} - 1)D$, где D — полуширина затравочной зоны (см. детали в работе [114]). При слабых корреляциях, когда $Z_{\text{FL}} \lesssim 1$, положение кинков в E_k практически совпадает с границами зоны невзаимодействующих электронов, что делает их практически ненаблюдаемыми. С другой стороны, в режиме сильных корреляций ($Z_{\text{FL}} \gg 1$) энергия кинков $\omega_*/D \propto Z_{\text{FL}}$ приближается к уровню Ферми внутри центрального пика, ширина которого с возрастанием корреляций уменьшается как $\Omega/D \propto \sqrt{Z_{\text{FL}}}$ [118].

Впервые кинки электронной природы были обнаружены с помощью LDA+DMFT-расчётов для системы SrVO_3 [116]. Определение энергетической шкалы ω_* содержит только параметры затравочной зонной структуры, которая может быть получена (для реальных систем) в зонных расчётах, а также ферми-жидкостную перенормировку массы $Z_{\text{FL}} = 1/(1 - \partial \text{Re } \Sigma(0)/\partial \omega) \equiv m/m^*$, которая может быть экспериментально определена из измерений теплоёмкости или спиновой восприимчивости. В частности, в работе [117] показано, что кинки электронной природы могут приводить к соответствующим изломам в линейном (по температуре) члене электронной теплоёмкости сильнокоррелированных металлов, что, по-видимому, наблюдалось в системе LiV_2O_4 с тяжёлыми фермионами.

3.3.3. Роль электрон-фононного взаимодействия. Материал раздела 3.3.2 с неизбежностью приводит нас к вопросу о соотношении и взаимном влиянии кинков электронной природы и "обычных" кинков в электронной дисперсии, обусловленных электрон-фононным взаимодействием, что связано также с более общей проблемой взаимовлияния сильных электронных корреляций и электрон-фононного взаимодействия. История таких исследований достаточно долгая; например, одной из наиболее популярных моделей для электрон-фононного взаимодействия в СКС является модель Хаббарда – Холстейна. Модель Хаббарда [8–13] описывает локальное кулоновское взаимодействие на решётке. С другой стороны, модель Холстейна содержит линейное взаимодействие электронов проводимости с локальными (эйнштейновскими) фононными модами [119]. Исследования свойств модели Хаббарда – Холстейна проводились в рамках стандартной теории динамического среднего поля [5], в частности с использованием NRG-кода [24]. Сведение модели Хаббарда – Холстейна к задаче об андерсоновско-холстейновской примеси впервые было проведено Хьюсоном и Майером [120], которые показали, что, используя NRG, можно рассчитать полный электрон-фононный вклад в собственно-энергетическую часть задачи, сделав таким образом решение модели Хаббарда – Холстейна непertурбативным в отношении не только хаббардовского, но и электрон-фононного взаимодействия. Отметим, что общая структура само-

согласованных уравнений DMFT в таком подходе сохраняется.

Однако до недавнего времени не было публикаций по исследованиям сильнокоррелированных электронов, взаимодействующих с дебаевскими фононами, что достаточно удивительно ввиду широкого обсуждения физики наблюдаемых в ARPES-экспериментах в ВТСП-оксидах [104] кинков электронной дисперсии, происхождение которых обычно связывается с электрон-фононным взаимодействием [105]. Проблема формирования кинков электронной дисперсии, вызываемых электрон-фононным взаимодействием в СКС, кратко обсуждалась в рамках модели Хаббарда – Холстейна в [121, 122]. В данном разделе мы рассмотрим результаты DMFT + Σ -подхода для модели Хаббарда, дополненной взаимодействием с дебаевскими фононами, в предположении выполнения теоремы Мигдала (адиабатическое приближение). Такое приближение разумно в случае константы электрон-фононного взаимодействия $\lambda < E_F/\omega_D \sim 10$, где E_F — энергия Ферми, ω_D — дебаевская частота.

Для рассмотрения электрон-фононного взаимодействия в СКС введём $\Sigma_k(\varepsilon) = \Sigma_{ph}(\varepsilon, \mathbf{k})$, возникающую в рамках обычной фрёлиховской модели. В соответствии с теоремой Мигдала в адиабатическом приближении мы можем ограничиться простейшим вкладом первого порядка для $\Sigma_{ph}(\varepsilon, \mathbf{k})$. Главное преимущество адиабатического приближения — это возможность пренебречь любыми связанными с электрон-фононным взаимодействием вершинными поправками, которые являются малыми по адиабатическому параметру $\omega_D/E_F \ll 1$ [123].

Фактически $\Sigma_{ph}(\varepsilon, \mathbf{k})$ в таком приближении имеет слабую импульсную зависимость, которой можно пренебречь, учитывая только существенную частотную зависимость. Прямые вычисления (см., например, [42]) в случае дебаевского фононного спектра $\omega_0(\mathbf{k}) = u|\mathbf{k}|$ при $|\mathbf{k}| < \omega_D/u$, где u — скорость звука, дают

$$\Sigma_{ph}(\varepsilon) = \frac{-ig^2}{4\omega_c^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \times \left\{ \omega_D^2 + \omega^2 \ln \left| \frac{\omega_D^2 - \omega^2}{\omega^2} \right| + i\pi\omega^2\theta(\omega_D^2 - \omega^2) \right\} I(\varepsilon + \omega), \quad (45)$$

где g — обычная константа электрон-фононного взаимодействия,

$$I(\varepsilon) = \int_{-D}^{+D} d\xi \frac{N_0(\xi)}{E_\varepsilon - \xi},$$

$E_\varepsilon = \varepsilon - \Sigma(\varepsilon) - \Sigma_{ph}(\varepsilon)$, $\omega_c = p_F u$ — характерная частота порядка дебаевской. В случае полуэллиптической "затравочной" DOS $N_0(\varepsilon)$ с полушириной зоны D получаем $I(\varepsilon) = (2/D^2) (E_\varepsilon - \sqrt{E_\varepsilon^2 - D^2})$. Удобно ввести безразмерную константу электрон-фононного взаимодействия, которая в такой модели принимает вид [42]

$$\lambda = g^2 N_0(E_F) \frac{\omega_D^2}{4\omega_c^2}. \quad (46)$$

Для упрощения расчётов пренебрежём перенормировкой фононов вследствие электрон-фононного взаимодействия [42], полагая, что фононный спектр фиксируется экспериментом.

3.3.4. Электронные и фононные кинки в DMFT + Σ -подходе. Остановимся лишь на наиболее интересных результатах DMFT + Σ -подхода в такой модели, отсылая читателя за подробностями к работам [124, 125]. Рассмотрим результаты, полученные для случая взаимодействия электронов с дебаевскими фононами (для эйнштейновского случая результаты аналогичны [125]).

Сравним плотности состояний, полученные в DMFT и в DMFT + Σ_{ph} -подходе, учитывающем электрон-фононное взаимодействие, для сильного ($U/2D = 1,25$) и слабого ($U/2D = 0,625$) хаббардовского взаимодействия, представленные соответственно на рис. 16а и б. Безразмерная константа λ (46), использованная в расчётах, принималась равной 0,8, а частота Дебая составляла $\omega_D = 0,125D$. В обоих случаях мы наблюдаем перераспределение спектрального веса, вызванное электрон-фононным взаимодействием. При $U/2D = 1,25$ (рис. 16а) видна хорошо развитая трёхпиковая структура, типичная для сильнокоррелированных металлов. В энергетическом интервале $\pm\omega_D$ вокруг энергии Ферми (которая принята за нуль энергии на рис. 16) квазичастичные пики в DOS, полученные в чистой DMFT и DMFT + Σ_{ph} , практически не различаются по форме. Однако вне этого интервала

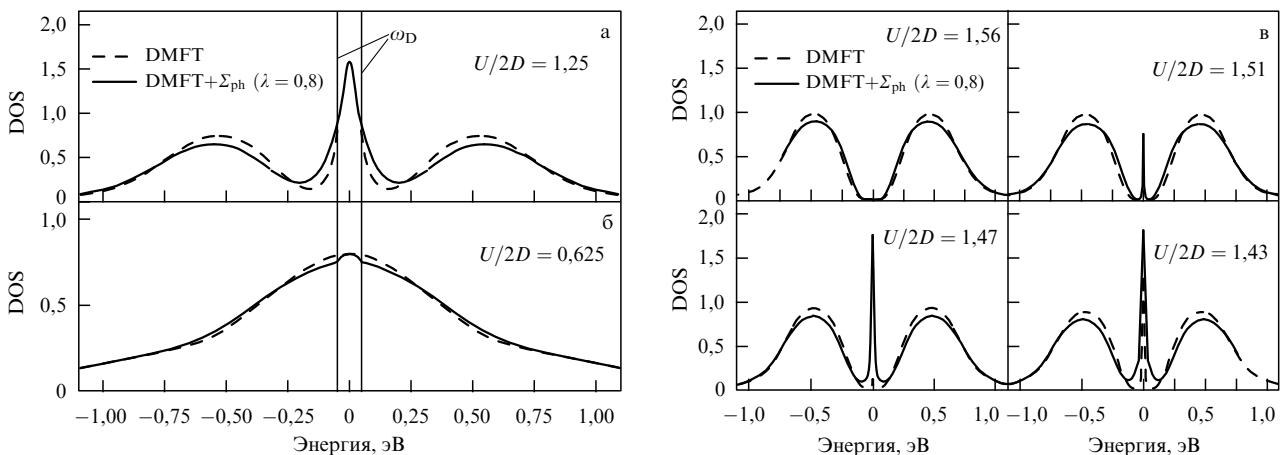


Рис. 16. Сравнение плотностей состояний, полученных в стандартной DMFT (штриховые кривые) и DMFT + Σ_{ph} (сплошные кривые), для сильного (а) $U/2D = 1,25$, и слабого (б) $U/2D = 0,625$, хаббардовского взаимодействия. (в) Плотность состояний вблизи перехода металл–диэлектрик при различных значениях $U/2D$. Безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия $\lambda = 0,8$ [124, 125].

квазичастичный DMFT + Σ_{ph} -пик становится значительно шире за счёт переноса части спектрального веса из хаббардовских зон. Уширение квазичастичного пика в DMFT + Σ_{ph} приводит, как мы увидим ниже, к задержке перехода металл – диэлектрик.

В случае $U/2D = 0,625$ (рис. 16б) ясно различимых хаббардовских зон не формируется, наблюдаются лишь некоторые боковые "крылья" DOS. Перераспределение спектрального веса на рис. 16б не является драматичным, несмотря на его качественное отличие от такового в случае $U/2D = 1,25$ (рис. 16а). Основное различие между результатами DMFT и DMFT + Σ_{ph} возникает в интервале $\pm\omega_D$, где наблюдается образование "шапочки" в DOS, вызванное электрон-фононным взаимодействием. Соответствующий спектральный вес "уходит" на энергии в окрестности $\pm U$, где начинают формироваться хаббардовские зоны.

На рисунке 16в сравниваются плотности состояний, полученные в DMFT без фононов и DMFT + Σ_{ph} , для различных значений параметра $U/2D$ 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 результатами. В DMFT + Σ_{ph} хаббардовские зоны ниже и шире, чем в DMFT, поскольку включают дополнительное (электрон-фононное) взаимодействие. С уменьшением U при значениях $U/2D = 1,51$ и $1,47$ мы наблюдаем, что DMFT + Σ_{ph} -результаты соответствуют металлическому состоянию (с узким квазичастичным пиком на уровне Ферми), а DMFT без фононов всё ещё приводит к диэлектрическому решению. Только в окрестности $U/2D = 1,43$ результаты для DOS как DMFT, так и DMFT + Σ_{ph} соответствуют металлическому состоянию. Таким образом, при увеличении U конечное электрон-фононное взаимодействие несколько задерживает мотт-хаббардовский переход из металлической фазы в диэлектрическую. Этот результат аналогичен тому, который наблюдается для модели Хаббарда – Холстейна при слабом электрон-фононном взаимодействии [126 – 128].

Таким образом, умеренное электрон-фононное взаимодействие приводит к довольно незначительным изменениям электронной плотности состояний и в коррели-

рованном металле, и в состоянии моттовского диэлектрика, лишь слегка задерживая переход от металла к диэлектрику при увеличении U .

Теперь перейдём к исследованию источника резких изменений наклона электронной дисперсии (кинков). Хорошо известно, что в общем случае кинки образуются в результате взаимодействия электронов с бозонными модами. В случае электрон-фононного взаимодействия типичная энергия кинка порядка дебаевской (или эйнштейновской) частоты. В разделе 3.3.1 мы видели, что в сильнокоррелированном металле могут возникать кинки чисто электронной природы [114]. Энергия такого кинка для полуэллиптической "голой" DOS порядка $\omega^* = Z_{FL}(\sqrt{2} - 1)D$, где D — полуширина "затравочной" зоны, $Z_{FL} = (1 - \partial \text{Re} \Sigma / \partial \varepsilon|_{\varepsilon=E_F})^{-1}$ — ферми-жидкостной фактор перенормировки. Грубо говоря, ω^* определяется полушириной квазичастичного пика в DOS.

