



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
ИНСТИТУТ ЭЛЕКТРОФИЗИКИ

ЭЛЕКТРОФИЗИКА НА УРАЛЕ

**ЧЕТВЕРТЬ ВЕКА
ИССЛЕДОВАНИЙ**

ЕКАТЕРИНБУРГ • 2011

УДК 53
ББК 22.3
Э455

*Рекомендовано к изданию
ученым советом Института электрофизики
Уральского отделения РАН*

Ответственный редактор: член-корреспондент РАН
доктор технических наук **В.Г. Шпак**

Э455 **Электрофизика на Урале: четверть века исследований** / Отв. ред. В.Г. Шпак;
Ин-т электрофизики УрО РАН. – Екатеринбург: УрО РАН, 2011. – 456 с.

ISBN 978-5-7691-2229-3

В коллективной монографии освещены основные научные направления, развиваемые в Институте электрофизики УрО РАН вот уже четверть века. Обобщены исследования в области мощной импульсной техники, создания устройств сильноточной электроники, физики электрического разряда и низкотемпературной плазмы, свойств наноразмерных порошков, новых материалов на их основе.

Для специалистов в области электрофизики, сильноточной энергетики и электроники, нанотехнологий и технологий ионно-лучевой модификации материалов, а также аспирантов, магистрантов и студентов физико-технических вузов.

УДК 53
ББК 22.3



ISBN 978-5-7691-2229-3

© Институт электрофизики
УрО РАН, 2011 г.

Раздел IV

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Глава 19

ОБОБЩЕННАЯ ТЕОРИЯ ДИНАМИЧЕСКОГО СРЕДНЕГО ПОЛЯ В ФИЗИКЕ СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ

1. Сильно коррелированные системы. Теория динамического среднего поля (DMFT)

В последние десятилетия центр тяжести экспериментальных и теоретических исследований в области физики конденсированного состояния значительно сместился в область переходных и редкоземельных элементов с незаполненными $3d$ -, $4f$ - и $5f$ -оболочками и их химических соединений. Фазовый переход металл–диэлектрик, наблюдаемый во многих оксидах переходных металлов, системы с тяжелыми фермионами, в которых обнаружилось огромное разнообразие фазовых переходов и связанных с ними явлений, манганиты с их гигантским магнетосопротивлением – все это вызвало пристальное внимание исследователей. Самым значительным событием стало открытие высокотемпературной сверхпроводимости в оксидах переходных металлов, вызвавшее новую волну интереса к синтезу и описанию таких систем.

Все разнообразие физических явлений во всех этих соединениях обусловлено незаполненными $3d$ -, $4f$ - и $5f$ -оболочками. Сильное взаимодействие электронов из узких энергетических зон таких орбиталей между собой или с коллективизированными электронами внешних оболочек в основном и формирует уникальные свойства этих систем. Такие системы с сильным взаимодействием электронов получили название *сильно коррелированных систем* (СКС).

Начиная с пионерских работ Хаббарда [1] в начале 1960-х гг. простейшей моделью, позволяющей описать свойства таких систем, служит модель, получившая его имя. *Гамильтониан однозонной модели Хаббарда* имеет вид

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (19.1)$$

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

Почти 30 лет не удавалось найти удовлетворительного подхода к анализу СКС. Казалось, что теория этих систем так и останется фрагментарной и полуколичественной. Прорыв был сделан в 1989 г. в работе [2] Метцнера и Вольхардта. Они предложили формально рассматривать систему сильно взаимодействующих электронов в пространстве с большой пространственной размерностью $d \rightarrow \infty$ (или в решетке с большим координационным числом $z \rightarrow \infty$ ³⁹).

В этом пределе оказывается возможным пренебречь пространственными флуктуациями в системе, оставив только динамические. В работе [2] было показано, что в пределе бесконечной размерности пространства (или, что более точно, в пределе бесконечно большого координационного числа) основную роль играют только локальные вклады в *собственно энергетическую часть* (СЭЧ) полной функции Грина (ФГ), а все нелокальные вклады пропорциональны $1/\sqrt{z} \sim 1/\sqrt{d}$ и могут быть отброшены. Таким образом, в этом пределе СЭЧ электрона не зависит от импульса \mathbf{k} , а является лишь функцией частоты, действительной (ω) или мацубаровской (ω_n)⁴⁰:

$$\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \Sigma_\sigma(\omega). \quad (19.2)$$

Это утверждение и есть основное упрощение, возникающее в пределе $d \rightarrow \infty$ [3–5].

На самом деле в пределе $d \rightarrow \infty$ СЭЧ не только локальна, но и в любой «скелетной» диаграмме для нее во всех вершинах фигурирует, как показано на рис. 19.1, только один узел (например i -й), т. е. СЭЧ является функционалом $\Sigma_{ii,\sigma} = F[G_{ii,\sigma}]$ от локальной полной функции Грина $G_{ii,\sigma}$. Вообще говоря, этого еще не достаточно, чтобы задача стала чисто локальной, поскольку полная функция Грина $G_{ii,\sigma}$ по-прежнему нелокальна. Возникает вопрос: нельзя ли подобрать чисто локальную задачу, пусть и со сложной динамикой в отсутствие взаимодействия U , которая давала бы такую же

³⁹ В гиперкубической решетке $z = 2d$, и эти два предела по сути совпадают, однако и для трехмерной решетки z может быть достаточно велико: для объемноцентрированной $z = 8$, для гранецентрированной $z = 12$. Так что правильнее говорить о пределе больших z .

⁴⁰ Большие координационные числа позволяют с успехом использовать это как приближение и при достаточно малых d .

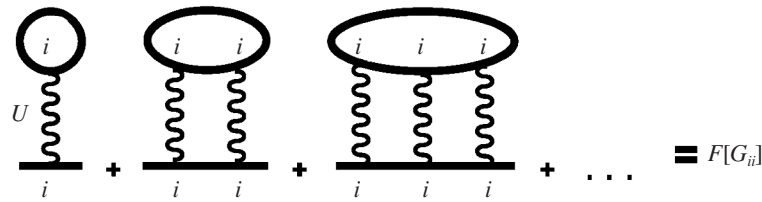


Рис. 19.1. «Скелетные» диаграммы для локальной СЭЧ DMFT (волнистые линии – локальное (хаббардовское) кулоновское взаимодействие U , сплошные – локальные функции Грина G_{ii})

СЭЧ? Ответ положительный. Пусть $\zeta_{\sigma}(\omega)$ – «свободная» динамическая функция Грина такой локальной задачи в отсутствие взаимодействия U , а $G_{d\sigma}(\omega)$ и $\Sigma_{d\sigma}(\omega)$ – ее полная функция Грина и СЭЧ. Если обеспечить равенство $G_{d\sigma}(\omega) = G_{ii,\sigma}(\omega)$, то равны и СЭЧ, 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 ζ_{σ} , $G_{d\sigma}$ и $\Sigma_{d\sigma}$ связаны уравнением Дайсона, которое немедленно дает интересующую нас «свободную» динамическую функцию Грина локальной задачи:

$$\zeta_{\sigma}^{-1}(\omega) = \Sigma_{\sigma}(\omega) + G_{ii,\sigma}^{-1}(\omega). \tag{19.3}$$

Таким образом, решеточная модель Хаббарда в пределе $d \rightarrow \infty$ сводится к чисто локальной динамической задаче. Физически она соответствует, как показано на рис. 19.2, рассмотрению взаимодействующих электронов на одной примеси, помещенной в резервуар, где все воздействие резервуара сводится к динамическому среднему полю $G(\omega)$, достаточно часто, по аналогии с теорией молекулярного поля в магнетизме, называемому «полем Вейсса». Это и определило название такого подхода – теория динамического среднего поля (*dynamical mean field theory, DMFT*).

Такая чисто динамическая задача все еще достаточно сложна. Однако она полностью эквивалентна однопримесной модели Андерсона (SIAM) [6]. Эта модель уже давно детально исследована различными методами, и физика, содержащаяся в ней, хорошо понятна. Для этой модели развиты неплохо работающие приближенные аналитические методы – такие, как итеративная теория возмущений (IPT) [4] и приближение непересекающихся диаграмм (NSA) [7, 8], но самое замечательное, что модель поддается точному численному моделированию, например, методами квантового Монте-Карло (QMC) [9] или численной ренорм-группы (NRG) [10, 11]. Решение эффективной однопримесной модели Андерсона тем или иным способом (или, как часто говорят, тем или иным *impurity solver*) замыкает общую схему DMFT-подхода.

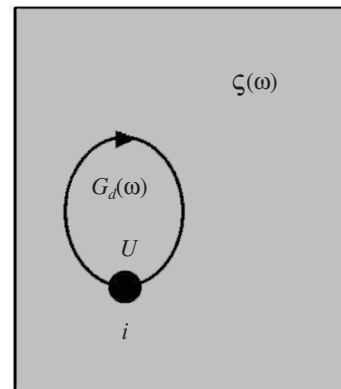


Рис. 19.2. Решеточная модель Хаббарда в DMFT-представлении

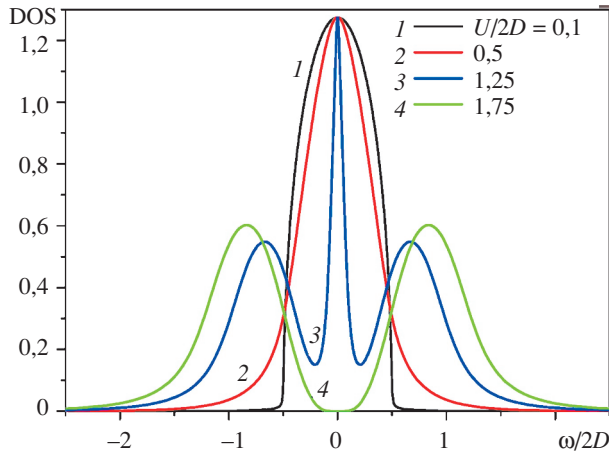


Рис. 19.3. Электронные плотности состояний 1–4, получаемые в *DMFT*

описание получил и *мюитт-халлбардовский переход* металл–диэлектрик. На рис. 19.3 показаны плотности состояний, получаемые в *DMFT* (*NRG*) при половинном заполнении из «затравочной» полуэллиптической *DOS* с шириной зоны $2D$. С ростом силы корреляций U в *DOS* формируется характерная трехпиковая структура, а с дальнейшим ростом U при $U/2D \approx 1,5$ квазичастичный пик схлопывается и происходит переход металл–диэлектрик.

В рамках *DMFT* оказалось возможным исследовать и ряд двухчастичных свойств. В частности, легко может быть получена *оптическая (динамическая) проводимость* [4, 12]. В последние годы *DMFT* была обобщена для *ab initio* расчетов «реалистичных» СКС путем ее объединения с первопринципной одноэлектронной теорией функционала плотности в приближении локальной плотности (*DFT/LDA*) в единую комбинированную расчетную схему *LDA + DMFT* [13–17].

При всех несомненных достоинствах, *DMFT*-подход имеет ряд недостатков. В частности, он полностью пренебрегает *нелокальными корреляциями*. За последние годы в целях преодоления этого недостатка предложен ряд кластерных обобщений *DMFT* [18, 19]. Однако такие методы требуют существенных затрат численных ресурсов и вследствие этого сильно ограничены как по размерам кластера, так и по возможности обобщения для многоорбитального случая. Кроме того, в таких подходах крайне затруднено исследование двухчастичных свойств. Для преодоления этих проблем нами было предложено [20–23] новое обобщение *DMFT*, позволяющее рассматривать нелокальные корреляции или дополнительные (по отношению к халлбардовскому) взаимодействия (в принципе любого типа), оставаясь в рамках однопримесной картины *DMFT* и сохраняя неизменной самосогласованную систему ее уравнений.

DMFT, по-видимому, является на сегодня вершиной современного теоретического описания СКС. В рамках такого подхода впервые была получена так называемая *трехпиковая структура* электронной плотности состояний СКС [4], состоящая из узкого центрального (квазичастичного) пика на уровне Ферми и двух широких боковых максимумов, соответствующих верхней и нижней халлбардовским зонам. Надежное теоретическое

2. Обобщенный DMFT + Σ_k -подход

Для определенности будем в дальнейшем рассматривать стандартную однозонную модель Хаббарда. Обобщение на многоорбитальную или многозонную модели также возможно. Главным предположением нашего подхода является выбор решеточной мацубаровской одночастичной функции Грина в виде

$$G_k(i\omega) = \frac{1}{i\omega + \mu - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega) - \Sigma_k(i\omega)}, \quad \omega = \pi T(2n+1), \quad (19.4)$$

где $\Sigma(i\omega)$ – локальная СЭЧ DMFT-типа, возникающая от хаббардовского взаимодействия, а $\Sigma_k(i\omega)$ – некоторая «внешняя» (в общем случае нелокальная, зависящая от импульса) СЭЧ. Этот последний вклад может происходить от взаимодействия электронов с некоторыми «дополнительными» коллективными модами или флуктуациями параметра порядка, возникающими в рамках самой модели Хаббарда, но может быть вызван и любыми другими взаимодействиями (флуктуациями), внешними по отношению к стандартной модели Хаббарда, например, фононами или рассеянием на примесях, когда он тоже является фактически локальным (не зависящим от импульса).

Необходимо подчеркнуть, что $\Sigma_k(i\omega)$ может содержать локальный (импульсно независимый) вклад, даже если СЭЧ рассматривать в рамках самой модели Хаббарда, однако этот вклад *исчезает* в пределе бесконечной размерности пространства $d \rightarrow \infty$ и не учитывается в DMFT, вследствие этого в нашем подходе не существует проблемы двойного учета диаграмм даже в этом случае. Этот вопрос вообще не возникает, если мы рассматриваем $\Sigma_k(i\omega)$, возникающее вследствие некоторого «добавочного» взаимодействия. Более важным является то, что предположение об аддитивной форме СЭЧ $\Sigma(i\omega) + \Sigma_k(i\omega)$ неявно соответствует пренебрежению интерференцией этого локального (DMFT) и нелокального вкладов. Действительно, в пренебрежение такой интерференцией (диаграммы, аналогичные представленной на рис. 19.4, б) полная СЭЧ определяется простой суммой этих двух вкладов (рис. 19.4, а). Две последние диаграммы (см. рис. 19.4, а) – пример «скелетных» диаграмм для нелокальной СЭЧ, где сплошная линия обозначает функцию Грина G_k , определяемую (19.4), а штриховая – «добавочное» взаимодействие с коллективными модами или флуктуациями параметра порядка.

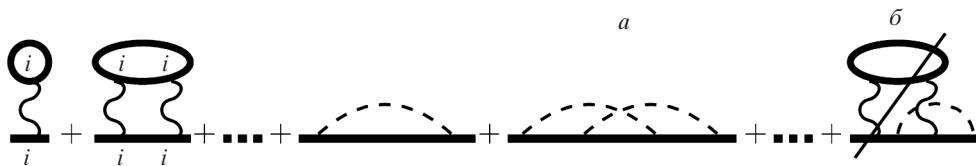


Рис. 19.4. Типичные «скелетные» диаграммы для СЭЧ в DMFT+ Σ_k -подходе

В результате структура диаграмм для локальной СЭЧ оказывается такой же, как в стандартной *DMFT*, и возникает следующая самосогласованная система уравнений нашего обобщенного *DMFT* + $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подхода [21–23]:

1. Стартуем с некоторой $\Sigma(i\omega)$ начального предположения для *локальной* СЭЧ, например, $\Sigma(i\omega) = 0$.

2. Строим $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ в рамках некоторой (возможно, приближенной) схемы, учитывающей взаимодействие с коллективными модами или флуктуациями параметра порядка, которая в общем случае сама может зависеть от $\Sigma(i\omega)$ и μ .

3. Вычисляем локальную функцию Грина:

$$G_{ii}(i\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega) - \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)}. \quad (19.5)$$

4. Определяем «поле Вейса»:

$$\zeta_0^{-1}(i\omega) = \Sigma(i\omega) + G_{ii}^{-1}(i\omega). \quad (19.6)$$

5. Используя некоторый *impurity solver* вычисляем одночастичную функцию Грина эффективной задачи Андерсона

$$G_d(\tau - \tau') = \frac{1}{Z_{eff}} \int Dc_{i\sigma}^+ Dc_{i\sigma} c_{i\sigma}(\tau) c_{i\sigma}^+(\tau') \exp(-S_{eff}) \quad (19.7)$$

с эффективным действием для фиксированного узла («примеси») i :

$$S_{eff} = -\int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 c_{i\sigma}(\tau_1) \zeta_0^{-1}(\tau_1 - \tau_2) c_{i\sigma}^+(\tau_2) + \int_0^\beta d\tau U n_{i\uparrow}(\tau) n_{i\downarrow}(\tau), \quad (19.8)$$

$$Z_{eff} = \int Dc_{i\sigma}^+ Dc_{i\sigma} \exp(-S_{eff}), \text{ и } \beta = T^{-1}.$$

6. Определяем *новую* локальную СЭЧ:

$$\Sigma(i\omega) = \zeta_0^{-1}(i\omega) - G_d^{-1}(i\omega). \quad (19.9)$$

7. Используя эту СЭЧ как «начальную» на шаге 1, продолжаем процедуру до тех пор, пока с достаточной точностью не получим

$$G_{ii}(i\omega) = G_d(i\omega). \quad (19.10)$$

В итоге мы имеем желаемую функцию Грина в виде (19.4), где $\Sigma(i\omega)$ и $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ – собственно-энергетические части, получаемые в конце нашей итерационной процедуры.

Успех нашего обобщенного подхода (и его основной недостаток) связан с аддитивной формой полной СЭЧ (пренебрежение интерференцией между разными вкладками) в уравнении (19.4). Это позволяет сохранить систему самосогласованных уравнений стандартной *DMFT*. Однако существует два отличия от традиционной *DMFT*. Во-первых, локальная функция Грина эффективной однопримесной задачи имеет вид (19.5) на каждом шаге стандартной *DMFT*-процедуры. Во-вторых, на каждой *DMFT*-итерации мы пересчитываем

соответствующую «внешнюю» СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ помощью некоторой приближенной схемы, учитывающей взаимодействие, например, с коллективными модами (фононы, магноны и т. д.) или с некоторыми флуктуациями параметра порядка. Для определения нелокального вклада $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ удобно ввести

$$\zeta_{0\mathbf{k}}(i\omega) = \frac{1}{G_{\mathbf{k}}^{-1}(i\omega) + \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)} = \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega)}, \quad (19.11)$$

играющую роль «голой» функции Грина при построении теории возмущений по «внешнему» взаимодействию. Выбор «голой» функции Грина в виде (19.11) гарантирует, что «одетая» таким взаимодействием функция Грина $G_{\mathbf{k}}^{-1}(i\omega) = \zeta_{0\mathbf{k}}^{-1}(i\omega) - \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$, которая входит в «скелетные» диаграммы для $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$, точно совпадает с полной функцией Грина $G_{\mathbf{k}}(i\omega)$.

Замечательной особенностью нашего подхода является возможность его обобщения для исследования ряда *двухчастичных* свойств – таких, как, например, оптическая проводимость [24, 25]. Проводимость системы выражается через запаздывающую функцию отклика плотность–плотность $\chi^R(\omega, \mathbf{q})$ [26, 27]:

$$\sigma(\omega) = -\lim_{q \rightarrow 0} \frac{ie^2\omega}{q^2} \chi^R(\omega, \mathbf{q}), \quad (19.12)$$

где e – заряд электрона, который определяется аналитическим продолжением на действительные частоты полной поляризационной петли в мацубаровском представлении [26]. Отметим, что проводимость полностью определяется первой производной по q^2 при $q \rightarrow 0$ от такой функции отклика. Это обстоятельство, а также то, что *DMFT* + Σ -приближение пренебрегает интерференцией между локальным хаббардовским и «внешним» взаимодействием, а неприводимые вершины от локального хаббардовского взаимодействия являются локальными, позволяет провести частичное пересуммирование интересных 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 [24, 25]:

$$\begin{aligned} \text{Re} \sigma(\omega) = \frac{e^2\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon [f(\varepsilon_-) - f(\varepsilon_+)] \text{Re} \left\{ \Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega) \left[1 - \frac{\Sigma^R(\varepsilon_+) - \Sigma^A(\varepsilon_-)}{\omega} \right]^2 - \right. \\ \left. - \Phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega) \left[1 - \frac{\Sigma^R(\varepsilon_+) - \Sigma^R(\varepsilon_-)}{\omega} \right]^2 \right\}, \quad (19.13) \end{aligned}$$

где

$$\Phi_{\varepsilon}^{0RR(RA)}(\omega) = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\Phi_{\varepsilon}^{0RR(RA)}(\omega, \mathbf{q}) - \Phi_{\varepsilon}^{0RR(RA)}(\omega, 0)}{q^2} \quad (19.14)$$

и введены двухчастичные функции Грина:

$$\Phi_{\epsilon}^{ORR(RA)}(\omega, \mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} G^R(\epsilon_+, \mathbf{k}_+) G^{R(A)}(\epsilon_-, \mathbf{k}_-) \Gamma^{RR(RA)}(\epsilon_-, \mathbf{k}_-; \epsilon_+, \mathbf{k}_+), \quad (19.15)$$

диаграммное представление для которых приведено на рис. 19.5 ($\mathbf{k}_{\pm} = \mathbf{k} \pm \frac{\mathbf{q}}{2}$, $\epsilon_{\pm} = \epsilon \pm \frac{\omega}{2}$). Вершины $\Gamma^{RR(RA)}(\epsilon_-, \mathbf{k}_-; \epsilon_+, \mathbf{k}_+)$ содержат все вершинные поправки от примесного рассеяния, но не включают вершинных поправок от Хаббардовского взаимодействия.

