



Модели псевдощелевого состояния

М.В. Садовский

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург



План лекций:

- Энергетическая щель в спектре – примеры
- Псевдощель - что это такое?
- Элементарная одномерная модель
- Псевдощель – двумерная модель (ВТСП)
- Сильно коррелированные системы

Что такое энергетическая щель?

Чтобы отыскать решение в окрестности границы зоны Бриллюэна, надо явно рассмотреть уравнения теории возмущений. Свойство периодичности решетки приводит, в частности, к тому, что потенциал может связывать лишь состояния с волновыми векторами, различающимися на вектор обратной решетки \mathbf{g} . Поэтому мы принимаем, что волновую функцию можно разложить в ряд

$$\psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{g}} \alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}}. \quad (3.12)$$

Если этот ряд подставить в уравнение Шредингера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mathcal{V}(\mathbf{r}) \right\} \psi_{\mathbf{k}} = \mathcal{E}(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}} \quad (3.13)$$

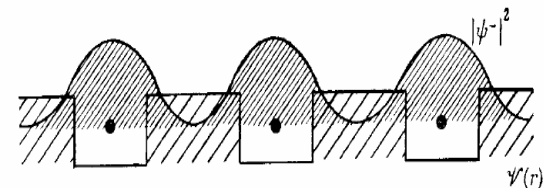
и помножить последнее на один из членов разложения (3.12), то получатся линейные уравнения для коэффициентов α

$$\{ \mathcal{E}_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^0 - \mathcal{E}(\mathbf{k}) \} \alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} + \sum_{\mathbf{g}'} \mathcal{V}_{\mathbf{g}'-\mathbf{g}} \alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{g}'} = 0, \quad (3.14)$$

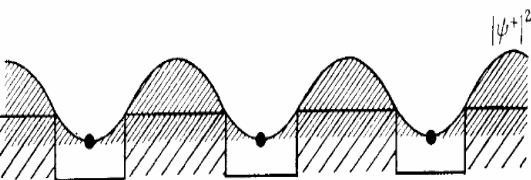
причем вектор \mathbf{g} принимает все значения (включая $\mathbf{g} = 0$ и $\mathbf{g}' = 0$). Как известно, простая формула теории возмущений получается, если считать малыми все коэффициенты $\alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}$, кроме коэффициента $\alpha_{\mathbf{k}}$. Действительно, тогда

$$\alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} \approx \frac{\mathcal{V}_{-\mathbf{g}}}{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^0 - \mathcal{E}_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^0}. \quad (3.15)$$

Именно это допущение становится несправедливым, когда вектор \mathbf{k} лежит вблизи границы зоны Бриллюэна, например вблизи границы, проходящей через середину вектора \mathbf{G} . Коэффициент при функции $\exp\{i(\mathbf{k} - \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}\}$ становится тогда столь же важным, сколь и коэффициент при исходной невозмущенной волновой функции. По существу здесь происходит брэгговское отражение электронов от решетки точно так же, как если бы это был внешний электронный пучок.

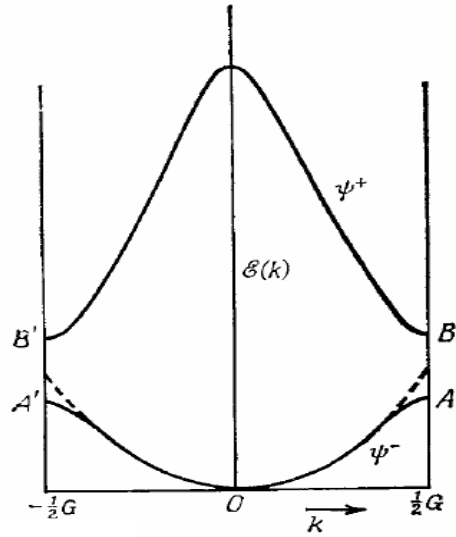


$\longleftrightarrow a$

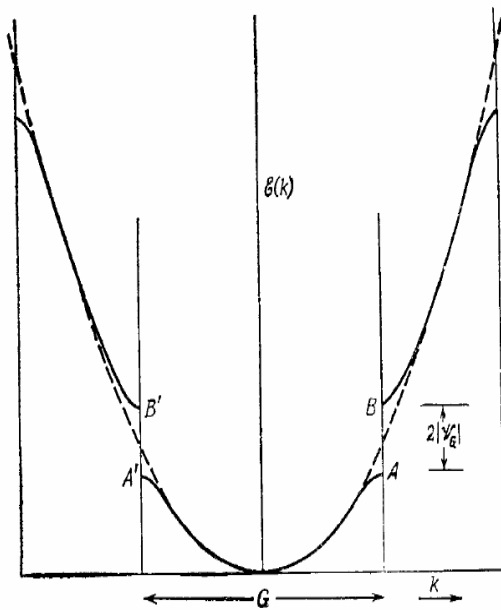


Периодический потенциал и концентрация электронов в состояниях s- и p-типа.

Д. Займан.
Принципы теории
твёрдого тела.



Энергия электрона в одномерном случае (схема приведенных зон).



Энергия электрона в одномерном случае (схема расширенных зон).

Приближенное решение задачи можно получить, отбрасывая в уравнениях (3.14) все коэффициенты, кроме упомянутых двух. Тогда, сдвигая начало отсчета энергии на \mathcal{V}_0 , мы приходим к системе двух уравнений

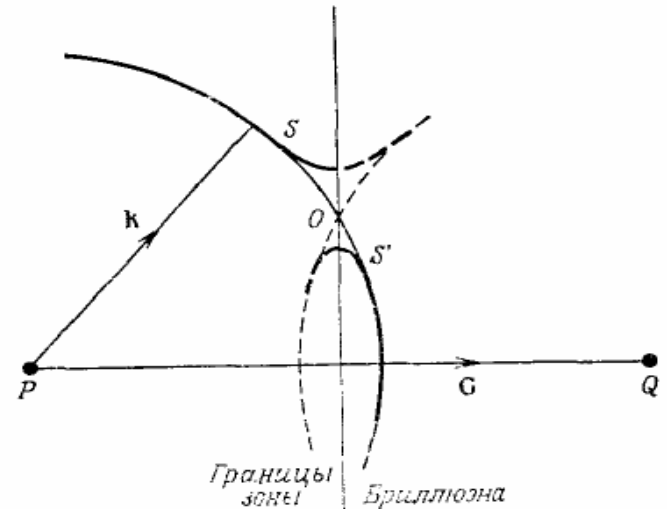
$$\begin{aligned} \{\mathcal{E}_k^0 - \mathcal{E}(k)\} \alpha_k + \mathcal{V}_G \alpha_{k-G} &= 0, \\ \mathcal{V}_{-G} \alpha_k + \{\mathcal{E}_{k-G}^0 - \mathcal{E}(k)\} \alpha_{k-G} &= 0. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Детерминант ее квадратичен по $\mathcal{E}(k)$, и нули его даются выражением

$$\mathcal{E}^{\pm}(k) = \frac{1}{2} (\mathcal{E}_k^0 + \mathcal{E}_{k-G}^0) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\mathcal{E}_k^0 - \mathcal{E}_{k-G}^0)^2 + 4|\mathcal{V}_G|^2}. \quad (3.17)$$

(Здесь принято во внимание, что $\mathcal{V}_{-G} = \mathcal{V}_G^*$.) Таким образом, функции $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ и $\exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}]$ смешиваются и возникают новые волновые функции ψ^+ и ψ^- , принадлежащие собственным значениям энергии \mathcal{E}^+ и \mathcal{E}^- .

Отсюда вытекает один из наиболее замечательных выводов теории: некоторым значениям энергии могут не соответствовать никакие электронные состояния, иначе говоря в энергетическом спектре могут появиться щели. Электронные уровни энергии образуют энергетические зоны. Это — фундаментальное свойство; оно обуславливает многие другие свойства металлов и полупроводников. Природа его — в брэгговском отражении. На электронные волновые функции «накладывается» периодичность решетки, что и приводит к расщеплению энергии.



Разрыв линий постоянной энергии на границе зоны Бриллюэна.

Пайерлсовский диэлектрик.

Как уже отмечалось выше, пайерлсовская неустойчивость фононного спектра приводит к возникновению спонтанной деформации решетки (цепочки) с волновым вектором $Q = 2p_F$. Посмотрим, как описывается “конденсированная” фаза, существующая при температурах $T < T_{p0}$. Запишем гамильтониан системы в виде:

$$H = \sum_p \xi_p a_p^\dagger a_p + \sum_l \omega_k b_k^\dagger b_k + \sum_{pk} g_k a_{p+k}^\dagger a_p (b_k + b_{-k}^\dagger) \quad (6.46)$$

где определили константу связи как:

$$g_k = g \sqrt{\frac{\omega_k}{2}} \quad (6.47)$$

поскольку мы здесь используем обозначения [1].

Возникновение пайерлсовской сверхструктуры описывается введением следующего аномального среднего [25], нарушающего трансляционную симметрию исходной решетки:

$$\Delta = g_{2p_F} \langle b_{2p_F} + b_{-2p_F}^\dagger \rangle \neq 0 \quad (6.48)$$

где угловые скобки обозначают статистическое среднее. Возникновение такого аномального среднего можно трактовать как бозе – конденсацию фононов в состоянии с квазиимпульсом $Q = 2p_F$. В координатном представлении (6.48) описывает потенциальное поле волны пайерлсовской деформации:

$$V(x) = \Delta e^{i2p_F x} + \Delta^* e^{-i2p_F x} = 2|\Delta| \cos(2p_F x + \phi) \quad (6.49)$$

где $|\Delta|$ представляет собой модуль, а ϕ – фазу соответствующего параметра порядка: $\Delta = |\Delta| e^{i\phi}$.

$$\begin{aligned}
 \text{Diagram 1: } & \text{p} \rightarrow \text{p} = \text{p} + \text{p} \xrightarrow{\Delta} \text{p} \\
 \text{Diagram 2: } & \text{p-Q} \rightarrow \text{p} = \text{p-Q} \xrightarrow{\Delta^*} \text{p}
 \end{aligned}$$

Чтобы найти спектр электрона, движущегося в поле (6.49) нужно, фактически, решить задачу о движении электрона в одномерном периодическом поле. Как это делается хорошо известно из любого курса теории твердого тела. Но посмотрим, как это можно сделать в рамках метода функций Грина. Для некоторой общности рассмотрим движение электрона в периодическом поле с произвольным волновым вектором Q :

$$V(x) = \Delta e^{iQx} + \Delta^* e^{-iQx} = 2|\Delta| \cos(Qx + \phi) \quad (6.50)$$

Тогда, ограничиваясь первым порядком по V , все можно описать системой уравнений для функций Грина типа уравнений Горькова, показанной графически на Рис. 6-5. В частности, в технике $T = 0$ мы можем записать эту систему в следующем виде:

$$G(\varepsilon p) = G_0(\varepsilon p) + G_0(\varepsilon p) \Delta F(\varepsilon p) \quad (6.51)$$

$$F(\varepsilon p) = G_0(\varepsilon p - Q) \Delta^* G(\varepsilon p) \quad (6.52)$$

где нормальная и anomalous функции Грина (в импульсно – временном представлении) определяются как:

$$G(tp) = -i \langle T a_p(t) a_p^+(0) \rangle \quad (6.53)$$

$$F(tp) = -i \langle T a_p(t) a_{p-Q}^+(0) \rangle \quad (6.54)$$

Аномальная функция Грина F (6.54) описывает здесь элементарный процесс переброса $p-Q \rightarrow p$, который возникает в периодическом поле (6.50). Система уравнений (6.51), (6.52) легко переписывается в виде:

$$(\varepsilon - \xi_p)G(\varepsilon p) - \Delta F(\varepsilon p) = 1 \quad (6.55)$$

$$(\varepsilon - \xi_{p-Q})F(\varepsilon p) - \Delta^* G(\varepsilon p) = 0 \quad (6.56)$$

решение которой дает:

$$G(\varepsilon p) = \frac{\varepsilon - \xi_{p-Q}}{(\varepsilon - \xi_p)(\varepsilon - \xi_{p-Q}) - |\Delta|^2} \quad (6.57)$$

$$F(\varepsilon p) = \frac{\Delta^*}{(\varepsilon - \xi_p)(\varepsilon - \xi_{p-Q}) - |\Delta|^2} \quad (6.58)$$

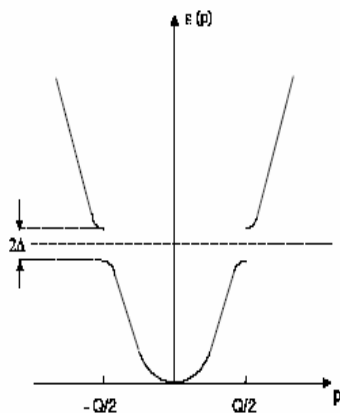
Нуль знаменателей (полюс) определяется здесь уравнением:

$$(\varepsilon - \xi_p)(\varepsilon - \xi_{p-Q}) - |\Delta|^2 = 0 \quad (6.59)$$

которое определяет стандартный ответ для спектра “новых” квазичастиц:

$$\varepsilon_{1,2}(p) = \frac{1}{2}(\xi_p + \xi_{p-Q}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\xi_p - \xi_{p-Q})^2 + |\Delta|^2}, \quad \xi_p = \frac{p^2}{2m} - \mu \quad (6.60)$$

т.е. “зонный” спектр в “двухволновом” приближении [27], который показан на Рис. 6-6. Естественно, что все рассмотрение симметрично относительно $Q \rightarrow -Q$.



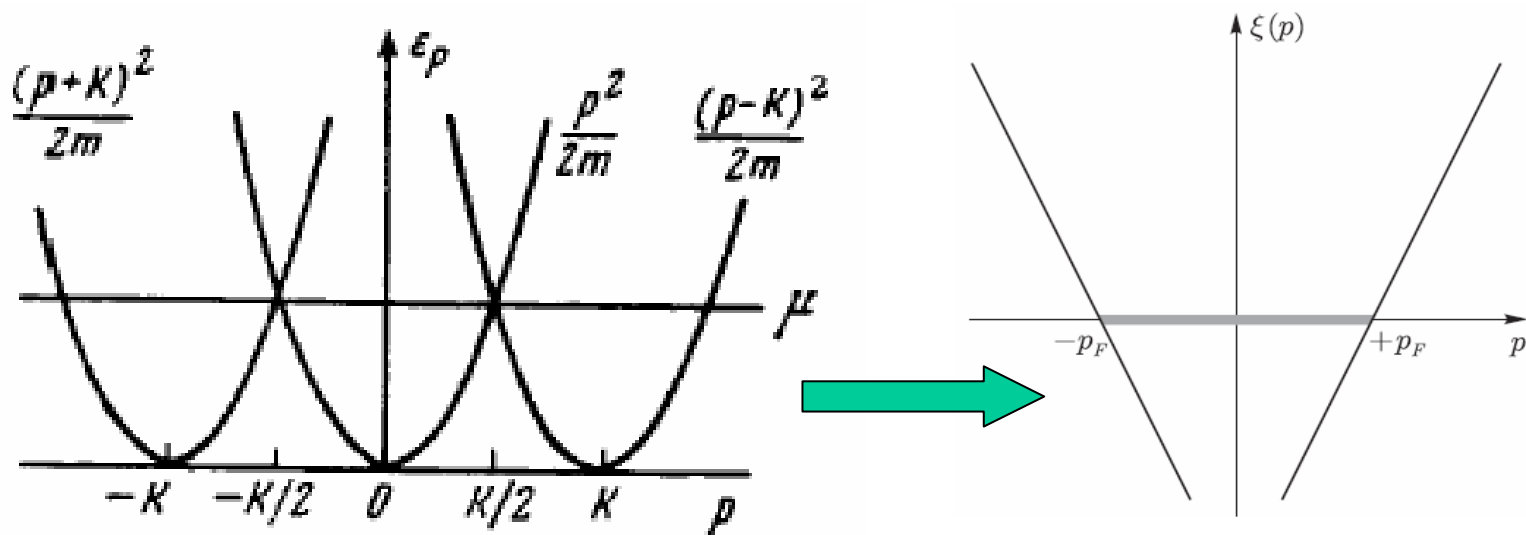
Для $Q = 2p_F$ уровень Ферми μ оказывается в точности в центре запрещенной зоны (щели) шириной 2Δ , так что система становится *диэлектриком*. При этом в одномерных системах для спектра свободных электронов всегда выполняется условие “нестинга”:

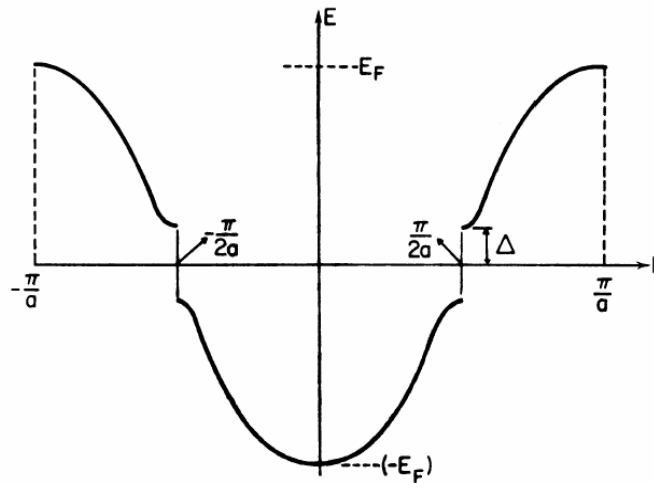
$$\xi_{p-Q} = \xi_{p-2p_F} = -\xi_p \quad (6.61)$$

в чем легко убедиться, взглянув на Рис. 6-7. Тогда спектр (6.60) сводится к виду БКШ:

$$\varepsilon_{1,2}(p) = \pm \sqrt{\xi_p^2 + |\Delta|^2} \quad (6.62)$$

а под ξ_p мы можем, как обычно, понимать спектр, линеаризованный вблизи уровня Ферми.





Часто представляет интерес рассмотрение электронного спектра в приближении сильной связи [27]. Например в модели с интегралом переноса J , отличным от нуля только для ближайших соседей (в цепочке), имеем спектр вида:

$$\varepsilon_p = -2J \cos pa, \quad \xi_p = \varepsilon_p - \mu = -2J \cos pa \quad (6.63)$$

где a – постоянная решетки (расстояние между атомами в цепочке), а второе равенство справедливо для наполовину заполненной зоны (один электрон проводимости на атом), когда $p_F = \frac{\pi}{2a}$, и уровень Ферми проходит в точности в центре зоны ($E_F = 2J$, если отсчитывать энергии от дна зоны, но $E_F = \mu = 0$, если отсчитывать энергии от уровня Ферми). В этом случае $Q = 2p_F = \frac{\pi}{a}$, что соответствует пайерлсовскому переходу с удвоением периода исходной цепочки. При этом опять выполняется условие “нестинга” в виде:

$$\xi_{p-Q} = -\xi_p, \quad \varepsilon_{p-\frac{\pi}{a}} = -\varepsilon_p \quad (6.64)$$

Вид спектра после пайерлсовского перехода для этого случая показан на Рис. 6-8. Данный пример типичен для случая *соизмеримого* перехода Пайерлса, когда период возникающей сверхструктуры составляет рациональное отношение с периодом исходной цепочки (в частности, равен целому числу исходных периодов). Случай, когда исходный спектр электронов в цепочке берется, как это делалось выше, в приближении свободных электронов (Рис. 6-7), является хорошей моделью для *несоизмеримого* перехода Пайерлса, когда период новой сверхструктуры никак не связан с периодом исходной цепочки (несоизмерим с ним). В частности, это связано с тем, что в модели свободных электронов уровень Ферми определяется только концентрацией электронов проводимости и никак не связан с периодом исходной решетки.

Перепишем систему уравнений (6.51), (6.52) в мацубаровской технике:

$$G(\varepsilon_n p) = G_0(\varepsilon_n p) + G_0(\varepsilon_n p) \Delta F(\varepsilon_n p) \quad (6.65)$$

$$F(\varepsilon_n p) = G_0(\varepsilon_n p - Q) \Delta^* G(\varepsilon_n p) \quad (6.66)$$

или (при выполнении условия “нестинга”):

$$G(\varepsilon_n p) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} + \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} \Delta F(\varepsilon_n p) \quad (6.67)$$

$$F(\varepsilon_n p) = \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p} \Delta^* G(\varepsilon_n p) \quad (6.68)$$

что еще можно переписать и так:

$$(i\varepsilon_n - \xi_p)G(\varepsilon_n p) - \Delta F(\varepsilon_n p) = 1 \quad (6.69)$$

$$(i\varepsilon_n + \xi_p)F(\varepsilon_n) - \Delta^* G(\varepsilon_n p) = 0 \quad (6.70)$$

что по форме (почти!) совпадает с (5.108) и (5.109). Решение этой системы дает:

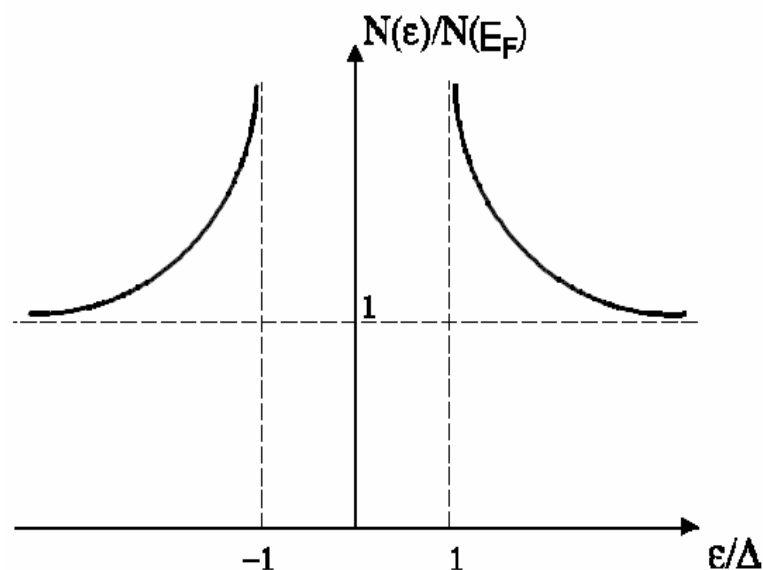
$$G(\varepsilon_n p) = \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\Delta|^2} \quad (6.71)$$

$$F(\varepsilon_n p) = \frac{\Delta^*}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\Delta|^2} \quad (6.72)$$

Из (6.71), после аналитического продолжения $i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon + i\delta$, нетрудно (аналогично (5.78)) посчитать плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми, которая имеет тот же вид, что и (5.79) теории БКШ:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N(E_F)} = \begin{cases} \frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 - |\Delta|^2}} & \text{при } |\varepsilon| > |\Delta| \\ 0 & \text{при } |\varepsilon| < |\Delta| \end{cases} \quad (6.77)$$

Характерный вид плотности состояний показан на Рис. 6-9. Несмотря на почти полное совпадение полученных здесь выражений с теорией БКШ, из всего предыдущего рассмотрения ясно, что возникающая здесь энергетическая щель $|\Delta|$ имеет *диэлектрическую* природу.



Пока мы еще сделали “полдела” — нужно еще написать уравнения для самосогласованного определения величины Δ , которая пока что введена “руками”.

Поскольку Δ определяется аномальным средним (6.48), мы должны выписать (мацубаровские) уравнения движения для операторов b_Q и b_Q^+ и усреднить их по Гиббсу. С помощью гамильтониана (6.46), стандартным образом получаем:

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} - \omega_Q\right) \langle b_{\pm Q}(\tau) \rangle = -g_Q \sum_p \langle a_{p \mp Q}^+ a_p \rangle = -g_Q \sum_p F^\mp(p\tau = -0) \quad (6.78)$$

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \tau} + \omega_Q\right) \langle b_{\pm Q}^+(\tau) \rangle = g_Q \sum_p \langle a_{p \pm Q}^+ a_p \rangle = -g_Q \sum_p F^\pm(p\tau = -0) \quad (6.79)$$

Отсюда, кстати, сразу же видно, что “фононное” аномальное среднее (6.48) пропорционально “электронным” аномальным средним типа $\langle a_{p \pm Q}^+ a_p \rangle$ ⁶. В связи с этим иногда говорят, что здесь мы имеем дело с *электрон – дырочным* спариванием.

После перехода к фурье – компонентам по мацубаровскому “времени”, система (6.78), (6.79) сводится к:

$$(i\omega_m - \omega_Q) \langle b_{\pm Q} \rangle_{\omega_m} = -g_Q \sum_p \sum_n F^\mp(p\varepsilon_n) \quad (6.81)$$

$$(i\omega_m + \omega_Q) \langle b_{\pm Q}^+ \rangle_{\omega_m} = g_Q \sum_p \sum_n F^\pm(p\varepsilon_n) \quad (6.82)$$

⁶Отсюда же ясно, что в системе возникает CDW — ее параметр порядка есть $\langle a_{p \pm Q}^+ a_p \rangle$. Для фурье – компоненты плотности заряда имеем ($Q = 2p_F$):

$$\langle \rho_q \rangle = \rho_0 \delta(q) + \rho_1 \delta(q \pm Q), \quad \rho_1 \sim \sum_p \langle a_{p \pm Q}^+ a_p \rangle \quad (6.80)$$

что и дает $\langle \rho(x) \rangle = \rho_0 + \rho_1 \cos(2p_F x + \phi)$.

Отсюда имеем:

$$\langle b_Q + b_{-Q}^+ \rangle_{\omega_m} = -\frac{g_Q}{\omega_m^2 + \omega_Q^2} 2\omega_Q T \sum_p \sum_n F^-(\varepsilon_n p) \quad (6.83)$$

Для $\omega_m = 0$ (бозе – конденсат!) отсюда имеем:

$$\langle b_Q + b_{-Q}^+ \rangle_{\omega_m=0} = -\frac{\lambda\omega_Q}{g_Q} \int d\xi_p T \sum_n F^-(\varepsilon_n p) \quad (6.84)$$

где перешли, как обычно, от суммирования по p к интегрированию по ξ_p и учли определение (6.21). Тогда из (6.48) и (6.84) получаем:

$$\Delta = g_Q \langle b_Q + b_{-Q}^+ \rangle_{\omega_m=0} = -\frac{\lambda}{\omega_Q} \int_{-E_F}^{E_F} d\xi_p T \sum_n F^-(\varepsilon_n p) \quad (6.85)$$

где еще ввели обрезание расходящегося интеграла на энергиях порядка $\pm E_F$, аналогичное обсуждавшемуся выше обрезанию по частотам. Подставляя сюда (6.72) и проводя обычные вычисления, аналогичные выполнявшимся выше в теории сверхпроводимости, получаем уравнение для щели Δ типа БКШ:

$$1 = \lambda \int_0^{E_F} d\xi \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)}} \text{th} \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)}}{2T} \quad (6.86)$$

из которого немедленно следует, что температура пайерлсовского перехода и величина щели при $T = 0$ определяются стандартными выражениями:

$$T_{p0} = \frac{2\gamma}{\pi} E_F e^{-\frac{1}{\lambda}}, \quad \Delta_0 = \frac{\pi}{\gamma} T_{p0} \quad (6.87)$$

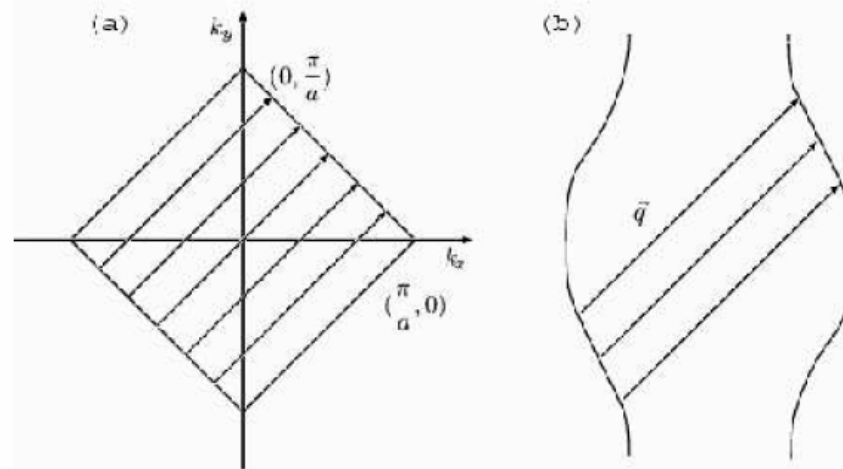
Волны зарядовой и спиновой плотности в многомерных системах, экситонный изолятор.

Может возникнуть вопрос — зачем мы столь подробно рассматривали задачу о пайерлсовском переходе? Задача рассматривалась одномерная, а в одномерных системах, как мы убедились выше, фазовый переход (упорядочение), строго говоря, невозможен. В этом смысле, рассматривавшийся выше подход, основанный на описании фазового перехода в приближении самосогласованного поля (в пренебрежении флуктуациями параметра порядка), кажется совершенно необоснованным. Дело, однако, в том, что в “реальной жизни” пайерлсовский переход экспериментально наблюдается в целом ряде *квазиодномерных* систем, где даже слабое взаимодействие электронов (или параметра порядка) на соседних “цепочках” атомов (эффекты трехмерности) приводят к стабилизации этого перехода⁹.

Более важно сейчас для нас другое — теоретическая схема, столь подробно описанная выше, почти целиком (или с небольшими изменениями) переносится на описание структурных и магнитных фазовых переходов в двумерных и трехмерных системах, обладающих свойством “нестинга” поверхностей Ферми (или их конечных участков) [6]. Аналогичным образом описывается и фазовый переход в модели так называемого “экситонного изолятора” — одной из базовых моделей в теории переходов металл – диэлектрик. Дело в том, что в условиях, когда электронный спектр $\varepsilon(\mathbf{p})$ удовлетворяет условию “нестинга” вида:

$$\varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) = -\varepsilon(\mathbf{p}) \quad (6.146)$$

где \mathbf{Q} – некоторый вектор (нестинга) в обратном пространстве, функции отклика соответствующей (многомерной) системе (поляризационный оператор, петля и т.п.) описываются практически теми же формулами, что и в одномерном случае. Соответственно, такие системы оказываются неустойчивыми к образованию волн зарядовой (CDW) плотности (деформации решетки) с волновым вектором \mathbf{Q} , если доминирующую роль играет электрон – фононное взаимодействие. Если доминирует электрон – электронное взаимодействие (отталкивание), то, как правило, в таких системах аналогичная неустойчивость, как мы увидим ниже, возникает в “спиновом канале” и в системе возникает волна спиновой плотности (SDW).

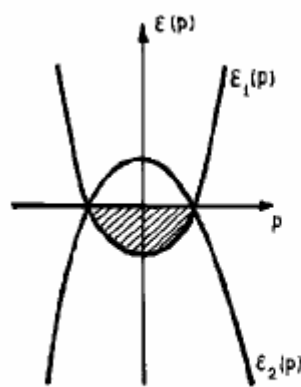


Условие (6.146) выполняется на всей поверхности Ферми, например, в простейшей модели электронного спектра в приближении сильной связи с интегралом переноса J , отличным от нуля, только для ближайших соседей в квадратной решетке:

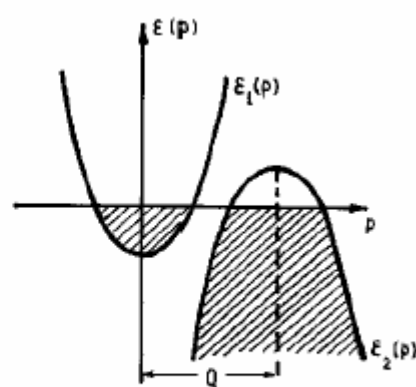
$$\varepsilon(\mathbf{p}) = -2J(\cos p_x a + \cos p_y a) \quad (6.147)$$

Условие (6.146) в этом случае выполняется для $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ (a – постоянная решетки), а поверхность Ферми, для случая полузаполненной зоны (один электрон проводимости на атом), представляет собой квадрат, показанный на Рис. 6-12 (а). Видим, что при “переносе” на вектор \mathbf{Q} противоположные участки поверхности Ферми полностью совмещаются, что и приводит к появлению логарифмических особенностей “одномерного” типа в функциях отклика, а вся поверхность Ферми оказывается “закрытой” диэлектрической щелью.

Может встретиться ситуация, когда при переносе на вектор \mathbf{Q} совмещаются только некоторые участки поверхности Ферми, как это показано на Рис. 6-12 (b). Тогда неустойчивость спектра все равно возникает, но энергетическая щель в спектре “открывается” только на этих участках поверхности Ферми, а остальные ее части оказываются незатронутыми. Подобные явления наблюдаются в некоторых “слоистых” соединениях переходных металлов ($NbSe_2$, TaS_2 и др.) [28]. В некоторых из них (например для $T - TaS_2$) происходит практически полный переход металл – диэлектрик (из – за сильного “нестинга”), так что щель “закрывает” почти всю поверхность Ферми. В других ($H - NbSe_2$) поверхность Ферми “закрывается” только частично, так что система остается металлом за счет “открытых” участков поверхности Ферми. Однако, переход с образованием CDW проявляется в особенностях температурного поведения электросопротивления, также как и в термодинамических характеристиках (например в теплоемкости).



(a)



(b)



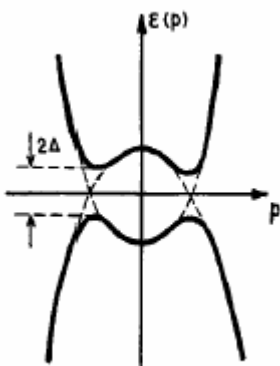
Аналогичные явления происходят и в замечательной модели “экситонного изолятора” (Л.В.Келдыш, Ю.В.Копаев, 1964). Эта модель основана на картине электронного спектра, показанной на Рис. 6-13. Суть дела здесь в наличии перекрывающихся зон электронов и дырок. Такая зонная структура (при достаточно малом перекрытии зон) характерна для так называемых полуметаллов. Из Рис. 6-13 видно, что в обоих случаях (a) и (b) существуют электронные и дырочные “карманы” на поверхности Ферми и выполняется условие “нестинга” вида:

$$\varepsilon_1(\mathbf{p}) = -\varepsilon_2(\mathbf{p}) \quad \text{для спектра (a)} \quad (6.148)$$

$$\varepsilon_1(\mathbf{p}) = -\varepsilon_2(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) \quad \text{для спектра (b)} \quad (6.149)$$

Тогда в системе возникает неустойчивость на нулевом волновом векторе для случая (a) или на конечном векторе \mathbf{Q} для случая (b), связанная с образованием *электрон – дырочных* пар, возникающих за счет всегда существующего притяжения противоположно заряженных электронов и дырок (как для обычных экситонов Ванье – Мотта), с последующей их “бозе – конденсацией” (иногда говорят о бозе – конденсации “экситонов”). Качественно, ситуация очень похожа на образование куперовских пар в сверхпроводниках, только электрон – дырочные пары, естественно, электронейтральны (незаряжены), но в спектре опять образуется энергетическая щель на уровне Ферми, связанная с таким фазовым переходом, как это показано (для случая (a)) на Рис. 6-14. В результате, система становится экситонным диэлектриком.

В случае неустойчивости на конечном волновом векторе \mathbf{Q} , определяемом зонной структурой типа Рис. 6-13 (b), в системе образуется и волна зарядовой (CDW) или спиновой плотности (SDW).