Электронный кинк является достаточно плавным, и его наблюдение довольно затруднительно. Результаты расчётов в DMFT + Σ_{ph} -приближении показывают, что электронные кинки плохо наблюдаемы на фоне фоновых кинков и требуется тонкая настройка параметров модели для их выделения. Прежде всего необходимо обеспечить выполнение условия $\omega_D \ll \omega^*$ (в противном случае плавные электронные кинки будут практически неразличимы на фоне кинков, обусловленных электрон-фононным взаимодействием). Для $U/(2D) = 1$ при $U = 3,5$ эВ имеем $\omega^* \sim 0,1D$, а дебаевскую частоту можно взять достаточно малой, например $\omega_D \sim 0,01D$. Для того чтобы кинк, обусловленный фононами, был достаточно выраженным при такой относительно малой дебаевской частоте, необходимо увеличить константу электрон-фононного взаимодействия до значения $\lambda = 2,0$.

Для демонстрации возможности сосуществования обоих типов кинков в спектре рассмотрим энергетическую дисперсию в случае простой кубической решётки с интегралом переноса только между ближайшими соседями. Наиболее удобным для рассмотрения является высокосимметричное направление $\Gamma - (\pi, \pi, \pi)$ зоны Бриллюэна [114]. На рисунке 17а показана электронная дисперсия вблизи уровня Ферми вдоль этого направления. Линии с ромбами — электронный спектр в обычной

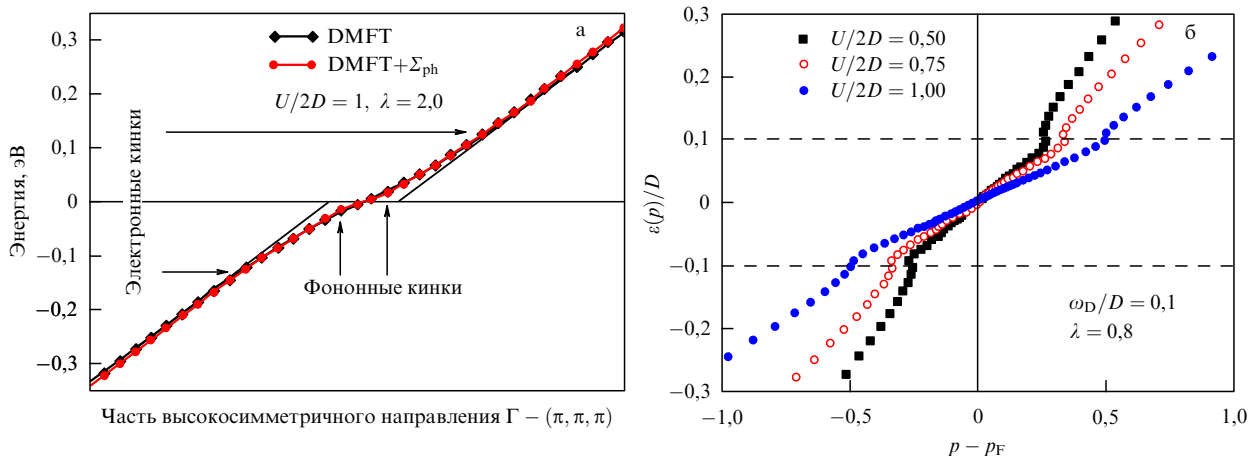


Рис. 17. (а) Квазичастичная дисперсия с кинками вблизи уровня Ферми вдоль высокосимметричного направления $\Gamma - (\pi, \pi, \pi)$ зоны Бриллюэна, полученная из "свободной" энергетической дисперсии простой кубической решётки с интегралом переноса только между ближайшими соседями в рамках DMFT (кривая с ромбами) и DMFT + Σ_{ph} (кривая с кружками); $\lambda = 2$, $\omega_D = 0,01D$. (б) Эволюция фононных кинков, полученная в DMFT + Σ_{ph} для различных величин хаббардовского взаимодействия: $U/2D = 0,5, 0,75, 1,0$; $\lambda = 0,8$, $\omega_D = 0,1D$ [124].

DMFT (без фононов), а линии с кружками представляют результат DFMT + Σ_{ph} -расчётов. Электронные и фононные кинки отмечены стрелками. В общем случае, однако, кинки в электронной дисперсии, обусловленные электрон-фононным взаимодействием, доминируют при наиболее типичных величинах модельных параметров, затрудняя наблюдение кинков чисто электронной природы, предсказанных в работе [114].

В заключение приведём картину эволюции фононных кинков в электронном спектре в зависимости от величины хаббардовского взаимодействия U . С возрастанием отношения $U/2D$ величина скорости Ферми убывает и кинк сдвигается по оси импульсов всё дальше от p_F , в то время как энергия кинка сохраняет величину порядка ω_D . Такое поведение кинка, которое следует из прямых DMFT + Σ_{ph} -расчётов [124, 125], показано на рис. 176. Для случая взаимодействия с эйнштейновскими фононами результаты вполне аналогичны [125].

4. Электронная структура реальных сильнокоррелированных систем: LDA + DMFT и LDA + DMFT + Σ

В настоящее время наиболее развитой схемой первопринципных (т.е. в идеале не использующих подгоночных параметров) расчётов электронных спектров *реальных* СКС является метод LDA + DMFT [2, 25]. В качестве "невзаимодействующего" стартового гамильтониана в этом методе используются результаты зонного LDA-расчёта, после чего сильные корреляции в явном виде учитываются в рамках DMFT. Расчётная схема LDA + DMFT фактически объединяет два научных направления: "реалистические" расчёты зонной структуры и традиционные модельные подходы, которые прежде были существенно отделены друг от друга. Без DMFT в рамках LDA невозможно описать сильнокоррелированные системы, в то время как без LDA-расчётов многочастичные модели не могут отразить специфику реальных соединений. Ниже кратко описываются основы метода LDA + DMFT и его последующее обобщение до LDA + DMFT + Σ .

4.1. Теория функционала электронной плотности (DFT). Приближение локальной электронной плотности (LDA) В адиабатическом приближении Борна – Оппенгеймера [129] при пренебрежении релятивистскими эффектами электронные свойства в физике твёрдого тела описываются гамильтонианом вида

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}, \sigma) \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V_{\text{ion}}(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r d^3r' \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}, \sigma) \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}', \sigma') V_{\text{ee}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \times \hat{\Psi}(\mathbf{r}', \sigma') \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma). \quad (47)$$

Здесь $\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}, \sigma)$ и $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma)$ — полевые операторы соответственно рождения и уничтожения электрона с координатой \mathbf{r} и спином σ , m_e — масса электрона,

$$V_{\text{ion}}(\mathbf{r}) = -e^2 \sum_i \frac{Z_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|}, \quad V_{\text{ee}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^2}{2} \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (48)$$

обозначают одночастичный потенциал, созданный всеми ионами i с зарядом eZ_i , расположенными в заданных позициях \mathbf{R}_i , и электрон-электронное взаимодействие соответственно.

Хотя первопринципный гамильтониан (47) легко записать, точно решить соответствующую квантово-механическую задачу невозможно. По этой причине приходится прибегать к существенным физическим приближениям. В частности, подход теории функционала электронной плотности (DFT) основывается на теореме Хоэнберга – Кона [130] (см. также обзор [131]), которая утверждает, что энергия основного состояния является однозначным функционалом зарядовой электронной плотности, который принимает минимальное значение при равновесной электронной плотности основного состояния:

$$E[\rho] = E_{\text{kin}}[\rho] + E_{\text{ion}}[\rho] + E_{\text{Hartree}}[\rho] + E_{\text{xc}}[\rho], \quad (49)$$

где энергия Хартри $E_{\text{Hartree}}[\rho] = (1/2) \int d^3r' d^3r V_{\text{ee}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \times \rho(\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r})$ и энергия ионного потенциала $E_{\text{ion}}[\rho] = \int d^3r V_{\text{ion}}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r})$ непосредственно выражаются через электронную плотность заряда; $E_{\text{kin}}[\rho]$ обозначает кинетическую энергию электронов, а $E_{\text{xc}}[\rho]$ — неизвестный, вообще говоря, обменно-корреляционный член, который содержит энергию электрон-электронного взаимодействия, не учтённую в слагаемом Хартри. Фактически все сложности многочастичной задачи перенесены здесь в расчёт величины $E_{\text{xc}}[\rho]$.

Практически вместо минимизации $E[\rho]$ по ρ обычно проводится минимизация по набору некоторых ортонормированных базисных функций ϕ_i , связанных с ρ соотношением

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (50)$$

Вводя произвольные параметры Лагранжа ε_i и требуя выполнения равенства

$$\frac{\delta}{\delta \phi_i(\mathbf{r})} \left\{ E[\rho] + \varepsilon_i \left[1 - \int d^3r |\phi_i(\mathbf{r})|^2 \right] \right\} = 0, \quad (51)$$

получаем уравнение Кона – Шэма [132, 133]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V_{\text{ion}}(\mathbf{r}) + \int d^3r' V_{\text{ee}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') + \frac{\delta E_{\text{xc}}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} \right] \times \phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\mathbf{r}). \quad (52)$$

Уравнение (52) формально совпадает с одночастичным стационарным уравнением Шрёдингера. Кинетическая энергия электронов, соответствующая зарядовой плотности основного состояния, даётся теперь выражением

$$E_{\text{kin}}[\rho_{\text{min}}] = - \sum_{i=1}^N \left\langle \phi_i \left| \frac{\hbar^2 \Delta}{2m_e} \right| \phi_i \right\rangle, \quad (53)$$

где ϕ_i являются самосогласованными (вырожденными по спину) решениями уравнений (50) и (52), соответствующими наименьшей одночастичной энергии ε_i [134].

Для расчёта $E_{\text{xc}}[\rho]$ чаще всего используется *приближение локальной электронной плотности*, которое аппроксимирует функционал $E_{\text{xc}}[\rho]$ функцией только

локальной зарядовой плотности:

$$E_{xc}[\rho] \rightarrow \int d^3r \rho(\mathbf{r}) \epsilon_{xc}^{LDA}(\rho(\mathbf{r})). \quad (54)$$

Явный вид $\epsilon_{xc}^{LDA}(\rho(\mathbf{r}))$ может быть найден в рамках различных моделей, например из численного анализа модели "желе" (электронный газ на положительно заряженном однородном ионном фоне) [135].

Фактически LDA соответствует замене гамильтониана (47) следующим гамильтонианом:

$$\hat{H}_{LDA} = \sum_{\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V_{ion}(\mathbf{r}) + \int d^3r' \rho(\mathbf{r}') V_{ee}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \frac{\delta E_{xc}^{LDA}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma). \quad (55)$$

При практических вычислениях операторы поля разлагаются по некоторому набору атомоподобных функций (базису) Φ_{ilm} (где i — решёточный узел, l — орбитальное квантовое число, m — магнитное квантовое число). В таком представлении

$$\hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) = \sum_{ilm} \hat{c}_{ilm}^{\dagger} \Phi_{ilm}(\mathbf{r}) \quad (56)$$

и гамильтониан (55) принимает вид

$$\hat{H}_{LDA} = \sum_{ilm, j'l'm', \sigma} (\delta_{ilm, j'l'm'} \epsilon_{ilm} \hat{n}_{ilm}^{\sigma} + t_{ilm, j'l'm'} \hat{c}_{ilm}^{\dagger} \hat{c}_{j'l'm'}^{\sigma}). \quad (57)$$

Здесь $\hat{n}_{ilm}^{\sigma} = \hat{c}_{ilm}^{\dagger} \hat{c}_{ilm}^{\sigma}$ — оператор плотности электронов на данной орбитали, а матричные элементы

$$t_{ilm, j'l'm'} = \left\langle \Phi_{ilm} \left| -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + V_{ion}(\mathbf{r}) + \int d^3r' \rho(\mathbf{r}') V_{ee}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \frac{\delta E_{xc}^{LDA}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} \right| \Phi_{j'l'm'} \right\rangle \quad (58)$$

при $ilm \neq j'l'm'$ определяют эффективные интегралы переноса, тогда как собственное значение энергии ϵ_{ilm} даётся соответствующим диагональным выражением при совпадающих индексах. На этом чисто аналитическая работа заканчивается, а далее следует численный счёт в выбранном базисе, например линейаризованных маффин-тин-орбиталей (Linearized Muffin-Tin Orbitals — LMTO). Конкретный вид матричных элементов (58) в базисе LMTO приведён, например, в работах [136, 137].

4.2. Расчётная схема LDA + DMFT

Особую важность для сильнокоррелированных материалов имеет кулоновское взаимодействие между d- и f-электронами на одном решёточном узле, поскольку оно вносит наибольший вклад в энергию взаимодействия. Наибольшим нелокальным вкладом является взаимодействие типа плотность — плотность на ближайших соседях, основной вклад в которое даёт хартриевский член (см. [138, 139], а также [140]), который уже учтён в LDA. Кроме того, в LDA осуществляется и некоторый учёт обменно-корреляционных взаимодействий через одноэлектронный эффективный потенциал $\delta E_{xc}^{LDA}[\rho]/\delta \rho(\mathbf{r})$.

