

# МОДЕЛИ ПСЕВДОЩЕЛЕВОГО СОСТОЯНИЯ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

М.В.САДОВСКИЙ

*Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, 620016, Россия*

Дается краткий обзор основных представлений и проблем физики высокотемпературных сверхпроводников на основе оксидов меди. Формулируется список основных “решенных” и “нерешенных” задач. Главной проблемой остается последовательное теоретическое описание свойств нормального состояния, для чего требуется выяснение природы так называемого псевдощелевого состояния.

Рассматриваются упрощенные модели псевдощелевого состояния, основанные на картине сильного рассеяния электронов на (псевдощелевых) флуктуациях ближнего порядка “диэлектрического” (AFM, CDW) типа и концепции “горячих” точек (участков) на поверхности Ферми. Псевдощелевые флуктуации описываются в статическом приближении, как соответствующее гауссово случайное поле, в котором движется электрон.

Построена система рекуррентных уравнений для одночастичной функции Грина и вершинной части, описывающей взаимодействие электронов с внешним полем, учитывающая все фейнмановские диаграммы для рассеяния электронов на псевдощелевых флуктуациях. Приводятся результаты расчетов спектральной плотности, плотности состояний и оптической проводимости, демонстрирующие как эффекты образования псевдощели в электронном спектре, так и эффекты локализации.

Анализируются особенности сверхпроводящего состояния ( $s$  и  $d$  – спаривание), возникающего “на фоне” таких псевдощелевых флуктуаций. На основе микроскопического вывода коэффициентов разложения Гинзбурга – Ландау проведен расчет зависимости критической температуры  $T_c$  и других основных характеристик сверхпроводника от параметров псевдощели. Проанализировано влияние рассеяния на “нормальных” примесях. Показано, что в рамках рассматриваемого упрощенного подхода удастся провести полуквантовое моделирование фазовой диаграммы ВТСП купратов<sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup>По материалам выступления автора на семинаре ОТФ ФИАН 7 октября 2003 года.

# 1 Основные представления и проблемы физики высокотемпературных сверхпроводников.

Мы начнем с некоторого обзора положения дел в физике высокотемпературных сверхпроводников, который может быть полезен читателю, не занимающемуся непосредственно этой областью.

## 1.1 Что ТОЧНО известно о ВТСП – оксидах:

Высокотемпературные сверхпроводники на основе оксидов меди (ВТСП) изучаются уже более 15 лет. За это время достигнут несомненный прогресс в понимании их природы и основных физических свойств, несмотря на то, что эти системы обладают весьма сложной фазовой диаграммой, содержащей практически все основные явления, изучаемые в физике твердого тела (Рис. 1).

Представляется, что целый ряд фактов уже можно считать твердо установленными и не подлежащими дальнейшему пересмотру<sup>2</sup>. В применении к сверхпроводящему состоянию, список “решенных” задач может быть выписан в следующем виде:

- *Природа сверхпроводимости  $\Rightarrow$  куперовское спаривание.*

При этом вполне установленным можно считать, что в данных системах реализуется

1. Спаривание  $d$  – типа, причем в спектре элементарных возбуждений имеется
2. Энергетическая щель  $\Delta \cos 2\phi$ , где полярный угол  $\phi$  определяет направление электронного импульса в двумерном обратном пространстве, соответствующем плоскости  $CuO_2$ . В частности, щель обращается в нуль и меняет знак на диагоналях двумерной зоны Бриллюэна.
3. Размер пар относительно мал:  $\xi_0 \sim 5 - 10a$ ,

---

<sup>2</sup>Разумеется всякий такой список носит достаточно субъективный характер и основывается, в значительной мере, на предпочтениях и “вкусах” автора. Хорошо известно, что в физике ВТСП “мирно сосуществуют” зачастую абсолютно противоположные взгляды и предположения. Тем не менее, представляется, что соответствующее перечисление может быть достаточно полезным.

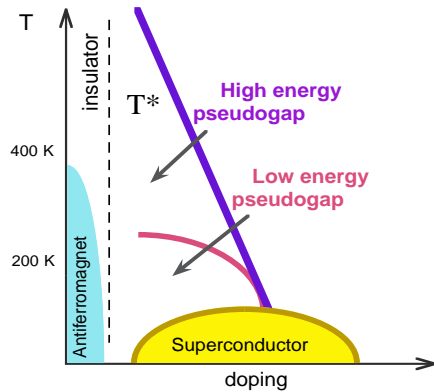


Рис. 1: Типичная фазовая диаграмма высокотемпературного сверхпроводника на основе оксида меди. Схематически показаны области существования различных фаз и аномального поведения. Концентрация носителей, соответствующая максимуму сверхпроводящей  $T_c$  называется оптимальной. Системы с меньшей концентрацией называются “недодопированными”, а с большей — “передопированными”.

где  $a$  – постоянная решетки. В этом смысле высокотемпературные сверхпроводники находятся в “переходной” области от “больших и рыхлых” пар теории БКШ к картине “компактных” бозонов.

Сверхпроводящее состояние всегда возникает как

#### 4. Фазовый переход II рода

с более или менее обычной термодинамикой.

Все эти факты были установлены в течение примерно первых пяти лет изучения ВТСП – оксидов. Мы не приводим здесь никаких оригинальных литературных ссылок, поскольку соответствующий список оказался бы слишком длинным. Ограничимся лишь указанием на пару обзоров [1, 2].

Ситуация существенно усложняется, когда мы переходим к обсуждению свойств нормального состояния. Можно сказать, что все основные аномалии этих необычных систем проявляются именно в нормальном состоянии. Тем не менее и здесь можно выписать краткий список основных установленных фактов:

- *Наличие поверхности Ферми.*

В этом смысле рассматриваемые системы несомненно являются *металлами*, хотя и довольно необычными (“плохими”). Большинство данных о поверхности Ферми получено методом ARPES [3, 4], который за последние годы достиг весьма впечатляющих успехов, связанных с улучшением (более, чем на порядок!) разрешающей способности по энергии (и импульсу). В качестве иллюстрации имеющихся здесь достижений на Рис. 2 приведен характерный вид *экспериментально* определенной поверхности Ферми системы  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  для состава с  $x = 0.063$  [5]. Обратим внимание на наличие у этой поверхности Ферми характерных “плоских” участков. Такой вид поверхности Ферми достаточно типичен для большинства ВТСП – купратов в области фазовой диаграммы, где реализуется сверхпроводимость.

- *Фазовый переход металл – диэлектрик*

который происходит при изменении химического состава (уменьшении числа носителей тока). Например, стехиометрическое соединение  $La_2CuO_4$  является антиферромагнитным диэлектриком (по всей видимости моттовского типа) с температурой Нееля порядка 400К. В нем существует хорошо определенная оптическая щель, а антиферромагнетизм обусловлен упорядочением *локализованных* спинов на ионах  $Cu$  и хорошо описывается двумерной моделью Гейзенберга. Это есть более или менее типичная ситуация и в других ВТСП – оксидах, которые, в этом смысле, являются несомненно *сильно коррелированными* системами. В тоже время, это диэлектрическое состояние быстро разрушается введением небольшого числа легирующих (порядка нескольких процентов) примесей. Например, поверхность Ферми, показанная на Рис. 2, реализуется в системе, фактически находящейся на пороге перехода металл – диэлектрик, который происходит в этой системе при  $x \sim 0.05$ .

- *Сильная анизотропия всех свойств (квазидвумерие!).*

Носители тока (в большинстве систем – дырки) достаточно свободно распространяются вдоль плоскостей  $CuO_2$  (направлений  $a$  и  $b$  в орторомбическом кристалле), тогда как поперечное движение в ортогональном плоскостям направлении (кристаллическая ось  $c$ ) сильно подавлено. Анизотропия проводимости типично меняется в пределах от  $10^2$  до  $10^5$ . Это создает основные проблемы для практиче-

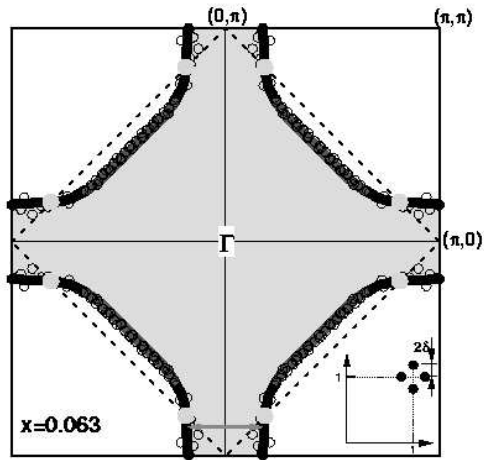


Рис. 2: Экспериментально установленный вид поверхности Ферми системы  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  с  $x = 0.063$ . На вставке схематически показана интенсивность нейтронного рассеяния, соответствующая четырем несоизмеримым пикам вблизи вектора рассеяния  $(\pi, \pi)$ . Пунктиром показаны границы антиферромагнитной зоны Бриллюэна, которые возникают при возникновении дальнего антиферромагнитного порядка (удвоении периода). Точки пересечения этой границы с поверхностью Ферми называются “горячими” точками.

ских приложений. В тоже время, совершенно неясно, является – ли двумерие необходимым условием реализации высокотемпературной сверхпроводимости?

## 1.2 Что до сих пор НЕ известно о ВТСП – оксидах:

Приведем теперь список основных проблем, которые до сих пор остаются предметом достаточно острых дискуссий, участники которых, зачастую, не очень прислушиваются к мнению друг друга. На первом месте, конечно, стоит

- *Механизм куперовского спаривания.*

Большинство исследователей (не все!) не сомневается, что в ВТСП – оксидах реализуется куперовское спаривание по более или менее стандартному “сценарию” теории БКШ, но вопрос в том, какое взаимодействие приводит к образованию пар? Соответственно, рассматривается широкий набор механизмов спаривания:

1. Электрон – фононный [6, 7]. Основная проблема тут в объяснении  $d$  – симметрии куперовских пар, обычно электрон – фононный механизм ведет к спариванию  $s$  – типа. Тем не менее, в решении этой проблемы в последнее время наблюдается определенный прогресс [8].

2. Спин – флуктуационный [9, 10, 11, 12].

Исторически, именно в рамках этого подхода, было *предсказано*, что в ВТСП – оксидах должно реализовываться  $d$  – спаривание. Последующее экспериментальное подтверждение, также как и возможность полуколичественного объяснения многих свойств этих систем, делают этот подход (с моей точки зрения!) наиболее конкурентноспособным среди множества других механизмов.

3. Обменный –  $RVB$ ,  $SO(5)$ , ...?

Эти модели [13, 14], как и множество более “экзотических”, развиваются с первых дней исследования ВТСП. На них затрачены огромные интеллектуальные усилия многих ведущих теоретиков и они продолжают активно обсуждаться. Тем не менее (опять – таки по субъективному мнению автора) степень

завершенности и “устойчивость” результатов здесь несравнимо меньше, чем в более традиционных моделях, а реальный “выход” на эксперимент весьма незначителен, так что все эти подходы, до некоторой степени, остаются “гимнастикой ума”. При этом я вовсе не отрицаю полезность этих подходов с чисто теоретической точки зрения. Например, обсуждение симметричной связи антиферромагнетизма и сверхпроводимости [14] представляет несомненный интерес. В тоже время надо заметить, что с точки зрения общего феноменологического подхода, наиболее естественным и полезным с точки зрения описания эксперимента остается феноменологическое описание ВТСП – оксидов на основе анизотропного обобщения стандартной теории Гинзбурга – Ландау<sup>3</sup>.

В настоящее время неясно, который из этих механизмов реализуется или является доминирующим в реальных ВТСП – оксидах. И дело здесь в том, что свойства сверхпроводящего состояния относительно нечувствительны к механизму спаривания. Достаточно трудно указать “решающий эксперимент”, который привел – бы к окончательным выводам. В некотором смысле, ситуация здесь аналогична той, которая давно сложилась в теории магнетизма. С середины 30-х годов прошлого века известно, что природа магнетизма связана с обменным взаимодействием. Существует множество механизмов этого взаимодействия (прямой и косвенный обмен, сверхобмен,  $s-d$  взаимодействие и т.д.). В тоже время, далеко не всегда удается однозначно указать, какой из этих механизмов действует в той или иной реальной системе. Классический пример тут — магнетизм железа!

- *Природа нормального состояния.*

Здесь единство мнений отсутствует практически полностью. В общем признавая металлическую природу рассматриваемых систем, теоретики обсуждают целый набор возможностей:

1. Ферми – жидкость (Ландау).
2. “Маргинальная” или “плохая” ферми – жидкость [15].

---

<sup>3</sup>Это особенно уместно отметить, поскольку семинар, на котором делался этот доклад, состоялся примерно через час после получения известия о присуждении В.Л.Гинзбургу Нобелевской премии по физике за 2003 год.

3. Латтинжеровская жидкость [13].

Собственно говоря, все разговоры о нарушении ферми – жидкостного подхода (отсутствии “хорошо определенных” квазичастиц) связаны, с теоретической точки зрения, с сильными межэлектронными корреляциями и квазидвумерностью электронных свойств рассматриваемых систем, а с экспериментальной точки зрения они обусловлены практической невозможностью изучения электронных свойств *нормального* состояния при достаточно низких температурах (когда эти свойства “шунтируются” неизбежно возникающей сверхпроводимостью, которую невозможно подавить без существенного изменения самой системы). Не надо забывать, что фермижидкостное поведение, по определению, возникает в низкотемпературном пределе. Поэтому вряд – ли стоит сильно удивляться его “отсутствию” в экспериментах, проводимых при температурах порядка  $10^2\text{K}$ ! В тоже время, как мы увидим чуть ниже, в последнее время происходит довольно существенное продвижение в понимании этой проблемы.

4. Роль беспорядка, локальные неоднородности.

Практически все высокотемпературные сверхпроводники обладают внутренней неупорядоченностью, связанной с их химическим составом (наличием легирующих примесей). Поэтому понимание их природы невозможно без детального исследования роли беспорядка в формировании электронных свойств этих сильно коррелированных систем с пониженной размерностью. В частности, в них весьма существенно проявляются эффекты локализации, исследование которых ведется уже достаточно давно [16]. Ситуация с ролью внутренней неупорядоченности существенно усложнилась с появлением новых данных, полученных методом сканирующей туннельной микроскопии, которые ясно продемонстрировали неоднородность локальной плотности электронных состояний и сверхпроводящей щели на микроскопических масштабах даже в практически идеальных монокристаллах ВТСП – оксидов. Из многочисленных работ последних лет, посвященных таким исследованием, мы процитируем лишь две [17, 18], в них можно найти довольно обширную библиографию. Эти результаты существенно меняют выдвигаемые ранее идеи о микроскопическом расслоении фаз, “страйпах” и т.п. С другой стороны, наличие таких неодно-



родностей делает рассматриваемые системы настоящим “кошмаром” для теоретика, хотя возможность неоднородной сверхпроводимости в неупорядоченных системах за счет флуктуаций локальной плотности электронных состояний анализировалась уже достаточно давно [16, 19].

#### 5. Псевдощель.

Сейчас уже ясно, что большинство аномалий нормального состояния ВТСП – купратов связано с формированием так называемого псевдощелевого состояния. Это состояние реализуется в широкой области фазовой диаграммы Рис. 1, соответствующей, в основном, “недодопированным” составам, и определяемой неравенством  $T < T^*$ . Нужно подчеркнуть, что линия  $T^*$  на Рис. 1 имеет довольно условный смысл и, по – видимому, не является линией какого – либо фазового перехода. Фактически, в области  $T < T^*$  происходит плавный “кроссовер” в область развитых псевдощелевых аномалий<sup>4</sup>. Коротко говоря, многочисленные эксперименты [20, 21] указывают на то, что в области  $T < T^*$  в системах, находящихся в нормальном (несверхпроводящем) состоянии, появляются признаки наличия щели в энергетическом спектре. Речь идет, при этом, не об истинной щели, а о так сказать “предчувствии” ее появления в спектре (откуда и происходит название “псевдощель”, впервые возникшее в качественной теории аморфных и жидких полупроводников [22]). Некоторые примеры наблюдаемых эффектов приводятся ниже.

Из самых грубых соображений ясно, что щель в спектре может быть либо сверхпроводящей, либо диэлектрической. Соответственно существует два основных теоретических сценария для объяснения псевдощелевых аномалий ВТСП – систем. Первый основан на модели формирования куперовских пар уже выше температуры сверхпроводящего перехода, с последующим установлением их фазовой когерентности в области существования сверхпроводящего состояния при  $T < T_c$ . Второй предполагает, что происхождение псевдощелевого состояния связано с флуктуациями ближнего порядка “диэлектрического” типа, суще-

---

<sup>4</sup>Иногда вводится понятие о “высокоэнергетической” псевдощели, величина которой определяется  $T^*$ , и о “низкоэнергетической” псевдощели, которая определится еще одной линией кроссовера, также показанной на Рис. 1, и проходящей в области  $T < T^*$  ближе к границе существования сверхпроводящей фазы.

ствующими в области недодопированных составов на фазовой диаграмме. При этом наиболее популярной является картина антиферромагнитных (AFM) флуктуаций, хотя нельзя исключить аналогичную роль флуктуаций волн зарядовой плотности (CDW), структурных искажений или фазового расслоения на микроскопических масштабах. По мнению автора, в последнее время появился целый ряд экспериментов, достаточно убедительно свидетельствующих в пользу именно второго сценария. Поэтому в последующей теоретической дискуссии мы ограничимся рассмотрением именно таких моделей. При этом, по большей части, имеется ввиду модель антиферромагнитных флуктуаций.

Общепринятая точка зрения состоит в том, что окончательное понимание природы высокотемпературной сверхпроводимости невозможно без выяснения природы нормального состояния. В более общем плане, требуется теоретическое обоснование характерного вида фазовой диаграммы Рис. 1. Это и есть основная задача теории, которая еще достаточно далека от полного решения. В дальнейшем изложении мы сосредоточимся на обсуждении простых моделей псевдощелевого состояния и попытке их применения к иллюстрации возможных путей решения этой главной задачи.

## **2 Основные экспериментальные факты о псевдощелевом состоянии высокотемпературных сверхпроводников.**

Как видно из фазовой диаграммы, показанной на Рис. 1, в зависимости от концентрации носителей тока в высокопроводящей плоскости  $CuO_2$  в ВТСП – оксидах наблюдается целый ряд фаз и областей с аномальными физическими свойствами. В области малых концентраций дырок все известные ВТСП – купраты являются антиферромагнитными диэлектриками. С повышением концентрации носителей тока, температура Нелеля  $T_N$  быстро падает от величин порядка нескольких сотен градусов  $K$ , обращаясь в нуль при концентрации дырок  $p$  меньше или порядка 0.05 и система становится металлом. При росте концентрации дырок система становится сверхпроводником, причем температура сверхпроводящего перехода растет с ростом концентрации носителей, проходя через характерный максимум при  $p_0 \approx 0.15-0.17$  (оптимальное допирование), а затем

уменьшается и исчезает при  $p \approx 0.25 - 0.30$ , хотя в этой (передошированной) области металлическое поведение сохраняется. При этом в области  $p > p_0$  металлические свойства являются достаточно традиционными (фермижидкостное поведение), тогда как при  $p < p_0$  система является аномальным металлом, не описываемым, по мнению большинства авторов, теорией ферми – жидкости.

Аномалии физических свойств, связываемые, в настоящее время, с образованием псевдощелевого состояния, наблюдаются в металлической фазе при  $p < p_x$  и температурах  $T < T^*$ , где  $T^*$  уменьшается от температур порядка  $T_N$  при  $p \sim 0.05$ , обращаясь в нуль при некоторой “критической” концентрации носителей  $p_c$ , слегка превышающей  $p_0$ , так что линия  $T^*$  на Рис. 1, продолжается под сверхпроводящий “купол”. Например, согласно [23]  $T^*$  обращается в нуль при  $p = p_c \approx 0.19$ . По мнению других авторов (сторонников сверхпроводящей природы псевдощели) линия  $T^*$  просто сливается с линией сверхпроводящей  $T_c$  вблизи оптимальной концентрации  $p_0$ . С нашей точки зрения, большинство новых экспериментальных данных, скорее всего, подтверждают первый из этих вариантов фазовой диаграммы (подробнее см. [23]).

Псевдощелевые аномалии, в общем случае, интерпретируются как связанные с подавлением (в данной области) плотности состояний одночастичных возбуждений вблизи уровня Ферми, что и соответствует общей концепции псевдощели [22]. При этом величина  $T^*$  определяет характерный масштаб наблюдаемых аномалий и просто пропорциональна энергетической ширине псевдощели. Перейдем теперь к рассмотрению типичных экспериментальных проявлений псевдощелевых аномалий.

В качестве характерного примера можно рассмотреть экспериментальные данные по электронному вкладу в теплоемкость ВТСП – купратов. В металлах этот вклад обычно записывается в виде:  $C = \gamma(T)T$ , так что в нормальном состоянии ( $T > T_c$ )  $\gamma \sim N(0)$ , где  $N(0)$  – плотность состояний на уровне Ферми. При  $T = T_c$  возникает известная аномалия, связанная с фазовым переходом II рода и величина  $\gamma(T)$  имеет характерный пик (“скачок”). В качестве примера на Рис. 3 приведены типичные экспериментальные данные, полученные на системе  $Y_{0.8}Ca_{0.2}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$  при различных значениях  $\delta$  [24]. Видим, что в оптимально допированных и передошированных образцах  $\gamma(T)$  остается практически постоянным во всей области  $T > T_c$ , тогда как для недодошированных образцов наблюдается существенное понижение  $\gamma(T)$  в области температур  $T < 150 - 200K$ . Это обстоятельство непосредственно указывает на падение плотности электронных состояний на уровне Ферми и образование

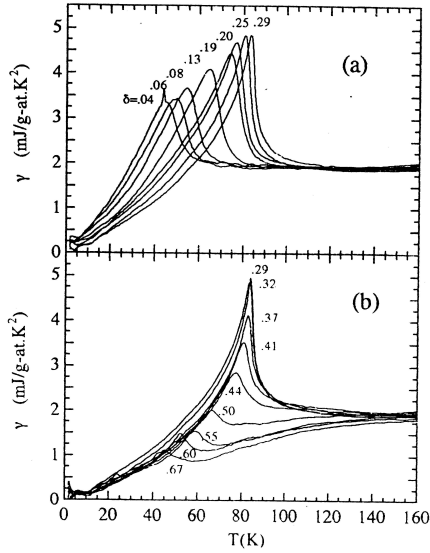


Рис. 3: Коэффициент электронной теплоемкости  $\gamma$  в передопированном (a) и недоопированном (b)  $Y_{0.8}Ca_{0.2}Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ .

псевдощели при  $T < T^*$ .

Заметим также, что величина “скачка” теплоемкости в окрестности температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$  существенно уменьшается при переходе в область недоопированных составов. При этом, более детальный анализ [23] показывает, что соответствующий  $\Delta\gamma_c$  начинает резко уменьшаться, начиная с “критической” концентрации носителей  $p_c \approx 0.19$ , что и рассматривается как момент появления псевдощели в электронном спектре.

Образование псевдощели в плотности состояний хорошо видно и в экспериментах по одночастичному туннелированию. Так в часто цитируемой работе [25] проводились туннельные эксперименты на монокристаллах  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$  ( $Bi - 2212$ ) с различным содержанием кислорода. Для недоопированных образцов четко наблюдалось образование псевдощели в плотности состояний при температурах существенно превышающих  $T_c$ . При этом псевдощель плавно эволюционировала в сверхпроводящую щель в области  $T < T_c$ , что часто воспринимается, как прямое подтверждение сверхпроводящей природы псевдощели. С другой стороны, в работах [26, 27], в которых туннельные эксперименты проводились на той же системе  $Bi - 2212$ , удалось четко продемонстрировать существование сверхпроводящей щели, обращаемой в нуль при  $T = T_c$ , на фоне

плавной псевдощели, существующей и при более высоких температурах.

Псевдощель проявляется также в кинетических свойствах ВТСП – систем в нормальном состоянии, сдвиге Найта и времени релаксации ЯМР. В частности, с ней часто связывается изменение стандартной, для оптимально допированных составов, линейной температурной зависимости электросопротивления в области  $T < T^*$  для недодопированных образцов. Величина сдвига Найта в таких образцах оказывается зависящей от температуры – в области  $T < T^*$  происходит быстрое падение его величины. Аналогичным образом, в недодопированных образцах ведет себя и величина  $(TT_1)^{-1}$ , где  $T_1$  – время спин – решеточной релаксации ЯМР. Напомним, что в обычных металлах сдвиг Найта пропорционален  $N(0)$ , а  $(TT_1)^{-1} \sim N^2(0)$  (корринговское поведение), а электросопротивление  $\rho$  пропорционально частоте рассеяния (обратному времени свободного пробега)  $\gamma \sim N(0)$ . Поэтому, заметное уменьшение всех этих величин естественно связывается с падением плотности электронных состояний  $N(0)$  на уровне Ферми. Заметим, что такая трактовка является, конечно, чрезмерно упрощенной, особенно когда речь идет о температурных зависимостях соответствующих величин. Например, в случае электросопротивления, эта зависимость, в значительной мере, определяется процессами неупругого рассеяния, физика которых в ВТСП – системах остается не вполне выясненной. При этом, уменьшение плотности состояний (частичная диэлектризация спектра) могла – бы приводить и к соответствующему росту электросопротивления.