Таким образом достигается существенное упрощение нашей задачи. Для вычисления оптической проводимости в *DMFT* + Σ -приближении мы должны решить только одночастичную задачу определения локальной СЭЧ $\Sigma(\epsilon_{\pm})$ с помощью *DMFT* + Σ -процедуры, описанной выше, а нетривиальный вклад от нелокальных корреляций входит посредством (19.14), которые могут быть вычислены в подходящем приближении, учитывая только «внешнее» взаимодействие, но используя в качестве «свободной» гриновскую функцию (19.11), включающую локальную СЭЧ, уже определенную в *DMFT* + Σ -процедуре. Фактически уравнение (19.13) обеспечивает также эффективный алгоритм для вычисления оптической проводимости в рамках стандартного *DMFT* (пренебрегая всеми нелокальными корреляциями). Тогда значение (19.14) легко находится из простой петлевой диаграммы, определяемой двумя функциями Грина и свободными скалярными вершинами. Следовательно, для определения проводимости нет необходимости вычислять вершинные поправки в рамках самого *DMFT*, как это было впервые показано при рассмотрении петли с векторными вершинами [4, 12].

3. Применения *DMFT*+ Σ -подхода

3.1. Сильно коррелированные системы в псевдощелевом состоянии

Ярким примером сильно коррелированных систем служат ВТСП-купраты. «Родительские» стехиометрические соединения купратов являются антиферромагнитными диэлектриками с хорошо определенной оптической щелью и антиферромагнетизмом, обусловленным упорядочением локализованных спинов на медных ионах, с температурой Нееля сотни градусов К.

Такое диэлектрическое состояние быстро разрушается введением небольшого количества легирующих примесей. Эти системы можно отнести к разряду легированных моттовских диэлектриков с сильными электронными корреляциями.

Среди многочисленных аномалий нормальной фазы высокотемпе-

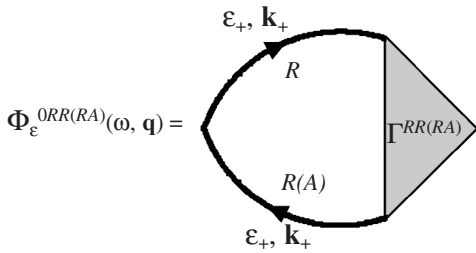


Рис. 19.5. Диаграммное представление $\Phi_{\epsilon}^{ORA}(\omega, \mathbf{q})$ и $\Phi_{\epsilon}^{ORR}(\omega, \mathbf{q})$

ратурных сверхпроводников особый интерес вызывает наблюдение псевдощели в электронном спектре недодопированных купратов [28, 29]. Несмотря на продолжающиеся дискуссии о природе псевдощели, предпочтительным, с нашей точки зрения, «сценарием» ее формирования служит модель сильного рассеяния носителей заряда на антиферромагнитных (*AFM*, *SDW*)-спиновых флуктуациях ближнего порядка [29, 30]. В импульсном представлении, это рассеяние с импульсами переброса порядка $\mathbf{Q} = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$ (a – параметр двумерной решетки).

Это приводит к формированию в одночастичном спектре структур, которые предвещают изменения в спектре вследствие дальнего *AFM*-порядка (удвоения периода). В результате мы получаем *нефермижидкостное* поведение (дизлектризацию) спектральной плотности вблизи так называемых «горячих точек» на поверхности Ферми, возникающих на пересечении поверхности Ферми с границей антиферромагнитной зоны Бриллюэна [29].

В рамках такого спин-флуктационного сценария упрощенная модель псевдощелевого состояния изучалась в [29, 31, 32] в предположении, что для достаточно высоких температур динамикой спиновых флуктуаций можно пренебречь и рассматривать рассеяние на статическом гауссовом случайном поле (замороженный беспорядок) псевдощелевых флуктуаций. Эти флуктуации характеризуются узким пиком векторов рассеяния вблизи \mathbf{Q} с шириной, определяемой обратной корреляционной длиной ближнего порядка $\kappa = \xi^{-1}$, и соответствующим энергетическим масштабом Δ (обычно порядка температуры кроссовера T^* в псевдощелевое состояние).

Поэтому для импульсно зависящей СЭЧ мы сейчас сосредоточимся на случае рассеяния электронов на *SDW*-подобных антиферромагнитных спиновых (или *CDW*-подобных зарядовых) флуктуациях ближнего порядка. Для расчета $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$ для электронов, движущихся в замороженном случайном поле гауссовых спиновых (или зарядовых) флуктуаций с доминирующим импульсом рассеяния вблизи характерного вектора \mathbf{Q} (модель «горячих точек» [29]), мы используем обобщенную версию рекуррентной процедуры, предложенной в [31–33], которая позволяет учесть *все фейнмановские диаграммы*, описывающие рассеяние электронов этим случайным полем. Это становится возможным вследствие замечательного свойства упрощенной модели «горячих точек»: **вклад произвольной диаграммы с пересечением линий взаимодействия равен вкладу некоторой диаграммы такого же порядка без пересечения этих линий** [33]. Таким образом, мы можем ограничиться рассмотрением только диаграмм без пересечения линий взаимодействия, учтя вклад других диаграмм с помощью комбинаторных множителей, приписываемых «начальным» вершинам или линиям взаимодействия [33]. В результате получаем следующее рекуррентное соотношение (представление непрерывной дробью [33]) для СЭЧ:

$$\Sigma_n(i\omega, \mathbf{k}) = \Delta^2 \frac{s(n)}{i\omega + \mu - \Sigma(i\omega) - \varepsilon_n(\mathbf{k}) + inv_n \kappa - \Sigma_{n+1}(i\omega, \mathbf{k})}. \quad (19.16)$$

Член $\Sigma_n(i\omega, \mathbf{k})$ рекуррентной процедуры содержит все вклады диаграмм с числом линий взаимодействия $\geq n$. Тогда

$$\Sigma_k(i\omega) = \Sigma_{n=1}(i\omega, \mathbf{k}) \quad (19.17)$$

является суммой всех диаграммных вкладов. Поскольку эта рекуррентная процедура для $\Sigma_n(i\omega, \mathbf{k})$ сходится достаточно быстро, можно положить $\Sigma_n(i\omega, \mathbf{k})$ для достаточно больших n равным нулю и, используя рекуррентную процедуру, при $n = 1$ получаем желаемую физическую СЭЧ [32].

Величина Δ характеризует энергетический масштаб (ширину) псевдощели; $\kappa = \xi^{-1}$ – обратная корреляционная длина $SDW(CDW)$ -флуктуаций; $\epsilon_n(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ и $v_n = |v_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^x| + |v_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^y|$ – для нечетных n , а $\epsilon_n(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})$ и $v_n = |v_{\mathbf{k}}^x| + |v_{\mathbf{k}}^y|$ – для четных n . Проекции скорости $v_{\mathbf{k}}^x$ и $v_{\mathbf{k}}^y$ определяются обычной производной по импульсу «голой» электронной энергетической дисперсии $\epsilon(\mathbf{k})$. Наконец, $s(n)$ представляет комбинаторные множители (определяющие число совпадающих диаграмм)

$$s(n) = n \quad (19.18)$$

для случая соизмеримых зарядовых (CDW -тип) флуктуаций с $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ [33].

Для несоизмеримых CDW -флуктуаций [33] (когда \mathbf{Q} не связан с периодом обратной решетки) имеем:

$$s(n) = \begin{cases} \frac{n+1}{2} & \text{для нечетных } n, \\ \frac{n}{2} & \text{для четных } n. \end{cases} \quad (19.19)$$

Если мы хотим учесть спиновую (гейзенберговскую) структуру взаимодействия со спиновыми флуктуациями в «почти антиферромагнитной фермижидкости» (спин-фермионная модель [31]), 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 работы [31]). В такой модели рекуррентное соотношение (19.16) для одночастичной функции Грина сохраняется, но комбинаторный множитель $s(n)$ имеет вид [31]:

$$s(n) = \begin{cases} \frac{n+2}{3} & \text{для нечетных } n, \\ \frac{n}{3} & \text{для четных } n. \end{cases} \quad (19.20)$$

Очевидно, что с этой процедурой мы вводим важный масштаб длины ξ , не присутствующий в стандартном $DMFT$. Физически этот масштаб отражает влияние флуктуаций ближнего порядка (SDW или CDW) на электронный

«резервуар», окружающий эффективную андерсоновскую примесь в *DMFT*.

После получения самосогласованного решения системы *DMFT*+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -уравнений (19.5–19.10), учитывающих и нелокальные флуктуации, мы можем рассчитать спектральную плотность $A(\omega, \mathbf{k})$:

$$A(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(\omega) - \Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)}, \quad (19.21)$$

где СЭЧ $\Sigma(\omega)$, $\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)$ и химический потенциал μ уже самосогласованно вычислены. Плотность состояний может быть рассчитана интегрированием (19.21) по зоне Бриллюэна.

Такой подход может быть развит и для нахождения двухчастичных вершин. Основная идея, используемая здесь, заключается в том, что произвольная диаграмма для вершинной части может быть получена вставкой линии «внешнего поля» в соответствующую диаграмму для СЭЧ [34–36]. В нашей модели мы можем ограничиться диаграммами с непересекающимися линиями взаимодействия, учтя вклад остальных диаграмм комбинаторными множителями, приписываемыми «начальным» вершинам взаимодействий (или линиям взаимодействия) [31–33]. Таким образом, все диаграммы для вершинной части порождаются простыми «лестничными» диаграммами с дополнительными $s(n)$ -множителями, связанными с линиями взаимодействия [35, 36] (см. также [27]). Тогда мы получаем систему рекуррентных соотношений для вершинной части $\Gamma^{RA}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-; \varepsilon_+, \mathbf{k}_+)$ [36], где мы также включили вклад от локальной (*DMFT*) СЭЧ, получаемой из *DMFT*+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -процедуры:

$$\begin{aligned} \Gamma_{n-1}^{RA}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-; \varepsilon_+, \mathbf{k}_+) &= 1 + \Delta^2 s(n) G_n^A(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-) G_n^R(\varepsilon_+, \mathbf{k}_+) \times \\ &\times \left\{ 1 + \frac{2i v_n \kappa n}{\omega - \varepsilon_n(\mathbf{k}_+) + \varepsilon_n(\mathbf{k}_-) - \Sigma^R(\varepsilon_+) + \Sigma^A(\varepsilon_-) + \Sigma_{n+1}^R(\varepsilon_+, \mathbf{k}_+) + \Sigma_{n+1}^A(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-)} \right\} \times \\ &\times \Gamma_n^{RA}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-; \varepsilon_+, \mathbf{k}_+); \end{aligned} \quad (19.22)$$

и

$$G_n^{R,A}(\varepsilon_{\pm}, \mathbf{k}_{\pm}) = \frac{1}{\varepsilon_{\pm} - \varepsilon_n(\mathbf{k}_{\pm}) \pm i v_n \kappa - \Sigma^{R,A}(\varepsilon_{\pm}) - \Sigma_{n+1}^{R,A}(\varepsilon_{\pm}, \mathbf{k}_{\pm})}. \quad (19.23)$$

«Физическая» вершина $\Gamma^{RA}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-; \varepsilon_+, \mathbf{k}_+)$ определяется как $\Gamma_{n=0}^{RA}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-; \varepsilon_+, \mathbf{k}_+)$. Рекуррентная процедура (19.22) учитывает *все* диаграммы теории возмущений для вершинной части. Для $\kappa \rightarrow 0$ ($\xi \rightarrow \infty$) (19.22) сводится к ряду, исследованному в [34] (см. также [31]), который может быть точно просуммирован в аналитической форме. Стандартное «лестничное» приближение соответствует в нашей схеме случаю комбинаторных множителей $s(n)$ в (19.22), равных 1 [35].

Рекуррентная процедура для $\Gamma^{RR}(\varepsilon_-, \mathbf{k}_-; \varepsilon_+, \mathbf{k}_+)$ отличается от (19.22) только очевидной заменой $A \rightarrow R$, а также заменой всего выражения в фигурных скобках в правой части (19.22) на 1.

Уравнения (19.4), (19.16), (19.22) совместно с (19.14) и (19.13) дают полностью самосогласованную процедуру для расчета оптической проводимости в нашей модели в рамках $DMFT+\Sigma_k$ -подхода.

Важной стороной теории является также то, что оба параметра, Δ и ξ , могут быть, в принципе, вычислены из микроскопической модели. Например, используя двухчастичный самосогласованный подход работы [37] совместно с вводимыми в [31, 32] приближениями, в [20, 22] для двумерной модели Хаббарда было получено микроскопическое выражение для Δ , которое можно рассчитать в рамках стандартной $DMFT$. Было продемонстрировано, что в широком интервале дырочного допирования амплитуда псевдощели Δ лежит в интервале от t до $2t$ (t – интеграл перескока на ближайших соседях).

3.1.1 Результаты и обсуждение. Обсудим результаты для стандартной однозонной модели Хаббарда на квадратной решетке с интегралами перескоков на первых (t) и вторых (t') ближайших соседях, 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 шкалы энергий выбираем интеграл перескока на ближайших соседях t , а для шкалы длин – постоянную решетки a . В качестве *impurity solvers* использовался метод *численной ренормализационной группы (NRG)* [10, 11]. Большое количество результатов исследования одночастичных свойств, демонстрирующих псевдощелевые аномалии, можно найти в [20–23], оптической проводимости – в [24], здесь мы остановимся только на наиболее ярких результатах, в основном соответствующих случаю $t'/t = -0,4$ (более или менее типичному для купратов) и заполнению $n = 0,8$ (дырочное допирование).

Плотность состояний и спектральная плотность. Начнем обсуждение результатов, получаемых в обобщенном $DMFT+\Sigma_k$ -подходе, с плотностей состояний (DOS) для случая малого (относительно ширины зоны) кулоновского взаимодействия $U = 4t$. Характерной чертой сильно коррелированного металлического состояния является сосуществование нижних и верхних хаббардовских зон, расщепленных кулоновским взаимодействием U с квазичастичным пиком на уровне Ферми [4, 12]. Поскольку невозмущенная DOS на квадратной решетке имеет сингулярность Ван-Хова вблизи уровня Ферми, невозможно трактовать пик на уровне Ферми просто как квазичастичный пик. Фактически имеется два вклада в этот пик: (i) от квазичастичного пика, появляющегося в сильно коррелированных металлах вследствие многочастичных эффектов, и (ii) сглаженной сингулярности Ван-Хова в невозмущенной DOS ⁴¹.

На рис. 19.6, а показаны $DMFT+\Sigma_k$ -плотности состояний для $n = 0,8$ в случае $t'/t = -0,4$ и $t' = 0$ для двух различных температур $T = 0,356t$ и $T = 0,088t$.

⁴¹Нами проверялось, что с увеличением кулоновского отталкивания сингулярность Ван-Хова непрерывно трансформируется в квазичастичный пик при $U = (6-8)t$.

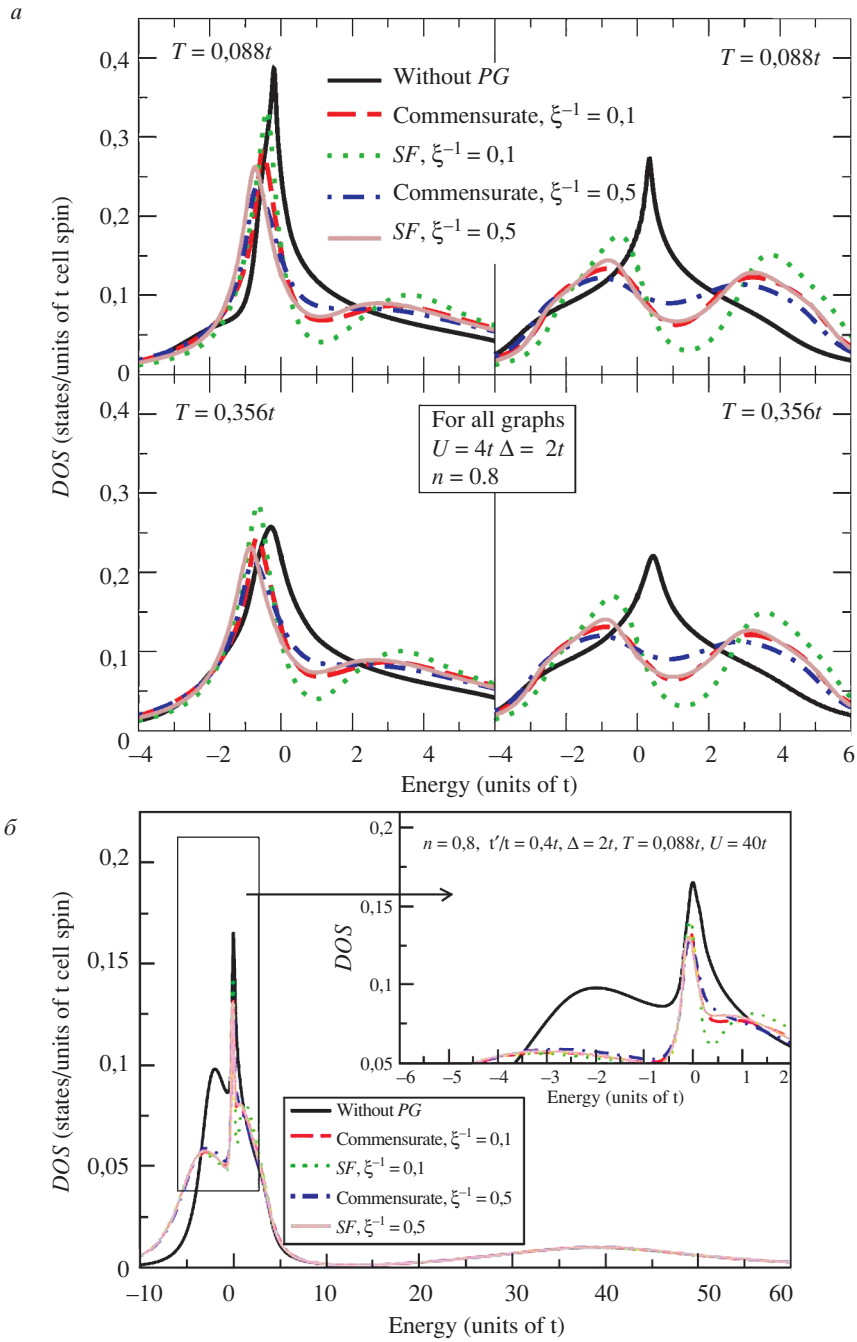


Рис. 19.6. Плотности состояний, полученных в [22] $DMFT(NRG)+\Sigma_k$ -расчетами для различных комбинаторных множителей (SF – спин-фермионная модель, соизмеримые флуктуации), обратных корреляционных длин (ξ^{-1}) в единицах постоянной решетки с псевдощелевой амплитудой $\Delta = 2t$ и заполнением $n = 0,8$: *a* – $U = 4t$, $t'/t = -0,4$ (левая колонка); $t'/t = 0$ (правая колонка); температура $T = 0,088t$ (сверху) и $T = 0,356t$ (внизу); *b* – $U = 40t$; $T = 0,088t$. Уровень Ферми соответствует нулю энергии

Черные кривые получены в отсутствие флуктуаций. Остальные кривые представляют результаты для DOS с нелокальными флуктуациями с 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 вблизи уровня Ферми) порядка $\sim 2\Delta$. Уменьшение величины Δ от $2t$ до t приводит к двукратному уменьшению ширины псевдощели и уменьшению ее глубины. При использовании комбинаторных факторов, соответствующих спин-фермионной модели (см. (19.20)), псевдощель оказывается более выраженной, чем в случае соизмеримых зарядовых флуктуаций (комбинаторные факторы (19.19)). Влияние корреляционной длины соответствует ожидаемому. Изменение ξ^{-1} от 0,1 до 0,5, т. е. уменьшение корреляционной длины, слегка замыкает псевдощель. Увеличение T от $0,088t$ до $0,356t$ приводит к общему уширению структур в плотностях состояний. Следует отметить, что результаты, получаемые в обобщенном $DMFT+\Sigma_k$ -подходе с $U = 4t$ (меньшим, чем ширина зоны W), качественно похожи на полученные ранее в отсутствие хаббардовского взаимодействия [31, 32].

Рассмотрим теперь случай допированного моттовского диэлектрика с силой кулоновского взаимодействия $U = 40t$, $t'/t = -0,4$ и заполнением $n = 0,8$ (рис. 19.6, б). Характерными чертами в DOS для таких сильно коррелированных 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 сейчас далеко справа и не касается квазичастичного пика (в отличие от случая малого кулоновского взаимодействия).

Для достаточно сильных нелокальных флуктуаций $\Delta = 2t$ псевдощель возникает в середине квазичастичного пика. Кроме того, мы наблюдаем, что нижняя хаббардовская зона слегка уширена флуктуационными эффектами. Качественно поведение псевдощелевых аномалий опять похоже на описанное выше для $U = 4t$, т. е. уменьшение ξ замыкает псевдощель, делает ее менее выраженной, уменьшение Δ с $2t$ до t раз сужает псевдощель и делает ее более мелкой (см. [20]). Заметим также, что для допированного моттовского диэлектрика псевдощель заметно более выражена для спиновых SDW -подобных флуктуаций, чем для зарядовых CDW -подобных.

Имеются, однако, и вполне заметные отличия от случая $U = 4t$. Например, ширина псевдощели в DOS оказывается существенно меньше, чем 2Δ , что мы связываем с заметным сужением самого квазичастичного пика локальными корреляциями.