Математический анализ этой модели вполне аналогичен задаче БКШ или, еще в большей степени, проведенному выше рассмотрению пайерлсовского перехода. Поэтому здесь мы ограничимся только схематическим рассмотрением¹⁰. Для конкретности обсудим случай спектра Рис. 6-13 (а), когда спектр электронов и дырок имеет простейший вид:

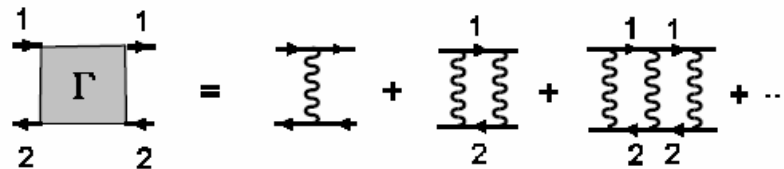
$$\varepsilon_{1,2}(\mathbf{p}) = \pm \left(\frac{p^2}{2m_{1,2}} - \frac{p_F^2}{2m_{1,2}} \right) \quad (6.150)$$

Экситонная неустойчивость определяется (аналогично куперовской неустойчивости) суммой лестничных диаграмм в канале частица – дырка, показанной на Рис. (5.15) – (5.17), и мы получаем для вершины, определяемой интегральным уравнением Рис. 6-15 (b), выражение типа (5.17):

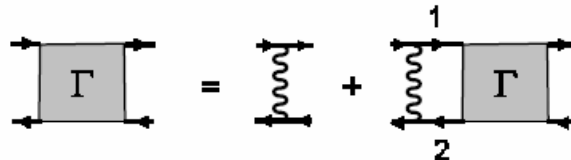
$$\Gamma(q=0, \omega) = \frac{\lambda}{1 + \lambda \left(\ln \left| \frac{2\omega_c}{\omega} \right| - i\frac{\pi}{2} \right)} \quad (6.151)$$

Здесь ω_c – частота обрезания логарифмической расходимости $\sim E_F$, q и ω – суммарные импульс и энергия в системе $e - h$. Безразмерная константа связи $\lambda < 0$ (притяжение!). Для модели экранированного кулоновского $e - h$ – взаимодействия, можно показать, что:

$$\lambda = \frac{me^2}{2\pi p_F} \ln \frac{\kappa_D^2}{2p_F^2} \quad (6.152)$$



(a)



Притяжение в канале частица – дырка приводит к возникновению в (6.151) полюса на мнимой частоте $\omega = i\Omega$, где (ср. (5.19)):

$$\Omega = 2\omega_c e^{-\frac{1}{|\lambda|}} \quad (6.153)$$

что и указывает на неустойчивость системы к образованию $e - h$ пар (“экситонов”) из электронов и дырок разных зон вблизи их (накладывающихся друг на друга!) поверхностей Ферми.

Чтобы найти спектр возбуждений системы в “конденсированной” фазе, нужно действовать аналогично теории БКШ или пайерлсовского диэлектрика. Запишем взаимодействие частиц из разных зон как:

$$H_{int} = \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) a_{1\sigma}^+(\mathbf{p} + \mathbf{q}) a_{2\sigma'}^+(\mathbf{p}' - \mathbf{q}) a_{2\sigma'}(\mathbf{p}') a_{1\sigma}(\mathbf{p}) \quad (6.154)$$

где явно выписаны спиновые и зонные индексы. Выделяя “наиболее расходящиеся” вклады в амплитуду рассеяния (вершинную часть), соответствующие рассеянию электронов из зоны 1 на дырках из зоны 2, можно привести этот гамильтониан к квадратичному виду, вводя соответствующие аномальные средние:

$$H_{int} \sim a_{1\sigma}^+(\mathbf{p}') a_{2\sigma'}^+(\mathbf{p}) a_{2\sigma'}(\mathbf{p}') a_{1\sigma}(\mathbf{p}) \rightarrow \langle a_{2\sigma'}^+(\mathbf{p}) a_{1\sigma}(\mathbf{p}) \rangle a_{1\sigma}^+(\mathbf{p}') a_{2\sigma'}(\mathbf{p}') \quad (6.155)$$

Тогда его можно диагонализировать $u - v$ преобразованием Боголюбова, аналогично тому, как это делается в теории БКШ [11].

Но можно написать и соответствующие уравнения Горькова для гриновских функций обеих зон $G_1(\varepsilon\mathbf{p})$ и $G_2(\varepsilon\mathbf{p})$, вводя также аномальные функции Грина F и F^+ , “перемешивающие” зоны:

$$F(\mathbf{r}_1t_1; \mathbf{r}_2t_2) = -i \langle T\psi_2(\mathbf{r}_2t_2)\psi_1^+(\mathbf{r}_1t_1) \rangle \quad (6.156)$$

$$F^+(\mathbf{r}_1t_1; \mathbf{r}_2t_2) = -i \langle T\psi_1(\mathbf{r}_1t_1)\psi_2^+(\mathbf{r}_2t_2) \rangle \quad (6.157)$$

Далее можно выписать уравнения движения, например для G_1 , и оставить в “правой части” только вклады типа (6.155). Аналогично нужно поступить и с F . В итоге возникают уравнения Горькова вида:

$$(\varepsilon - \varepsilon_1(\mathbf{p}))G_1(\varepsilon\mathbf{p}) - \Delta F(\varepsilon\mathbf{p}) = 1 \quad (6.158)$$

$$(\varepsilon - \varepsilon_2(\mathbf{p}))F(\varepsilon\mathbf{p}) - \Delta^* G_1(\varepsilon\mathbf{p}) = 0 \quad (6.159)$$

где

$$\Delta(\mathbf{p}) = i \int \frac{d\mathbf{p}'d\varepsilon}{(2\pi)^4} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}') F(\mathbf{p}'\varepsilon) \quad (6.160)$$

Решение системы уравнений (6.158) и (6.159) имеет вид:

$$G_1(\varepsilon\mathbf{p}) = \frac{\varepsilon - \varepsilon_2(\mathbf{p})}{\varepsilon^2 - (\varepsilon_1(\mathbf{p}) + \varepsilon_2(\mathbf{p}))\varepsilon + \varepsilon_1(\mathbf{p})\varepsilon_2(\mathbf{p}) - |\Delta(\mathbf{p})|^2} \quad (6.161)$$

$$F(\varepsilon\mathbf{p}) = \frac{\Delta^*(\mathbf{p})}{\varepsilon^2 - (\varepsilon_1(\mathbf{p}) + \varepsilon_2(\mathbf{p}))\varepsilon + \varepsilon_1(\mathbf{p})\varepsilon_2(\mathbf{p}) - |\Delta(\mathbf{p})|^2} \quad (6.162)$$

откуда возникает спектр элементарных возбуждений:

$$E_{1,2}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2}[\varepsilon_1(\mathbf{p}) + \varepsilon_2(\mathbf{p})] \pm \sqrt{\frac{1}{4}[\varepsilon_1(\mathbf{p}) - \varepsilon_2(\mathbf{p})]^2 + |\Delta(\mathbf{p})|^2} \quad (6.163)$$

Решение уравнения для щели дает, как и выше в теории БКШ, $\Delta = \Omega$, где Ω определено в (6.153).

До сих пор рассматривалось взаимодействие типа притяжения. Оказывается, что даже в случае отталкивательного взаимодействия, в системах с “нестингом” поверхностей Ферми возникают неустойчивости, но в “спиновом канале”, ведущие не к CDW, но к переходу в состояние с SDW (A.W.Overhauser, 1965). Для того, чтобы понять это явление, вернемся к полученным выше формулам (2.13), (2.14) для магнитной восприимчивости в системе с “хаббардовским” взаимодействием:

$$\chi(\mathbf{q}\omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}\omega)}{1 + U\Pi_0(\mathbf{q}\omega)} = \frac{\chi_0(\mathbf{q}\omega)}{1 - \frac{4U}{g^2\mu_B^2}\chi_0(\mathbf{q}\omega)} \quad (6.164)$$

Напомним, что в соответствии с принятыми нами определениями $\Pi_0(\mathbf{q}0) < 0$, а с учетом $g = 2$, можно написать $\chi_0 = -\mu_B^2\Pi_0$.

В одномерных, а также в двумерных и трехмерных системах с “нестингом”, магнитная восприимчивость $\chi_0 \sim \Pi_0(\mathbf{q})$ имеет логарифмическую особенность при $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$, где \mathbf{Q} – вектор нестинга. Соответственно, в случае отталкивания ($U > 0$), полная восприимчивость (6.164) имеет полюс (расходимость), того же типа, что имеется в зарядовой функции отклика (диэлектрической проницаемости) в случае притяжения (экситонный изолятор). Здесь эта особенность указывает на тенденцию к магнитному упорядочению — образованию SDW с волновым вектором \mathbf{Q} . Неустойчивость опять возникает даже для сколь угодно слабого отталкивания U . Конечно, при неполном “нестинге” (или даже в его отсутствие) может оказаться, что для возникновения такой неустойчивости требуется достаточно сильное взаимодействие, так чтобы выполнялось условие:

$$U|\Pi_0(\mathbf{Q}, 0)| > 1 \quad (6.165)$$

Это условие применимо и в теории коллективизированного ферромагнетизма, когда $\mathbf{Q} = 0$. Тогда имеем $\Pi_0(\mathbf{q} \rightarrow 0, 0) = -N(E_F)$, так что (6.165) сводится к:

$$UN(E_F) > 1 \quad (6.166)$$

что дает известный критерий Стонера для возникновения ферромагнитного упорядочения.

Формальная сторона дела здесь также аналогична рассмотренному выше случаю пайерлсовского перехода. Для простоты рассмотрим опять одномерный случай и хаббардовское взаимодействие $U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$. В импульсном представлении гамильтониан Хаббарда можно записать как (L – длина системы):

$$H = \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k - \mu) a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma} + \frac{U}{L} \sum_{kk'q} a_{k\uparrow}^{\dagger} a_{k+q\uparrow} a_{k'\downarrow}^{\dagger} a_{k'-q\downarrow} \quad (6.167)$$

Спиновая плотность в точке x определяется как:

$$\begin{aligned} S^z(x) &= \frac{1}{2} [c_{\uparrow}^{\dagger}(x) c_{\uparrow}(x) - c_{\downarrow}^{\dagger}(x) c_{\downarrow}(x)] = \\ &= \frac{1}{2L} \sum_{kk'} [c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{k'\uparrow} - c_{k\downarrow}^{\dagger} c_{k'\downarrow}] e^{-i(k-k')x} \end{aligned} \quad (6.168)$$

Поскольку восприимчивость (6.164) расходится, в данном случае, при $q = 2p_F$, оставим в (6.168) только $k - k' = \pm 2p_F$. Тогда имеем¹¹:

$$S^z(x) = \frac{1}{2L} \sum_k [\langle c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{k+2p_F\uparrow} \rangle - \langle c_{k\downarrow}^{\dagger} c_{k+2p_F\downarrow} \rangle] e^{i2p_F x} + c.c. \quad (6.169)$$

Введем обозначение:

$$\langle S \rangle = |S| e^{i\phi} = \frac{1}{L} \sum_k [\langle c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{k+2p_F\uparrow} \rangle - \langle c_{k\downarrow}^{\dagger} c_{k+2p_F\downarrow} \rangle] \quad (6.170)$$

и выделив соответствующие аномальные средние в гамильтониане (6.167) (оставляя только члены с $q = \pm 2p_F$), получим:

$$H = \sum_{k\sigma} \{ \varepsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + (\Delta a_{k+2p_F\sigma}^+ a_{k\sigma} + h.c.) \} \quad (6.171)$$

где (N – число атомов в цепочке)

$$\Delta = \frac{U}{N} \langle S^z \rangle = \frac{U}{N} \frac{1}{2} \text{Re}(\langle S \rangle e^{i2p_F x}) = \frac{U}{N} |S| \cos(2p_F x + \phi) \quad (6.172)$$

Все эти соотношения являются прямым аналогом (6.46) – (6.50), так что и структура решения совершенно ясна. В частности спектр электронов в такой системе имеет вид:

$$E_k = \mu \pm \sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + |\Delta|^2} \quad (6.173)$$

и изображается тем же Рис. 6-6.

Возникающую здесь магнитную структуру (SDW) можно представить себе как образованную двумя волнами плотности электронов со спинами \uparrow и \downarrow , находящимися в противофазе, так что плотность заряда остается однородной, а спиновая плотность осциллирует с периодом $2\pi/2p_F$ (параметр порядка (6.172)). Такая ситуация называется синусоидальной SDW. В принципе, возможны и другие решения – например, так называемая геликоидальная SDW, в которой величина спина остается неизменной, но его направление вращается в плоскости xy , как это показано на Рис. 6-16:

$$\langle S^x \rangle = |S| \cos(2p_F x + \phi), \quad \langle S^y \rangle = |S| \sin(2p_F x + \phi) \quad (6.174)$$

Обычно такая структура несколько более выгодна по энергии.

Разумеется, стандартным образом можно исследовать и термодинамику таких переходов. В приближении самосогласованного поля возникает критическая температура, при которой SDW исчезает и пропадает щель в электронном спектре. Соответствующие формулы очень похожи на аналогичные выражения в теории БКШ или пайерлсовского перехода. В частности, для температуры перехода получится нечто типа (6.24), с безразмерной константой связи $\lambda = UN(E_F)$.



Что такое псевдощель?

Metal–Insulator Transitions

Second Edition

N. F. MOTT

*Emeritus Cavendish Professor of Physics
University of Cambridge*



16 Pseudogaps and metal–insulator transitions

If a conduction and valence band overlap slightly then a “pseudogap” or minimum in the density of states (Fig. 1.32) is expected, as first suggested by Mott (1966). As long as the overlap is small, one would expect the density of states, all localized, to be the sum of the contributions by the two bands. As the overlap increases, a point will be reached at which states at E_F are no longer localized. At this point a metal–insulator transition of Anderson type is expected.

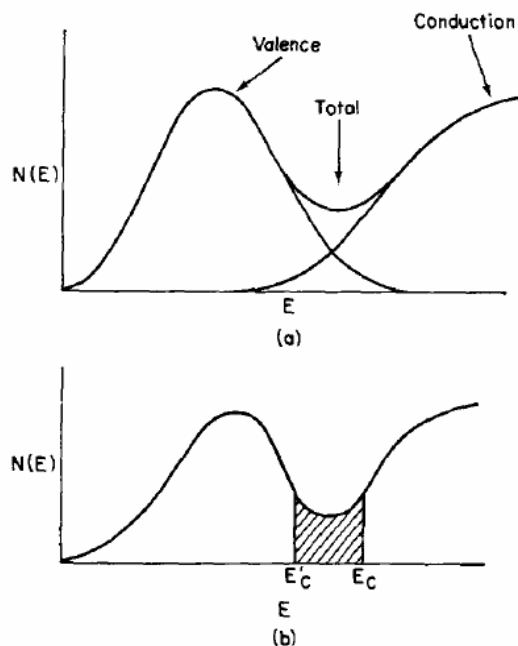


Fig. 1.32 (a) Overlapping bands forming a pseudogap, with localized states at the Fermi energy. (b) Total density of states, with localized states shaded.

Как получить вместо щели псевдощель?

$$V(x) = \Delta e^{i2p_F x} + \Delta^* e^{-i2p_F x} = 2|\Delta| \cos(2p_F x + \phi)$$

Надо сделать амплитуду Δ или фазу ϕ случайными функциями (в общем случае координат и времени)!

При этом дальний порядок не требуется, достаточно медленных флуктуаций ближнего порядка с достаточно большой корреляционной длиной ξ !

Качественное поведение спектральной плотности

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

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

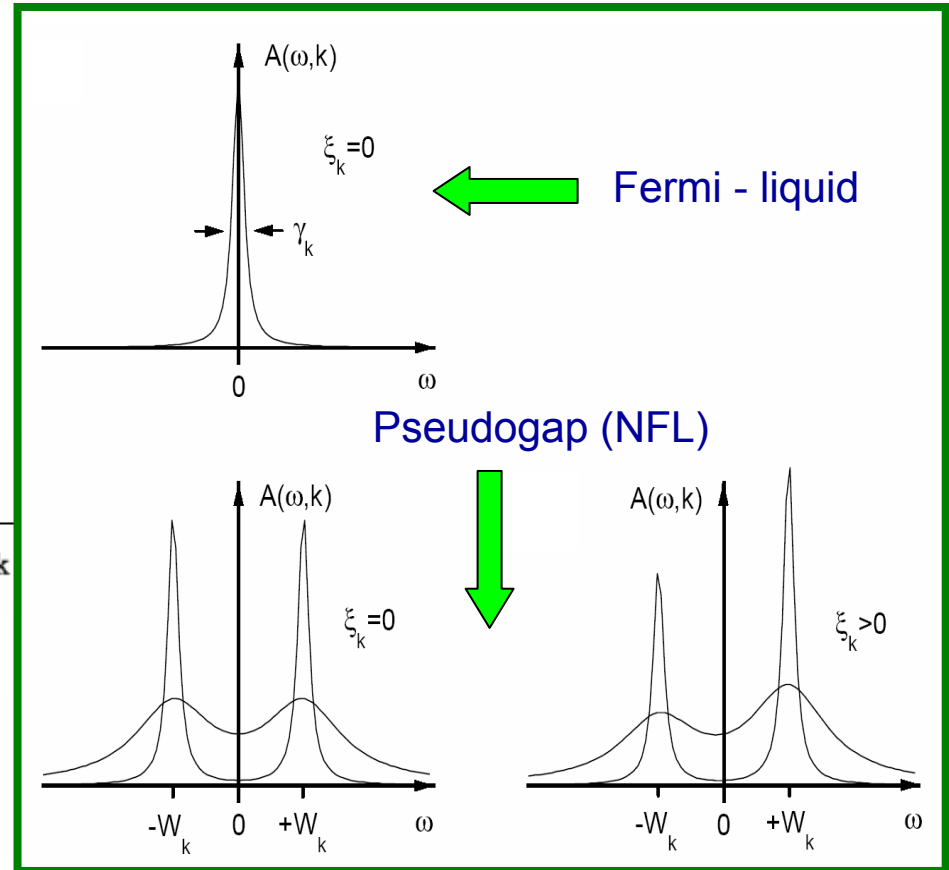
$$G(\omega, \mathbf{k}) = \frac{Z_{\mathbf{k}}}{\omega - \xi_{\mathbf{k}} - i\gamma_{\mathbf{k}}} + G_{\text{incoh}}$$

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

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

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + W_{\mathbf{k}}^2}$$

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



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

Псевдощель.

Флуктуации пайерлсовского ближнего порядка.

Вернемся к рассмотрению одномерной системы с пайерлсовской CDW. Уже не раз отмечалось, что в чисто одномерном случае установление дальнего порядка невозможно. Обсудим на качественном уровне вопрос о том, что же происходит в области температур $T < T_{p0}$, при учете флуктуаций, разрушающих дальний порядок. Запишем снова одномерное разложение ГЛ (6.140) в виде:

$$F(\Delta_Q; T) - F(0; T) = a(T)|\Delta_Q|^2 + c(T)(Q - 2p_F)^2|\Delta_Q|^2 + b(T)|\Delta_Q|^4 \quad (6.175)$$

где коэффициенты $a(T)$, $c(T)$ имеют вид:

$$a(T) = N(E_F) \frac{T - T_{p0}}{T_{p0}}, \quad T_{p0} = \frac{2\gamma}{\pi} E_F e^{-\frac{1}{\lambda}} \quad (6.176)$$

$$c(T) = N(E_F) \xi_0^2(T), \quad \xi_0^2(T) = \frac{7\zeta(3)v_F^2}{16\pi^2 T^2} \quad (6.177)$$

а для коэффициента $b(T)$ напомним следующую интерполяционную формулу (P.A.Lee, T.M.Rice, P.W.Anderson, 1973):

$$b(T) = \left\{ b_0 + (b_1 - b_0) \frac{T}{T_{p0}} \right\} \frac{N(E_F)}{T_{p0}^2}, \quad b_0 = \frac{\gamma^2}{2\pi^2}, \quad b_1 = \frac{7\zeta(3)}{16\pi^2} \quad (6.178)$$

Тогда разложение ГЛ (6.175), формально полученное выше для области $T \sim T_{p0}$, можно применить для качественного анализа при любых температурах. В частности, для $T \rightarrow 0$ получаем:

$$F(\Delta \sim \Delta_0) \approx -\frac{1}{2}N(E_F)\Delta_0^2 + 2N(E_F)(|\Delta| - \Delta_0)^2 + \dots \quad (6.179)$$

где $\Delta_0 = \frac{\pi}{\gamma}T_{p0} = 2E_F e^{-\frac{1}{\lambda}}$ — щель при $T = 0$, полученная в приближении самосогласованного поля. Для температурной зависимости параметра порядка, стандартным образом [11] получаем:

$$\Delta(T) = \begin{cases} 0 & \text{при } T > T_{p0} \\ \left(-\frac{a}{2b}\right)^{1/2} = \left(\frac{N(E_F)}{2b}\right)^{1/2} \left(\frac{T_{p0}-T}{T_{p0}}\right)^{1/2} & \text{при } T \leq T_{p0} \\ \Delta_0 = \frac{\pi}{\gamma}T_{p0} & \text{при } T \ll T_{p0} \end{cases} \quad (6.180)$$

Таким образом, разложение (6.175) – (6.178) качественно воспроизводит результаты приближения самосогласованного поля (микроскопической теории) во всем интервале температур. Но это приближение, как известно, не учитывает флуктуаций, которые играют решающую роль в разрушении дальнего порядка в одномерных системах.

В принципе, в системе могут возникать множество произвольных флуктуаций параметра $\{\Delta_Q\}$. Вероятность конкретной флуктуации Δ_Q определяется как [11]:

$$\mathcal{P}(\Delta_Q) \sim \exp \left\{ -\frac{1}{T}[F(\Delta_Q, T) - F(0, T)] \right\} \quad (6.181)$$

Тогда статсумма системы флуктуаций описывается функциональным интегралом [20] вида:

$$Z = \int \{\delta\Delta_Q\} \exp \left\{ -\frac{1}{T}[F(\Delta_Q, T) - F(0, T)] \right\} \quad (6.182)$$

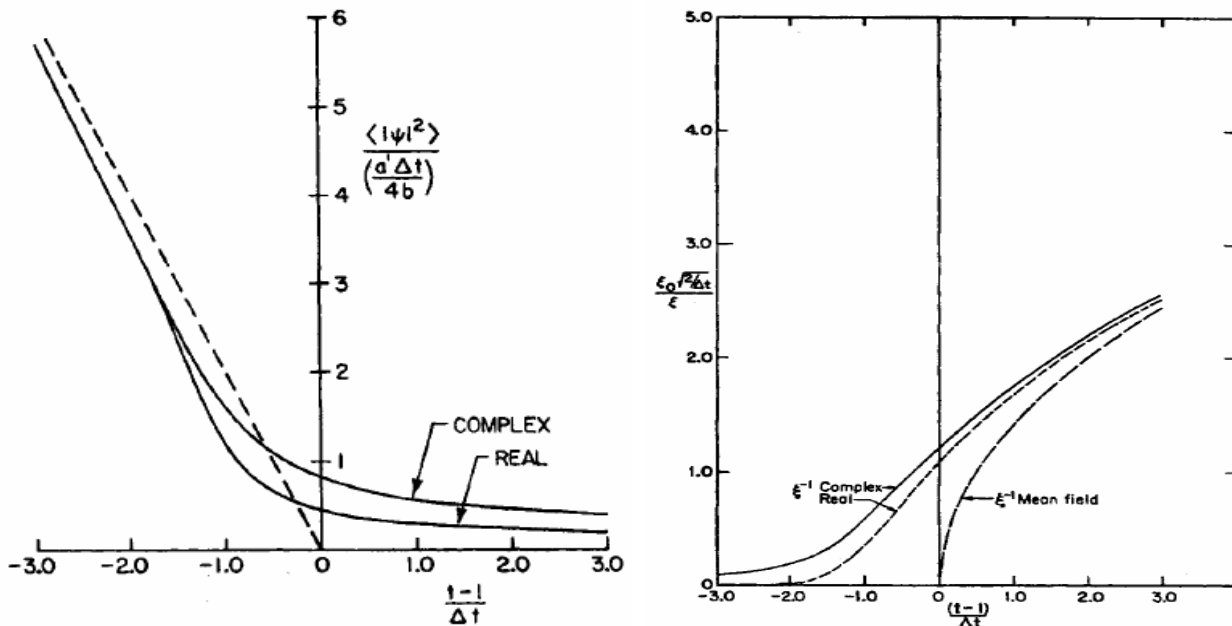
Соответственно, полная свободная энергия системы есть $F = -T \ln Z$.

Для одномерной модели ГЛ типа (6.175) можно провести практически точное рассмотрение (D.J.Scalapino, M.Sears, R.A.Ferrell, 1972). Мы этим заниматься не будем, а приведем только наиболее интересные для нас качественные результаты. Отсутствие дальнего порядка означает равенство нулю термодинамического среднего:

$$\langle \Delta_Q \rangle = \frac{1}{Z} \int \{\delta\Delta_Q\} \Delta_Q \exp \left\{ -\frac{1}{T}[F(\Delta_Q, T) - F(0, T)] \right\} = 0 \quad (6.183)$$

В тоже время среднеквадратичная флуктуация параметра порядка, очевидно, нулю не равна: $\langle |\Delta_Q|^2 \rangle \neq 0$. Соответственно, корреляционная функция флуктуаций параметра порядка, в рассматриваемой модели, равна:

$$\langle \Delta(x)\Delta(x') \rangle = 2 \langle |\Delta|^2 \rangle \exp \left\{ -\frac{|x - x'|}{\xi(T)} \right\} \cos 2p_F(x - x') \quad (6.184)$$



Поведение параметров, определяющих (6.184), показано¹² на Рис. 6-17, 6-18, где $t = \frac{T}{T_{p0}}$, а величина Δt определяет ширину “гинзбурговской” критической области [11], которая в данной модели равна:

$$\Delta t = \frac{\Delta T}{T_{p0}} = 2 \left(\frac{b T_{p0}}{a'^2 \xi_0} \right)^{2/3} \sim 2 \left(\frac{N(E_F) T_{p0}}{T_{p0}^2} \frac{1}{v_F N(E_F)} \right)^{2/3} \sim \left(\frac{1}{N(E_F) v_F} \right)^{2/3} \sim 1 \quad (6.185)$$

где a' определено соотношением $a(T) = a'(t - 1)$, а в последней оценке учтено, что $N(E_F) = \frac{1}{\pi v_F}$. Кстати, то обстоятельство, что ширина гинзбурговской области порядка единицы и соответствует, фактически, отсутствию в системе фазового перехода (дальнего порядка).

Основные качественные выводы из картины, представленной на Рис. 6-17, 6-18 следующие. Грубо можно оценить, что $\langle |\Delta|^2 \rangle \sim \Delta(T) \sim T_{p0}$ в весьма широкой области температур. Корреляционная длина $\xi(T) \sim \xi_0 \sqrt{\frac{T_{p0}}{T - T_{p0}}}$ при $T \gg T_{p0}$, но $\xi(T) \rightarrow \infty$ только при $T \rightarrow 0$. В тоже время, при температурах $T < T_{p0}$, корреляционная длина становится весьма большой — в системе возникают большие области *ближнего порядка*, в которых можно говорить о существовании (флуктуационной) пайерлсовской CDW с волновым вектором $Q \sim 2p_F$.

Электрон в случайном поле флуктуаций.

Рассмотрим электрон, распространяющийся в случайном поле флуктуаций $\Delta(x)$, которые будем считать гауссовыми. Тогда задачу можно решать, пользуясь обычной “примесной” диаграммной техникой, причем линии взаимодействия (рассеяния) сопоставляется коррелятор (6.184). В импульсном представлении линии взаимодействия следует сопоставить фурье – образ (6.184):

$$S(Q) = 2\Delta^2 \left\{ \frac{\kappa}{(Q - 2p_F)^2 + \kappa^2} + \frac{\kappa}{(Q + 2p_F)^2 + \kappa^2} \right\} \quad (6.196)$$

где $\kappa = \xi^{-1}(T)$, а $\langle |\Delta|^2 \rangle$ для краткости обозначено как Δ^2 . В дальнейшем мы рассмотрим чрезвычайно упрощенный, но весьма поучительный, вариант такой модели, соответствующий пределу $\xi \rightarrow \infty$ ($\kappa \rightarrow 0$), т.е. в асимптотике очень больших корреляционных длин флуктуаций ближнего порядка¹³. Оказывается, что такая задача допускает точное решение, мы можем просуммировать *все* фейнмановские графики теории возмущений с “взаимодействием” вида (6.196), которое переходит в рассматриваемом пределе в¹⁴:

$$S(Q) = 2\pi\Delta^2 \{ \delta(Q - 2p_F) + \delta(Q + 2p_F) \} \quad (6.197)$$

Гауссово случайное поле флуктуаций

! простейшая *факторизация* корреляторов случайного поля (4.7) “по Вику”:

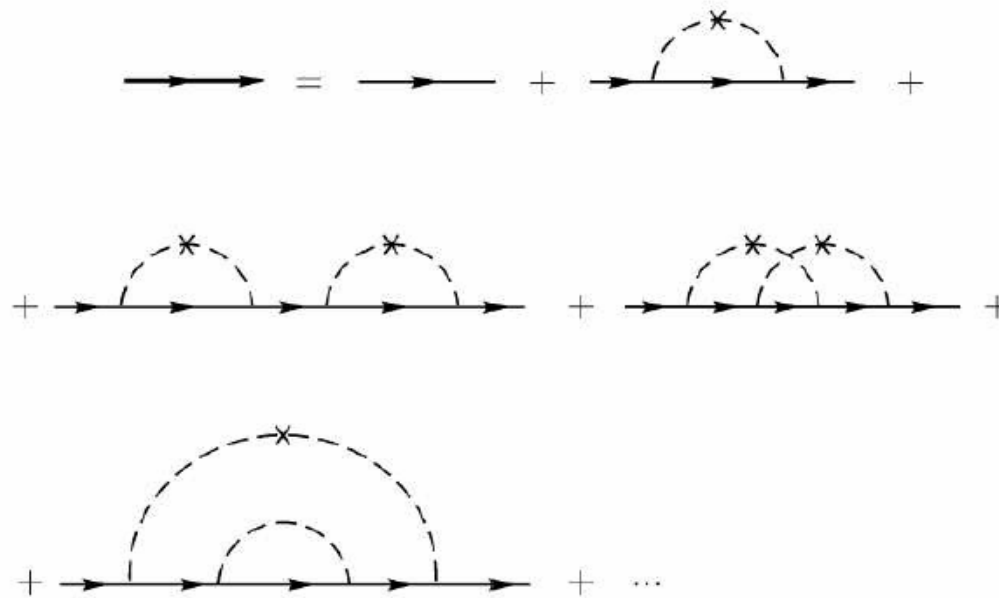
$$\langle V(1)V(2) \rangle \neq 0$$

$$\langle V(1) \rangle = 0 \quad \langle V(1)V(2)V(3) \rangle = 0$$

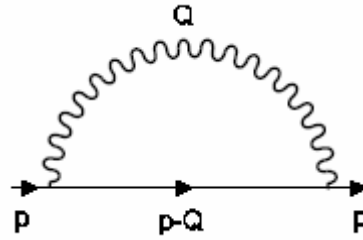
– и т. д. для всех нечетных степеней,

$$\langle V(1)V(2)V(3)V(4) \rangle = \langle V(1)V(2) \rangle \langle V(3)V(4) \rangle + \langle V(1)V(4) \rangle \langle V(2)V(3) \rangle$$

– и т. п. для всех четных степеней.



Диаграммное разложение усредненной функции Грина в гауссовом случайном поле.



Рассмотрим простейший вклад в собственно – энергетическую часть электрона, изображаемый диаграммой Рис. 6-20, который пишем в мацубаровской технике:

$$\begin{aligned}
 \Sigma(\varepsilon_n p) &= \int \frac{dQ}{2\pi} S(Q) \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{p-Q}} \approx 2\Delta^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} \frac{\kappa}{x^2 + \kappa^2} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p - v_F x} = \\
 &= 2\Delta^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} \frac{\kappa}{(x - i\kappa)(x + i\kappa)} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p - v_F x} = \\
 &= \frac{\Delta^2}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa} \quad (6.198)
 \end{aligned}$$

где, для определенности, полагали $p \sim +p_F$, $\varepsilon_n > 0$ и определили новую переменную интегрирования x с помощью $Q = 2p_F + x$ (полезно еще раз взглянуть на Рис.

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

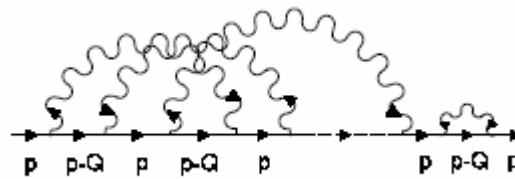
$$v_F \kappa = v_F \xi^{-1} \ll \text{Max}\{2\pi T, \xi_p\} \quad (6.199)$$

или

$$v_F \kappa = v_F \xi^{-1} \ll 2\pi T, \quad \xi(T) \gg |p - p_F|^{-1} \quad (6.200)$$

Тогда (6.198) переходит в:

$$\Sigma(\varepsilon_n p) \approx \frac{\Delta^2}{i\varepsilon_n + \xi_p} \quad (6.201)$$



Теперь для “взаимодействия” (6.197) нет проблем выписать вклад графика любого порядка для функции Грина, типа показанного на Рис. 6-21. В таком графике n -го порядка по $S(Q)$ имеется всего $2n$ вершин, соединенных между собой линиями взаимодействия всеми возможными способами. При этом эти линии поочередно “уносят” и “приносят” импульсы $Q = 2p_F$ ¹⁵. В результате, в соответствующем аналитическом выражении для такого графика возникает последовательность чередующихся функций Грина вида $\frac{1}{i\epsilon_n - \xi_p}$ (n штук) и $\frac{1}{i\epsilon_n + \xi_p}$ (тоже n штук), плюс еще одна (начальная) $\frac{1}{i\epsilon_n - \xi_p}$ ¹⁶. Кроме того, есть еще множитель Δ^{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 тождество¹⁷:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n! z^n = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} (\zeta z)^n = \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} \frac{1}{1 - \zeta z} \quad (6.202)$$

Тогда легко суммируем *весь* ряд для функции Грина и получаем точное решение рассматриваемой задачи (М.В.Садовский, 1974)¹⁸:

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

где использовали обозначение:

$$z(\epsilon_l, \xi_p) = \Delta^2 G_0(\epsilon_l, \xi_p) G_0(\epsilon_l, -\xi_p)$$



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

$$G_{\Delta^2}(\varepsilon l p) = \frac{i\varepsilon_l + \xi_p}{(i\varepsilon_l)^2 - \xi_p^2 - \Delta^2} \quad (6.205)$$

под знаком “усреднения”:

$$\langle \dots \rangle_\zeta = \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \dots \quad (6.206)$$



(6.203) представляет собой функцию Грина электрона, движущегося во внешнем поле вида $2W \cos(2p_F x + \phi)$, амплитуда которого “флуктуирует” с так называемым распределением Рэлея¹⁹:

$$\mathcal{P}(W) = \frac{2W}{\Delta^2} e^{-\frac{W^2}{\Delta^2}} \quad (6.207)$$

а фаза ϕ распределена однородно на интервале от 0 до 2π .