Образование псевдощели в области недодопированных составов ВТСП – купратов четко проявляется также в многочисленных экспериментах по измерению оптической проводимости, как при направлении вектора электрического поля вдоль хорошо проводящей плоскости  $CuO_2$ , так и для ортогонального направления вдоль тетрагональной оси  $c$ . Соответствующие данные достаточно подробно описаны в [20]. В качестве типичного примера на Рис. 4 мы приводим данные работы [28] по оптической проводимости в плоскости  $CuO_2$  для нескольких составов оксида  $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$  с электронной проводимостью. Характерной особенностью здесь является появление, что особенно заметно для недодопированных образцов с  $x = 0.05$  и  $x = 0.10$ , “псевдощелевого провала” в районе частот порядка  $0.25 \text{ eV}$  с размытым максимумом поглощения через необычно широкую псевдощель в окрестности  $\omega \sim 0.5 \text{ eV}$ . Природа дополнительного максимума поглощения, заметного при  $\omega \sim 0.1 \text{ eV}$ , по – видимому, может быть приписана эффектам локализации (см. ниже).

В недодопированных купратах с дырочной проводимостью, оптиче-

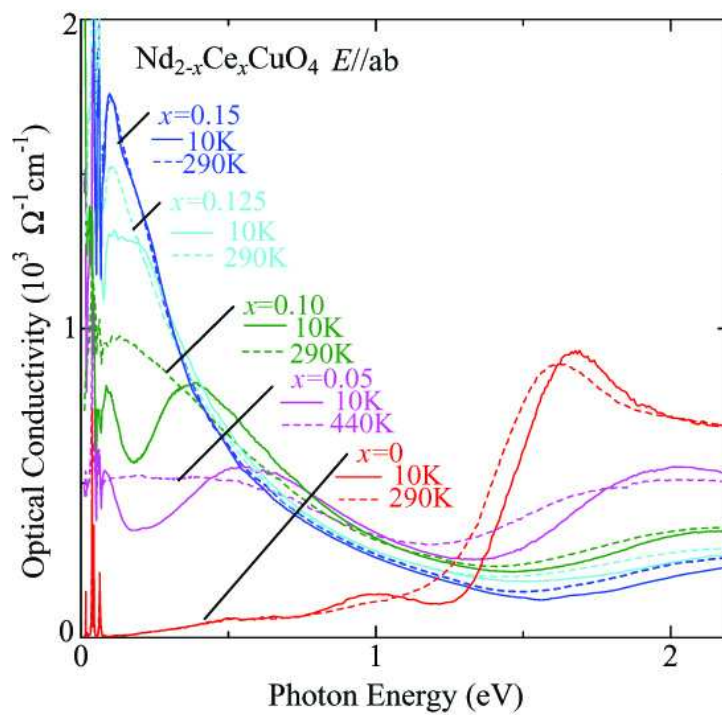


Рис. 4: Действительная часть оптической проводимости в  $ab$  – плоскости  $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$  для различных температур и составов по  $x$ .

ская проводимость обычно характеризуется узким “друдевским” пиком поглощения на малых частотах, с последующим “провалом” и размытым пиком поглощения через псевдощель с шириной порядка  $0.1\text{eV}$  [20, 21]. “Локализационный” пик в них наблюдается достаточно редко, как правило, при введении дополнительного разупорядочения [29, 30, 31].

Наиболее яркие эффекты, связанные с образованием псевдощели, проявляются, по – видимому, в экспериментах по фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES). Интенсивность ARPES (энергетическое и импульсное распределение фотоэлектронов) фактически определяется как [4]:

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

где  $\mathbf{k}$  – импульс в зоне Бриллюэна,  $\omega$  – энергия начального состояния, измеренная относительно уровня Ферми (химпотенциала)<sup>5</sup>,  $I_0(\mathbf{k})$  включает в себя кинематические факторы и квадрат матричного элемента электрон – фотонного взаимодействия и, в достаточно грубом приближении, считается константой. Величина

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

где  $G(\mathbf{k}, \omega)$  – функция Грина, представляет собой спектральную плотность носителей. Функция распределения Ферми  $f(\omega) = [\exp(\omega/T) + 1]^{-1}$  отражает тот факт, что в процессе фотоэмиссии участвуют электроны из занятых состояний. Таким образом, в упомянутом грубом приближении, можно говорить, что в ARPES экспериментах непосредственно измеряется произведение  $f(\omega)A(\mathbf{k}\omega)$ , и мы получаем прямую информацию о спектральных свойствах одночастичных возбуждений системы.

Рассмотрим качественно характер ожидаемых изменений одноэлектронной спектральной плотности (2). В стандартной теории ферми – жидкости одноэлектронная функция Грина металла имеет вид:

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

где  $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$  – энергия квазичастиц, отсчитанная от уровня Ферми (химпотенциала)  $\mu$ ,  $\gamma_{\mathbf{k}}$  – их затухание. Вычет в полюсе  $0 < Z_{\mathbf{k}} < 1$ ,  $G_{incoh}$  – несингулярный вклад многочастичных возбуждений. Тогда соответствующая спектральная плотность:

$$A(\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{\pi} Z_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{(\omega - \xi_{\mathbf{k}})^2 + \gamma_{\mathbf{k}}^2} + \dots \quad (4)$$

---

<sup>5</sup>В реальных экспериментах  $\omega$  измеряется относительно уровня Ферми хорошего металла типа *Pt* и *Ag*, находящегося в электрическом контакте с образцом.

где многоточием обозначен более или менее постоянный вклад, возникающий из  $G_{incoh}$ , а квазичастичный спектр проявляется узким (в меру малости затухания  $\gamma_{\mathbf{k}}$ , по сравнению с  $\xi_{\mathbf{k}}$ ) лоренцевским пиком. В стандартной теории ферми – жидкости  $\gamma \sim \omega^2 \sim |\mathbf{k} - \mathbf{k}_F|^2$  и квазичастицы являются хорошо определенными в некоторой (достаточно малой) окрестности поверхности Ферми. В модели “маргинальной” ферми – жидкости  $\gamma \sim \omega \sim |\mathbf{k} - \mathbf{k}_F|$  и энергия квазичастицы, удовлетворяет “пограничной” оценке  $\gamma \sim \xi_{\mathbf{k}}$ . При наличии статического рассеяния (например на примесях) в затухании появляется постоянный (не зависящий от частоты  $\omega$ ) вклад  $\gamma_0$ .

Качественный вид спектральной плотности, в картине ферми – жидкости иллюстрируется Рис. 5(a).

Если в системе возникает дальний порядок (например SDW(AFM) или CDW типа) в спектре элементарных возбуждений системы открывается (диэлектрическая) щель  $W_{\mathbf{k}}$  (зависимость от  $\mathbf{k}$  подчеркивает возможность возникновения ненулевой щели только на некоторой части поверхности Ферми), и одноэлектронная функция Грина приобретает характерный вид функции Горькова, в которую можно добавить и некоторое затухание  $\Gamma_{\mathbf{k}}$ :

$$G(\omega, \mathbf{k}) = \frac{u_{\mathbf{k}}^2}{\omega - E_{\mathbf{k}} + i\Gamma_{\mathbf{k}}} + \frac{v_{\mathbf{k}}^2}{\omega + E_{\mathbf{k}} - i\Gamma_{\mathbf{k}}} \quad (5)$$

где спектр возбуждений:

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + W_{\mathbf{k}}^2} \quad (6)$$

и введены коэффициенты Боголюбова:

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \quad (7)$$

$$v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \quad (8)$$

Тогда спектральная плотность:

$$A(\omega \mathbf{k}) = \frac{u_{\mathbf{k}}^2}{\pi} \frac{\Gamma_{\mathbf{k}}}{(\omega - E_{\mathbf{k}})^2 + \Gamma_{\mathbf{k}}^2} + \frac{v_{\mathbf{k}}^2}{\pi} \frac{\Gamma_{\mathbf{k}}}{(\omega + E_{\mathbf{k}})^2 + \Gamma_{\mathbf{k}}^2} + \dots \quad (9)$$

где теперь возникает *два* пика, узких в меру малости  $\Gamma_{\mathbf{k}}$  и соответствующих “боголюбовским” квазичастицам.



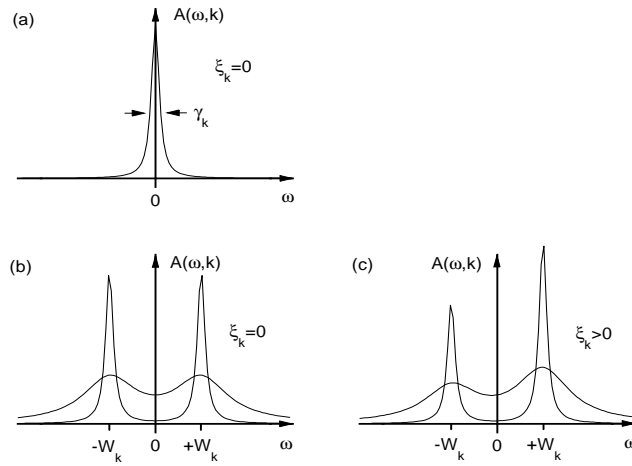


Рис. 5: Качественная картина эволюции спектральной плотности. (а) – нормальный металл (ферми-жидкость),  $\xi_{\mathbf{k}} = 0$  – на поверхности Ферми. (б) – два узких пика, соответствующих “боголюбовским” квазичастицам в системе с диэлектрической щелью  $W_{\mathbf{k}}$  (при наличии дальнего порядка типа CDW или SDW). Размытые максимумы – система без дальнего порядка (псевдощелевое поведение),  $\xi_{\mathbf{k}} = 0$  – на поверхности Ферми. (с) Тоже самое, что и в случае (б), но для  $\xi_{\mathbf{k}} > 0$ , т.е. над поверхностью Ферми. В этом случае возникает характерная асимметрия спектральной плотности.

Пусть теперь дальний порядок SDW или CDW типа отсутствует, но есть сильное рассеяние на флуктуациях соответствующего ближнего порядка, характеризуемого некоторой корреляционной длиной  $\xi$ . Тогда нетрудно представить себе, что в спектральной плотности, в той области импульсного пространства, где при наличии дальнего порядка открывается диэлектрическая щель, сохраняется “воспоминание” (или “предчувствие”) о ней в виде характерной “двугорбой” структуры, как это показано качественно на Рис. 5. При этом ширина максимумов, естественно, должна определяться параметром типа  $v_F/\xi$ , т.е. обратным временем пролета электрона через область размером  $\xi$ , в которой эффективно сохраняется “диэлектрическое” упорядочение. Ниже мы увидим, что последовательное рассмотрение приводит именно к таким результатам. В этом смысле, последующее теоретическое рассмотрение будет посвящено обоснованию изложенной качественной картины и выводу различных ее следствий.

На Рис. 6 показаны ARPES данные для системы  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$  [32], полученные в трех различных точках на поверхности Ферми для различных температур. Наличие щели (псевдощели) проявляется в сдвиге (влево) порога энергетического распределения фотоэлектронов (leading edge) из образца, по сравнению с эталонным спектром хорошего металла ( $Pt$ ). Видно, что щель закрывается при различных температурах для различных значений  $\mathbf{k}$ , а величина (ширина) щели уменьшается по мере удаления от направления  $(0, 0) - (0, \pi)$ . Псевдощель вообще отсутствует в направлении диагонали зоны  $(0, 0) - (\pi, \pi)$ . При низких температурах это вполне соответствует картине  $d$ -спаривания, которая хорошо установлена из многочисленных экспериментов на ВТСП – купратах [1, 2]. Важно, однако, что “щель” в ARPES данных наблюдается и при температурах значительно превышающих температуру сверхпроводящего перехода  $T_c$ .

На Рис. 7 показано угловое поведение ширины щели в зоне Бриллюэна и температурная зависимость ее максимального значения для ряда образцов  $Bi - 2212$  разных составов, полученные из ARPES в работе [33]. Видно, что при общей  $d$ -волновой симметрии, щель в спектре оптимально допированной системы обращается в нуль практически при  $T = T_c$ , тогда как для недопированных образцов возникают “хвосты” температурной зависимости щели в области  $T > T_c$ . Качественно можно утверждать, что образование анизотропной в обратном пространстве псевдощели при  $T > T_c$ , непрерывно переходящей в сверхпроводящую щель при  $T < T_c$ , приводит к “разрушению” поверхности Ферми недопированных образцов уже при  $T < T^*$  на участках вокруг точки  $(0, \pi)$  (и симметричных

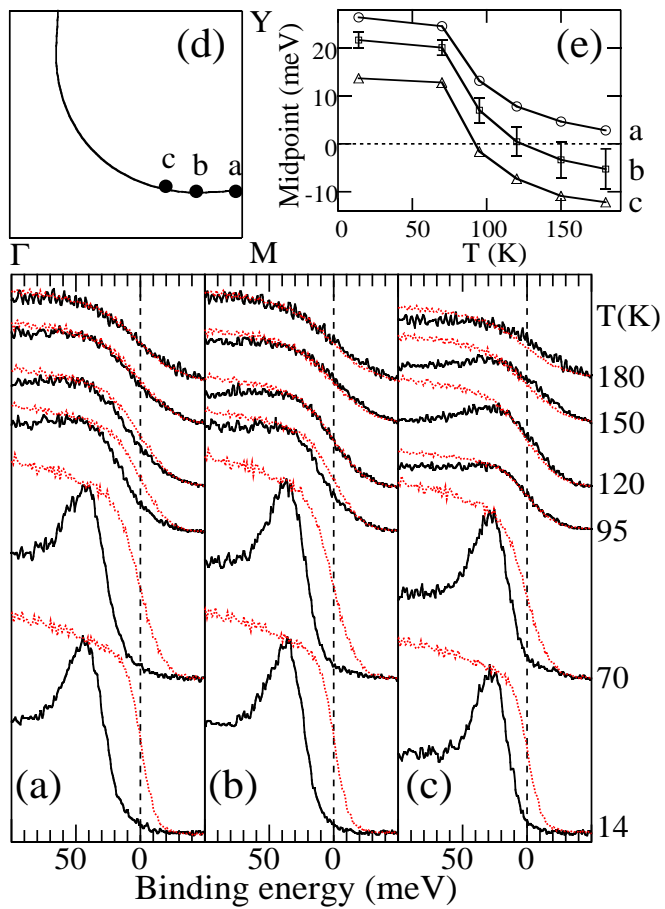


Рис. 6: Спектры ARPES в трех различных точках  $a, b, c$  на поверхности Ферми  $Bi - 2212$  для недодопированного образца с  $T_c = 85K$ . Тонкие кривые – спектр эталонного образца  $Pt$ .

к ней), причем ширина этих участков растет с понижением температуры [32].

Центральный интерес представляет, конечно, эволюция спектральной плотности  $A(\mathbf{k}_F, \omega)$  на поверхности Ферми. При довольно слабых предположениях ее можно непосредственно выделить из данных по ARPES [32]. При наличии электрон – дырочной симметрии имеем  $A(\mathbf{k}_F, \omega) = A(\mathbf{k}_F, -\omega)$  (что всегда справедливо вблизи уровня Ферми, реально при  $|\omega|$  меньше нескольких десятых  $m\epsilon V$ ), так что, с учетом  $f(-\omega) = 1 - f(\omega)$ , из (1) при  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_F$  сразу же получаем  $I(\omega) + I(-\omega) = A(\mathbf{k}_F, \omega)$ . Поэтому спектральную плотность на поверхности Ферми можно получить прямо из эксперимента, построив симметризованный спектр  $I(\omega) + I(-\omega)$ . В качестве примера такого построения на Рис. 8 приведены данные [34] для недодопированного образца  $Bi - 2212$  с  $T_c = 83K$  и передопированного с  $T_c = 82K$  при разных температурах. Видно, что существование псевдощели четко проявляется в виде характерной “двугорбой” структуры спектральной плотности, которая возникает (для недодопированной системы) при температурах существенно превышающих  $T_c$ . Видим, что эти данные вполне соответствуют описанной выше ожидаемой форме спектральной плотности в псевдощелевом состоянии.

Подчеркнем, что хорошо определенным квазичастицам должен соответствовать достаточно узкий пик спектральной плотности  $A(\mathbf{k}_F, \omega)$  при  $\omega = 0$ . Такое поведение в ВТСП – купратах, до недавнего времени, практически не наблюдалось. Оказалось, однако, что в сверхпроводящей фазе, при  $T \ll T_c$ , в окрестности точки пересечения поверхности Ферми с диагональю зоны Бриллюэна (направление  $(0, 0) - (\pi, \pi)$ ), где сверхпроводящая щель обращается в нуль, появляется достаточно острый пик спектральной плотности, соответствующий хорошо определенным квазичастицам [35]. При этом вблизи точки  $(0, \pi)$  поверхность Ферми остается “разрушенной” сверхпроводящей щелью и псевдощелью. Изучение этих, так называемых “узловых” (nodal) квазичастиц приобрело, в последнее время, очень большое значение и привело к некоторому прояснению вопроса о применимости фермижидкостной картины. При этом, последние измерения показывают, что квазичастичный пик в диагональном направлении сохраняется и при температурах, существенно превышающих  $T_c$ . Это ярко видно, из данных работы [36], показанных на Рис. 9, где четко прослежена эволюция этого пика при движении вдоль поверхности Ферми. Видно, что квазичастичное поведение имеет место всюду для передопированных образцов и только в окрестности диагонали для оптимально допированных (и недодопированных). Квазичастичный пик

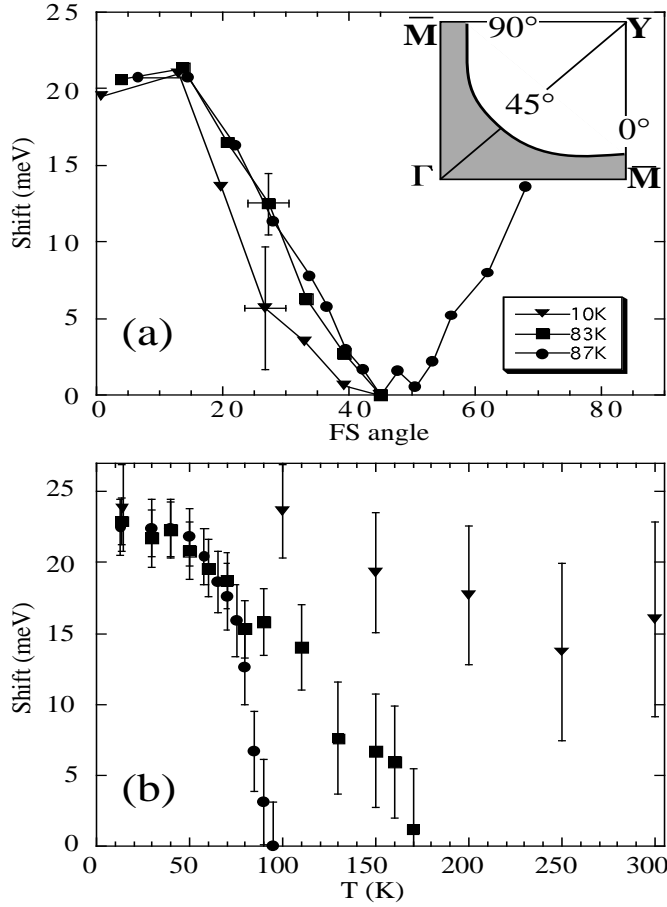


Рис. 7: Угловая и температурная зависимость энергетической щели в  $Bi-2212$ , полученная из данных ARPES для образцов с  $T_c = 87K$  (почти оптимально допированный),  $T_c = 83K$  и  $T_c = 10K$  (недодопированные): (a) – величина ARPES щели, измеренная в различных точках поверхности Ферми (показанной на вставке), положение которых определяется полярным углом, отсчитанным от направления  $\Gamma\bar{M}$ . Видна  $d$ -симметрия щели. (b) – температурная зависимость максимальной щели, измеренной вблизи точки  $\bar{M}$ .

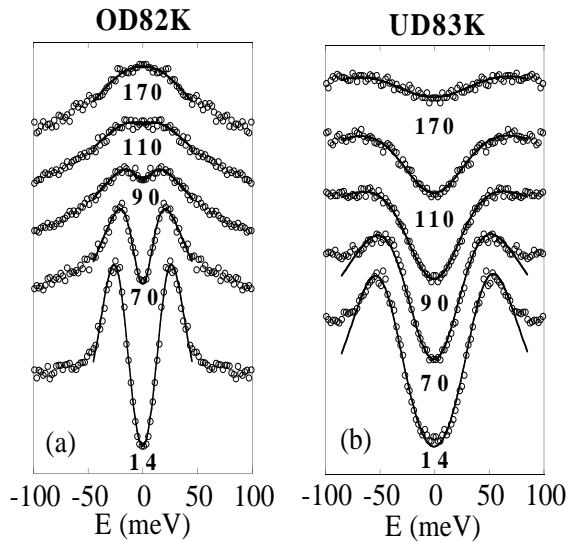


Рис. 8: Симметризованные спектры ARPES для передопированного образца  $Bi-2212$  с  $T_c = 82K$  (a) и недодопированного образца с  $T_c = 83K$  (b) в точке пересечения поверхности Ферми с границей зоны  $(0, \pi) - (\pi, \pi)$ .

в диагональном направлении сохраняется даже для сильно недодопированных образцов, находящихся на пороге перехода в диэлектрическое состояние [5]. Из данных, показанных на Рис. 10 [36], видно также, что наблюдается существенная анизотропия статического (точнее квазистатического, в пределах разрешения метода ARPES) рассеяния, которое заметно возрастает в окрестности точки  $(0, \pi)$ , что очевидным образом может быть связано с образованием псевдощели.

Наконец, приведем на Рис. 11 замечательные результаты работы [37], полученные из ARPES измерений с существенно улучшенной разрешающей способностью, из которых “невооруженным глазом” видно, что эффективное затухание “узловых” квазичастиц имеет, в основном, (кроме, может быть, недодопированных образцов) квадратичную зависимость от энергии, характерную для ферми – жидкости. Только вблизи оптимального состава и в глубине недодопированной области виден некоторый вклад дополнительного рассеяния, скорее всего магнитной природы. Эти новейшие результаты позволяют совершенно по новому взглянуть на обсуждавшуюся выше проблему фермижидкостного описания ВТСП – оксидов. Квазичастичное поведение фермижидкостного типа в них существует в области передопированных составов, но оно “разрушается” по мере движения в область оптимальных и недодопированных составов, в

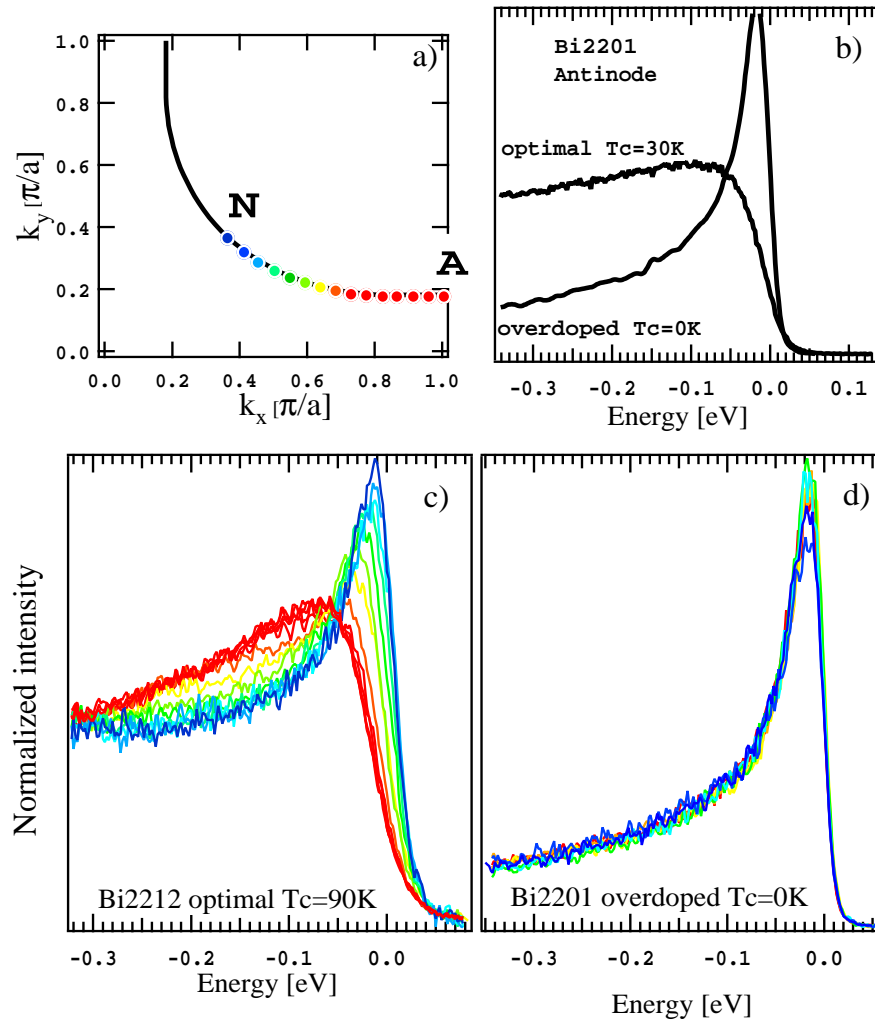


Рис. 9: Спектры ARPES, измеренные в различных точках на поверхности Ферми, по мере перехода от диагонали зоны Бриллюэна к окрестности точки  $(\pi, 0)$ : (a) – точки в которых проводились измерения; (b) – сравнение данных в “антиузловой” точке  $A$  (окрестность  $(\pi, 0)$ ) в оптимально допированном и передопированном  $Bi2201$ ; (c) – данные по оптимально допированному  $Bi2212$  с  $T_c = 90K$ , полученные при  $T = 140K$ ; (d) – такие же данные для передопированного  $Bi2201$  с  $T_c = 0$ , измеренные при  $T = 140K$ .