Для того чтобы учесть сильное локальное кулоновское взаимодействие, необходимо дополнить гамильтониан (57) приближённой локальной кулоновской матрицей, в которую входят только наиболее важные пара-

метры [25]: U — одноузельное внутриорбитальное кулоновское отталкивание, J — обменное взаимодействие и межорбитальное кулоновское отталкивание U' , действующие на разных электронных орбиталях, принадлежащих данному узлу i_d , в котором находится атом с частично заполненной d-оболочкой:

$$\hat{H} = \hat{H}_{LDA} + U \sum_m \sum_{i=i_d, l=l_d} \hat{n}_{ilm\uparrow} \hat{n}_{ilm\downarrow} + \sum_{i=i_d, l=l_d} \sum_{m \neq m'} \sum_{\sigma \sigma'} (U' - \delta_{\sigma \sigma'} J) \hat{n}_{ilm\sigma} \hat{n}_{ilm'\sigma'} - \sum_{i=i_d, l=l_d} \sum_{m\sigma} \Delta \epsilon_d \hat{n}_{ilm\sigma}, \quad (59)$$

где для простоты оставлены только взаимодействия типа плотность — плотность и использована так называемая параметризация Канамори, в которой для одинаковых орбиталей ($m = m'$) берётся параметр прямого кулоновского взаимодействия U , а для разных орбиталей ($m \neq m'$) — U' , причём $U' = U - 2J$, как следствие вращательной инвариантности атомной задачи, а параметр обменного взаимодействия не зависит от орбитального индекса и равняется J .

Кроме того, в (59) добавлено последнее слагаемое, содержащее величину $\Delta \epsilon_d$, которая должна скорректировать двойной учёт вкладов в локальное кулоновское взаимодействие, уже содержащихся в \hat{H}_{LDA} (так называемая поправка на двойной учёт). Общее микроскопическое выражение для $\Delta \epsilon_d$ через U и ρ неизвестно, однако существует несколько качественных способов определения величины $\Delta \epsilon_d$, которые используются в различных LDA + DMFT-расчётах (см. подробное обсуждение в работах [141, 142]). Простейшее физическое предположение состоит в том, что в рамках DFT энергия кулоновского взаимодействия может быть записана как

$$E_{DFT} = \frac{1}{2} \bar{U} n_d (n_d - 1), \quad (60)$$

где n_d — полное число электронов на d-оболочке, \bar{U} — среднее значение кулоновского взаимодействия (предполагается усреднение по всем парам орбиталей $m\sigma, m'\sigma'$ на данном узле). Соответственно $\Delta \epsilon_d$ берётся в виде

$$\Delta \epsilon_d = \frac{\partial E_{DFT}}{\partial n_d} = \bar{U} \left(n_d - \frac{1}{2} \right). \quad (61)$$

Параметры взаимодействия, U , J и U' , могут быть получены из усреднённого кулоновского взаимодействия \bar{U} и хундовского обменного параметра J . Усреднённое взаимодействие \bar{U} связано с кулоновскими параметрами U и U' соотношением

$$\bar{U} = \frac{U + (N_{orb} - 1) U' + (N_{orb} - 1)(U' - J)}{2N_{orb} - 1}, \quad (62)$$

где N_{orb} — число взаимодействующих орбиталей. Поскольку U и U' не независимы, для определения U достаточно двух величин, \bar{U} и J [29–31, 143].

Для микроскопического вычисления усреднённого кулоновского взаимодействия разработаны различные методы, такие как CLDA (Constrained LDA) [144] или CRPA (Constrained Random-Phase Approximation) [145, 146]. Существуют и их обобщения для расчёта хундовского обмена. К сожалению, разброс получаемых значе-

ний в этих методах остаётся пока достаточно большим, в частности \bar{U} оказывается сильно зависящим от формы и набора используемых орбиталей (например, при решении задачи об экранировании дальнедействующей части кулоновского взаимодействия). Ясно, что введение всех этих (в сущности, модельных) параметров уводит нас достаточно далеко от идеала "первопринципности", однако это лучшее из того, что можно сделать в настоящее время для построения электронной структуры твёрдых тел, содержащих атомы переходных металлов, в которых межэлектронные корреляции играют определяющую роль. В этом смысле, возможно, правильнее говорить о моделировании электронной структуры таких систем.

Матричные элементы "невзаимодействующего" гамильтониана в обратном пространстве $H_{\text{LDA}}^0(\mathbf{k})$ могут быть рассчитаны численно в каждой точке зоны Бриллюэна, интегралы по зоне обычно вычисляются методом тетраэдров [147]. В случае относительно простых зонных дисперсий, когда удаётся задать аналитическую зависимость $H_{\text{LDA}}^0(\mathbf{k})$, величины интегралов переноса могут быть найдены из LDA с помощью проектирования на соответствующие функции Ванье [148–151]. Матричные элементы этого гамильтониана, т.е. одночастичные LDA-энергии без учёта локального кулоновского взаимодействия, записываются следующим образом:

$$(H_{\text{LDA}}^0(\mathbf{k}))_{qlm, q'l'm'} = (H_{\text{LDA}}(\mathbf{k}))_{qlm, q'l'm'} - \delta_{qlm, q'l'm'} \delta_{ql, q'l} \Delta \epsilon_d n_d, \quad (63)$$

где q — индекс атома в элементарной ячейке.

Суть дальнейшего состоит в использовании в DMFT или DMFT + Σ (см. раздел 2.1) локальной функции Грина решёточной задачи (5), определяемой проинтегрированным уравнением Дайсона следующего вида:

$$G_{qlm, q'l'm'}(\omega) = \frac{1}{V_B} \int d\mathbf{k} [\omega \delta_{qlm, q'l'm'} - (H_{\text{LDA}}^0(\mathbf{k}))_{qlm, q'l'm'} + \delta_{ql, q'l} \Sigma_{qlm, q'l'm'}(\omega)]^{-1}, \quad (64)$$

где $[\dots]^{-1}$ обозначает операцию нахождения обратной матрицы с наборами индексов $n(=qlm)$, $n'(=q'l'm')$, а интегрирование ведётся по зоне Бриллюэна с объёмом V_B .

Вычисления могут быть существенно упрощены в случае кубической симметрии решётки, когда кристаллическое поле приводит к сильному расщеплению d-орбиталей на трёхкратно вырожденные t_{2g} -состояния и не смешивающиеся с ними двукратно вырожденные e_g -состояния. В этом частном случае функция Грина и СЭЧ становятся диагональными по орбитальным и спиновым индексам, так что задача фактически сводится к однозонной. Тогда вычисление локальной функции Грина решёточной задачи может быть проведено интегрированием по энергиям с использованием невозмущённой плотности состояний, что позволяет избежать громоздкого интегрирования по зоне Бриллюэна в (64) и записать

$$G(\omega) = G^0(\omega - \Sigma(\omega)) = \int d\epsilon \frac{N^0(\epsilon)}{\omega - \Sigma(\omega) - \epsilon}. \quad (65)$$

При этом поправка на двойной учёт $\Delta \epsilon_d$ сводится к незначительному сдвигу химического потенциала, так что её точная форма вообще не важна.

4.3. Примеры LDA + DMFT-расчётов

4.3.1. Кубические перовскиты CaVO_3 и SrVO_3 . Рассмотрим примеры некоторых расчётов электронной структуры реальных соединений с достаточно сильными электронными корреляциями, выполненных в рамках LDA + DMFT. Оксиды переходных металлов являются идеальным "полигоном" для изучения электронных корреляций в твёрдых телах. Среди этих материалов кубические перовскиты имеют простейшую кристаллическую структуру и, таким образом, могут рассматриваться как стартовая точка для объяснения электронных свойств более сложных систем. Обычно 3d-состояния в таких материалах формируют сравнительно узкие зоны шириной $W \sim 2-3$ эВ, что и приводит к сильным кулоновским корреляциям между электронами.

Современный этап экспериментальных исследований спектральных и транспортных свойств сильнокоррелированных 3d¹-оксидов переходных металлов начался с работы Фуджимори и др. [152], авторы которой, по-видимому впервые, обнаружили явно выраженную нижнюю хаббардовскую зону в фотоэмиссионных спектрах (ФЭС), которая не могла быть объяснена с помощью стандартных методов расчёта зонной структуры. Во многих ранних работах [153–156], посвящённых свойствам серии соединений $\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{VO}_3$ с различными значениями x , были получены достаточно противоречивые результаты. В то время как термодинамические характеристики (коэффициент Зоммерфельда, электрическое сопротивление и магнитная восприимчивость) оказались в основном независимыми от x , данные спектроскопических измерений при переходе от $x=0$ (SrVO_3) к $x=1$ (CaVO_3) изменялись достаточно сильно, свидетельствуя о том, что данная изоэлектронная серия демонстрирует переход от сильнокоррелированного металла (SrVO_3) к практически полному диэлектрику (CaVO_3), а область концентраций $x \rightarrow 1$ $\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{VO}_3$ находится на границе перехода Мотта–Хаббарда.

Анализ этой проблемы был проведён с помощью экспериментов по фотоэмиссии с большой проникающей способностью, выполненных Маити и др. [157], и аналогичных экспериментов по фотоэмиссии высокого разрешения, проведённых Секиямой и др. [158]. В частности, в работе [158] было показано: 1) техника приготовления поверхности образца очень важна (предпочтительным является метод скола); 2) энергия рентгеновского пучка должна быть достаточно большой, для того чтобы излучение проникало в глубь образца на несколько элементарных ячеек. В то же время должно обеспечиваться достаточно высокое инструментальное разрешение (около 100 мэВ в работе [158]). Такое усовершенствование экспериментальных методов фотоэмиссионной спектроскопии привело к наблюдению почти одинаковых спектров для $\text{Sr}(\text{Ca})\text{VO}_3$ [157, 158] и позволило достичь согласия результатов спектроскопических и термодинамических измерений. Результаты этих экспериментов согласуются также с более ранними 1s-рентгеновскими спектрами поглощения (X-ray Absorption Spectroscopy, XAS), полученными Иное и др. [159], различаясь только для энергий, немного превышающих уровень Ферми, в отличие, скажем, от данных BIS (Bremsstrahlung Isochromat Spectroscopy) [156]. В рамках однозонной модели Хаббарда, пренебрегая орбитальной структурой 3d-оболочки V, Розенберг и др. [160] смоделировали спектры $\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{VO}_3$, полученные с помощью

фотоэмиссионной спектроскопии с высокой проникающей способностью [157], используя подгоночные параметры. Позднее в [158] было показано, что данные работы [157] содержат значительный вклад от поверхностных состояний.

Ниже представлены результаты LDA + DMFT(QMC)-расчётов без подгоночных параметров для спектральной плотности и плотности электронных состояний кубического перовскита SrVO_3 и орторомбического CaVO_3 . Согласно результатам этих расчётов основное состояние обеих систем является сильнокоррелированным металлом, находящимся достаточно далеко от границы перехода металл – диэлектрик. Несмотря на значительно меньший угол V–O–V-связи в CaVO_3 , фотоэмиссионные спектры этих двух систем очень похожи и их квазичастичные пики почти идентичны. Полученные результаты хорошо согласуются с упомянутыми выше современными данными по фотоэмиссии с высокой проникающей способностью и фотоэмиссии с большим разрешением. В спектральной плотности SrVO_3 в LDA + DMFT(QMC)-расчётах были выявлены кинки чисто электронной природы с энергией около 200 мэВ, которые позднее были обнаружены экспериментально.

Результаты LDA + DMFT-расчёта. Прежде всего из зонной структуры, рассчитанной в LDA, извлекается одночастичный гамильтониан \hat{H}_{LDA}^0 , из которого вычтено усреднённое кулоновское взаимодействие (во избежание его двойного учёта) [25]. Дополняя \hat{H}_{LDA}^0 локальным кулоновским взаимодействием между электронами, получаем гамильтониан (59) для интересующего нас материала. Поскольку симметрия CaVO_3 близка к кубической, можно упростить расчёт, используя при интегрировании по зоне одночастичную LDA-плотность состояний $N^0(\epsilon)$. В гамильтониане (59) локальное внутриатомное кулоновское отталкивание, межатомное отталкивание и обменное взаимодействие учтены в явном виде как U , U' и J . Величины этих взаимодействий для SrVO_3 были вычислены в рамках метода CLDA [144] с учётом экранирования e_g -состояниями [161]. Получены величины среднего кулоновского взаимодействия $\bar{U} = 3,55$ эВ ($\bar{U} = U'$ для t_{2g} -орбиталей [26, 143]) и $J = 1,0$ эВ. Внут-

риатомное кулоновское отталкивание U фиксировано вращательной инвариантностью $U = U' + 2J = 5,55$ эВ. Для CaVO_3 \bar{U} не вычислялось, так как стандартная процедура вычисления параметров кулоновского взаимодействия между двумя t_{2g} -электронами, экранированными e_g -состояниями, неприменима для искажённой кристаллической структуры, в которой e_g - и t_{2g} -орбитали не разделены по симметрии. С другой стороны, известно, что изменение локального кулоновского взаимодействия обычно намного меньше, чем изменение плотности состояний, которые, как было показано, очень слабо зависят от угла связи V–O–V. Это означает, что \bar{U} для CaVO_3 должно быть практически таким же, как и для SrVO_3 . Соответственно, были использованы значения $\bar{U} = 3,55$ эВ и $J = 1,0$ эВ как для SrVO_3 , так и для CaVO_3 . Данные значения согласуются с результатами других расчётов для соединений ванадия [161] и экспериментальными данными [162].