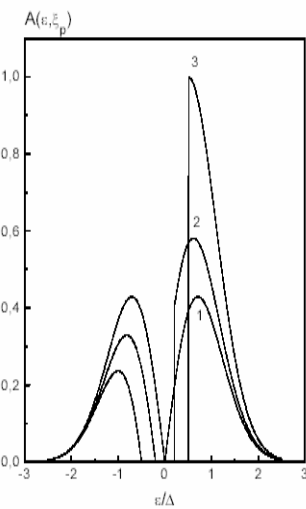
Выполняя аналитическое продолжение $i\varepsilon_l \rightarrow \varepsilon \pm i\delta$ из (6.203) получаем для $\varepsilon > 0$:

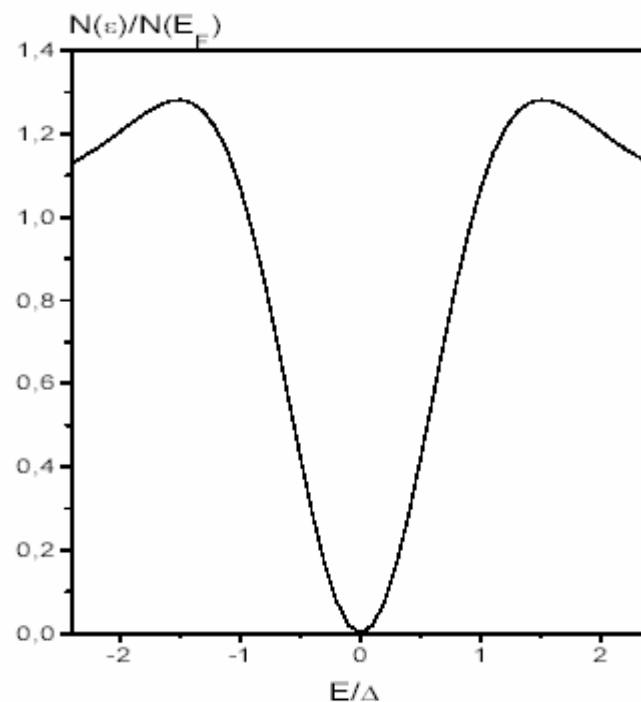
$$\begin{aligned} \text{Im}G^{R,A}(\varepsilon\xi_p) &= \mp\pi(\varepsilon + \xi_p) \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \delta(\varepsilon^2 - \xi_p^2 - \zeta\Delta^2) = \\ &= \mp\frac{\pi}{\Delta^2}(\varepsilon + \xi_p)\theta(\varepsilon^2 - \xi_p^2)e^{-\frac{\varepsilon^2 - \xi_p^2}{\Delta^2}} \end{aligned} \quad (6.208)$$

так что спектральная плотность

$$A(\varepsilon\xi_p) = -\frac{1}{\pi}\text{Im}G^R(\varepsilon\xi_p) \quad (6.209)$$

имеет “нефермижидкостный” вид, показанный на Рис. 6-22.





Плотность состояний электронов имеет вид:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0(E_F)} = \left| \frac{\varepsilon}{\Delta} \right| \int_0^{\frac{\varepsilon^2}{\Delta^2}} d\zeta \frac{e^{-\zeta}}{\sqrt{\frac{\varepsilon^2}{\Delta^2} - \zeta}} = 2 \left| \frac{\varepsilon}{\Delta} \right| \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{\Delta^2}\right) \operatorname{Erfi}\left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right) =$$

$$= \begin{cases} 1 & \text{при } |\varepsilon| \rightarrow \infty \\ \frac{2\varepsilon^2}{\Delta^2} & \text{при } |\varepsilon| \rightarrow 0 \end{cases} \quad (6.211)$$

где $N_0(E_F)$ – плотность состояний свободных электронов на уровне Ферми, а $\operatorname{Erfi}(x) = \int_0^x dx e^{x^2}$ – интеграл вероятностей от мнимого аргумента. Характерный вид этой плотности состояний показан на Рис. 6-23 и демонстрирует наличие размытой (“мягкой”) *псевдощели* в окрестности уровня Ферми. По сути дела, это есть плотность состояний пайерлсовского диэлектрика (6.77), показанная выше на Рис. 6-9, усредненная по флуктуациям щели, определяемым распределением (6.207)²⁰.

Обобщение этих результатов на случай конечных корреляционных длин $\xi(T)$ (или конечных κ) существенно сложнее (М.В.Садовский, 1979). Прежде всего, попробуем разобраться как вычисляется вклад диаграммы произвольного порядка. К сожалению, эту задачу нельзя решить точно, поскольку интегрирования становятся все более громоздкими с ростом порядка диаграммы. Однако оказывается, что можно сформулировать некоторый весьма эффективный приближенный *Ansatz*, позволяющий выписать явное выражение для любой диаграммы произвольного порядка. На Рис. 6.24 приведены все существенные диаграммы третьего порядка. Предположим, что мы имеем дело с линеаризованным спектром свободных электронов, показанным на Рис. 6.3, и рассмотрим случай, когда вектор рассеяния $Q < p_F$, так что рассеяние электронов происходит только на одной (“правой” или “левой”) ветви спектра. В этом случае мы можем рассчитать вклад произвольной диаграммы, типа показанных на Рис. 6.24, поскольку в этом случае мы можем гарантировать что ненулевой вклад в интегралы возникает только от полюсов лорентцианов $S(Q)$, как в (6.198). Это связано с тем, что для электрона, рассеивающегося в пределах одной ветви спектра, скорость не меняет знак. Например, элементарные вычисления показывают, что вклад диаграммы Рис. 6.24 (d) имеет вид:

$$\Delta^6 \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{p-Q} + iv_{F\kappa}} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_{F\kappa}} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{p-Q} + 3iv_{F\kappa}} \times$$

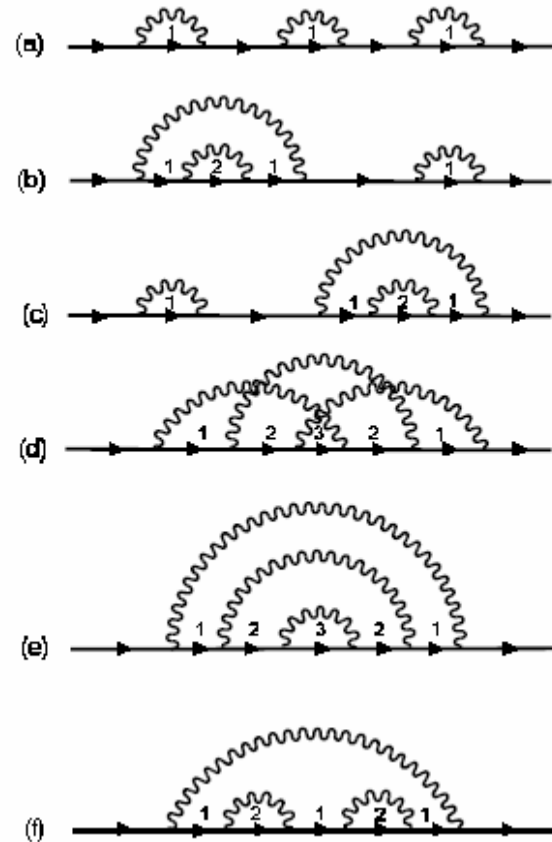
$$\times \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_{F\kappa}} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{p-Q} + iv_{F\kappa}} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p}$$
(6.212)

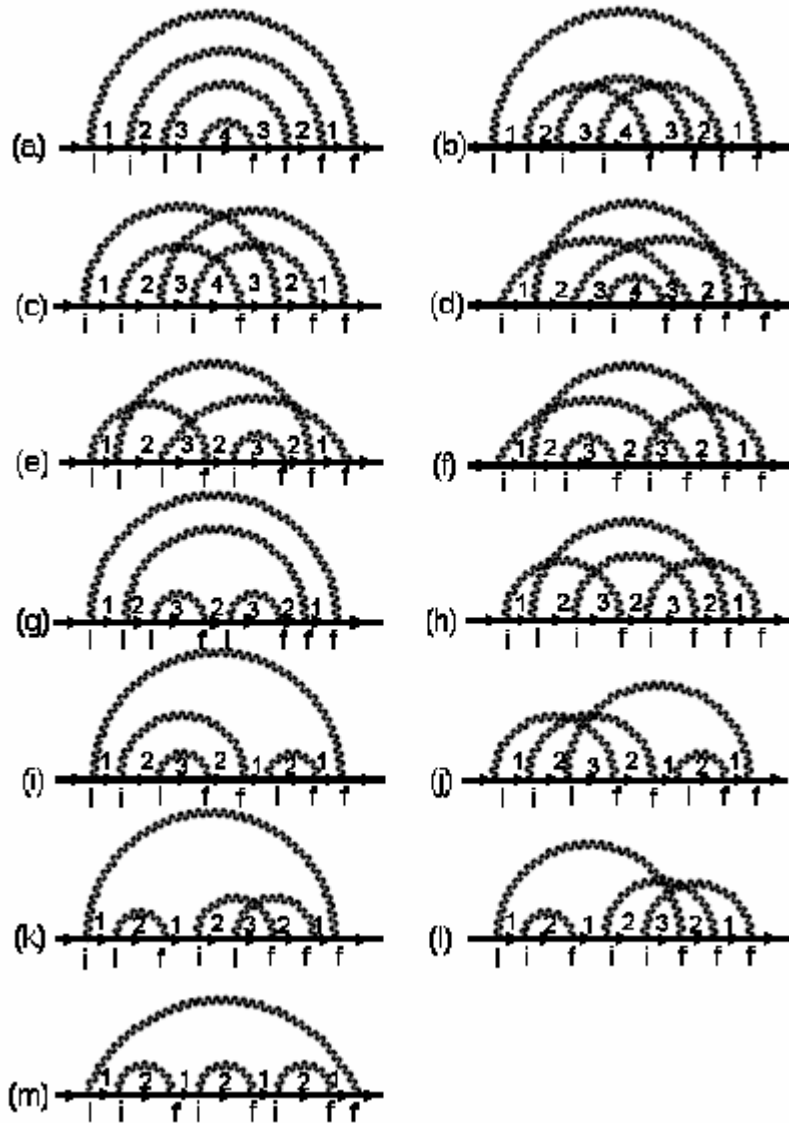
Предположим теперь, что ξ_p и ξ_{p-Q} в (6.212) представляют собой “реальный” спектр электрона, который, конечно, является непрерывной функцией импульса p . Тогда мы можем просто *продолжить* (6.212) на *любые* значения Q , включая $Q = 2p_F$. В этом случае, вместо (6.212) мы немедленно получаем (вспоминая условие “нестинга” (6.61)!):

$$\Delta^6 \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_{F\kappa}} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_{F\kappa}} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p + 3iv_{F\kappa}} \times$$

$$\times \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_{F\kappa}} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_{F\kappa}} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p}$$
(6.213)

В этом и состоит смысл нашего *Ansatz'a*! Фактически, он является точным в пределе $\xi \rightarrow \infty$ (или $\kappa \rightarrow 0$), что очевидно из прямого сравнения с результатами рассмотрения этого предела, проведенного выше. Таким образом, для $Q = 2p_F$ мы точно учитываем рассеяние назад (с одной ветви спектра на другую) на вектор Q , а приближенно учитываются только малые (при больших ξ , или малых κ) “отклонения” от вектора рассеяния $Q = 2p_F$.





В четвертом порядке имеется $4! = 24$ существенных диаграмм, из них все неприводимые диаграммы для собственно – энергетической части показаны на Рис. 6.25. Соответствующие вклады легко находятся и аналогичны по форме вкладам третьего порядка, причем цифры над электронными линиями здесь имеют тот же смысл, что и на Рис. 6.24. Более того, снова вклады целого ряда диаграмм равны между собой: (a)=(b)=(c)=(d); (e)=(f)=(g)=(h); (i)=(j); (k)=(l).

Теперь становится ясным общее правило, пользуясь которым можно выписать вклад произвольной диаграммы. Фактически, он определяется расстановкой “начальных” и “конечных” вершин (на Рис. 6.25 они обозначены буквами i и f). Каждая электронная линия, следующая за вершиной типа i приобретает дополнительный вклад $i v_{Fk}$ в знаменатель, а в знаменателе электронной линии, следующей за вершиной типа f , такой вклад вычитается.

Более того, любая диаграмма с перекрывающимися линиями взаимодействия может быть однозначно представлена некоторой диаграммой без пересечений. Рецепт построения такой диаграммы (без пересечений) для данной последовательности i и f вершин может быть сформулирован следующим образом: начиная слева, первая конечная вершина соединяется линией взаимодействия с ближайшей к ней слева начальной вершиной, и так далее для оставшихся несоединенными вершин. Например, диаграммы Рис. 6.25 (b), (c), (d) сводятся к диаграмме Рис. 6.25 (a), а диаграммы Рис. 6.25 (e), (f) сводятся к диаграмме Рис. 6.25 (g), и т.д. Для фиксированного расположения начальных вершин, конечные вершины выбираются из точек с (номера) противоположной четности (поскольку мы сейчас ограничиваемся рассмотрением несоизмеримого случая). Числа, приписанные электронным линиям на Рис. 6.24 и 6.25 могут быть перенесены на вершины, если мы припишем им число вкладов $i v_{Fk}$, появляющихся в знаменателе, соответствующем линии, следующей за рассматриваемой вершиной. Общее правило выглядит так: начальной вершине приписывается число $N_n = N_{n-1} + 1$, где N_{n-1} есть число, приписанное ближайшей вершине слева. Конечной вершине приписывается число $N_n - 1$. При этом $N_0 = 0$, а n – порядковый номер вершины.

Определим:

$$v(k) = \begin{cases} \frac{k+1}{2} & \text{для нечетных } k \\ \frac{k}{2} & \text{для четных } k. \end{cases} \quad (6.214)$$

Тогда можно убедиться, что число неприводимых диаграмм для собственно – энергетической части равных заданной диаграмме без пересечений линий взаимодействия равно произведению множителей $v(N_n)$, сопоставляемых всем начальным вершинам данной диаграммы (П.В.Елютин, 1977)²⁰. Соответственно, все дальнейшие рассуждения можно вести в терминах диаграмм без пересечений линий взаимодействия, начальным вершинам которых приписаны дополнительные множители $v(N_n)$.

Любая диаграмма для неприводимой собственно – энергетической части, будучи перестроена описанным выше образом, содержит линию взаимодействия, охватывающую все остальные, т.е. сводящуюся к форме, показанной на Рис. 6.26 (а). Теперь мы можем вывести рекуррентное уравнение, определяющее неприводимую собственно – энергетическую часть, включающую все диаграммы соответствующего фейнмановского ряда. По определению неприводимой собственно – энергетической части, мы можем записать уравнение Дайсона для гриновской функции в виде:

$$G^{-1}(\varepsilon_n, \xi_p) = G_0^{-1}(\varepsilon_n, \xi_p) - \Sigma_1(\varepsilon_n, \xi_p) \quad (6.215)$$

где

$$\Sigma_1(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{\Delta^2}{(i\varepsilon_n + \xi_p - iv_F\kappa)^2} \Xi_1(\varepsilon_n, \xi_p) = \Delta^2 G_0^2(\varepsilon_n, -\xi_p - iv_F\kappa) \Xi_1(\varepsilon_n, \xi_p), \quad (6.216)$$

а для $\Xi_1(\varepsilon_n, \xi_p)$ имеем разложение, показанное графически на Рис. 6.26 (b) в терминах диаграмм без пересечений линий взаимодействия, с дополнительными множителями $v(N_n)$, приписанными к вершинам. Это разложение может быть обычным образом выражено через соответствующие неприводимые диаграммы:

$$\Xi_1(\varepsilon_n, \xi_p) = G_0^{-2}(\varepsilon_n, -\xi_p - iv_F\kappa) \{G_0^{-1}(\varepsilon_n, -\xi_p - iv_F\kappa) - \Sigma_2(\varepsilon_n, \xi_p)\}^{-1} \quad (6.217)$$

где $G_0(\varepsilon_n, \xi_p)$ обозначает функцию Грина свободного электрона, а $\Sigma_2(\varepsilon_n, \xi_p)$ выражается суммой неприводимых диаграмм, показанной на Рис. 6.26 (c):

$$\Sigma_2(\varepsilon_n, \xi_p) = \Delta^2 v(2) G_0^2(\varepsilon_n, \xi_p - 2iv_F\kappa) \Xi_2(\varepsilon_n, \xi_p) \quad (6.218)$$

$$\Xi_2(\varepsilon_n, \xi_p) = G_0^{-2}(\varepsilon_n, \xi_p - 2iv_F\kappa) \{G_0^{-1}(\varepsilon_n, \xi_p - 2iv_F\kappa) - \Sigma_3(\varepsilon_n, \xi_p)\}^{-1} \quad (6.219)$$

и т.д. Окончательно имеем:

$$\Xi_k(\varepsilon_n, \xi_p) = G_0^{-2}(\varepsilon_n, (-1)^k \xi_p - ikv_F\kappa) \{G_0^{-1}(\varepsilon_n, (-1)^k \xi_p - ikv_F\kappa) - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n, \xi_p)\}^{-1} \quad (6.221)$$

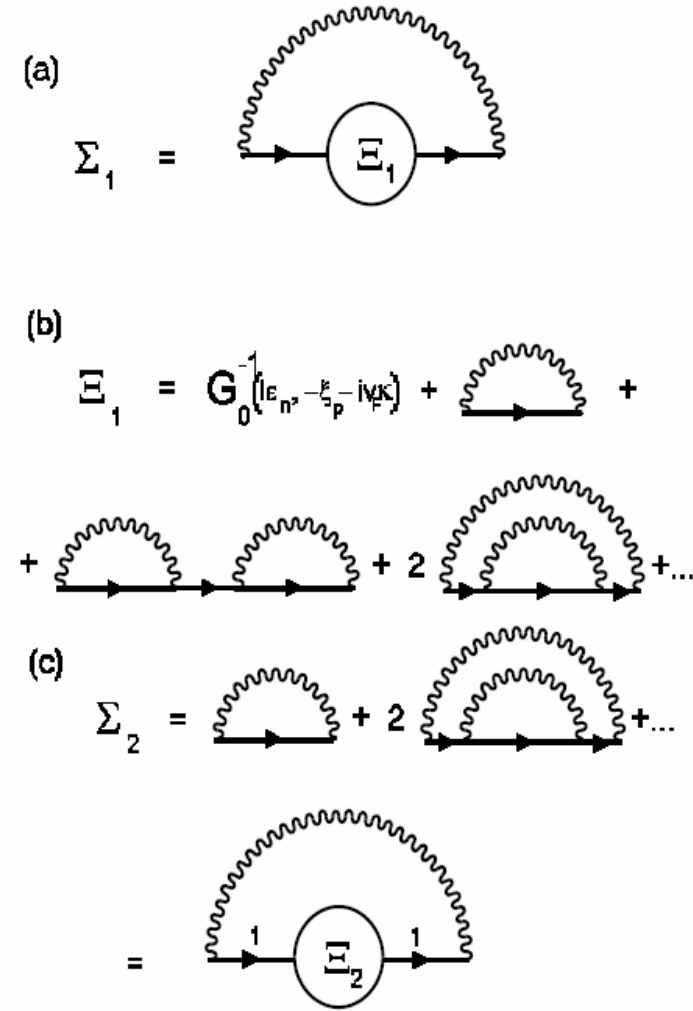
и мы получаем фундаментальное рекуррентное соотношение для собственно – энергетической части (М.В.Садовский, 1979):

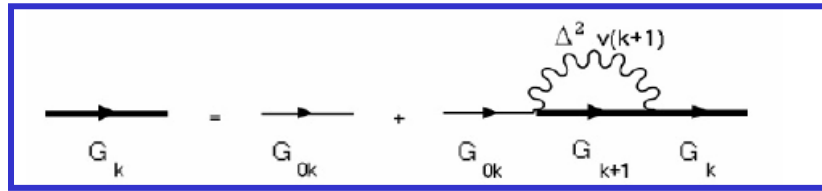
$$\Sigma_k(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{\Delta^2 v(k)}{G_0^{-1}(\varepsilon_n, (-1)^k \xi_p - ikv_F\kappa) - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n, \xi_p)} \quad (6.222)$$

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

$$G_k(\varepsilon_n, \xi_p) = \{i\varepsilon_n - (-1)^k \xi_p + ikv_F\kappa - \Delta^2 v(k+1) G_{k+1}(\varepsilon_n, \xi_p)\}^{-1}, \quad (6.223)$$

причем физическая функция Грина определяется как $G(\varepsilon_n, \xi_p) \equiv G_{k=0}(\varepsilon_n, \xi_p)$, что эквивалентно полной сумме всего фейнмановского диаграммного ряда для рассматриваемой модели. Фактически, эти рекуррентные уравнения дают представление одноэлектронной функции Грина в виде следующей цепной дроби:





$$\Sigma_k(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{\Delta^2 v(k)}{G_0^{-1}(\varepsilon_n, (-1)^k \xi_p - ikv_F \kappa) - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n, \xi_p)} \quad (6.222)$$

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

$$G_k(\varepsilon_n, \xi_p) = \{i\varepsilon_n - (-1)^k \xi_p + ikv_F \kappa - \Delta^2 v(k+1)G_{k+1}(\varepsilon_n, \xi_p)\}^{-1}, \quad (6.223)$$

причем физическая функция Грина определяется как $G(\varepsilon_n, \xi_p) \equiv G_{k=0}(\varepsilon_n, \xi_p)$, что эквивалентно полной сумме всего фейнмановского диаграммного ряда для рассматриваемой модели.

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

(6.224)

Символически, наше рекуррентное уравнение может быть представлено в виде “уравнения Дайсона”, показанного графически на Рис. 6.27.

При $\kappa = 0$ мы можем воспользоваться известным представлением неполной Γ – функции в виде цепной дроби:

$$\Gamma(\alpha, x) = \int_x^\infty dt e^{-t} t^{\alpha-1} = \frac{x^\alpha}{x + \frac{1-\alpha}{1 + \frac{1-\alpha}{x + \frac{2-\alpha}{1+\dots}}}} \quad (6.225)$$

и соотношением $\Gamma(0, x) = -Ei(-x)$, чтобы убедиться, что (6.224), после обычного аналитического продолжения $i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon + i\delta$, сводится к (6.210), (6.208), воспроизводя полученный выше точный результат (6.203).

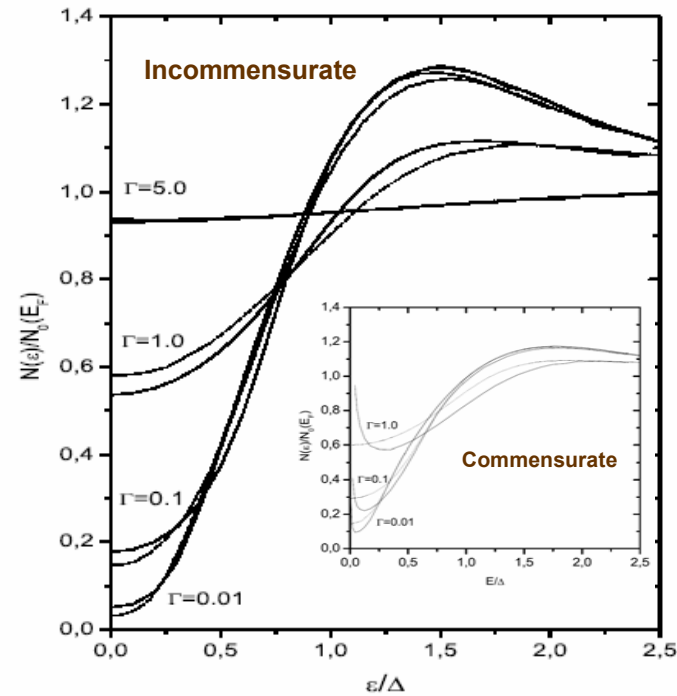
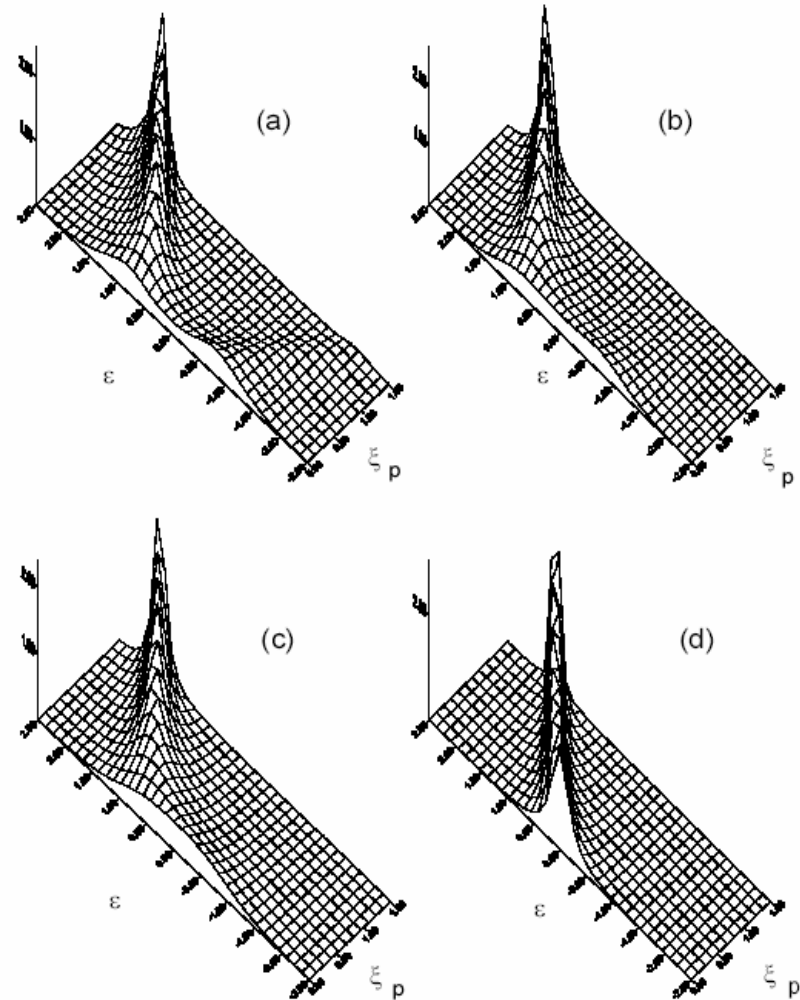
Пользуясь фундаментальным рекуррентным соотношением (6.222), после аналитического продолжения $i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon + i\delta$, получаем систему рекуррентных соотношений для действительной и мнимой частей собственно – энергетической части:

$$Re\Sigma_k(\varepsilon, \xi_p) = \frac{\Delta^2 v(k)[\varepsilon - (-1)^k \xi_p - Re\Sigma_{k+1}(\varepsilon, \xi_p)]}{[\varepsilon - (-1)^k \xi_p - Re\Sigma_{k+1}(\varepsilon, \xi_p)]^2 + [kv_F \kappa - Im\Sigma_{k+1}(\varepsilon, \xi_p)]^2} \quad (6.226)$$

$$Im\Sigma_k(\varepsilon, \xi_p) = \frac{-\Delta^2 v(k)[kv_F \kappa - Im\Sigma_{k+1}(\varepsilon, \xi_p)]}{[\varepsilon - (-1)^k \xi_p - Re\Sigma_{k+1}(\varepsilon, \xi_p)]^2 + [kv_F \kappa - Im\Sigma_{k+1}(\varepsilon, \xi_p)]^2} \quad (6.227)$$

$$A(\varepsilon, \xi_p) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^R(\varepsilon, \xi_p) = \frac{\text{Im} \Sigma_1(\varepsilon, \xi_p)}{[\varepsilon - \xi_p - \text{Re} \Sigma_1(\varepsilon, \xi_p)]^2 + [\text{Im} \Sigma_1(\varepsilon, \xi_p)]^2}$$

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



Двумерные поверхности спектральной плотности $A(\varepsilon, \xi_p)$ для: (a) — $\Gamma = 0.1$; (b) — $\Gamma = 0.5$; (c) — $\Gamma = 1.0$; (d) — $\Gamma = 5.0$. Все энергии приведены в единицах Δ .

Плотность состояний с псевдощелью для различных значений $\Gamma = v_F \kappa / \Delta$. Сплошные линии — наше приближение. Пунктирные линии — результаты точного численного моделирования (L.Bartosch, P.Kopietz, 1999).

Модель негауссовых флуктуаций

Пусть электрон совершает одномерное движение в периодическом поле вида

$$V(x) = 2D \cos(Qx + \phi). \quad (1)$$

Выберем $Q = 2p_F - k$, где p_F — импульс Ферми, а $k \ll p_F$ — некоторая отстройка от выделенного вектора рассеяния $2p_F$. Электронный спектр выберем в обычном, линеаризованном вблизи уровня Ферми, виде

$$\begin{aligned} \xi_1 &\equiv \xi_p = v_F(|p| - p_F), \\ \xi_{p-2p_F} &= -\xi_p \quad (\text{нестинг}), \\ \xi_2 &\equiv \xi_{p-Q} = -\xi_p - v_F k \equiv -\xi_p - \eta, \end{aligned} \quad (2)$$

где введена переменная $\eta = v_F k$ (v_F — скорость Ферми), которая будет широко использоваться в дальнейшем. Поле (1) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} V(x) &= D \exp(i2p_F x - ikx) + \\ &\quad + D^* \exp(-i2p_F x + ikx), \end{aligned} \quad (3)$$

где в результате замены $D \rightarrow D e^{i\phi}$ введена комплексная амплитуда.

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

$$\begin{aligned}
 g_{11}(i\varepsilon_n pp) &= \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_1} + \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_1} \times \\
 &\times D^* \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_2} D \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_1} + \dots = \\
 &= \frac{i\varepsilon_n - \xi_2}{(i\varepsilon_n - \xi_1)(i\varepsilon_n - \xi_2) - |D|^2} = \\
 &= \frac{i\varepsilon + \xi + \eta}{(i\varepsilon - \xi)(i\varepsilon + \xi + \eta) - |D|^2}, \quad (4)
 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
 g_{12}(i\varepsilon_n pp - Q) &= \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_1} D^* \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_2} + \dots = \\
 &= \frac{D^*}{(i\varepsilon_n - \xi_1)(i\varepsilon_n - \xi_2) - |D|^2} = \\
 &= \frac{D^*}{(i\varepsilon - \xi)(i\varepsilon + \xi + \eta) - |D|^2}. \quad (5)
 \end{aligned}$$

Пусть теперь поле (1) является случайным. Рассмотрим вслед за [15] весьма специфическую модель беспорядка, в которой случайным считается вектор отстройки k , причем его функция распределения задается в виде лоренциана²⁾:

$$\mathcal{P}_k(k) = \frac{1}{\pi} \frac{\kappa}{k^2 + \kappa^2}, \quad (6)$$

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

$$\mathcal{P}_\phi(\phi) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} & \text{при } 0 \leq \phi \leq 2\pi, \\ 0 & \text{при остальных значениях.} \end{cases} \quad (7)$$

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

$$\begin{aligned}
 \langle V(x)V(x') \rangle &= 2D^2 \cos[2p_F(x - x')] \times \\
 &\times \exp[-\kappa|x - x'|], \quad (8)
 \end{aligned}$$

где угловые скобки обозначают усреднение по функциям распределения (6) и (7).

Функции Грина, усредненные по ансамблю случайных полей вида (1) с распределениями (6) и (7), вычисляются путем элементарного интегрирования. При этом среднее от аномальной функции Грина (5) просто равно нулю (после усреднения по (7)), что соответствует отсутствию дальнего диэлектрического порядка. Усредненная функция Грина (4) легко получается почленным интегрированием ряда (4) по (6) и равна

$$\begin{aligned}
 G(i\varepsilon_n p) &= \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} + \\
 &+ \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} D^* \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa} D \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} + \\
 &+ \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} D^* \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa} D \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} \times \\
 &\times D^* \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa} D \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} + \dots = \\
 &= \frac{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa}{(i\varepsilon_n - \xi_p)(i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa) - |D|^2}. \quad (10)
 \end{aligned}$$

$$\mathcal{P}_D(D) = \frac{2D}{W^2} \exp\left(-\frac{D^2}{W^2}\right). \quad (11)$$

Усреднение корреляторов (8) и (9) приводит при этом к простой замене $D \rightarrow W$. Усредненная функция Грина электрона теперь имеет вид

$$\begin{aligned}
 G(i\varepsilon_n p) &= \int_0^\infty dD \mathcal{P}_D(D) \times \\
 &\times \frac{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa}{(i\varepsilon_n - \xi_p)(i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa) - |D|^2} = \\
 &= \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \frac{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa}{(i\varepsilon_n - \xi_p)(i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa) - \zeta W^2}, \quad (12)
 \end{aligned}$$

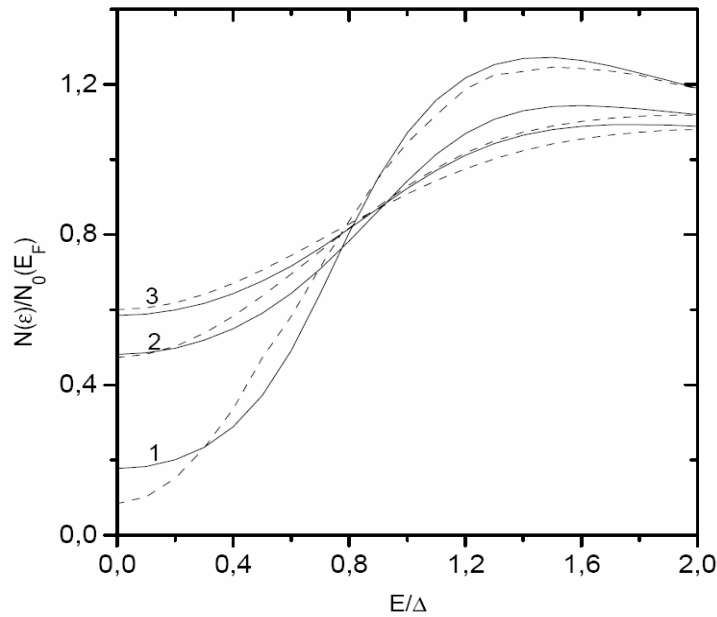
где W определяет теперь энергетическую ширину псевдощели. В пределе больших корреляционных длин флуктуаций поля (1), т.е. при $\xi_{corr} \rightarrow \infty$ ($\kappa \rightarrow 0$), решение (12) совпадает с найденным в работах [7] для случая гауссовского случайного поля.

$$\Sigma_{\alpha}^{\text{ph+am}}(q, \omega + i0^+) =$$

$$\frac{\Delta_s^2}{\omega + \alpha v_F q + i \frac{v_F}{\xi} - \frac{\Delta_s^2}{\omega - \alpha v_F q - \frac{\Delta_s^2}{\omega + \alpha v_F q + i \frac{v_F}{\xi} - \frac{\Delta_s^2}{\omega - \alpha v_F q - \frac{\Delta_s^2}{\omega + \alpha v_F q + i \frac{v_F}{\xi} - \frac{\Delta_s^2}{\omega - \alpha v_F q - \frac{\Delta_s^2}{\omega + \alpha v_F q + i \frac{v_F}{\xi} - \dots}}}}$$

$$\Sigma_{\alpha}^{\text{Sadovskii}}(q, \omega + i0^+) =$$

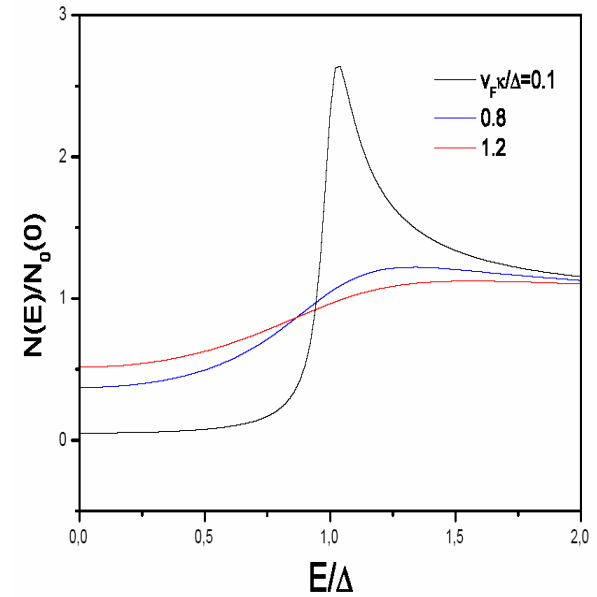
$$\frac{\Delta_s^2}{\omega + \alpha v_F q + i \frac{v_F}{\xi} - \frac{\Delta_s^2}{\omega - \alpha v_F q + 2i \frac{v_F}{\xi} - \frac{\Delta_s^2}{\omega + \alpha v_F q + 3i \frac{v_F}{\xi} - \frac{\Delta_s^2}{\omega - \alpha v_F q + 4i \frac{v_F}{\xi} - \frac{\Delta_s^2}{\omega + \alpha v_F q + 5i \frac{v_F}{\xi} - \dots}}}}$$



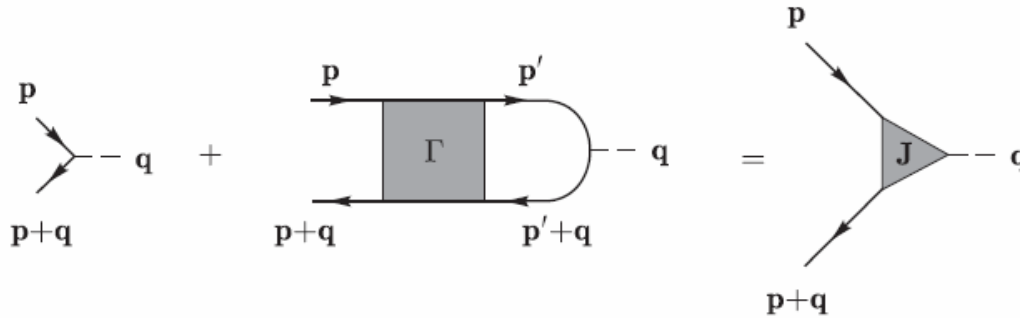
Одноэлектронная плотность состояний в одномерной модели при различных значениях параметра $v_F \kappa / \Delta$:

(1)–0.1; (2)–0.8; (3)–1.2.