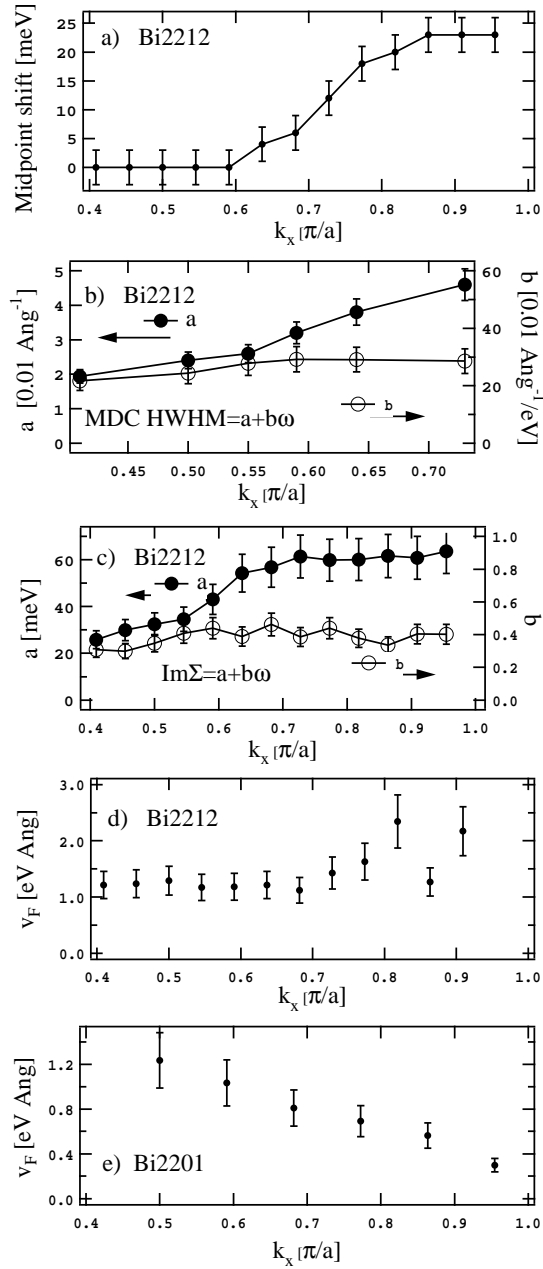


Рис. 10: Обработка данных по ширине ARPES спектров под “маргинальную” зависимость мнимой части собственной энергии электрона вида:  $Im\Sigma = a + b\omega$ . Хорошо видна анизотропия статического (квазистатического) рассеяния в оптимально легированном *Bi2212*, тогда как динамическое (неупругое) рассеяние остается изотропным (с). Поведение скорости на поверхности Ферми показано на (d) и (e) (передопированный *Bi2201*).



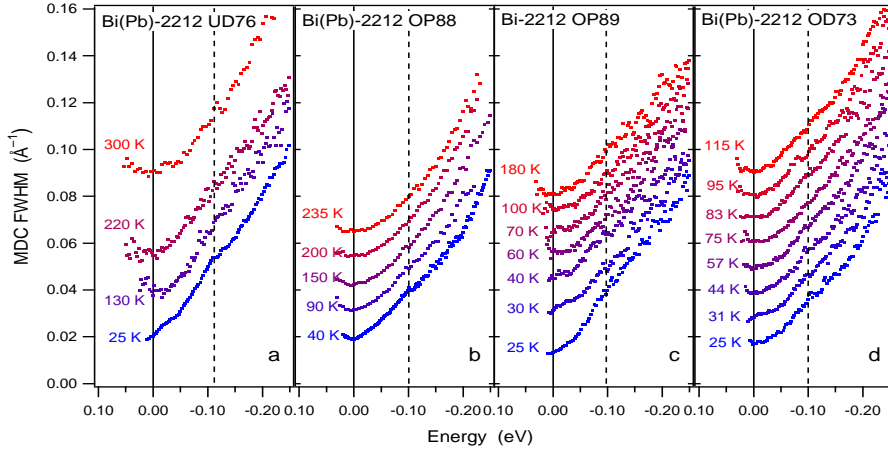


Рис. 11: Экспериментально определенные ширины пиков ARPES в  $Bi(Pb)2212$  и  $Bi2212$  для разных температур, при изменении уровня легирования от недодопированного образца с  $T_c = 76K$  (a) до передопированного с  $T_c = 73K$  (d).

части импульсного пространства (в окрестности точек типа  $(0, \pi)$ ), где образуется псевдощель и возрастает роль соответствующего рассеяния (взаимодействия).

Возрастание псевдощелевых аномалий при переходе в окрестность точки  $(0, \pi)$ , где становится максимальной величина сверхпроводящей щели, соответствующей спариванию  $d$  – типа, часто интерпретируется в том смысле, что и псевдощель имеет  $d$  – волновую симметрию, и имеет сверхпроводящую природу, переходя в истинную щель при  $T < T_c$ . Существует, однако, много аргументов в пользу того, что псевдощель, на самом деле, конкурирует со сверхпроводимостью, имея, скорее всего, диэлектрическую природу. Подробное обсуждение и аргументацию в пользу такой точки зрения можно найти, например, в [21, 23]. Здесь мы ограничимся только самым общим замечанием – псевдощелевые аномалии в ВТСП нарастают по мере движения вглубь области недодопированных составов, где сверхпроводимость попросту исчезает. Трудно понять, как такое поведение может быть обусловлено образованием куперовских пар при  $T > T_c$ .

С другой стороны, имеются и прямые экспериментальные данные, которые свидетельствуют о “диэлектрической” природе псевдощели. На Рис. 12 мы приводим ARPES данные о поверхности Ферми электронного сверхпроводника  $Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO_4$  [38], которые четко показывают,

что “разрушение” поверхности Ферми за счет образования псевдощели происходит в окрестности “горячих точек”, возникающих при пересечении этой поверхности с границей “будущей” антиферромагнитной зоны Бриллюэна, которая возникла – бы при установлении дальнего антиферромагнитного порядка. Соответствующая щель в спектре, очевидно имеет обычный “зонный” или “диэлектрический” характер, а куперовское спаривание с  $d$  – симметрией тут не причем. Просто большинство экспериментов по ARPES в ВТСП выполнены на системах с дырочной проводимостью, где расстояние между сторонами поверхности Ферми в окрестности  $(0, \pi)$  заметно меньше, чем в системе  $NdCeCuO$ . Существенно меньше в них и энергетический масштаб псевдощели, что уже кратко упоминалось в связи с обсуждением данных по оптической проводимости, показанных на Рис. 4. Соответственно, разрешающей способности ARPES, скорее всего, просто не хватает для того, чтобы выделить отдельные “горячие точки”, находящиеся достаточно близко друг другу в окрестности  $(0, \pi)$ . С моей точки зрения, результаты работы [38] однозначно решают вопрос в пользу “диэлектрического” сценария формирования псевдощели в ВТСП – купратах.

В заключение, следует еще раз подчеркнуть, что в различных экспериментах, обсуждавшихся выше, характерная температура  $T^*$ , ниже которой проявляются аномалии, приписываемые образованию псевдощели, несколько меняется, в зависимости от того, какая величина измеряется. Однако во всех случаях имеется систематическая зависимость  $T^*$  от степени легирования и эта температура обращается в нуль при концентрации носителей равной или слегка превышающей оптимальную. На Рис. 13 приведена обобщающая сводка данных (найденным из обработки самых разных экспериментов) по энергетической ширине псевдощели  $E_g$  в системе  $YBCO$  в зависимости от концентрации дырок [23] (в этой работе принималось достаточно произвольное модельное соотношение  $E_g = 2.5T^*$ ). Видно, что псевдощель “закрывается” при критическом значении концентрации  $p_c \approx 0.19$ , слегка превышающем оптимальную концентрацию носителей, что само по себе, также указывает на несверхпроводящую природу псевдощели в ВТСП – купратах.

Более подробный обзор других экспериментов, в которых проявляется образование псевдощелевого состояния в ВТСП можно найти в [20, 23].

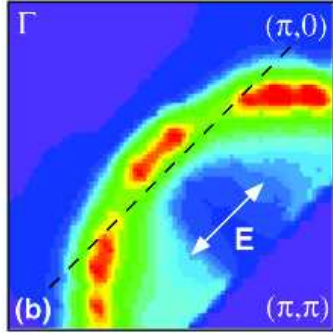


Рис. 12: Поверхность Ферми электронного сверхпроводника  $Nd_{1.85}Ce_{0.15}CuO_4$  в одном квадранте зоны Бриллюэна, полученная интегрированием спектров ARPES. Пунктир обозначает границу антиферромагнитной зоны Бриллюэна.

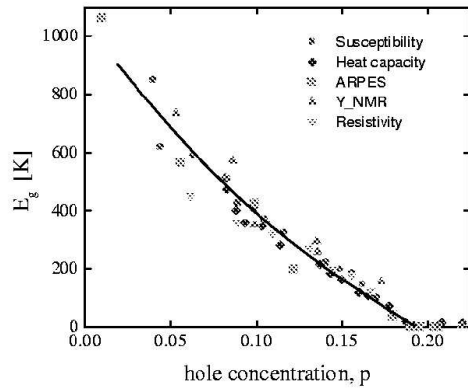


Рис. 13: Зависимость энергетической ширины псевдощели  $E_g$  в  $YBCO$  от концентрации дырок по данным различных экспериментов.

### 3 Теоретические соображения – варианты упрощенной модели.

Как уже отмечалось выше существует два основных теоретических сценария для объяснения псевдощелевых аномалий ВТСП – систем. Первый основан на модели формирования куперовских пар уже выше температуры сверхпроводящего перехода (precursor pairing), а второй предполагает, что происхождение псевдощелевого состояния связано с флуктуациями ближнего порядка “диэлектрического” типа (например антиферромагнитного или типа волн зарядовой плотности), существующими в области недодопированных составов, на которых происходит сильное рассеяние электронов, приводящее к псевдощелевой перестройке их спектра. Второй сценарий представляется нам более предпочтительным, как исходя из целого ряда экспериментальных данных, обсуждавшихся выше, так и из того простого обстоятельства, что все псевдощелевые аномалии усиливаются по мере уменьшения концентрации носителей, когда система все дальше “уходит” от оптимальной для сверхпроводимости области фазовой диаграммы, приближаясь к области диэлектрической (антиферромагнитной) фазы.

Рассмотрим типичную поверхность Ферми носителей в плоскости  $CuO_2$ , показанную на Рис. 2. Если отвлечься от деталей, то в достаточно грубом приближении, наблюдаемая в ARPES топология поверхности Ферми (и спектр элементарных возбуждений) в плоскости  $CuO_2$ , в первом приближении, достаточно хорошо описывается моделью сильной связи:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a) - 4t' \cos k_x a \cos k_y a \quad (10)$$

где  $t \approx 0.25eV$  – интеграл переноса между ближайшими соседями, а  $t'$  – интеграл переноса между вторыми ближайшими соседями, который может меняться от  $t' \approx -0.45t$  для  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  до  $t' \approx -0.25t$  для  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ ,  $a$  – постоянная (квадратной) решетки.

Фазовый переход в антиферромагнитное состояние вызывает удвоение периода решетки и приводит к появлению в обратном пространстве “магнитной” зоны Бриллюэна, показанной на Рис. 14. Если спектр носителей дается (10) с  $t' = 0$ , то для случая половинного заполнения зоны, поверхность Ферми представляет собой квадрат, совпадающий с границами магнитной зоны, имеет место полный “нестинг” – плоские участки поверхности Ферми совмещаются при переносе на вектор антиферромагнетизма  $\mathbf{Q} = (\pm\pi/a, \pm\pi/a)$ . Тогда при  $T = 0$  электронный спектр неустойчив – всюду на поверхности Ферми открывается щель и система переходит в

диэлектрическое состояние, вызванное антиферромагнитной волной спиновой плотности (SDW)<sup>6</sup>. На этом основана одна из популярных схем объяснения антиферромагнетизма ВТСП – купратов, в качестве примера сошлемся, например, на работу [39] и обзор [40], хотя, как отмечалось выше, эксперименту определенно отвечает просто гейзенберговская модель с локализованными спинами. В случае поверхности Ферми, показанной на Рис. 14, при возникновении антиферромагнитного дальнего порядка, в соответствии с общими правилами зонной теории, в точках пересечения изоэнергетических поверхностей и, в частности поверхности Ферми, с границами новой (магнитной) зоны Бриллюэна, они испытывают разрыв, связанный с открытием щели в спектре в точках, связанных вектором  $\mathbf{Q}$ . Обратите внимание на прямое сходство этой картины с экспериментальными данными, показанными на Рис. 12.

В интересующей нас области фазовой диаграммы ВТСП – купратов антиферромагнитного дальнего порядка нет, однако целый ряд экспериментов указывает на существование всюду под линией  $T^*$  развитых флуктуаций антиферромагнитного ближнего порядка, на которых происходит рассеяние электронов с характерными импульсами передачи порядка  $\mathbf{Q}$ . В принципе, не так уж важно, чтобы это было рассеяние именно на AFM(SDW) флуктуациях, такую же роль могут играть и флуктуации CDW типа. Несомненно, что рассеяние с такими импульсами действительно имеет место (и доминирует!) в рассматриваемых системах во всей области существования псевдощели. Для того, чтобы в этом убедиться достаточно взглянуть на данные, представленные, например, на Рис. 9!

Для конкретности рассмотрим, однако, модель “почти антиферромагнитной” ферми – жидкости [41, 42], в которой вводится эффективное взаимодействие электронов со спиновыми флуктуациями, описываемое динамической спиновой восприимчивостью  $\chi_{\mathbf{q}}(\omega)$ , форма которой определялась из подгонки к данным ЯМР – экспериментов [43, 44]:

$$V_{eff}(\mathbf{q}, \omega) = g^2 \chi_{\mathbf{q}}(\omega) \approx \frac{g^2 \xi^2}{1 + \xi^2 (\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 - i \frac{\omega}{\omega_{sf}}} \quad (11)$$

где  $g$  – константа связи,  $\xi$  – корреляционная длина спиновых флуктуаций,  $\mathbf{Q} = (\pm\pi/a, \pm\pi/a)$  – вектор антиферромагнитного упорядочения в диэлектрической фазе,  $\omega_{sf}$  – характерная частота спиновых флуктуаций.

Поскольку динамическая спиновая восприимчивость  $\chi_{\mathbf{q}}(\omega)$  имеет пики при волновых векторах в окрестности  $(\pm\pi/a, \pm\pi/a)$ , в системе возникает

---

<sup>6</sup>Совершенно аналогичная ситуация имеет место и для диэлектризации за счет образования волны зарядовой плотности (CDW).

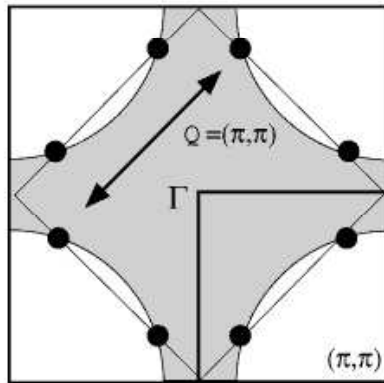


Рис. 14: Поверхность Ферми в зоне Бриллюэна и модель “горячих точек”. Показаны границы магнитной зоны Бриллюэна, возникающей при удвоении периода, связанным с возникновением антиферромагнетизма. “Горячие” точки – точки пересечения поверхности Ферми с границами магнитной зоны, связанные импульсом рассеяния порядка  $\mathbf{Q} = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$ .

“два типа” квазичастиц — “горячие квазичастицы”, импульсы которых расположены в окрестности “горячих точек” на поверхности Ферми (Рис. 14), а энергии удовлетворяют неравенству ( $v_F$  – скорость на поверхности Ферми):

$$|\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}| < v_F/\xi, \quad (12)$$

и “холодные”, импульсы которых находятся вблизи участков поверхности Ферми, окружающих диагонали зоны Бриллюэна  $|p_x| = |p_y|$  и не удовлетворяют (12). Эта терминология связана с тем, что квазичастицы из окрестности “горячих точек” сильно рассеиваются на вектор порядка  $\mathbf{Q}$ , за счет взаимодействия со спиновыми флуктуациями (11), тогда как для частиц с импульсами вдали от “горячих точек” это взаимодействие является достаточно слабым. В дальнейшем такую модель будем называть моделью “горячих точек”. Корреляционная длина флуктуаций ближнего антиферромагнитного порядка  $\xi$ , описываемых (11) играет в дальнейшем важнейшую роль. Надо заметить, что в реальных ВТСП – системах она обычно не очень велика и меняется в пределах  $2a < \xi < 8a$  [45, 46].

Характерная частота спиновых флуктуаций  $\omega_{sf}$ , в зависимости от типа соединения и степени легирования, обычно лежит в интервале  $10 - 100K$  [45, 46], так что в большей части псевдощелевой области на фазовой диаграмме достаточно хорошо выполняется неравенство  $2\pi T \gg \omega_{sf}$ , позволяющее пренебречь спиновой динамикой и ограничиться квазистатическим приближением:

$$V_{eff}(\mathbf{q}) = W^2 \frac{\xi^2}{1 + \xi^2(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2} \quad (13)$$

где  $W$  – эффективный параметр размерности энергии, который в модели АФМ флуктуаций может быть записан как [47]:

$$W^2 = g^2 \frac{\langle \mathbf{S}_i^2 \rangle}{3} = g^2 \langle (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2 \rangle \quad (14)$$

где  $g$  – константа взаимодействия электронов со спиновыми флуктуациями,  $\langle \mathbf{S}_i^2 \rangle$  – средний квадрат спина на узле решетки,  $n_{i\uparrow}, n_{i\downarrow}$  – операторы числа электронов на узле с соответствующими проекциями спина. В таком приближении, реальное динамическое поле спиновых флуктуаций фактически заменяется статическим случайным (гауссовым!) полем “замороженных”<sup>7</sup> спинов, антиферромагнитно скоррелированных на длинах

<sup>7</sup>При этом из диаграмм теории возмущений исчезают все “петлевые” вставки в линии взаимодействия, неизбежно присутствующие в задаче с динамикой и соответствующие квантовым поправкам высших порядков к спиновым (или зарядовым) флуктуациям ближнего порядка.

порядка  $\xi$ .

Ясно, что в рамках полуфеноменологического подхода, корреляционную длину  $\xi$  и параметр  $W$  следует рассматривать как некоторые функции концентрации носителей (и температуры), подлежащие определению из эксперимента. В частности  $W$  определяет эффективную энергетическую ширину псевдощели. Построение полной микроскопической теории псевдощелевого состояния не входит в нашу задачу, в дальнейшем мы будем заниматься, в основном, моделированием соответствующей перестройки электронного спектра и ее влияния на физические свойства системы, в частности, на сверхпроводимость.

Существенное упрощение расчетов возникает, если от (13) перейти к модельному взаимодействию вида [48] (аналогичное упрощение впервые использовалось в работах [49]):

$$V_{eff}(\mathbf{q}) = W^2 \frac{\xi^{-1}}{\xi^{-2} + (q_x - Q_x)^2} \frac{\xi^{-1}}{\xi^{-2} + (q_y - Q_y)^2} \quad (15)$$

Фактически, выражение (15) качественно вполне аналогично (13) и мало от него отличается количественно в наиболее интересной области  $|\mathbf{q} - \mathbf{Q}| < \xi^{-1}$ . Фактически, таким образом достигается эффективная одномеризация задачи.

Рассеяние на антиферромагнитных флуктуациях в ВТСП – купратах не всегда имеет максимальную интенсивность на векторе  $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ , соизмеримом с периодом исходной решетки, в общем случае вектор  $\mathbf{Q}$  может соответствовать несоизмеримому рассеянию (см. например вставку на Рис. 2). Исходя из наблюдаемой топологии Ферми поверхности с плоскими участками, типа показанной на Рис. 2, можно предложить и другую модель рассеяния на флуктуациях ближнего порядка антиферромагнитного типа, которую будем называть моделью “горячих участков” [50]. В этой модели мы считаем, что поверхность Ферми двумерной электронной системы имеет вид, представленный на Рис. 15. Размер “горячих участков” определяется угловым параметром  $\alpha$ . Хорошо известно, что плоские участки на поверхности Ферми приводят к неустойчивости системы относительно образования волны зарядовой (CDW) или спиновой (SDW) плотности, с установлением соответствующего дальнего порядка и образованием (диэлектрической) энергетической щели на этих участках. Нас же интересует ситуация, характерная для флуктуационной области соответствующей фазовой диаграммы, когда дальнего порядка нет. Флуктуации ближнего порядка опять считаем статическими и гауссовскими, определяя взаимодействие с ними в виде аналогичном (15), где



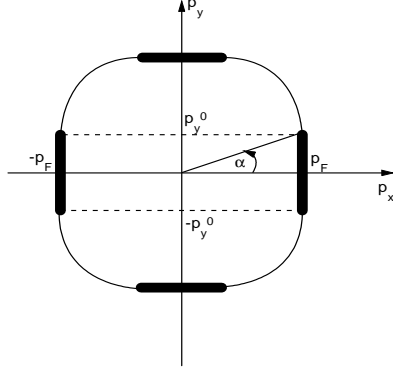


Рис. 15: Поверхность Ферми в модели “горячих участков”, которые показаны толстыми линиями, ширина которых  $\sim \xi^{-1}$ . Угол  $\alpha$  определяет размер “горячего участка”,  $\alpha = \pi/4$  соответствует квадратной поверхности Ферми.

вектор рассеяния берется в виде  $Q_x = \pm 2p_F$ ,  $Q_y = 0$  или  $Q_y = \pm 2p_F$ ,  $Q_x = 0$ . Предполагается, что с этими флуктуациями взаимодействуют электроны только с плоских (“горячих”) участков на поверхности Ферми, показанных на Рис. 15, так что это рассеяние носит фактически одномерный характер. В частности, при  $\alpha = \pi/4$  имеем просто квадратную поверхность Ферми, а задача становится чисто одномерной. Для  $\alpha < \pi/4$  на поверхности Ферми имеются “холодные” участки, на которых рассеяние либо просто отсутствует, либо считается достаточно слабым. Выбор вектора рассеяния  $\mathbf{Q} = (\pm 2k_F, 0)$  или  $\mathbf{Q} = (0, \pm 2p_F)$  в общем случае подразумевает картину несоизмеримых флуктуаций, поскольку импульс Ферми  $p_F$  вообще говоря не связан с периодом обратной решетки. Соизмеримый случай также может быть рассмотрен в рамках этой модели [50].

Итак, основная идея рассматриваемых моделей состоит в рассмотрении сильного рассеяния на флуктуациях ближнего порядка, которое, в соответствии с (11), (15), эффективно отлично от нуля в ограниченной области обратного пространства с размерами порядка  $\xi^{-1}$  вокруг “горячих” точек или участков, что и приводит к псевдощелевой перестройке электронного спектра в этих областях. Оказывается, что в рамках сфор-

мулированных приближений, данные модели допускают “почти точное” решение, описанию которого и будет посвящена значительная часть последующего изложения. При этом, основное внимание будет уделено модели “горячих точек”, как более “реалистической” и еще недостаточно описанной в обзорной литературе. Подробности, касающиеся модели “горячих участков”, также как и соответствующую библиографию, можно найти в обзоре [21].

#### 4 Элементарная модель псевдощели.

Прежде чем анализировать “реалистическую” модель “горячих точек”, весьма поучительно рассмотреть элементарную одномерную модель псевдощелевого состояния, допускающую точное решение в аналитическом виде [51]. Пусть электрон совершает одномерное движение в случайном поле гауссовых флуктуаций, фурье – образ коррелятора которых, сопоставляемый линии взаимодействия (рассеяния) в соответствующей теории возмущений, имеет вид:

$$V_{eff}(Q) = 2W^2 \left\{ \frac{\kappa}{(Q - 2p_F)^2 + \kappa^2} + \frac{\kappa}{(Q + 2p_F)^2 + \kappa^2} \right\} \quad (16)$$

где  $\kappa = \xi^{-1}(T)$ . Выбор вектора рассеяния  $Q \sim \pm 2p_F$ , сразу подразумевает рассмотрение несоизмеримых флуктуаций. Точное решение можно получить в предел  $\xi \rightarrow \infty$  ( $\kappa \rightarrow 0$ ), т.е. в асимптотике очень больших корреляционных длин флуктуаций ближнего порядка<sup>8</sup>. Теперь мы можем просуммировать все фейнмановские графики теории возмущений с “взаимодействием” вида (16), которое переходит в рассматриваемом пределе в:

$$V_{eff}(Q) = 2\pi W^2 \{ \delta(Q - 2p_F) + \delta(Q + 2p_F) \} \quad (17)$$

Рассмотрим простейший вклад в собственно – энергетическую часть электрона, изображаемый диаграммой Рис. 16, который пишем в мацубаровской технике:

$$\Sigma(\varepsilon_n p) = \int \frac{dQ}{2\pi} V_{eff}(Q) \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{p-Q}} \approx 2W^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} \frac{\kappa}{x^2 + \kappa^2} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p - v_F x} =$$

---

<sup>8</sup>Во избежание недоразумений, сразу заметим, что в данном случае, переход к такому пределу не означает возникновения дальнего порядка. Электрон движется в гауссовом случайном поле со специфическим парным коррелятором, а не в периодической системе.