На рис. 19.7 приведена спектральная плотность $A(\omega, \mathbf{k})$, рассчитанная в $DMFT+\Sigma_k$ -подходе для двух видов флуктуаций вдоль высокосимметричных направлений первой зоны Бриллюэна: $\Gamma(0,0) - X(\pi, 0) - M(\pi, \pi) - \Gamma(0,0)$. По сути, на этом рисунке приведена квазичастичная зона, а ширина пиков определяет квазичастичное затухание, и мы можем наблюдать частичную перестройку («разрушение») такой зоны псевдощелевыми флуктуациями. Можно видеть характерную двухпиковую псевдощелевую структуру вбли-

зи X -точки зоны Бриллюэна. В центре M - Γ -направления (так называемая «нодальная» точка) можно видеть возникновение псевдощели как память о 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. остается такой же, как для «голых» квазичастиц [3]. Однако в случае нетривиальной импульсной зависимости СЭЧ, может возникать существенная перенормировка поверхности Ферми вследствие формирования псевдощели [31]. Существует несколько способов определения поверхности Ферми в сильно коррелированных системах с псевдощелевыми флуктуациями. В дальнейшем мы будем использовать диаграмму интенсивности для спектральной плотности (19.21), взятой при $\omega = 0$, часто называемую *картой поверхности Ферми*. Такая карта непосредственно определяется в экспериментах по $ARPES$, и положение максимума интенсивности на ней определяет поверхность Ферми в обычном фермижидкостном случае.

На рис. 19.8, *a* показаны такие карты для случая коррелированного металла с $U = 4t$. Диаграмма интенсивности спектральной плотности ясно демонстрирует «разрушение» поверхности Ферми в «горячих точках» с формированием «дуг Ферми» с ростом Δ , аналогично наблюдаемому в пионерских $ARPES$ -экспериментах Нормана и др. [38] и подтвержденных впоследствии в огромном числе работ. Следует отметить, что качественно аналогичное псевдощелевое поведение наблюдается и в отсутствие электронных корреляций ($U = 0$) [21, 39]. Роль конечных U сводится к уменьшению интенсивности спектральной плотности в сравнении со случаем $U = 0$ и приводит к дополнительному «размытию», делающему «горячие точки» менее заметными. «Разрушение» поверхности Ферми начинается в окрестности «горячих точек» для малых величин Δ , но практически сразу она пропадает во всей антинодальной области (окрестность точек $X(\pi, 0)$, $Y(0, \pi)$) зоны Бриллюэна, а сохраняются только «дуги Ферми» в нодальной области, достаточно близкие к «затравочной» поверхности Ферми.

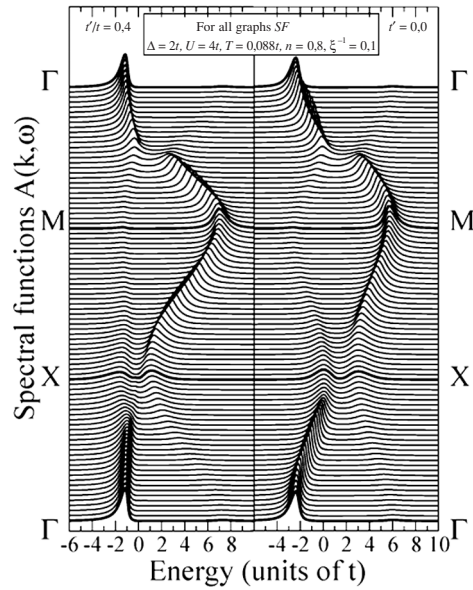


Рис. 19.7: Спектральная плотность $A(\omega, \mathbf{k})$, полученная в [22] из $DMFT(NRG)+\Sigma_{\mathbf{k}}$ -расчетов вдоль высокосимметричных направлений первой зоны Бриллюэна: спин-фермионная комбинаторика (SF) (левая колонка) и соизмеримая комбинаторика (правая колонка). Модельные параметры: $U = 4t$; $n = 0,8$; $\Delta = 2t$; $\xi^{-1} = 0,1$; температура $T = 0,088t$. Уровень Ферми соответствует нулю энергии

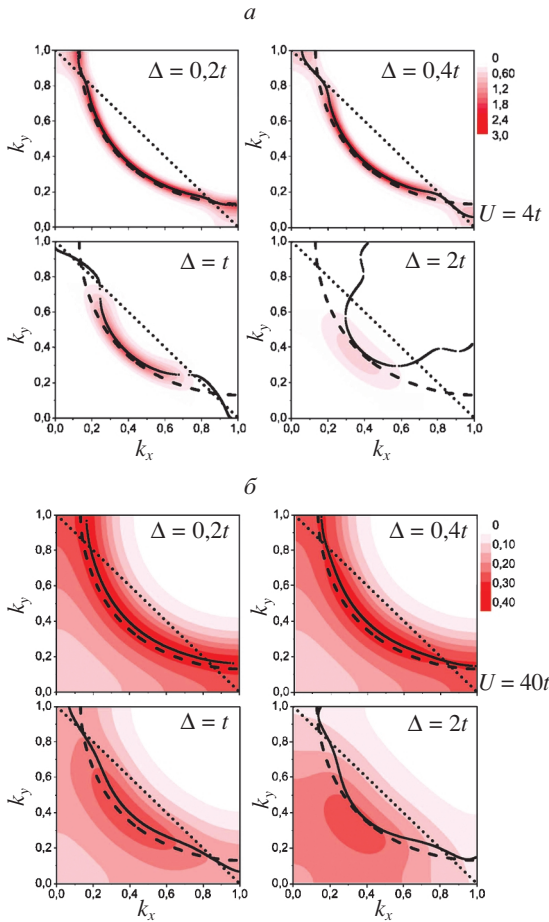


Рис. 19.8: «Разрушение» поверхности Ферми, полученное в [21] $DMFT(NRG)+\Sigma_{\mathbf{k}}$ -расчетами: *a* – для $U = 4t$; *b* – для $U = 40t$. Заполнение $n = 0,8$. Пунктирные линии – «голая» поверхность Ферми. Черными линиями показаны решения уравнения 19.25

ет поверхность Ферми, близкую к получаемой из диаграммы интенсивности при малых Δ , но не учитывает существенное ее размытие, особенно важное при больших Δ . При большой амплитуде псевдощели такое определение поверхности Ферми качественно адекватно реальному поведению, следующему из анализа спектральной плотности, лишь в нодальной области. Именно диаграмма интенсивности спектральной плотности дает наиболее полное и естественное представление о поверхности Ферми в таких системах.

Оптическая проводимость. Приступим к обсуждению результатов, получаемых для оптической проводимости в псевдощелевом состоянии в нашем $DMFT+\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подходе.

Эти результаты дают естественное объяснение наблюдаемому в *ARPES* поведению и тому факту, что существование области «горячих точек» отмечается только в достаточно редких случаях [40]. Более подробно вопрос о возможности наблюдения области «горячих точек» (с примерами таких систем) будет рассмотрен в 3.2 далее.

Для случая допированного моттовского диэлектрика с $U = 40t$ (рис. 19.8, *б*) мы видим, что «поверхность Ферми» достаточно плохо определена для всех величин Δ . Профиль спектральной плотности гораздо более «размыт», чем в случае меньших величин U , и отражает важную роль корреляций.

Для сравнения на рис. 19.8, *а, б* показаны перенормированные поверхности Ферми, полученные в этой модели достаточно формальным определением поверхности Ферми как решения уравнения

$$\omega - \varepsilon(\mathbf{k}) + \mu - \text{Re}\Sigma(\omega) - \text{Re}\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega) = 0 \quad (19.25)$$

при $\omega = 0$, используемого, например, в [31]. Очевидно, что последнее определение да-

На рис. 19.9, *a* показаны $DMFT+\Sigma_k$ -результаты для действительной части проводимости в коррелированном металле ($U = 4t$) при разных значениях амплитуды псевдощели. Мы ясно наблюдаем формирование типичной псевдощелевой аномалии на «плече» друдевского пика: как и следовало ожидать, псевдощелевые аномалии растут с ростом Δ . Такое поведение довольно похоже на *mid-infrared feature*, которая наблюдается в оптической проводимости купратных сверхпроводников [43, 44]. Рост температуры и уменьшение корреляционной длины флуктуаций «замывают» псевдощель, делая такую аномалию менее выраженной [24].

На рис. 19.9, *б* показаны $DMFT+\Sigma_k$ -результаты для действительной части проводимости в допированном моттовском диэлектрике ($U = 40t$) при разных значениях амплитуды псевдощели. Область частот, где наблюдается псевдощелевая аномалия, становится уже с ростом силы корреляций, и для больших величин U псевдощелевые аномалии сильно подавлены. Псевдощелевые флуктуации приводят к заметному изменению оптической проводимости только для относительно малых частот порядка Δ , а для высоких частот (например, порядка U , где есть вклад от переходов в верхнюю хаббардовскую зону) псевдощелевых эффектов не наблюдается (см. вставку на рис. 19.9, *б*). Для малых частот мы наблюдаем подавление друдевского пика с достаточно слабой аномалией при $\omega \sim \Delta$, которая пропадает для малых величин Δ или коротких корреляционных длин.

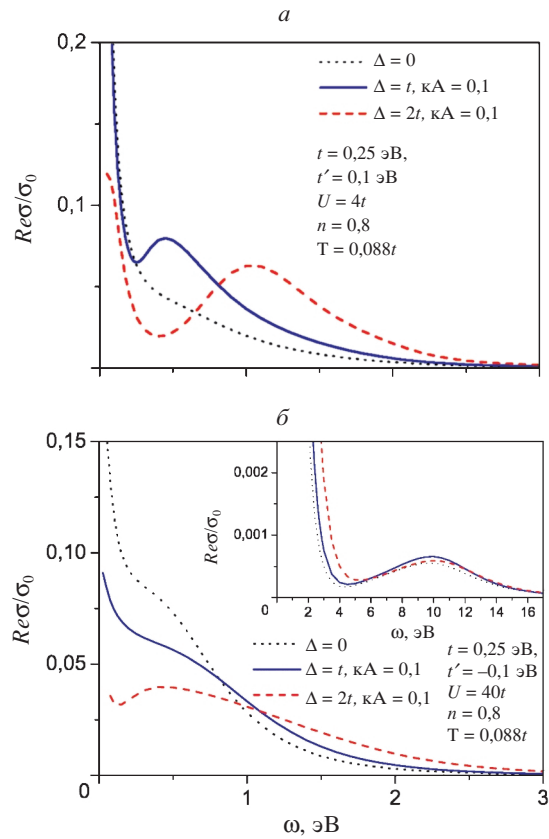


Рис. 19.9: Действительная часть оптической проводимости ($t' = -0,4t$, $t = 0,25$ эВ), полученная в [24] в $DMFT+\Sigma_k$ -приближении для различных значений Δ ($\Delta = 0$; $\Delta = t$; $\Delta = 2t$). Температура $T = 0,088t$, заполнение $n = 0,8$ и корреляционная длина $\xi = 10a$: *a* – для коррелированного металла $U = 4t$; *б* – для допированного моттовского диэлектрика $U = 40t$. На вставке: проводимость в широком частотном интервале, включающем переходы в верхнюю хаббардовскую зону

3.2. Электронная структура реальных оксидов меди: LDA+DMFT+ Σ

Псевдощелевое состояние является одной из основных аномалий нормального состояния купратов и обычно считается наиболее значимым для понимания физической природы ВТСП [28, 29, 45]. Наиболее мощным инструментом исследования такого состояния является фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением (*ARPES*). В течение последнего десятилетия наблюдался огромный прогресс в экспериментальной технике *ARPES*. На сегодня из *ARPES*-данных могут быть получены некоторые важные экспериментальные характеристики, например, поверхность Ферми (*FS*), квазичастичная дисперсия и затухание и даже поведение СЭЧ [41, 42]. Это позволило открыть целый ряд интересных физических аномалий в недодопированной фазе купратов: формирование псевдощели, «теневые» зоны, дуги Ферми, эффекты межслойной гибридизации (*BS*) в двуслойных системах и т. д. [41, 42]. Имеется много разных теорий, объясняющих данное явление, но до сих пор нет устоявшейся точки зрения на их физическую природу. Полагается, что многие из них достаточно значимы для физики ВТСП. Проблема значительно усложняется имеющимися в этих системах сильными электронными корреляциями, делающими сомнительной стандартную зонную теорию и фермижидкостный подход.

Покажем, что учета короткодействующих AFM-флуктуаций, приводящих к формированию псевдощели, в принципе достаточно для описания целого ряда *ARPES*-экспериментов. Для этой цели мы используем новую гибридную *ab initio* расчетную схему LDA+DMFT+ Σ_k [21–23]. С одной стороны, эта схема унаследовала все преимущества LDA+DMFT [13–17], т. е. объединения первопринципной одноэлектронной теории функционала плотности в приближении локальной плотности (*DFT/LDA*) [46, 47] и теории динамического среднего поля (*DMFT*) для сильно коррелированных электронов [2–5, 12]. С другой стороны, наша схема позволяет учесть нелокальные корреляции, вводя (аддитивно) импульсно зависимую СЭЧ с сохранением обычной системы самосогласованных *DMFT*-уравнений [21–23]. Для решения однопримесной задачи *DMFT* снова используем надежный метод численной ренормгруппы (*NRG*) [10, 11].

Такая комбинированная схема очень подходит для описания электронных свойств ВТСП-купратов в нормальном недодопированном состоянии. Во-первых, все определяемые спецификой конкретных систем модельные параметры для физически значимой Cu-3d ($x^2 - y^2$)-орбитали могут быть получены из LDA-расчетов. Во-вторых, недопированные купраты являются антиферромагнитными моттовскими диэлектриками с $U \gg W$ (U – локальное кулоновское взаимодействие; W – ширина невзаимодействующей зоны), так что корреляционные эффекты очень важны. При конечном допировании (вплоть до оптимального) купраты являются типичными сильно коррелированными металлами. *DMFT*-этап нашей расчетной схемы позволяет учесть такие сильные электронные корреляции. Наконец, для изучения «антиферромагнитного сценария» формирования псевдощели в купратах мы включаем в LDA+DMFT k -зависимую СЭЧ Σ_k , описывающую нелокаль-

ные корреляции, вызываемые (квази)статическими гейзенберговскими спиновыми флуктуациями *AFM* ближнего порядка [31, 32].

В таком *LDA+DMFT+Σ_к*-подходе мы изучили ряд высокотемпературных составов: дырочно допированные $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8-\delta}$ (Bi2212) [48] и $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) [49], а также электронно допированные $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (NCCO) [50, 51] и $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (PCCO) [52]. Поскольку наиболее мощным экспериментальным инструментом для исследования электронных свойств является фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением (*ARPES*) [41,54–56] мы проведем сравнение рассчитанных *LDA+DMFT+Σ_к*-спектральных функций и поверхностей Ферми с полученными *ARPES* квазичастичными зонами и картами поверхности Ферми. Двухчастичные свойства (например, оптическая проводимость) также могут быть описаны в нашем подходе [24]. Сравнение рассчитанных с помощью *LDA+DMFT+Σ_к* оптических спектров в псевдощелевом состоянии с экспериментальными данными для Bi2212 [48] и NCCO [50, 51] дает неплохое качественное согласие.

Кристаллическая структура Bi2212 [48], NCCO [50, 51] и PCCO [52] имеет тетрагональную симметрию с пространственной группой *I4/mmm*, а LSCO имеет орторомбически искаженную структуру *Bmab* [49]. Другие кристаллографические данные, использованные в наших *LDA+DMFT+Σ_к*-расчетах см. в [48–53]. Хорошо известна квазидвумерная природа купратов, во многом определяющая их физические свойства. Физически наиболее интересны плоскости CuO_2 . Эти плоскости дают частично заполненную антисвязывающую $\text{Cu-}3d(x^2 - y^2)$ -орбиталь с дисперсией, пересекающей уровень Ферми. В приближении сильной связи такая дисперсия имеет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) = & -2t(\cos k_x a + \cos k_y a) - 4t' \cos k_x a \cos k_y a - 2t''(\cos 2k_x a + \cos 2k_y a) - \\ & 2t'''(\cos k_x a \cos 2k_y a + \cos 2k_x a \cos k_y a). \end{aligned} \quad (26)$$

Здесь t, t', t'', t''' – интегралы перескока Cu–Cu в первых четырех координационных сферах плоскости; a – постоянная решетки. Соответствующие эффективные интегралы перескока, полученные в рамках метода линейаризованных *muffin-tin*-орбиталей (*LMTO*) [57] с последующим использованием функций Ванье *LMTO N*-го порядка (*NMTO*), полученных в подходе [58], приведены в табл. 19.1.

Таблица 19.1

Рассчитанные энергетические модельные параметры (эВ) и экспериментальная корреляционная длина ξ . Первые четыре интеграла перескока Cu–Cu в плоскости t, t', t'', t''' ; эффективный межплоскостной интеграл перескока t_{\perp} , локальное кулоновское взаимодействие U и амплитуда псевдощели Δ

Состав	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	–0,01	–	1,1	0,36	50a
PCCO	–0,438	0,156	0,098	–	–	1,1	0,275	50a
LSCO	–0,476	0,077	–0,025	–0,015	–	1,1	0,21	10a

Таким образом, мы просто используем рассчитанную в *LDA* эффективную антисвязывающую $\text{Cu}-3d(x^2 - y^2)$ -зону как «затравочную» в дальнейших *LDA+DMFT+ Σ_k* -вычислениях.

В двуслойных системах (например, в Bi2212) существенны также перескоки между двумя соседними плоскостями. В приближении сильной связи выражение для такой межплоскостной дисперсии, полученное в [59], имеет вид

$$t_{\perp}(\mathbf{k}) = \frac{t_{\perp}}{4} (\cos k_x a - \cos k_y a)^2. \quad (19.27)$$

Амплитуда данного межплоскостного перескока (*BS*) равна $2t_{\perp}$. Величина t_{\perp} приведена в табл. 19.1. Учет межплоскостного перескока и возникающих *BS*-эффектов требует некоторого легкого обобщения *DMFT+ Σ_k* -схемы, используемой в дальнейших расчетах [48].

Для проведения *DMFT*-расчетов необходимо также установить величину одноузельного кулоновского взаимодействия. Величина такого кулоновского взаимодействия U для эффективной $\text{Cu}-3d(x^2 - y^2)$ -орбитали, полученная из *LDA* в методе сверхъячейки [60], также представлена в табл. 19.1.

Для учета *AFM* спиновых флуктуаций применялась двумерная модель псевдощелевого состояния [31, 32], обобщенная в подходе *DMFT+ Σ_k* для сильно коррелированных систем [22, 23]. Дополнительная «внешняя» \mathbf{k} -зависимая СЭЧ Σ_k [22, 23] описывает нелокальные корреляции, вызываемые (квази)статическими⁴² *AFM*-спиновыми флуктуациями.

Для определения Σ_k необходимо знание двух важных параметров – амплитуды псевдощели Δ , представляющей энергетический масштаб флуктуирующей *SDW*, и корреляционной длины флуктуаций ξ . Величины Δ рассчитывались, как описано в [22, 23, 48]. Величины корреляционной длины брались в соответствии с величинами, получаемыми из экспериментов по нейтронному рассеянию для *NCCO* [61] и *LSCO* [62]. Используемые величины Δ и ξ для всех рассматриваемых систем приведены в табл. 19.1. Для решения эффективной андерсоновской однопримесной задачи в *DMFT* использовалась численная ренормгруппа (*NRG*) [10, 11]. Температура *DMFT(NRG)*-расчетов выбиралась равной 0,011 эВ, а электронная или дырочная концентрация (допирование) – 15%.

Основываясь на широком анализе *LDA+DMFT+ Σ_k* -результатов и экспериментальных *ARPES*-данных, нами было установлено существование четко выраженных «горячих точек» в поведении спектральной плотности и на картах поверхности Ферми в электронно допированных системах [50–52], в то время как в дырочно допированных системах имеются только дуги Ферми [48, 49].

⁴² Квазистатическое приближение для *AFM*-флуктуаций с необходимостью ограничивает наш подход областью достаточно высоких температур (и энергий, не слишком близких к уровню Ферми) [31, 32], так что фактически мы не можем судить, например, о природе низкотемпературного (энергетического) затухания в нашей модели.

На рис. 19.10 приведены $LDA+DMFT+\Sigma_k$ -спектральные плотности вдоль $1/8$ части невзаимодействующей поверхности Ферми от нодалльной точки на диагонали зоны Бриллюэна (верхняя кривая) к антинодалльной на границе этой зоны (нижняя кривая). Результаты для $Bi2212$ показаны на рис. 19.10, *а*, для $NCCO$ – на рис. 19.10, *б*. Для обоих составов в нодалльном направлении квазичастицы хорошо определены – острый пик спектральной плотности, расположенный практически на уровне Ферми. При движении к антинодалльной точке квазичастичное затухание растет, достигая максимума в «горячей точке» (сплошная черная линия), а пик сдвигается от уровня Ферми. Такое поведение подтверждается и экспериментами [63, 64] (сравнение с экспериментом – см. в [50, 51]). Непосредственно из $LDA+DMFT+\Sigma_k$ -результатов на рис. 19.10 видим, что для $Bi2212$ антинодалльные квазичастицы формируются низкоэнергетическим краем псевдощели⁴³, а для $NCCO$ – высокоэнергетическим. Для $Bi2212$ мы также наблюдаем межплоскостное расщепление (BS) на квазичастичном пике, что связано с двуслойным характером этой системы.

«Горячие точки» для $NCCO$ расположены ближе к диагонали зоны Бриллюэна (BZ) [50, 51], что можно видеть по черным линиям рис. 19.10, соответствующим «горячим точкам». Кроме того, корреляционная длина в $NCCO$ гораздо больше, чем в $Bi2212$. Поэтому для $NCCO$ (в отличие от $Bi2212$) в антинодалльном направлении квазичастицы снова хорошо определены. Для $Bi2212$ рассеяние вблизи границ зоны Бриллюэна сильно везде, и вместо «горячих точек» мы наблюдаем достаточно сильное «разрушение» поверхности Ферми вблизи этих границ. Качественно такая же картина наблюдается также в $LSCO$.