Сплошные линии — результат расчета по формулам типа (6.224), пунктирные кривые — результат расчета по (12).



ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЙ ОТКЛИК



Изменение функции Грина во внешнем электромагнитном поле

Вообще удобно ввести общее определение вершины:

$$J^\mu(p; p+q) = -\frac{\delta G^{-1}(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta A_\mu(\mathbf{q}\omega)}$$

где $A_\mu(\mathbf{q}\omega) = \{\varphi_{\mathbf{q}\omega}, \mathbf{A}_{\mathbf{q}\omega}\}$, так что “свободная” вершина равна:

$$J_0^\mu(p; p+q) = \begin{cases} -\frac{e}{mc}\mathbf{p} & \mu = 1, 2, 3 \\ e & \mu = 0 \end{cases}$$

или

$$\frac{\delta G_0(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta A_\mu(\mathbf{q}\omega)} = G_0(\varepsilon\mathbf{p})J_0^\mu(p; p+q)G_0(\varepsilon + \omega\mathbf{p} + \mathbf{q})$$

тогда как для “полной” функции Грина:

$$\frac{\delta G(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta A_\mu(\mathbf{q}\omega)} = G(\varepsilon\mathbf{p})J^\mu(p; p+q)G(\varepsilon + \omega\mathbf{p} + \mathbf{q})$$

$$\frac{\delta G(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta A_\mu(\mathbf{q}\omega)} = \left\langle \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^n (\zeta z(\varepsilon\mathbf{p}))^{m-1} \zeta \frac{\delta z}{\delta A_\mu(\mathbf{q}\omega)} (\zeta z(\varepsilon + \omega\mathbf{p} + \mathbf{q}))^{n-m} G_0(\varepsilon + \omega\mathbf{p} + \mathbf{q}) + \sum_{n=0}^{\infty} (\zeta z(\varepsilon\mathbf{p}))^n \frac{\delta G_0(\varepsilon\mathbf{p})}{\delta A_\mu(\mathbf{q}\omega)} \right\rangle_\zeta$$

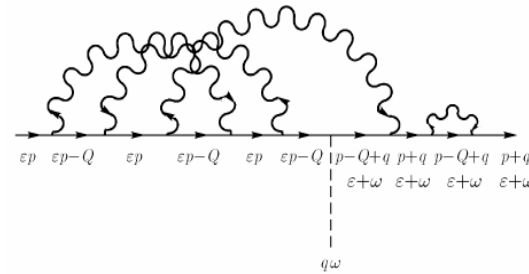
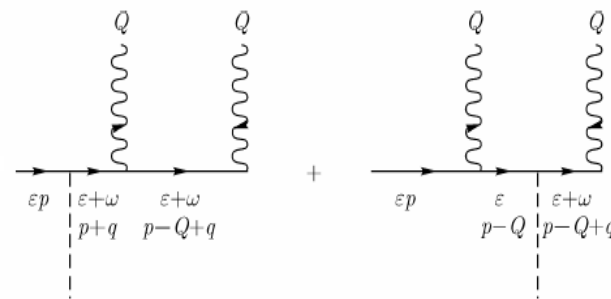


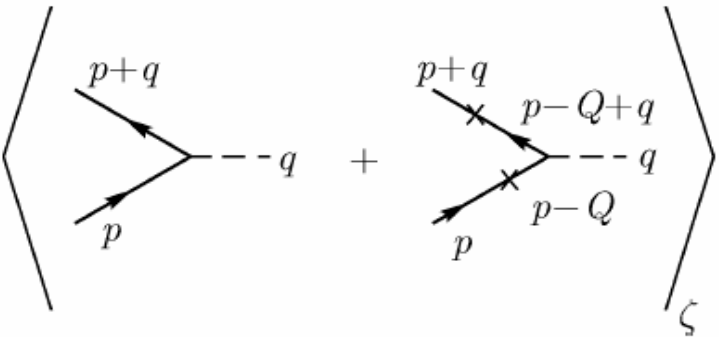
График произвольного порядка для вершинной части взаимодействия с внешним электромагнитным полем.



Графики для функциональной производной “блока” z(εp)

$$\begin{aligned} \frac{\delta G(\varepsilon \mathbf{p})}{\delta A_\mu(\mathbf{q}\omega)} &= G(\varepsilon \mathbf{p}) J^\mu G(\varepsilon + \omega \mathbf{p} + \mathbf{q}) = \\ &= \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \left\{ G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon \mathbf{p}) J_0^\mu(\mathbf{p}; \mathbf{p} + \mathbf{q}) G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon + \omega \mathbf{p} + \mathbf{q}) + \right. \\ &\quad \left. + F_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon \mathbf{p}) J_0^\mu(\mathbf{p} - \mathbf{Q}; \mathbf{p} - \mathbf{Q} + \mathbf{q}) F_{\zeta\Delta^2}^+(\varepsilon + \omega \mathbf{p} + \mathbf{q}) \right\} \end{aligned}$$

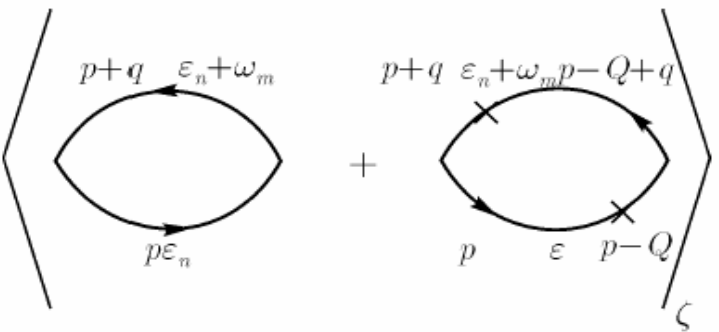
**Аномальные функции
Грина возникают автоматически!**



Теперь можно сразу выписать и соответствующий поляризационный оператор (который пишем уже в мацубаровской технике):

$$\begin{aligned} \Pi(\mathbf{q}\omega_m) &= \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} 2T \sum_n \int_{-\infty}^\infty \frac{dp}{2\pi} \left\{ G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon_n \mathbf{p}) G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon_n + \omega_m \mathbf{p} + \mathbf{q}) + \right. \\ &\quad \left. + F_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon_n \mathbf{p}) F_{\zeta\Delta^2}^+(\varepsilon_n + \omega_m \mathbf{p} + \mathbf{q}) \right\} = \langle \Pi_{\zeta\Delta^2}(\mathbf{q}\omega_m) \rangle_\zeta \quad (6.254) \end{aligned}$$

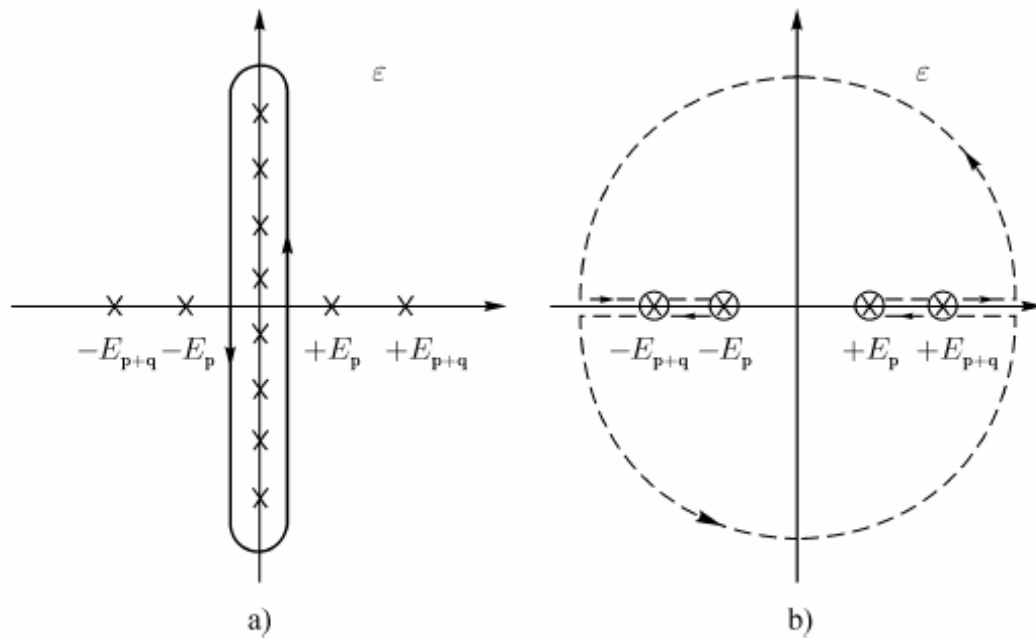
Графическое представление функциональной производной $G(\varepsilon \mathbf{p})$.



$$\begin{aligned} G_{\Delta^2}(\varepsilon_n \mathbf{p}) &= \frac{u_p^2}{i\varepsilon_n - E_p} + \frac{v_p^2}{i\varepsilon_n + E_p} \\ F_{\Delta^2}^+(\varepsilon_n \mathbf{p}) &= \frac{\Delta}{(i\varepsilon_n - E_p)(i\varepsilon_n + E_p)} \\ u_p^2 &= \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{\xi_p}{E_p} \right\}, \quad v_p^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{\xi_p}{E_p} \right\} \end{aligned} \quad E_p = \sqrt{\xi_p^2 + \Delta^2}$$

Поляризационный оператор в модели псевдощелевого состояния.

$$\begin{aligned} \Pi_{\Delta^2}(\mathbf{q}\omega_m) = & -2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi i} \int_C \frac{d\varepsilon}{2\pi} n(\varepsilon) \left\{ \frac{u_p^2 u_{p+q}^2}{(\varepsilon - E_p)(\varepsilon + i\omega_m - E_{p+q})} + \right. \\ & + \frac{v_p^2 v_{p+q}^2}{(\varepsilon + E_p)(\varepsilon + i\omega_m + E_{p+q})} + \frac{u_p^2 v_{p+q}^2}{(\varepsilon - E_p)(\varepsilon + i\omega_m + E_{p+q})} + \\ & \left. + \frac{v_p^2 u_{p+q}^2}{(\varepsilon + E_p)(\varepsilon + i\omega_m - E_{p+q})} + \frac{\Delta^2}{(\varepsilon + E_p)(\varepsilon - E_p)(\varepsilon + i\omega_m - E_{p+q})(\varepsilon + i\omega_m + E_{p+q})} \right\} \end{aligned}$$

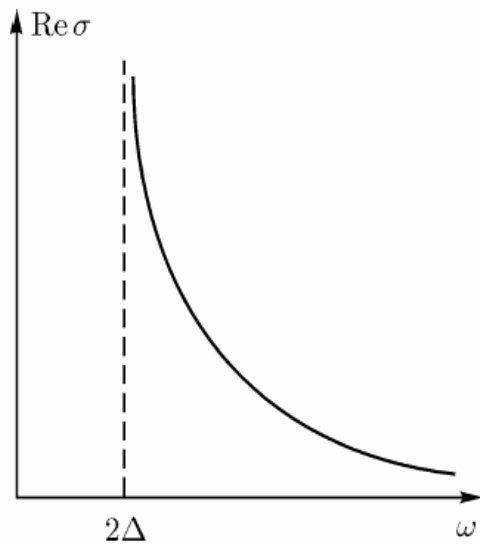


$$Re \varepsilon_{\Delta^2}(q\omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} Re \Pi_{\Delta^2}(q\omega)$$

$$Im \varepsilon_{\Delta^2}(q\omega) = -\frac{4\pi e^2}{q^2} Im \Pi_{\Delta^2}(q\omega)$$

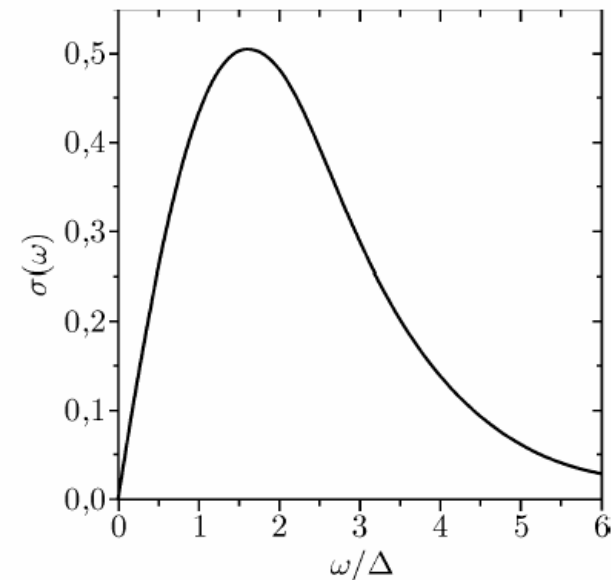
$$Re \sigma_{\Delta^2}(\omega) = \frac{\omega}{4\pi} Im \varepsilon_{\Delta^2}(\omega)$$

Контура интегрирования, используемые при вычислении суммы по фермиевским частотам в поляризацонном операторе.



$$Re\sigma_{\Delta^2}(\omega) = \frac{\omega}{4\pi} Im\epsilon_{\Delta^2}(\omega) = \begin{cases} \frac{ne^2}{m\omega} \frac{\pi}{\sqrt{\frac{\omega^2}{4\Delta^2}-1}} \frac{\Delta}{\omega} & \text{при } |\omega| > 2\Delta \\ 0 & \text{при } |\omega| < 2\Delta \end{cases}$$

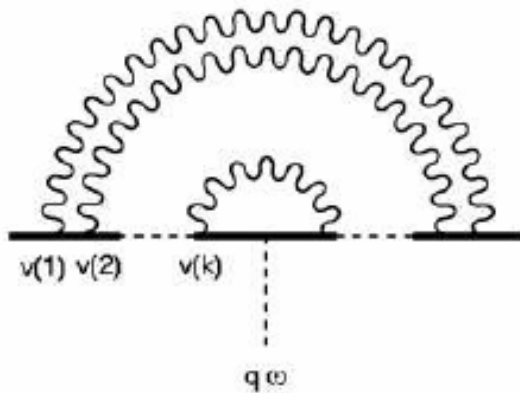
Частотная зависимость действительной части проводимости в пайерлсовском диэлектрике.



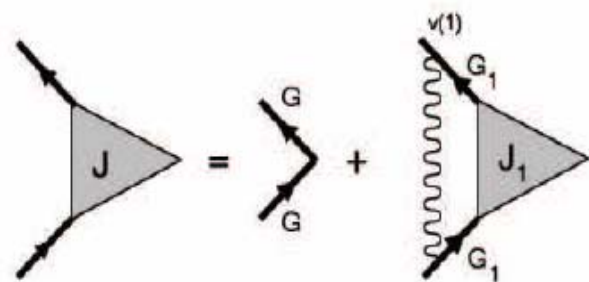
$$Re\sigma(\omega) = \frac{\omega_p^2}{4} \frac{\Delta}{\omega^2} \int_0^{\frac{\omega^2}{4\Delta^2}} d\zeta e^{-\zeta} \frac{\zeta}{\sqrt{\frac{\omega^2}{4\Delta^2} - \zeta}}$$

Обобщение этих результатов на случай конечных корреляционных длин ξ (или конечных κ) может быть проведено, путем вывода рекуррентных уравнений для вершинной части, описывающей электромагнитный отклик системы, аналогично проведенному выше выводу рекуррентных уравнений для собственно – энергетической части (одноэлектронной функции Грина).

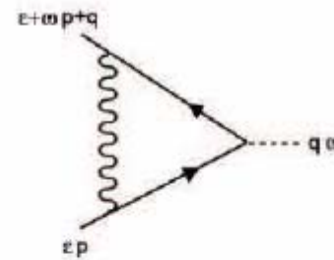
: Частотная зависимость действительной части проводимости в псевдоцелевом состоянии. Проводимость дана в единицах $\frac{\omega_p^2}{4\pi\Delta}$.



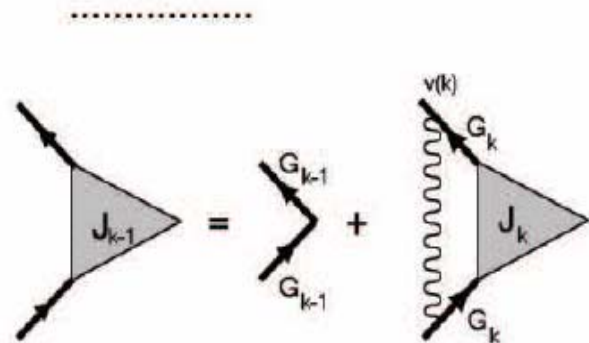
Произвольная диаграмма для вершинной части, как мы видели выше, может быть получена вставкой линии внешнего поля в соответствующую диаграмму для неприводимой собственно – энергетической части. Основная идея дальнейшего вывода состоит в том, что в нашей модели можно ограничиться только диаграммами без пересечения линий взаимодействия, с дополнительными комбинаторными множителями $v(k)$, приписываемыми “начальным” вершинам взаимодействия.



(a)



(b)



(c)

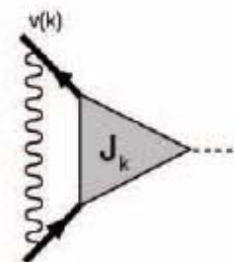
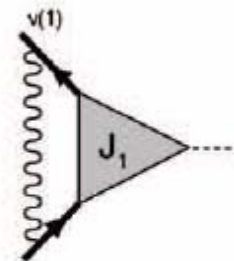
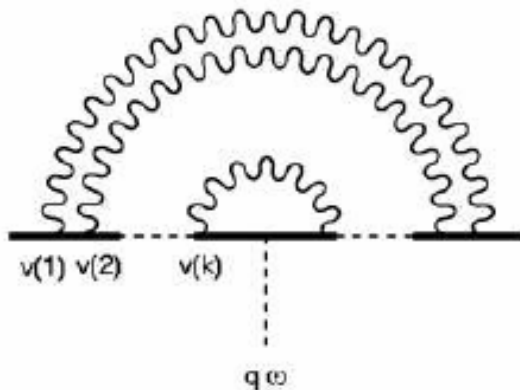
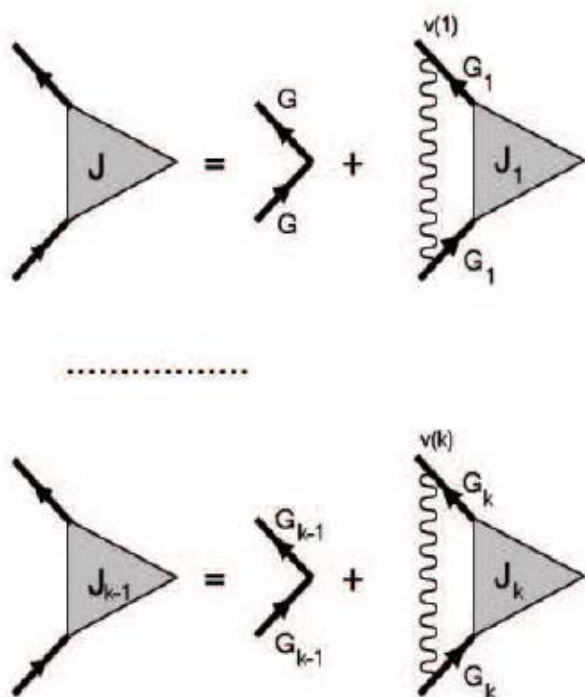


Рис. 6.43: Простейшая поправка к вершинной части.

Рекуррентные уравнения для вершинной части.



Произвольная диаграмма для вершинной части, как мы видели выше, может быть получена вставкой линии внешнего поля в соответствующую диаграмму для неприводимой собственно – энергетической части. Основная идея дальнейшего вывода состоит в том, что в нашей модели можно ограничиться только диаграммами без пересечения линий взаимодействия, с дополнительными комбинаторными множителями $v(k)$, приписываемыми “начальным” вершинам взаимодействия.



Тогда немедленно получаем рекуррентное уравнение для вершинной части, показанное графически на Рис. 6.42, и имеющее следующий аналитический вид (М.В.Садовский, А.А.Тимофеев, 1991):

$$J_{k-1}^{RA}(\varepsilon, \xi_p; \varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) = 1 + \Delta^2 v(k) G_k^A(\varepsilon, \xi_p) G_k^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) \times \left\{ 1 + \frac{2iv_F k k}{\omega - (-1)^k v_F q - \Sigma_{k+1}^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) + \Sigma_{k+1}^A(\varepsilon, \xi_p)} \right\} J_k^{RA}(\varepsilon, \xi_p; \varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) \quad (6.306)$$

Рекуррентные уравнения для вершинной части.

частей, показанную на Рис. 6.42. Чтобы найти соответствующие аналитические выражения рассмотрим простейшую поправку к вершинной части, показанную на Рис. 6.43 (а). Непосредственно выполняя вычисления при $T = 0$ в RA – канале, находим:

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_1^{(1)RA}(\varepsilon, \xi_p; \varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) &= \Delta^2 \int \frac{dQ}{2\pi} G_0^A(\varepsilon, \xi_{p-Q}) G_0^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p-Q+q}) = \\
&= \Delta^2 \left\{ G_0^A(\varepsilon, -\xi_p + iv_F \kappa) - G_0^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q} - iv_F \kappa) \right\} \frac{1}{\omega + v_F q} = \\
&= \Delta^2 G_0^A(\varepsilon, -\xi_p + iv_F \kappa) G_0^R(\varepsilon + \omega, -\xi_{p+q} - iv_F \kappa) \left\{ 1 + \frac{2iv_F \kappa}{\omega + v_F q} \right\}
\end{aligned} \tag{6.301}$$

где, при интегрировании, мы воспользовались следующим тождеством, справедливым для свободных функций Грина:

$$G_0^A(\varepsilon, \xi_p) G_0^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) = \left\{ G_0^A(\varepsilon, \xi_p) - G_0^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) \right\} \frac{1}{\omega - v_F q} \tag{6.302}$$

“Одевая” внутренние электронные линии флуктуациями, получаем диаграмму, показанную на Рис. 6.43 (b), так что с использованием тождества:

$$\begin{aligned}
G^A(\varepsilon, \xi_p) G^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) &= \left\{ G^A(\varepsilon, \xi_p) - G^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) \right\} \times \\
&\times \frac{1}{\omega - v_F q - \Sigma_1^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) + \Sigma_1^A(\varepsilon, \xi_p)}
\end{aligned} \tag{6.303}$$

справедливого для полных функций Грина (6.215), можно записать вклад этой диаграммы как:

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_1^{RA}(\varepsilon, \xi_p; \varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) &= \Delta^2 v(1) G_1^A(\varepsilon, \xi_p) G_1^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) \times \\
&\times \left\{ 1 + \frac{2iv_F \kappa}{\omega + v_F q - \Sigma_2^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) + \Sigma_2^A(\varepsilon, \xi_p)} \right\} J_1^{RA}(\varepsilon, \xi_p; \varepsilon + \omega, \xi_{p+q})
\end{aligned} \tag{6.304}$$

Здесь мы предположили, что линия взаимодействия в вершинной поправке на Рис. 6.43 (b) “преобразует” собственно – энергетические части $\Sigma_1^{R,A}$ внутренних линий в $\Sigma_2^{R,A}$, в соответствии с основной идеей нашего *Ansatz*'а для собственно – энергетической части³². Теперь мы можем выписать аналогичное выражение для диаграммы общего вида, показанной на Рис. 6.43 (c):

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_k^{RA}(\varepsilon, \xi_p; \varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) &= \Delta^2 v(k) G_k^A(\varepsilon, \xi_p) G_k^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) \times \\
&\times \left\{ 1 + \frac{2iv_F \kappa k}{\omega - (-1)^k v_F q - \Sigma_{k+1}^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) + \Sigma_{k+1}^A(\varepsilon, \xi_p)} \right\} J_k^{RA}(\varepsilon, \xi_p; \varepsilon + \omega, \xi_{p+q})
\end{aligned}$$

Тогда немедленно получаем рекуррентное уравнение для вершинной части, показанное графически на Рис. 6.42, и имеющее следующий аналитический вид (М.В.Садовский, А.А.Тимофеев, 1991):

$$\begin{aligned}
J_{k-1}^{RA}(\varepsilon, \xi_p; \varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) &= 1 + \Delta^2 v(k) G_k^A(\varepsilon, \xi_p) G_k^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) \times \\
&\times \left\{ 1 + \frac{2iv_F \kappa k}{\omega - (-1)^k v_F q - \Sigma_{k+1}^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) + \Sigma_{k+1}^A(\varepsilon, \xi_p)} \right\} J_k^{RA}(\varepsilon, \xi_p; \varepsilon + \omega, \xi_{p+q})
\end{aligned} \tag{6.306}$$

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

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{q}\omega) &= 2 \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \sum_{nm} \left\langle \varphi_m(\mathbf{p}_+) \varphi_m^*(\mathbf{p}'_+) \varphi_n(\mathbf{p}'_-) \varphi_n^*(\mathbf{p}_-) \frac{n(\varepsilon_m) - n(\varepsilon_n)}{\omega + \varepsilon_n - \varepsilon_m + i\delta} \right\rangle = \\ &= 2 \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \{ [n(\varepsilon + \omega) - n(\varepsilon)] \langle G^R(\mathbf{p}_+\mathbf{p}'_+, \varepsilon + \omega) G^A(\mathbf{p}'_-\mathbf{p}_-, \varepsilon) \rangle + \\ &\quad + n(\varepsilon) \langle G^R(\mathbf{p}_+\mathbf{p}'_+, \varepsilon + \omega) G^R(\mathbf{p}'_-\mathbf{p}_-, \varepsilon) \rangle - \\ &\quad - n(\varepsilon + \omega) \langle G^A(\mathbf{p}_+\mathbf{p}'_+, \varepsilon + \omega) G^A(\mathbf{p}'_-\mathbf{p}_-, \varepsilon) \rangle \} \end{aligned} \quad (4.86)$$

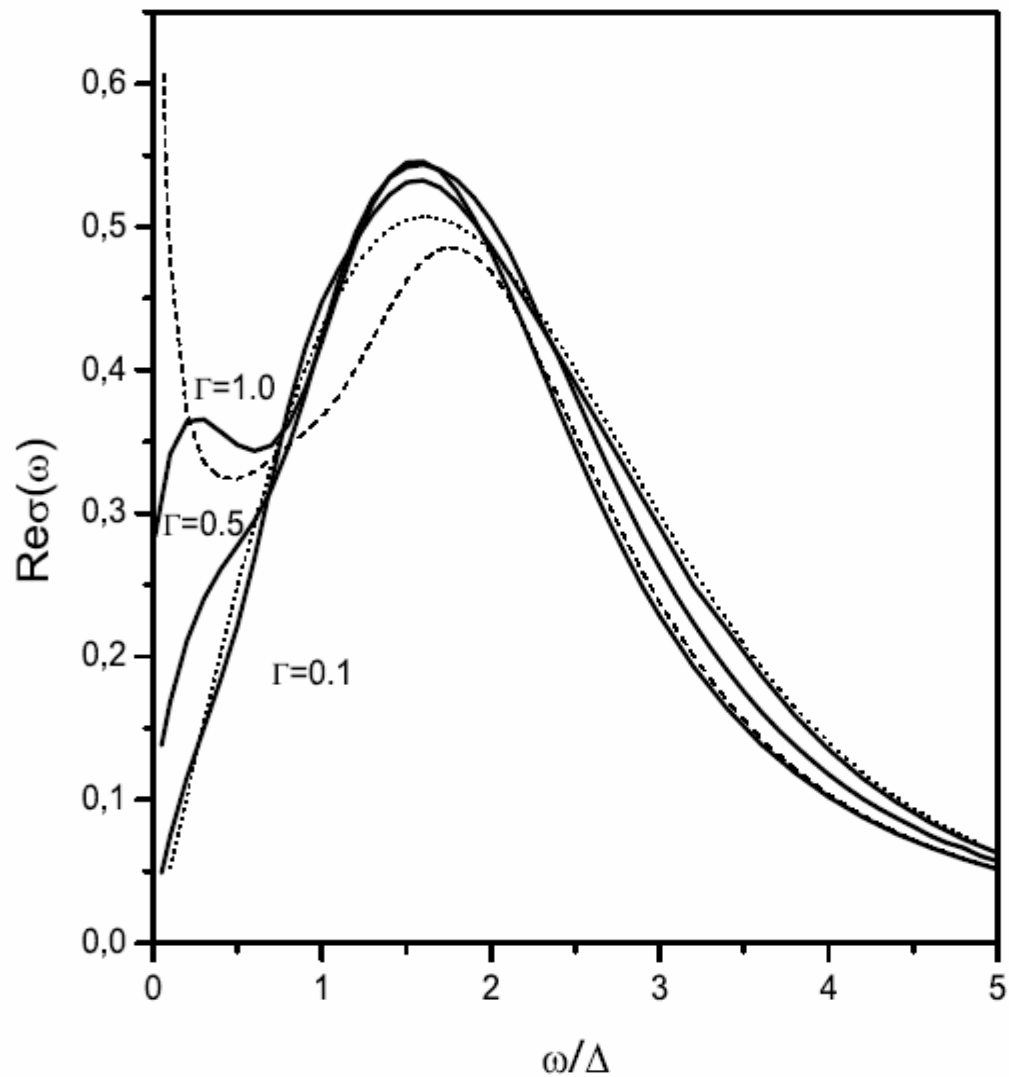
где второе выражение проверяется непосредственно с использованием (4.82), и мы ввели $\mathbf{p}_{\pm} = \mathbf{p} \pm \frac{1}{2}\mathbf{q}$. Выражение (4.86) можно переписать как:

$$\chi(\mathbf{q}\omega) = - \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \{ [n(\varepsilon + \omega) - n(\varepsilon)] \Phi^{RA}(\varepsilon\omega\mathbf{q}) + n(\varepsilon) \Phi^{RR}(\varepsilon\omega\mathbf{q}) - n(\varepsilon + \omega) \Phi^{AA}(\varepsilon\omega\mathbf{q}) \} \quad (4.87)$$

где ввели обозначение:

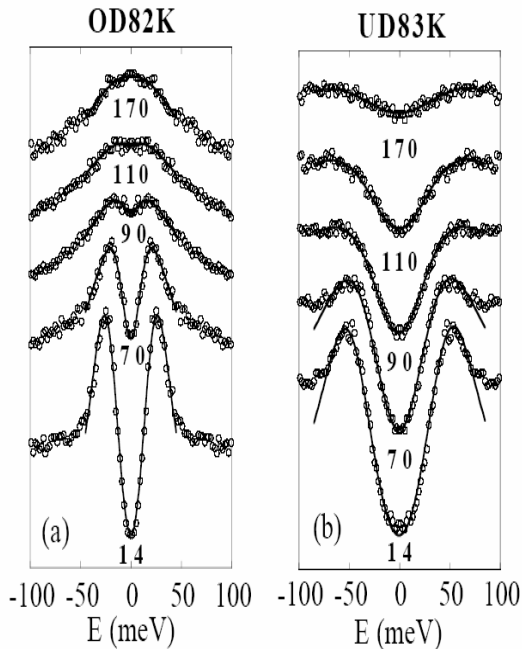
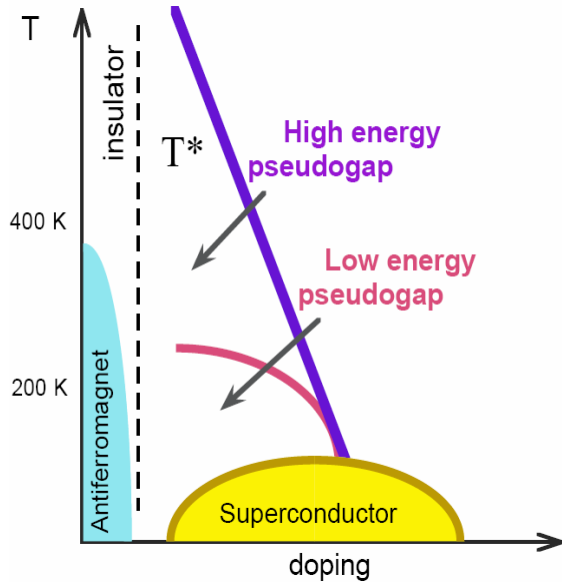
$$\Phi^{RA}(\varepsilon\omega\mathbf{q}) = -\frac{1}{2\pi i} 2 \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \langle G^R(\mathbf{p}_+\mathbf{p}'_+, \varepsilon + \omega) G^A(\mathbf{p}'_-\mathbf{p}_-, \varepsilon) \rangle \quad (4.88)$$

и аналогичные выражения для Φ^{RR} и Φ^{AA} . Заметим, что мы включили в эти определения спиновую “двойку”.

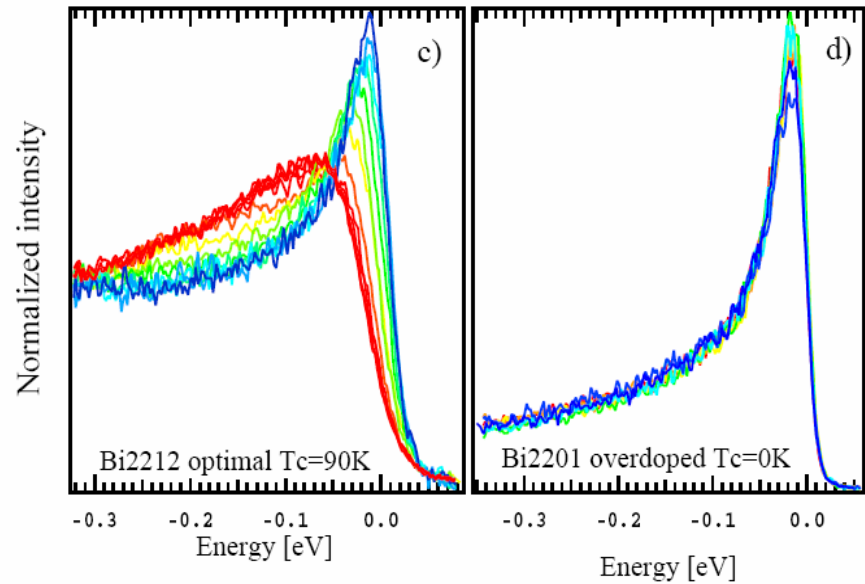
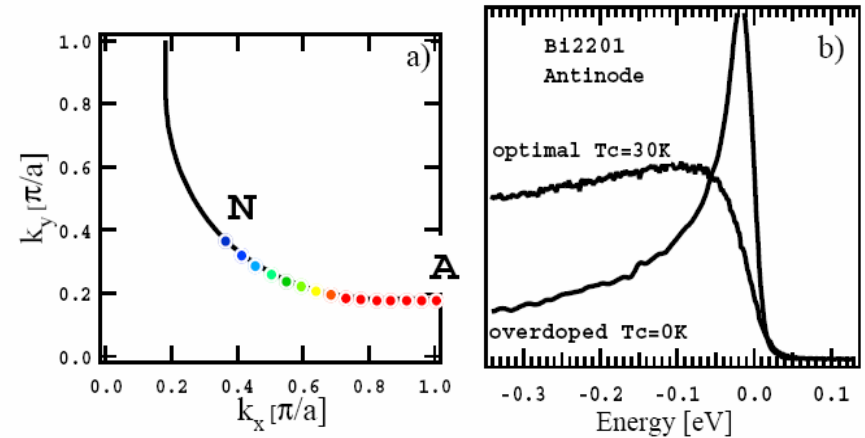


Частотная зависимость действительной части проводимости в случае несоизмеримых псевдощелевых флуктуаций для различных значений $\Gamma = v_F \kappa / \Delta$. Пунктир – случай $\Gamma = 0$. Штрихи – результаты “лестничного” приближения для $\Gamma = 1.0$. Проводимость дана в единицах $\frac{\omega_p^2}{4\pi\Delta}$.