Дальнейшие расчёты с гамильтонианом (59) проводились в рамках приближения DMFT с использованием квантового метода Монте-Карло [18–22]. Функции Грина с помощью QMC рассчитывались для мнимого времени (или на мацубаровских частотах), их продолжение на действительные времена (частоты) осуществлялось методом максимальной энтропии [163]. В рассчитанных LDA + DMFT(QMC)-спектрах для SrVO_3 и CaVO_3 , показанных на рис. 18а, хорошо видны проявления корреляционных эффектов, например формирование нижних хаббардовских зон при значении энергии около –2,0 эВ и верхних хаббардовских зон при энергии около 2,5 эВ с чётко выраженными квазичастичными пиками на уровне Ферми. Следовательно, и SrVO_3 , и CaVO_3 представляют собой сильнокоррелированные металлы. Различие в ширине зон (около 4%) проявляется только в небольшом дополнительном переносе спектрального веса из квазичастичного пика в хаббардовские зоны и в небольших изменениях положения хаббардовских зон. Очевидно, что обе системы не находятся вблизи мотт-хаббардовского перехода металл – диэлектрик. Многочастичные плотности состояний обеих систем (см. рис. 18) очень похожи, но не идентичны. Действительно, SrVO_3

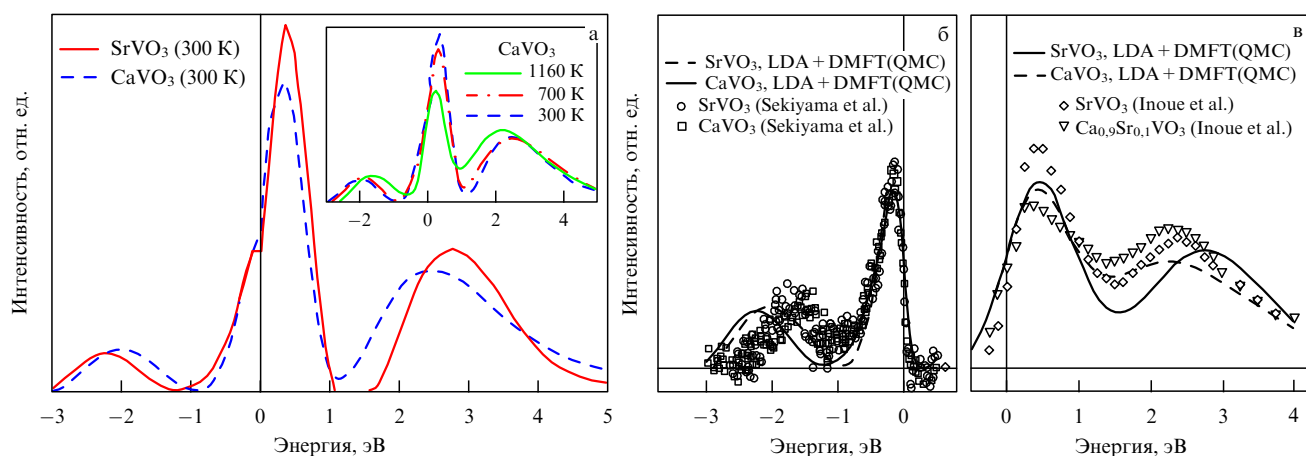


Рис. 18. (а) LDA + DMFT(QMC)-спектры SrVO_3 (сплошная кривая) и CaVO_3 (штриховая кривая), вычисленные при $T = 300$ К. На вставке показано влияние температуры на форму спектра CaVO_3 . (б, в) Сравнение рассчитанных без подгоночных параметров LDA + DMFT(QMC)-спектров SrVO_3 (сплошная кривая) и CaVO_3 (штриховая кривая) с данными фотоэмиссии с высокой проникающей способностью и разрешением (SrVO_3 — кружки, CaVO_3 — квадраты) [158] (б) и 1s-XAS-спектрами (SrVO_3 — ромбы, $\text{Ca}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{VO}_3$ — треугольники) [159] (в). Горизонтальная прямая — уровень экспериментального фона.

немного менее коррелирован, чем CaVO_3 , в соответствии с различиями в ширине их LDA-зон. Вставка на рис. 18а показывает, что влияние температуры на спектр при $T \lesssim 700$ К мало.

На рисунке 18б проводится сравнение LDA + DMFT(QMC)-спектров (вычисленных при $T = 300$ К, умноженных затем на функцию Ферми при экспериментальной температуре (20 К) и размытых гауссианом с экспериментальным разрешением 0,1 эВ [158]) с экспериментальными ФЭС, полученными вычитанием кислородного и "поверхностного" вкладов. Рассчитанные и экспериментальные квазичастичные пики хорошо согласуются. В частности, их высота и ширина почти одинаковы для SrVO_3 и CaVO_3 (но немного различаются при энергиях выше уровня Ферми). С другой стороны, позиции нижних хаббардовских зон различаются довольно заметно. Это различие может быть связано с вычитанием (оценённого) кислородного вклада, которое может удалить часть 3d-спектрального веса при энергиях ниже -2 эВ, а также с неточностью в расчётах \bar{U} .

На рисунке 18в проведено сравнение с данными XAS. Эффекты, связанные с конечным временем жизни дырок, учитываются с помощью размытия теоретического спектра лоренцианом с шириной 0,2 эВ [164], который умножается на обратную функцию Ферми (с $T = 80$ К), а затем размывается гауссианом с экспериментальным разрешением 0,36 эВ. Общее согласие весов и позиций квазичастичной зоны и верхней хаббардовской t_{2g} -зоны хорошее, включая тенденции при переходе от SrVO_3 к CaVO_3 (в эксперименте $\text{Ca}_{0,9}\text{Sr}_{0,1}\text{VO}_3$). Для CaVO_3 вес квазичастичного пика немного меньше, чем в эксперименте. В отличие от однозонной модели Хаббарда, LDA + DMFT отражает особенности конкретных систем и воспроизводит сильную асимметрию спектра в окрестности энергии Ферми, учитывая относительные веса и ширины зон. Представленные на рис. 18 результаты, полученные на основе LDA + DMFT(QMC), позволяют дать иную интерпретацию данных XAS, отличную от той, которая приведена в работе [159], где максимум при энергии около 2,5 эВ был приписан e_g -зоне, а не верхней хаббардовской t_{2g} -зоне. Небольшое различие в квазичастичных пиках (см. рис. 18) приводит к разным значениям эффективных масс: $m^*/m_0 = 2,1$ для SrVO_3 и $m^*/m_0 = 2,4$ для CaVO_3 . Указанные теоретические значения согласуются со значениями $m^*/m_0 = 2-3$ для SrVO_3 и CaVO_3 , полученными из экспериментов по эффекту де Гааза–ван Альфена и термодинамических данных [153–155, 165]. Отметим, что эффективная масса для CaVO_3 , найденная в оптических экспериментах, немного больше: $m^*/m_0 = 3,9$ [162].

4.3.2. Кинки в спектральной функции SrVO_3 . Рассмотрим подробнее результаты расчётов спектральной функции $A(\mathbf{k}, \omega)$ для SrVO_3 , полученные в рамках LDA + DMFT(QMC) в работе [116]. Благодаря идеальной кубической симметрии решётки матрица СЭЧ $\Sigma(\omega)$ в данном случае является диагональной, причём её диагональные элементы равны для всех t_{2g} -орбиталей. Спектральная функция определяется мнимой частью функции Грина $\text{Im } G(\mathbf{k}, \omega)$, т.е. фактически величиной СЭЧ $\Sigma(\omega)$ на действительных частотах, которая рассчитывалась с помощью численного решения уравнения Дайсона для известной полной и затравочной функций Грина методом, описанным в приложении работы [151].

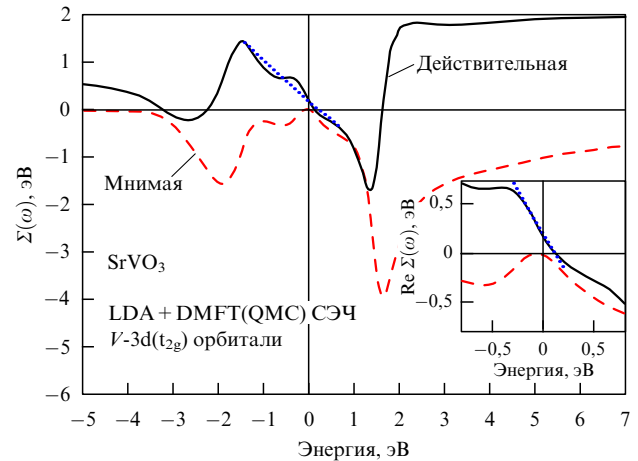


Рис. 19. Вещественная (сплошная кривая) и мнимая (штриховая кривая) части $\Sigma(\omega)$, полученной из LDA + DMFT(QMC)-расчёта для V-3d- t_{2g} -орбиталей в SrVO_3 [116]. На вставке показана СЭЧ в малой окрестности уровня Ферми. Пунктирные прямые показывают угол наклона $\text{Re } \Sigma(\omega)$ вдали от уровня Ферми и вблизи его.

На рисунке 19 изображена полученная таким образом $\Sigma(\omega)$ как функция вещественных частот, которая существенно асимметрична относительно уровня Ферми, как и можно было предполагать исходя из асимметрии LDA-плотности состояний и заполнения зоны проводимости, равного 1/6. При энергиях $\omega \sim \pm 1,5$ эВ вещественная часть $\Sigma(\omega)$ имеет экстремумы, которые соответствуют области перехода от квазичастичного пика к нижней и верхней хаббардовским зонам. Два экстремума в мнимой части СЭЧ, соответствующие нулям $\text{Re } \Sigma(\omega)$, определяют положение нижней и верхней хаббардовских зон⁷ (рис. 18а).

Асимметричный квазичастичный пик в плотности состояний находится в области энергий $-0,8-1,4$ эВ (рис. 18а). Видно, что мнимая часть СЭЧ, $\text{Im } \Sigma(\omega)$, достаточно мала при этих энергиях, а её вещественная часть может быть грубо представлена пунктирной прямой, показанной на рис. 19. Угол наклона пунктирной прямой определяет величину перенормировки квазичастичной массы $Z = m^*/m = 1 - \partial \text{Re } \Sigma(\omega) / \partial \omega|_{\omega=0} = 1,9$. Эта величина Z согласуется с той, которая может быть получена из исходных QMC-данных на мацубаровских частотах: $m^*/m = 1 - \text{Im } \Sigma(\omega_0) / \omega_0 \approx 2$, где ω_0 — "нулевая" мацубаровская частота. Такая величина перенормировки хорошо согласуется со значением $m^*/m = 2,2$, приведённым в работах [166, 167], а также с экспериментальной оценкой из ARPES-данных [168].

Как видно из вставки рис. 19, ферми-жидкостное поведение СЭЧ ($\text{Im } \Sigma(\omega) \sim -\omega^2$ и $\text{Re } \Sigma(\omega) \sim -\omega$) наблюдается только в энергетическом интервале от $-0,20$ до $0,15$ эВ. Угол наклона $\text{Re } \Sigma(\omega)$ в непосредственной близости от уровня Ферми круче, чем в более широком интервале энергий (см. пунктирную прямую на рис. 19). Таким образом, значение ферми-жидкостной перенормировки массы превышает значение $m^*/m = 1,9$ и равняется $m_{\text{low } E}^*/m = 3$ (см. пунктирную прямую на вставке рис. 19). На границах энергетической области ферми-жидкостного режима видны сильные изгибы $\text{Re } \Sigma(\omega)$ при энер-

⁷ Напомним, что действительная часть функции Грина связана с мнимой частью СЭЧ соотношением Крамерса–Кронига [115].

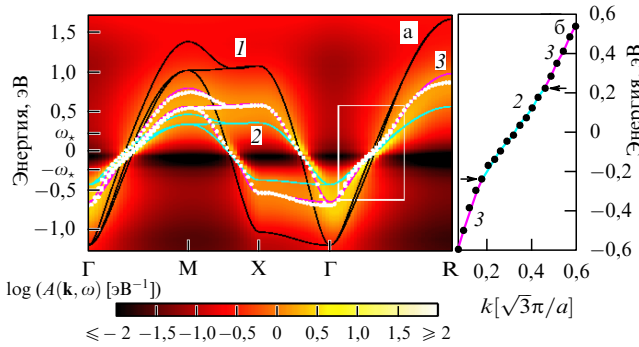


Рис. 20. (а) Кинки в дисперсионном соотношении E_{nk} (светлые кружки), полученные для SrVO_3 в LDA+DMFT-расчёте. Кривые 1 — зонная структура LDA ϵ_{nk} ; кривые 2 — перенормированные на величину ферми-жидкостной перенормировки массы LDA-зоны. Кривые 3 — зонная структура в промежуточном режиме. (б) Увеличенное изображение области, выделенной прямоугольником на рис. а. Кинки отмечены стрелками.