На рис. 19.11 (верхний ряд) представлена $LDA+DMFT+\Sigma_k$ -карта поверхности Ферми в четверти BZ для $Bi2212$ (вверху слева) и $NCCO$ (вверху справа). В $Bi2212$ наблюдается существенное «разрушение» FS рассеянием на псевдощелевых флуктуациях вблизи границ BZ ⁴⁴. Напротив, $NCCO$ -поверхность Ферми, как и предсказывалось нами, почти полностью восстанавливается вблизи границ BZ . С другой стороны, дуга Ферми в нодалльном направлении $Bi2212$ достаточно четко выражена, а в $NCCO$ – заметно размыта. Это еще одно следствие того, что «горячие точки» в $NCCO$ расположены ближе к диагонали BZ . Немного бóльшая величина амплитуды псевдощели Δ также способствует большему размытию дуг Ферми в $NCCO$. Необходимо отметить появление «теневого» поверхности Ферми, которая заметно более интенсивная для $NCCO$.

Качественно такие же формы FS наблюдались экспериментально и для составов Bi [65] и Nd [63] (см. нижнюю панель рис. 19.11). По нашему мнению, такое различие карт FS для этих систем связано лишь со спецификой материалов. В частности, LDA -поверхности Ферми $NCCO$ – более искривленные, «горячие точки» оказываются достаточно далеко от границ BZ , со-

⁴³ Особенно четко это видно при меньшей корреляционной длине $\xi = 5a$, рассмотренной в [48].

⁴⁴ Аналогичное поведение, в полном соответствии с $ARPES$ -результатами, реализуется и в другой дырочной системе – $LSCO$, исследованной нами в $LDA+DMFT+\Sigma_k$ -подходе [49].

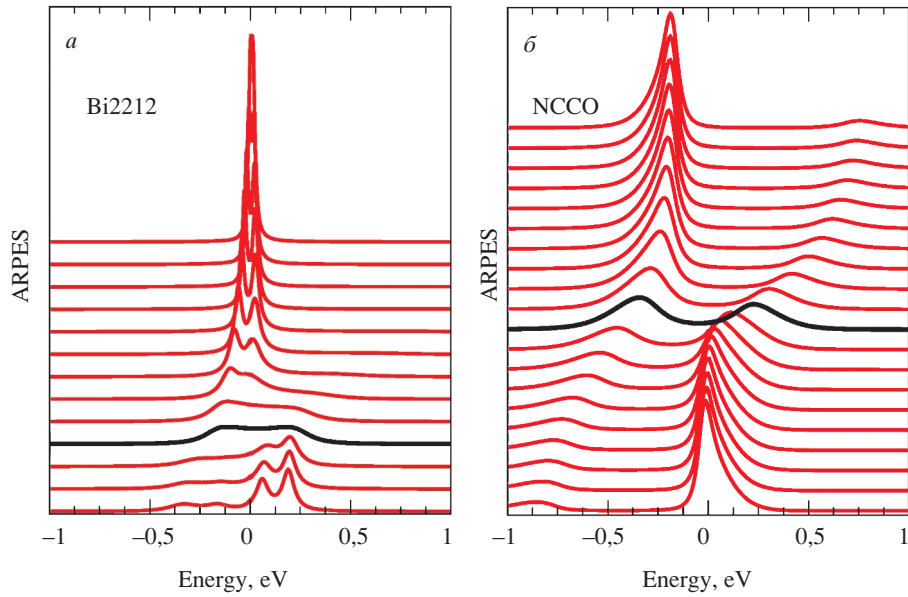


Рис. 19.10. $LDA+DMFT+\Sigma_k$ -спектральные плотности для Bi2212 (а) и NCCO (б) вдоль «затравочной» поверхности Ферми в 1/8 зоны Бриллюэна. Сплошная черная кривая соответствует «горячей точке» [50, 51]

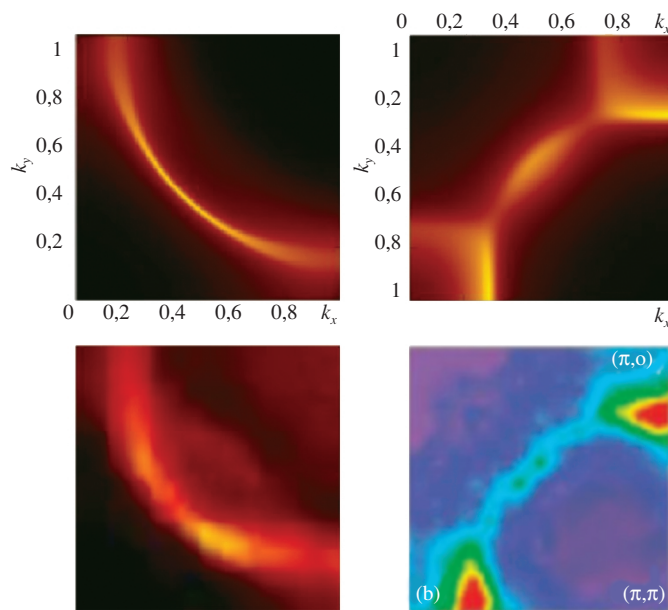


Рис. 19.11. $LDA+DMFT+\Sigma_k$ -карты поверхности Ферми, полученные в [50, 51] для Bi2212 (вверху слева) и NCCO (вверху справа) в 1/4 от BZ (k_x, k_y в единицах π/a). Экспериментальные FS для Bi2212 (внизу слева) [65] и NCCO (внизу справа) [63]

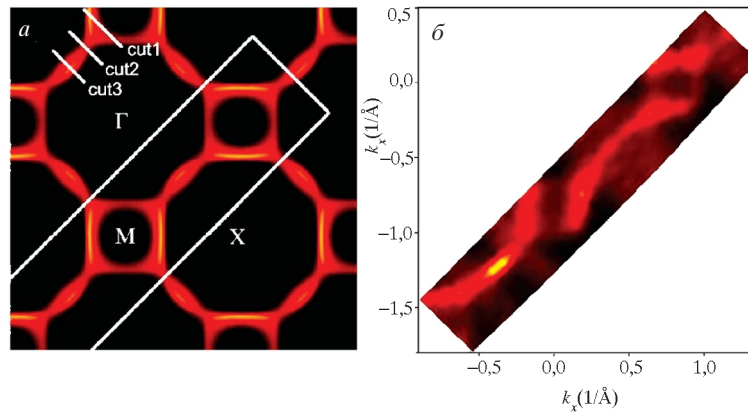


Рис. 19.12. Карта поверхности Ферми для PCCO: *a* – LDA+DMFT+ Σ_k -результаты; *b* – часть обратного пространства, измеренного экспериментально (белый прямоугольник на *a*), нижний левый угол является X-точкой ($\pi/a, 0$) [52]

ответственно, поверхность Ферми вблизи этих границ почти не испытывает рассеяния. А в *Bi2212 FS* подходит к границам *BZ* достаточно близко к точке $(\pi/a, 0)$, близки к ней и «горячие точки». Поэтому в *Bi2212* они скрытаны общим сильным псевдощелевым рассеянием вблизи точки $(\pi/a, 0)$ и не видны. Более выраженному характеру «горячих точек» в *NCCO* способствует также гораздо бóльшая корреляционная длина в этой системе.

Хорошее согласие LDA+DMFT+ Σ_k -результатов с экспериментальными ARPES-данными недавно получено нами также для PCCO в [52]. На рис. 19.12 представлена карта поверхности Ферми PCCO (*a* – LDA+DMFT+ Σ_k -результаты; *b* – экспериментальные ARPES-данные). Поверхность Ферми ясно различима, как воспоминание о невзаимодействующей зоне, лишь вблизи

границ первой зоны Бриллюэна и вокруг точки $\left(\frac{\pi}{a} \cdot \frac{1}{2}, \frac{\pi}{a} \cdot \frac{1}{2}\right)$ (так назы-

ваемая дуга Ферми). Опять, как и в *NCCO*, наблюдается «разрушение» поверхности Ферми в «горячих точках», расположенных на пересечении поверхности Ферми и ее *AFM*-теневой реплики. Такое «разрушение» поверхности Ферми возникает вследствие сильного электронного рассеяния на *AFM*-спиновых (псевдощелевых) флуктуациях на медных атомах. Таким образом, «теневая» поверхность Ферми также становится наблюдаемой, как это обычно происходит при *AFM*-удвоении периода. Однако, поскольку дальнего порядка в интересующей нас недодопированной области нет, «теневая» поверхность Ферми имеет интенсивность, меньшую в сравнении с обычной *FS*. Поверхность Ферми PCCO очень похожа на наблюдаемую в $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (*NCCO*), который принадлежит тому же семейству сверхпроводников [50, 51, 63].

Сравним (рис. 19.13) теоретические (верхний ряд) и экспериментальные (нижний ряд) энергетические квазичастичные дисперсии для наиболее характерных сечений (см. рис. 19.12). Теоретические данные домножены на

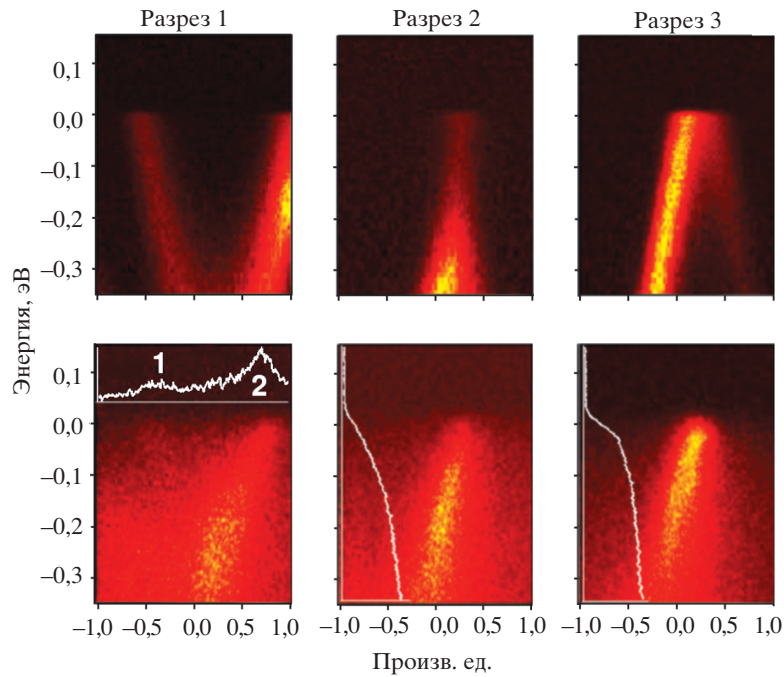


Рис. 19.13. Энергетически-импульсные распределения интенсивности на характерных сечениях, приведенных на рис. 19.12 (верхний ряд – теоретические данные; нижний – экспериментальные данные фотоэмиссии). Уровню Ферми соответствует ноль энергии [50, 51]

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

Чтобы судить об абсолютных интенсивностях «теневого» (1) и основной зоны (2) на разрезе 1 приведена кривая импульсного распределения (*MDC*), проинтегрированная по энергетическому окну 60 мэВ, центрированному на уровне Ферми. Аналогичная интегральная кривая энергетического распределения (*EDC*) для разреза 2 (через «горячую точку») показывает подавление интенсивности на *FL* в сравнении с аналогичным для разреза 3, который расположен достаточно далеко от «горячей точки».

Разрез 1 пересекает квазичастичную и «тень» поверхности Ферми вблизи границ зоны Бриллюэна. Соответственно, на нем можно обнаружить *вилкоподобную* структуру, сформированную подавленной «тенью» зоной (–0,5–0) и лучше определенной квазичастичной зоной (0,5–1). 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 вокруг уровня Ферми. Разрез 3 пересекает дугу Ферми, и мы можем видеть очень хорошо определенную квазичастичную зону. Однако слабо интенсивная «тень» зона также присутствует. В случае дальнего *AFM*-порядка и полного удвоения периода поверхность Ферми и ее «тень» должны сформировать замкну-

тый «карман» поверхности Ферми вокруг точки $(\pi/2a, \pi/2a)$, а в данном случае часть кармана, формируемая «теневогой» зоной, не столь хорошо определена в импульсном пространстве. Как можно видеть, наблюдается хорошее соответствие между расчетными и экспериментальными данными, которые также похожи на результаты, полученные для $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (NCCO) в наших более ранних работах [50, 51].

Как уже отмечалось, в рамках $LDA+DMFT+\Sigma_k$ -схемы можно анализировать и двухчастичные свойства [24], что позволило нам исследовать оптическую проводимость Bi - и Nd -составов [50, 51], также демонстрирующую существенное отличие влияния псевдощели в этих системах. В частности, в оптической проводимости NCCO, в качественном согласии с экспериментом [67], наблюдается характерный псевдощелевой провал и плавный максимум рассеяния через псевдощель на частотах $\sim 2\Delta$, а в оптической проводимости Bi_{2212} характерной псевдощелевой структуры не возникает ни в теории, ни в эксперименте [68], что связано с достаточно малыми Δ и корреляционной длиной.

Подведем некоторые итоги. Для всех составов $LDA+DMFT+\Sigma_k$ -расчеты показывают, что фермижидкостное поведение сохраняется лишь достаточно далеко от «горячих точек» (нодальное направление), а «разрушение» поверхности Ферми наблюдается вблизи «горячих точек». Такое разрушение происходит вследствие сильного рассеяния коррелированных электронов на AFM (псевдощелевых) флуктуациях ближнего порядка. Основываясь на широком анализе $LDA+DMFT+\Sigma_k$ -результатов и экспериментальных $ARPES$ -данных, мы установили существование четко выраженных «горячих точек» в поведении спектральной плотности и на картах поверхности Ферми в электронно допированных системах, в отличие от дырочно допированных систем, где наблюдается сильное разрушение поверхности Ферми вблизи границ зоны Бриллюэна и остаются только дуги Ферми. Существует несколько причин для этого результата: (i) «горячие точки» в электронно допированных системах расположены ближе к центру зоны Бриллюэна; (ii) корреляционная длина AFM -флуктуаций в электронно допированных системах больше; (iii) ширина псевдощели в электронных также больше, чем в дырочных. Сравнение между экспериментальными и $LDA+DMFT+\Sigma_k$ -данными выявляет хорошее полуколичественное соответствие. Экспериментальные и теоретические результаты, рассмотренные здесь, еще раз подтверждают AFM -сценарий формирования псевдощели как в дырочно допированных [48, 49], так и в электронно допированных системах [50–52].

3.3. Переход Мотта–Андерсона в неупорядоченных системах

Важность учета электронного взаимодействия и неупорядоченности при исследовании конденсированного состояния хорошо известна [69]. Кулоновские корреляции и беспорядок являются двумя движущими силами, приводящими к переходам металл–диэлектрик, связанными с локализацией и делокализацией носителей заряда. В частности, переход Мотта–Хаббарда вызывается электронным отталкиванием [70], а андерсоновский

переход металл–диэлектрик связан с примесным рассеянием невзаимодействующих частиц [71]. Как известно, тонкая конкуренция эффектов беспорядка и взаимодействия имеет много проявлений [69, 72], и наиболее полно эта проблема возникает в случае сильных электронных корреляций и сильного беспорядка, определяя физические механизмы перехода металл–диэлектрик Мотта–Андерсона [69]. Одной из основных моделей, позволяющих учесть как электронные корреляции, приводящие к моттовскому переходу металл–диэлектрик [70], так и эффекты сильного беспорядка, приводящие к андерсоновскому переходу металл–диэлектрик, является модель Андерсона–Хаббарда, интенсивно исследуемая в последнее время [25, 73–78].

В работах [73–75] трехмерная модель Андерсона–Хаббарда рассматривалась в рамках теории динамического среднего поля (*DMFT*) [2–4, 12]. В таком подходе влияние локального беспорядка обычно учитывается с помощью усредненной плотности состояний (*DOS*) [79] в рамках хорошо известного приближения когерентного потенциала [80] и не описывает физики локализации Андерсона. Для преодоления этой проблемы Добросавлевич и Котляр [73] предложили вариант *DMFT*, где из решения самосогласованных стохастических уравнений *DMFT* рассчитывалась геометрически усредненная локальная плотность состояний. Этот подход был развит в [74, 75] путем включения хаббардовских корреляций через *DMFT*, что приводит к весьма нетривиальной фазовой диаграмме трехмерной парамагнитной модели Андерсона–Хаббарда [75] с фазами коррелированного металла, моттовского изолятора и коррелированного андерсоновского изолятора. Главная проблема подхода, используемого в [73–75], – невозможность напрямую 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, базирующийся на решении уравнений для обобщенного коэффициента диффузии. Эффективность этого подхода в отсутствие взаимодействия известна достаточно давно [26, 27, 29, 81–83], принимались и некоторые попытки включить эффекты взаимодействия в рамки такого подхода с достаточно обещающими результатами [82, 84], однако не было попыток включить этот подход в современную теорию сильно коррелированных электронных систем. Впервые такое исследование проведено нами в [25] для трехмерных систем и развито для двумерных в [85].

Будем рассматривать немагнитную неупорядоченную модель Андерсона–Хаббарда при половинном заполнении для произвольной силы взаимодействия и беспорядка. Такая модель на равных правах включает и мотт-хаббардовский, и андерсоновский переходы металл–диэлектрик. Гамильтониан рассматриваемой модели имеет вид

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} \epsilon_i n_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (19.28)$$

где $t > 0$ – амплитуда перескока между ближайшими соседями; U – отталкивание на узле; $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$ – оператор числа электронов на узле; $a_{i\sigma}$ ($a_{i\sigma}^\dagger$) – опе-

ратор уничтожения (рождения) электрона со спином σ , локальные энергии ε_i полагаются независимыми случайными величинами на разных узлах решетки. Для упрощения диаграмной техники в дальнейшем мы предполагаем для ε_i распределение Гаусса:

$$P(\varepsilon_i) = \frac{1}{\Delta\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\varepsilon_i^2}{2\Delta^2}\right). \quad (19.29)$$

Параметр Δ здесь служит мерой силы беспорядка, и гауссовское случайное поле («белый» шум) энергетических уровней ε_i на различных узлах решетки вызывает «примесное» рассеяние, приводя к стандартной диаграммной технике для вычисления усредненных функций Грина [27].

Для $\Sigma_p(i\varepsilon)$, возникающей вследствие рассеяния на беспорядке, мы будем использовать простой однопетлевой вклад, пренебрегающий «перекрестными» диаграммами, т. е. самосогласованное борновское приближение [27], которое в случае гауссовского беспорядка (19.29) приводит к обычному выражению

$$\Sigma_p(i\varepsilon) = \Delta^2 \sum_{\mathbf{p}} G(i\varepsilon, \mathbf{p}) \equiv \Sigma_{imp}(i\varepsilon), \quad (19.30)$$

и «внешняя» СЭЧ также оказывается p -независимой (локальной).

Для анализа оптической проводимости будем использовать общее в $DMFT+\Sigma$ -подходе выражение (19.13). Наиболее важный блок $\Phi_\varepsilon^{ORA}(\omega, \mathbf{q})$ можно вычислить, используя основной подход самосогласованной теории локализации [26, 27, 29, 81–83] с некоторыми обобщениями, учитывающими роль хаббардовского взаимодействия с помощью $DMFT+\Sigma$ -подхода [25, 85]. Основное отличие от стандартного подхода – в том, что уравнения самосогласованной теории здесь выводятся с использованием функции Грина (19.4), содержащей локальный вклад в СЭЧ от хаббардовского взаимодействия.

Следуя стандартному рассмотрению [26, 27, 29, 81–83], мы получаем диффузионно-подобный (при малых ω и \mathbf{q}) вклад в $\Phi_\varepsilon^{ORA}(\omega, \mathbf{q})$, имеющий вид

$$\Phi_\varepsilon^{ORA}(\mathbf{q}, \tilde{\omega}) = \frac{2\pi i N(\varepsilon)}{\tilde{\omega} + iD(\omega)q^2}, \quad (19.31)$$

где $D(\omega)$ – обобщенный коэффициент диффузии, а важное отличие от одностатистического случая заключено в $\tilde{\omega}$, так что

$$\tilde{\omega} = \varepsilon_+ - \varepsilon_- - \Sigma^R(\varepsilon_+) + \Sigma^A(\varepsilon_-) = \omega - \Sigma^R(\varepsilon_+) + \Sigma^A(\varepsilon_-) \equiv \omega - \Delta\Sigma^{RA}(\omega), \quad (19.32)$$

которая заменяет обычный ω -член в знаменателе стандартного выражения для $\Phi_\varepsilon^{ORA}(\omega, \mathbf{q})$.

Из общих соображений ясно, что в металлической фазе для $\omega \rightarrow 0$ мы имеем $\Delta\Sigma^{RA}(\omega = 0) = 2i\text{Im}\Sigma(\varepsilon) \sim \text{Max}\{T^2, \varepsilon^2\}$, что отражает ферми-жидкостное поведение в $DMFT$ (сохраняемое упругим примесным рассеянием). При конечных T это приводит к обычному нарушению фазовой когерентности вследствие электрон-электронного рассеяния [69, 72].

Тогда (19.13) принимает вид

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \sigma(\omega) = & \frac{e^2 \omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon [f(\varepsilon_-) - f(\varepsilon_+)] \times \\ & \times \operatorname{Re} \left\{ \frac{2\pi N(\varepsilon) D(\omega)}{\omega^2} - \Phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega) \left[1 - \frac{\Delta \Sigma^{RR}(\omega)}{\omega^2} \right]^2 \right\}, \end{aligned} \quad (19.33)$$

где вторым членом в фигурных скобках при малых ω фактически можно пренебречь или в широком интервале частот точно рассчитывать из (19.14), взяв $\Phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega, \mathbf{q})$, даваемое обычным лестничным приближением.