Псевдощель в ВТСП - купратах



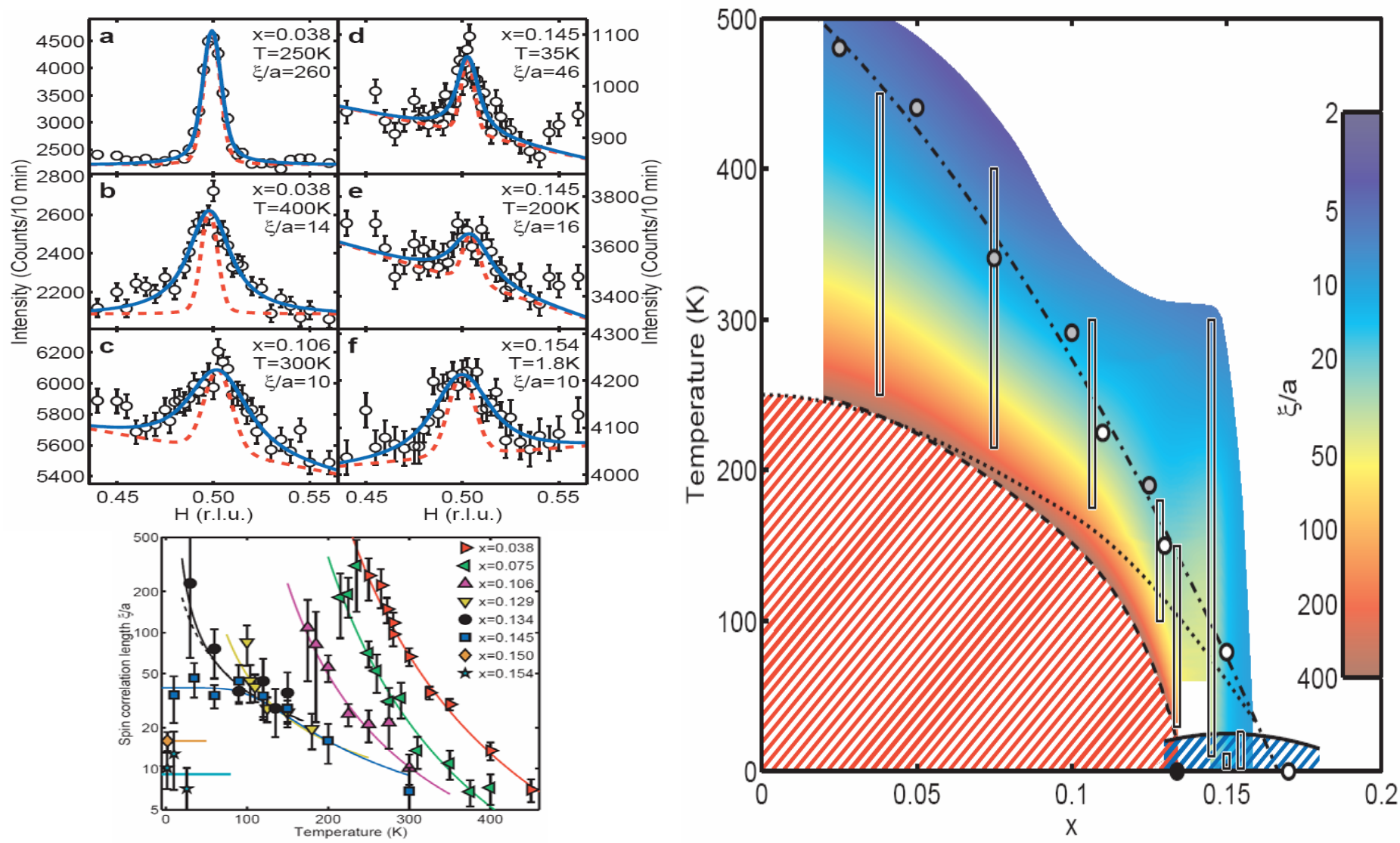
M.Norman et al. (1998)



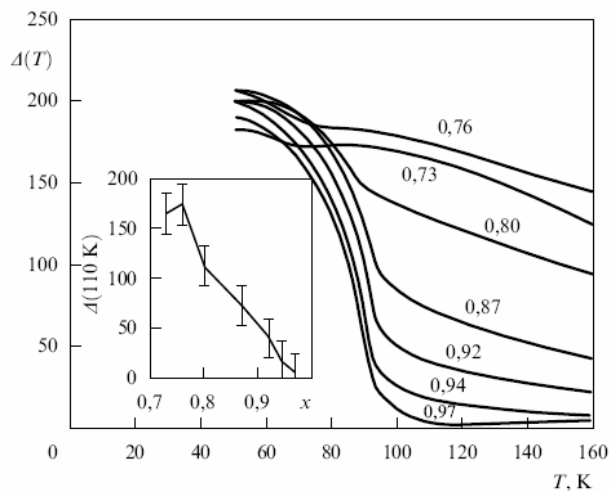
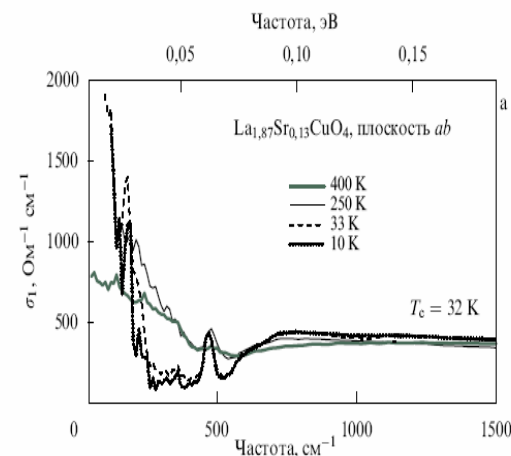
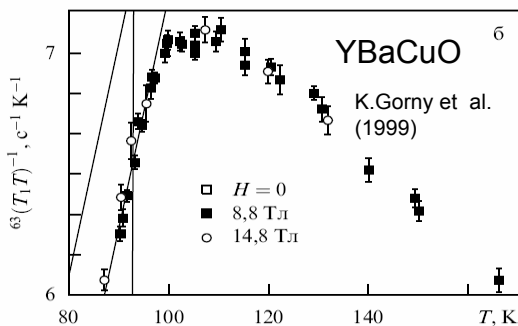
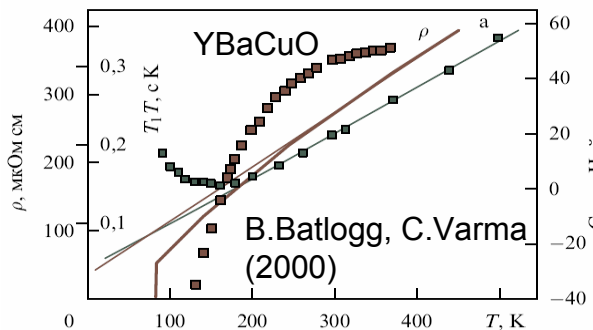
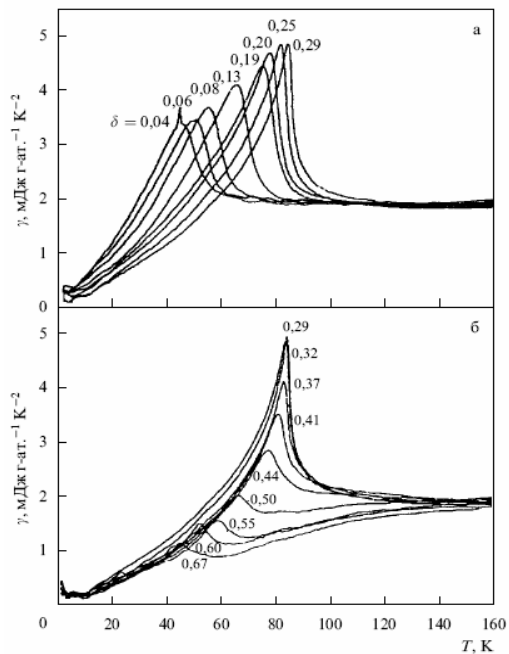
J.Campuzano et al. (2004)

Spin correlations of the electron-doped high transition-temperature superconductor $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4\pm\delta}$

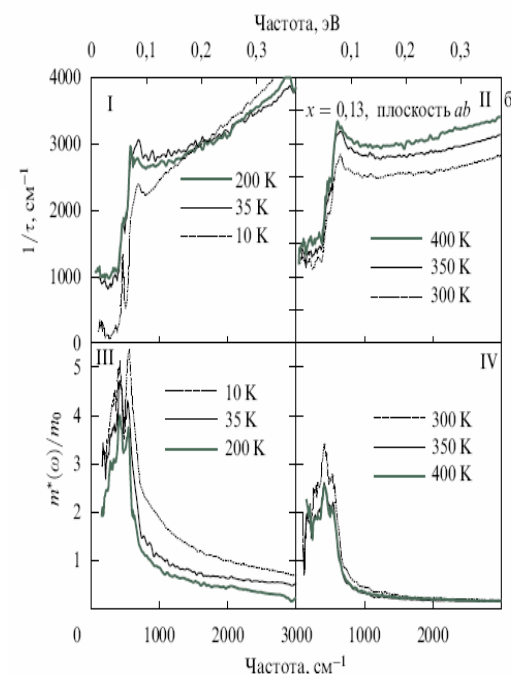
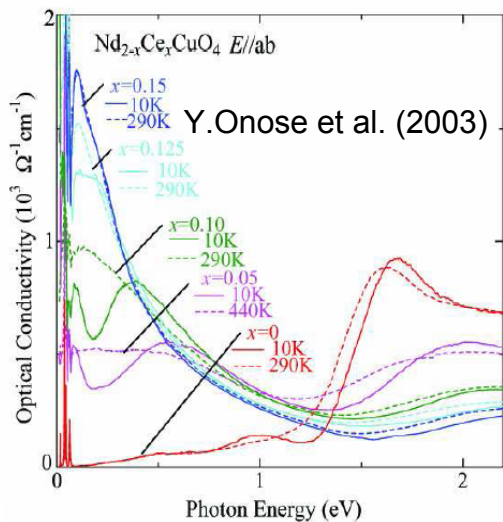
E.M. Motoyama¹, G. Yu¹, I.M. Vishik¹, O.P. Vajk², P.K. Mang³ & M. Greven^{3,4}



Основные экспериментальные факты о псевдощели

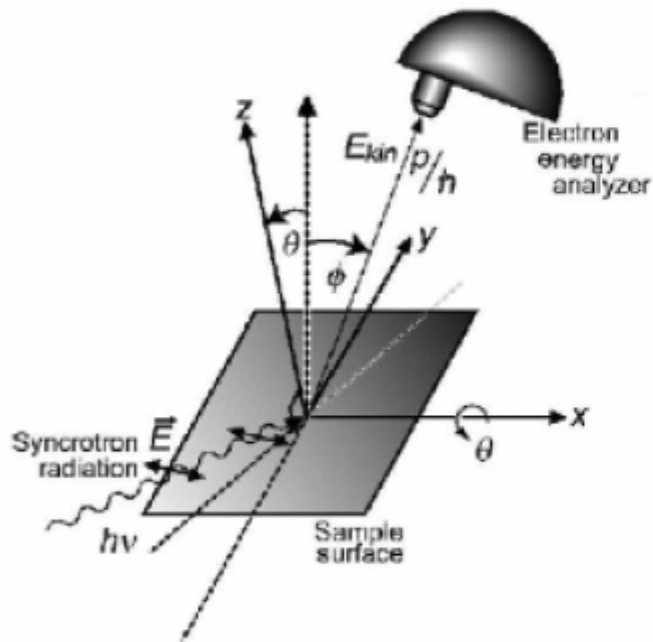


J. Loram, J. Tallon et al. (1997)

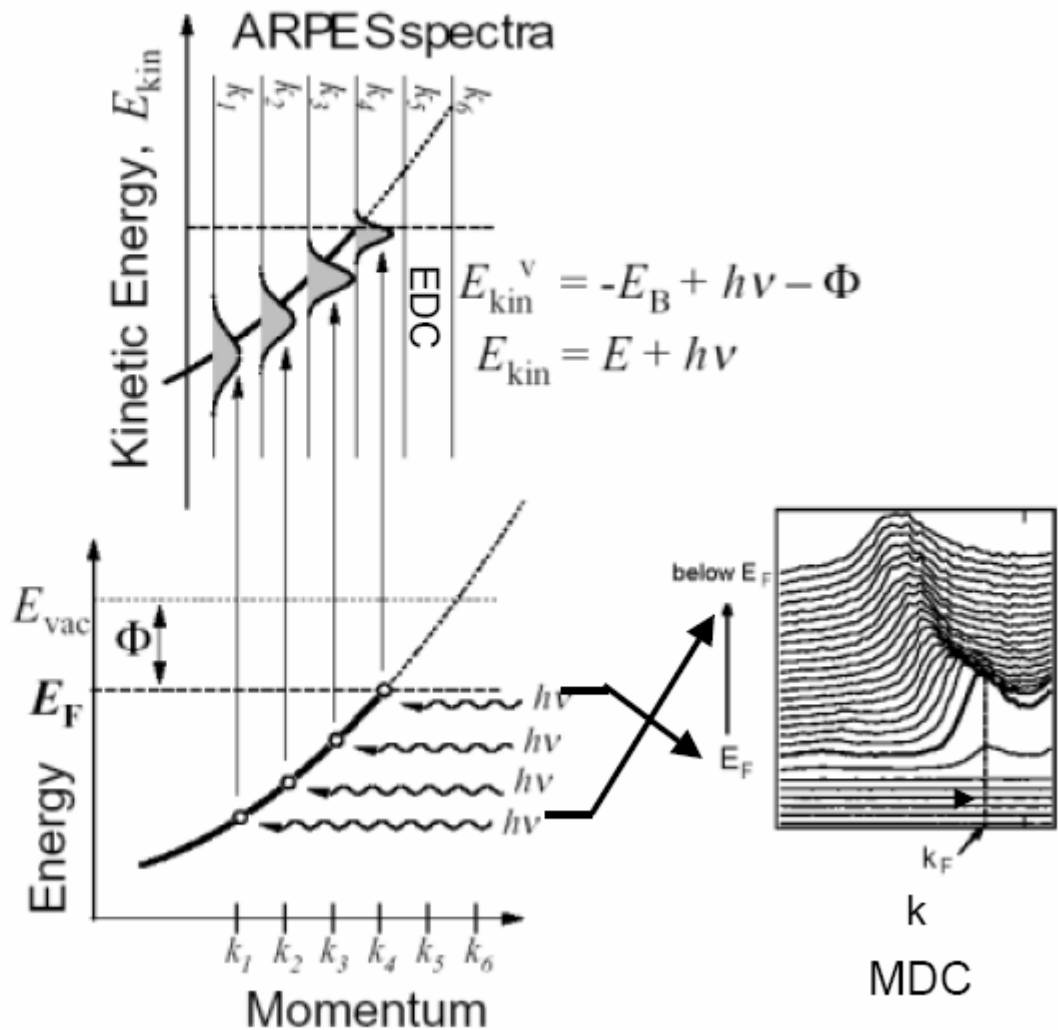


T. Startseva et al. (1999)

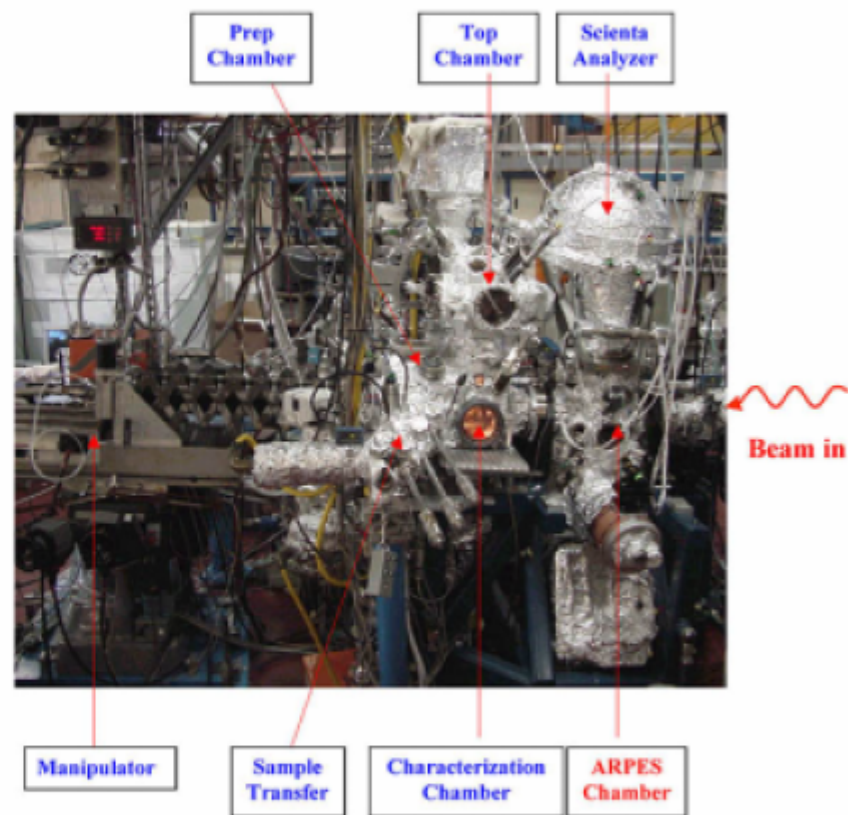
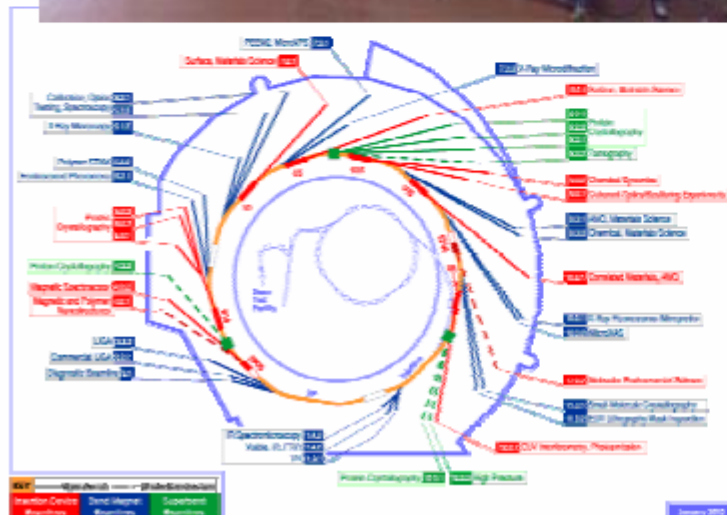
Angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES)



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



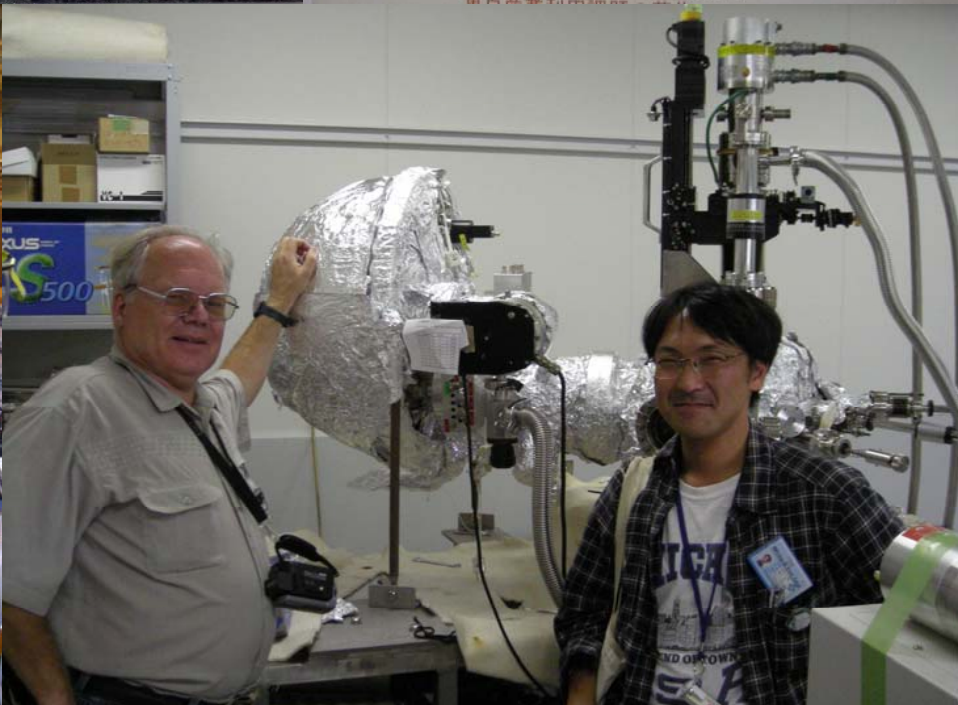
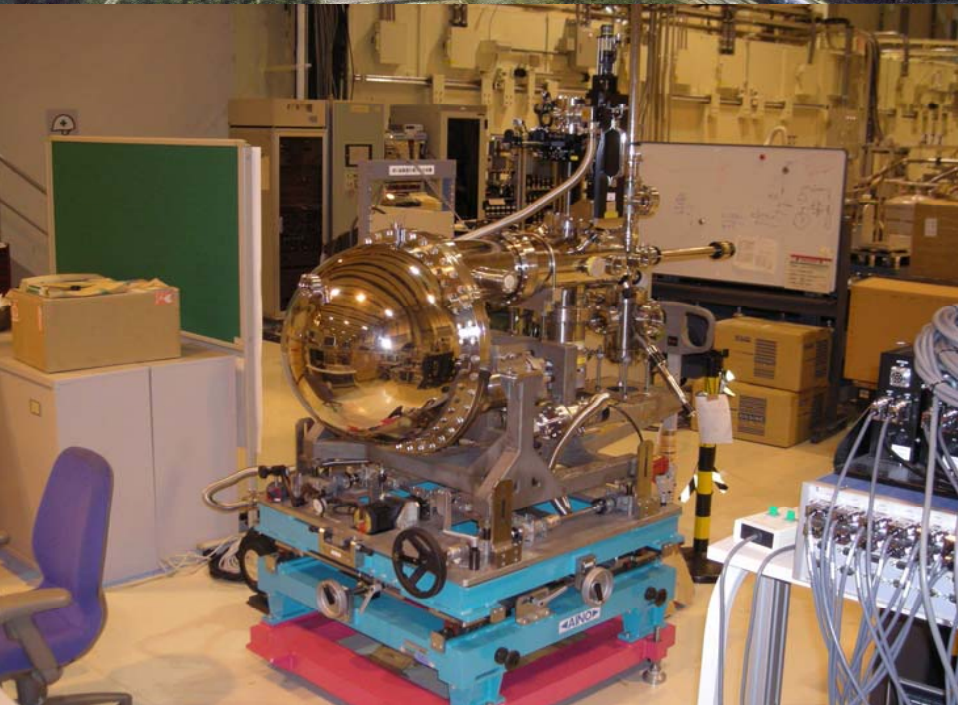
Advanced Light Source ARPES beamline 10.0.1



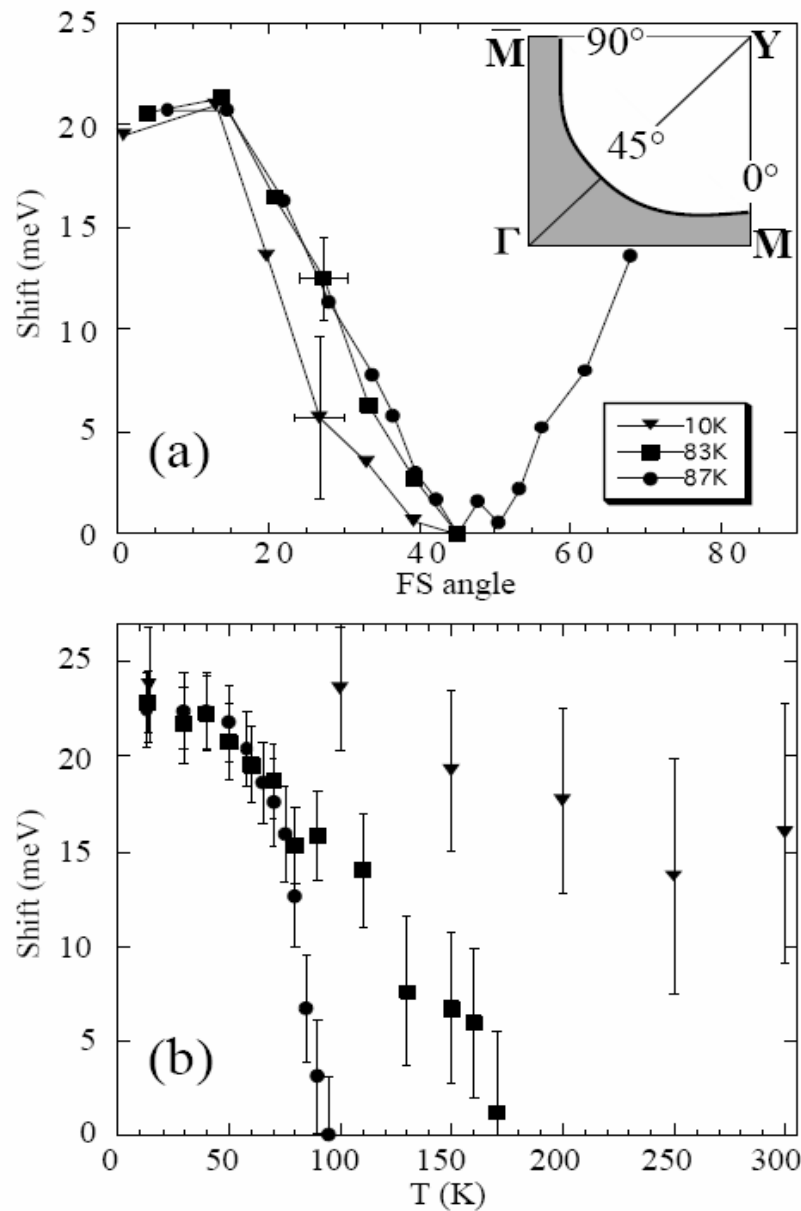
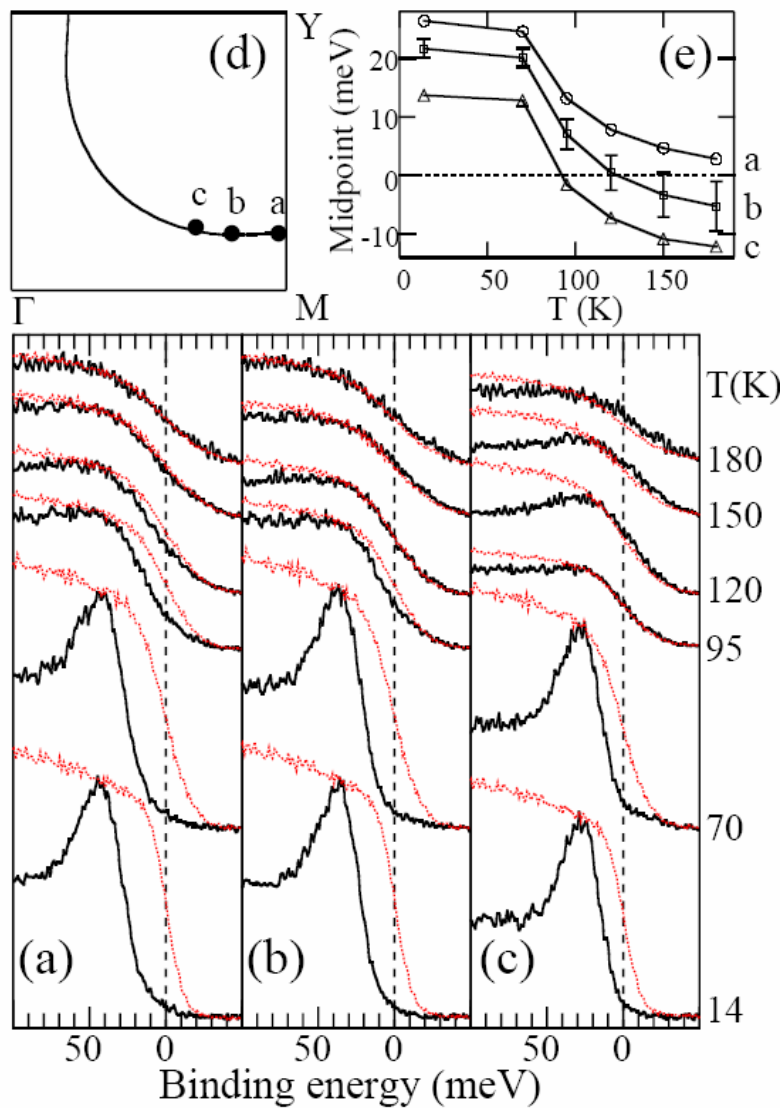
SGM beamline + Scientia SES-2000

X. J. Zhou, Z.-X. Shen, Z. Hussain

SPRING - 8



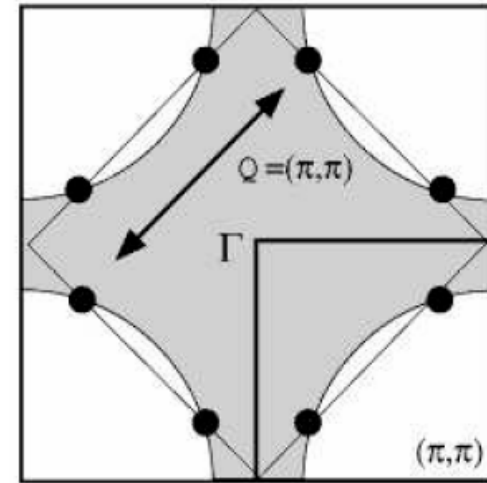
Bi2210



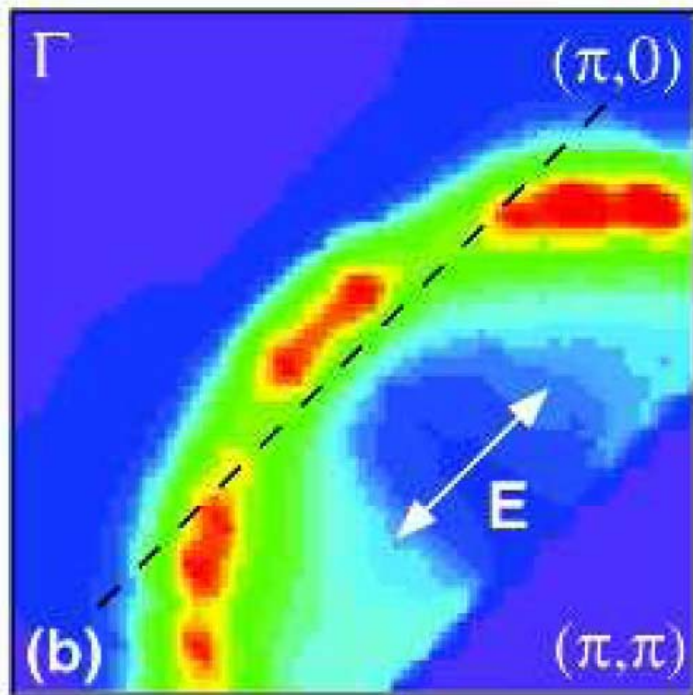
Псевдощель в модели “горячих точек”

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

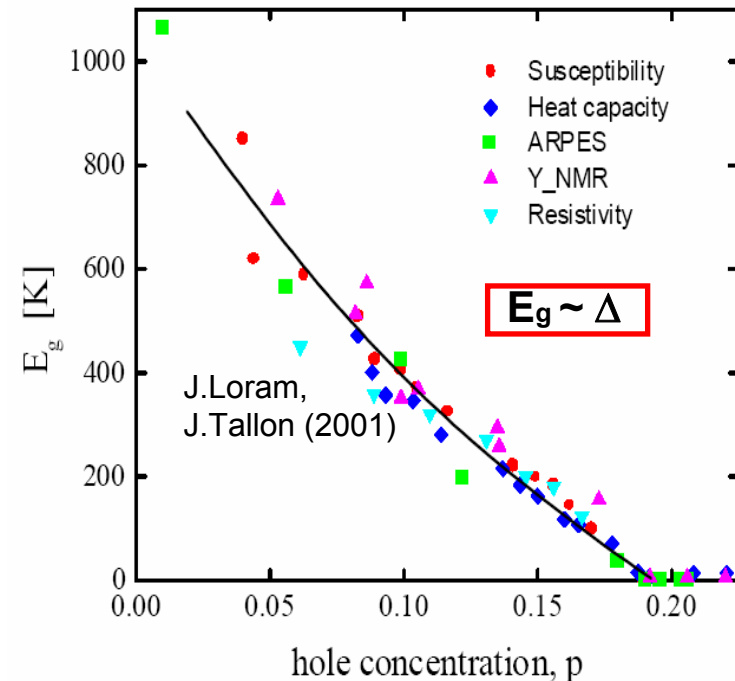
ξ - correlation length ω_{sf} - frequency of fluctuations



D.Pines et al.
SF-model
(1990 - 1999)



NdCeCuO - N.Armitage et al. (2001)



Качественные соображения о виде модели

В первом приближении спектр квазичастиц в плоскости CuO_2 есть:

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

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.

Рассмотрим модель “почти антиферромагнитной” ферми – жидкости, в которой вводится эффективное взаимодействие электронов со спиновыми флуктуациями, описываемое динамической спиновой восприимчивостью $\chi_{\mathbf{q}}(\omega)$:

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

D.Pines et al. (1990)

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

Характерная частота спиновых флуктуаций ω_{sf} , в зависимости от типа соединения и степени легирования, обычно лежит в интервале $10 - 100K$, 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:

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

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

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

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” спинов, антиферромагнитно скоррелированных на длинах порядка ξ .

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

Модель “горячих точек”

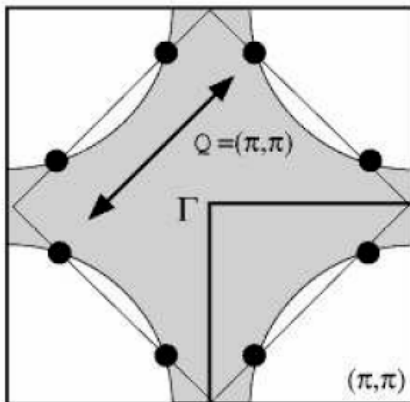
$$\Sigma(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{q}} V_{eff}(\mathbf{q}) \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}}$$

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

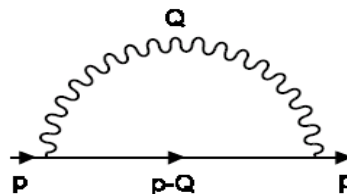
$$\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} = \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}+\mathbf{k}} \approx \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} + \mathbf{v}_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} \mathbf{k}$$

где $\mathbf{v}_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} = \frac{\partial \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}}{\partial \mathbf{p}}$ – соответствующая скорость квазичастицы на поверхности Ферми.