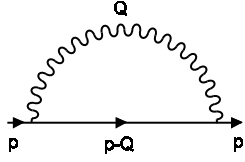


Рис. 16: Простейший график для собственно – энергетической части электрона. Волнистая линия изображает взаимодействие  $V_{eff}(Q)$ .

$$\begin{aligned}
 &= 2W^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} \frac{\kappa}{(x - i\kappa)(x + i\kappa)} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p - v_F x} = \\
 &= \frac{W^2}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa}
 \end{aligned} \tag{18}$$

где, для определенности, полагали  $p \sim +p_F$ ,  $\varepsilon_n > 0$  и определили новую переменную интегрирования  $x$  с помощью  $Q = 2p_F + x$ . При этом мы также воспользовались всегда справедливым в одномерии условием “нестинга”  $\xi_{p-2p_F} = -\xi_p$  для спектра электронов, который взят в стандартном виде  $\xi_p = v_F(|p| - p_F)$ .

Интересующий нас предел  $\xi(T) \rightarrow \infty$  ( $\kappa \rightarrow 0$ ) следует понимать в смысле:

$$v_F \kappa = v_F \xi^{-1} \ll \text{Max}\{2\pi T, \xi_p\} \tag{19}$$

или

$$v_F \kappa = v_F \xi^{-1} \ll 2\pi T, \quad \xi(T) \gg |p - p_F|^{-1} \tag{20}$$

Тогда (18) переходит в:

$$\Sigma(\varepsilon_n p) \approx \frac{W^2}{i\varepsilon_n + \xi_p} \tag{21}$$

Теперь для “взаимодействия” (17) нет проблем выписать вклад графика любого порядка для функции Грина, типа показанного на Рис. 17.

В таком графике  $n$ -го порядка по  $V_{eff}(Q)$  имеется всего  $2n$  вершин, соединенных между собой линиями взаимодействия всеми возможными способами. При этом эти линии поочередно<sup>9</sup> “уносят” и “приносят” импульсы  $Q = 2p_F$ . В результате, в соответствующем аналитическом выражении для такого графика возникает последовательность чередующихся функций Грина вида  $\frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p}$  ( $n$  штук) и  $\frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p}$  (тоже  $n$  штук), плюс еще одна (начальная)  $\frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p}$ <sup>10</sup>. Кроме того, есть еще множитель  $W^{2n}$ . В итоге, вклады всех графиков в данном порядке просто совпадают, а их суммарный вклад определяется их полным числом, которое легко подсчитать из комбинаторных соображений – оно равно  $n!$ . В самом деле, имеется  $2n$  точек (вершин), куда “входят” или “выходят” линии взаимодействия. Из них  $n$  точек имеют “выходящую” линию, которая любым из  $n!$  способов может “войти” в оставшиеся “свободными”  $n$  вершин. Используем теперь тождество<sup>11</sup>:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n! z^n = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} (\zeta z)^n = \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} \frac{1}{1 - \zeta z} \quad (22)$$

Тогда легко суммируем *весь* ряд для функции Грина и получаем точное решение рассматриваемой задачи:

$$\begin{aligned} G(\varepsilon_l p) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{W^{2n} n!}{(i\varepsilon_l - \xi_p)^n (i\varepsilon_l + \xi_p)^n (i\varepsilon_l - \xi_p)} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} n! z^n(\varepsilon_l, \xi_p) G_0(\varepsilon_l \xi_p) = \\ &= \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} \frac{i\varepsilon_l + \xi_p}{(i\varepsilon_l)^2 - \xi_p^2 - \zeta W^2} \equiv \langle G_{\zeta W^2}(\varepsilon_l \xi_p) \rangle_{\zeta}, \quad \varepsilon_l = (2l + 1)\pi T \quad (23) \end{aligned}$$

где использовали обозначение:

$$z(\varepsilon_l, \xi_p) = W^2 G_0(\varepsilon_l, \xi_p) G_0(\varepsilon_l, -\xi_p) \quad (24)$$

---

<sup>9</sup>Эта поочередность важна, чтобы электрон “не уходил” далеко от уровня Ферми (точек  $\pm p_F$ ), (что привело – бы к появлению больших энергий в знаменателях соответствующих вкладов теории возмущений). Это не так для случая соизмеримых флуктуаций, типа удвоения периода, когда работаем со спектром, “сильной связи” и “приход” или “уход” любого числа импульсов  $Q = (\pi/a, \pi/a)$  оставляет электрон вблизи уровня Ферми. Соответственно, для этого частного случая возникает несколько иная комбинаторика диаграмм [52], которую мы не будем рассматривать из соображений экономии времени и места.

<sup>10</sup>Разумеется точно также решается задача и с произвольным фиксированным вектором рассеяния  $Q$ , когда просто чередуются  $\frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p}$  и  $\frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p - Q}$ . Мы берем  $Q = 2p_F$  просто для компактности записи и для того, чтобы псевдощель оказалась как раз на уровне Ферми.

<sup>11</sup>В математике это называется суммированием по Борелю.

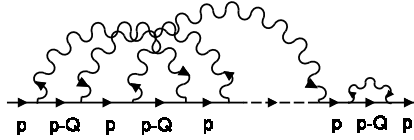


Рис. 17: График произвольного порядка для одноэлектронной функции Грина.

и у нас возникла “нормальная” функция Грина диэлектрика (пайерлсовского типа):

$$G_{W^2}(\varepsilon_l p) = \frac{i\varepsilon_l + \xi_p}{(i\varepsilon_l)^2 - \xi_p^2 - W^2} \quad (25)$$

под знаком “усреднения”:

$$\langle \dots \rangle_\zeta = \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \dots \quad (26)$$

Нетрудно сообразить (формальное доказательство, как и многие другие детали, связанные с рассматриваемой моделью можно найти в [53]), что (23) представляет собой функцию Грина электрона, движущегося во внешнем поле вида  $2V \cos(2p_F x + \phi)$ , амплитуда которого “флуктуирует” с так называемым распределением Рэлея<sup>12</sup>:

$$\mathcal{P}(V) = \frac{2V}{W^2} e^{-\frac{V^2}{W^2}} \quad (27)$$

а фаза  $\phi$  распределена однородно на интервале от 0 до  $2\pi$ .

<sup>12</sup>Это распределение хорошо известно в статистической радиофизике, см. например: С.М.Рытов. Введение в статистическую радиофизику. Часть I. “Наука”, М, 1976.

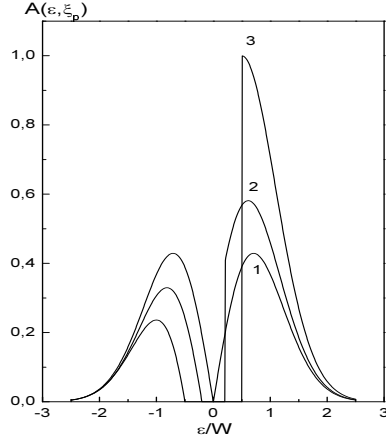


Рис. 18: Спектральная плотность в модели псевдощелевого состояния: (1)— $\xi_p = 0$ ; (2)— $\xi_p = 0.1W$ ; (3)— $\xi_p = 0.5W$ .

Выполняя аналитическое продолжение  $i\varepsilon_l \rightarrow \varepsilon \pm i\delta$  из (23) получаем для  $\varepsilon > 0$ :

$$\begin{aligned} \text{Im}G^{R,A}(\varepsilon\xi_p) &= \mp\pi(\varepsilon + \xi_p) \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \delta(\varepsilon^2 - \xi_p^2 - \zeta W^2) = \\ &= \mp \frac{\pi}{W^2} (\varepsilon + \xi_p) \theta(\varepsilon^2 - \xi_p^2) e^{-\frac{\varepsilon^2 - \xi_p^2}{W^2}} \end{aligned} \quad (28)$$

так что спектральная плотность

$$A(\varepsilon\xi_p) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G^R(\varepsilon\xi_p) \quad (29)$$

имеет “нефермижидкостный” вид, показанный на Рис. 18. Подчеркнем, что полученная нами функция Грина не обладает особенностями полюсного вида на действительной оси  $\varepsilon$ , которые соответствовали бы одночастичным возбуждениям квазичастичного типа, что также означает отсутствие фермижидкостного поведения.

Плотность состояний электронов имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{N(\varepsilon)}{N_0(E_F)} &= \left| \frac{\varepsilon}{W} \right| \int_0^{\frac{\varepsilon^2}{W^2}} d\zeta \frac{e^{-\zeta}}{\sqrt{\frac{\varepsilon^2}{W^2} - \zeta}} = 2 \left| \frac{\varepsilon}{W} \right| \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{W^2}\right) \text{Erfi}\left(\frac{\varepsilon}{W}\right) = \\ &= \begin{cases} 1 & \text{при } |\varepsilon| \rightarrow \infty \\ \frac{2\varepsilon^2}{W^2} & \text{при } |\varepsilon| \rightarrow 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (30)$$

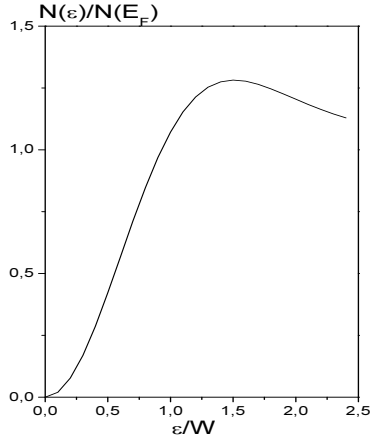


Рис. 19: Плотность состояний с псевдощелью.

где  $N_0(E_F)$  – плотность состояний свободных электронов на уровне Ферми, а  $\text{Erfi}(x) = \int_0^x dx e^{x^2}$  – интеграл вероятностей от мнимого аргумента. Характерный вид этой плотности состояний показан на Рис. 19 и демонстрирует наличие размытой (“мягкой”) псевдощели в окрестности уровня Ферми. По сути дела, это есть плотность состояний одномерного диэлектрика со щелью шириной  $2V$ , усредненная по флуктуациям этой щели, определяемым распределением (27).

Замечательной особенностью рассматриваемой модели является также возможность получить точное решение (просуммировать *все* диаграммы) и для функции отклика на внешнее электромагнитное поле [51, 53]. Дело здесь в том, что произвольная диаграмма для вершинной части, описывающей отклик на внешнее поле, может быть получена из произвольной диаграммы для функции Грина (типа Рис. 17) “вставкой” в любую из электронных линий линии внешнего поля, как это показано на Рис. 20. Проводя непосредственно такие “вставки” во всех диаграммах ряда (23) можно, после некоторых (достаточно громоздких, но прямых) вычислений просуммировать весь ряд для соответствующей вершинной части и получить замкнутые выражения для функций отклика (например для поляризационного оператора). Детали соответствующих вычислений можно найти в [51, 53]). Однако, структура соответствующего ответа понятна и без вычислений — нужно просто рассчитать отклик диэлектрика с фиксированной щелью  $2V$ , а потом усреднить результат по флуктуациям щели с функцией распределения (27). В частности, для поляризационного оператора возникает следующее изящное выражение

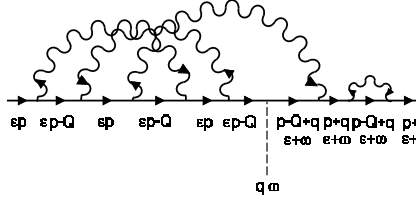


Рис. 20: График произвольного порядка для вершинной части взаимодействия с внешним электромагнитным полем.

( $\omega_m = 2\pi mT$ ):

$$\begin{aligned} \Pi(\mathbf{q}\omega_m) = \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} 2T \sum_n \int_{-\infty}^\infty \frac{dp}{2\pi} \{ & G_{\zeta W^2}(\varepsilon_n \mathbf{p}) G_{\zeta W^2}(\varepsilon_n + \omega_m \mathbf{p} + \mathbf{q}) + \\ & + F_{\zeta W^2}(\varepsilon_n \mathbf{p}) F_{\zeta W^2}^+(\varepsilon_n + \omega_m \mathbf{p} + \mathbf{q}) \} = \langle \Pi_{\zeta W^2}(\mathbf{q}\omega_m) \rangle_\zeta \quad (31) \end{aligned}$$

где автоматически возникает произведение двух “аномальных” функций Грина:

$$F(\varepsilon_n p) = \frac{W^*}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |W|^2}, \quad F^+(\varepsilon_n + \omega_m p) = \frac{W}{(i\varepsilon_n + i\omega_m)^2 - \xi_p^2 - |W|^2} \quad (32)$$

описывающих процессы переброса в системе с дальним порядком [53]. Ввиду отсутствия дальнего порядка в рассматриваемой задаче, среднее значение (32) обращается нуль при усреднении по фазе, тогда как среднее от парного произведения в двухчастичном отклике (31) отлично от нуля. В итоге, под знаком усреднения по флуктуациям щели здесь стоит просто поляризационный оператор диэлектрика (пайерлсовского типа).

Действительная часть проводимости для такого одномерного диэлек-



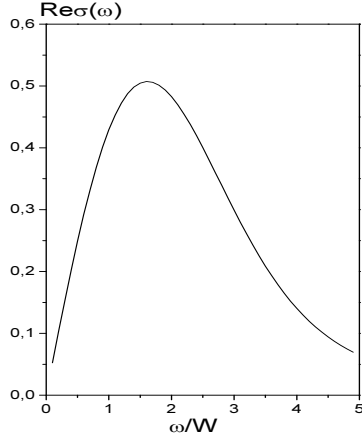


Рис. 21: Частотная зависимость действительной части проводимости в псевдощелевом состоянии. Проводимость дана в единицах  $\frac{\omega_p^2}{4\pi W}$ .

трика с фиксированной щелью  $2W$  имеет следующий вид [53]:

$$Re\sigma_{W^2}(\omega) = \begin{cases} \frac{n\epsilon^2}{m\omega} \frac{\pi}{\sqrt{\frac{\omega^2}{4W^2}-1}} \frac{W}{\omega} & \text{при } |\omega| > 2W \\ 0 & \text{при } |\omega| < 2W \end{cases} \quad (33)$$

Отсюда видно, что поглощение электромагнитной энергии происходит путем возбуждения квазичастиц через щель и отлично от нуля при  $\omega > 2W$ . В псевдощелевом состоянии это выражение нужно еще усреднить по флуктуациям  $W$ , описываемым распределением (26) или (27). Таким образом из (33) получаем:

$$Re\sigma(\omega) = \frac{\omega_p^2}{4} \frac{W}{\omega^2} \int_0^{\frac{\omega^2}{4W^2}} d\zeta e^{-\zeta} \frac{\zeta}{\sqrt{\frac{\omega^2}{4W^2} - \zeta}} \quad (34)$$

Соответствующая частотная зависимость показана на Рис. 21. Виден характерный размытый максимум поглощения через псевдощель.

Рассмотренная элементарная модель псевдощелевого состояния оказывается весьма полезной при решении целого ряда задач. Она легко обобщается на двумерный случай в варианте модели “горячих участков” на поверхности Ферми [50]. Это позволяет проанализировать целый ряд вопросов, связанных с формированием сверхпроводящего состояния “на фоне” такой (диэлектрической) псевдощели [50, 54, 55, 59, 56]. В частности, благодаря тому, что модель допускает точное решение в аналити-

ческом виде, удастся проанализировать тонкие вопросы отсутствия самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка в случайном поле псевдощелевых флуктуаций [54], что указывает на возможный механизм образования локальных неоднородностей (типа “сверхпроводящих капель”) при температурах выше среднеполевой температуры сверхпроводящего перехода. Это может объяснить, в частности, экспериментально наблюдаемые проявления сверхпроводимости в этой области (типа аномального эффекта Нернста), которые обычно интерпретируются в духе сценария сверхпроводящей псевдощели. Возможна также прямая связь с картиной неоднородной сверхпроводимости, наблюдаемой в STM экспериментах [17, 18].

К сожалению, достоинства модели определяют и ее недостатки. В частности, совершенно нереалистической является асимптотика бесконечной корреляционной длины псевдощелевых флуктуаций. В реальных системах, как уже отмечалось выше, корреляционная длина не превышает нескольких межатомных расстояний. Кроме того, с ростом корреляционной длины неизбежно нарушается и гауссов характер псевдощелевых флуктуаций. Учет эффектов конечности корреляционной длины представляет собой весьма сложную задачу. Для одномерной модели такое обобщение было впервые предложено в работе [57]. Оказалось, что при уменьшении корреляционной длины  $\xi$  происходит постепенное “замытие” псевдощели, связанное с ростом параметра рассеяния  $v_F/\xi$ , т.е. уже отмечавшегося выше обратного времени пролета электрона через область размером  $\sim \xi$ , в которой эффективно сохраняется “диэлектрическое” упорядочение. На методе, использованном в [57] основано и соответствующее обобщение на двумерный случай [48, 47], которое будет подробно рассмотрено ниже, в связи с обсуждением модели “горячих точек”. Отметим также весьма упрощенный вариант одномерной модели с конечной корреляционной длиной, близкий по духу к модели [51, 57], предложенный в работе [58] и использованный в [59] для анализа вопросов самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка в модели “горячих участков”.

## 5 Модель “горячих точек”.

### 5.1 “Почти точное” решение для одночастичной функции Грина.

Перейдем теперь к описанию нашего “почти точного” решения для модели “горячих точек”. Рассмотрим поправку первого порядка по  $V_{eff}$  (15) к собственно-энергетической части электрона, соответствующую простейшей диаграмме первого порядка типа Рис. 16:

$$\Sigma(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{q}} V_{eff}(\mathbf{q}) \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}} \quad (35)$$

При достаточно больших корреляционных длинах  $\xi$ , основной вклад в сумму по  $\mathbf{q}$  дает область вблизи  $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ . Тогда можем записать:

$$\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} = \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}+\mathbf{k}} \approx \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} + \mathbf{v}_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} \mathbf{k} \quad (36)$$

где  $\mathbf{v}_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} = \frac{\partial \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}}{\partial \mathbf{p}}$  – соответствующая скорость квазичастицы на поверхности Ферми. Тогда (35) легко вычисляется и дает:

$$\Sigma(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{W^2}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} + i(|v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x| + |v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y|) \kappa \text{sign} \varepsilon_n} \quad (37)$$

где  $\kappa = \xi^{-1}$ . Подчеркнем, что здесь и в дальнейшем “линеаризация” спектра квазичастиц (36) в интеграле в (35) проводится только по малой (порядка  $v_F \xi^{-1}$ ) в силу достаточно большой величины  $\xi$  добавке к спектру квазичастиц вблизи поверхности Ферми, тогда как форма спектра  $\xi_{\mathbf{p}}$  и  $\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}$  соответствует общему выражению (10):  $\xi_{\mathbf{p}} = \varepsilon_{\mathbf{p}} - \mu$ .

Рассмотрим теперь поправки следующего (второго) порядка, показанные на Рис. 22. С использованием (15) получаем:

$$\Sigma(a) = W^4 \frac{\int \frac{d\mathbf{k}_1}{\pi^2} \int \frac{d\mathbf{k}_2}{\pi^2} \frac{\kappa}{\kappa^2 + k_{1x}^2} \frac{\kappa}{\kappa^2 + k_{1y}^2} \frac{\kappa}{\kappa^2 + k_{2x}^2} \frac{\kappa}{\kappa^2 + k_{2y}^2}}{1} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x k_{1x} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y k_{1y}} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}} - v_{\mathbf{p}}^x (k_{1x} + k_{2x}) - v_{\mathbf{p}}^y (k_{1y} + k_{2y})} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x k_{1x} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y k_{1y}} \quad (38)$$

$$\Sigma(b) = W^4 \frac{\int \frac{d\mathbf{k}_1}{\pi^2} \int \frac{d\mathbf{k}_2}{\pi^2} \frac{\kappa}{\kappa^2 + k_{1x}^2} \frac{\kappa}{\kappa^2 + k_{1y}^2} \frac{\kappa}{\kappa^2 + k_{2x}^2} \frac{\kappa}{\kappa^2 + k_{2y}^2}}{1} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x k_{1x} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y k_{1y}} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}} - v_{\mathbf{p}}^x (k_{1x} + k_{2x}) - v_{\mathbf{p}}^y (k_{1y} + k_{2y})} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x k_{2x} - v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y k_{2y}} \quad (39)$$

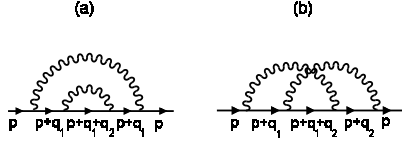


Рис. 22: Графики второго порядка по эффективному взаимодействию с псевдощелевыми флуктуациями.

где воспользовались видом спектра (10), из которого, в частности, следует  $\xi_{\mathbf{p}+2\mathbf{Q}} = \xi_{\mathbf{p}}$ ,  $\mathbf{v}_{\mathbf{p}+2\mathbf{Q}} = \mathbf{v}_{\mathbf{p}}$  при  $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ . Если знаки  $v_{\mathbf{p}}^x$  и  $v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x$ , а также  $v_{\mathbf{p}}^y$  и  $v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y$  совпадают, то интегралы в (38) и (39) полностью определяются вкладами от полюсов лоренцианов, определяющих взаимодействие с флуктуациями ближнего порядка, и после элементарного контурного интегрирования получаем:

$$\Sigma(a) = \Sigma(b) = \frac{W^4}{[i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} + i(|v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x| + |v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y|)\kappa]^2} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}} + i2(|v_{\mathbf{p}}^x| + |v_{\mathbf{p}}^y|)\kappa} \quad (40)$$

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

Таким образом оказывается, что в случае, когда знаки проекций скоростей на поверхности Ферми  $v_{\mathbf{p}}^x$  и  $v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x$ , а также  $v_{\mathbf{p}}^y$  и  $v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y$  совпадают, то фейнмановские интегралы в диаграмме любого порядка определяются только вкладами от полюсов лоренцианов в (15) и легко вычисляются. Аналогичная ситуация возникает и в том частном случае, когда скорости в “горячих точках”, связанных вектором  $\mathbf{Q}$  в точности перпендикулярны. В этом случае вклад произвольной диаграммы для собственно – энергетической части  $N$ -го порядка по взаимодействию с флуктуациями (15)

имеет вид:

$$\Sigma^{(N)}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = W^{2N} \prod_{j=1}^{2N-1} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_j(\mathbf{p}) + in_j v_j \kappa} \quad (41)$$

где  $\xi_j(\mathbf{p}) = \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}$  и  $v_j = |v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x| + |v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y|$  для нечетных  $j$  и  $\xi_j(\mathbf{p}) = \xi_{\mathbf{p}}$  и  $v_j = |v_{\mathbf{p}}^x| + |v_{\mathbf{p}}^y|$  для четных  $j$ . Здесь  $n_j$  – число линий взаимодействия, охватывающих  $j$ -ю функцию Грина в данной диаграмме (считая от первой) и для определенности полагаем, что  $\varepsilon_n > 0$ .

В работе [48] были подробно проанализированы условия, при которых выполняются указанные условия на скорости в точках поверхности Ферми, связанных вектором  $\mathbf{Q}$  (“горячих точках”) и приведены примеры соответствующих геометрий поверхности Ферми, реализующихся при определенных соотношениях параметров  $t$  и  $t'$  в (10). В этих случаях выражение (41) является точным, с отмеченной выше оговоркой об использовании “линеаризации” (36). Во всех остальных случаях (при других соотношениях  $t$  и  $t'$ ) мы используем выражение (41) в качестве удачного *Ansatz*'а для вклада произвольного порядка, получающегося простым продолжением по параметрам спектра  $t$  и  $t'$  в интересующую нас область. Даже в наиболее неблагоприятном одномерном случае [57], соответствующем квадратной поверхности Ферми, возникающей из (10) при  $t' = 0$  и  $\mu = 0$ , использование этого *Ansatz*'а дает результаты (например для плотности состояний) очень близкие количественно [60] к результатам точного численного моделирования этой задачи [61].

В общем плане заметим, что в стандартных ситуациях, в рамках диаграммного подхода выполняется суммирование тех или иных *подпоследовательностей* диаграмм, которые отбираются по какому – либо параметру малости. В данном случае, мы сталкиваемся с гораздо более редкой ситуацией — удастся просуммировать *весь* диаграммный ряд, но вклад каждой из диаграмм вычисляется приближенно. В этом смысле мы и употребляем термин “почти точное” решение.

В случае использования *Ansatz*'а (41) оказывается, что *вклад любой диаграммы с пересечением линий взаимодействия оказывается равным вкладу некоторой диаграммы того же порядка без пересечения этих линий* [57]. Поэтому, фактически, мы можем учитывать лишь диаграммы без пересечения линий взаимодействия, учитывая вклад диаграмм с пересечением с помощью дополнительных комбинаторных множителей, сопоставляемых “начальным” вершинам (или линиям) взаимодействия [57]. В результате, для одноэлектронной функции Грина возникает следующее рекуррентное соотношение (представление в виде цепной дроби [57]), ко-



Рис. 23: Графическое представление рекуррентного соотношения для одноэлектронной функции Грина.