Следуя стандартному рассмотрению самосогласованной теории локализации [26, 27, 29, 81–83], получаем замкнутое самосогласованное уравнение для обобщенного коэффициента диффузии:

$$D(\omega) = i \frac{\langle v \rangle^2}{d} \left\{ \tilde{\omega} - \Delta \Sigma_{imp}^{RA}(\omega) + \Delta^4 \sum_{\mathbf{p}} (\Delta G_{\mathbf{p}})^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\tilde{\omega} + iD(\omega)q^2} \right\}^{-1}, \quad (19.34)$$

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

$$\langle v \rangle = \frac{\sum_{\mathbf{p}} |\mathbf{v}_{\mathbf{p}}| \Delta G_{\mathbf{p}}}{\sum_{\mathbf{p}} \Delta G_{\mathbf{p}}}, \quad \text{где } \mathbf{v}_{\mathbf{p}} = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}. \quad \text{Это уравнение и необходимо решать}$$

в совокупности с нашей $DMFT+\Sigma$ -процедурой (19.5–19.10, 19.30). Уравнение (19.34) для обобщенного коэффициента диффузии фактически является трансцендентным и легко решается итерациями для каждого значения $\tilde{\omega}$.

Вследствие существующего предела применимости диффузионного приближения суммирование по \mathbf{q} в (19.34) должно быть ограничено [82, 27]:

$$q < k_0 = \operatorname{Min}\{l^{-1}, p_F\}, \quad (19.35)$$

где $l = \langle v \rangle / 2\gamma(0)$ – упругая длина свободного пробега; $\gamma(0)$ – частота рассеяния на примесях; p_F – импульс Ферми. Как мы увидим в дальнейшем, в нашей модели в двумерной системе андерсоновская локализация происходит при сколь угодно слабом беспорядке. Однако при таком беспорядке радиус локализации экспоненциально велик, поэтому существенную роль начинают играть размеры образца. Размер образца L может быть введен в самосогласованную теорию локализации обрезанием диффузионного полюса при малых q [26, 81], т. е. при

$$q \sim k_L = 1/L. \quad (19.36)$$

При $\omega \rightarrow 0$ (а на поверхности Ферми $\varepsilon = 0$), очевидно, и $\tilde{\omega} \rightarrow 0$) в фазе андерсоновского диэлектрика мы имеем локализационное поведение обобщенного коэффициента диффузии [26, 27, 81]:

$$D(\omega) = -i\tilde{\omega} R_{loc}^2. \quad (19.37)$$

При подстановке (19.37) в (19.34) получаем уравнение, определяющее радиус локализации R_{loc} :

$$R_{loc}^2 = -\frac{\langle v \rangle^2}{d\Delta^4} \left\{ \sum_p (\Delta G_p)^2 \sum_q \frac{1}{1 + R_{loc}^2 q^2} \right\}^{-1}. \quad (19.38)$$

3.3.1. Трехмерные системы. Сейчас мы представим наиболее яркие результаты из обширных численных расчетов для *трехмерной модели* Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением на квадратной решетке с модельной полуэллиптической плотностью состояний в «затраповочной» зоне шириной $W = 2D$:

$$N_0(\epsilon) = \frac{2}{\pi D^2} \sqrt{D^2 - \epsilon^2}. \quad (19.39)$$

Плотность состояний всегда приводится в единицах числа состояний на энергетический интервал, на элементарную ячейку объема a^3 (a – параметр решетки), на один спин. Значения проводимости даются в естественных единицах $e^2/\hbar a$ (a – параметр решетки). Для более подробного ознакомления с результатами (в том числе и при отклонении от половинного заполнения) мы отсылаем к [25].

Эволюция плотности состояний. В рамках стандартного *DMFT*-подхода плотность состояний в модели Хаббарда с половинным заполнением имеет типичную трехпиковую структуру [12, 4, 86]: узкая квазичастичная зона (центральный пик), располагающаяся на уровне Ферми, и широкие верхняя и нижняя хаббардовские зоны, формирующиеся на $\epsilon \sim \pm U/2$. Квазичастичная зона сужается с ростом U в металлической фазе, исчезая в точке мотт-хаббардовского перехода металл–диэлектрик при критическом $U_{c2} \approx 1,5W$. При дальнейшем увеличении U на уровне Ферми открывается диэлектрическая щель.

На рис. 19.14, *а* представлены наши *DMFT*+ Σ -результаты для плотности состояний (*DOS*), полученные при $U = 2,5D = 1,2W$, типичном для коррелированного металла в отсутствие беспорядка, для различных значений беспорядка Δ , включая достаточно сильный, переводящий коррелированный металл в коррелированный андерсоновский диэлектрик (о проводимости см. далее). Как и можно было ожидать, наблюдается типичное уширение и подавление плотности состояний беспорядком.

Более неожиданным оказался результат, полученный для значения $U = 4,5D = 2,25W$, типичного для моттовского диэлектрика в отсутствие беспорядка, и показанный на рис. 19.14, *б*. Мы видим восстановление центрального пика (квазичастичной зоны) в *DOS* с ростом беспорядка, что переводит моттовский диэлектрик в коррелированный металл или коррелированный андерсоновский изолятор. Подобное поведение *DOS* было недавно получено в [75].

Физическая причина для такого достаточно неожиданного восстановления квазичастичного пика вполне ясна. Контролирующим параметром пе-

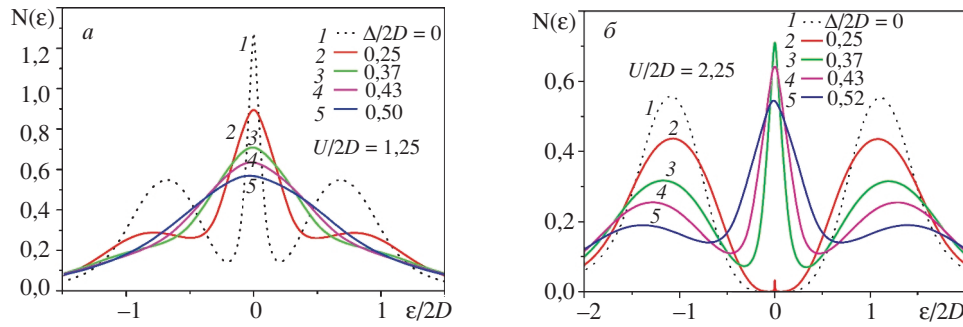


Рис. 19.14. Плотность состояний в модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ :
 a – для $U = 2,5D$, типичного для коррелированного металла; b – для $U = 4,5D$, типичного для моттовского диэлектрика [5]

перехода металл–диэлектрик в *DMFT* является отношение хаббардовского взаимодействия U к ширине затравочной зоны $W = 2D$. При разупорядочении мы получаем новую эффективную ширину зоны W_{eff} (в отсутствие хаббардовского взаимодействия), которая растет с беспорядком, в то время как полуэллиптическая форма *DOS* с хорошо определенными границами зоны сохраняется в самосогласованном борновском приближении (19.30). Это приводит к уменьшению отношения U/W_{eff} , что и вызывает восстановление квазичастичной зоны в нашей модели. Более детально такой качественный подход будет проанализирован при изучении фазовой диаграммы модели Андерсона–Хаббарда.

В отсутствие беспорядка хорошо известно гистерезисное поведение *DOS*, получаемое для перехода Мотта–Хаббарда, если проводить *DMFT*-вычисления с U , уменьшающимся из диэлектрической фазы [4, 86]. Фаза моттовского диэлектрика сохраняется для величин U достаточно далеко внутри фазы коррелированного металла, получаемой с увеличением U . Металлическая фаза восстанавливается только при $U_{c1} \approx 1,0W$. Интервал $U_{c1} < U < U_{c2}$ обычно рассматривают как область сосуществования металлической и моттовской диэлектрической фазы, где металлическая фаза является термодинамически более стабильной [4, 86, 87]. Такое гистерезисное поведение *DOS* [25] сохраняется и в присутствии беспорядка.

Оптическая проводимость: переходы Мотта–Хаббарда и Андерсона.

В отсутствие беспорядка мы воспроизводим результаты стандартной *DMFT* [4, 12] с оптической проводимостью, характеризующейся обычным друдевским пиком, лежащим на нулевой частоте, и широким максимумом при $\omega \sim U$, соответствующим переходам в верхнюю хаббардовскую зону. С ростом U друдевский пик уменьшается и исчезает при моттовском переходе, когда остается только вклад от переходов через мотт-хаббардовскую щель. Введение беспорядка приводит к качественному изменению частотной зависимости проводимости.

На рис. 19.15, a мы приводим действительную часть оптической проводимости в модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением для

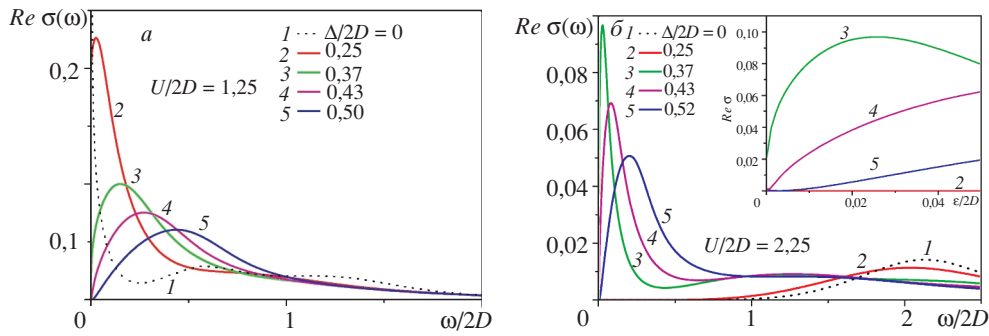


Рис. 19.15. Действительная часть оптической проводимости в модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением для различных степеней беспорядка Δ : *a* – для $U = 2,5D$, типичного для коррелированного металла. (1, 2 – металлическая фаза; 3 – порог подвижности (переход Андерсона); 4, 5 – соответствуют коррелированному андерсоновскому диэлектрику); *б* – для $U = 4,5D$, типичного для моттовского диэлектрика (1, 2 – соответствуют моттовскому диэлектрику; 3 – порог подвижности (переход Андерсона); 4, 5 – соответствуют коррелированному андерсоновскому диэлектрику; на вставке – увеличенная область малых частот [25]

различных степеней беспорядка Δ и $U = 2,5D$, типичного для коррелированного металла. Переходы в верхнюю хаббардовскую зону при $\omega \sim U$ практически не наблюдаются для этих данных. Однако 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 кривой 3 на всех наших графиках, в том числе и для DOS). Отметим, что это значение зависит от величины обрезания (19.35), которое определено с точностью до коэффициента порядка единицы [27, 82]. Наивные ожидания могут приводить к заключению, что узкая квазичастичная зона на уровне Ферми, формирующаяся в сильно коррелированном металле, может быть локализована значительно легче, чем обычная зона проводимости. Однако эти ожидания ошибочны, и эта зона локализуется только при достаточно сильном беспорядке $\Delta_c \sim D$, – таком же, как у всей зоны проводимости с шириной $\sim W$. Это согласуется с предшествующим анализом локализации в двухзонной модели [88].

Более важным является тот факт, что в $DMFT+\Sigma$ -приближении величина критического беспорядка Δ_c не зависит от U , поскольку все эффекты взаимодействия входят в уравнение (19.34) только через $\Delta\Sigma^{RA}(\omega) \rightarrow 0$ при $\omega \rightarrow 0$ (для $T = 0$), поэтому влияние взаимодействия при $\omega = 0$ пропадает. Это фактически основной недостаток нашего приближения, являющийся следствием пренебрежения эффектами интерференции между взаимодействием и примесным рассеянием.

Существенная роль таких интерференционных эффектов известна достаточно давно [69, 72]. Однако, пренебрегая этими эффектами, нам удается провести физически разумную интерполяцию между двумя основными пределами – чистый переход Андерсона за счет беспорядка и переход Мотта–Хаббарда вследствие сильных корреляций. Мы рассматриваем наше приближение как разумный первый шаг к будущей полной теории перехо-

да металл–диэлектрик в сильно коррелированных неупорядоченных системах.

На рис. 19.15, б приведена действительная часть оптической проводимости при различных степенях беспорядка Δ и $U = 4,5D$, типичного для мотт-Хаббардовского диэлектрика. На вставке отражены данные для малых частот, которые позволяют ясно разделять различные типы поведения проводимости, особенно вблизи перехода Андерсона или в фазе моттовского диэлектрика. На основной части рис. 19.15, б ясно виден вклад в проводимость от переходов в верхнюю Хаббардовскую зону при $\omega \sim U$. Мы наблюдаем, что рост беспорядка приводит к конечной проводимости в области частот мотт-Хаббардовской щели, что коррелирует с возникновением квазичастичной зоны в DOS внутри этой щели, как показано на рис. 19.14, б. Эта проводимость является металлической (конечной в статическом пределе $\omega = 0$) для $\Delta < \Delta_c$, а при $\Delta > \Delta_c$ на малых частотах мы получаем $\text{Re}\sigma(\omega) \sim \omega^2$, что типично для андерсоновского диэлектрика [26, 27, 29, 81–83].

Несколько необычным является возникновение в $\text{Re}\sigma(\omega)$ пика на малой, но конечной частоте даже в металлической фазе. Это происходит вследствие важности слабых локализационных эффектов. В «лестничном» приближении для $\Phi_e^{ORA}(\omega, \mathbf{q})$, которое пренебрегает всеми локализационными эффектами, мы получаем обычный друдевский пик при $\omega = 0$ [25], а учет эффектов локализации в нашем самосогласованном подходе смещает пик в $\text{Re}\sigma(\omega)$ на малые (конечные) частоты. Металлическое состояние определяется [70] конечностью величины статической ($\omega = 0$) проводимости при нулевой температуре.

Выше мы представляли только данные по проводимости, полученные при увеличении U от металлической до моттовской диэлектрической фазы. При уменьшении U из фазы моттовского диэлектрика наблюдается гистерезис проводимости в области сосуществования, определяемой (в отсутствие беспорядка) условием $U_{c1} < U < U_{c2}$. Гистерезисное поведение проводимости в области сосуществования наблюдается и в присутствии беспорядка [25].

Фазовая диаграмма модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением. Фазовая диаграмма модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением изучалась в [75], использовавшей подход, базирующийся на прямых $DMFT$ -вычислениях для сетки узлов со случайными реализациями энергий ϵ_i в (19.28) с последующим усреднением, для получения стандартной усредненной DOS , а также геометрически усредненной локальной DOS , которая использовалась для определения перехода в фазу андерсоновского диэлектрика. Представим результаты для фазовой диаграммы парамагнитной модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением, полученные из обширных расчетов плотности состояний и оптической проводимости в $DMFT+\Sigma$ -приближении. Необходимо отметить, что анализ проводимости есть наиболее прямой способ различения металлической и диэлектрической фаз [70].

Наша фазовая диаграмма в плоскости беспорядок–корреляции (Δ, U) приведена на рис. 19.16. Линия перехода Андерсона $\Delta_c \approx 0,37W = 0,74D$ определялась как величина беспорядка, для которого статическая проводимость обращается в ноль при $T = 0$. Переход Мотта–Хаббарда может быть определен по исчезновению центрального пика (квазичастичной зоны) в

DOS или по проводимости, например, при наблюдении закрытия щели в оптической проводимости в диэлектрической фазе, или по исчезновению статической проводимости в металлической.

Мы уже отмечали, что $DMFT+\Sigma$ -приближение дает универсальную (U -независимую) величину критического беспорядка Δ_c вследствие пренебрежения интерференцией между рассеянием на беспорядке и хаббардовским взаимодействием, что приводит к основному упрощению нашей фазовой диаграммы по сравнению с полученной в [75].

Влияние рассеяния на беспорядке на переход Мотта–Хаббарда весьма нетривиально и качественно совпадает с результатами, представленными в [75]. Основное отличие состоит в сохранении в нашем приближении хаббардовских зон в DOS даже в пределе достаточно сильного беспорядка, в то время как в [75] они пропадают. Кроме того, мы получаем область сосуществования, плавно расширяющуюся с ростом беспорядка и не исчезающую в некоторой «критической» точке, как в [75]. Границы нашей области сосуществования, которые фактически определяют границы фазы моттовского диэлектрика, получаемыми с ростом или уменьшением U , определяются кривыми $U_{c1}(\Delta)$ и $U_{c2}(\Delta)$ (рис. 19.16), которые получаются из простых уравнений (19.40)–(19.42):

$$\frac{U_{c1,c2}(\Delta)}{W_{eff}} = \frac{U_{c1,c2}}{W} \quad (19.40)$$

с эффективной шириной зоны в присутствии беспорядка, вычисленной для $U = 0$ в самосогласованном борновском приближении (19.30):

$$W_{eff} = W \sqrt{1 + 16 \frac{\Delta^2}{W^2}}. \quad (19.41)$$

Границы области сосуществования, определяющие и границы фазы моттовского диэлектрика, имеют вид

$$U_{c1,c2}(\Delta) = U_{c1,c2} \sqrt{1 + 16 \frac{\Delta^2}{W^2}} \quad (19.42)$$

и показаны на рис. 19.16 пунктирной и сплошной линиями. Точки, определяемые из условия исчезновения квазичастичного пика, а также точки,

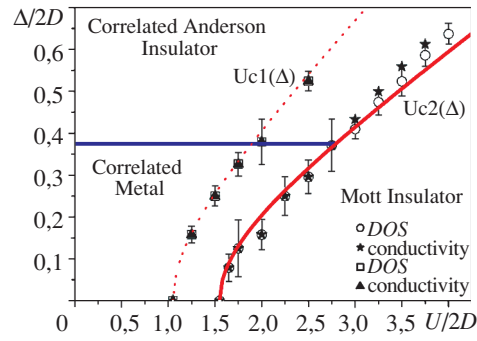


Рис. 19.16. Фазовая диаграмма парамагнитной модели Андерсона–Хаббарда при нулевой температуре [25].

Границы фазы моттовского диэлектрика $U_{c1,c2}(\Delta)$ получены из выражения (19.42), различными символами показаны точки этих границ, установленные из поведения DOS или проводимости. Точечная кривая определяет границу области сосуществования, полученную уменьшением U из фазы моттовского диэлектрика. Линия перехода Андерсона определяется сосчитанной величиной $\Delta_c = 0,37$

следующие из качественных изменений в поведении проводимости, показаны на рис. 19.16 различными символами и демонстрируют очень хорошее согласие с этими линиями, подтверждая выбор отношения (19.40) как параметра, контролирующего переход Мотта в присутствии беспорядка.

3.3.2. Двумерные системы. Согласно *скэйлинговой теории локализации* [89], не существует металлического состояния в двумерных системах: они локализованы при сколь угодно слабом беспорядке. Несмотря на то что данное предсказание было сделано для $2D$ -систем не взаимодействующих частиц, вскоре было показано, что слабое взаимодействие между электронами скорее лишь усиливает локализацию [90]. Эксперименты, проведенные в начале 1980-х гг. на различных двумерных системах [91], подтверждали это предсказание. Однако появлялись и теоретические работы [72], указывающие, что общепринятая точка зрения неверна и в пределе слабого беспорядка и достаточно сильного взаимодействия $2D$ -системы имеют конечную ненулевую проводимость при нулевой температуре. Экспериментальное получение перехода металл–диэлектрик (*MIT*) в двумерных слабонеупорядоченных системах с низкой концентрацией носителей тока [92], отсутствующего в одночастичной теории локализации Андерсона, породило целый ряд теоретических исследований (обзор – в [93]).

В [77] модель Андерсона–Хаббарда исследовалась как для трехмерных, так и для двумерных систем. В качестве главного эффекта, приводящего к делокализации, рассматривалась «экранировка» случайного потенциала локальным кулоновским взаимодействием [76]. Модель Андерсона–Хаббарда сводилась к эффективной одночастичной модели Андерсона с перенормированным эффективным распределением энергии локального уровня, которое рассчитывалось в атомном пределе. Все прочие эффекты электронных корреляций фактически отбрасывались. Сильный беспорядок учитывался в рамках самосогласованной теории локализации. В таком подходе удастся получить заметное возрастание радиуса локализации с ростом локального хаббардовского взаимодействия в двумерных системах. Однако даже в таком подходе радиус локализации продолжает оставаться конечным, система локализована при сколь угодно слабом беспорядке и андерсоновский переход металл–диэлектрик для двумерной системы отсутствует. Аналогичный результат имел место и при более прямом численном моделировании двумерной модели Андерсона–Хаббарда [78].

В нашем $DMFT+\Sigma$ -приближении для бесконечной двумерной системы ($L \rightarrow \infty$) радиус локализации, определяемый уравнением (19.38), остается конечным (хотя и экспоненциально большим) для сколь угодно слабого беспорядка, что говорит об отсутствии перехода Андерсона в такой системе. Однако в системах конечного размера радиус локализации расходится при некотором критическом беспорядке, определяемом характерным размером L . Качественно критический беспорядок определяется тем условием, что радиус локализации бесконечной системы становится сравнимым с ха-

рактерным размером образца $R_{loc}^{L \rightarrow \infty} \sim L$. Таким образом, в конечных двумерных системах существуют переход Андерсона и металлическая фаза для беспорядка ниже критического. В дальнейшем под фазой *коррелированно-го металла* мы будем подразумевать именно такую фазу для конечных двумерных систем.

Сейчас мы представим наиболее важные результаты обширных численных расчетов для двумерной модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением на квадратной решетке с модельной прямоугольной (плоской) плотностью состояний в «затравочной» зоне шириной $W = 2D$:

$$N_0(\epsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2D} & |\epsilon| \leq D, \\ 0 & |\epsilon| > D. \end{cases} \quad (19.43)$$

Выбор такой модельной плотности состояний определяется ее двумерным характером (константа) вблизи краев зоны.

Плотность состояний и оптическая проводимость. Поведение плотности состояний качественно полностью аналогично трехмерному случаю. Количественные отличия связаны другой моделью «затравочной» плотности состояний (19.43), что, в частности, приводит к бóльшим, чем в трехмерной 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 трехмерной 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 двумерном случае такое поведение не означает, как в общем случае, перехода в состояние коррелированного металла и, по крайней мере, для бесконечных систем мы имеем дело с коррелированным диэлектриком Андерсона.