гиях $\omega = \pm 0,25$ эВ. Границей ферми-жидкостного режима можно считать значения энергии, при которых мнимая часть СЭЧ перестаёт подчиняться квадратичному закону $\text{Im } \Sigma(\omega) \sim -\omega^2$ и, следовательно, её действительная часть отклоняется от линейного закона $\text{Re } \Sigma(\omega) \sim -\omega$, вытекающего из соотношения Крамерса–Кронига. Отклонение от квадратичного поведения $\text{Im } \Sigma$ при энергиях порядка $\omega = \pm 0,25$ эВ сразу же приводит к появлению изломов в $\text{Re } \Sigma(\omega)$.

По известным значениям $\text{Re } \Sigma(\omega)$ можно вычислить спектральную плотность $A(\mathbf{k}, \omega)$, а также квазичастичную дисперсию, определяемую импульсной зависимостью максимума $A(\mathbf{k}, \omega)$. На рисунке 20 изображена карта спектральной плотности, полученная в работе [116] для SrVO_3 . Для этой многозонной системы (с вырожденными зонами) дальнейший анализ очень схож с проведённым в разделе 3.3.2 для однозонного случая. Светлые точки представляют дисперсионные кривые E_{nk} , полученные для SrVO_3 в LDA+DMFT-расчёте. В малой окрестности уровня Ферми они совпадают с зонной структурой LDA ϵ_{nk} (кривые 1), перенормированной ферми-жидкостным фактором $Z_{\text{FL}} = 0,35$, так что $E_{nk} = Z_{\text{FL}} \epsilon_{nk}$ (кривые 2). За пределами ферми-жидкостной области дисперсионные кривые соответствуют LDA-зонной структуре с другим перенормировочным фактором: $E_{nk} = Z_{\text{CP}} \epsilon_{nk} + c_{\pm}$ (кривые 3), где $Z_{\text{CP}} = 0,64$, $c_{+} = 0,086$ эВ, $c_{-} = 0,13$ эВ. Вдоль высокосимметричных направлений в зоне Бриллюэна Γ –М и Γ –R переход между двумя режимами приводит к образованию кинков в эффективных дисперсиях при энергиях $\omega_{*} = 0,22$ эВ и $-\omega_{*} = -0,24$ эВ. Эти кинки отмечены стрелками на рис. 20б, соответствующем области, ограниченной прямоугольником на рис. 20а. Из контурной карты спектральной функции $A(\mathbf{k}, \omega)$ видно, что в области энергий, достаточно далёких от уровня Ферми, спектральная плотность сохраняет явно выраженную \mathbf{k} -зависимость, несмотря на большую величину затухания, что противоречит традиционной зонной картине для систем с сильными межэлектронными корреляциями.

Кинки электронной природы были обнаружены в данной системе в ARPES-экспериментах [168] для направления Γ –М при энергиях около 0,25 эВ, что хорошо согласуется с приведёнными выше результатами LDA+DMFT(QMC)-расчётов.

4.4. Электронная структура оксидов меди в псевдощелевом состоянии: LDA+DMFT+ Σ

Наличие псевдощели, как отмечалось в разделе 3, представляет собой одну из основных аномалий несверхпроводящего (нормального) состояния ВТСП-купратов — считается, что выяснение физической природы псевдощелевого состояния является ключевым для понимания механизма ВТСП [55, 56, 169]. Наиболее мощным инструментом исследования этого состояния в последние годы стал метод ARPES. В течение последнего десятилетия в развитии этого метода наблюдается большой прогресс, связанный с существенным увеличением разрешающей способности ARPES как в энергетическом, так и в импульсном пространствах [170–173]. По данным ARPES-экспериментов непосредственно восстанавливается вид поверхностей Ферми (FS), квазичастичная дисперсия и затухание, и даже форма СЭЧ [170–173]. Это позволило достаточно подробно изучить формирование псевдощели, "теневые" зоны, такое необычное явление, как образование "дуг" Ферми, эффекты межслойной гибридизации (bilayer splitting) в двуслойных системах [170–173], установить качественные различия между электронными и дырочными купратами [170–173]. Задачей теории является объяснение указанных особенностей, причём проблема значительно усложняется, поскольку в этих системах имеются достаточно сильные электронные корреляции, что ставит под сомнение правомерность применения к ним стандартной зонной теории и ферми-жидкостного подхода.

В данном разделе мы покажем, что учёта AFM-флуктуаций ближнего порядка в принципе достаточно для описания результатов целого ряда ARPES-экспериментов на реальных системах. Для этой цели мы используем гибридную расчётную схему LDA+DMFT+ Σ [174–179]. С одной стороны, эта схема наследует все преимущества LDA+DMFT [25–31], т.е. преимущества объединения первопринципной одноэлектронной теории функционала плотности в приближении локальной плотности (DFT/LDA) [132, 133, 180, 181] и теории динамического среднего поля для сильнокоррелированных электронов [3–5, 7, 14]. С другой стороны, гибридная схема позволяет учесть нелокальные корреляции посредством введения импульсно-зависящей СЭЧ с сохранением обычной системы самосогласованных DMFT-уравнений [35–37]. Для решения однопримесной задачи DMFT в обсуждаемых ниже работах использовался метод численной ренормгруппы [23, 24].

Такая комбинированная схема вполне подходит для описания электронных свойств ВТСП-купратов в нормальном (недодопированном) состоянии. Во-первых, все определяемые спецификой конкретных систем модельные параметры для физически значимой $\text{Cu-3d}_{x^2-y^2}$ -орбитали могут быть получены из LDA-расчётов. Во-вторых, недопированные (стехиометрические) купраты являются антиферромагнитными моттовскими диэлектриками, в которых $U \gg W$ (U — локальное кулоновское взаимодействие, W — ширина зоны проводимости), так что корреляционные эффекты в них очень важны. При конечном уровне допирования (по крайней мере, вплоть до оптимального) купраты являются типичными сильнокоррелированными металлами, а DMFT-этап расчётной схемы позволяет учесть сильные электронные корреляции. Наконец, для изучения "антиферромагнитного сценария" формирования псевдощели в стандартную

схему LDA + DMFT вводится \mathbf{k} -зависимая СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{k}}$, описывающая нелокальные корреляции, вызываемые статическими (квазистатическими) гейзенберговскими AFM-спиновыми флуктуациями ближнего порядка [58–60].

В рамках LDA + DMFT + Σ -подхода проведены расчёты для ряда высокотемпературных сверхпроводников: дырочно-допированных $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8-\delta}$ (Bi2212) [174] и $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) [175], а также электронно-допированных $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (NCCO) [176, 177] и $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (PCCO) [178]. Результаты LDA + DMFT + Σ -расчётов для спектральных функций и поверхностей Ферми можно сравнить с данными ARPES для квазичастичных зон и экспериментальными картами поверхностей Ферми.

Кристаллическая структура Bi2212 [174], NCCO [176, 177] и PCCO [178] имеет тетрагональную симметрию с пространственной группой $I4/mmm$, а LSCO характеризуется орторомбически искажённой структурой $Bmab$ [175]. Более подробно кристаллографические данные, использованные в LDA + DMFT + Σ -расчётах, представлены в работах [174–179].

Хорошо известно, что физические свойства купратов во многом определяются квазидвумерностью их электронных свойств. С этой точки зрения наибольший интерес представляют электронные состояния в плоскостях CuO_2 , где имеется частично заполненная антисвязывающая $\text{Cu-3d}_{x^2-y^2}$ -орбиталь с пересекающей уровень Ферми дисперсией, которая в приближении сильной связи имеет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) = & -2t(\cos k_x a + \cos k_y a) - 4t' \cos k_x a \cos k_y a - \\ & - 2t''(\cos 2k_x a + \cos 2k_y a) - \\ & - 2t'''(\cos k_x a \cos 2k_y a + \cos 2k_x a \cos k_y a). \end{aligned} \quad (66)$$

Здесь t, t', t'', t''' — интегралы переноса Cu-Cu в первых четырёх координационных сферах плоскости CuO_2 , a — постоянная решётки. Значения эффективных интегралов переноса, полученные в рамках метода линеаризованных маффин-тин-орбиталей (LMTO) [136, 137], с последующим использованием функций Ванье LMTO N -го порядка (NMTO), полученных в рамках подхода работы [148–150], приведены в таблице. В LDA + DMFT + Σ -вычислениях мы используем рассчитанную в LDA эффективную антисвязывающую $\text{Cu-3d}_{x^2-y^2}$ -зону как "затравочную".

В двуслойных системах, например в Bi2212, важную роль играют также перескоки между двумя соседними плоскостями. В приближении сильной связи выражение

для соответствующей межплоскостной дисперсии [182] имеет вид

$$t_{\perp}(\mathbf{k}) = \frac{t_{\perp}}{4} (\cos k_x a - \cos k_y a)^2. \quad (67)$$

Величина t_{\perp} приведена в таблице. Учёт межплоскостных перескоков и возникающих эффектов межплоскостного расщепления (bilayer splitting) требует некоторого обобщения расчётной схемы DMFT + Σ [174].

Для проведения DMFT-расчётов необходимо также определить величину одноузельного кулоновского взаимодействия. Величина такого взаимодействия U для эффективной $\text{Cu-3d}_{x^2-y^2}$ -орбитали, полученная из LDA (методом CLDA) [144], также приведена в таблице.

Для учёта AFM-спиновых флуктуаций применялась двумерная модель псевдошелевого состояния [58–60], обобщённая для DMFT + Σ -расчётов согласно [35, 37]. Дополнительная "внешняя" \mathbf{k} -зависимая СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ [35, 37] описывает нелокальные корреляции, вызываемые статическими (квазистатическими)⁸ AFM-спиновыми флуктуациями.

Для определения $\Sigma_{\mathbf{k}}$ должны быть известны два важных параметра — амплитуда псевдощели Δ , представляющая энергетический масштаб флуктуирующей SDW, и корреляционная длина флуктуаций ξ . Величины Δ рассчитывались, как описано в работах [35, 37, 174]. Величины корреляционной длины выбирались по данным экспериментов по нейтронному рассеянию для NCCO [183, 184] и LSCO [185]. Используемые величины Δ и ξ для всех рассматриваемых систем приведены в таблице. Для решения эффективной андерсоновской однопримесной задачи в DMFT использовался метод численной ренормгруппы [23, 24]. Температура в DMFT(NRG)-расчётах выбиралась равной 0,011 эВ, а электронная (или дырочная) концентрация (уровень допирования) составляла 15 %.

В результате LDA + DMFT + Σ -расчётов получена ярко выраженная картина горячих точек в поведении спектральной плотности и на картах поверхности Ферми для электронно-допированных систем [176–178], в то время как в дырочно-допированных системах возникают только дуги Ферми [174, 175].

На рисунке 21 приведены полученные в LDA + DMFT + Σ -расчётах спектральные плотности вдоль 1/8 части невзаимодействующей поверхности Ферми в направлении от нодальной точки на диагонали зоны Бриллюэна (верхняя кривая) к антинодальной на границе этой зоны (нижняя кривая) для Bi2212 и NCCO. Для обеих систем в нодальном направлении квазичастицы хорошо определены — виден острый пик спектральной плотности, расположенный практически на уровне Ферми. При движении к антинодальной точке квазичастичное затухание увеличивается, достигая максимума в горячей точке (тёмная кривая), а пик сдвигается от уровня Ферми. Такое поведение находится в полном соответствии с результатами [186, 187] (сравнение с экспериментальными данными см. в работах [176, 177]).

Таблица. Рассчитанные энергетические модельные параметры (в электронвольтах) и экспериментальная корреляционная длина ξ .

Соединение	t	t'	t''	t'''	t_{\perp}	U	Δ	ξ
Bi2212	−0,627	0,133	0,061	−0,015	0,083	1,51	0,21	10a
NCCO	−0,44	0,153	0,063	−0,010	—	1,10	0,36	50a
PCCO	−0,438	0,156	0,098	—	—	1,10	0,275	50a
LSCO	−0,476	0,077	−0,025	−0,015	—	1,10	0,21	10a

Примечание. t, t', t'', t''' — первые четыре интеграла переноса Cu-Cu в плоскости CuO_2 , t_{\perp} — эффективный межплоскостной интеграл переноса, U — локальное кулоновское взаимодействие, Δ — амплитуда псевдощели.

⁸ Квазистатическое приближение для AFM-флуктуаций с необходимостью ограничивает этот подход областью достаточно высоких температур (и энергий, не слишком близких к уровню Ферми) [58–60], так что фактически мы не можем судить, например, о природе низкотемпературного (энергетического) затухания, которое целиком определяется динамическими (неупругими) процессами рассеяния.