торое дает эффективный алгоритм для последующих численных расчетов [48]:

$$G_k(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_k(\mathbf{p}) + ikv_k\kappa - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}})} \equiv \{G_{0k}^{-1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}})\}^{-1} \quad (42)$$

$$\Sigma_k(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) = W^2 \frac{v(k)}{i\varepsilon_n - \xi_k(\mathbf{p}) + ikv_k\kappa - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}})} \quad (43)$$

Графически это рекуррентное представление для функции Грина показано на Рис. 23. Интересующая нас физическая функция Грина  $G(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) = G_{k=0}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}})$ . В (42) мы ввели также вспомогательное обозначение:

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

Комбинаторный множитель:

$$v(k) = k \quad (45)$$

в случае соизмеримых флуктуаций с  $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$  [57], если не учитывать их спиновой структуры (флуктуации CDW – типа). Для несоизмеримых CDW флуктуаций [57]:

$$v(k) = \begin{cases} \frac{k+1}{2} & \text{при нечетных } k \\ \frac{k}{2} & \text{при четных } k \end{cases} \quad (46)$$

Если учесть спиновую структуру взаимодействия в рамках модели “почти антиферромагнитной” ферми – жидкости (спин – фермионная модель [47]), то комбинаторика диаграмм становится более сложной. В частности, рассеяние с сохранением спина дает формально соизмеримую комбинаторику, тогда как рассеяние с переворотом спина описывается диаграммами несоизмеримого случая (“заряженного” случайного поля в терминах работы [47]). В результате, рекуррентное соотношение для функции Грина, по прежнему, имеет вид (43), но комбинаторный множитель  $v(k)$  имеет вид [47]:

$$v(k) = \begin{cases} \frac{k+2}{3} & \text{при нечетных } k \\ \frac{k}{3} & \text{при четных } k \end{cases} \quad (47)$$

Полученное решение для одночастичной функции Грина является асимптотически точным в пределе  $\xi \rightarrow \infty$ , когда можно найти решение в аналитическом виде [51, 47]. Оно точно и в тривиальном пределе  $\xi \rightarrow 0$ , когда при фиксированном значении  $W$  взаимодействие (15) просто исчезает. Для всех промежуточных значений  $\xi$  оно дает, как отмечено выше, очень хорошую интерполяцию, являясь практически точным для определенных геометрий поверхности Ферми, возникающих для конкретных областей изменения параметров спектра (10) [48]. Заметим также, что изложенный формализм может быть легко использован и для описания псевдощели в рамках сверхпроводящего сценария ее формирования [48, 62]. Наше же предпочтение “диэлектрического” сценария основано на физических соображениях.

С помощью (42) нетрудно провести численные расчеты одноэлектронной спектральной плотности:

$$A(E\mathbf{p}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G^R(E\mathbf{p}) \quad (48)$$

которая может быть найдена и из экспериментальных данных по ARPES [21]. В (48) величина  $G^R(E\mathbf{p})$  представляет собой запаздывающую функцию Грина, полученную обычным аналитическим продолжением (42) с

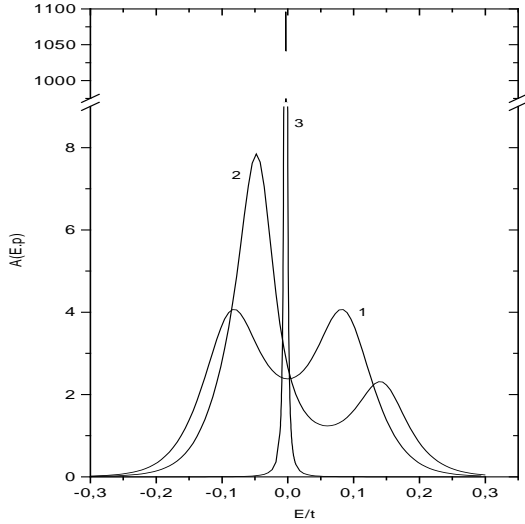


Рис. 24: Спектральная плотность в модели “горячих точек”, случай несоизмеримых флуктуаций,  $\kappa a = 0.01$ : (1) – в “горячей точке”  $p_x a/\pi = 0.142$ ,  $p_y a/\pi = 0.587$ , (2) – вблизи “горячей точки” при  $p_x a/\pi = 0.145$ ,  $p_y a/\pi = 0.843$ , (3) – вдали от “горячей точки” при  $p_x a/\pi = p_y/\pi = 0.375$ .

мацубаровских частот на вещественную ось  $E$ . Аналогичным образом, можно провести и расчеты одноэлектронной плотности состояний:

$$N(E) = \sum_{\mathbf{p}} A(E\mathbf{p}) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{p}} \text{Im}G^R(E\mathbf{p}) \quad (49)$$

Детали соответствующих расчетов и обсуждение полученных результатов для рассматриваемой нами двумерной модели можно найти в цитированных выше работах [47, 48]. Здесь мы приведем только ряд наиболее важных результатов.

В качестве типичного примера на Рис.24 приведены результаты [48] для спектральной плотности носителей в несоизмеримом (CDW) случае. Видим, что спектральная плотность вблизи “горячей точки” имеет ожидавшийся нами нефермижидкостной вид, понятие квазичастиц ввести нельзя. Вдали от горячей точки спектральная плотность имеет острый пик, соответствующий хорошо определенным квазичастицам (ферми – жидкость). На Рис. 25 из работы [47] показано произведение функции распределения на спектральную плотность для различных точек на “перенормированной” поверхности Ферми, определяемой из уравнения



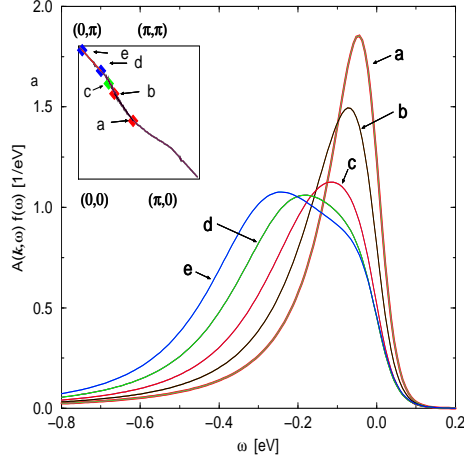


Рис. 25: Произведение спектральной плотности на фермиевскую функцию распределения в различных точках поверхности Ферми, показанных на вставке. Спин – фермионная модель, корреляционная длина  $\xi = 3a$ .

$\varepsilon_{\mathbf{p}} - \text{Re}\Sigma(E = 0\mathbf{p}) = 0$ , где “затравочный” спектр  $\varepsilon_{\mathbf{p}}$  брался в виде (10) с  $t = -0.25eV$ ,  $t' = -0.35t$  при концентрации дырок  $n_h = 0.16$ , константе связи в (11)  $g = 0.8eV$  и корреляционной длине  $\xi = 3a$  (соизмеримый случай, спин – фермионная модель). Видно полное качественное соответствие с обсуждавшимися выше данными ARPES и качественно различное поведение вблизи и вдали от “горячей точки”. Наконец, на Рис. 26 из [47] показаны рассчитанные в рамках спин – фермионной модели положения максимума  $A(\omega\mathbf{k})$  для двух разных концентраций дырок и соответствующие экспериментальные данные работы [63] по ARPES в системе  $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Dy_xCu_2O_{8+\delta}$ . Дело здесь в том, что положения максимума спектральной плотности в плоскости  $(\omega, \mathbf{k})$ , определяемые из ARPES, в идеальной системе типа ферми – жидкости, фактически определяют закон дисперсии соответствующих квазичастиц (см. Рис. 5(a)). Для перодопированной системы принимались значения  $n_h = 0.22$  и  $\xi = a$ . Полученные результаты демонстрируют достаточно хорошо определенные ветви спектра как в направлении диагонали зоны Бриллюэна, так и в направлении  $(0, 0) - (\pi, 0)$ . Для недодопированной системы принимались значения  $n_h = 0.16$  и  $\xi = 3a$ . При этом, в направлении диагонали, по-прежнему видно пересечение спектра с уровнем Ферми, тогда как вблизи “горячих точек” в окрестности  $(\pi, 0)$  размытый максимум спектраль-

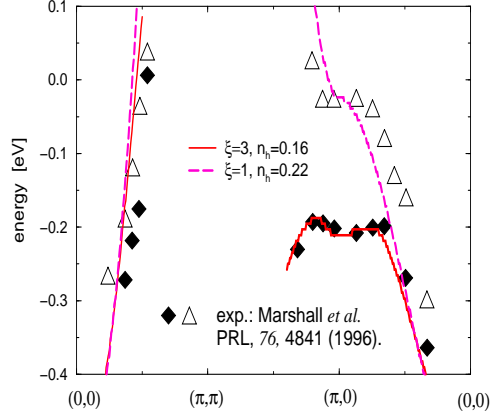


Рис. 26: Положение максимума спектральной плотности в зависимости от корреляционной длины  $\xi$  и концентрации дырок, рассчитанное для обсуждаемого варианта спин – фермионной модели в сравнении с данными ARPES для  $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Dy_xCu_2O_{8+\delta}$  с  $x = 1$  (треугольники) и  $x = 0.175$  (ромбики).

ной плотности остается примерно на  $200 \text{ meV}$  ниже уровня Ферми (псевдощель). В целом, соответствие теоретической модели и эксперимента является вполне удовлетворительным.

Перейдем к рассмотрению одноэлектронной плотности состояний, которая определяется интегралом от спектральной плотности  $A(E\mathbf{p})$  по всей зоне Бриллюэна. Подробные расчеты плотности состояний в модели “горячих точек” были проведены в [48]. В качестве примера на Рис. 27 приведены соответствующие данные для топологии поверхности Ферми, типичной для ВТСП – систем. Видим, что для достаточно типичного значения  $t'/t = -0.4$  в плотности состояний наблюдается лишь небольшой провал (псевдощель). Это понижение плотности состояний довольно слабо зависит от величины корреляционной длины  $\xi$ . В тоже время, например, для  $t'/t = -0.6$  (что нехарактерно для ВТСП – купратов) “горячие точки” на поверхности Ферми имеются, но псевдощель в плотности состояний практически не видна [48]. Заметно лишь замытие Ван-Хововской особенности, существующей в отсутствие рассеяния на флуктуациях. В этом смысле, наиболее яркие проявления псевдощели имеют место не в плотности состояний, а в спектральной плотности, что, в общем, вполне

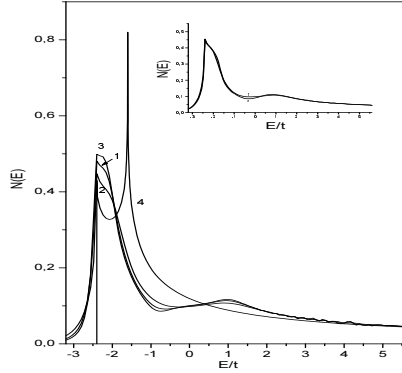


Рис. 27: Одноэлектронная плотность состояний (в единицах  $1/ta^2$ ) для различных комбинаторик диаграмм для случая  $t'/t = -0.4$ ,  $\mu/t = -1.3$ , типичного для ВТСП – систем: (1)—несоизмеримый случай, (2)—соизмеримый случай, (3)—комбинаторика спин – фермионной модели, (4)—в отсутствие псевдощелевых флуктуаций. Использовано значение  $W/t = 1$ , корреляционная длина соответствует  $ka = 0.1$ . На вставке: Одноэлектронная плотность состояний для соизмеримой комбинаторики диаграмм при: (1)— $ka = 0.1$ ; (2)— $ka = 0.01$

соответствует эксперименту.

## 5.2 Рекуррентные уравнения для вершинной части и оптическая проводимость.

Для расчета оптической проводимости требуется вычисление вершинной части, описывающей электромагнитный отклик системы. Эта вершина может быть найдена методом, предложенным для аналогичной одномерной модели в работах [64, 65]. В дальнейшем изложении мы следуем работе [66]. Выше мы уже видели, что любой график для неприводимой вершинной части может быть получен вставкой линии внешнего поля в соответствующий график для собственно энергетической части [51]. Поскольку в нашей модели можно учитывать только диаграммы для собственно – энергетической части без пересечения линий взаимодействия с дополнительными комбинаторными множителями  $v(k)$  в “начальных” вершинах, при вычислении вершинных поправок достаточно рассмотреть только диаграммы типа показанной на Рис. 28. Диаграммы с перекрещивающимися линиями взаимодействия, при этом, также оказываются учтенными. Отсюда сразу же возникает система рекуррентных уравне-

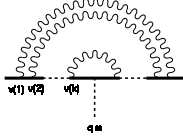


Рис. 28: Общий вид поправки высшего порядка для вершинной части.

ний для вершинных частей, показанная графически на Рис. 29. Чтобы получить соответствующие аналитические выражения рассмотрим простейшую вершинную поправку, показанную на Рис. 30 (а). Проводя вычисления при  $T = 0$  в  $RA$  – канале, легко получаем соответствующий вклад в виде:

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_1^{(1)RA}(\varepsilon_{\mathbf{p}}; \varepsilon + \omega_{\mathbf{p} + \mathbf{q}}) &= \sum_{\mathbf{K}} V_{eff}(\mathbf{K}) G_{00}^A(\varepsilon \xi_{\mathbf{p} - \mathbf{K}}) G_{00}^R(\varepsilon + \omega \xi_{\mathbf{p} - \mathbf{K} + \mathbf{q}}) = \\
&= W^2 \{ G_{00}^A(\varepsilon, \xi_1(\mathbf{p}) + iv_1 \kappa) - G_{00}^R(\varepsilon + \omega, \xi_1(\mathbf{p} + \mathbf{q}) - iv_1 \kappa) \} \frac{1}{\omega + \xi_1(\mathbf{p}) - \xi_1(\mathbf{p} + \mathbf{q})} = \\
&= W^2 G_{00}^A(\varepsilon, \xi_1(\mathbf{p}) + iv_1 \kappa) G_{00}^R(\varepsilon + \omega, \xi_1(\mathbf{p} + \mathbf{q}) - iv_1 \kappa) \left\{ 1 + \frac{2iv_1 \kappa}{\omega + \xi_1(\mathbf{p}) - \xi_1(\mathbf{p} + \mathbf{q})} \right\} \equiv \\
&\equiv W^2 G_{01}^A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) G_{01}^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p} + \mathbf{q}}) \left\{ 1 + \frac{2iv_1 \kappa}{\omega + \xi_1(\mathbf{p}) - \xi_1(\mathbf{p} + \mathbf{q})} \right\} \quad (50)
\end{aligned}$$

где при вычислении интегралов мы воспользовались тождеством, справедливым для свободных функций Грина:

$$G_{00}^A(\varepsilon \xi_{\mathbf{p}}) G_{00}^R(\varepsilon + \omega \xi_{\mathbf{p} + \mathbf{q}}) = \left\{ G_{00}^A(\varepsilon \xi_{\mathbf{p}}) - G_{00}^R(\varepsilon + \omega \xi_{\mathbf{p} + \mathbf{q}}) \right\} \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{p} + \mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{p}}} \quad (51)$$

“Одевая” внутренние электронные линии, переходим к диаграмме Рис. 30 (b) и используя тождество:

$$G^A(\varepsilon \xi_{\mathbf{p}}) G^R(\varepsilon + \omega \xi_{\mathbf{p} + \mathbf{q}}) = \left\{ G^A(\varepsilon \xi_{\mathbf{p}}) - G^R(\varepsilon + \omega \xi_{\mathbf{p} + \mathbf{q}}) \right\} \times$$

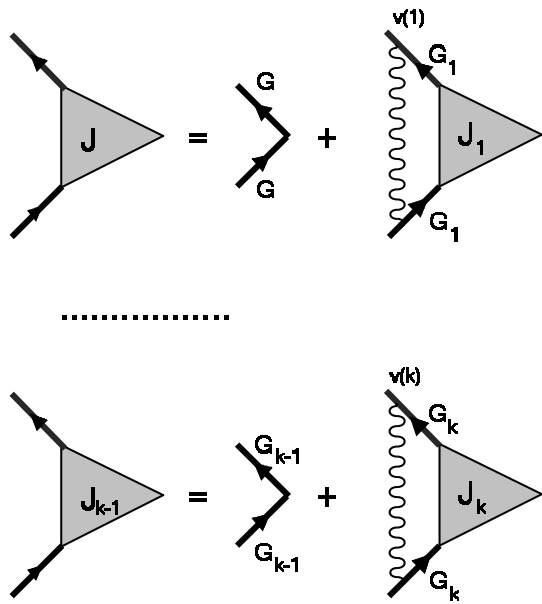


Рис. 29: Рекуррентные уравнения для вершинной части.

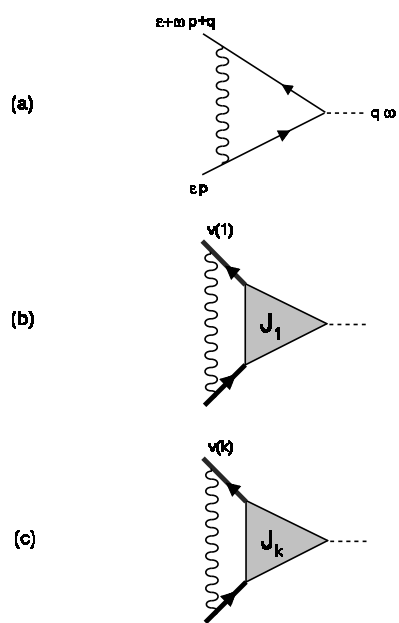


Рис. 30: Простейшие поправки к вершинным частям.

$$\times \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{p}} - \Sigma_1^R(\varepsilon + \omega\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) + \Sigma_1^A(\varepsilon\xi_{\mathbf{p}})} \quad (52)$$

справедливое для полных функций Грина, запишем вклад этой диаграммы в виде:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_1^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega\mathbf{p} + \mathbf{q}) &= W^2 v(1) G_1^A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) G_1^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \left\{ 1 + \right. \\ &\left. + \frac{2iv_1\kappa}{\omega - \xi_1(\mathbf{p} + \mathbf{q}) + \xi_1(\mathbf{p}) - \Sigma_2^R(\varepsilon + \omega\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) + \Sigma_2^A(\varepsilon\xi_{\mathbf{p}})} \right\} J_1^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega\mathbf{p} + \mathbf{q}) \end{aligned} \quad (53)$$

Здесь мы предположили, что линия взаимодействия в диаграмме для вершинной поправки Рис. 30 (b) “преобразует” собственно – энергетические части  $\Sigma_1^{R,A}$  внутренних электронных линий в  $\Sigma_2^{R,A}$ , в соответствии с использованным выше основным приближением для собственно – энергетической части (см. Рис. 23)<sup>13</sup>.

Теперь не представляет труда выписать аналогичное выражение для графика общего вида, показанного на Рис. 30 (c):

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_k^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega\mathbf{p} + \mathbf{q}) &= W^2 v(k) G_k^A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) G_k^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \left\{ 1 + \right. \\ &\left. + \frac{2iv_k\kappa k}{\omega - \xi_k(\mathbf{p} + \mathbf{q}) + \xi_k(\mathbf{p}) - \Sigma_{k+1}^R(\varepsilon + \omega\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) + \Sigma_{k+1}^A(\varepsilon\xi_{\mathbf{p}})} \right\} J_k^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega\mathbf{p} + \mathbf{q}) \end{aligned} \quad (54)$$

Соответственно, фундаментальное рекуррентное соотношение для вершинной части Рис. 23 записывается в виде:

$$\begin{aligned} J_{k-1}^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega\mathbf{p} + \mathbf{q}) &= 1 + W^2 v(k) G_k^A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) G_k^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \left\{ 1 + \right. \\ &\left. + \frac{2iv_k\kappa k}{\omega - \xi_k(\mathbf{p} + \mathbf{q}) + \xi_k(\mathbf{p}) - \Sigma_{k+1}^R(\varepsilon + \omega\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) + \Sigma_{k+1}^A(\varepsilon\xi_{\mathbf{p}})} \right\} J_k^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega\mathbf{p} + \mathbf{q}) \end{aligned} \quad (55)$$

“Физическая” вершина  $J_{k=0}^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega\mathbf{p} + \mathbf{q})$  определяется как  $J_{k=0}^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega\mathbf{p} + \mathbf{q})$ . Рекуррентная процедура (55) учитывает все графики теории возмущений для вершинной части. При  $\kappa \rightarrow 0$  ( $\xi \rightarrow \infty$ ) (55) сводится к ряду, изучавшемуся в работах [51] (см. также [47]), который удается точно просуммировать в аналитическом виде. Стандартному “лестничному”

<sup>13</sup>Мотивировкой в пользу такой записи является то обстоятельство, что в результате обеспечивается выполнение обсуждаемого ниже тождества Уорда [64].

$$\Phi^{RA}(q\varepsilon\omega) = \frac{1}{2\pi i} \sum_{\mathcal{P}} \text{diag}$$

Рис. 31: Диаграммное представление для двухчастичной функции  $\Phi^{RA}(q\omega)$ .

приближению в нашей схеме рассмотрения соответствует случай, когда все комбинаторные множители  $v(k)$  в (55) полагаются равными единице [65].

Проводимость системы выражается [67] через запаздывающую функцию отклика плотность – плотность  $\chi^R(q\omega)$ :

$$\sigma(\omega) = e^2 \lim_{q \rightarrow 0} \left( -\frac{i\omega}{q^2} \right) \chi^R(q\omega) \quad (56)$$

где  $e$  – заряд электрона,

$$\chi^R(q\omega) = \omega \left\{ \Phi^{RA}(0q\omega) - \Phi^{RA}(00\omega) \right\} \quad (57)$$

а двухчастичная функция Грина  $\Phi^{RA}(\varepsilon q\omega)$  определяется петлевым графиком, показанным на Рис. 31.

Прямые численные расчеты подтверждают, что рекуррентная процедура (55) удовлетворяет точному соотношению, следующему (при  $\omega \rightarrow 0$ ) из тождества Уорда [67]:

$$\Phi^{RA}(00\omega) = -\frac{N(E_F)}{\omega} \quad (58)$$



где  $N(E_F)$  – плотность состояний на уровне Ферми  $E_F = \mu$ . Это является основным аргументом в пользу *Ansatz'*а, использованного при выводе (53), (54) и (55).

В итоге, проводимость записывается в следующем, удобном для численных расчетов симметризованном виде:

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2 \omega^2}{\pi} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} \sum_{\mathbf{p}} \left\{ G^R \left( \frac{\omega}{2}, \mathbf{p} + \frac{\mathbf{q}}{2} \right) J^{RA} \left( \frac{\omega}{2}, \mathbf{p} + \frac{\mathbf{q}}{2}; -\frac{\omega}{2}, \mathbf{p} - \frac{\mathbf{q}}{2} \right) G^A \left( -\frac{\omega}{2}, \mathbf{p} - \frac{\mathbf{q}}{2} \right) - G^R \left( \frac{\omega}{2}, \mathbf{p} \right) J^{RA} \left( \frac{\omega}{2}, \mathbf{p}; -\frac{\omega}{2}, \mathbf{p} \right) G^A \left( -\frac{\omega}{2}, \mathbf{p} \right) \right\} \quad (59)$$

где учли еще дополнительный фактор 2, связанный с суммированием по спине.

Численные расчеты [66] проводились, для различных параметров исходного спектра (10), непосредственно по формулам (59), (55), (42), причем рекуррентная процедура обрывалась на достаточно высоком “этаже”  $k$ , где все  $\Sigma_k$  и  $J_k$  полагались равными нулю. Интегрирование в (59) осуществлялось по всей двумерной зоне Бриллюэна. Импульсы интегрирования естественным образом обезразмериваются постоянной решетки  $a$ , а все энергии далее приводятся в единицах интеграла переноса  $t$ . Проводимость при этом измеряется в единицах универсальной проводимости двумерной системы  $\sigma_0 = \frac{e^2}{h} = 2.5 \cdot 10^{-4} \text{ ом}^{-1}$ , а плотность состояний — в единицах  $1/ta^2$ . В дальнейшем, для определенности, принимаем значение  $W = t$ .

Рассмотрим сначала случай поверхностей Ферми вблизи половинного заполнения зоны  $\mu = 0$  и  $t' = 0$ , которые показаны (для первого квадранта зоны Бриллюэна) на Рис. 32 (а). Для  $\mu = 0$  и  $t' = 0$  поверхность Ферми представляет собой, как хорошо известно, квадрат (полный “нестинг”), так что ситуация, в известном смысле, эквивалентна одномерному случаю, рассматривавшемуся в [51, 64, 65]. Результаты расчетов для действительной части оптической проводимости в рассматриваемой здесь двумерной модели, для случая спин – фермионной комбинаторики диаграмм и различных значений корреляционной длины ближнего АФМ порядка (параметра  $\kappa = \xi^{-1}$ , где  $\xi$  измеряется в единицах постоянной решетки  $a$ ) приведены на Рис. 33. Качественный вид проводимости вполне аналогичен найденному для одномерной модели (для случая несоизмеримых флуктуаций CDW – типа) в работах [64, 65]. Он характеризуется наличием ярко выраженного пика поглощения через псевдощель (соответствующие кривые для плотности состояний, демонстрирующие наличие псевдощели вблизи уровня Ферми, показаны на вставке на Рис. 33) при

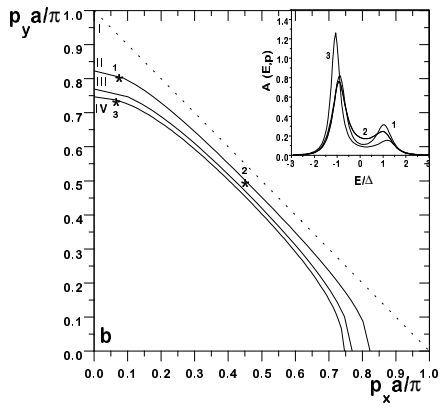
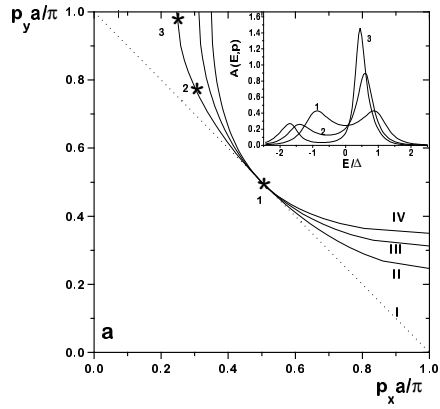


Рис. 32: Поверхности Ферми для различных значений параметра  $t'$  и химического потенциала  $\mu$ . (a) соответствует  $\mu = 0$  и значениям  $t'/t$ : 0 – I; -0.2 – II; -0.4 – III; -0.6 – IV. (b) соответствует  $t' = 0$  и значениям  $\mu/t$ : 0 – I; -0.3 – II; -0.5 – III; -0.6 – IV. На вставках изображены энергетические зависимости спектральной плотности для спин – фермионной модели при  $\kappa a = 0.1$  в точках импульсного пространства, отмеченных звездочками.