Поведение оптической проводимости в широком интервале частот также качественно вполне аналогично трехмерной модели. Однако в рассматриваемой двумерной модели проводимость на нулевой частоте обращается в нуль и, в отличие от $d = 3$ [25], даже при очень слабом беспорядке пик оптической проводимости лежит на конечной частоте. В «лестничном» приближении, которое не содержит локализационных поправок, наблюдается обычный друдевский пик на нулевой частоте и проводимость при $\omega = 0$ конечна.

Более подробно с результатами для DOS и оптической проводимости в такой двумерной модели можно ознакомиться в [85].

Радиус локализации и фазовая диаграмма двумерной модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением. На левой шкале рис. 19.17 приведена зависимость проводимости на конечной, но достаточно малой частоте $\omega = 0,00005D$ от степени беспорядка Δ . Кружочками показан результат «лестничного» приближения, треугольниками – результат самосогласованной теории локализации. Кривая 3, практически совпадающая с

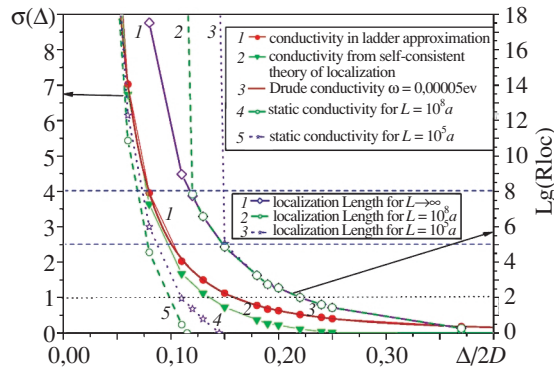


Рис. 19.17. Зависимости проводимости на конечной частоте и логарифма радиуса локализации от степени беспорядка Δ :

на *левой* шкале – зависимость проводимости на конечной частоте $\omega = 0,00005D$ и $U/2D = 1$ от степени беспорядка Δ . Кривыми (кривая 1) обозначено лестничное приближение, треугольниками (кривая 2) – результат самосогласованной теории локализации. Кривая 3, практически совпадающая с 1, получена из формулы Друде (19.44). Кривые 4, 5 – статическая проводимость в конечных образцах с размерами $L = 10^8 a$ и $L = 10^5 a$ соответственно; на *правой* шкале – зависимость логарифма радиуса локализации от степени беспорядка Δ . Кривая 1 – для бесконечного образца. Кривые 2, 3 – для образцов с размерами $L = 10^8 a$ и $L = 10^5 a$ соответственно [85]

2 от 1, 3) возникает лишь при достижении проводимостью значений порядка минимальной металлической проводимости $\sigma_0 = \frac{e^2}{h}$ (на которую и нормировалась проводимость на рисунках). Следует заметить, что именно в этой области беспорядка, как мы увидим ниже, и происходит андерсоновский переход металл – диэлектрик (расходится радиус локализации) в двумерных системах разумных конечных размеров.

На правой шкале рис. 19.17 показаны кривые зависимости логарифма радиуса локализации, полученного из уравнения (19.38), от степени беспорядка для бесконечного образца (кривая 1) и для образцов конечных размеров $L = 10^8 a$ и $L = 10^5 a$ (кривые 2, 3 соответственно). Радиус локализации экспоненциально растет с уменьшением беспорядка, оставаясь конечным в бесконечной двумерной системе, где андерсоновский переход отсутствует. В конечных же системах радиус локализации *расходится* при критическом беспорядке, определяемом размером системы, демонстрируя существование эффективно перехода Андерсона. Качественно критический беспорядок определяется тем условием, что радиус локализации бесконечной системы становится сравним с характерным размером образца $R_{loc}^{L \rightarrow \infty} \sim L$. Следует заметить, что в нашем подходе, в отличие от [77], радиус локализации практически не зависит от U , что приводит к независимости от силы корреляций U и критического беспорядка в двумерных системах конечного размера. Аналогичная ситуация⁴⁵ наблюдалась в нашем подходе и для трехмерных систем [25].

⁴⁵ Радиус локализации в трехмерной модели, который исследовался нами уже после выхода [25], оказался также практически независим от хаббардовского взаимодействия U .

«лестничным» приближением, получена из качественной формулы Друде:

$$\sigma(\omega) = \sigma(0) \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + \omega^2}, \quad (19.44)$$

где статическая проводимость

$$\sigma(0) = e^2 N(0) D_0 \approx \frac{e^2}{h} \frac{\epsilon_F}{2\pi\gamma};$$

$N(0)$ – плотность состояний на уровне Ферми, D_0 – друдевский коэффициент диффузии; $\epsilon_F \approx D$ – энергия Ферми. Для частоты рассеяния на примесях принималось $\gamma = \pi N(0) \Delta^2 \approx \frac{\pi}{2D} \Delta^2$. Заметный вклад лока-

лизационных поправок в проводимость на конечной частоте (заметное отличие кривой

2 от 1, 3) возникает лишь при достижении проводимостью значений порядка минимальной металлической проводимости $\sigma_0 = \frac{e^2}{h}$ (на которую и нормировалась проводимость на рисунках).

Следует заметить, что именно в этой области беспорядка, как мы увидим ниже, и происходит андерсоновский переход металл – диэлектрик (расходится радиус локализации) в двумерных системах разумных конечных размеров.

На правой шкале рис. 19.17 показаны кривые зависимости логарифма радиуса локализации, полученного из уравнения (19.38), от степени беспорядка для бесконечного образца (кривая 1) и для образцов конечных размеров $L = 10^8 a$ и $L = 10^5 a$ (кривые 2, 3 соответственно). Радиус локализации экспоненциально растет с уменьшением беспорядка, оставаясь конечным в бесконечной двумерной системе, где андерсоновский переход отсутствует. В конечных же системах радиус локализации *расходится* при критическом беспорядке, определяемом размером системы, демонстрируя существование эффективно перехода Андерсона. Качественно критический беспорядок определяется тем условием, что радиус локализации бесконечной системы становится сравним с характерным размером образца $R_{loc}^{L \rightarrow \infty} \sim L$. Следует заметить, что в нашем подходе, в отличие от [77], радиус локализации практически не зависит от U , что приводит к независимости от силы корреляций U и критического беспорядка в двумерных системах конечного размера. Аналогичная ситуация⁴⁵ наблюдалась в нашем подходе и для трехмерных систем [25].

На левой шкале рис. 19.17 приведена зависимость от степени беспорядка статической проводимости в конечных образцах с размерами $L = 10^8 a$ и $L = 10^5 a$ и (кривые 4, 5 соответственно). В конечных системах при малом беспорядке статическая проводимость отлична от нуля (металл) и непрерывно уменьшается с ростом беспорядка, обращаясь в ноль при критическом беспорядке, при котором расходится радиус локализации в образце соответствующего размера. Статическая проводимость конечных образцов в нашем подходе также практически не зависит от силы корреляций U . Существенное отличие статической проводимости от проводимости на малой конечной частоте (рис. 19.17) связано с уже отмечавшейся выше экспоненциальной малостью области частот с локализационным поведением проводимости.

Представим результаты для фазовой диаграммы двумерной парамагнитной модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением, полученные из обширных расчетов плотности состояний в $DMFT+\Sigma$ -приближении и анализа поведения радиуса локализации конечных двумерных систем в нашем подходе. Такая фазовая диаграмма в плоскости беспорядок–корреляции (Δ, U) приведена на рис. 19.18.

Заштрихованная полоса соответствует области эффективного перехода металл–андерсоновский диэлектрик. Ее границы определяются расходимостью радиуса локализации в конечных образцах с характерными размерами $L = 10^5 a$ (верхняя граница) и $L = 10^8 a$ (нижняя граница) (см. рис. 19.17). Следует подчеркнуть, что дальнейшее увеличение размеров системы (например, в 10 раз – до $L = 10^9 a$) лишь очень незначительно сдвигает вниз (уменьшает критический беспорядок) нижнюю границу заштрихованной полосы (рис. 19.18) – характерной области эффективного перехода Андерсона в конечных системах.

Кривая $U_{c2}(\Delta)$, полученная из расчетов плотности состояний, определяет границу моттовского перехода. Критерием перехода является исчезновение центрального квазичастичного пика в плотности состояний $N(\epsilon)$ с открытием щели на уровне Ферми.

Как и в трехмерной модели, при уменьшении U из диэлектрической фазы моттовский переход наступает при $U = U_{c1}(\Delta) < U_{c2}(\Delta)$ и наблюдается область сосуществования фаз (гистерезис), лежащая между кривыми $U_{c1}(\Delta)$ и $U_{c2}(\Delta)$ на фазовой диаграмме (рис. 19.18).

Так же, как в трехмерной модели, мы можем качествен-

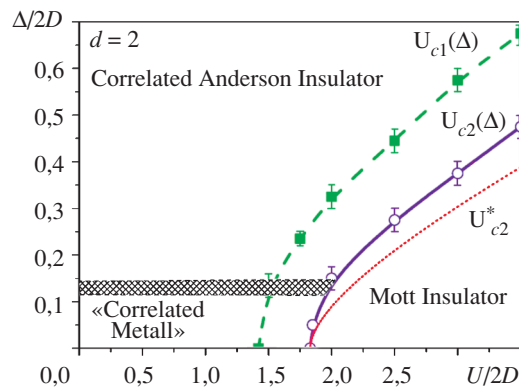


Рис. 19.18. Фазовая диаграмма двумерной парамагнитной модели Андерсона–Хаббарда при нулевой температуре [85].

Граница области моттовского диэлектрика $U_{c2}(\Delta)$ и граница области сосуществования $U_{c1}(\Delta)$ получены из поведения плотности состояния. $U_{c2}^*(\Delta)$, рассчитана из выражения (19.45). Заштрихованная область между штриховыми прямыми соответствует эффективному андерсоновскому переходу металл–диэлектрик в конечных системах

но оценить зависимости $U_{c_1,c_2}(\Delta)$. Считая, что отношение величины хаббардовского взаимодействия к эффективной ширине зоны $\frac{U_{c_1,c_2}(\Delta)}{W_{eff}(\Delta)}$, контроли-

рующее моттовский переход металл–диэлектрик, есть универсальная константа, не зависящая от беспорядка, в двумерной модели получаем

$$U_{c_1,c_2}^*(\Delta) = U_{c_1,c_2}(0) \frac{W_{eff}(\Delta)}{W} = U_{c_1,c_2}(0) \left(\frac{2\Delta^2}{W^2} \ln \left(\frac{c+1}{c-1} \right) + c \right), \quad (19.45)$$

где $c = \sqrt{4 \left(\frac{\Delta}{W} \right)^2 + 1}$. В отличие от случая $d = 3$ [25], зависимость $U_{c_2}(\Delta)$,

полученная из расчетов плотностей состояний, существенно отличается от качественной $U_{c_1}^*(\Delta)$ (пунктирная кривая на рис. 19.18), определяемой (19.45). Это, по-видимому, связано с заметным изменением формы плотности состояний (при $U = 0$) при росте степени беспорядка Δ , которое отсутствует для полуэллиптической зоны в случае $d = 3$.

3.4. Роль электрон-фононного взаимодействия

Проблема взаимовлияния сильных электронных корреляций и электрон-фононного взаимодействия – одна из центральных в физике сильно коррелированных систем. Фактически такие исследования имеют достаточно давнюю историю. Например, одной из наиболее популярных моделей для электрон-фононного взаимодействия (*EPI*) в сильно коррелированных системах является модель Хаббарда-Холстейна (*HNM*). Сама модель Хаббарда [1] описывает локальное кулоновское взаимодействие на решетке, включая, например, мотт-хаббардовский переход металл–диэлектрик. С другой стороны, модель Холстейна содержит локальное линейное по отклонениям плотности взаимодействие электронов проводимости с локальными (эйнштейновскими) фононными модами [94].

Активные исследования свойств *HNM* проводились в рамках теории динамического среднего поля (*DMFT*) [4], являющейся *непертурбативным* подходом по отношению к параметрам взаимодействия в модели Хаббарда. Среди многих других подходов остановимся на *DMFT*-решении *HNM* в случае, когда в качестве *impurity solver* использовалась численная ренормализационная группа (*NRG*) (обзор применений *DMFT* (*NRG*) см. в [95]). Сведение *HNM* к проблеме андерсоновско-холстейновской примеси было впервые сделано Хевсоном и Майером [96]. Они показали, что, используя *NRG*, можно (численно точно) рассчитать полный электрон-фононный вклад в СЭЧ задачи, делая решение *HNM* непертурбативным также и в отношении силы электрон-фононного взаимодействия. Отметим, что система самосогласованных уравнений *DMFT* в таком подходе сохраняется.

Однако до настоящего времени, по-видимому, не исследовались сильно коррелированные электроны, взаимодействующие с дебаевскими фононами. Это является тем более удивительным ввиду широкого обсуждения физики «кинков» (переломов) в электронной дисперсии, наблюдаемых в *ARPES*-экспериментах в ВТСП на 40–70 мэВ ниже уровня Ферми [97], происхождение которых часто приписывается *EPI* [98]. Проблема формирования кинков в электронной дисперсии, вызываемых *EPI* в сильно коррелированных системах, кратко обсуждалась в рамках *HNM* в [99, 100].

В данном разделе мы представляем результаты *DMFT*+ Σ -подхода для модели Хаббарда, дополненной взаимодействием с дебаевскими фононами, в предположении выполнения теоремы Мигдала (адиабатическое приближение). Такое приближение разумно для константы *EPI* взаимодействия $\lambda < E_F/\omega_D$, где E_F – энергия Ферми; ω_D – дебаевская частота.

Для рассмотрения электрон-фононного взаимодействия в сильно коррелированной системе мы введем $\Sigma_k(\epsilon) = \Sigma_{ph}(\epsilon, k)$, возникающую от *EPI* в рамках обычной фреilihовской модели. В соответствии с теоремой Мигдала в адиабатическом приближении, мы можем ограничиться простейшим вкладом первого порядка для $\Sigma_{ph}(\epsilon, k)$. Главное преимущество адиабатического приближения – возможность пренебрегать любыми вершинными поправками от электрон-фононного взаимодействия, которые являются малыми по адиабатическому параметру $\frac{\omega_D}{\epsilon_F} = 1$ [101].

Фактически $\Sigma_{ph}(\epsilon, k)$ в таком приближении имеет слабую импульсную зависимость, которой мы можем пренебречь и учитывать только существенную частотную зависимость. Прямые вычисления (см., например, [27]) в случае дебаевского фононного спектра $\omega_0(k) = u|k|$ при $u|k| < \frac{\omega_D}{u}$, где u – скорость звука, дают

$$\Sigma_{ph}(\epsilon) = \frac{-ig^2}{4\omega_c^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left\{ \omega_D^2 + \omega^2 \ln \left| \frac{\omega_D^2 - \omega^2}{\omega^2} \right| + i\pi\omega^2 \theta(\omega_D^2 - \omega^2) \right\} I(\epsilon + \omega), \quad (19.46)$$

где g – обычная константа электрон-фононного взаимодействия;

$$I(\epsilon) = \int_{-D}^{+D} d\xi \frac{N_0(\xi)}{E_\epsilon - \xi}, \quad E_\epsilon = \epsilon - \Sigma(\epsilon) - \Sigma_{ph}(\epsilon) \text{ и } \omega_c = p_F u - \text{характерная частота}$$

порядка ω_D . В случае полуэллиптической «затравочной» *DOS* $N_0(\epsilon)$, имеющей полуширину зоны D , $I(\epsilon) = \frac{2}{D^2} (E_\epsilon - \sqrt{E_\epsilon^2 - D^2})$. Удобно ввести безразмерную константу электрон-фононного взаимодействия, которая в такой модели принимает вид [27]

$$\lambda = g^2 N_0(\epsilon_F) \frac{\omega_D^2}{4\omega_c^2}. \quad (19.47)$$

Для упрощения анализа мы не проводим полностью самосогласованные расчеты, пренебрегая перенормировкой фононов вследствие *EPI* [27], поскольку предполагаем, что фононный спектр фиксируется экспериментом.

3.4.1. Результаты и обсуждение. Остановимся лишь на наиболее интересных результатах *DMFT*+ Σ -подхода в такой модели, отсылая за подробностями к [102].

Начнем со сравнения между *DMFT*- и *DMFT*+ Σ_{ph} -плотностями состояний для сильного ($U/2D = 1,25$) и слабого ($U/2D = 0,625$) хаббардовского взаимодействия, представленного, соответственно, вверху и внизу рис. 19.19, *a*. Безразмерная константа *EPI* (19.47), использованная в этих расчетах, $\lambda = 0,8$, частота Дебая $\omega_D = 0,125D$. В обоих случаях мы наблюдаем некоторое перераспределение спектрального веса вследствие *EPI*. Для $U/2D = 1,25$ (рис. 19.19, *a*, вверху) мы видим хорошо развитую трехпиковую структуру, типичную для сильно коррелированных металлов. В энергетическом интервале $\pm\omega_D$ вокруг энергии Ферми (которая выбирается за ноль энергии на всех рисунках) практически нет отличия в форме квазичастичного пика в *DOS*, полученного чистой *DMFT* и *DMFT*+ Σ_{ph} . Однако вне этого интервала *DMFT*+ Σ_{ph} -квазичастичный пик становится значительно шире за счет переноса части спектрального веса из хаббардовских зон. Это уширение *DMFT*+ Σ_{ph} -квазичастичного пика ведет, как мы покажем ниже, к задержке перехода металл–диэлектрик.

В случае $U/2D = 0,625$ ясно различимых хаббардовских зон не формируется, наблюдаются лишь некоторые «боковые крылья» *DOS*. Перераспределение спектрального веса на рис. 19.19, *a*, внизу не драматично, несмотря на качественное отличие от случая $U/2D = 1,25$. Основное различие между результатами чистой *DMFT* и *DMFT*+ Σ_{ph} возникает здесь в интервале $\pm\omega_D$, где наблюдается образование «шапочки» в *DMFT*+ Σ_{ph} *DOS*. Соответствующий спектральный вес уходит на энергии в окрестности $\pm U$, где пытаются сформироваться хаббардовские зоны.

На рис. 19.19, *b* мы сравниваем поведение плотностей состояний, полученных чистой *DMFT* и *DMFT*+ Σ_{ph} , для различных величин $U/2D$ вблизи мотт-хаббардовского перехода металл–диэлектрик. При $U/2D = 1,56$ как стандартная *DMFT*, так и *DMFT*+ Σ_{ph} приводят к диэлектрическому решению. Однако есть некоторые различия между этими решениями. *DMFT*+ Σ_{ph} -хаббардовские зоны ниже и шире, чем *DMFT*, поскольку включают дополнительное (*EPI*) взаимодействие. С уменьшением U при $U/2D$, равном 1,51 и 1,47, мы наблюдаем, что *DMFT*+ Σ_{ph} -результаты соответствуют металлическому состоянию (с узким квазичастичным пиком на уровне Ферми), а обычная *DMFT* все еще приводит к диэлектрическому решению. Только вблизи $U/2D = 1,43$ и *DMFT*-, *DMFT*+ Σ_{ph} -результаты для *DOS* соответствуют металлическому состоянию и все формы кривых плотностей состояний становятся такими же, как описано выше. Таким образом, при увеличении U конечное *EPI* слегка задерживает мотт-хаббардовский переход из металлической в диэлектрическую фазу. Этот результат аналогичен тому, что наблюдается для *ННМ* в слабом *EPI*-режиме [103–105].

Умеренное *EPI* приводит к довольно незначительным изменениям электронной плотности состояний и в коррелированном металле, и в состоянии Моттовского диэлектрика, лишь слегка затягивая переход от металла к диэлектрику с увеличением U .

Перейдем к исследованию источника резких изменений наклона (изломов) электронной дисперсии – так называемых кинков. Хорошо известно, что взаимодействие электронов с некоторой бозонной модой вызывает такой кинк. В случае *EPI* типичная энергия кинка есть просто дебаевская (или эйнштейновская) частота. Недавно в [106] были открыты кинки чисто электронной природы. Энергия чисто электронного кинка, как показано в [106], для полуэллиптической «голой» *DOS*

$\omega^* = Z_{FL}(\sqrt{2} - 1)D$, где D – полуширина «затраповочной»

$$\text{зоны; } Z_{FL} = \left(1 - \frac{\partial \text{Re} \Sigma}{\partial \epsilon} \Big|_{\epsilon = \epsilon_F} \right)^{-1} -$$

фермижидкостный квазичастичный вес. Грубая оценка ω^* дает полуширину квазичастичного пика в *DOS* на половине его высоты.

Электронный кинк достаточно гладок, и обычно его наблюдение затруднено. Наши расчеты ясно показывают, что электронные кинки плохо наблюдаемы на фоне фононных кинков и требуется тонкая настройка параметров нашей модели для их выделения. Прежде всего необходимо обеспечить $\omega_D \ll \ll \omega^*$ (в других случаях плавные электронные кинки будут практически неразличимы на фоне фононных). Для $U/2D = 1$ при $U = 3,5$ эВ мы получаем $\omega^* \sim 0,1D$ и разумной величины частоты Дебая является $\omega_D \sim 0,01D$. Чтобы сделать фононный кинк достаточно выраженным при такой относительно малой дебаевской частоте, мы увеличим константу *EPI* до величины $\lambda = 2,0$.