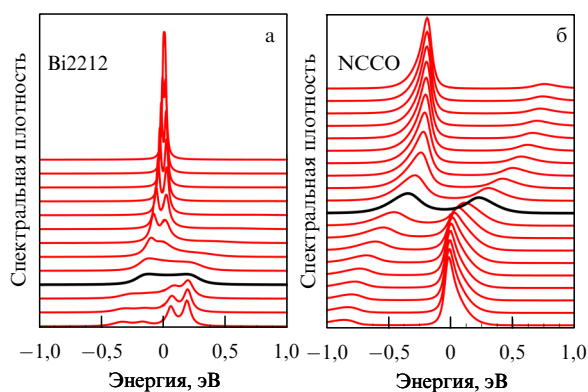


Рис. 21. LDA + DMFT + Σ -спектральные плотности для Bi2212 (а) и NCCO (б) вдоль "затравочной" поверхности Ферми в 1/8 зоны Бриллюэна. Тёмные кривые соответствуют горячим точкам [176, 177].

Непосредственно из LDA + DMFT + Σ -результатов, показанных на рис. 21, видим, что в Bi2212 антинодальные состояния формируются низкоэнергетическим краем псевдощели⁹, а в NCCO — высокоэнергетическим. В случае Bi2212 мы также наблюдаем межплоскостное расщепление квазичастичного пика, что связано с наличием двух плоскостей CuO_2 в элементарной ячейке.

Горячие точки для NCCO расположены ближе к диагонали зоны Бриллюэна [176, 177], что можно видеть по тёмным линиям на рис. 21, соответствующим горячим точкам. Кроме того, корреляционная длина в NCCO гораздо больше, чем в Bi2212. Поэтому для NCCO в антинодальном направлении квазичастицы снова достаточно хорошо определены. Напротив, для Bi2212 рассеяние вблизи границ зоны Бриллюэна сильно везде и вместо картины горячих точек мы наблюдаем достаточно сильное "разрушение" поверхности Ферми вблизи этих границ. Качественно такая же картина наблюдается и в LSCO.

LDA + DMFT + Σ -карта поверхности Ферми в четверти зоны Бриллюэна для Bi2212 представлена на рис. 22а, а для NCCO — на рис. 22б. В Bi2212 наблюдается существенное "разрушение" ферми-поверхности рассеянием на псевдощелевых флуктуациях вблизи границ зоны Бриллюэна¹⁰. Напротив, в NCCO поверхность Ферми почти полностью восстанавливается вблизи границ зоны Бриллюэна. С другой стороны, ферми-дуга вокруг нодального направления в Bi2212 достаточно чётко выражена, а в NCCO — заметно размыта. Это ещё одно следствие того, что горячие точки в NCCO расположены ближе к диагонали зоны Бриллюэна. Немного большая величина амплитуды псевдощели Δ тоже способствует большему размытию ферми-дуг в NCCO. Необходимо отметить также появление "теневого" поверхности Ферми, которая значительно более интенсивна для NCCO.

Качественно именно такие поверхности Ферми наблюдались экспериментально для реальных систем Bi [188] и Nd [186] (рис. 22в, г). Таким образом, различие

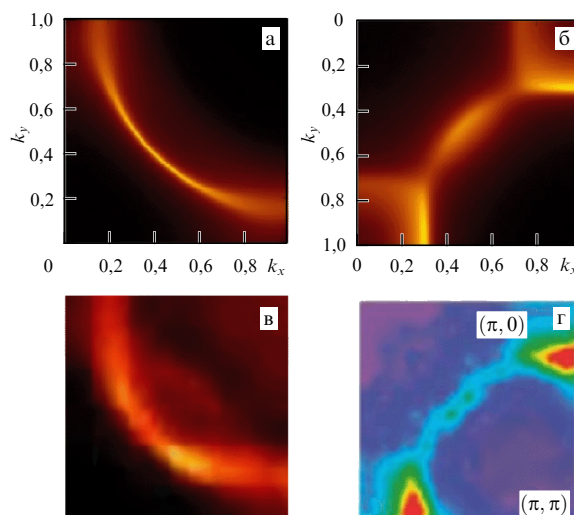


Рис. 22. LDA + DMFT + Σ -карты поверхности Ферми, полученные в [176, 177] для Bi2212 (а) и NCCO (б) в четверти зоны Бриллюэна (k_x, k_y в единицах π/a). Экспериментальные ферми-поверхности для Bi2212 (в) [188] и NCCO (г) [186].

карт поверхностей Ферми для Bi- и Nd-систем связано в основном с различием зонных параметров этих материалов. В частности, LDA-поверхности Ферми NCCO более искривлены, и горячие точки оказываются достаточно удалёнными от границ зоны Бриллюэна, соответственно поверхность Ферми вблизи этих границ почти не испытывает рассеяния на AFM-флуктуациях. В Bi2212 LDA-поверхность Ферми подходит к границам зоны Бриллюэна достаточно близко в окрестности точки $(\pi/a, 0)$, близки к ней и горячие точки, поэтому они оказываются размытыми общим сильным псевдощелевым рассеянием вблизи точки $(\pi/a, 0)$ и почти не проявляются. Кроме того, в NCCO горячие точки яснее проявляются, как отмечалось выше, благодаря гораздо большей корреляционной длине флуктуаций.

Не менее яркие результаты получены в LDA + DMFT + Σ -расчётах и ARPES-экспериментах в случае PCCO [178]. На рисунке 23 представлена карта поверхности Ферми PCCO (LDA + DMFT + Σ -результаты и данные ARPES). Поверхность Ферми здесь чётко различима лишь вблизи границ первой зоны Бриллюэна и вокруг точки $(\pi/a/2, \pi/a/2)$ (дуга Ферми). Так же как и в NCCO, наблюдается "разрушение" поверхности Ферми в горячих точках, расположенных на пересечении поверхности Ферми и её теневой AFM-"реплики". Такое разрушение поверхности Ферми возникает вследствие сильного электронного рассеяния на AFM-спиновых (псевдощелевых) флуктуациях. Теневая поверхность Ферми становится наблюдаемой, как это происходит при AFM-удвоении периода. Однако поскольку дальний порядок в интересующей нас недодопированной области отсутствует, теневая поверхность Ферми оказывается сильно размытой. Поверхность Ферми PCCO очень похожа на наблюдаемую в соединении $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (NCCO), которое принадлежит тому же семейству сверхпроводников [176, 177, 186].

Сравним теоретические (рис. 24а) и экспериментальные (рис. 24б) квазичастичные дисперсии вдоль наиболее характерных разрезов поверхности Ферми, отмеченных на рис. 23. Теоретические данные домножены на функ-

⁹ Особенно чётко это видно при меньшей корреляционной длине, $\xi = 5a$, рассмотренной в работе [174].

¹⁰ Аналогичное поведение в полном соответствии с ARPES-результатами реализуется и в другой дырочной системе — LSCO, расчёты которой в LDA + DMFT + Σ -подходе проведены в [175].

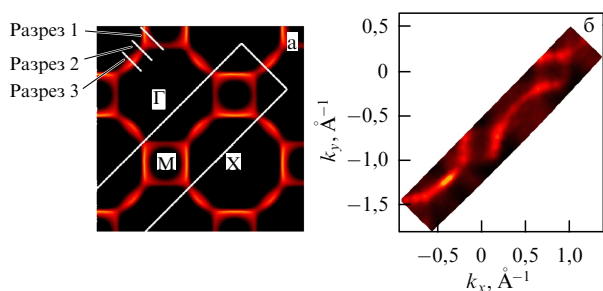


Рис. 23. Карта поверхности Ферми для PCCO. (а) Результаты LDA+DMFT+ Σ -расчёта. (б) Часть обратного пространства (выделенная на рис. а прямоугольником), в которой велись ARPES-измерения. Нижний левый угол совпадает с X-точкой зоны Бриллюэна ($\pi/a, 0$) [178].

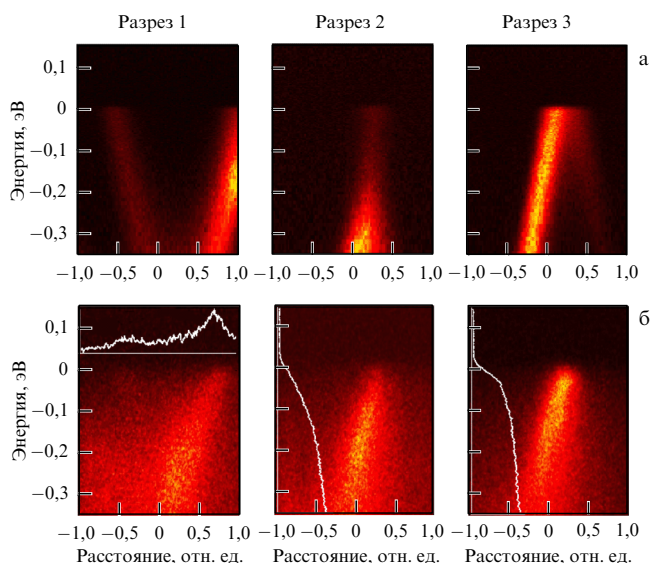


Рис. 24. Импульсно-энергетические распределения интенсивности на характерных разрезах в зоне Бриллюэна, показанных на рис. 23: (а) теоретические данные, (б) экспериментальная интенсивность фотоэмиссии. Для разреза 1 приведена кривая импульсного распределения, проинтегрированная по энергетическому окну шириной 60 мэВ вокруг уровня Ферми. Аналогичная интегральная кривая энергетического распределения для разреза 2 (через горячую точку) показывает подавление интенсивности ARPES по сравнению с таковой для разреза 3, который расположен достаточно далеко от горячей точки [176, 177].

цию Ферми с температурой 30 К и свёрнуты (по энергии) с распределением Гаусса для имитации экспериментального разрешения.

Разрез 1 пересекает квазичастичную и теневую поверхности Ферми вблизи границы зоны Бриллюэна. Соответственно на нём можно обнаружить вилкообразную структуру, сформированную подавленной теневой зоной и гораздо лучше определённой квазичастичной зоной. Такая структура соответствует началу формирования цилиндра поверхности Ферми вокруг точки $(\pi/a, 0)$. Разрез 2 проходит точно через горячую точку. Здесь мы видим сильное подавление квазичастичной зоны вблизи уровня Ферми. Разрез 3 пересекает дугу Ферми, и мы можем видеть достаточно хорошо определённую квазичастичную зону. Однако теневая зона слабой интенсивности также присутствует. В случае дальнего AFM-порядка и полного удвоения периода поверхность Ферми

и её "тень" формируют замкнутый карман поверхности Ферми вокруг точки $(\pi/2a, \pi/2a)$ — в данном случае часть кармана, формируемая теневой зоной, достаточно сильно размыта. Как можно видеть, наблюдается хорошее согласие расчётных и экспериментальных данных. Как отмечалось, в рамках LDA+DMFT+ Σ -схемы можно рассчитать и двухчастичные свойства [38], что позволило исследовать оптическую проводимость Bi- и Nd-купратов [176, 177], также демонстрирующую существенные различия во влиянии псевдощелевых флуктуаций. В частности, в оптической проводимости NCCO, в качественном согласии с экспериментом [189] наблюдается характерный псевдощелевой провал и плавный максимум поглощения через псевдощель на частотах $\sim 2\Delta$, а в оптической проводимости Bi2212 характерной псевдощелевой структуры практически не возникает ни в теории, ни в эксперименте [190], что связано с достаточно малыми значениями Δ и корреляционной длины флуктуаций в этой системе.

Подведём некоторые итоги. Для всех изученных систем LDA+DMFT+ Σ -расчёты 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-флуктуациях (псевдощелевых) ближнего порядка. Сравнение данных ARPES и LDA+DMFT+ Σ -расчётов демонстрирует наличие чётко выраженных горячих точек как в поведении спектральной плотности, так и на картах поверхности Ферми в электронно-допированных системах, тогда как на картах поверхности Ферми дырочно-допированных систем наблюдаются только сильное разрушение поверхности Ферми вблизи границ зоны Бриллюэна и дуги Ферми вокруг её диагоналей.

Существует несколько причин такого различия: 1) горячие точки в электронно-допированных системах расположены ближе к центру зоны Бриллюэна; 2) корреляционная длина AFM-флуктуаций в электронно-допированных системах больше; 3) ширина псевдощели в электронных системах также больше, чем в дырочных. Экспериментальные и теоретические результаты, рассмотренные здесь, наглядно подтверждают AFM-сценарий формирования псевдощели как в дырочно-допированных [174, 175], так и в электронно-допированных купратах [176–178].

5. Заключение

Представленное в обзоре DMFT+ Σ -обобщение стандартной динамической теории среднего поля позволяет включать в рассмотрение нелокальные корреляции или дополнительные (по отношению к хаббардовскому) взаимодействия (в принципе любого типа), оставаясь в рамках однопримесной картины DMFT и сохраняя неизменной самосогласованную систему её уравнений. Основное приближение данного метода связано с пренебрежением интерференционными вкладами диаграмм DMFT и дополнительных взаимодействий, включаемых в рассмотрение. Именно это (строго говоря, не вполне контролируемое) приближение и позволяет сохранить общую структуру DMFT-уравнений, что обеспечивает возможность решения DMFT+ Σ -уравнений с помощью хорошо разработанных методов, используемых в стан-

дартной DMFT. Следует подчеркнуть, что самосогласованный учёт дополнительных взаимодействий на каждом шаге DMFT-цикла приводит к достаточно сложной процедуре, эквивалентной суммированию бесконечных классов диаграмм.