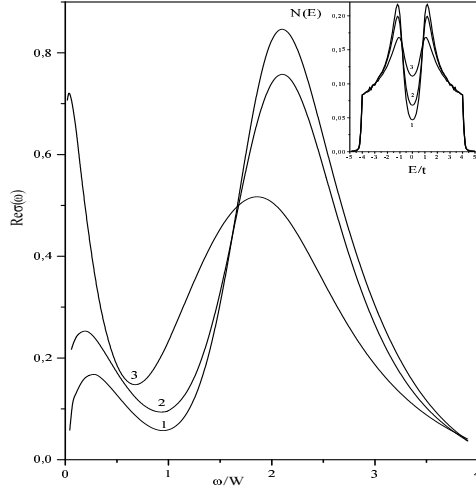


Рис. 33: Действительная часть оптической проводимости в спин – фермионной модели для случая квадратной поверхности Ферми ( $\mu = 0$ ,  $t' = 0$ ) при различных значениях обратной корреляционной длины ближнего порядка  $ka$ : 0.1 – 1; 0.2 – 2; 0.5 – 3. На вставке показаны соответствующие плотности состояний.

$\omega \sim 2W$  и наличием максимума в области малых частот, связанного с локализацией носителей в статическом (в нашем приближении) случайном поле AFM флуктуаций. Локализационная природа этого максимума подтверждается его превращением в характерный “друдевский” пик (с максимумом при  $\omega = 0$ ) при расчетах в “лестничном” приближении, когда комбинаторные множители  $v(k) = 1$ , что соответствует “выключению” вклада перекрестных графиков, непосредственно приводящих к двумерной андерсоновской локализации [67, 68]. Качественный вид проводимости в этом случае также вполне аналогичен найденному в [65]. Сужение локализационного пика при уменьшении корреляционной длины флуктуаций объясняется, как это отмечалось в [65], уменьшением эффективного взаимодействия (15) при уменьшении  $\xi$  (при фиксированной величине  $W$ ), что приводит к общему уменьшению рассеяния, в том числе и на “холодной” части поверхности Ферми. Отметим, что найденное здесь поведение плотности состояний и оптической проводимости находится в полном качественном соответствии с результатами, полученными для аналогичной двумерной модели пайерлсовского перехода квантовым методом Монте – Карло в работе [69].

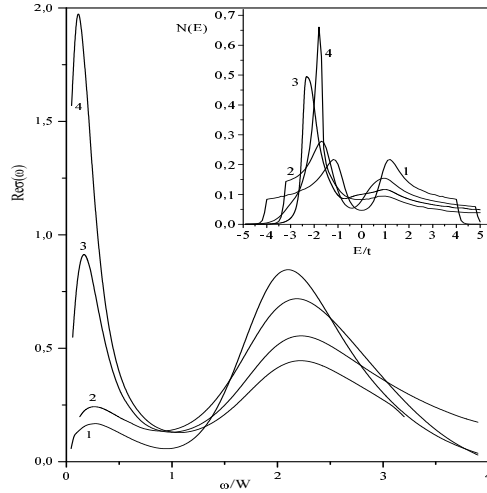


Рис. 34: Действительная часть оптической проводимости в спин – фермионной модели при  $\mu = 0$  и  $\kappa a = 0.1$  для различных поверхностей Ферми, получающихся из квадратной при “включении” интеграла переноса  $t'/t$ : 0 – 1; -0.2 – 2; -0.4 – 3; -0.6 – 4. На вставке показаны соответствующие плотности состояний.

Если теперь, сохраняя значение  $\mu = 0$ , “включить” интеграл переноса  $t'$  между вторыми ближайшими соседями в (10), мы перейдем к отличным от квадрата поверхностям Ферми, показанным на Рис. 32 (а). На вставке на этом рисунке показано поведение спектральной плотности (48) в нескольких характерных точках на этих поверхностях Ферми. Видно, что она имеет характерное “нефермижидкостное” поведение, типа изучавшегося в работах [47, 48], практически везде на поверхности Ферми, пока эта поверхность не очень сильно отличается от квадрата, несмотря на то, что “горячая точка” в рассматриваемой ситуации лежит строго на пересечении поверхности Ферми с диагональю зоны Бриллюэна. Соответствующие кривые для действительной части оптической проводимости показаны на Рис. 34. На вставке на этом рисунке приведен вид соответствующих плотностей состояний. Видно, что по мере отхода от ситуации полного “нестинга”, пик поглощения через псевдощель уменьшается, а локализационный пик (в соответствии с общим правилом сумм для проводимости) растет. Заметим, однако, что пик поглощения через псевдощель остается достаточно заметным, даже когда псевдощель в плотности состояний практически не заметна (кривые 4 на Рис. 34).

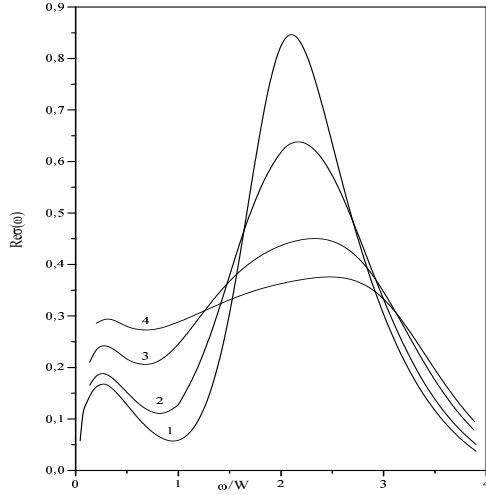


Рис. 35: Действительная часть оптической проводимости в спин – фермионной модели при  $t' = 0$  и  $\kappa a = 0.1$  для различных поверхностей Ферми, получающихся из квадратной при отходе от половинного заполнения зоны. Химический потенциал соответствует следующим значениям  $\mu/t$ : 0 – 1; -0.3 – 2; -0.5 – 3; -0.6 – 4.

Вернемся к случаю  $t' = 0$ , но будем менять величину  $\mu$ , переходя к поверхностям Ферми достаточно близким к квадрату, показанным на Рис. 32 (b). Строго говоря, “горячие точки” на этих поверхностях Ферми вообще отсутствуют, однако спектральная плотность, показанная на вставке на Рис. 32 (b), сохраняет характерный псевдощелевой вид. Соответствующие зависимости для действительной части оптической проводимости показаны на Рис. 35.

Перейдем теперь к рассмотрению геометрии поверхности Ферми с “горячими точками”, наблюдающейся в большинстве ВТСП – оксидов типа показанной на Рис. 14. Но сначала, на Рис. 36 покажем действительную часть оптической проводимости, рассчитанную (при различных комбинациях диаграмм) при характерном значении  $t' = -0.4t$ , для химпотенциала  $\mu = 0$ , когда “горячие точки” находятся на диагонали зоны Бриллюэна. Видно, что псевдощелевое поведение проводимости сохраняется и при практическом отсутствии псевдощели плотности состояний (показанной на вставке на Рис. 36). Пунктирной кривой на Рис. 36 показаны результаты “лестничного” приближения, демонстрирующие исчезновение двумерной локализации. При уменьшении корреляционной

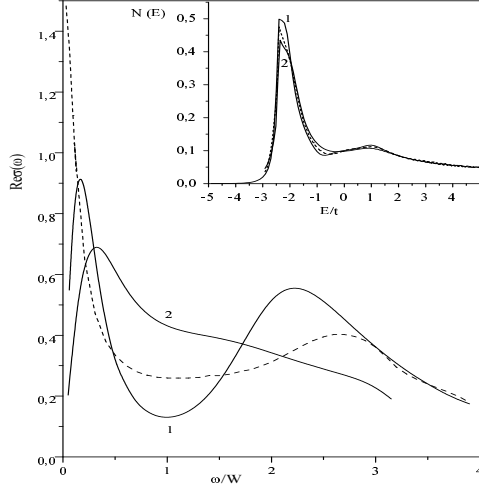


Рис. 36: Действительная часть оптической проводимости при  $t'/t = -0.4$  для случая  $\mu = 0$  при  $\kappa a = 0.1$  для различных комбинаторик диаграмм: 1 – комбинаторика спин – фермионной модели; 2 – соизмеримый случай. Пунктир - лестничная комбинаторика. На вставке приведены соответствующие плотности состояний.

длины ближнего порядка, в общем случае, происходит “замытие” псевдощелевого максимума проводимости.

Для большинства высокотемпературных сверхпроводников на основе оксидов меди характерна геометрия поверхности Ферми, описываемая случаем  $t' = -0.4t$  и  $\mu = -1.3t$  [47]. Результаты расчетов оптической проводимости для этого случая при различных значениях обратной корреляционной длины  $\kappa$  приведены на Рис. 37 (для случая спин – фермионной комбинаторики диаграмм). При этом мы ввели дополнительное слабое рассеяние за счет неупругих процессов путем стандартной замены  $\omega \rightarrow \omega + i\gamma$  [70], которое приводит к появлению узкого “друдевского” пика в области частот  $\omega < \gamma$  (разрушение двумерной локализации за счет процессов сбоя фазы). Нетрудно убедиться, что с ростом частоты неупругого рассеяния  $\gamma$ , локализационный максимум “замывается” и переходит в “обычный” друдевский пик в области малых частот. Максимум поглощения через псевдощель становится более заметным с ростом корреляционной длины  $\xi$  (уменьшением параметра  $\kappa$ ). Аналогичные результаты в модели “горячих участков” были получены в работе [71]

Прямое сходство этих результатов с экспериментальными данными,

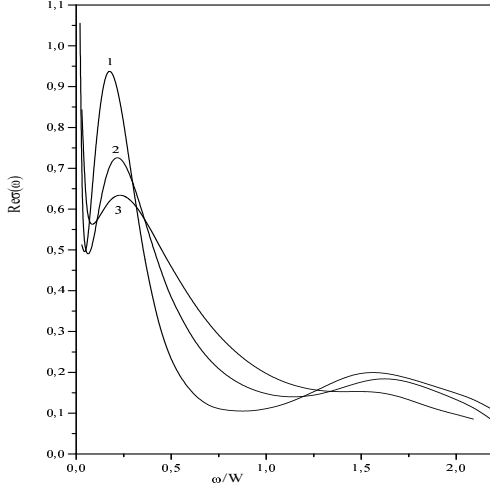


Рис. 37: Действительная часть оптической проводимости в спин – фермионной модели при  $t'/t = -0,4$  и  $\mu/t = -1.3$  для различных значений корреляционной длины  $ka$ : 0.05 – 1; 0.1 – 2; 0.2 – 3. Фактор затухания  $\gamma/t = 0.005$ .

показанными на Рис. 4 [28] очевидно. Простейшие оценки подтверждают и совпадение характерных величин проводимости в теории и эксперименте по порядку величины. В принципе, не представляет труда провести и полную количественную подгонку, подбирая соответствующим образом параметры нашей модели.

### 5.3 Вершина взаимодействия со сверхпроводящими флуктуациями.

Перейдем теперь к рассмотрению сверхпроводимости, формирующейся “на фоне” псевдощелевых флуктуаций. Для учета псевдощелевых флуктуаций при рассмотрении куперовской неустойчивости и выводе разложения Гинзбурга – Ландау в системе с псевдощелью необходимо найти вершинную часть, описывающую взаимодействие электрона с произвольной флуктуацией сверхпроводящего параметра порядка (щели) соответствующей симметрии [72]:

$$\Delta(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \Delta_{\mathbf{q}} \epsilon(\mathbf{p}) \quad (60)$$

где симметричный множитель, определяющий тип (симметрию) спаривания берется в виде:

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \begin{cases} 1 & (s - \text{спаривание}) \\ \cos p_x a - \cos p_y a & (d_{x^2-y^2} - \text{спаривание}) \end{cases}. \quad (61)$$

и спаривание подразумевается синглетным по спину.

Приведем сразу возникающие при соответствующем анализе [72, 73] рекуррентные уравнения для “треугольных” вершин в куперовском канале, аналогичные выведенным выше, в связи с рассмотрением отклика на внешнее электромагнитное поле [66]. Интересующую нас вершину удобно записать как:

$$\Gamma(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{p}, -\mathbf{p} + \mathbf{q}) \equiv \Gamma_{\mathbf{p}}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q})\epsilon(\mathbf{p}) \quad (62)$$

Тогда  $\Gamma_{\mathbf{p}}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q})$  определяется рекуррентной процедурой следующего вида:

$$\Gamma_{\mathbf{p}k-1}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) = 1 \pm W^2 r(k) G_k(\varepsilon_n, \mathbf{p} + \mathbf{q}) G_k(-\varepsilon_n, \mathbf{p}) \left\{ 1 + \frac{2ik\kappa v_k}{G_k^{-1}(\varepsilon_n, \mathbf{p} + \mathbf{q}) - G_k^{-1}(-\varepsilon_n, \mathbf{p}) - 2ik\kappa v_k} \right\} \Gamma_{\mathbf{p}k}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) \quad (63)$$

которая представлена графиками на Рис. 38. “Физическая” вершина соответствует  $\Gamma_{\mathbf{p}k=0}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q})$ . Дополнительный комбинаторный множитель  $r(k) = v(k)$  для простейшего случая зарядовых (или изинговских спиновых) псевдощелевых флуктуаций рассматривавшихся в [72]. Для наиболее интересного случая гейзенберговских спиновых (SDW) флуктуаций, которые рассматриваются ниже, этот множитель равен [47, 73]:

$$r(k) = \begin{cases} k & \text{при четных } k \\ \frac{k+2}{9} & \text{при нечетных } k \end{cases} \quad (64)$$

Выбор знака перед  $W^2$  в правой части (63) зависит от симметрии сверхпроводящего параметра порядка и типа псевдощелевых флуктуаций [72, 73]. Соответствующие варианты перечислены в Таблице I.

Таблица I. Выбор знака в рекуррентной процедуре для вершины.

Пары	CDW	SDW (Изинг)	SDW (Гейзенберг)
$s$	+	−	+
$d$	−	+	−



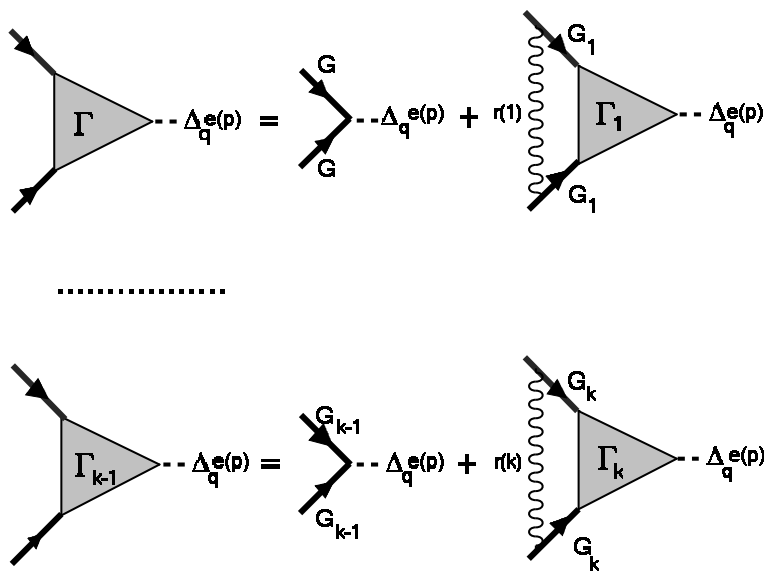


Рис. 38: Рекуррентные уравнения для “треугольной” вершины в куперовском канале.

В частности из этой таблицы видно, что в наиболее интересном для нас случае  $d$  – спаривания и гейзенберговских псевдощелевых флуктуаций следует взять знак “–”, так что рекуррентная процедура для вершинной части становится знакопеременной. В тоже время, для случая  $s$  – спаривания и флуктуаций того же типа следует взять знак “+” и рекуррентная процедура становится знакопостоянной. В работе [72] было показано, что такое различие в типах рекуррентной процедуры приводит к двум вариантам качественно отличного поведения всех основных характеристик сверхпроводников.

## 5.4 Влияние примесей.

Влияние рассеяния на нормальных (немагнитных) примесях легко учесть в самосогласованном борновском приближении, записав для одноэлектронной функции Грина “уравнение Дайсона”, показанное графически на Рис. 39 (а), где, по сравнению с Рис. 38, добавлен стандартный вклад в собственно – энергетическую часть от примесного рассеяния.

В результате, рекуррентное уравнение для функции Грина записывается в виде:

$$G_k(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{1}{G_{0k}^{-1}(\varepsilon_n \mathbf{p}) - \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} G(\varepsilon_n \mathbf{p}) - W^2 v(k+1) G_{k+1}(\varepsilon_n \mathbf{p})} \quad (65)$$

где  $\rho$  – концентрация примесей с точечным потенциалом  $U$ , а в “примесную” собственно – энергетическую часть входит полная функция Грина  $G(\varepsilon_n \mathbf{p}) = G_{k=0}(\varepsilon_n \mathbf{p})$ , которая, в общем случае, должна определяться самосогласованным образом с помощью выписанной процедуры. Вклад в эту собственно – энергетическую часть от действительной части функции Грина обычным образом сводится к несущественной перенормировке химического потенциала, так что (65) сводится к:

$$G_k(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{1}{i(\varepsilon_n - \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} \text{Im} G(\varepsilon_n \mathbf{p}) + kv_k \kappa) - \xi_k(\mathbf{p}) - W^2 v(k+1) G_{k+1}(\varepsilon_n \mathbf{p})} \quad (66)$$

Поэтому, по сравнению с беспримесным случаем, фактически, происходит замена (перенормировка):

$$\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon_n - \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} \text{Im} G(\varepsilon_n \mathbf{p}) \equiv \varepsilon_n \eta_\varepsilon \quad (67)$$

$$\eta_\varepsilon = 1 - \frac{\rho U^2}{\varepsilon_n} \sum_{\mathbf{p}} \text{Im} G(\varepsilon_n \mathbf{p}) \quad (68)$$

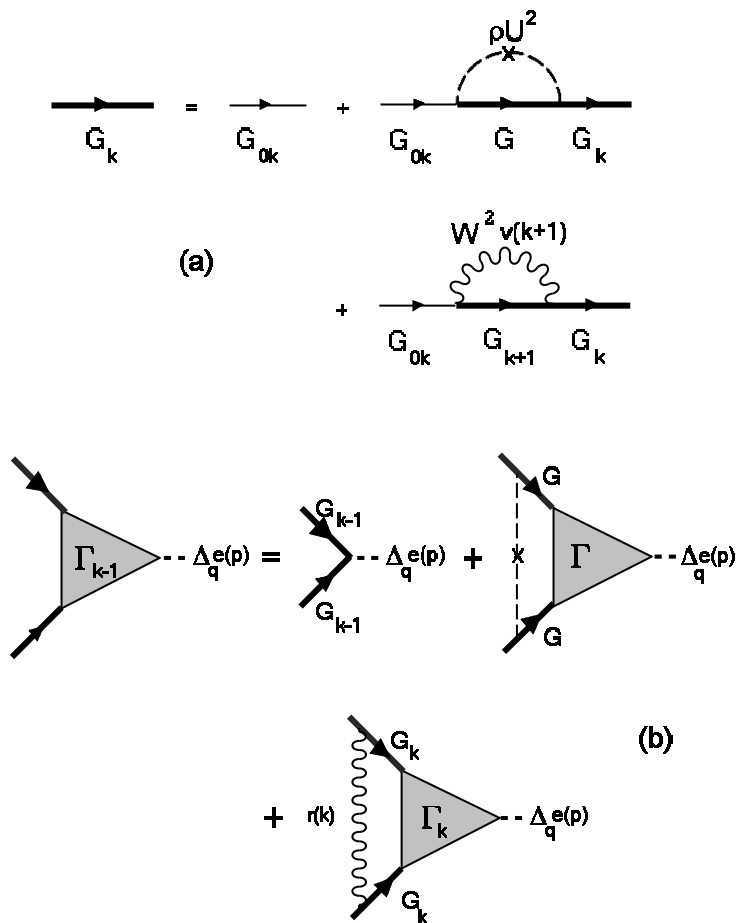


Рис. 39: Рекуррентные уравнения для функции Грина (а) и “треугольной” вершины (б) с учетом рассеяния на примесях.

Если не проводить полного самосогласования в собственно – энергетической части примесного рассеяния, то, в простейшем приближении, имеем просто:

$$\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon_n - \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} \text{Im} G_{00}(\varepsilon_n \mathbf{p}) \equiv \varepsilon_n \eta_\varepsilon = \varepsilon_n + \gamma_0 \text{sign} \varepsilon_n \quad (69)$$

$$\eta_\varepsilon = 1 + \frac{\gamma_0}{|\varepsilon_n|} \quad (70)$$

где  $\gamma_0 = \pi \rho U^2 N_0(0)$  – стандартная борновская частота рассеяния на примесях ( $N_0(0)$  – плотность состояний свободных электронов на уровне Ферми).

Для интересующих нас “треугольных” вершин рекуррентное уравнение, учитывающее рассеяние на примесях, имеет графический вид, показанный на Рис. 39 (b). Для вершины, описывающей взаимодействие с флуктуацией сверхпроводящего параметра порядка (60) с симметрией  $d$  – типа (61) это уравнение существенно упрощается, поскольку вклад второй диаграммы в правой части Рис. 39 (b), фактически равен нулю в силу условия  $\sum_{\mathbf{p}} e(\mathbf{p}) = 0$  (ср. обсуждение аналогичной ситуации в [50]). Тогда рекуррентное уравнение для вершины имеет вид (63), где в качестве  $G_k(\pm \varepsilon_n \mathbf{p})$  следует использовать выражения, определяемые из (65), (66), т.е. просто “одетые” примесным рассеянием функции Грина, определяемые Рис. 39 (a). Для вершины, описывающей взаимодействие с флуктуацией параметра порядка с  $s$  – симметрией, имеем уравнение:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\mathbf{p}k-1}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) = & 1 + \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} G(\varepsilon_n, \mathbf{p} + \mathbf{q}) G(-\varepsilon_n, \mathbf{p}) \Gamma_{\mathbf{p}}(\varepsilon, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) \pm \\ & \pm W^2 r(k) G_k(\varepsilon_n, \mathbf{p} + \mathbf{q}) G_k(-\varepsilon_n, \mathbf{p}) \left\{ 1 + \right. \\ & \left. + \frac{2ikkv_k}{G_k^{-1}(\varepsilon_n, \mathbf{p} + \mathbf{q}) - G_k^{-1}(-\varepsilon_n, \mathbf{p}) - 2ikkv_k} \right\} \Gamma_{\mathbf{p}k}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) \end{aligned} \quad (71)$$

где для  $G_k(\pm \varepsilon_n \mathbf{p})$  снова следует использовать выражения (65), (66), а знак перед  $W^2$  определяется в соответствии с изложенными выше правилами. Отличие от случая вершины взаимодействия с флуктуациями  $d$  – симметрии состоит в появлении второго члена в правой части (71), т.е. в замене:

$$1 \rightarrow \eta_\Gamma = 1 + \rho U^2 \sum_{\mathbf{p}} G(\varepsilon_n, \mathbf{p} + \mathbf{q}) G(-\varepsilon_n, \mathbf{p}) \Gamma_{\mathbf{p}}(\varepsilon, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) \quad (72)$$

Поэтому процедура самосогласованного счета выглядит теперь следующим образом. Стартуем с “нулевого” приближения  $G = G_{00}$ ,  $\Gamma_{\mathbf{p}} = 1$ , тогда

в уравнениях (66), (71) имеем просто  $\eta_\varepsilon = \eta_\Gamma = 1 - \rho U^2 / \varepsilon_n \sum_{\mathbf{p}} \text{Im} G_{00}(\varepsilon_n \mathbf{p})$ . “Прогоняем” соответствующие рекуррентные процедуры (начиная с некоторого достаточно большого значения  $k$ ) и определяем новые значения  $G = G_{k=0}$  и  $\Gamma_{\mathbf{p}} = \Gamma_{k=0}$ . Снова вычисляем  $\eta_\varepsilon$  и  $\eta_\Gamma$  с помощью (68) и (72), используем эти значения в (66), (71) и т. д., до достижения сходимости.

При рассмотрении вершины  $d$  – симметрии следует просто считать  $\eta_\Gamma = 1$  на всех этапах расчета. Фактически, в этом случае нет особой нужды проводить полное самосогласование по примесному рассеянию, т.к. оно приводит к сравнительно незначительным поправкам к результатам несамосогласованного расчета с использованием простейшей замены (69) [75].