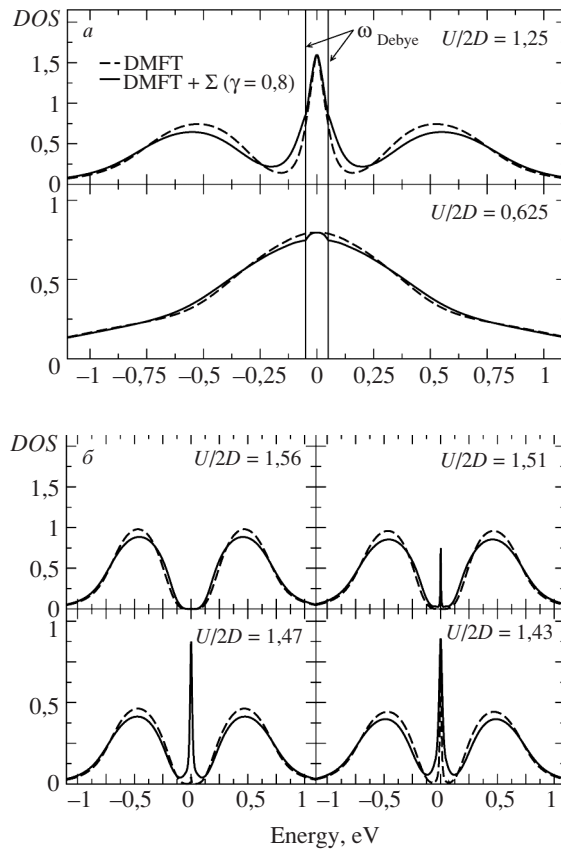


Рис. 19.19. Плотности состояний, полученные в стандартной *DMFT* (штриховые кривые) и *DMFT*+ Σ_{ph} (сплошные кривые) [102]: *a* – для сильного (вверху), $U/2D = 1,25$ и слабого (внизу) $U/2D = 0,625$ хаббардовского взаимодействия; *b* – последовательность плотностей состояний вблизи перехода металл–диэлектрик; безразмерная константа *EPI* $\lambda = 0,8$

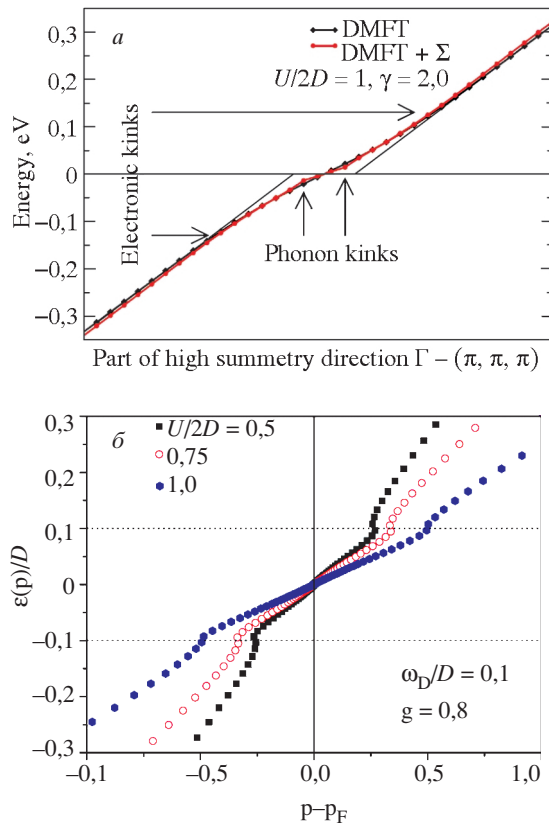


Рис. 19.20. Квазичастичная дисперсия с кинками вблизи уровня Ферми [102]:

a – рассчитанная вдоль высокосимметричного направления $\Gamma - (\pi, \pi, \pi)$ зоны Бриллюэна с использованием «свободной» энергетической дисперсии простой кубической решетки с интегралом переноса только на ближайших соседей в стандартной *DMFT* (черная кривая с ромбами) и в *DMFT*+ Σ_{ph} (красная кривая с кружками) $\lambda = 2$; $\omega_D = 0,01D$; *b* – эволюция фононных кинков, полученная *DMFT*+ Σ_{ph} -расчетами для различных значений величины хаббардовского взаимодействия $U/2D$ (0,5; 0,75; 1,0), $\lambda = 0,8$; $\omega_D = 0,1D$

падает, и положение кинка сдвигается по импульсной оси все дальше от p_F , в то время как энергия кинка сохраняет значение ω_D . Такое поведение подтверждается нашими прямыми *DMFT*+ Σ_{ph} -расчетами. Соответствующая общая картина эволюции фононных кинков в спектре показана на рис. 19.20, *b*.

3.5. Выводы

Нами предложено новое *DMFT*+ Σ_k -обобщение теории динамического среднего поля (*DMFT*), позволяющее включать нелокальные корреляции или дополнительные (по отношению к хаббардовскому) взаимодействия

Для демонстрации сосуществования обоих типов кинков в спектре мы рассмотрели энергетическую дисперсию простой кубической решетки с интегралом переноса только на ближайших соседей. Наиболее удобным для рассмотрения является высокосимметричное направление $\Gamma - (\pi, \pi, \pi)$ зоны Бриллюэна [106]. На рис. 19.20, *a* показана электронная дисперсия вблизи уровня Ферми вдоль этого направления. Черные линии с ромбами – электронный спектр в чистой *DMFT*, а красные линии с кружками представляют результат *DMFT*+ Σ_{ph} -расчетов. Электронные и фононные кинки отмечены стрелками. Однако кинки в электронной дисперсии от *EPI* доминируют для наиболее типичных величин модельных параметров, затрудняя наблюдение кинков чисто электронной природы, предсказанных в [106].

В заключение необходимо сказать о поведении фононных кинков в электронном спектре как функции хаббардовского взаимодействия U . С ростом отношения $U/2D$ значении скорости Ферми

(в принципе любого типа), оставаясь в рамках однопримесной картины *DMFT* и сохраняя неизменной самосогласованную систему ее уравнений. Предложенный подход оказался достаточно универсальным при рассмотрении целого ряда проблем в системах с сильными электронными корреляциями. *DMFT*+ Σ_k -подход замечателен возможностью исследования наряду с одночастичными характеристиками и двухчастичных свойств – таких, как оптическая проводимость.

При рассмотрении всех задач отмечалось, что аналогичные результаты могут быть получены и в рамках более сложных подходов, использующих прямое численное моделирование. Например, похожие результаты по формированию псевдощели в одночастичных характеристиках для двумерной модели Хаббарда также получены в кластерных обобщениях *DMFT* [18, 19]. Однако эти методы имеют характерные ограничения (на размер кластера и др.) и до сих пор широко не применялись для вычисления двухчастичных свойств – таких, как общие функции отклика, в частности, для вычислений оптической проводимости.

Наш подход свободен от подобных ограничений, требует существенно меньших затрат счетного времени, а его преимущество при вычислении двухчастичных функций отклика очевидно. Это также открывает возможности для систематического сравнения различных типов нелокальных флуктуаций или дополнительных взаимодействий и их влияния на электронные свойства, обеспечивая интуитивно более ясный путь к анализу экспериментов или теоретических данных, полученных в рамках более продвинутых схем.

Представленный подход может быть легко обобщен в рамках недавно предложенной *LDA+DMFT*+ Σ_k -расчетной схемы, которая позволяет проводить расчеты псевдощелевых аномалий как в одноэлектронных свойствах, так и в оптической проводимости для реалистичных систем.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Hubbard J.* Electron Correlations in Narrow Energy Bands // Proc. Roy. Soc. London Ser. A, 1963. Vol. 276. P. 238–257; Electron Correlations in Narrow Energy Bands. II. The Degenerate Band Case // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A, 1964. Vol. 277. P. 237–259; Electron Correlations in Narrow Energy Bands. III. An Improved Solution // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A, 1964. Vol. 281. P. 401–419; Electron Correlations in Narrow Energy Bands. IV. The Atomic Representation // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A, 1965. Vol. 285. P. 542–560; Electron Correlations in Narrow Energy Bands. V. A Perturbation Expansion About the Atomic Limit // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A, 1967. Vol. 296. P. 82–99; Electron Correlations in Narrow Energy Bands. VI. The Connexion with Many-Body Perturbation Theory // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A, 1967. Vol. 296. P. 100–112.
2. *Metzner W., Vollhardt D.* Correlated Lattice Fermions in $d = \infty$ Dimensions // Phys. Rev. Lett., 1989. Vol. 62. P. 324–327.
3. *Vollhardt D.* Investigation of Correlated Electron Systems Using the Limit of High Dimensions / Ed. by V.J. Emery // Correlated Electron Systems. Singapore: World Scientific, 1993. P. 57.
4. *Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M.J.* Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions // Rev. Mod. Phys., 1996. Vol. 68. P. 13–125.
5. *Kotliar G., Vollhardt D.* Strongly Correlated Materials: Insights from Dynamical Mean-Field Theory // Phys. Today, 2004. Vol. 57, No. 3. P. 53–59.

6. *Anderson P.W.* Localized magnetic states in metals // *Phys. Rev.*, 1961. Vol. 124, No. 1. P. 41–53.
7. *Pruschke Th., Grewe N.* The Anderson model with finite Coulomb repulsion // *Zs. Phys. B*, 1989. Vol. 74, No. 4. P. 439–449.
8. *Pruschke Th., Cox D.L., Jarrell M.* Hubbard model at infinite dimensions: Thermodynamic and transport properties // *Phys. Rev. B*, 1993. Vol. 47, No. 7. P. 3553–3565.
9. *Hirsch J.E., Fye R.M.* Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals // *Phys. Rev. Lett.*, 1986. Vol. 56, No. 23. P. 2521–2524; *Jarrell M.* Hubbard model in infinite dimensions: A quantum Monte Carlo study. *Phys. Rev. Lett.*, 1992. Vol. 69. P. 168–171; *Rozenberg M., Zhang X.Y., Kotliar G.* Mott-Hubbard transition in infinite dimensions // *Phys. Rev. Lett.*, 1992. Vol. 69. P. 1236–1239; *Georges A., Krauth W.* Numerical solution of the $d = \infty$ Hubbard model: Evidence for a Mott transition // *Phys. Rev. Lett.*, 1992. Vol. 69. P. 1240–1243; *Jarrell M.* Numerical Methods for lattice Quantum Many-Body Problems / Ed. by D. Scalapino. Addison Wesley, 1997.
10. *Wilson K.G.* The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem // *Rev. Mod. Phys.*, 1975. Vol. 47, No. 4. P. 773–840; *Krishna-murthy H.R., Wilkins J.W., Wilson K.G.* Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. I. Static properties for the symmetric case // *Phys. Rev. B*, 1980. Vol. 21, No. 3. P. 1003–1043; Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. II. Static properties for the asymmetric case // *Phys. Rev. B*, 1980. Vol. 21, No. 3. P. 1044–1083.
11. *Bulla R., Hewson A.C., Pruschke Th.* Numerical renormalization group calculations for the self-energy of the impurity Anderson model // *J. Phys.: Condens. Matter*, 1998. Vol. 10, No. 37. P. 8365–8380; *Bulla R.* Zero temperature metal-insulator transition in the infinite-dimensional Hubbard model // *Phys. Rev. Lett.*, 1999. Vol. 83, No. 1. P. 136–139.
12. *Pruschke Th., Jarrell M., Freericks J.K.* Anomalous normal-state properties of high-Tc superconductors: intrinsic properties of strongly correlated electron systems? // *Adv. in Phys.*, 1995. Vol. 44, No. 2. P. 187–210.
13. *Anisimov V.I., Poteryaev A.I., Korotin M.A. et al.* First-principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: dynamical mean-field theory // *J. Phys.: Condens. Matter*, 1997. Vol. 9, No. 35. P. 7359–7368.
14. *Lichtenstein A.I., Katsnelson M.I.* Ab initio calculations of quasiparticle band structure in correlated systems: LDA++ approach // *Phys. Rev. B*, 1998. Vol. 57, No. 12. P. 6884–6895.
15. *Nekrasov I.A., Held K., Blümer N. et al.* Calculation of photoemission spectra of the doped Mott insulator $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{TiO}_3$ using LDA+DMFT(QMC) // *Euro. Phys. J. B*, 2000. Vol. 18, No. 1. P. 55–62.
16. *Held K., Nekrasov I.A., Keller G. et al.* Realistic investigations of correlated electron systems with LDA+DMFT // *Psi-k Newsletter*, 2003. Vol. 56. P. 65–103.
17. *Held K., Nekrasov I.A., Blümer N. et al.* Realistic modeling of strongly correlated electron systems: An introduction to the LDA+DMFT approach // *Int. J. Mod. Phys. B*, 2001. Vol. 15. P. 2611–2625; *Held K., Nekrasov I.A., Keller G. et al.* The LDA+DMFT approach to materials with strong electronic correlations // *ArXiv: cond-mat/0112079* (Quantum simulations of complex many-body systems: from theory to algorithms / Eds. J. Grotendorst, D. Marks, A. Muramatsu. NIC Ser. Forschungszentrum Jülich, 2002. Vol. 10. P. 175–209); *Lichtenstein A. I., Katsnelson M.I., Kotliar G.* Electron correlations and materials properties. Ed. by A. Gonis, N. Kioussis, M. Ciftan. N.Y.: Kluwer Academic Publishers., 2002. P. 428; available as *cond-mat/0112079*.
18. *Maier Th., Jarrell M., Pruschke Th., Hettler M.* Quantum cluster theories // *Rev. Mod. Phys.*, 2005. Vol. 77, No. 3. P. 1027–1080; *ArXiv: cond-mat/0404055*.
19. *Kotliar G., Savrasov S.Y., Palsson G., Biroli G.* Cellular dynamical mean field approach to strongly correlated systems // *Phys. Rev. Lett.*, 2001. Vol. 87. P. 186401–186404; for periodized version (PCDMFT) see: *Capone M., Civelli M., Kancharla S.S. et al.* Cluster-dynamical mean-field theory of the density-driven Mott transition in the one-dimensional Hubbard model // *Phys. Rev. B*, 2004. Vol. 69. P. 195105–195109.
20. *Sadovskii M.V., Nekrasov I.A., Kuchinskii E.Z. et al.* Pseudogaps in Strongly Correlated Metals // *ArXiv: cond-mat/0502612*.
21. *Kuchinskii E.Z., Nekrasov I.A., Sadovskii M.V.* “Destruction” of the Fermi surface due to pseudogap fluctuations in strongly correlated systems // *Письма в ЖЭТФ*, 2005. Т. 82. С. 217; *ArXiv: cond-mat/0506215*.

22. *Sadovskii M.V., Nekrasov I.A., Kuchinskii E.Z. et al.* Pseudogaps in strongly correlated metals: a generalized dynamical mean-field theory approach // *Phys. Rev. B*, 2005. Vol. 72. Art. 155105; ArXiv: cond-mat/0508585.
23. *Kuchinskii E.Z., Nekrasov I.A., Sadovskii M.V.* Pseudogaps: Introducing the length scale into DMFT // *ФНТ*, 2006. Т. 32. С. 528 [*Low Temp. Phys.*, 2006. Vol. 32. P. 398]; ArXiv: cond-mat/0510376.
24. *Kuchinskii E.Z., Nekrasov I.A., Sadovskii M.V.* Pseudogaps in strongly correlated metals: optical conductivity within the generalized dynamical mean-field theory approach // *Phys. Rev. B*, 2007. Vol. 75. P. 115102–115112; ArXiv: cond-mat/0609404.
25. *Kuchinskii E.Z., Nekrasov I.A., Sadovskii M.V.* Mott–Hubbard transition and Anderson localization: generalized dynamical mean-field theory approach // *ЖЭТФ*, 2008. Т. 133, вып. 3. С. 670; ArXiv: 0706.2618.
26. *Vollhardt D., Wölfle P.* Diagrammatic, self-consistent treatment of the Anderson localization problem in $d \leq 2$ dimensions // *Phys. Rev. B*, 1980. Vol. 22. P. 4666–4679; Scaling equations from a self-consistent theory of Anderson localization // *Phys. Rev. Lett.*, 1982. Vol. 48. P. 699.
27. *Sadovskii M.V.* Diagrammatics. Singapore: World Scientific, 2006; *Садовский М.В.* Диаграмматика (Лекции по избранным задачам теории конденсированного состояния). М.; Ижевск, 2004.
28. *Timusk T., Statt B.* The pseudogap in high-temperature superconductors: an experimental survey // *Rep. Progr. Phys.*, 1999. Vol. 62, No. 1. P. 61–122.
29. *Садовский М.В.* Псевдощель в высокотемпературных сверхпроводниках // *Успехи физических наук*, 2001. Т. 171, № 5. С. 539–564; ArXiv: cond-mat/0102111; ArXiv: cond-mat/0408489.
30. *Pines D.* Pseudogap Behavior in Underdoped Cuprates // ArXiv: cond-mat/0404151.
31. *Schmalian J., Pines D., Stojkovic B.* Microscopic theory of weak pseudogap behavior in the underdoped cuprate superconductors I: General theory and quasiparticle properties // *Phys. Rev. Lett.*, 1998. Vol. 80. P. 3839; Preprint cond-mat/9804129; *Phys. Rev. B*, 1999. Vol. 60. P. 667.
32. *Кучинский Э.З., Садовский М.В.* Модели псевдощелевого состояния двумерных систем // *ЖЭТФ*, 1999. Т. 115. С. 1765 [*JETP*, 1999. Vol. 88. P. 347]; ArXiv: cond-mat/9808321.
33. *Садовский М.В.* Точное решение для электронной плотности состояний в одной модели неупорядоченной системы // *ЖЭТФ*, 1979. Т. 77, вып. 5 (11). С. 2070–2079. [*Sov. Phys.-JETP*, 1979. Vol. 50. P. 989.]
34. *Садовский М.В.* Об одной модели неупорядоченной системы (к теории «жидких полупроводников») // *ЖЭТФ*, 1974. Т. 66, вып. 5. С. 1720–1733.
35. *Sadovskii M.V., Timofeev A.A.* The two-particle Green function in a model of a one-dimensional disordered system: An exact solution? // *J. Moscow Phys. Soc.*, 1991. Vol. 1. P. 391–406; Оптическая проводимость высокотемпературных сверхпроводников в модели «спиновых мешков»: точное решение? // *СФХТ*, 1991. Т. 4, вып. 1. С. 11–23.
36. *Садовский М.В., Стригина Н.А.* Оптическая проводимость в двумерной модели псевдощелевого состояния // *ЖЭТФ*, 2002. Т. 122. С. 610–623 [*JETP*, 2002. Vol. 95. P. 526]; ArXiv: cond-mat/0203479.
37. *Vilk Y.M., Tremblay A.-M.S.* Non-Perturbative Many-Body Approach to the Hubbard Model and Single-Particle Pseudogap // *J. Phys. I France*, 1997. Vol. 7. P. 1309.
38. *Ding H., Yokoda T., Campuzano J.C. et al.* Spectroscopic evidence for a pseudogap in the normal state of underdoped high-Tc superconductors // *Nature*, 1996. Vol. 382. P. 51.
39. *Kuchinskii E.Z., Sadovskii M.V.* Non-Fermi liquid behavior in the fluctuating gap model: from pole to zero of the green's function // *ЖЭТФ*, 2006. Т. 130, № 3 (9). С. 477–490; ArXiv: cond-mat/0602406.
40. *Armitage N.P., Lu D.H., Kim C. et al.* Anomalous electronic structure and pseudogap effects in $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$ // *Phys. Rev. Lett.*, 2001. Vol. 87. Art. 147003.
41. *Damascelli A., Hussain Z., Shen Z.-X.* Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors // *Rev. Mod. Phys.*, 2003. Vol. 75, No. 2. P. 473–541.
42. *Campuzano J.C., Norman M.R., Randeria M.* “Physics of Superconductors”. В.: Springer / Ed. K.H. Bennemann, J.B. Ketterson, 2004. Vol. II. P. 167–273; *Fink J., Borisenko S., Kordyuk A. et al.* Dressing of the charge carriers in high-Tc superconductors // ArXiv: cond-mat/0512307; *Zhou X.J., Cuk T., Devereaux T. et al.* Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy on Electronic

Structure and Electron-Phonon Coupling in Cuprate Superconductors // ArXiv: cond-mat/0604284.

43. *Basov D.N., Timusk T.* Electrodynamics of high-Tc superconductors // *Rev. Mod. Phys.*, 2005. Vol. 77. P. 721–779.

44. *Hwang J., Timusk T., Gu G.D.* Doping dependent optical properties of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ // *J. Phys.: Condes. Matter*, 2007. Vol. 19. Art. 125208; ArXiv: cond-mat/0607653.

45. *Садовский М.В.* Модели псевдощелевого состояния в высокотемпературных сверхпроводниках // *Струны, браны, решетки, сетки, псевдощели и пылинки*. М.: Науч. мир, 2007. С. 357–441; arXiv: cond-mat/0408489.

46. *Kohn W., Sham L.J.* Self-consistent equations including exchange and correlation effects // *Phys. Rev.*, 1965. Vol. 140. A1133–A1138; *Sham L.J., Kohn W.* One-particle properties of an inhomogeneous interacting electron gas // *Phys. Rev.*, 1966. Vol. 145. P. 561–567.

47. *Hedin L., Lundqvist B.I.* Explicit local exchange-correlation potentials // *J. Phys. C*, 1971. Vol. 4, No. 14. P. 2064–2083; *Barth U. von, Hedin L.* A local exchange-correlation potential for the spin polarized case // *J. Phys. C*, 1972. Vol. 5, No. 13. P. 1629–1642.

48. *Kuchinskii E.Z., Nekrasov I.A., Pchelkina Z.V., Sadovskii M.V.* Pseudogap Behavior in $\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{SrCuO}_8$: Results of generalized dynamical mean-field approach // *ЖЭТФ*, 2007. Т. 131, вып. 5. С. 908–921; ArXiv: cond-mat/0606651.

49. *Nekrasov I.A., Kokorina E.E., Kuchinskii E.Z. et al.* RPES spectral functions and Fermi surface for $\text{La}_{1.86}\text{Sr}_{0.14}\text{CuO}_4$ compared with $\text{LDA}+\text{DMFT}+\Sigma$ -calculations // *ЖЭТФ*, 2010. Т. 137. С. 1133.

50. *Nekrasov I.A., Kokorina E.E., Kuchinskii E.Z. et al.* Comparative study of electron and hole doped high-Tc compounds in pseudogap regime: $\text{LDA}+\text{DMFT}+\Sigma$ approach // *J. Phys. Chem. Solids*, 2008. Vol. 69. P. 3269; ArXiv: 0708.2313.