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

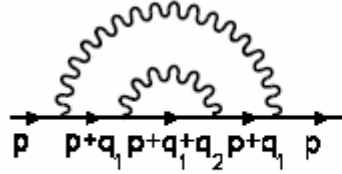


$$V_{eff}(\mathbf{q}) = W^2 \frac{\xi^{-1}}{\xi^{-2} + (q_x - Q_x)^2} \frac{\xi^{-1}}{\xi^{-2} + (q_y - Q_y)^2}$$

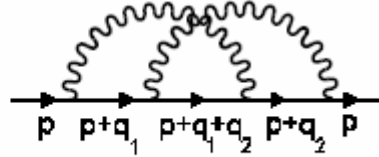


М.В.Садовский, Э.З.Кучинский (1999)
D.Pines, J.Schmalian, B.Stojkovic (1999)

(a)



(b)



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

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

где воспользовались видом спектра $\xi_{\mathbf{p}}$, 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 (a) и (b) полностью определяются вкладами от полюсов лоренцианов.

После элементарного контурного интегрирования получаем:

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

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 лорентцианов 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:

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

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 и для определенности полагаем, что $\varepsilon_n > 0$.

Рекуррентные уравнения для функции Грина

! В случае использования *Ansatz'a* оказывается, что вклад любой диаграммы с пересечением линий взаимодействия оказывается равным вкладу некоторой диаграммы того же порядка без пересечения этих линий. 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. В результате, для одноэлектронной функции Грина возникает следующее рекуррентное соотношение (представление в виде цепной дроби, которое дает эффективный алгоритм для последующих численных расчетов:

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

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



$$G(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) = G_{k=0}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}})$$

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

Комбинаторный множитель:

$$v(k) = k$$

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

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

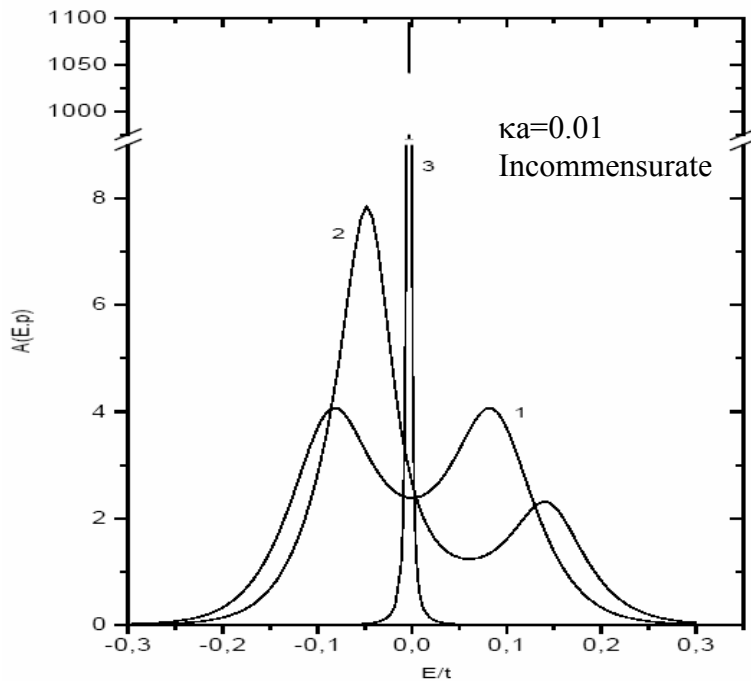
$$v(k) = \begin{cases} \frac{k+2}{3} & \text{при нечетных } k \\ \frac{k}{3} & \text{при четных } k \end{cases}$$

Для спин - фермионной модели (SDW флуктуации)

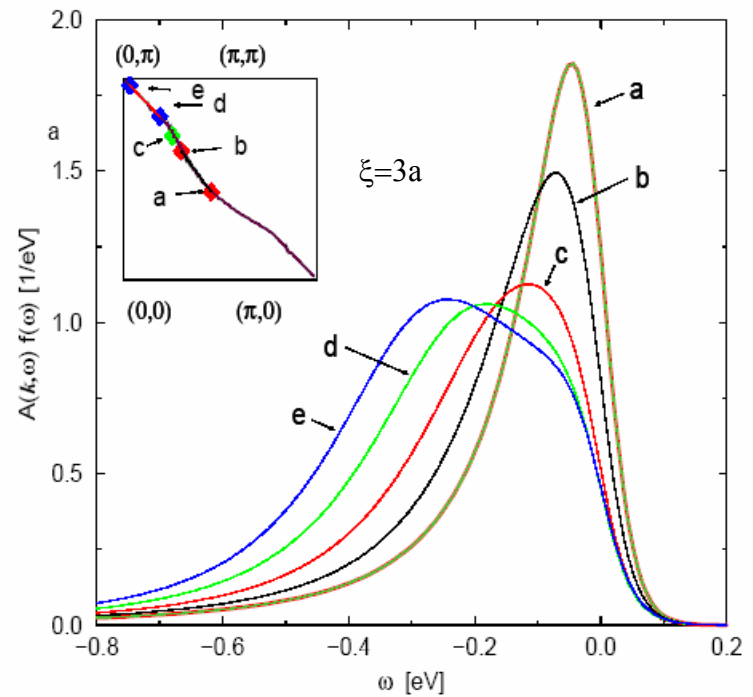
Спектральная плотность, ARPES и плотность состояний

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

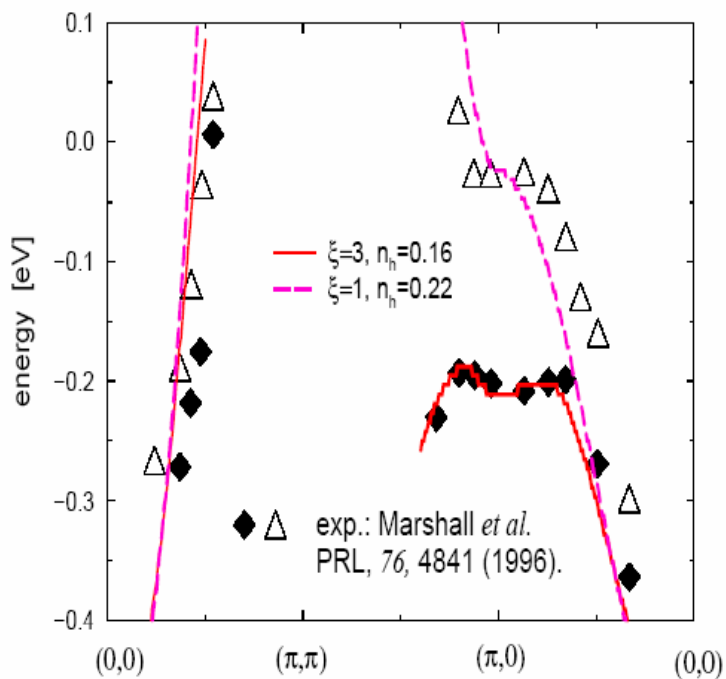
$$N(E) = \sum_{\mathbf{p}} A(E_{\mathbf{p}}) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{p}} \text{Im}G^R(E_{\mathbf{p}})$$



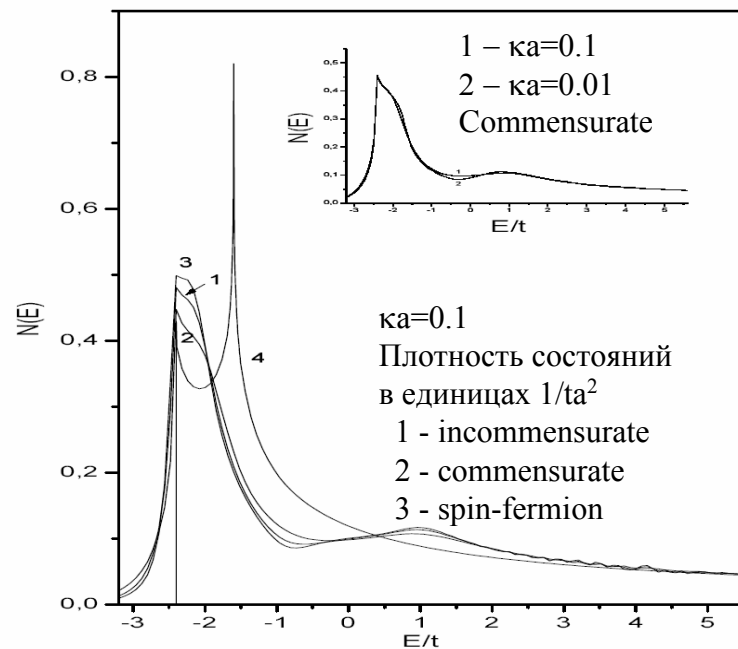
Спектральная плотность для случая несоизмеримых (CDW) флуктуаций



Произведение спектральной плотности на фермиевскую функцию распределения (ARPES)



Положение максимума спектральной плотности для спин-фермионной модели в сравнении с ARPES данными для $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{1-x}\text{Dy}_x\text{Cu}_2\text{O}_8$



Плотность состояний для различных комбинаторик диаграмм, спектр с $t'/t=0.4, \mu/t=-1.3$

Отступление о 2D-сверхпроводящих флуктуациях

BCS

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

где ϕ – полярный угол, определяющий направление электронного импульса \mathbf{p} в плоскости, а для $e(\phi)$ принимается модельная зависимость [26, 27]:

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

Константа взаимодействия V , как обычно, предполагается отличной от нуля для электронов, находящихся в некотором слое вблизи поверхности Ферми. Тогда собственно-энергетическая часть, соответствующая Рис.10(а), имеет вид:

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

где эффективное взаимодействие с SC-флуктуациями имеет вид:

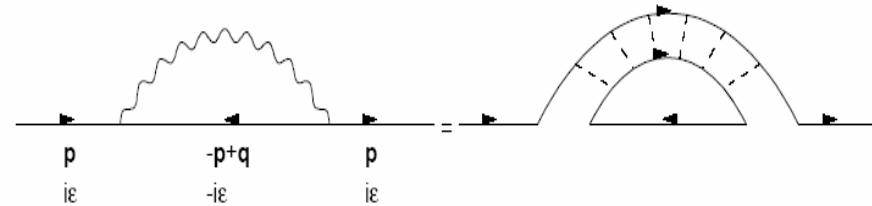
$$V_{eff}(i\omega_m \mathbf{q}) = -\frac{V e^2(\phi)}{1 - VT \sum_{n \mathbf{p}} G_0(i\varepsilon_n \mathbf{p}) G_0(i\omega_m - i\varepsilon_n, -\mathbf{p} + \mathbf{q}) e^2(\phi)}$$

В дальнейшем будем считать SC-флуктуации статическими, так что в (33) можно ограничиться учетом только слагаемого с $\omega_m = 0$. Тогда эффективное взаимодействие можно записать как:

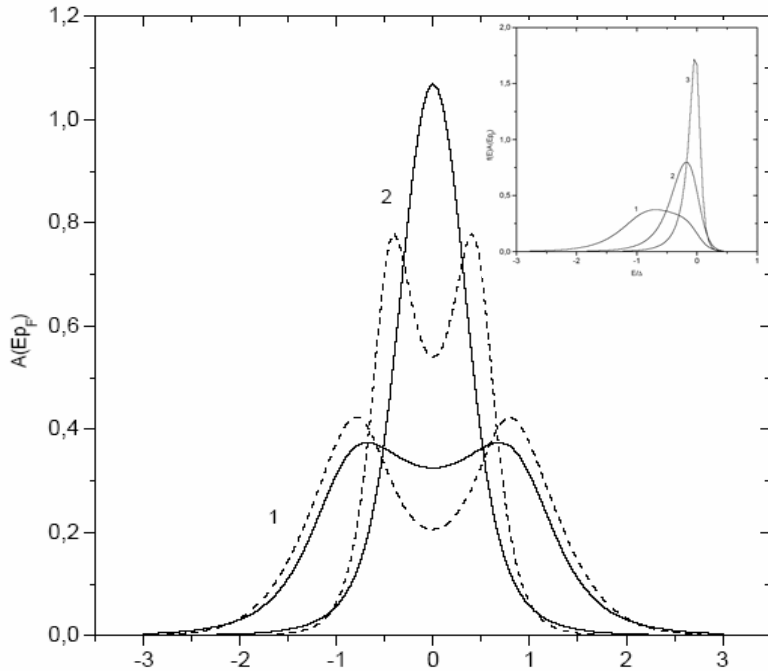
$$V_{eff}(\mathbf{q}) \approx -\frac{\tilde{\Delta}^2 e^2(\phi)}{\xi^{-2}(T) + q^2} \quad \longrightarrow \quad V_{eff}(\mathbf{q}) = -\Delta^2 e^2(\phi) \frac{2\xi^{-1}}{\xi^{-2} + q_x^2} \frac{2\xi^{-1}}{\xi^{-2} + q_y^2}$$

где

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



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



-Энергетическая зависимость спектральной плотности $A(E, \mathbf{p})$ для случая флуктуационного спаривания d -типа для различных значений полярного угла ϕ , определяющего направление электронного импульса в плоскости:

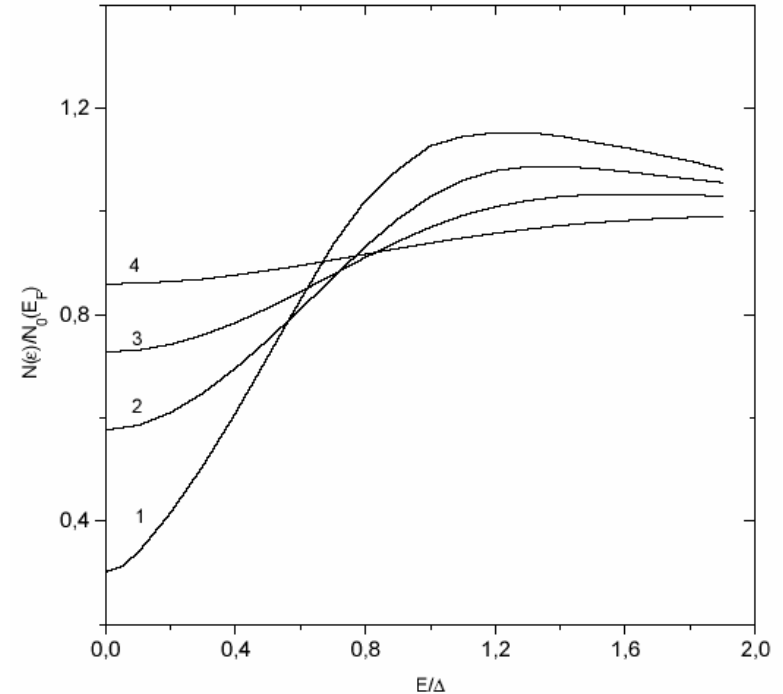
(1) $-\phi = 0$; (2) $-\phi = \pi/6$.

Корреляционная длина выбрана соответствующей $v_F \kappa / \Delta = 0.5$ (сплошные кривые) и 0.1 (пунктир).

аналогичная зависимость произведения $f(E)A(E, \mathbf{p})$ ($f(E)$ - функция Ферми):

(1) $-\phi = 0$; (2) $-\phi = \pi/6$; (3) $-\phi = \pi/4$.

Температура (в функции Ферми) $T = 0.1\Delta$, $v_F \kappa / \Delta = 0.5$.



Одноэлектронная плотность состояний в модели SC-флуктуаций при различных значениях параметра $v_F \kappa / \Delta$ (корреляционных длинах флуктуаций ближнего порядка):

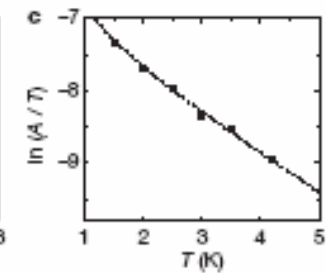
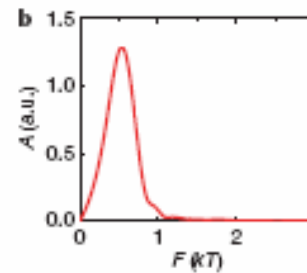
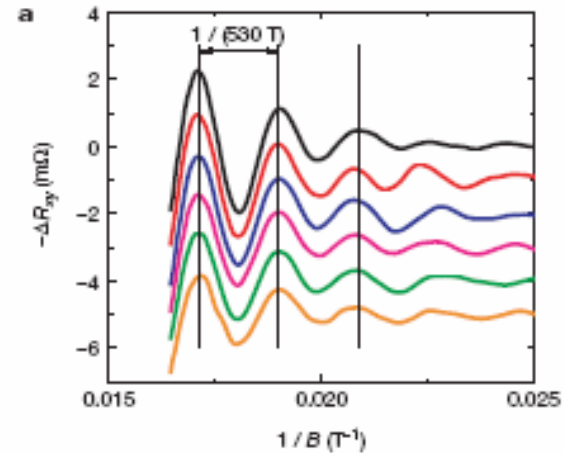
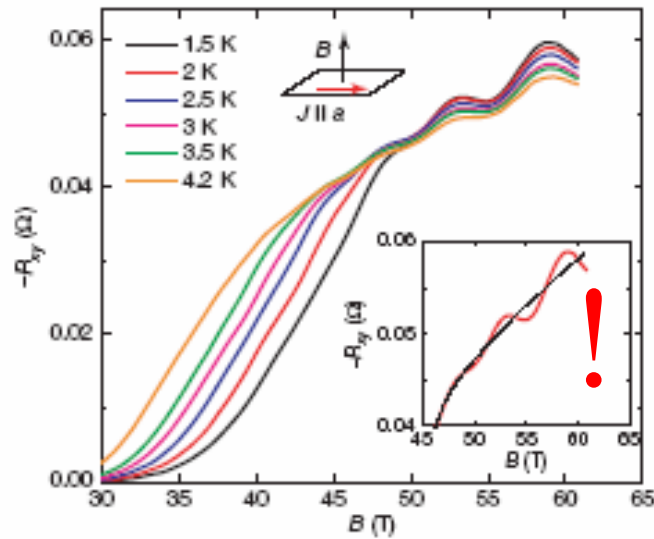
-случай d -спаривания.

Кривые построены для следующих значений параметра $v_F \kappa / \Delta$:

(1) -0.1 ; (2) -0.5 ; (3) -1.0 ; (4) -2.0 .

Магнитные осцилляции холловского сопротивления $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$

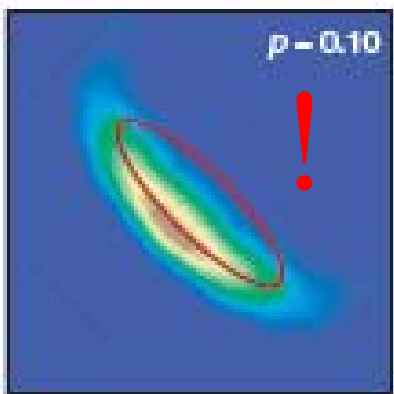
N. Doiron-Leyraud *et al.*, Nature **447**, 565 (2007)



$$m^* = (1.9 \pm 0.1) m_e$$

$$F = (\hbar/2\pi e) A_k$$

$$F = 530 \pm 20 \text{ T} \longrightarrow A_k/A_{BZ} \approx 1.9\%$$



$$p = 4 * 2 A_k/A_{BZ} = 0.152$$

$$(2) \qquad \qquad \qquad = 0.076$$

$$p_{nom} = 0.1$$

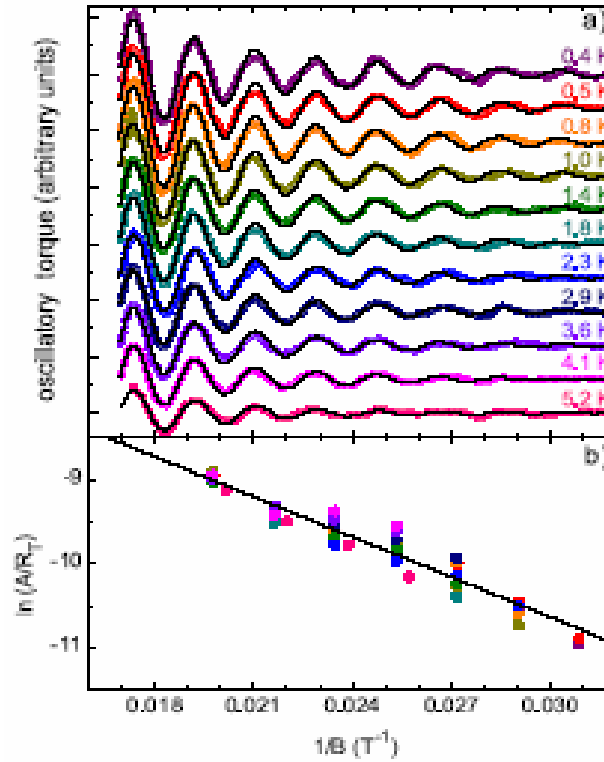
dHvA (YBa₂Cu₃O_{6.5})

Cyril Jaudet *et al.*,
PRL **100**, 187005 (2008)

$$F = 540 \pm 4 \text{ T}$$

$$m^* = (1.76 \pm 0.07)m_e$$

$$\omega_H \tau = 0.7 \pm 0.2 \quad (B = 35 \text{ T})$$



S-dH, Hall resistance (YBa₂Cu₄O₈)

PRL **100**, 047003 (2008);
PRL **100**, 047004 (2008)

$$F = 660 \pm 30 \text{ T} \quad (A_k/A_{BZ} = 2.4\%)$$

$$m^* = (2.7 \pm 0.07)m_e$$

dHvA (YBa₂Cu₃O_{6.5})

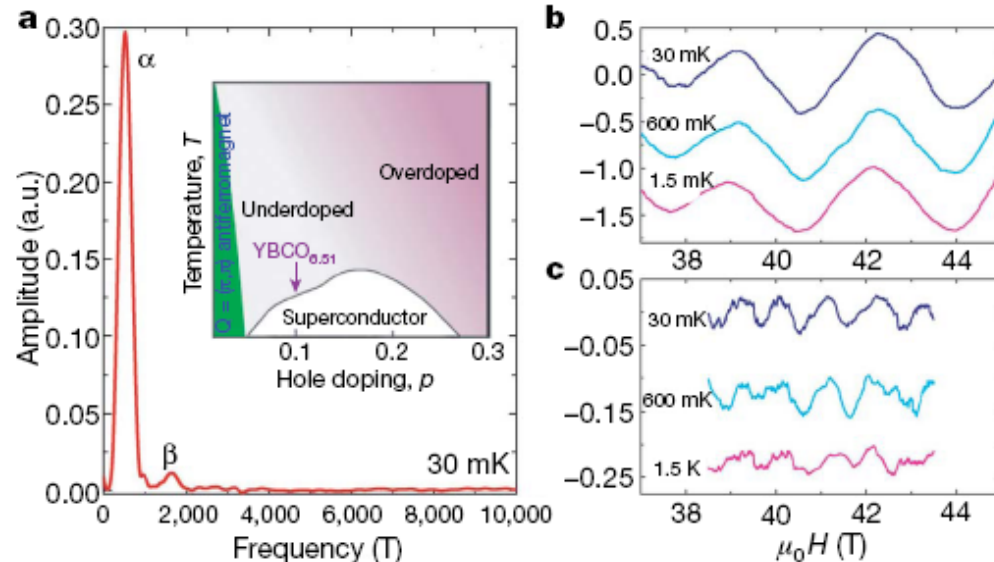
Suchitra E. Sebastian *et al.*,
Nature **454**, 200 (2008)

Две частоты осцилляций (два “кармана”) электронный? дырочный?

$$F_\alpha = 500 \pm 20 \text{ T}, \quad F_\beta = 1650 \pm 40 \text{ T}$$

$$m_\alpha^* = (1.9 \pm 0.1)m_e, \quad m_\beta^* = (3.8 \pm 0.4)m_e$$

$$A_\alpha/A_\beta \approx 30$$



Перестройка поверхности Ферми в псевдощелевом состоянии

Энергетический спектр в CuO_2 плоскости:

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

where a is the lattice constant, μ — chemical potential,
 $t'/t = -0.4$ and doping $n = 0.9$ (10% hole doping), corresponding to $\mu = -1.08t$.

$$V(\mathbf{l}) = D \exp(i\mathbf{Q}\mathbf{l} - i\mathbf{q}\mathbf{l}) + D^* \exp(-i\mathbf{Q}\mathbf{l} + i\mathbf{q}\mathbf{l})$$

Низкотемпературный режим флуктуаций
Флуктуации амплитуды “выморожены”

where $\mathbf{l} = (n_x a, n_y a)$ numerates lattice sites and $D = |D|e^{i\phi}$ denotes the complex amplitude of fluctuating SDW (or CDW) order parameter, while $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$ is a small deviation from the dominating scattering vector $\mathbf{Q} = (Q_x, Q_y) = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$.

$$\mathcal{P}(q_x, q_y) = \frac{1}{\pi^2} \frac{\kappa}{q_x^2 + \kappa^2} \frac{\kappa}{q_y^2 + \kappa^2}$$

where $\kappa = \xi^{-1}$ is determined by the inverse correlation length of short-range order. Phase ϕ is also considered to be random and distributed uniformly on the interval $[0, 2\pi]$.

$$G_D(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) + i v \kappa}{(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k}))(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) + i v \kappa) - |D|^2}$$

where $v = |v_x(\mathbf{k} + \mathbf{Q})| + |v_y(\mathbf{k} + \mathbf{Q})|$, with $v_{x,y}(\mathbf{k}) = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial k_{x,y}}$.

Полюса функции Грина ($v\kappa \ll t$)

$$\tilde{E}(\pm) = E_{\mathbf{k}}^{(\pm)} - i \frac{v\kappa}{2} \left(1 \mp \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(-)}}{E_{\mathbf{k}}} \right)$$

with $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(\pm)} = \frac{1}{2}[\varepsilon(\mathbf{k}) \pm \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q})]$, $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(-)2} + |D|^2}$,

$$E_{\mathbf{k}}^{(\pm)} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{(+)} \pm \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(-)2} + |D|^2}$$

Максимальное
затухание:

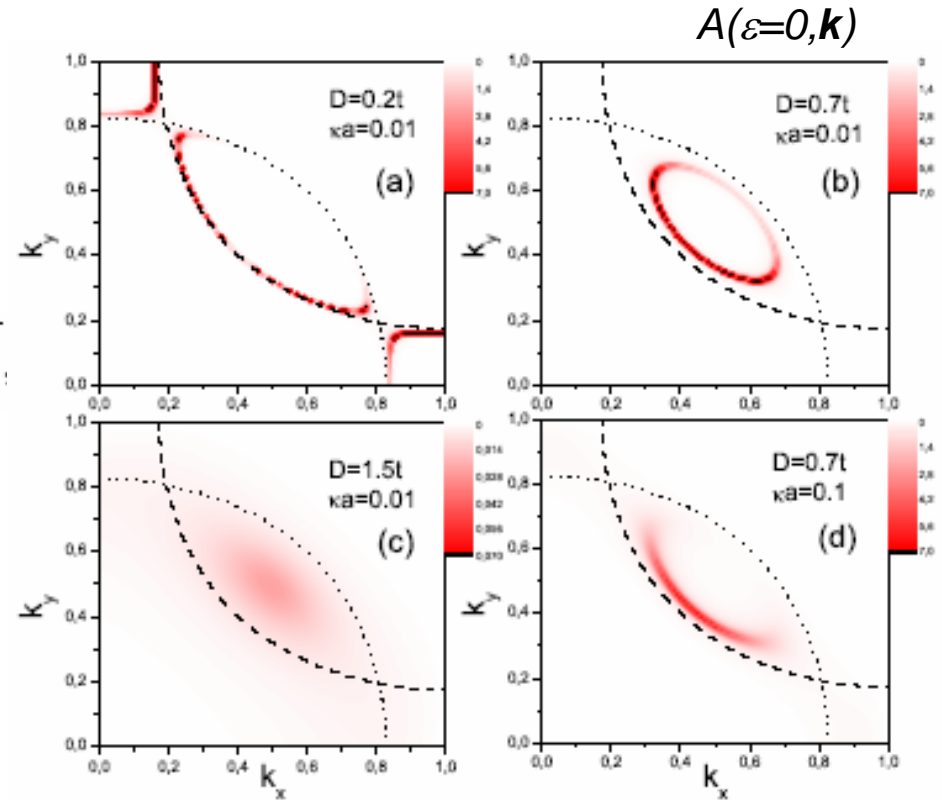
Дыроочный: $E_{\mathbf{k}}^{(-)} = 0 \approx v_F^{\text{n}} \kappa$ $v_F^{\text{n}} = |v_x(\mathbf{k}) + |v_y(\mathbf{k})||_{\varepsilon(\mathbf{k})=0, k_x=k_y}$ нодальная

Электронный: $E_{\mathbf{k}}^{(+)} = 0 \approx v_F^{\text{a}} \kappa$ $v_F^{\text{a}} = |v_x(\mathbf{k}) + |v_y(\mathbf{k})||_{\varepsilon(\mathbf{k})=0, k_x=\frac{\pi}{a}}$ антинодальная

Исчезновение кармана:

Дыроочный: $|D| = -\mu = 1.08t$

Электронный: $|D| = \mu - 4t' = 0.52t$



Критерий наблюдаемости осцилляций

$$\omega_H \tau \sim \omega_H \frac{\xi}{\langle v_F \rangle} \sim \frac{\omega_H \xi}{t a} \gg 1$$

$$\langle v_F \rangle = \begin{cases} v_F^n & \text{for hole "pocket"} \\ v_F^a & \text{for electronic "pocket"} \end{cases}$$

Жесткий критерий, завышающий эффективное затухание

$$\xi = 100 a \longrightarrow \omega_H \tau \approx 0.8 \text{ for hole "pocket"}$$

$$H = 50 \text{ T} \longrightarrow \omega_H \tau \approx 1.3 \text{ for electronic "pockets"}$$

Необходимо

$$\xi \sim 50-100 a$$

Теорема Латтинжера и допирование

$$p = 1 - n = a^2 \frac{S_h - S'_e}{\pi^2} = a^2 \frac{S_h - S_e/2}{\pi^2} \quad (|D| \rightarrow 0!)$$

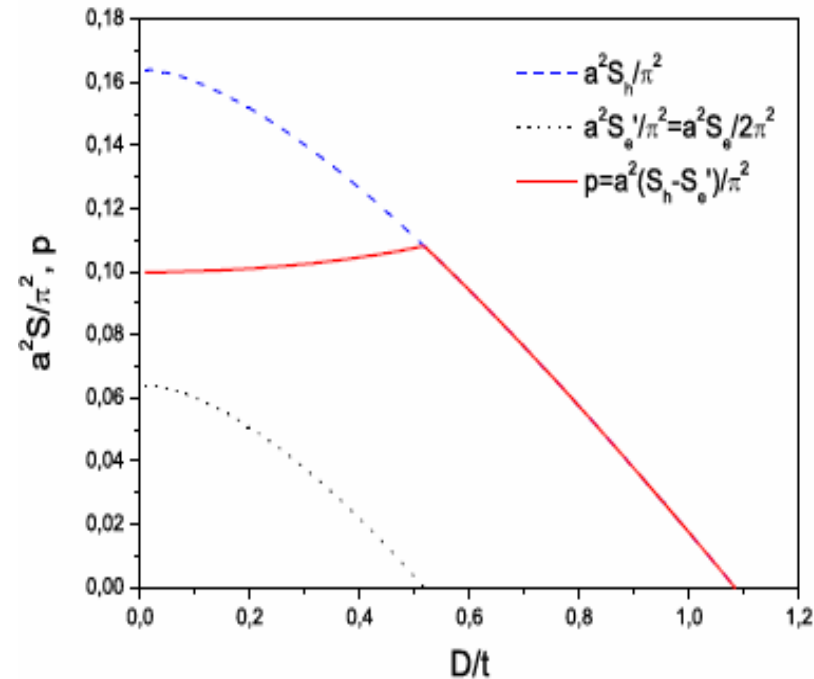
S_h – площадь дырочного кармана,

S'_e – площадь частей электронного кармана
в четверти зоны Бриллюэна

$$F \approx 540 \text{ T} \text{ only the hole "pocket"} \longrightarrow p = a^2 S_h / \pi^2 = 0.078 \longrightarrow |D| \approx 0.7t$$

$$F_\alpha = 500 \text{ T (электронный)} \longrightarrow p = 0.21$$

$$F_\beta = 1650 \text{ T (дырочный)}$$



Высокотемпературный режим AFM флуктуаций

$$\mathcal{P}_D(|D|) = \frac{2|D|}{\Delta^2} \exp\left(-\frac{|D|^2}{\Delta^2}\right) \quad \text{Распределение Релея}$$

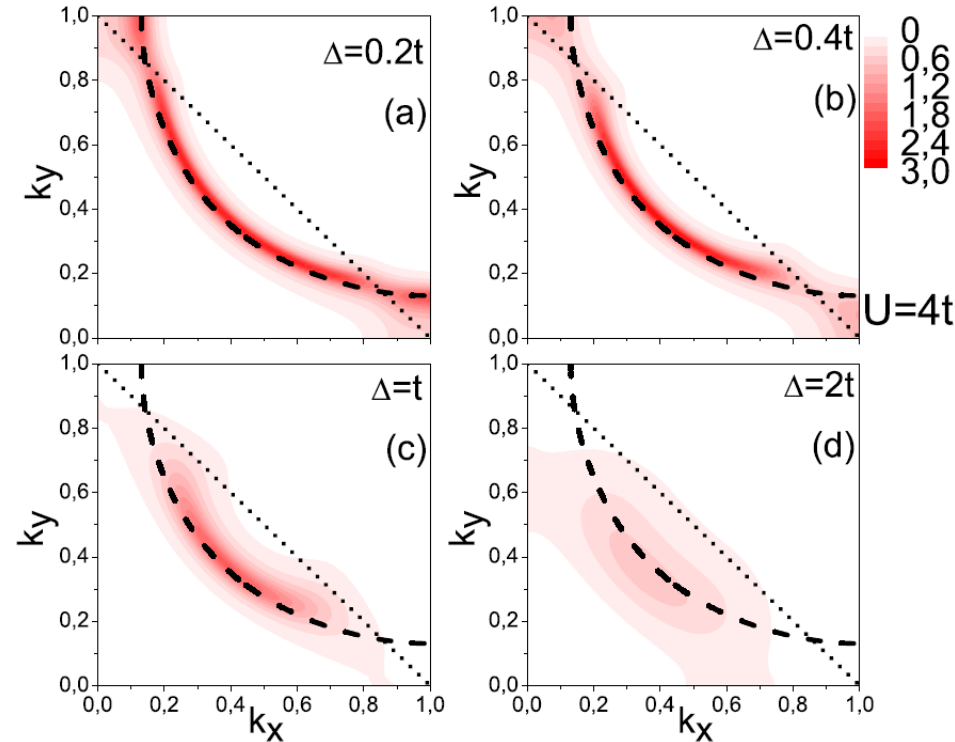
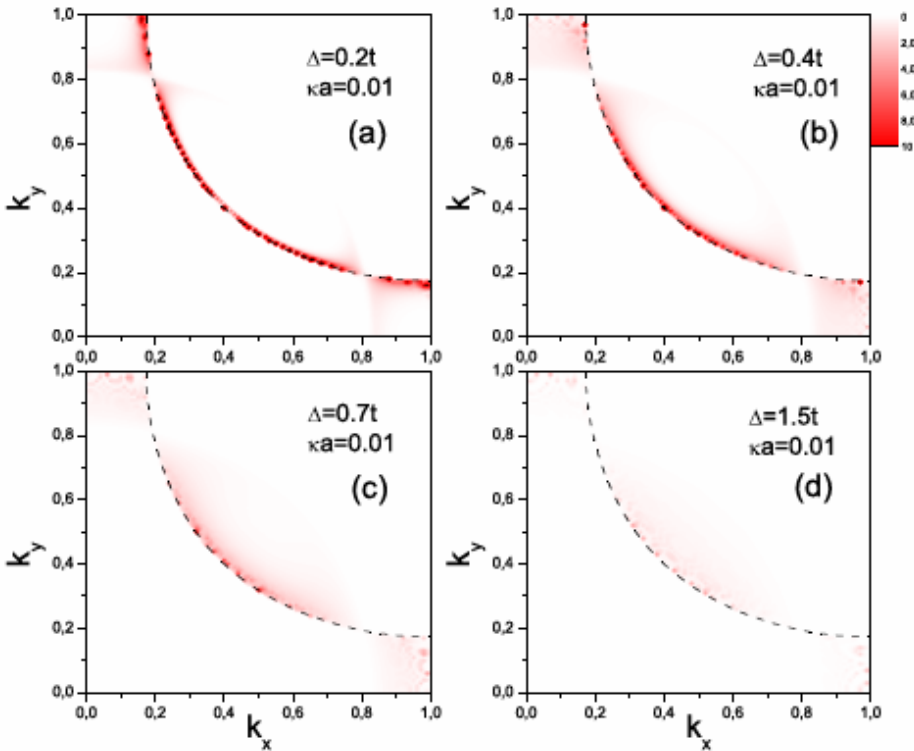
$$G_\Delta(\varepsilon, \mathbf{k}) = \int_0^\infty d|D| \mathcal{P}_D(|D|) G_D(\varepsilon, \mathbf{k})$$

Спин-фермионная модель

J. Schmalian et al, *Phys. Rev.* **B60**, 667 (1999);

М.В.Садовский, УФН **171**, 539 (2001)

$\kappa a = 0.1$

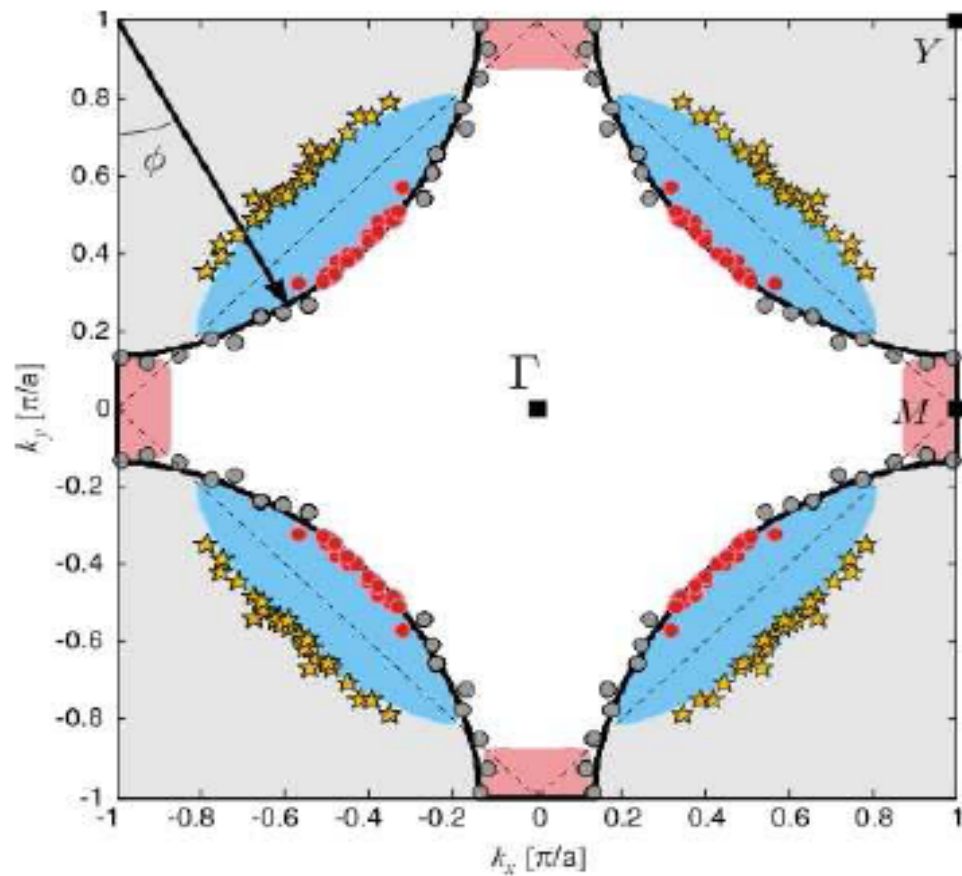


Модель демонстрирует эволюцию от “Ферми дуг”, наблюдающихся в ARPES экспериментах при относительно высоких температурах к “малым” электронным и дырочным “карманам”, наблюдающимся в экспериментах по магнитным осцилляциям при низких температурах.