Предложенный подход оказался достаточно универсальным при рассмотрении целого ряда проблем в системах с сильными электронными корреляциями — от полуфеноменологического учёта нелокальных псевдоцелевых флуктуаций ближнего порядка до самосогласованной схемы рассмотрения перехода металл — диэлектрик в неупорядоченной модели Хаббарда — Андерсона и учёта эффектов электрон-фононного взаимодействия в электронных спектрах сильнокоррелированных систем. Замечательной особенностью DMFT + Σ -подхода является возможность исследования, наряду с одночастичными характеристиками, двухчастичных свойств, т.е. в принципе любых функций отклика (оптическая проводимость, магнитная восприимчивость, экранирование заряда и т.п.). Универсальность метода позволяет надеяться на его успешное применение и для многих других задач.

При обсуждении всех рассматривавшихся задач нужно иметь в виду, что во многом аналогичные физические результаты могут быть получены и в рамках более сложных подходов, использующих те или иные методы прямого численного моделирования. Например, похожие результаты по формированию псевдощели в одночастичных характеристиках для двумерной модели Хаббарда получены в кластерных обобщениях DMFT [32, 33]. Однако эти методы имеют характерные ограничения (например, на размер кластера), и они до сих пор широко не применялись для вычисления двухчастичных свойств, таких как общие функции отклика, в частности оптической проводимости. DMFT + Σ -подход имеет здесь очевидные преимущества, связанные с экономией вычислительных ресурсов — он требует существенно меньших затрат счётного времени, а его преимущество при вычислении двухчастичных функций отклика вполне очевидно. Это открывает дополнительные возможности для систематического сравнения различных типов нелокальных флуктуаций или дополнительных взаимодействий и их влияния на электронные свойства сильнокоррелированных систем, обеспечивая интуитивно ясный путь к анализу экспериментальных и теоретических результатов, полученных в рамках более сложных схем.

Достаточно простое обобщение рассмотренной расчётной схемы позволило сформулировать и обобщённый LDA + DMFT + Σ -подход, который даёт возможность проводить расчёты всех обсуждавшихся эффектов для реальных соединений переходных элементов с сильными электронными корреляциями. Можно полагать, что такие расчёты окажутся полезными при анализе и объяснении новых экспериментальных данных.

Благодарности. Авторы благодарны Th. Pruschke за существенный вклад, внесённый им в развитие DMFT + Σ -подхода на начальном этапе, а также за предоставление весьма эффективного NRG-кода, который использовался в большинстве расчётов. Мы также благодарны С.В. Борисенко и другим членам дрезденской группы, совместно с которыми были выполнены ARPES-исследования PCO. Исследования Sr(Ca)VO₃, LSCO и NCCO выполнялись в рамках совместной

работы с университетом Осака в группе S. Suga и S. Sekiyama.

Работа частично поддержана грантом РФФИ 11-02-00147 и выполнена в рамках программ фундаментальных исследований Президиума РАН "Квантовая физика конденсированного состояния" (УрО РАН 09-П-2-1009) и ОФН РАН "Сильнокоррелированные электроны в твёрдых телах" (УрО РАН 09-Т-2-1011).

Список литературы

1. Mott N F *Metal-Insulator Transitions* 2nd ed. (London: Taylor & Francis, 1990) [Мотт Н Ф *Переходы металл — изолятор* (М.: Наука, 1979)]
2. Изюмов Ю А, Анисимов В И *Электронная структура соединений с сильными корреляциями* (М. — Ижевск: РХД, 2008) [Anisimov V, Izyumov Yu *Electronic Structure of Strongly Correlated Materials* (Heidelberg: Springer, 2010)]
3. Vollhardt D, in *Correlated Electron Systems* (Eds V J Emery) (Singapore: World Scientific, 1993) p. 57
4. Pruschke Th, Jarrell M, Freericks J K *Adv. Phys.* **44** 187 (1995)
5. Georges A et al. *Rev. Mod. Phys.* **68** 13 (1996)
6. Vollhardt D *AIP Conf. Proc.* **1297** 339 (2010)
7. Kotliar G, Vollhardt D *Phys. Today* **57** (3) 53 (2004)
8. Hubbard J *Proc. R. Soc. London A* **276** 238 (1963)
9. Hubbard J *Proc. R. Soc. London A* **277** 237 (1964)
10. Hubbard J *Proc. R. Soc. London A* **281** 401 (1964)
11. Hubbard J *Proc. R. Soc. London A* **285** 542 (1965)
12. Hubbard J *Proc. R. Soc. London A* **296** 82 (1967)
13. Hubbard J *Proc. R. Soc. London A* **296** 100 (1967)
14. Metzner W, Vollhardt D *Phys. Rev. Lett.* **62** 324 (1989)
15. Anderson P W *Phys. Rev.* **124** 41 (1961)
16. Pruschke Th, Grewe N Z. *Phys. B* **74** 439 (1989)
17. Pruschke Th, Cox D L, Jarrell M *Phys. Rev. B* **47** 3553 (1993)
18. Hirsch J E, Fye R M *Phys. Rev. Lett.* **56** 2521 (1986)
19. Jarrell M *Phys. Rev. Lett.* **69** 168 (1992)
20. Rozenberg M J, Zhang X Y, Kotliar G *Phys. Rev. Lett.* **69** 1236 (1992)
21. Georges A, Krauth W *Phys. Rev. Lett.* **69** 1240 (1992)
22. Jarrell M, in *Numerical Methods for Lattice Quantum Many-Body Problems* (Ed. D J Scalapino) (Reading, Mass.: Addison-Wesley, 1997)
23. Wilson K G *Rev. Mod. Phys.* **47** 773 (1975)
24. Bulla R, Costi T A, Pruschke Th *Rev. Mod. Phys.* **80** 395 (2008)
25. Anisimov V I et al. *J. Phys. Condens. Matter* **9** 7359 (1997)
26. Lichtenstein A I, Katsnelson M I *Phys. Rev. B* **57** 6884 (1998)
27. Nekrasov I A et al. *Eur. Phys. J. B* **18** 55 (2000)
28. Held K et al. *Ψ_k Newsletter* (56) 65 (2003)
29. Held K et al. *Int. J. Mod. Phys. B* **15** 2611 (2001)
30. Held K et al., in *Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms* (Eds J Grotendorst, D Marx, A Muramatsu) (Jülich: John von Neumann Institute for Computing, 2002) p. 175
31. Lichtenstein A I, Katsnelson M I, Kotliar G, in *Electron Correlations and Materials Properties 2 Vol. 2* (Eds A Gonis, N Kioussis, M Ciftan) (New York: Kluwer Acad./Plenum Publ., 2003) p. 428
32. Maier Th et al. *Rev. Mod. Phys.* **77** 1027 (2005)
33. Kotliar G et al. *Phys. Rev. Lett.* **87** 186401 (2001)
34. Capone M et al. *Phys. Rev. B* **69** 195105 (2004)
35. Sadovskii M V et al. *Phys. Rev. B* **72** 155105 (2005)
36. Kuchinskii E Z, Nekrasov I A, Sadovskii M V *Письма в ЖЭТФ* **82** 217 (2005) [*JETP Lett.* **82** 198 (2005)]
37. Kuchinskii E Z, Nekrasov I A, Sadovskii M V *ФНТ* **32** 528 (2006) [*Low Temp. Phys.* **32** 398 (2006)]
38. Kuchinskii E Z, Nekrasov I A, Sadovskii M V *Phys. Rev. B* **75** 115102 (2007)
39. Kuchinskii E Z, Nekrasov I A, Sadovskii M V *ЖЭТФ* **133** 670 (2008) [*JETP* **106** 581 (2008)]
40. Vollhardt D, Wölffe P *Phys. Rev. B* **22** 4666 (1980)
41. Vollhardt D, Wölffe P *Phys. Rev. Lett.* **48** 699 (1982)
42. Садовский М В *Диаграмматика* 2-е изд. (М. — Ижевск: Ин-т компьютер. исслед., 2010) [Sadovskii M V *Diagrammatics* (Singapore: World Scientific, 2006)]