51. *Kokorina E.E., Kuchinskii E.Z., Nekrasov I.A. et al.* Origin of “hot-spots” in the pseudogap regime of $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$: $\text{LDA}+\text{DMFT}+\Sigma$ study // *ЖЭТФ*, 2008. Т. 134, № 5 (11). С. 968–979.

52. *Nekrasov I.A., Pavlov N.S., Kuchinskii E.Z. et al.* Electronic structure of $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ studied via ARPES and $\text{LDA}+\text{DMFT}+\Sigma_k$ // *Phys. Rev. B*, 2009. Vol. 80. P. 140510–140513.

53. *Nekrasov I.A., Kuchinskii E.Z., Sadovskii M.V.* Pseudogap phase of high-Tc compounds described within the $\text{LDA}+\text{DMFT}+\Sigma$ approach // *J. Phys. Chem. Solids* DOI: 10.1016/j.jpcs.2010.10.081; ArXiv: 1006.0295.

54. *Held K.* Electronic structure calculations using dynamical mean field theory // *Adv. Phys.*, 2007. Vol. 56, No. 6. P. 829–926.

55. *Tsunekawa M., Sekiyama A., Kasai S. et al.* Bulk electronic structures and strong electron-phonon interactions in an electron-doped high-temperature superconductor // *New J. Phys.*, 2008. Vol. 10. Art. 073005.

56. *Yoshida T., Zhou X.J., Tanaka K. et al.* Systematic doping evolution of the underlying Fermi surface of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ // *Phys. Rev. B*, 2006. Vol. 74. Art. 224510.

57. *Andersen O.K.* Linear methods in band theory // *Phys. Rev. B*, 1975. Vol. 12. P. 3060–3083; *Andersen O.K., Jepsen O.* First-principles tight-binding theory // *Phys. Rev. Lett.*, 1984. Vol. 53. P. 2571–2574.

58. *Andersen O.K., Saha-Dasgupta T.* Muffin-tin orbitals of arbitrary order // *Phys. Rev. B*, 2000. Vol. 62. R16219; *Andersen O.K., Saha-Dasgupta T., Ezhov S. et al.* Third-generation MTOs // *Psi-k Newsletter*, 2001. Vol. 45. P. 86–119; *Andersen O.K., Saha-Dasgupta T., Ezhov S.* Third-generation muffin-tin orbitals // *Bull. Mater. Sci.*, 2003. Vol. 26. P. 19.

59. *Andersen O.K., Liechtenstein A.I., Jepsen O., Paulsen F.* LDA energy bands, low-energy hamiltonians, t , t' , $t_{\perp}(k)$, and J_{\perp} // *J. Phys. Chem. Solids*, 1995. Vol. 56, No. 12. P. 1573–1591.

60. *Gunnarsson O., Andersen O.K., Jepsen O., Zaanen J.* Density-functional calculation of the parameters in the Anderson model: Application to Mn in CdTe // *Phys. Rev. B*, 1989. Vol. 39. P. 1708–1722.

61. *Zobkalo I.A., Gukasov A.G., Kokovin S.Yu. et al.* Polarized neutron scattering investigation of successive magnetic phase transitions in Nd_2CuO_4 and $\text{Nd}_{1.87}\text{Ce}_{0.19}\text{CuO}_4$ // *Solid State Comm.*, 1991. Vol. 80, No. 11. P. 921–924; *Motoyama E.M., Yu G., Vishik I.M.* Spin correlations in the electron-doped high-transition-temperature superconductor $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4\pm\delta}$ // *Nature*, 2007. Vol. 445. P. 186.

62. *Huecker M., Kim Y.-J., Gu G.D. et al.* Neutron scattering study on $\text{La}_{1.9}\text{Ca}_{1.1}\text{Cu}_2\text{O}_{6+\delta}$ and $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CaCu}_2\text{O}_{6+\delta}$ // *Phys. Rev. B*, 2005. Vol. 71. P. 094510–094521.

63. *Armitage N.P., Ronning F., Lu D.H. et al.* Doping dependence of an n -type cuprate superconductor investigated by angle-resolved photoemission spectroscopy // *Phys. Rev. Lett.*, 2002. Vol. 88. P. 257001–257004.
64. *Kaminski A., Fretwell H.M., Norman M.R. et al.* Momentum anisotropy of the scattering rate in cuprate superconductors // *Phys. Rev. B*, 2005. Vol. 71. P. 014517–014523.
65. *Borisenko S.V., Golden M.S., Legner S. et al.* Joys and pitfalls of fermi surface mapping in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ using angle resolved photoemission // *Phys. Rev. Lett.*, 2000. Vol. 84. P. 4453.
66. *Massidda S., Hamada N., Yu J., Freeman A.J.* Electronic structure of Nd–Ce–Cu–O, a Fermi liquid superconductor // *Physica C*, 1989. Vol. 157, No. 3. P. 571–574; *Matsuno S., Kanimura H.* Electronic structure of Nd_2CuO_4 and its physical properties // *J. of Superconductivity*, 1994. Vol. 7, No. 3. P. 517–519.
67. *Onose Y., Taguchi Y., Ishizaka K., Tokura Y.* Doping dependence of pseudogap and related charge dynamics in $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ // *Phys. Rev. Lett.*, 2001. Vol. 87. P. 217001–217004.
68. *Quijada M.A., Tanner D.B., Kelley R.J. et al.* Anisotropy in the ab-plane optical properties of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ single-domain crystals // *Phys. Rev. B*, 1999. Vol. 60. P. 14917–14934.
69. *Lee P.A., Ramakrishnan T.V.* Disordered electronic systems // *Rev. Mod. Phys.*, 1985. Vol. 57. P. 287–337; *Belitz D., Kirkpatrick T.R.* The Anderson-Mott transition // *Rev. Mod. Phys.*, 1994. Vol. 66. P. 261–380.
70. *Mott N.F.* The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals // *Proc. Phys. Soc. A*, 1949. Vol. 62, No. 7. P. 416; *Metal-insulator transitions*. L.: Taylor and Francis, 1990.
71. *Anderson P.W.* Absence of diffusion in certain random lattices // *Phys. Rev.*, 1958. Vol. 109. P. 1492–1505.
72. *Finkelstein A.M.* Influence of Coulomb interaction on the properties of disordered metals // *ЖЭТФ*, 1983. Т. 84, вып. 1. С. 168 [*Sov. Phys.-JETP*, 1983. Vol. 57, No. 1. P. 97]; *Castellani C., Di Castro C., Lee P.A., Ma M.* Interaction-driven metal-insulator transitions in disordered fermion systems // *Phys. Rev. B*, 1984. Vol. 30. P. 527–543.
73. *Dobrosavljevic' V., Kotliar G.* Mean field theory of the Mott–Anderson transition // *Phys. Rev. Lett.*, 1997. Vol. 78. P. 3943–3946.
74. *Dobrosavljevic' V., Pastor A.A., Nikolic' B.K.* Typical medium theory of Anderson localization: A local order parameter approach to strong-disorder effects // *Europhys. Lett.*, 2003. Vol. 62, No. 1. P. 76–82.
75. *Byczuk K., Hofstetter W., Vollhardt D.* Mott–Hubbard transition versus Anderson localization in correlated electron systems with disorder // *Phys. Rev. Lett.*, 2005. Vol. 94. P. 056404–056407.
76. *Henseler P., Kroha J., Shapiro B.* Static screening and delocalization effects in the Hubbard–Anderson model // *Phys. Rev. B*, 2008. Vol. 77. P. 075101–075106.
77. *Henseler P., Kroha J., Shapiro B.* Self-consistent study of Anderson localization in the Anderson–Hubbard model in two and three dimensions // *Phys. Rev. B*, 2008. Vol. 78. P. 235116–235121.
78. *Pezzoli M.E., Becca F.* Ground-state properties of the disordered Hubbard model in two dimensions // *Phys. Rev. B*, 2010. Vol. 81. P. 075106–075116; arXiv: 0906.4870.
79. *Ulmke M., Janiš V., Vollhardt D.* Anderson–Hubbard model in infinite dimensions // *Phys. Rev. B*, 1995. Vol. 51. P. 10411–10426.
80. *Vlaming R., Vollhardt D.* Controlled mean-field theory for disordered electronic systems: Single-particle properties // *Phys. Rev. B*, 1992. Vol. 45. P. 4637–4649.
81. *Wölfle P., Vollhardt D.* Anderson localization // *Springer Series in Solis State Sciences* / Eds. Y. Nagaoka, H. Fukuyama. B.: Springer Verlag, 1982. Vol. 39. P. 26.
82. *Sadovskii M.V.* // *Sov. Sci. Rev. – Phys. Rev* / Ed. I.M. Khalatnikov. N.Y.: Harwood Academic Publ., 1986. Vol. 7. P. 1.
83. *Vollhardt D., Wölfle P.* // *Electronic Phase Transitions* / Eds. W. Hanke, Yu.V. Kopaev. Amsterdam, 1992. Vol. 32. P. 1.
84. *Кучинский Э.З., Садовский М.В., Суворов В.Г., Эркабаев М.А.* Самосогласованная теория перехода металл–диэлектрик в неупорядоченных системах // *ЖЭТФ*, 1995. Т. 107. С. 2027 [*JETP*, 1995. Vol. 80. P. 1122]; *Кучинский Э.З., Эркабаев М.А.* Переход металл–диэлектрик в самосогласованной теории // *ФТТ*, 1997. Т. 39. С. 412.

85. *Kuchinskii E.Z., Kuleeva N.A., Nekrasov I.A., Sadovskii M.V.* Two-dimensional Anderson–Hubbard model in DMFT+ Σ approximation // *ЖЭТФ*, 2010. Т. 137, No. 2. С. 368–379; ArXiv: 0908.3747.
86. *Bulla R.* Zero temperature metal-insulator transition in the infinite-dimensional Hubbard model // *Phys. Rev. Lett.*, 1999. Vol. 83. P. 136–139; *Bulla R., Costi T.A., Vollhardt D.* Finite-temperature numerical renormalization group study of the Mott transition // *Phys. Rev. B*, 2001. Vol. 64. P. 045103–045111.
87. *Blümer N.* Mott–Hubbard Metal-Insulator Transition and Optical Conductivity. Thesis. München, 2002.
88. *Erkabaev M.A., Sadovskii M.V.* Self-consistent localization theory in the two-band model // *J. Moscow Phys. Soc.*, 1992. Vol. 2. P. 233.
89. *Abrahams E., Anderson P.W., Licciardello D.C., Ramakrishnan T.V.* Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions // *Phys. Rev. Lett.*, 1979. Vol. 42. P. 673–676.
90. *Altshuler B.L., Aronov A.G., Lee P.A.* Interaction effects in disordered Fermi systems in two dimensions // *Phys. Rev. Lett.*, 1980. Vol. 44. P. 1288–1291.
91. *Dolan G.J., Osheroff D.D.* Nonmetallic conduction in thin metal films at low temperatures // *Phys. Rev. Lett.*, 1979. Vol. 43. P. 721–724; *Bishop D.J., Tsui D.C., Dynes R.C.* Nonmetallic conduction in electron inversion layers at low temperatures // *Phys. Rev. Lett.*, 1980. Vol. 44. P. 1153–1156; *Uren M.J., Davies R.A., Pepper M.* The observation of interaction and localisation effects in a two-dimensional electron gas at low temperatures // *J. Phys. C*, 1980. Vol. 13, No. 33. L985.
92. *Kravchenko S.V., Sarachik M.P.* Metal-insulator transition in two-dimensional electron systems // *Rep. Prog. Phys.*, 2004. Vol. 67, No. 1. P. 1.
93. *Abrahams E., Kravchenko S.V., Sarachik M.P.* Metallic behavior and related phenomena in two dimensions // *Rev. Mod. Phys.*, 2001. Vol. 73. P. 251–266.
94. *Holstein T.* Studies of polaron motion: Part I. The molecular-crystal model // *Ann. Phys.*, 1959. Vol. 8, No. 3. P. 325–342.
95. *Bulla R., Costi T.A., Pruschke T.* Numerical renormalization group method for quantum impurity systems // *Rev. Mod. Phys.*, 2008. Vol. 80. P. 395–450.
96. *Hewson A.C., Mayer D.* Non-equilibrium differential conductance through a quantum dot in a magnetic field // *J. Phys.: Condens. Matter*, 2002. Vol. 17, No. 35. P. 5413–5422.
97. *Lanzara A., Bogdanov P.V., Zhou X.J. et al.* Evidence for ubiquitous strong electron-phonon coupling in high-temperature superconductors // *Nature*, 2001. Vol. 412. P. 510.
98. *Shen Z.-X., Lanzara A., Ishihara S., Nagaosa N.* Role of the electron-phonon interaction in the strongly correlated cuprate superconductors // *Phil. Mag. B*, 2002. Vol. 82. P. 1349–1368.
99. *Koller W., Hewson A.C., Edwards D.M.* Polaronic quasiparticles in a strongly correlated electron band // *Phys. Rev. Lett.*, 2006. Vol. 95. Art. 256401.
100. *Hague J.P.* Electron and phonon dispersions of the two-dimensional Holstein model: effects of vertex and non-local corrections // *J. Phys.: Condens. Matter*, 2003. Vol. 15, No. 17. Art. 2535–2550.
101. *Migdal A.B.* // *ЖЭТФ*, 1958. Т. 34. С. 1438 [*Sov. Phys. JETP*, 1958. Vol. 7. P. 999].
102. *Kuchinskii E.Z., Nekrasov I.A., Sadovskii M.V.* Interplay of electron-phonon interaction and strong correlations: DMFT+ Σ -study // *Phys. Rev. B*, 2009. Vol. 80. Art. 115124; ArXiv: 0906.3865.
103. *Koller W., Mayer D., Hewson A.C.* Dynamic response functions for the Holstein–Hubbard model // *Phys. Rev. B*, 2004. Vol. 70. No. 15. Art. 155103–155114.
104. *Jeon G.S., Park T.-H., Han J.H. et al.* Dynamical mean-field theory of the Hubbard–Holstein model at half filling: Zero temperature metal-insulator and insulator-insulator transitions // *Phys. Rev. B*, 2004. Vol. 70, No. 12. Art. 125114.
105. *Koller W., Mayer D., Ōno Y., Hewson A.C.* First- and second-order phase transitions in the Holstein–Hubbard model // *Europhys. Lett.*, 2004. Vol. 66, No. 4. P. 559–564.
106. *Byczuk K., Killar M., Held K. et al.* Kinks in the dispersion of strongly correlated electrons // *Nature Phys.*, 2007. Vol. 3, No. 3. P. 168.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Раздел I. ИМПУЛЬСНАЯ ЭНЕРГЕТИКА

<i>Глава 1.</i> МАЛОГАБАРИТНЫЕ СИЛЬНОТОЧНЫЕ ГЕНЕРАТОРЫ РАДАН И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ (<i>Шпак В.Г.</i>)	5
<i>Глава 2.</i> SOS-ЭФФЕКТ И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ В МОЩНОЙ НАНОСЕКУНДНОЙ ЭЛЕКТРОНИКЕ (<i>Рукин С.Н.</i>)	19
<i>Глава 3.</i> СИЛЬНОТОЧНЫЕ НАНОСЕКУНДНЫЕ РАЗРЯДНИКИ В ВИДЕ АВТОКОММУТАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ С ЕМКОСТНЫМИ СВЯЗЯМИ (<i>Загулов Ф.Я., Кладухин С.В.</i>)	65
<i>Глава 4.</i> СВЕРХБЫСТРЫЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ВЗРЫВ ПРОВОДНИКОВ: МЕХАНИЗМЫ РАЗРУШЕНИЯ, СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛАЗМЕННОГО КАНАЛА (<i>Барахвостов С.В., Бочкарев М.Б., Волков Н.Б., Нагаев К.А., Тимошенкова О.В., Чингина Е.А.</i>) ..	76
<i>Глава 5.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ ИМПУЛЬСНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПРОБОЯ И ВАКУУМНОГО ПЕРЕКРЫТИЯ ДИЭЛЕКТРИКОВ (<i>Емлин Р.В.</i>)	105
<i>Глава 6.</i> ЧАСТОТНЫЕ НАНОСЕКУНДНЫЕ УСКОРИТЕЛИ ЭЛЕКТРОНОВ СЕРИИ УРТ ДЛЯ РАДИАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ (<i>Соковнин С.Ю.</i>) ..	114
<i>Глава 7.</i> ИМПУЛЬСНАЯ ТЕХНИКА НА СЛУЖБЕ МЕДИЦИНЫ (<i>Кузнецов В.Л.</i>) .	121

Раздел II. НОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И МАТЕРИАЛЫ

<i>Глава 8.</i> ПОЛУЧЕНИЕ НАНОПОРОШКОВ ИМПУЛЬСНЫМИ МЕТОДАМИ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ (<i>Азаркевич Е.И., Бекетов И.В., Иванов М.Г., Саматов О.М., Сафронов А.П.</i>)	129
<i>Глава 9.</i> СИНТЕЗ НАНОПОРОШКОВ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ С ПОМОЩЬЮ МОЩНОГО CO ₂ -ЛАЗЕРА (<i>Осипов В.В., Лисенков В.В., Платонов В.В.</i>)	153
<i>Глава 10.</i> СИНТЕЗ И ХАРАКТЕРИСТИКИ ОПТИЧЕСКИХ КЕРАМИК (<i>Осипов В.В., Шитов В.А., Орлов А.Н., Лукьяшин К.Е.</i>)	173
<i>Глава 11.</i> РАЗВИТИЕ НОВОГО ПОДХОДА К СОЗДАНИЮ МАТЕРИАЛОВ ИЗ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПОРОШКОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ МАГНИТНО-ИМПУЛЬСНОГО МЕТОДА И УСТРОЙСТВ НА ИХ ОСНОВЕ (<i>Иванов В.В., Липилин А.С., Паранин С.Н., Хрустов В.Р.</i>)	193
<i>Глава 12.</i> ИССЛЕДОВАНИЕ ГАЗОРАЗРЯДНЫХ СИСТЕМ С ПЛАЗМЕННЫМ КАТОДОМ И РАЗРАБОТКА НА ИХ ОСНОВЕ УСТРОЙСТВ ДЛЯ МОДИФИКАЦИИ МАТЕРИАЛОВ (<i>Гаврилов Н.В., Емлин Д.Р., Каменецких А.С., Мамаев А.С.</i>)	210
<i>Глава 13.</i> ОТ ПРОБЛЕМ РАДИАЦИОННОЙ ЗАЩИТЫ И РАДИАЦИОННОЙ СТОЙКОСТИ К ТЕХНОЛОГИЯМ РАДИАЦИОННОЙ ОБРАБОТКИ МАТЕРИАЛОВ (<i>Овчинников В.В.</i>)	245

	453
<i>Глава 14. АТОМНО-ЗОНДОВЫЕ МЕТОДЫ ПОЛЕВОЙ ИОННОЙ МИКРОСКОПИИ В ИССЛЕДОВАНИЯХ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛОВ ПОСЛЕ ИНТЕНСИВНЫХ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ (Ивченко В.А.)</i>	258
<i>Глава 15. ФОРМИРОВАНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВОЙ И ЭЛЕКТРОРАЗРЯДНОЙ НЕРАВНОВЕСНОЙ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ (Кузнецов Д.Л.)</i>	272
Раздел III. ОПТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ	
<i>Глава 16. ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЙ АНАЛИЗ (Соломонов В.И., Спирина А.В.)</i>	282
<i>Глава 17. ОПТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ, СВЯЗАННЫЕ С ПРОЯВЛЕНИЕМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СПИНОВОГО И ОРБИТАЛЬНОГО МОМЕНТОВ ФОТОНА (Кундикова Н.Д.)</i>	295
<i>Глава 18. ПЕРЕСТРАИВАЕМЫЕ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ: СВОЙСТВА И ПРИМЕНЕНИЕ (Бибикова Э.А., Кундикова Н.Д., Попкова А.М., Попков И.И.)</i>	317
Раздел IV. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ	
<i>Глава 19. ОБОБЩЕННАЯ ТЕОРИЯ ДИНАМИЧЕСКОГО СРЕДНЕГО ПОЛЯ В ФИЗИКЕ СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ (Кучинский Э.В., Некрасов И.А., Садовский М.В.)</i>	332
<i>Глава 20. НЕКОТОРЫЕ ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ЭЛЕКТРОГИДРОДИНАМИКИ ЖИДКОСТЕЙ СО СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ (Зубарев Н.М.)</i>	379
<i>Глава 21. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БЫСТРОПРОТЕКАЮЩИХ ПРОЦЕССОВ В ВАКУУМНОМ РАЗРЯДЕ (Уйманов И.В.)</i>	393
<i>Глава 22. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИЛЬНОТОЧНОЙ ВАКУУМНОЙ ДУГИ (Шмелев Д.Л.)</i>	418

Научное издание

**ЭЛЕКТРОФИЗИКА НА УРАЛЕ:
ЧЕТВЕРТЬ ВЕКА ИССЛЕДОВАНИЙ**

Рекомендовано к изданию ученым советом Института электрофизики
и НИСО УрО РАН

Редактор **Т.П. Гуськова**
Технический редактор **Е.М. Бородулина**
Корректор **Г.Н. Старкова**
Компьютерная верстка **А.В. Баталовой**
Дизайн **Т.О. Турыгиной**

ISBN 978-5-7691-2229-3



НИСО УрО РАН № 37(11)–47. Подписано в печать 29.09.2011. Формат 70×100¹/₁₆.
Бумага типографская. Печать офсетная. Усл. печ. л. 37. Уч.-изд. л. 38.
Тираж 150 экз. Заказ 182.

Оригинал-макет изготовлен в РИО УрО РАН.
620990, Екатеринбург, ул. Первомайская, 91.

Типография «Уральский центр академического обслуживания».
620990, Екатеринбург, ул. Первомайская, 91.