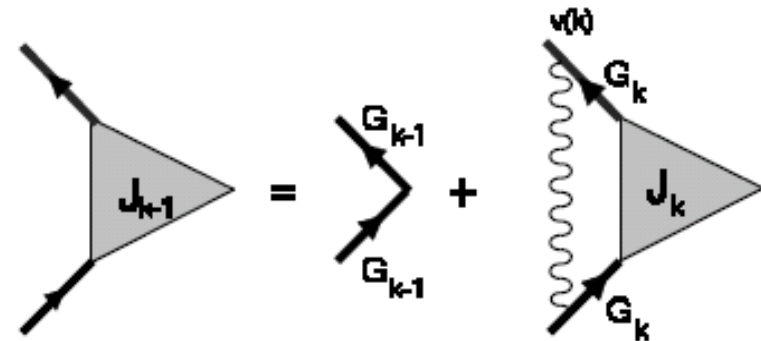
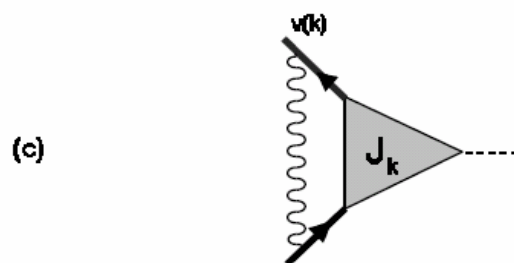
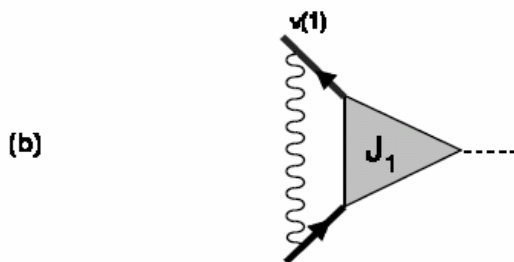
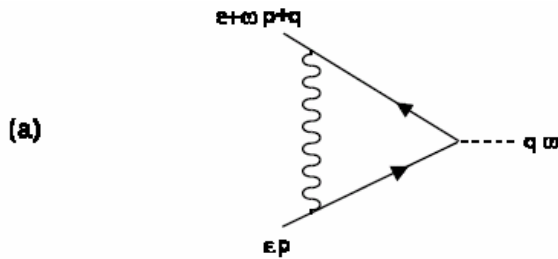
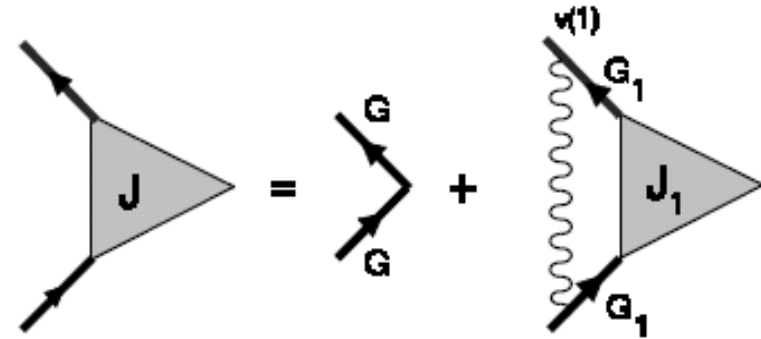
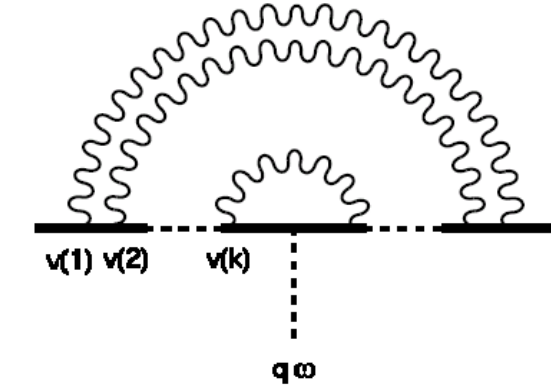
$T=15$ K (40, 80, 110), $p=0.12$ (дырочное)

$t=240$ meV, $t'/t=-0.325$ $D=30$ meV

- Наблюдается пик спектральной плотности на теневой поверхности Ферми (звезды)
- Этот пик шире, чем в нодальной окрестности поверхности Ферми (красные круги) и ослабевает с ростом температуры (пропадает при $T^* \sim 155$ K)
- **Отрицательный** коэффициент Холла при низких температурах



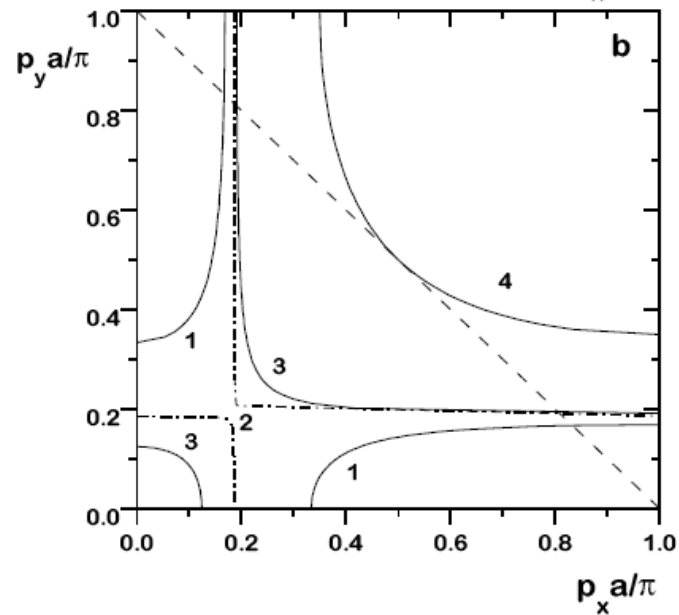
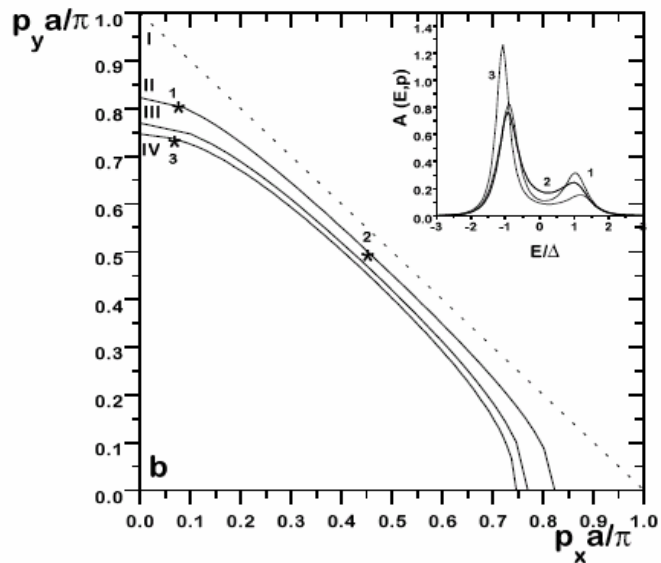
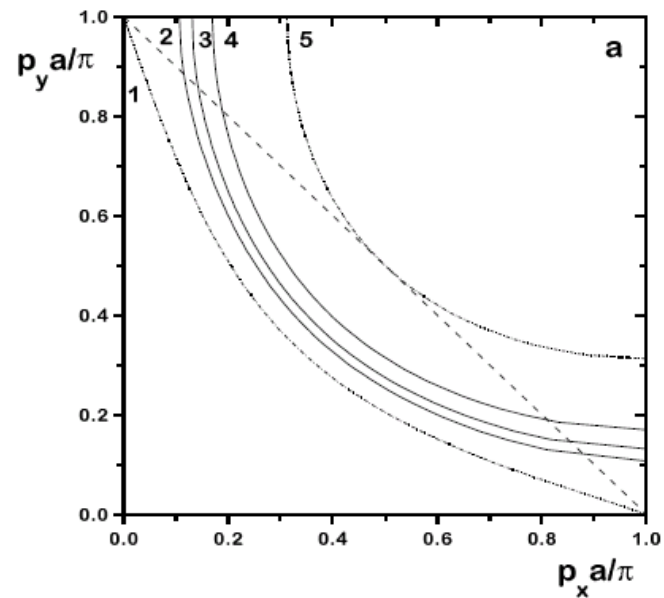
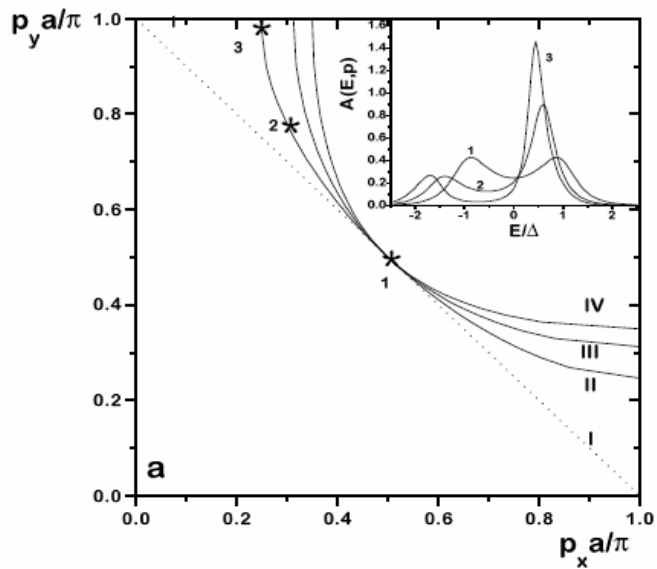
Рекуррентные уравнения для вершины



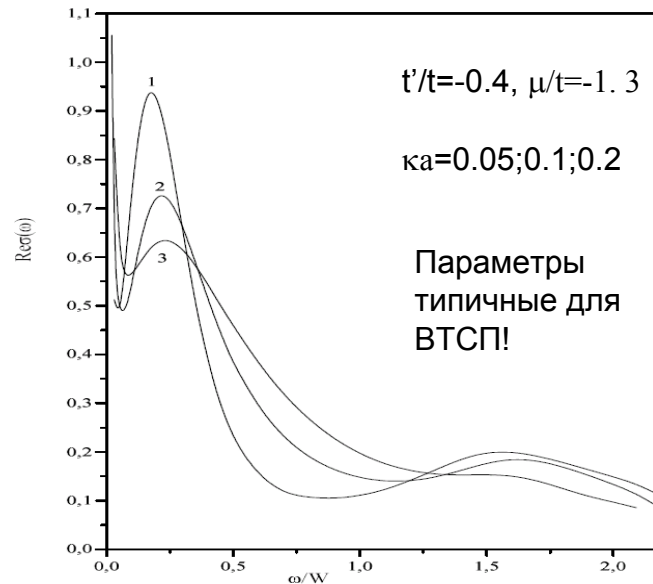
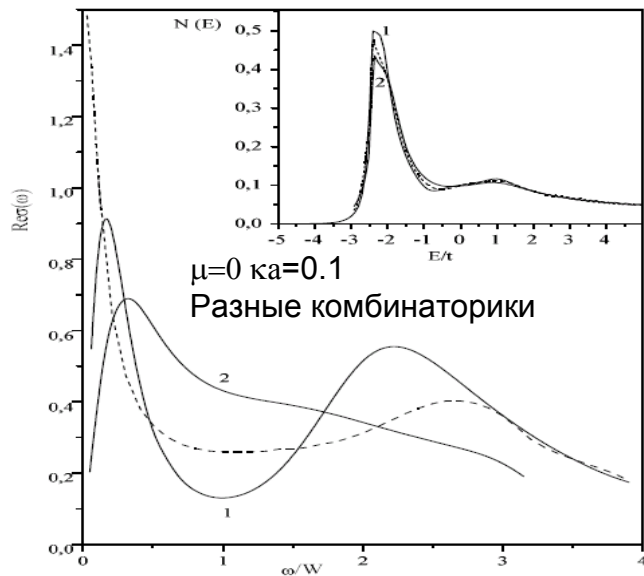
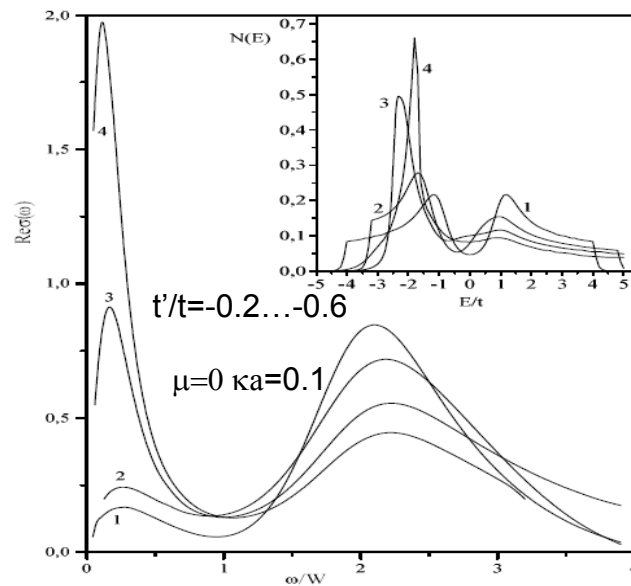
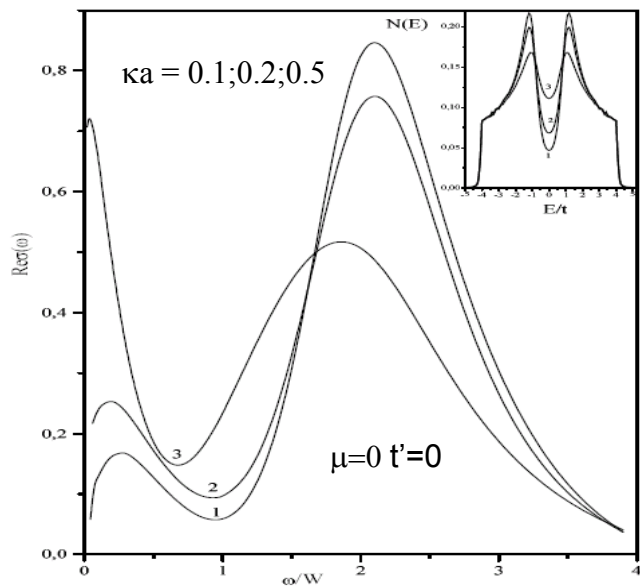
$$J_{k-1}^{RA} = 1 + W^2 v(k) G_k^A(\varepsilon, \xi_p) G_k^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) \left\{ 1 + \frac{2iv_k \kappa k}{\omega - \xi_k(\mathbf{p} + \mathbf{q}) + \xi_k(\mathbf{p}) - \Sigma_{k+1}^R(\varepsilon + \omega, \xi_{p+q}) + \Sigma_{k+1}^A(\varepsilon, \xi_p)} \right\} J_k^{RA}$$

“Физическая” вершина $J^{RA}(\varepsilon \mathbf{p}; \varepsilon + \omega \mathbf{p} + \mathbf{q})$ определяется как $J_{k=0}^{RA}(\varepsilon \mathbf{p}; \varepsilon + \omega \mathbf{p} + \mathbf{q})$.

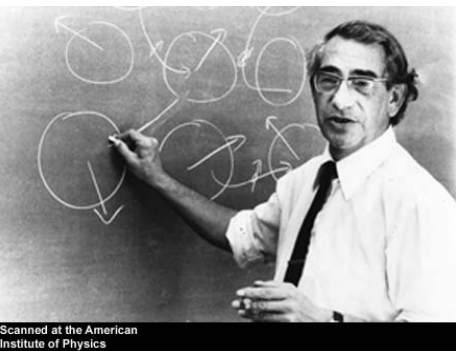
Поверхности Ферми с разной топологией



Оптическая проводимость - разные поверхности Ферми

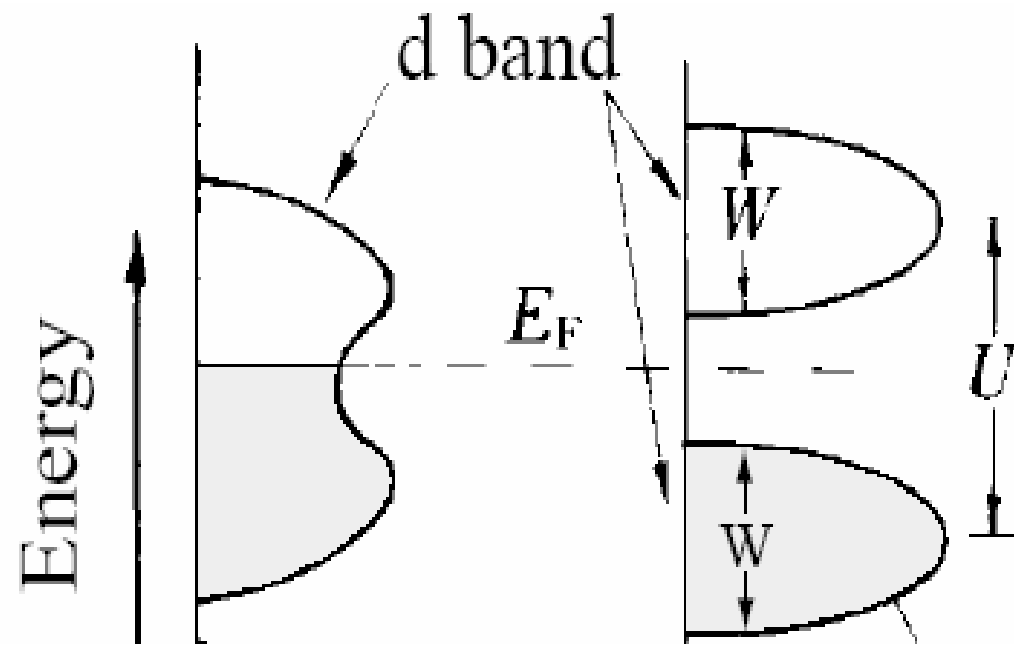
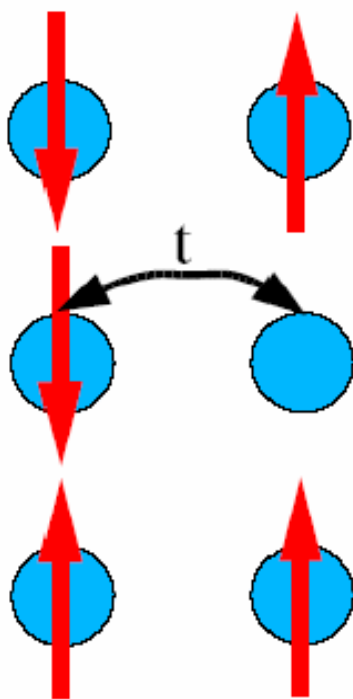


Модель Хаббарда – сильные корреляции



$$H = - \sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

J. Hubbard (1964)



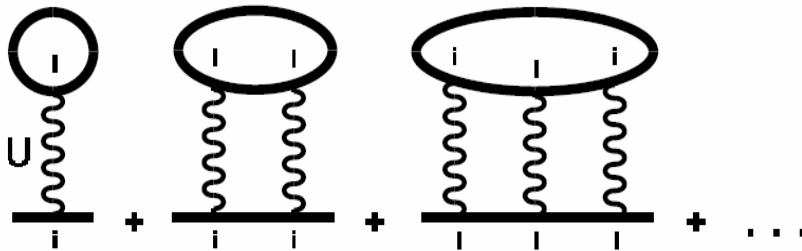
Металл

Моттовский диэлектрик

Приближение DMFT

$$H = - \sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

J.Hubbard (1964)



В бесконечномерном пределе

$$d \rightarrow \infty$$

с.э.ч. *локальна*, т.е.

$$\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega) \rightarrow \Sigma(i\omega)$$

Тогда задача *точно* (!) сводится к примесной модели Андерсона, которая может быть решена соответствующим “impurity solver” (QMC, CTQMC, NRG, NCA и.т.п.)

W.Metzner, D.Vollhardt, 1989, A.Georges, G.Kotliar, 1992, Th.Pruschke, M.Jarrell, 1992

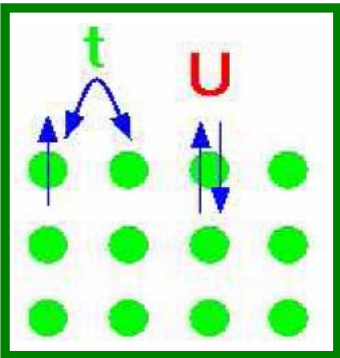
Отсутствие \mathbf{k} -зависимости с.э.ч. – основной недостаток стандартной DMFT, но именно благодаря этому и получается точное решение!

Стандартный алгоритм DMFT :

1. Guess some initial value of *local* self – energy $\Sigma(i\omega)$, e.g. $\Sigma(i\omega) = 0$.
2. Calculate local Green’s function as:

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

Hubbard



3. Define the “Weiss field” as:

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

4. Using some “impurity solver” calculate Green’s function for the effective Anderson impurity, defined by Grassmanian functional integral:

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

with effective action for a fixed site (“impurity”) i

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

and $Z_{\text{eff}} = \int Dc_{i\sigma}^+ Dc_{i\sigma} \exp(-S_{\text{eff}})$, with $\beta = T^{-1}$, thus defining in fact the *new* value of $G_d^{-1}(i\omega)$.

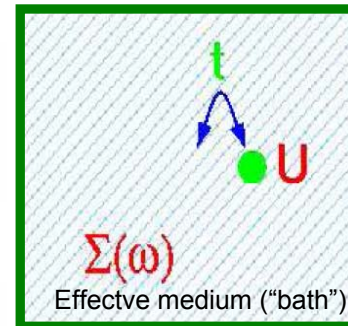
5. Define the *new* value of local self – energy as:

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

6. Using this new value as “initial” in step 1 continue the procedure until (and if) convergence is reached to obtain:

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

Effective Anderson



Основные результаты

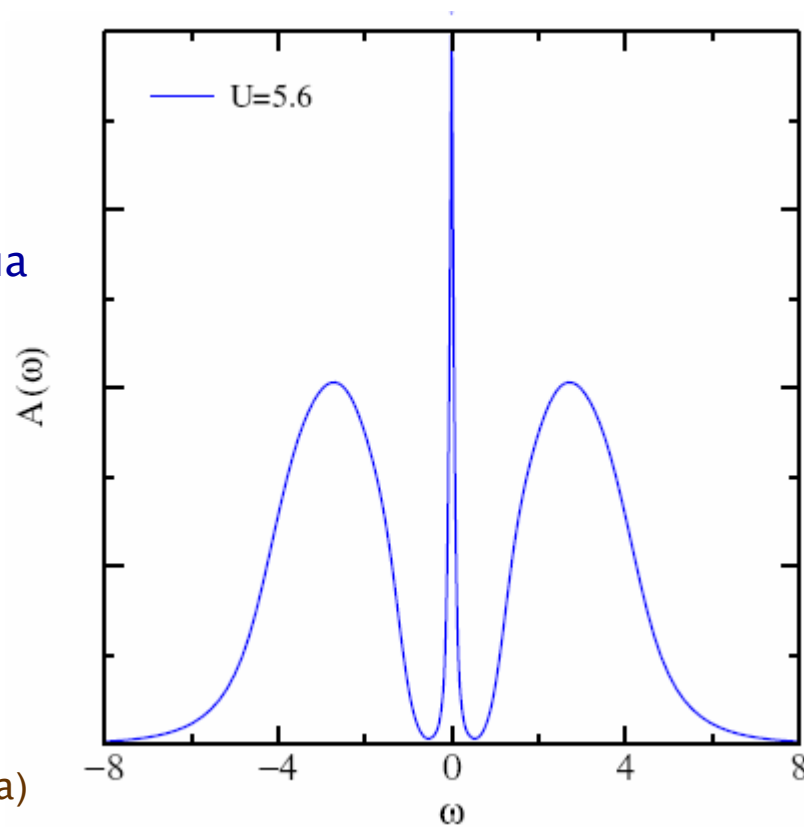
DMFT демонстрирует формирование хаббардовских и квазичастичной зоны на Уровне Ферми.

$$W=2D=2Zt=4$$

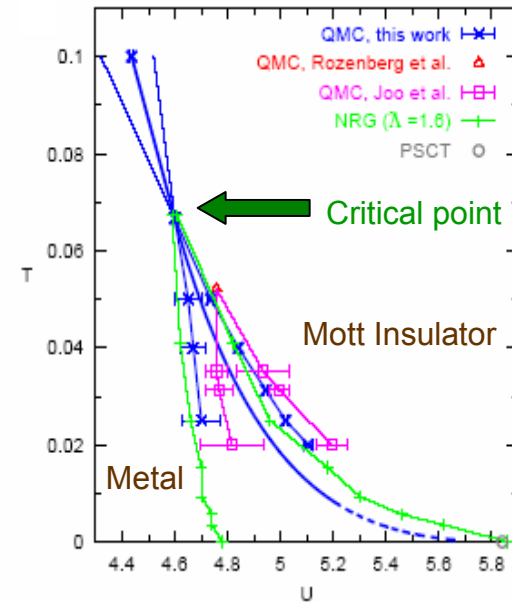
$$U_c=1.5W=6$$

Энергии в единицах t
 $Z=4$ (кубическая решетка)

$$N(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(\omega)$$



Переход Мотта при $U=6$.



Metal – Fermi liquid

$$\Sigma(\omega) = \left(1 - \frac{1}{Z}\right)\omega - iB\omega^2 + \mathcal{O}(\omega^3)$$

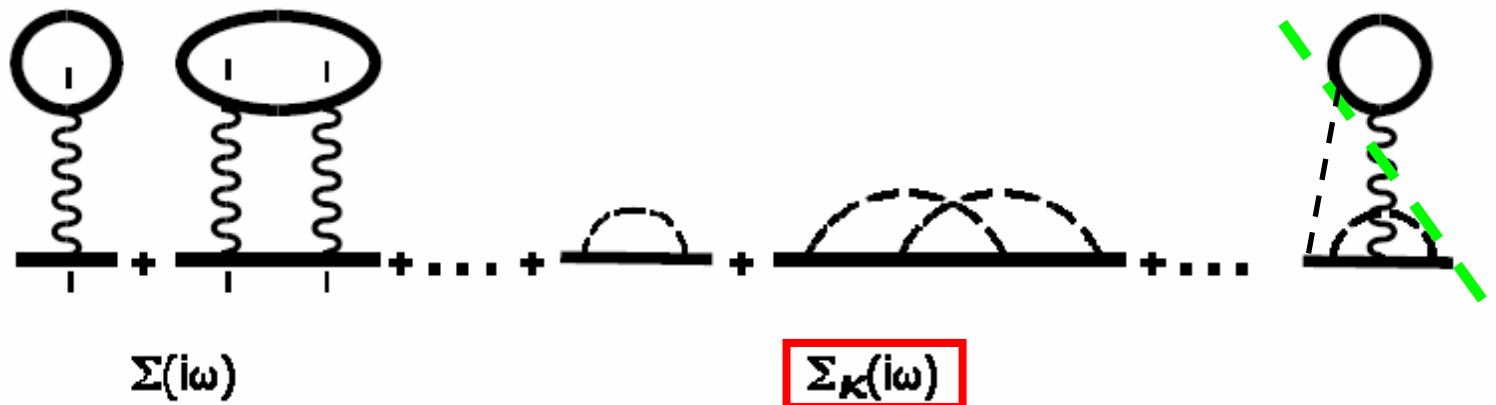
$$\frac{m^*}{m} = \frac{1}{Z} = 1 - \left. \frac{\partial \text{Re}\Sigma(\omega+i0^+)}{\partial \omega} \right|_{\omega=0}$$

Основы DMFT+ Σ подхода

- DMFT+ Σ :

M.V.Sadovskii, I.A.Nekrasov,
E.Z.Kuchinskii, Th.Pruschke,
V.I.Anisimov (2005)

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



$\Sigma_{\mathbf{k}}$ – с.э.ч. от “внешнего” взаимодействия!

Алгоритм DMFT+ Σ :

1. Guess some initial value of *local* self – energy $\Sigma(i\omega)$, e.g. $\Sigma(i\omega) = 0$.
2. Construct $\Sigma_p(i\varepsilon)$ within some (approximate) scheme, taking into account interactions with “external” interaction (impurity scattering in our case) which in general can depend on $\Sigma(i\omega)$ and μ .
3. Calculate local Green’s function as:

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

4. Define the “Weiss field” as:

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

5. Using some “impurity solver” calculate Green’s function for the effective Anderson impurity, defined by Grassmanian functional integral:

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

with effective action for a fixed site (“impurity”) i

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

and $Z_{\text{eff}} = \int Dc_{i\sigma}^+ Dc_{i\sigma} \exp(-S_{\text{eff}})$, with $\beta = T^{-1}$, thus defining in fact the *new* value of $G_d^{-1}(i\omega)$.

6. Define the *new* value of local self – energy as:

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

7. Using this new value as “initial” in step 1 continue the procedure until (and if) convergence is reached to obtain:

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

$\Sigma_{\mathbf{k}}$ - SDW(CDW) флуктуации

Spin - Fermion (SF) or CDW model

We take into account ALL(!)
diagrams for quenched (Gaussian)
AFM (CDW) fluctuations

Valid for $T \gg \omega_{sf}$!



$\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega)$

$$\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega) = \Sigma_{n=1}(i\omega\mathbf{k})$$

M.V.Sadovskii, 1979
E.Z.Kuchinskii, M.V.Sadovskii, 1999
D.Pines, J.Schmalian, B.Stoikovic, 1999

with

$$\Sigma_n(\omega\mathbf{k}) = \Delta^2 \frac{s(n)}{i\omega + \mu - \Sigma(i\omega) - \varepsilon_n(\mathbf{k}) + in v_n \kappa - \Sigma_{n+1}(i\omega\mathbf{k})}$$

where Δ characterizes the energy scale and $\kappa = \xi^{-1}$ is the inverse correlation length of SDW (CDW) fluctuations, $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ and $v_n = |v_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^x| + |v_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^y|$ for odd n while $\varepsilon_n(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p})$ and $v_n = |v_{\mathbf{k}}^x| + |v_{\mathbf{k}}^y|$ for even n , with velocity projections $v_{\mathbf{k}}^x$ and $v_{\mathbf{k}}^y$ determined by usual momentum derivatives of the “bare” spectrum which we always take in the standard form:

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

$S(n)$ - is defined by diagram combinatorics (AFM(SDW), CDW, commensurate etc.)