В качестве иллюстрации на Рис. 40 приведено сравнение ARPES данных работы [36] для импульсной зависимости величины  $a = \text{Im}\Sigma(E = 0, \mathbf{p})$ , взятых с Рис. 10 (с), с результатом несамосогласованного расчета по приведенным выше формулам (66), (69), (70). Приняты типичные значения параметров задачи типичные для ВТСП, указанные на рисунке, в спектре (10) взято  $t = 0.25eV$ ,  $t' = -0.4t$ , а химпотенциал вычислен для двух предельных степеней легирования. Видим, что по порядку величины характерная величина анизотропии в импульсном пространстве воспроизводится верно, но общая форма зависимости лишь качественно напоминает экспериментальные данные, являясь промежуточной между двумя расчетными кривыми. Примерно такие же результаты получаются и для спин – фермионной комбинаторики. В принципе, не очень хорошее согласие расчетов с экспериментом не является удивительным. Модель, как мы видели, является весьма упрощенной, да и точность эксперимента оставляет желать лучшего. Кроме того нам практически не известны параметры модели, подходящие для изучавшейся системы.

## 5.5 Расчет температуры сверхпроводящего перехода и коэффициентов Гинзбурга – Ландау.

Критическая температура сверхпроводящего перехода определяется уравнением куперовской неустойчивости нормальной фазы:

$$1 - V\chi(0; T) = 0 \quad (73)$$

где обобщенная куперовская восприимчивость определяется графиком Рис. 41 и равна:

$$\chi(\mathbf{q}; T) = -T \sum_{\varepsilon_n} \sum_{\mathbf{p}} G(\varepsilon_n \mathbf{p} + \mathbf{q}) G(-\varepsilon_n, -\mathbf{p}) \varepsilon^2(\mathbf{p}) \Gamma_{\mathbf{p}}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, \mathbf{q}) \quad (74)$$

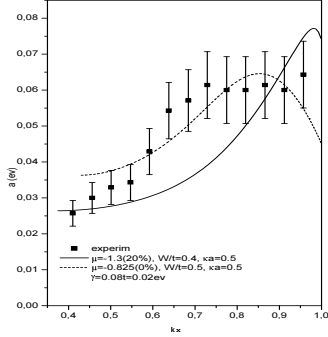


Рис. 40: Сравнение ARPES данных для статического вклада в мнимую часть собственной энергии электрона  $a = \text{Im}\Sigma(E = 0, \mathbf{p})$  с результатами расчетов в модели “горячих точек” с учетом рассеяния на примесях для характерного набора параметров модели, указанных на рисунке. Приведены результаты расчетов для случая соизмеримой комбинаторики и двух значений степени легирования 0% и 20%. Импульс  $k_x$  дан в единицах  $\frac{\pi}{a}$ , так что его изменение от 0 до 1 соответствует переходу вдоль поверхности Ферми от диагонали зоны Бриллюэна к окрестности точки типа  $(0, \pi)$ .

Константа спаривательного взаимодействия  $V$ , отличная от нуля в слое шириной  $2\omega_c$  вокруг уровня Ферми, определяет “затравочную” температуру перехода  $T_{c0}$  в отсутствие псевдощелевых флуктуаций с помощью стандартного уравнения БКШ<sup>14</sup>:

$$1 = \frac{2VT}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\bar{m}} \int_0^{\pi/a} dp_x \int_0^{\pi/a} dp_y \frac{e^2(\mathbf{p})}{\xi_{\mathbf{p}}^2 + \varepsilon_n^2} \quad (75)$$

где  $\bar{m} = \lfloor \frac{\omega_c}{2\pi T_{c0}} \rfloor$  – безразмерный параметр обрезания суммы по мацубаровским частотам. Все расчеты [72, 73] проводились для типичного спектра квазичастиц в ВТСП (10) при различных соотношениях  $t, t'$  и  $\mu$ . Выбирая, достаточно произвольно,  $\omega_c = 0.4t$  и  $T_{c0} = 0.01t$  можно легко подобрать значения параметра спаривания  $V$  в (75), дающее такое значение  $T_{c0}$  для различных типов спаривания. В частности, при  $t'/t = -0.4$ ,  $\mu/t = -1.3$  для спаривания s-типа получаем  $\frac{V}{ta^2} = 1$ , а для  $d_{x^2-y^2}$  – спаривания имеем  $\frac{V}{ta^2} = 0.55$ .

<sup>14</sup>Мы не обсуждаем микроскопическую природу этого взаимодействия – она может быть связана с обменом теми же антиферромагнитными спиновыми флуктуациями, фононами, или с комбинацией электрон – фононного и спин – флуктуационного взаимодействий.

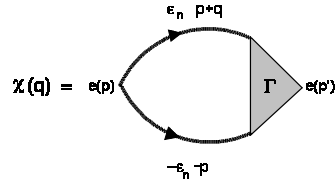


Рис. 41: Диаграммное представление для обобщенной восприимчивости  $\chi(\mathbf{q})$  в куперовском канале.

То обстоятельство, что для расчета  $T_c$  требуется куперовская восприимчивость при  $q = 0$  существенно упрощает расчеты [72]. В общем случае, например, для расчета коэффициентов разложения Гинзбурга – Ландау требуется знание  $\chi(q; T)$  при произвольных (малых)  $q$ .

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

$$F_s - F_n = A|\Delta_{\mathbf{q}}|^2 + q^2 C |\Delta_{\mathbf{q}}|^2 + \frac{B}{2} |\Delta_{\mathbf{q}}|^4 \quad (76)$$

и определяется петлевым разложением для свободной энергии электрона в поле флуктуаций параметра порядка (60), показанным на Рис. 42.

Коэффициенты Гинзбурга – Ландау  $A, B, C$  удобно нормировать на их значения в отсутствие псевдощелевых флуктуаций, записав их в виде [72]:

$$A = A_0 K_A; \quad C = C_0 K_C; \quad B = B_0 K_B, \quad (77)$$

$$A_0 = N_0(0) \frac{T - T_c}{T_c} \langle \epsilon^2(\mathbf{p}) \rangle; \quad C_0 = N_0(0) \frac{7\zeta(3)}{32\pi^2 T_c^2} \langle |\mathbf{v}(\mathbf{p})|^2 \epsilon^2(\mathbf{p}) \rangle;$$

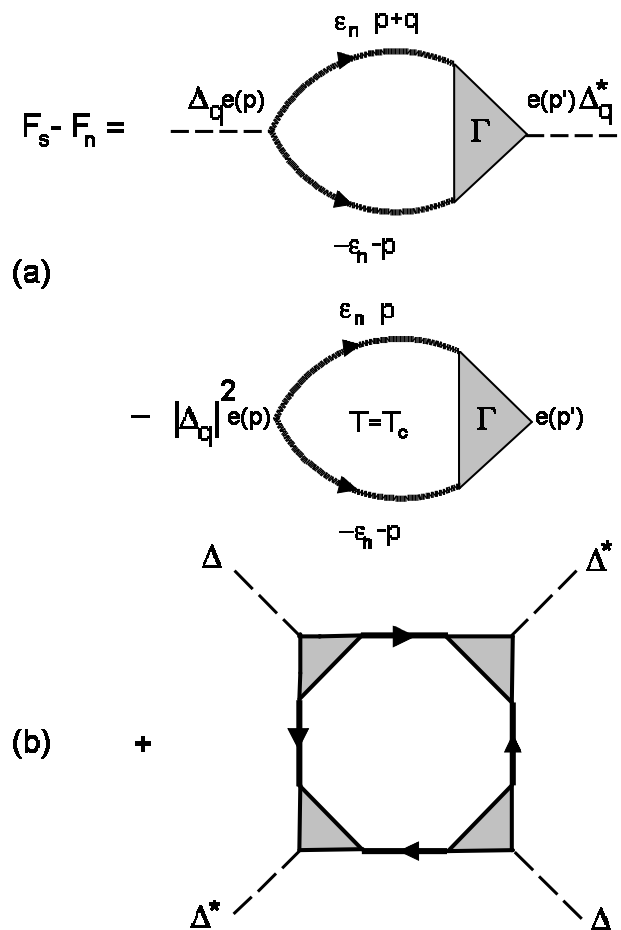


Рис. 42: Графический вид разложения Гинзбурга – Ландау.



$$B_0 = N_0(0) \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T_c^2} \langle e^4(\mathbf{p}) \rangle, \quad (78)$$

а угловые скобки обозначают обычное усреднение по поверхности Ферми:  $\langle \dots \rangle = \frac{1}{N_0(0)} \sum_p \delta(\xi_{\mathbf{p}}) \dots$ ,  $N_0(0)$  – плотность состояний на поверхности Ферми для свободных электронов.

Тогда имеем следующие общие выражения [72]:

$$K_A = \frac{\chi(0; T) - \chi(0; T_c)}{A_0} \quad (79)$$

$$K_C = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\chi(\mathbf{q}; T_c) - \chi(0; T_c)}{q^2 C_0} \quad (80)$$

$$K_B = \frac{T_c}{B_0} \sum_{\varepsilon_n} \sum_{\mathbf{p}} e^4(\mathbf{p}) (G(\varepsilon_n \mathbf{p}) G(-\varepsilon_n, -\mathbf{p}))^2 (\Gamma_{\mathbf{p}}(\varepsilon_n, -\varepsilon_n, 0))^4 \quad (81)$$

которые и использовались для прямых численных расчетов.

При наличии примесей все функции Грина и вершины, входящие в эти выражения, следует вычислять согласно выписанным выше уравнениям (66) и (71).

Знание коэффициентов разложения Гинзбурга – Ландау позволяет определить все основные характеристики сверхпроводника вблизи температуры перехода  $T_c$ . Длина когерентности определяется как:

$$\frac{\xi^2(T)}{\xi_{BCS}^2(T)} = \frac{K_C}{K_A}, \quad (82)$$

где  $\xi_{BCS}(T)$  – значение этой длины в отсутствие псевдощели.

Глубина проникновения магнитного поля:

$$\frac{\lambda(T)}{\lambda_{BCS}(T)} = \left( \frac{K_B}{K_A K_C} \right)^{1/2}, \quad (83)$$

где также проведена нормировка на значение  $\lambda_{BCS}(T)$  в отсутствие псевдощелевых флуктуаций.

Аналогичным образом нормированный наклон кривой верхнего критического поля вблизи  $T_c$ :

$$\frac{\left| \frac{dH_{c2}}{dT} \right|_{T_c}}{\left| \frac{dH_{c2}}{dT} \right|_{T_{c0}}} = \frac{T_c}{T_{c0}} \frac{K_A}{K_C}. \quad (84)$$

Относительный скачок теплоемкости в точке перехода:

$$\Delta C = \frac{(C_s - C_n)_{T_c}}{(C_s - C_n)_{T_{c0}}} = \frac{T_c}{T_{c0}} \frac{K_A^2}{K_B}. \quad (85)$$

Результаты расчетов для случая зарядовых (CDW) и спиновых (SDW) изинговских флуктуаций ближнего порядка были приведены в работе [72]. Здесь мы сосредоточимся на рассмотрении наиболее важного и интересного случая гейзенберговских спиновых (SDW) флуктуаций и на обсуждении роли примесного рассеяния (разупорядочения) [73, 74]. Ввиду особой важности случая  $d$  – спаривания для физики высокотемпературных сверхпроводников на основе оксидов меди, этому случаю уделяется несколько большее внимание.

Далее приводятся результаты расчетов для типичных значений параметров спектра  $t'/t = -0.4$ ,  $\mu/t = -1.3$ , а для обратной корреляционной длины принимается  $ka = 0.2$ . С целью экономии места мы не приводим результаты расчетов для безразмерных коэффициентов разложения Гинзбурга – Ландау  $K_A$ ,  $K_B$ ,  $K_C$ , а сразу показываем характерные зависимости для основных физических характеристик.

При рассмотрении зависимостей от ширины псевдощели, все характеристики приводятся нормированными на их значение при  $T = T_{c0}$ , а при рассмотрении зависимостей от частоты примесного рассеяния  $\gamma_0$  — нормированными на их значение при  $T = T_{c0}(W)$ , т.е. при “затравочном” значении температуры перехода при заданном значении  $W$ , но в отсутствие примесного рассеяния ( $\gamma_0 = 0$ ).

### 5.5.1 $d$ – спаривание.

На Рис. 43 показана зависимость температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$  от эффективной ширины псевдощели  $W$  для нескольких значений частоты примесного рассеяния. Видно, что псевдощелевые флуктуации приводят к заметному подавлению сверхпроводимости, причем в присутствии конечного беспорядка возникает “критическое” значение  $W$ , при котором величина  $T_c$  обращается в нуль. Такое подавление  $T_c$  естественно связано с частичной “диэлектризацией” электронного спектра в окрестности “горячих точек” [47, 48].

Аналогичные зависимости для наклона температурной зависимости верхнего критического поля и скачка теплоемкости в точке перехода — на Рис. 44. Характерно быстрое подавление этих характеристик сверхпроводника псевдощелевыми флуктуациями.

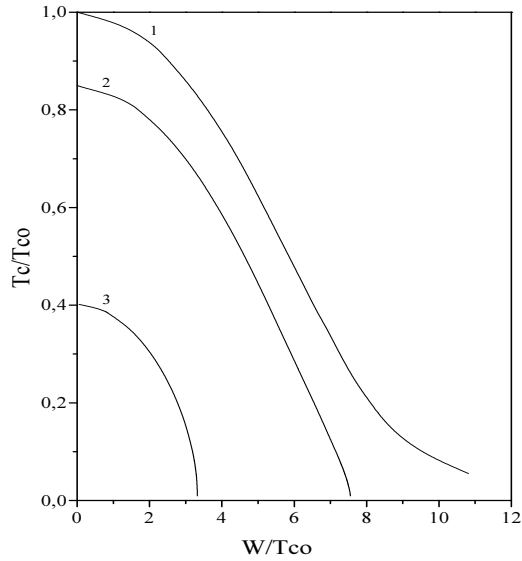


Рис. 43: Зависимость  $T_c$  от эффективной ширины псевдощели  $W$  в случае  $d$  – спаривания для нескольких значений частоты примесного рассеяния  $\gamma_0/T_{c0}$ : 0 – 1; 0.18 – 2; 0.64 – 3. Обратная корреляционная длина  $\kappa a=0.2$

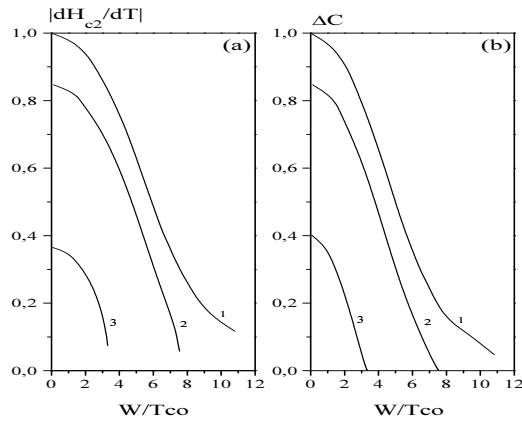


Рис. 44: Зависимость величины наклона температурной зависимости верхнего критического поля и скачка теплоемкости в точке перехода от эффективной ширины псевдощели  $W$  в случае  $d$  – спаривания для нескольких значений частоты примесного рассеяния  $\gamma_0/T_{c0}$ : 0 – 1; 0.18 – 2; 0.64 – 3.

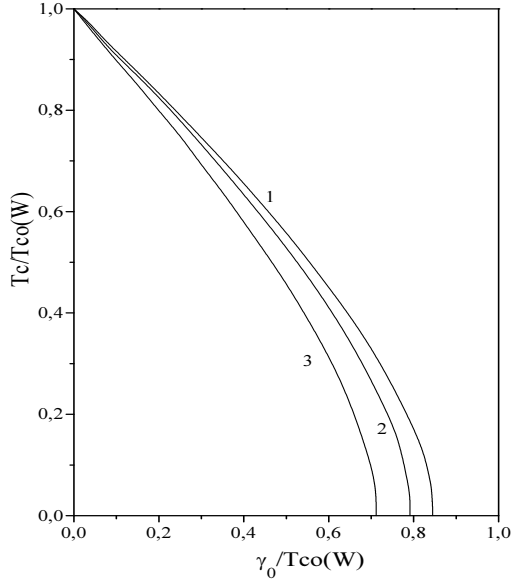


Рис. 45: Зависимость  $T_c$  от частоты рассеяния на примесях (беспорядка)  $\gamma_0$  в случае  $d$  – спаривания для нескольких значений эффективной ширины псевдощели:  $W/T_{c0}$ : 0 – 1; 2.8 – 2; 5.5 – 3.

Зависимость от величины корреляционной длины флуктуаций ближнего порядка более медленная – во всех случаях рост  $\xi$  (уменьшение параметра  $\kappa$ ) усиливает эффект псевдощелевых флуктуаций. Соответствующие результаты мы опускаем из соображений экономии места.

На Рис. 45 показаны зависимости температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$  от частоты рассеяния на примесях  $\gamma_0$  для нескольких значений эффективной ширины псевдощели. Видим, что при наличии псевдощелевых флуктуаций подавление  $T_c$  с ростом беспорядка происходит заметно быстрее, чем это происходит в их отсутствие ( $W = 0$ ), когда зависимость  $T_c$  от  $\gamma_0$  в случае  $d$  – спаривания описывается стандартной кривой Абрикосова – Горькова (полученной впервые для случая  $s$  – спаривания и рассеяния на магнитных примесях) [76, 77]. Аналогичные зависимости для наклона кривой  $H_{c2}(T)$  и скачка теплоемкости показаны на Рис. 46. Опять видно, что и примесное рассеяние (беспорядок) ведет к быстрому уменьшению двух последних величин, т.е. усиливает аналогичный эффект от псевдощелевых флуктуаций.

Аналогичные зависимости получены в работе [72] для случая псевдощелевых флуктуаций зарядового (CDW) типа, когда также возникает

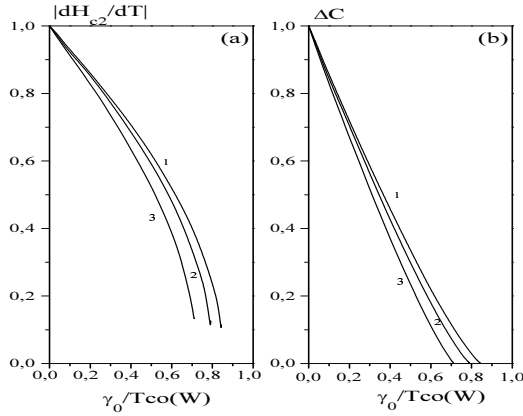


Рис. 46: Зависимость величины наклона температурной зависимости верхнего критического поля и скачка теплоемкости в точке перехода от частоты рассеяния на примесях (беспорядка)  $\gamma_0$  в случае  $d$  – спаривания для нескольких значений ширины псевдощели  $W/T_{c0}$ : 0 – 1; 2.8 – 2; 5.5 – 3.

знакопеременная рекуррентная процедура для вершинной части. В тоже время там возникают определенные количественные отличия, которые связаны с иной комбинаторикой диаграмм.

Найденные зависимости находятся в качественном соответствии с большинством данных, полученных в экспериментах по изучению сверхпроводимости в области существования псевдощели (область недодопированных составов на фазовой диаграмме купратов). Ниже будет показано, что полученные результаты могут быть использованы для непосредственного моделирования типичной фазовой диаграммы ВТСП купратов.

### 5.5.2 $s$ – спаривание.

Рассмотрение случая  $s$  – спаривания представляет интерес, в основном, с точки зрения выявления характерных отличий от случая спаривания  $d$  – типа. Экспериментальные данные по сверхпроводимости  $s$  – типа в системах с псевдощелью практически отсутствуют, хотя и не исключено, что соответствующие системы будут открыты в будущем.

Расчеты показывают, что псевдощелевые флуктуации заметно подавляют температуру сверхпроводящего перехода и в этом случае (Рис. 47), хотя характерный масштаб таких флуктуаций, необходимый для суще-

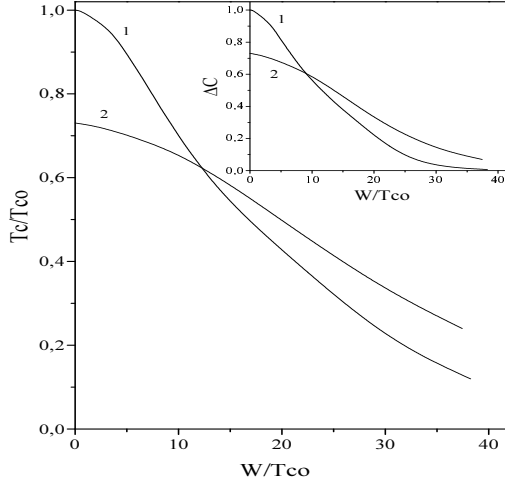


Рис. 47: Зависимость  $T_c$  от эффективной ширины псевдощели  $W$  в случае  $s$  – спаривания для двух значений частоты примесного рассеяния:  $\gamma_0/T_{c0}$ : 0 – 1; 20 – 2. Обратная корреляционная длина  $\kappa a=0.2$ . На вставке показано характерное поведение скачка теплоемкости при аналогичных параметрах.

ственного подавления сверхпроводимости в этом случае, значительно выше, чем в случае спаривания  $d$  – типа. Этот результат уже был получен в [72], однако следует обратить внимание на отсутствие в рассматриваемом случае гейзенберговских SDW флуктуаций характерной “полочки” в зависимости  $T_c$  от  $W$ , получающейся в случае рассеяния на псевдощелевых флуктуациях CDW типа [72]. На таком же масштабе  $W$  происходит и существенное подавление величины скачка теплоемкости в точке сверхпроводящего перехода, что показано на вставке на Рис. 47.

Что касается зависимости  $T_c$  от частоты рассеяния на примесях (беспорядка), то наряду с относительно слабым эффектом подавления  $T_c$  беспорядком, связанным [75] с размытием плотности состояний на уровне Ферми, может наблюдаться и слабый эффект повышения  $T_c$  с ростом  $\gamma_0$ , связанный, по видимому, с эффектом “замытия” псевдощели в плотности состояний примесным рассеянием [73].

На Рис. 48 показано, как рассеяние на примесях (беспорядок) влияет на наклон верхнего критического поля и скачок теплоемкости. Скачок теплоемкости существенно подавляется беспорядком, наклон  $H_{c2}(T)$  ведет себя качественно иным образом, чем в случае  $d$  – спаривания: рост

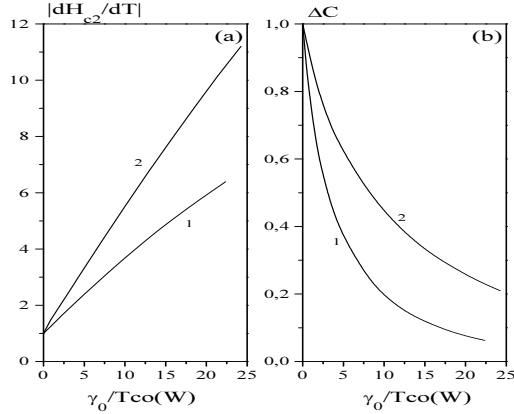


Рис. 48: Зависимость величины наклона температурной зависимости верхнего критического поля и скачка теплоемкости в точке перехода от частоты рассеяния на примесях (беспорядка)  $\gamma_0$  в случае  $s$  – спаривания и для двух значений ширины псевдощели:  $W/T_{c0}$ : 0 – 1; 15 – 2.

беспорядка приводит к заметному росту этой величины, как и в случае стандартной теории “грязных” сверхпроводников [16], тогда как псевдощелевые флуктуации способствуют увеличению наклона  $H_{c2}(T)$ . В отсутствие псевдощелевых флуктуаций, аналогичные отличия в поведении наклона  $H_{c2}(T)$  при разупорядочении (между сверхпроводниками с  $s$  и  $d$  спариванием) отмечались ранее в [76].

## 6 Моделирование фазовой диаграммы ВТСП – купратов.

Описанная модель влияния псевдощелевых флуктуаций на сверхпроводимость позволяет провести простое моделирование типичной фазовой диаграммы ВТСП купратов [73, 74]<sup>15</sup>. Впервые попытка такого моделирования в крайне упрощенном варианте нашей модели была предпринята в работе [56]. Основная идея состоит в отождествлении параметра  $W$  с экспериментально наблюдаемой эффективной шириной псевдощели

<sup>15</sup>При этом мы “пренебрегаем” существованием узкой области антиферромагнитного упорядочения в состоянии моттовского диэлектрика, существующей в области малых концентраций легирующей примеси, ограничиваясь рассмотрением широкой области существования “плохого” металла.

(температурой кроссовера в псевдощелевую область фазовой диаграммы)  $E_g \approx T^*$ , определяемой из многочисленных экспериментов [24, 21]. Эта величина, как отмечалось выше, практически линейно убывает с ростом концентрации легирующей примеси (носителей тока) от величин порядка  $10^3\text{K}$ , обращаясь в нуль при некоторой критической концентрации  $x_c \approx 0.19..0.22$ , слегка превышающей “оптимальное значение”  $x_o \approx 0.15..0.17$  [24, 78]. Соответственно, мы можем принять аналогичную концентрационную зависимость нашего параметра ширины псевдощели  $W(x)$ <sup>16</sup>. В этом смысле, можно считать, что зависимость  $W(x)$  определяется непосредственно из эксперимента. Тогда, единственным параметром, подлежащим определению, становится концентрационная зависимость “затравочной” температуры сверхпроводящего перехода  $T_{c0}(x)$ , которая существовала бы в отсутствие псевдощелевых флуктуаций, ее знание позволяет определить концентрационное поведение реальной температуры перехода  $T_c(x)$ , путем решения уравнений нашей модели. К сожалению, зависимость  $T_{c0}(x)$  в общем случае неизвестна и не определяется из известных экспериментов, оставаясь подгоночным параметром теории.