43. Kotliar G et al. *Phys. Rev. Lett.* **87** 186401 (2001)
44. Biroli G, Kotliar G *Phys. Rev. B* **65** 155112 (2002)
45. Lichtenstein A I, Katsnelson M I *Phys. Rev. B* **62** R9283 (2000)
46. Hettler M H et al. *Phys. Rev. B* **58** R7475 (1998)
47. Hettler M H et al. *Phys. Rev. B* **61** 12739 (2000)
48. Maier Th et al. *Phys. Rev. Lett.* **85** 1524 (2000)
49. Maier Th et al. *Eur. Phys. J. B* **13** 613 (2000)
50. Huscroft C et al. *Phys. Rev. Lett.* **86** 139 (2001)
51. Kusunose H *J. Phys. Soc. Jpn.* **75** 054713 (2006)
52. Toschi A, Katanin A A, Held K *Phys. Rev. B* **75** 045118 (2007)
53. Rubtsov A N, Katsnelson M I, Lichtenstein A I *Phys. Rev. B* **77** 033101 (2008)
54. Rubtsov A N, Katsnelson M I, Lichtenstein A I, Georges A *Phys. Rev. B* **79** 045133 (2009)
55. Timusk T, Statt B *Rep. Prog. Phys.* **62** 61 (1999)
56. Садовский М В *УФН* **171** 539 (2001) [Sadovskii M V *Phys. Usp.* **44** 515 (2001)]
57. Pines D, cond-mat/0404151
58. Schmalian J, Pines D, Stojković B *Phys. Rev. Lett.* **80** 3839 (1998)
59. Schmalian J, Pines D, Stojković B *Phys. Rev. B* **60** 667 (1999)
60. Кучинский Э З, Садовский М В *ЖЭТФ* **115** 1765 (1999) [Kuchinskii E Z, Sadovskii M V *JETP* **88** 968 (1999)]
61. Садовский М В *ЖЭТФ* **77** 2070 (1979) [Sadovskii M V *Sov. Phys. JETP* **50** 989 (1979)]
62. Садовский М В *ЖЭТФ* **66** 1720 (1974) [Sadovskii M V *Sov. Phys. JETP* **39** 845 (1974)]
63. Sadovskii M V, Timofeev A A *J. Moscow Phys. Soc.* **1** 391 (1991)
64. Садовский М В, Стригина Н А *ЖЭТФ* **122** 610 (2002) [Sadovskii M V, Strigina N A *JETP* **95** 526 (2002)]
65. Vilk Y M, Tremblay A-M S *J. Physique* **17** 1309 (1997)
66. Ding H et al. *Nature* **382** 51 (1996)
67. Kuchinskii E Z, Sadovskii M V *ЖЭТФ* **130** 477 (2006) [*JETP* **103** 415 (2006)]
68. Armitage N P et al. *Phys. Rev. Lett.* **87** 147003 (2001)
69. Basov D N, Timusk T *Rev. Mod. Phys.* **77** 721 (2005)
70. Hwang J, Timusk T, Gu G D *J. Phys. Condens. Matter* **19** 125208 (2007)
71. Lee P A, Ramakrishnan T V *Rev. Mod. Phys.* **57** 287 (1985)
72. Belitz D, Kirkpatrick T R *Rev. Mod. Phys.* **66** 261 (1994)
73. Mott N F *Proc. Phys. Soc. A* **62** 416 (1949)
74. Anderson P W *Phys. Rev.* **109** 1492 (1958)
75. Финкельштейн А М *ЖЭТФ* **84** 168 (1983) [Finkel'shtein A M *Sov. Phys. JETP* **57** 97 (1983)]
76. Castellani C P et al. *Phys. Rev. B* **30** 527 (1984)
77. Dobrosavljević V, Kotliar G *Phys. Rev. Lett.* **78** 3943 (1997)
78. Dobrosavljević V, Pastor A A, Nikolić B K *Europhys. Lett.* **62** 76 (2003)
79. Byczuk K, Hofstetter W, Vollhardt D *Phys. Rev. Lett.* **94** 056404 (2005)
80. Henseler P, Kroha J, Shapiro B *Phys. Rev. B* **77** 075101 (2008)
81. Henseler P, Kroha J, Shapiro B *Phys. Rev. B* **78** 235116 (2008)
82. Pezzoli M E, Becca F *Phys. Rev. B* **81** 075106 (2010)
83. Ulmke M, Janiš V, Vollhardt D *Phys. Rev. B* **51** 10411 (1995)
84. Vlaming R, Vollhardt D *Phys. Rev. B* **45** 4637 (1992)
85. Wölfle P, Vollhardt D, in *Anderson Localization*, (Eds Y Nagaoka, H Fukuyama) Springer Series in Solid State Sciences (Berlin Springer 1982) **39** p. 26
86. Sadovskii M V, in *Soviet Scientific Reviews – Physics Reviews* Vol. 7 (Ed I M Khalatnikov) (New York: Harwood Acad. Publ., 1986) p. 1
87. Wölfle P, Vollhardt D, in *Electronic Phase Transitions* (Modern Problems in Condensed Matter Sciences, Vol. 32, Eds W Hanke, Yu V Kopayev) (Amsterdam: North-Holland, 1992) p. 1
88. Кучинский Э З и др. *ЖЭТФ* **107** 2027 (1995) [Kuchinskii E Z et al. *JETP* **80** 1122 (1995)]
89. Кучинский Э З, Эркабаев М А *ФТТ* **39** 412 (1997) [Kuchinskii É Z, Érkabaev M A *Phys. Solid State* **39** 357 (1997)]
90. Kuchinskii E Z et al. *ЖЭТФ* **137** 368 (2010) [*JETP* **110** 325 (2010)]
91. Bulla R *Phys. Rev. Lett.* **83** 136 (1999)
92. Bulla R, Costi T A, Vollhardt D *Phys. Rev. B* **64** 045103 (2001)
93. Blümler N “Mott – Hubbard metal – insulator transition and optical conductivity”, Thesis (München: Univ. Augsburg, 2002)
94. Erkaev M A, Sadovskii M V *J. Moscow Phys. Soc.* **2** 233 (1992)
95. Abrahams E et al. *Phys. Rev. Lett.* **42** 673 (1979)
96. Altshuler B L, Aronov A G, Lee P A *Phys. Rev. Lett.* **44** 1288 (1980)
97. Dolan G J, Osheroff D D *Phys. Rev. Lett.* **43** 721 (1979)
98. Bishop D J, Tsui D C, Dynes R C *Phys. Rev. Lett.* **44** 1153 (1980)
99. Uren M J, Davies R A, Pepper M J. *Phys. C* **13** L985 (1980)
100. Kravchenko S V, Sarachik M P *Rep. Prog. Phys.* **67** 1 (2004)
101. Abrahams E, Kravchenko S V, Sarachik M P *Rev. Mod. Phys.* **73** 251 (2001)
102. Valla T et al. *Phys. Rev. Lett.* **83** 2085 (1999)
103. Hengsberger M et al. *Phys. Rev. Lett.* **83** 592 (1999)
104. Lanzara A et al. *Nature* **412** 510 (2001)
105. Shen Z-X et al. *Philos. Mag. B* **82** 1349 (2002)
106. Rotenberg E, Schaefer J, Kevan S D *Phys. Rev. Lett.* **84** 2925 (2000)
107. Higashiguchi M et al. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144** – 147 639 (2005)
108. Sun Z et al. *Phys. Rev. Lett.* **97** 056401 (2006)
109. He H et al. *Phys. Rev. Lett.* **86** 1610 (2001)
110. Hwang J, Timusk T, Gu G D *Nature* **427** 714 (2004)
111. Ronning F et al. *Phys. Rev. B* **67** 165101 (2003)
112. Yoshida T et al. *Phys. Rev. Lett.* **95** 146404 (2005)
113. Graf J et al. *Phys. Rev. Lett.* **98** 067004 (2007)
114. Byczuk K et al. *Nature Phys.* **3** 168 (2007)
115. Абрикосов А А, Горьков Л П, Дзялошинский И Е *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (М.: Физматгиз, 1963) [Abrikosov A A, Gorkov L P, Dzyaloshinski I E *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (New York: Dover Publ., 1975)]
116. Nekrasov I A et al. *Phys. Rev. B* **73** 155112 (2006)
117. Toshi A et al. *Phys. Rev. Lett.* **102** 076402 (2009)
118. Bulla R, Pruschke Th, Hewson A C *Physica B* **259** – 261 721 (1999)
119. Holstein T *Ann. Physics* **8** 325 (1959)
120. Hewson A C, Mayer D J. *Phys.: Condens. Matter* **17** 5413 (2002)
121. Koller W, Hewson A C, Edwards D M *Phys. Rev. Lett.* **95** 256401 (2006)
122. Hague J P J. *Phys. Condens. Matter* **15** 2535 (2003)
123. Migdal A D *ЖЭТФ* **34** 1438 (1958) [*Sov. Phys. JETP* **7** 999 (1958)]
124. Kuchinskii E Z, Nekrasov I A, Sadovskii M V *Phys. Rev. B* **80** 115124 (2009)
125. Sadovskii M V, Kuchinskii E Z, Nekrasov I A *J. Phys. Chem. Solids* **72** 366 (2011)
126. Koller W, Meyer D, Hewson A C *Phys. Rev. B* **70** 155103 (2004)
127. Jeon G S et al. *Phys. Rev. B* **70** 125114 (2004)
128. Koller W et al. *Europhys. Lett.* **66** 559 (2004)
129. Born M, Oppenheimer R *Ann. Physik* **389** 457 (1927)
130. Hohenberg P, Kohn W *Phys. Rev.* **136** B864 (1964)
131. Jones R O, Gunnarsson O *Rev. Mod. Phys.* **61** 689 (1989)
132. Kohn W, Sham L J *Phys. Rev.* **140** A1133 (1965)
133. Sham L J, Kohn W *Phys. Rev.* **145** 561 (1966)
134. Janak J F *Phys. Rev. B* **18** 7165 (1978)
135. Ceperley D M, Alder B J *Phys. Rev. Lett.* **45** 566 (1980)
136. Andersen O K *Phys. Rev. B* **12** 3060 (1975)
137. Andersen O K, Jepsen O *Phys. Rev. Lett.* **53** 2571 (1984)
138. Müller-Hartmann E Z. *Phys. B* **74** 507 (1989)
139. Müller-Hartmann E Z. *Phys. B* **76** 211 (1989)
140. Wahle J et al. *Phys. Rev. B* **58** 12749 (1998)
141. Held K *Adv. Phys.* **56** 829 (2007)
142. Karolak M et al. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **181** 11 (2010)
143. Zölfl M B et al. *Phys. Rev. B* **61** 12810 (2000)
144. Gunnarsson O et al. *Phys. Rev. B* **39** 1708 (1989)
145. Aryasetiawan F et al. *Phys. Rev. B* **70** 195104 (2004)
146. Miyake T, Aryasetiawan F *Phys. Rev. B* **77** 085122 (2008)
147. Lambin Ph, Vigneron J P *Phys. Rev. B* **29** 3430 (1984)
148. Andersen O K, Saha-Dasgupta T *Phys. Rev. B* **62** R16219 (2000)
149. Andersen O K et al. *Ψ_k Newsletter* (45) 86 (2001)
150. Andersen O K, Saha-Dasgupta T, Ezhov S *Bull. Mater. Sci.* **26** 19 (2003)
151. Anisimov V I et al. *Phys. Rev. B* **71** 125119 (2005)
152. Fujimori A et al. *Phys. Rev. Lett.* **69** 1796 (1992)
153. Aiura Y et al. *Phys. Rev. B* **47** 6732 (1993)
154. Inoue I H et al. *Phys. Rev. Lett.* **74** 2539 (1995)
155. Inoue I H et al. *Phys. Rev. B* **58** 4372 (1998)
156. Morikawa K et al. *Phys. Rev. B* **52** 13711 (1995)
157. Maiti K et al. *Europhys. Lett.* **55** 246 (2001)
158. Sekiyama A et al. *Phys. Rev. Lett.* **93** 156402 (2004)

159. Inoue I H et al. *Physica C* **235–240** 1007 (1994)
160. Rozenberg M J et al. *Phys. Rev. Lett.* **76** 4781 (1996)
161. Solovyev I, Hamada N, Terakura K *Phys. Rev. B* **53** 7158 (1996)
162. Makino H et al. *Phys. Rev. B* **58** 4384 (1998)
163. Jarrell M, Gubernatis J E *Phys. Rep.* **269** 133 (1996)
164. Krause M O, Oliver J H J. *Phys. Chem. Ref. Data* **8** 329 (1979)
165. Inoue I H et al. *Phys. Rev. Lett.* **88** 236403 (2002)
166. Pavarini E et al. *Phys. Rev. Lett.* **92** 176403 (2004)
167. Pavarini E et al. *New J. Phys.* **7** 188 (2005)
168. Yoshida T et al. *Phys. Rev. Lett.* **95** 146404 (2005)
169. Садовский М В, in *Strings, Branes, Lattices, Networks, Pseudogaps and Dust* (Moscow: Scientific World, 2007) p. 357 [Translated into English: Sadovskii M V, cond-mat/0408489]
170. Damascelli A, Hussain Z, Shen Z-X *Rev. Mod. Phys.* **75** 473 (2003)
171. Campuzano J C Norman M R, Randeria M, in *Physics of Superconductors* Vol. 2 (Eds K H Bennemann, J B Ketterson) (Berlin: Springer, 2004) p. 167
172. Fink J et al. *Lecture Notes Phys.* **715** 295 (2007)
173. Zhou X J et al., in *Handbook of High-Temperature Superconductivity: Theory and Experiment* (Ed. J R Schrieffer) (Berlin: Springer, 2007) p. 87
174. Kuchinskii E Z et al. *ЖЭТФ* **131** 908 (2007) [*JETP* **104** 792 (2007)]
175. Nekrasov I A et al. *ЖЭТФ* **137** 1133 (2010) [*JETP* **110** 989 (2010)]
176. Nekrasov I A et al. *J. Phys. Chem. Solids* **69** 3269 (2008)
177. Kokorina E E et al. *ЖЭТФ* **134** 968 (2008) [*JETP* **107** 828 (2008)]
178. Nekrasov I A et al. *Phys. Rev. B* **80** 140510(R) (2009)
179. Nekrasov I A, Kuchinskii E Z, Sadovskii M V *J. Phys. Chem. Solids* **72** 371 (2011)
180. Hedin L, Lundqvist B I *J. Phys. C* **4** 2064 (1971)
181. von Barth U, Hedin L *J. Phys. C* **5** 1629 (1972)
182. Andersen O K et al. *J. Phys. Chem. Solids* **56** 1573 (1995)
183. Zobkalo I A et al. *Solid State Commun.* **80** 921 (1991)
184. Motoyama E M et al. *Nature* **445** 186 (2007)
185. Hücker M et al. *Phys. Rev. B* **71** 094510 (2005)
186. Armitage N P et al. *Phys. Rev. Lett.* **88** 257001 (2002)
187. Kaminski A et al. *Phys. Rev. B* **71** 014517 (2005)
188. Borisenko S V et al. *Phys. Rev. Lett.* **84** 4453 (2000)
189. Onose Y et al. *Phys. Rev. Lett.* **87** 217001 (2001)
190. Quijada M A et al. *Phys. Rev. B* **60** 14917 (1999)

Generalized dynamical mean-field theory in the physics of strongly correlated systems

E.Z. Kuchinskii, I.A. Nekrasov

*Institute for Electrophysics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
ul. Amundsena 106, 620016 Ekaterinburg, Russian Federation
E-mail: kuchinskii@iep.uran.ru, nekrasov@iep.uran.ru*

M.V. Sadovskii

*Institute for Electrophysics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
ul. Amundsena 106, 620016 Ekaterinburg, Russian Federation
E-mail: sadovski@iep.uran.ru
Institute for Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
ul. S. Kovalevskoi 18, 620219 Ekaterinburg, Russian Federation*

This review discusses the generalization of dynamical mean-field theory (DMFT) for strongly correlated electronic systems to include additional interactions necessary for the correct description of physical effects in such systems. Specifically, the additional interactions include: (1) the interaction of electrons with antiferromagnetic (or charge) order parameter fluctuations in high-temperature superconductors leading to the formation of a pseudogap state, (2) scattering on static disorder and its role in the general picture of the Anderson–Hubbard metal–insulator transition, (3) electron–phonon interaction and the features of electronic spectra in strongly correlated systems. The proposed DMFT + Σ approach incorporates the above interactions by introducing into the general DMFT scheme an additional (generally momentum-dependent) self-energy Σ , which is calculated in a self-consistent way without violating the general structure of the DMFT iteration cycle. The paper formulates a general calculation scheme for both one-particle (spectral functions and densities of states) and two-particle (optical conductivity) properties. The problem of pseudogap formation is examined, including the Fermi arc formation and the partial destruction of the Fermi surface; the metal–insulator transition in the disordered Anderson–Hubbard model; and the general picture of kink formation in the electronic spectra of strongly correlated systems. A generalization of the DMFT + Σ approach to realistic materials with strong electron-electron correlations is presented based on the LDA + DMFT method. The general scheme of LDA + DMFT method is reviewed, as are some of its applications to real systems. The generalized LDA + DMFT + Σ approach is employed to calculate pseudogap states in electron- and hole-doped HTSC cuprates. Comparisons with angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) results are presented.

PACS numbers: 71.10.Fd, 71.10.Hf, **71.20. – b**, **71.27. + a**, **71.30. + h**, 72.15.Rn, **74.72. – h** DOI: 10.3367/UFNr.0182.201204a.0345

Bibliography — 190 references

Received 20 June 2011

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **182** (4) 345–378 (2012)

Physics–Uspekhi **55** (4) (2012)