Предполагая, аналогично [56], что  $T_{c0}(x)$  можно описать линейной функцией  $x$ , обращающейся в нуль при  $x = 0.3$ , и подбирая значение  $T_{c0}(x = 0)$  так, чтобы получить желаемое значение  $T_c(x = x_o)$  можно рассчитать вид “наблюдаемой” зависимости  $T_c(x)$ . Пример результатов такого расчета для случая  $d$  – спаривания и рассеяния на зарядовых (CDW) псевдощелевых флуктуациях [72], с использованием типичной зависимости  $W(x)$ , показан на Рис. 49. Видим, что даже при столь произвольных предположениях модель “горячих точек” позволяет получить зависимость  $T_c(x)$  довольно близкую к экспериментально наблюдаемой. Аналогичные расчеты для изинговской модели взаимодействия со спиновыми флуктуациями (знакопостоянная рекуррентная процедура для вершинной части [72]) показывают, что разумные значения  $T_c(x)$  могут быть получены только при нереалистических значениях  $W(x)$  примерно на порядок превышающих наблюдаемые.

В рамках рассматриваемой нами модели БКШ для “затравочной”  $T_{c0}$ , предположение заметной концентрационной зависимости этой величины представляется довольно нереалистическим<sup>17</sup>. Поэтому, предположим,

<sup>16</sup>Естественно, такое отождествление можно провести с точностью до неизвестного коэффициента пропорциональности  $\sim 1$ .

<sup>17</sup>В рамках такого подхода зависимость  $T_{c0}$  от  $x$  может быть обусловлена только относительно слабым изменением плотности состояний на уровне Ферми при изменении  $x$ .



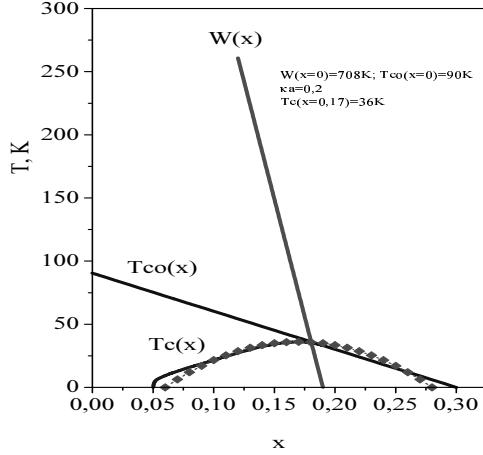


Рис. 49: Модельная фазовая диаграмма для случая рассеяния на псевдощелевых флуктуациях зарядового (CDW) типа ( $d$  – спаривание) и “затравочной” температуры сверхпроводящего перехода  $T_{c0}$  линейно зависящей от концентрации носителей.

что величина  $T_{c0}$  вообще не зависит от концентрации носителей  $x$ , но учтем, что введение легирующей примеси неизбежно ведет к появлению примесного рассеяния (внутреннего беспорядка), что можно описать соответствующей линейной зависимостью  $\gamma(x)$ . Предположим, что именно такой рост неупорядоченности приводит к полному подавлению  $d$  – спаривания при  $x = 0.3$ , в соответствии с известной зависимостью Абрикосова – Горькова [76, 77]. Результаты расчета фазовой диаграммы для системы типа  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  в нашей модели, для случая гейзенберговских псевдощелевых флуктуаций, с учетом описанной роли примесного рассеяния, показан на Рис. 50. Использованные при расчете значения параметров задачи, соответствующих данной системе, приведены на этом же рисунке. “Экспериментальные” значения  $T_c(x)$ , показанные на этом рисунке (также как и на Рис. 49) “ромбиками”, получены с помощью эмпирической формулы [78, 79]:

$$\frac{T_c(x)}{T_c(x = x_o)} = 1 - 82.6(x - x_o)^2 \quad (86)$$

которая дает достаточно хорошее описание концентрационного поведения  $T_c$  для целого ряда ВТСП купратов. Видим, что во всей области недодопированных составов наша модель дает практически идеальное описание

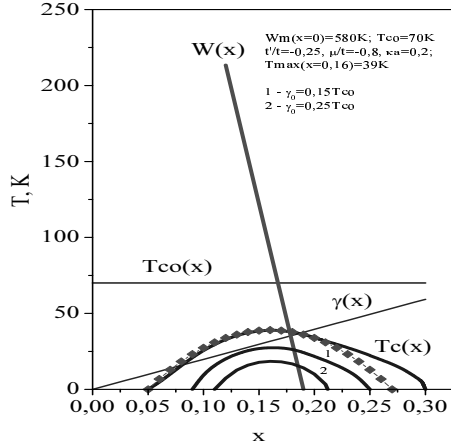


Рис. 50: Модельная фазовая диаграмма для случая рассеяния на гейзенберговских (SDW) псевдощелевых флуктуациях ( $d$  – спаривание) и “затравочной” температуры сверхпроводящего перехода  $T_{c0}$  не зависящей от концентрации носителей, с учетом роли внутренней неупорядоченности, линейной по концентрации легирующей примеси  $\gamma(x)$ .

“экспериментальных” данных при вполне разумных значениях  $W(x)$ . В конце области передопированных составов описание несколько ухудшается, однако следует иметь в виду, что выражение (86) также не дает здесь достаточно хорошего описания, да и наша модель исчезновения сверхпроводимости в области передопированных составов является очевидно весьма грубой, а какой – либо специальной подгонки параметров, улучшающей согласие с данными в этой области вообще не проводилось.

Интересно рассмотреть вопрос о поведении температуры сверхпроводящего перехода  $T_c$  при дополнительном разупорядочении системы для различных составов (концентраций носителей). Имеется довольно много экспериментальных работ [16], в которых такое разупорядочение производилось путем введения примесей [81, 82] или облучением быстрыми нейтронами [80] и электронами [83, 84]. При этом специальное обсуждение роли дополнительного разупорядочения в контексте существования псевдощелевого состояния проводилось только в работе [82].

В нашей модели, такое разупорядочение можно симулировать введением дополнительного параметра рассеяния на “примесях”  $\gamma_0$ , который просто добавляется к параметру внутреннего беспорядка  $\gamma(x)$ . Результа-

ты расчетов температуры сверхпроводящего перехода для двух значений этого параметра также показаны на Рис. 50. Видно, что в полном соответствии с экспериментом [82], введение “примесей” (беспорядка) приводит к быстрому сужению области существования сверхпроводимости. Также, в полном соответствии со сделанным выше в связи с Рис. 45 выводом, и с результатами экспериментов [80, 82], подавление сверхпроводимости беспорядком в области недодопированных составов (псевдощелевой области) происходит существенно быстрее, чем при оптимальном составе. Можно было бы ожидать, что введение “нормального” беспорядка, приводящее, очевидно, к некоторому подавлению псевдощели в плотности состояний могло бы привести к определенной “затяжке” подавления  $T_c$ , однако такой эффект для случая спаривания  $d$  – типа отсутствует.

Проблема однако в том, что во всех случаях, подавление  $T_c$  происходит быстрее, чем по стандартной кривой Абрикосова – Горькова для случая  $d$  – спаривания [77]. В тоже время, попытки соответствующей обработки большинства экспериментальных данных по разупорядочению в ВТСП купратах [81, 83, 84], приводят к выводу о том, что такое подавление в действительности происходит существенно медленнее, чем предсказывается зависимостью Абрикосова – Горькова. Эта, до сих пор нерешенная, проблема относится к числу основных проблем теории высокотемпературных сверхпроводников [16]. Один из путей ее решения может быть связан с последовательным описанием роли беспорядка в сверхпроводниках, находящихся в области перехода от “рыхлых” пар теории БКШ к “компактным” парам возникающим в пределе очень сильной связи [85]. Другая интересная возможность объяснения такой “затяжки” подавления  $T_c$  связана с анизотропией упругого рассеяния на примесях, подробно рассмотренной в [76, 86]. Такой эффект может быть относительно легко включен в нашу схему расчетов. Он представляется особенно интересным в связи с установленным фактом сильной анизотропии упругого рассеяния (с симметрией  $d$  – типа), наблюдавшейся в ARPES экспериментах на системе  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$  [36]. Соответствующая частота рассеяния изменяется в интервале 20 – 60  $meV$  (см. Рис. 10 (с)) [36], что почти на порядок превышает максимальное значение  $\gamma(x)$ , использованное в наших расчетах, и еще раз указывает на необычную устойчивость  $d$  – спаривания в купратах по отношению к статическому беспорядку. Следует заметить, что наша модель для собственно – энергетической части электрона фактически описывает аналогичную анизотропию упругого рассеяния, соответствующую его возрастанию в окрестности “горячих точек”, однако эффект “затяжки” подавления  $T_c$  в наших расчетах не наблюдался.

ся.

Полученные результаты показывают, что несмотря на очевидную грубость сделанных предположений, модель “горячих точек” позволяет легко получить достаточно разумное (иногда даже полуколичественное) описание области существования сверхпроводимости на фазовой диаграмме ВТСП купратов<sup>18</sup>. Основным недостатком использованного подхода остается значительная неопределенность “сценария” формирования концентрационной зависимости “затравочной” температуры сверхпроводящего перехода.

## 7 Заключение

Проведенное выше рассмотрение демонстрирует многообразие результатов, которые могут быть получены в рассматриваемом классе моделей псевдощелевого состояния. Нужно, конечно, еще раз подчеркнуть, весьма упрощенный характер приближений, положенных в основу нашего рассмотрения, что, впрочем, и позволяет получить, то, что выше названо “почти точным решением”. Это решение интересно, прежде всего, с чисто теоретической точки зрения, как достаточно редкий пример ситуации, когда удается просуммировать весь фейнмановский ряд теории возмущений (хотя, в общем случае, отдельные классы диаграмм высших порядков и вычисляются приближенно). Возможно, что основной теоретический “урок” такого рассмотрения состоит в том, что результаты такого полного суммирования довольно радикально отличаются от результатов, полученных тем или иным “выборочным” суммированием (геометрической прогрессии).

Возможно главным недостатком наших моделей является пренебрежение динамикой флуктуаций ближнего порядка. Это приближение оправдано, как отмечалось выше, лишь при достаточно высоких температурах, что плохо, например с точки зрения описания свойств сверхпроводящего состояния при  $T \ll T_c$ <sup>19</sup>

Другим недостатком, как не раз отмечалось [57, 48], является ограничение гауссовым приближением для статистики флуктуаций, что также

---

<sup>18</sup>Выше всегда подразумевались системы с дырочным легированием, для которых зависимость  $T^*(x)$  является хорошо установленной [24, 78]. Для электронно допированных купратов такие данные практически отсутствуют.

<sup>19</sup>В связи с этим, также, как и из соображений экономии места, мы опустили рассмотрение уравнений Горькова, которые также можно вывести и проанализировать [55, 75], с учетом всех порядков теории возмущений по псевдощелевым флуктуациям.

может быть оправдано только для области достаточно высоких температур. До некоторой степени, это ограничение носит, конечно, технический характер. Тем не менее, оно крайне существенно для структуры изучавшихся решений.

Мы уже упоминали, что в данном классе моделей можно продемонстрировать нарушение фундаментального свойства самоусредняемости сверхпроводящего параметра порядка [54, 59]. К сожалению, такое исследование удалось провести только в достаточно нереалистичском пределе бесконечной корреляционной длины псевдощелевых флуктуаций [54], или в весьма специфической модели с конечной корреляционной длиной [58, 59], причем только в переупрощенном варианте модели “горячих участков”. Возникающая при этом качественная картина существования в системе “сверхпроводящих капель” при температурах выше “среднеполевой”  $T_c$  [19, 54, 59] может иметь прямое отношение к объяснению существования “низкоэнергетической” псевдощели (проявлению признаков сверхпроводящего отклика при  $T > T_c$ ) и наблюдаемой неоднородной сверхпроводимости купратов [17, 18]. В модели “горячих точек” такое рассмотрение до сих пор не проводилось.

В тоже время, из проведенного рассмотрения видно, что в некоторых случаях удастся довести дело до прямого сравнения с экспериментом, причем результаты такого сравнения оказываются достаточно обнадеживающими. В этом смысле, модель “горячих точек” может претендовать на достаточно реалистичское описание свойств псевдощелевого состояния высокотемпературных сверхпроводников.

Автор признателен Э.З.Кучинскому и Н.А.Кулеевой (Стригиной), в соавторстве с которыми выполнены основные работы по модели “горячих точек”. Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 02-02-16031, и программ Президиума РАН “Квантовая макрофизика” и Отделения физических наук РАН “Сильно коррелированные электроны в полупроводниках, металлах, сверхпроводниках и магнитных материалах”.

## Список литературы

- [1] J.Annett, N.Goldenfeld, A.J.Leggett. Physical Properties of High Temperature Duperconductors. Vol. 5, p. 375 (Ed. by D.M.Ginsberg), World Scientific, Singapore, 1996. ArXiv: cond-mat/9601060
- [2] C.C.Tsui, J.R.Kirtley. Rev. Mod. Phys. **72**, 969 (2000)
- [3] Z.-X.Shen, D.S.Dessau. Phys. Reports **253**, 1 (1995)
- [4] A.Damasceli, Z.Hussain, Z.-X.Shen. Rev. Mod. Phys. **75**, 475 (2003)
- [5] X.J.Zhou, T.Yoshida, D.-H.Lee, W.L.Yang, V.Brouet, F.Zhou, W.X.Ti, J.W.Xiong, Z.X.Zhao, T.Sasagawa, T.Kakeshita, H.Eisaki, S.Uchida, A.Fujimori, Z.Hussain, Z.-X.Shen. Phys. Rev. Lett. **92**, 187001 (2004).
- [6] Е.Г.Максимов. УФН **170**, 1033 (2000)
- [7] M.Kulić. Phys. Reports **338**, 1 (2000)
- [8] M.Kulić. ArXiv: cond-mat/0404287
- [9] D.J.Scalapino. Phys. Reports **250**, 329 (1995)
- [10] T.Moriya, K.Ueda. Adv. Phys. **49**, 555 (2000)
- [11] A.V.Chubukov, D.Pines, J.Schmalian. The Physics of Superconductors. (Ed. K.-H.Bennemann and J.B.Ketterson), Springer 2002. ArXiv: cond-mat/0201140
- [12] Y.Yanase, T.Jugo, T.Nomura, H.Ikeda, T.Hotta, K.Yamada. Phys. Reports **387**, 1 (2004). ArXiv: cond-mat/0309094
- [13] P.W.Anderson. The Theory of Superconductivity in the High -  $T_c$  Cuprates. Princeton University Press, Princeton, 1997
- [14] E.Demler, W.Hanke, Shou-Cheng Zhang. ArXiv: cond-mat/0405038
- [15] C.M.Varma, Z.Nussinov, Wim van Saarloos. Phys. Reports **361**, 267 (2002)
- [16] M.V.Sadovskii. Superconductivity and Localization. World Scientific, Singapore 2000.
- [17] S.H.Pan, J.P.O'Neil, R.L.Badzey, C.Chamon, H.Ding, J.R.Engelbrecht, Z.Wang, H.Eisaki, S.Uchida, A.K.Gupta. Nature **413**, 282 (2001)

- [18] K.McElroy, D.-H.Lee, J.E.Hoffman, K.M.Lang, E.W.Hudson, H.Eisaki, S.Uchida, J.Lee, J.C.Davis. ArXiv: cond-mat/0404005
- [19] Л.Н.Булаевский, С.В.Панюков, М.В.Садовский. ЖЭТФ **92**, 672 (1987)
- [20] T.Timusk, B.Statt. Rep.Progr.Phys. **62**, 61 (1999)
- [21] М.В.Садовский. УФН **171**, 539 (2001)
- [22] Н.Ф.Мотт, Э.Дэвис. Электронные процессы в некристаллических веществах. Мир, М. 1974
- [23] J.L.Tallon, J.W.Loram, Physica **C349**, 53 (2001), ArXiv: cond-mat/0005063
- [24] J.W.Loram, K.A.Mirza, J.R.Cooper, J.L.Tallon. Physica **C 282-287**, 1405 (1997)
- [25] C.Renner, B.Revaz, J.Y.Genoud, K.Kadowaki, Ø.Fisher. Phys.Rev.Lett. **80**, 149 (1998)
- [26] V.M.Krasnov, A.Yurgens, D.Winkler, P.Delsing, T.Claeson. Phys.Rev.Lett. **84**, 5860 (2000)
- [27] V.M.Krasnov, A.E.Kovalev, A.Yurgens, D.Winkler, Phys. Rev. Lett. **86**, 2657 (2001)
- [28] Y.Onose, Y.Taguchi, K.Ishizaka, Y.Tokura. Phys. Rev. Lett. **87**, 217001 (2001); Preprint (2003)
- [29] D.N.Basov, A.V.Puchkov, R.A.Hughes, T.Strach, J.Preston, T.Timusk. Phys.Rev. **B49**, 12165 (1994)
- [30] D.N.Basov, B.Dabrowski, T.Timusk. Phys.Rev.Lett. **81**, 2132 (1998)
- [31] E.J.Singley, D.N.Basov, K.Kurahashi, T.Uefuji, K.Yamada. Phys. Rev. **B64**, 224503 (2001)
- [32] M.R.Norman, H.Ding, M.Randeria, J.C.Campuzano, T.Yokoya, T.Takeuchi, T.Takahashi, T.Mochiku, K.Kadowaki, P.Guptasarma, D.G.Hinks. Nature **392**, 157 (1998)

- [33] H.Ding, T.Yokoya, J.C.Campuzano, T.Takahashi, M.Randeria, M.R.Norman, T.Mochiku, K.Kadowaki, J.Giapintzakis. *Nature* **382**, 51 (1996)
- [34] M.R.Norman, M.Randeria, H.Ding, J.C.Campuzano. *Phys.Rev.* **B57**, R11093 (1998)
- [35] A.Kaminski, J.Mesot, H.Fretwell, J.C.Campuzano, M.R.Norman, M.Randeria, H.Ding, T.Sato, T.Takahashi, T.Mochiku, K.Kadowaki, H.Hoehst. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1788 (2000)
- [36] A.Kaminski, H.M.Fretwell, M.R.Norman, M.Randeria, S.Rosenkranz, J.C.Campuzano, J.Mesot, T.Sato, T.Takahashi, T.Terashima, M.Takano, K.Kadowaki, Z.Z.Li, H.Raffy. *ArXiv: cond-mat/0404385*
- [37] A.A.Kordyuk, S.V.Borisenko, A.Koitzsch, J.Fink, M.Knupfer, B.Büchner, H.Berger, G.Margaritondo, C.T.Lin, B.Keimer, S.Ono, Y.Ando. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 257006 (2004)
- [38] N.P.Armitage, D.H.Lu, C.Kim, A.Damascelli, K.M.Shen, F.Ronning, D.L.Feng, P.Bogdanov, Z.-X.Shen. *Phys.Rev.Lett.* **87**, 147003 (2001)
- [39] J.R.Schrieffer, X.G.Wen, S.C.Zhang. *Phys.Rev.* **B39**, 11663 (1989)
- [40] Ю.А.Изюмов. *УФН* **161**, 1 (1991)
- [41] P.Monthoux, A.Balatsky, D.Pines. *Phys.Rev.* **B46**, 14803 (1992)
- [42] P.Monthoux, D.Pines. *Phys.Rev.* **B47**, 6069 (1993); *Phys.Rev.* **B48**, 4261 (1994)
- [43] A.Millis, H.Monien, D.Pines. *Phys.Rev.* **B42**, 1671 (1990)
- [44] Ю.А.Изюмов. *УФН* **169**, 225 (1999)
- [45] V.Barzykin, D.Pines. *Phys.Rev.* **B52**, 13565 (1995)
- [46] D.Pines. *Z.Phys.* **B103**, 129 (1997)
- [47] J.Schmalian, D.Pines, B.Stojkovič. *Phys.Rev.Lett.* **80**, 3839(1998); *Phys.Rev.* **B60**, 667 (1999)
- [48] Э.З.Кучинский, М.В.Садовский. *ЖЭТФ* **115**, 1765 (1999)
- [49] A.P.Kampf, J.R.Schrieffer. *Phys.Rev.* **B41**,6399(1990), **B42**,7967(1990)



- [50] А.И.Посаженикова, М.В.Садовский. *ЖЭТФ* **115**, 632 (1999)
- [51] М.В.Садовский. *ЖЭТФ* **66**, 1720 (1974); *ФТТ* **16**, 2504 (1974)
- [52] W.Wonneberger, R.Lautenschlager. *J.Phys. C* **9**, 2865 (1976)
- [53] М.В.Садовский. *Диagramматика (Лекции по избранным задачам теории конденсированного состояния)*. Москва – Ижевск, 2004; <http://sadvovski.iep.uran.ru/RUSSIAN/Diagramm.ps> (pdf)
- [54] Э.З.Кучинский, М.В.Садовский. *ЖЭТФ* **117**, 613 (2000)
- [55] Э.З.Кучинский, М.В.Садовский. *ЖЭТФ* **119**, 553 (2001)
- [56] A.Posazhennikova, P.Coleman. *Phys.Rev.* **B67**, 165109 (2003)
- [57] М.В.Садовский. *ЖЭТФ* **77**, 2070(1979)
- [58] L.Bartosch, P.Kopietz. *Eur. Phys. J.* **B17**, 555 (2000)
- [59] Э.З.Кучинский, М.В.Садовский. *ЖЭТФ* **121**, 758 (2002)
- [60] M.V.Sadvorskii. *Physica C* **341-348**, 811 (2000)
- [61] L.Bartosch, P.Kopietz. *Phys.Rev.* **B60**, 15488 (1999)
- [62] Y.Yanase. *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 1000 (2004)
- [63] D.S.Marshall, D.S.Dessau, A.G.Loesser, C-H.Park, A.Y.Matsuura, J.N.Eckstein, I.Bozovic, D.Fournier, A.Kapitulnik, W.E.Spicer, Z.-X.Shen. *Phys.Rev.Lett.* **76**, 4841 (1996)
- [64] М.В.Садовский, А.А.Тимофеев. *СФХТ* **4**, 11 (1991)
- [65] M.V.Sadvorskii, A.A.Timofeev. *J.Moscow Phys.Soc.* **1**, 391 (1991)
- [66] М.В.Садовский, Н.А.Стригина. *ЖЭТФ* **122**, 610 (2002)
- [67] D.Vollhardt, P.Wolfe. *Phys.Rev.* **B22**, 4666 (1980)
- [68] Л.П.Горьков, А.И.Ларкин, Д.Е.Хмельницкий. *Письма ЖЭТФ* **30**, 248 (1979)
- [69] P.Monthoux, D.J.Scalapino. *Phys. Rev.* **B65**, 235104 (2002)
- [70] A.A.Gogolin, G.T.Zimanyi. *Sol.St.Comm.* **46**, 469 (1983)

- [71] М.В.Садовский. Письма ЖЭТФ **69**, 447 (1999); Physica **C341-348**, 939 (2000)
- [72] Э.З.Кучинский, М.В.Садовский, Н.А.Стригина. ЖЭТФ **125**, 854 (2004)
- [73] Н.А.Кулеева, Э.З.Кучинский, М.В.Садовский. ЖЭТФ (в печати); ArXiv: cond-mat/0406156
- [74] E.Z.Kuchinskii, N.A.Kuleeva, M.V.Sadovskii. J. Phys. Chem. Solids (to be published); ArXiv: cond-mat/0405691
- [75] Н.А.Кулеева, Э.З.Кучинский. ФТТ **46**, 1557 (2004)
- [76] А.И.Посаженикова, М.В.Садовский. Письма ЖЭТФ **63**, 347 (1996); ЖЭТФ **112**, 2124 (1997)
- [77] R.J.Radtke, K.Levin, H.-B.Schüttler, M.R.Norman. Phys.Rev. B **48**, 653 (1993)
- [78] S.H.Naqib, J.R.Cooper, J.L.Tallon, R.S.Islam, R.A.Chakalov. ArXiv:cond-mat/0312443
- [79] M.R.Presland, J.L.Tallon, R.G.Buckley, R.S.Liu, N.E.Flower. Physica C **176**, 95 (1991)
- [80] А.Е.Карькин, С.А.Давыдов, Б.Н.Гощицкий, С.В.Мошкин, М.Ю.Власов. ФММ **76**, 103 (1993)
- [81] Y.Fukuzumi, K.Mizuhashi, K.Takenaka, S.Uchida. Phys.Rev.Lett. **76**, 684 (1996)
- [82] J.L.Tallon, C.Bernhard, G.V.M.Williams, J.W.Loram. Phys.Rev.Lett. **79**, 5294 (1997)
- [83] S.K.Tolpygo, J.-Y.Lin, M.Gurvitch, S.Y.Hou, J.M.Phillips. Phys.Rev. B **53**, 12454, 12462 (1996)
- [84] F.Rullier-Albenque, H.Alloul, R.Tourbot. Phys.Rev.Lett. **91**, 047001 (2003)
- [85] А.И.Посаженикова, М.В.Садовский. Письма ЖЭТФ **65**, 258 (1997)
- [86] G.Haran, A.D.S.Nagy. Phys.Rev. **54**, 15463 (1996)