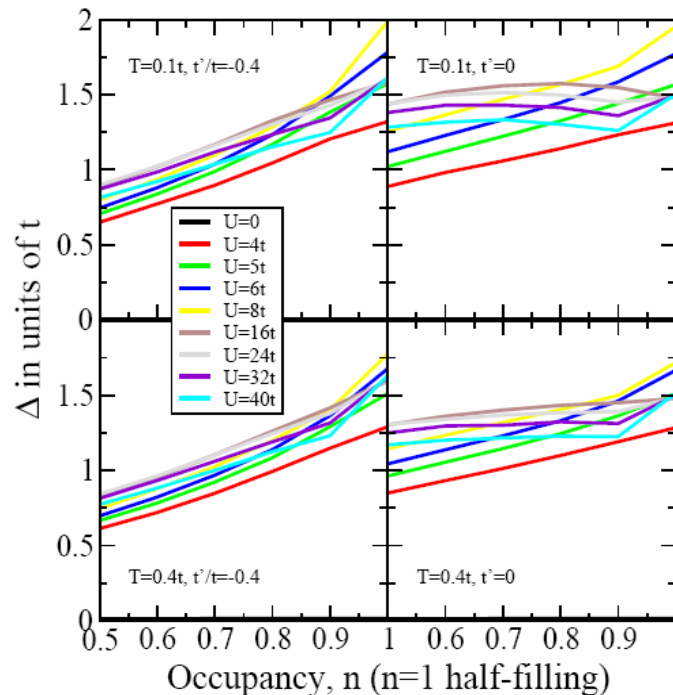
Эффективные параметры в модели Хаббарда

$$H = - \sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

Two - particle self - consistent approximation Y.Vilk, A-M.Tremblay, 1997

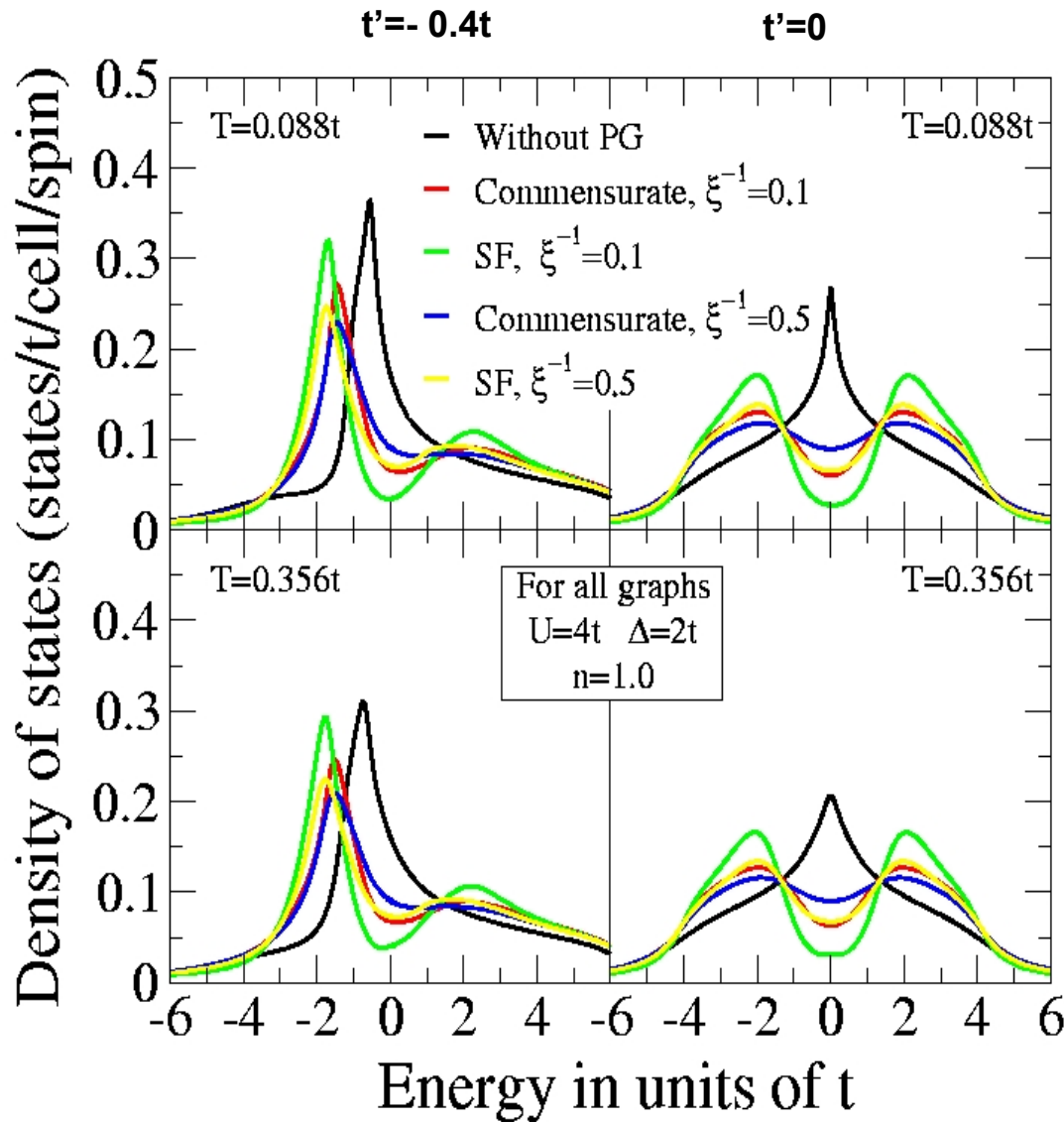
$$\begin{aligned} \Delta^2 &= \frac{1}{4} U^2 \frac{\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle}{\langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle} [\langle n_{i\uparrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle - 2 \langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle] \\ &= U^2 \frac{\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle}{n^2} \langle (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2 \rangle \end{aligned}$$

QMC results



Correlation length ξ is always considered as phenomenological parameter to be determined from experiments. Typically $\xi \sim 5-10a$.

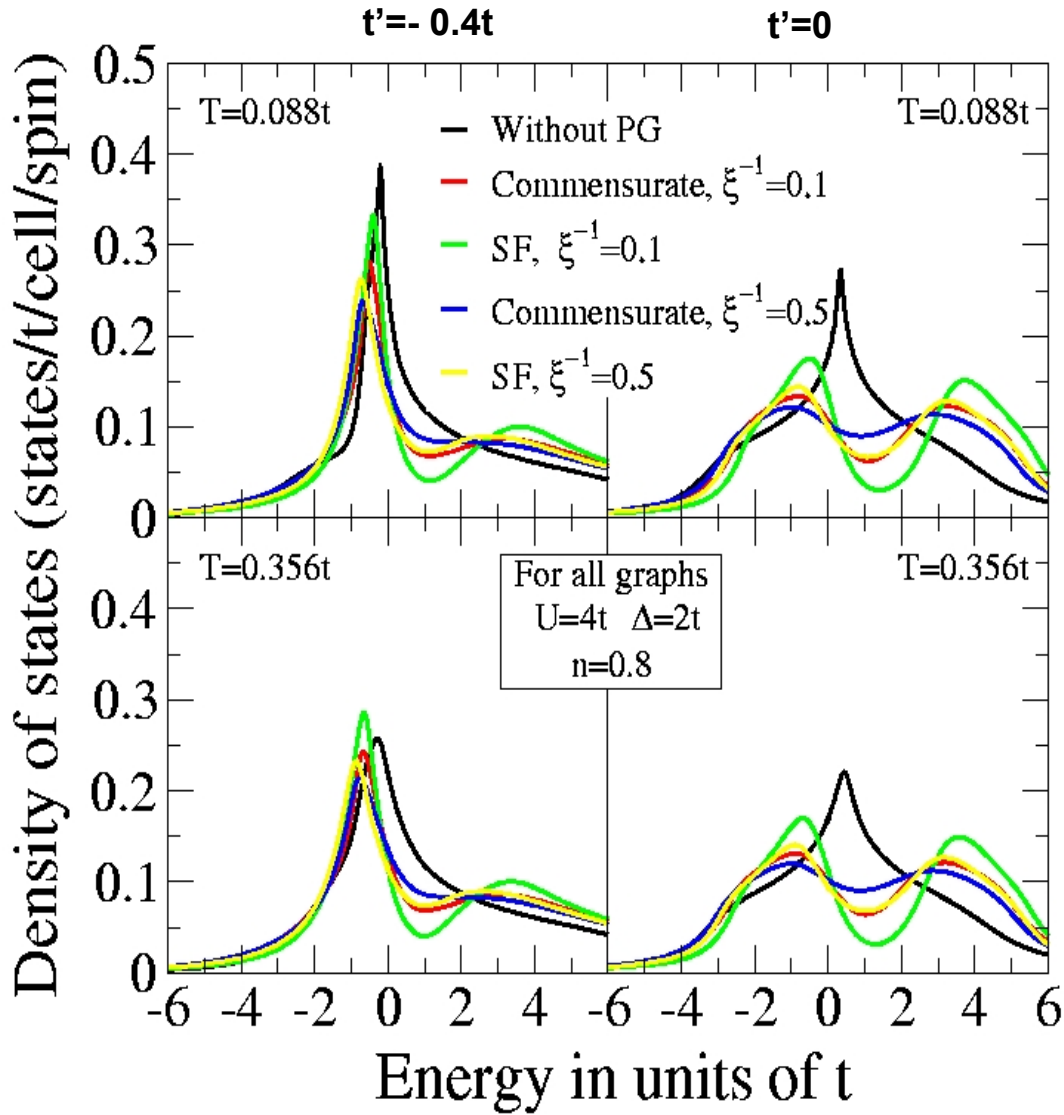
Плотность состояний – коррелированный металл ($U < W$)



DMFT + Σ_k
results

Impurity solver -NRG

Плотность состояний – коррелированный металл ($U < W$)

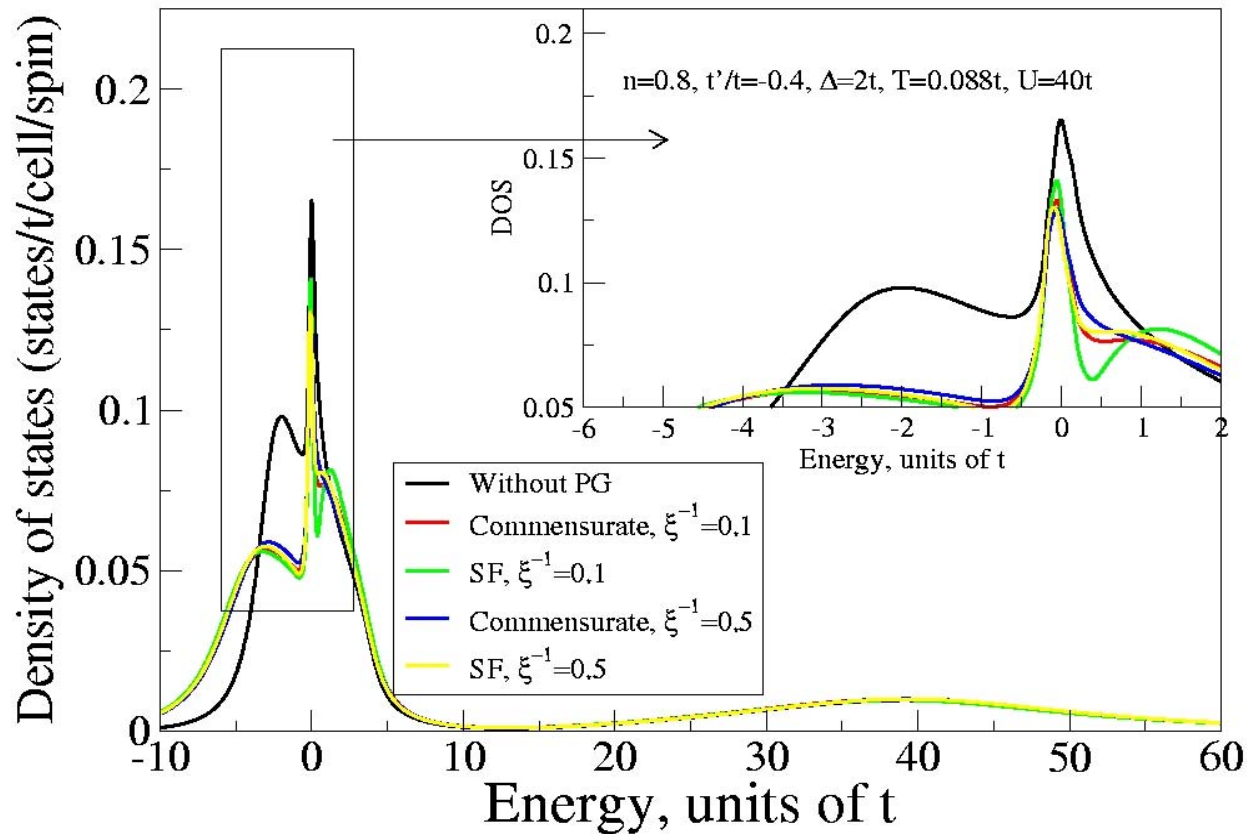


DMFT + Σ_k
results

Impurity solver - NRG

K.G. Wilson, 1975,
 R. Bulla, A.C. Hewson,
 Th. Pruschke, 1999

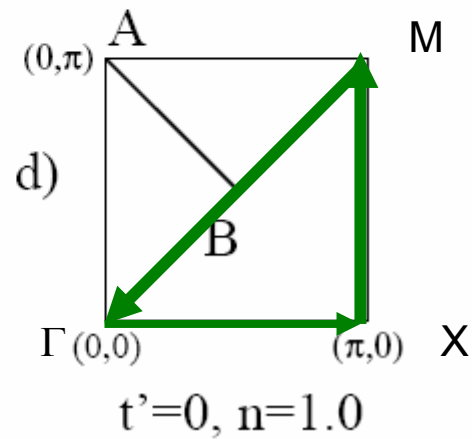
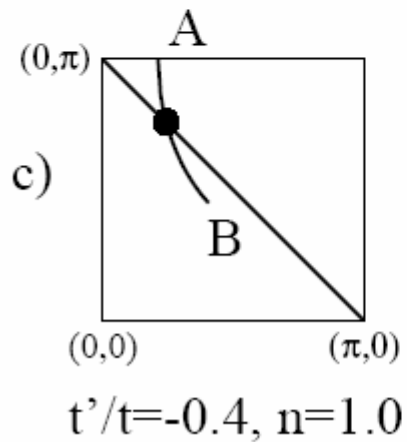
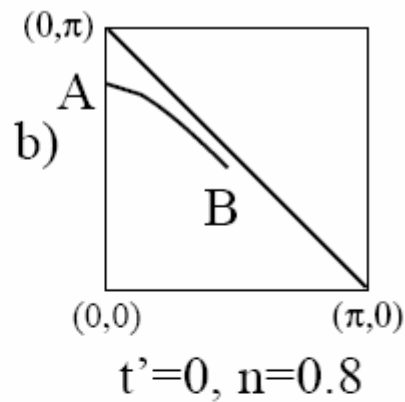
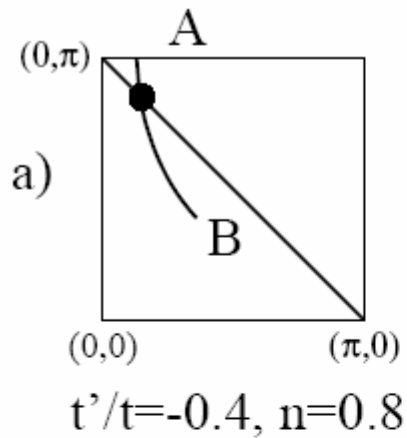
Легированный моттовский диэлектрик ($U \gg W$)



Impurity solver-NRG

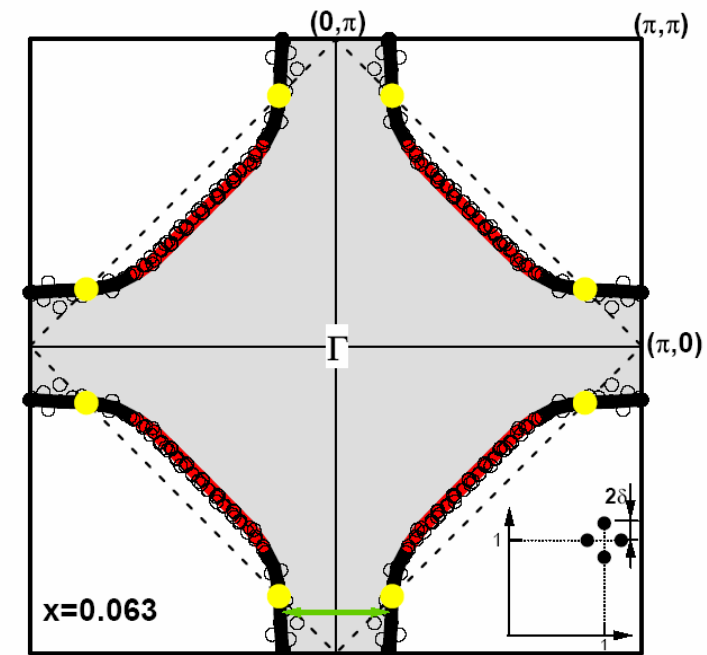
K.G.Wilson, 1975,
R.Bulla, A.C.Hewson,
Th. Pruschke, 1999

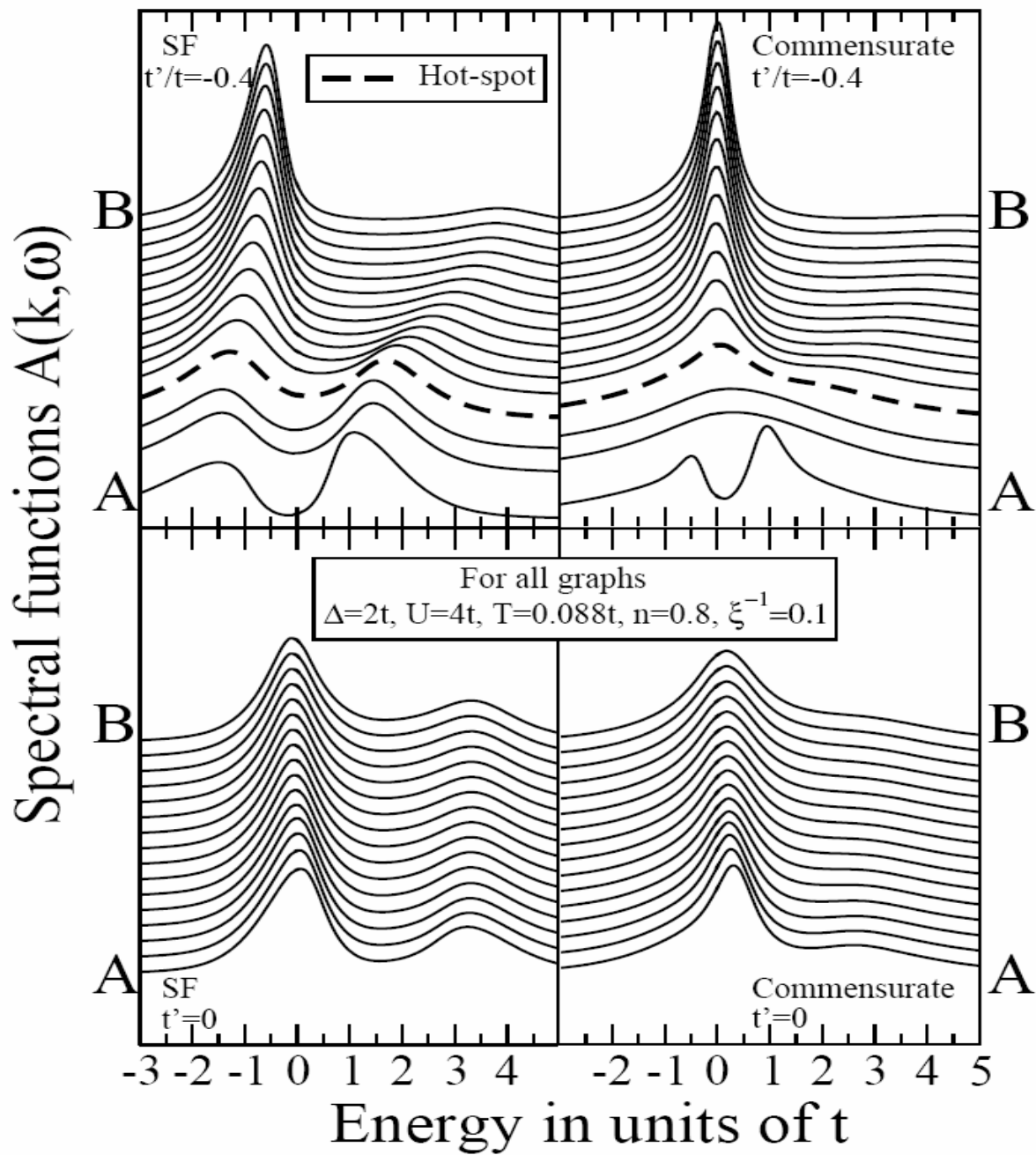
Спектральная плотность и ARPES

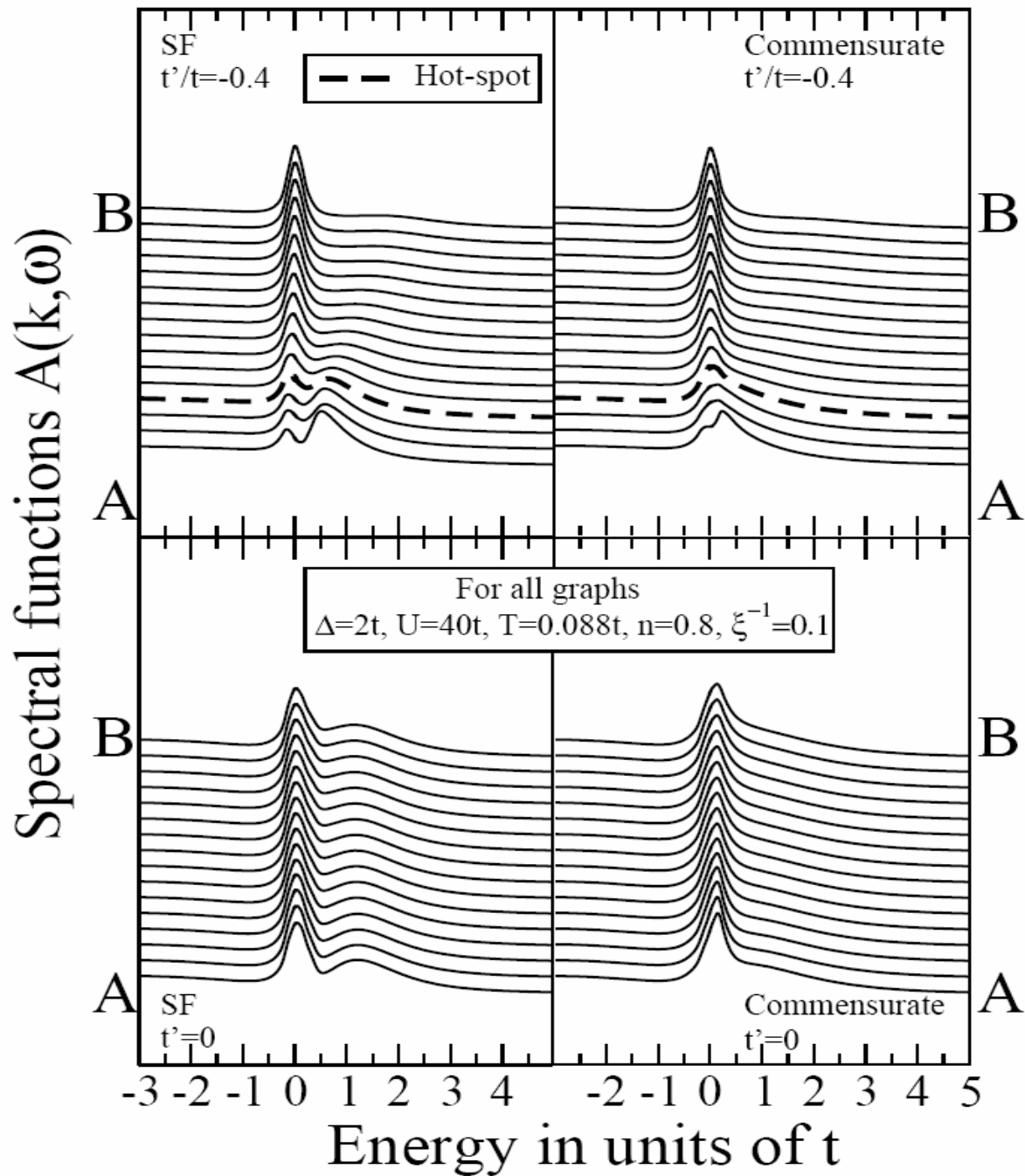


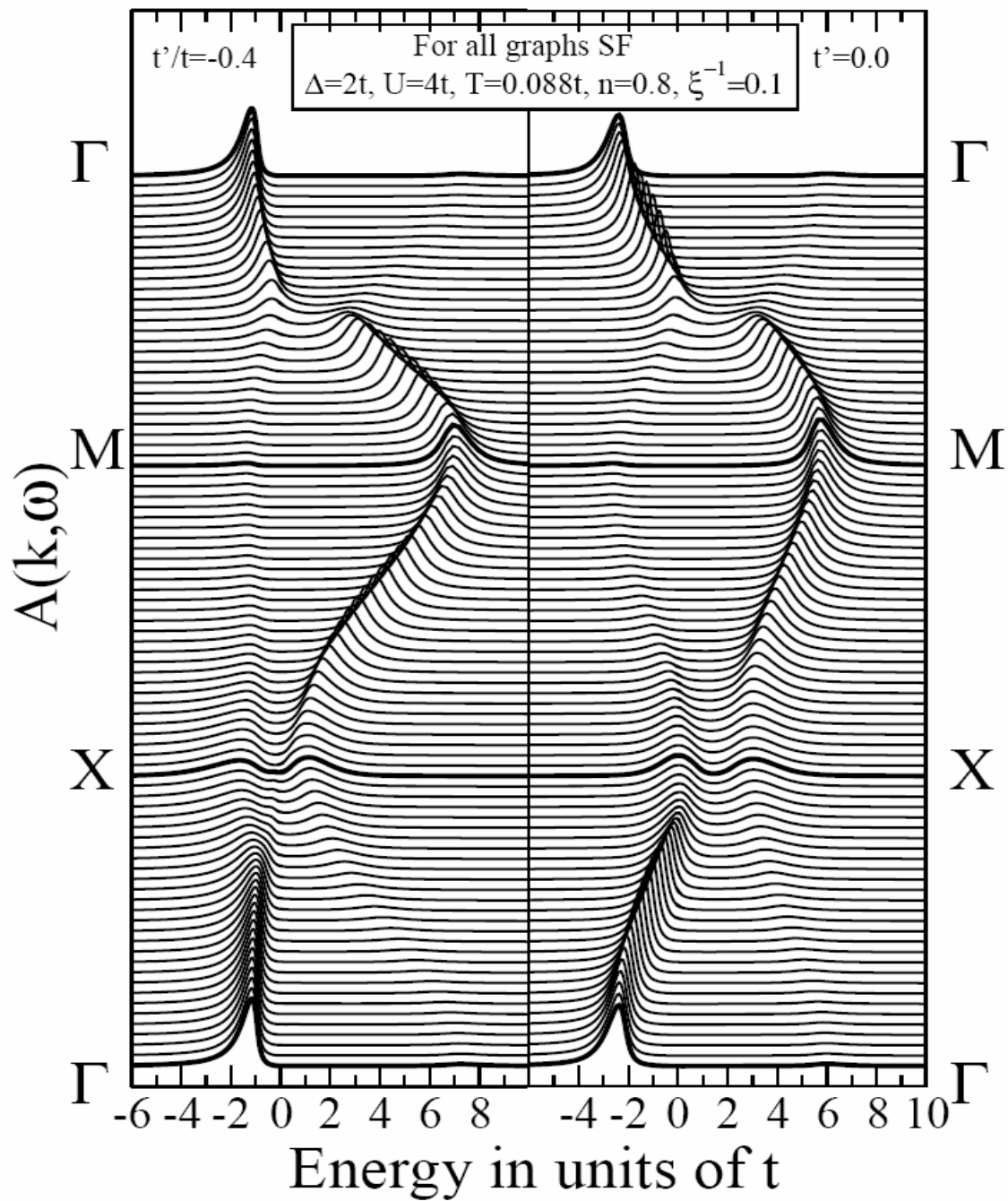
Typical Fermi surface of copper -
oxide superconductor
($La_{2-x}Sr_xCuO_4$)

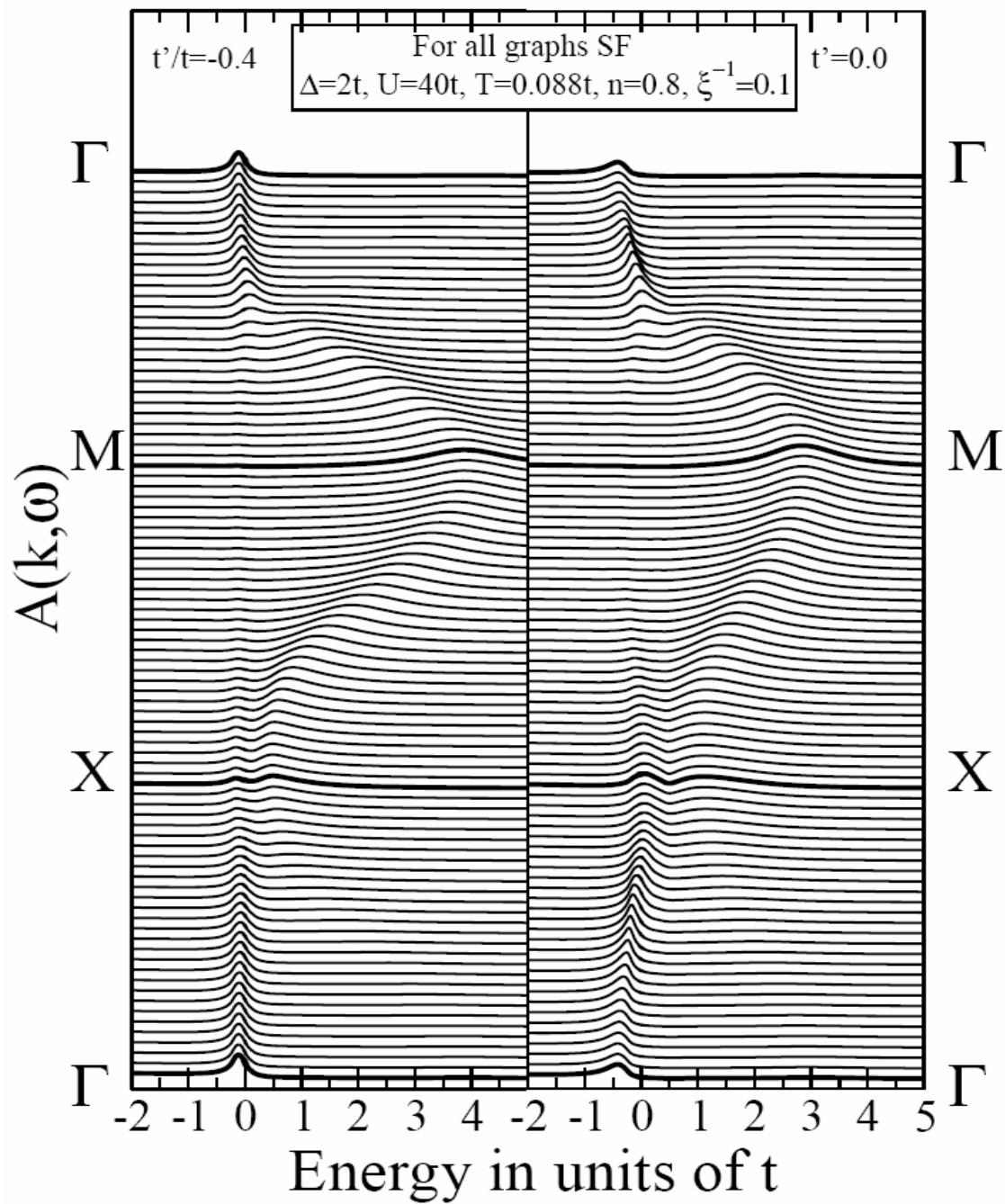
Z.X.Shen et al. (2004)





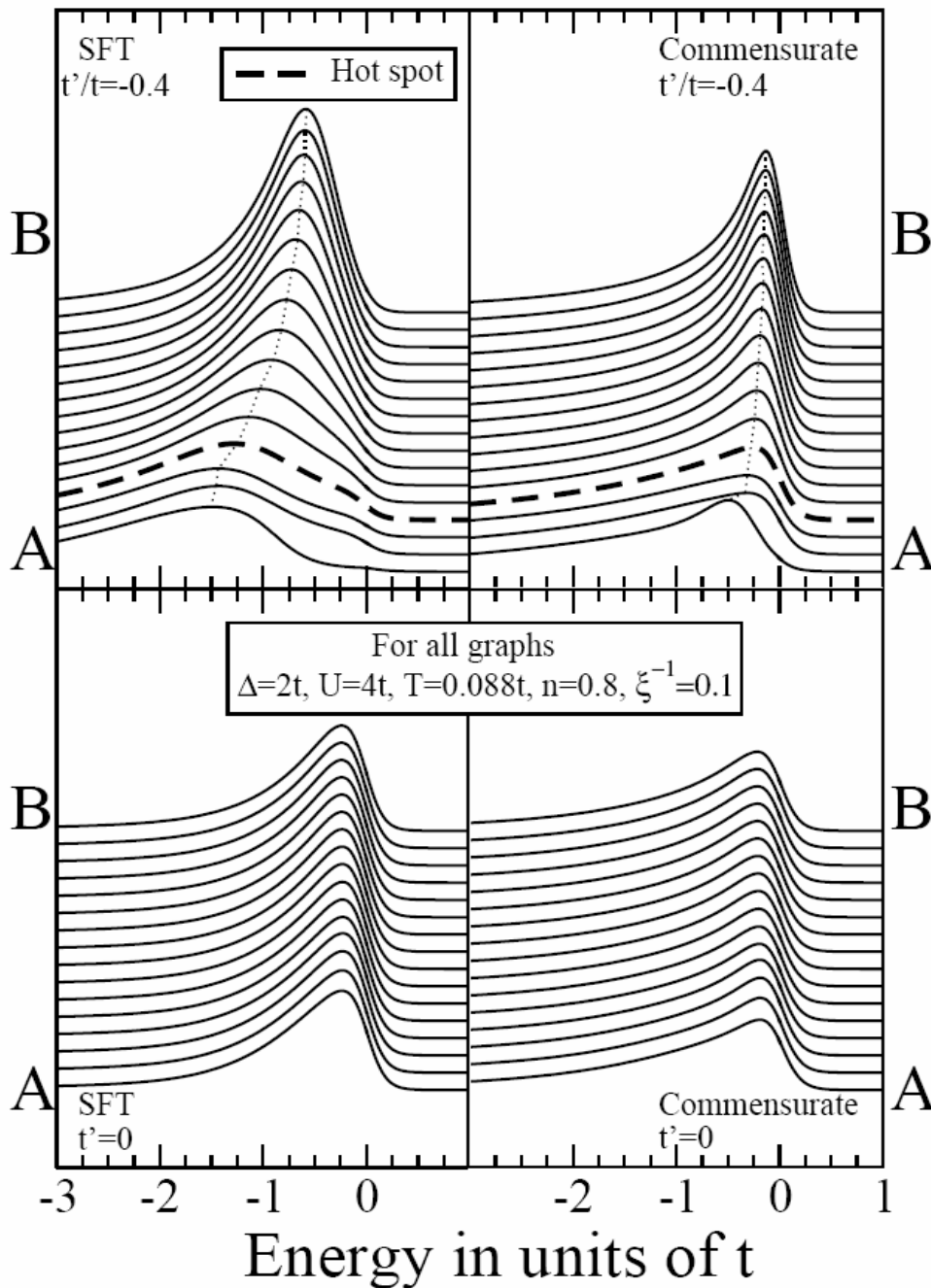




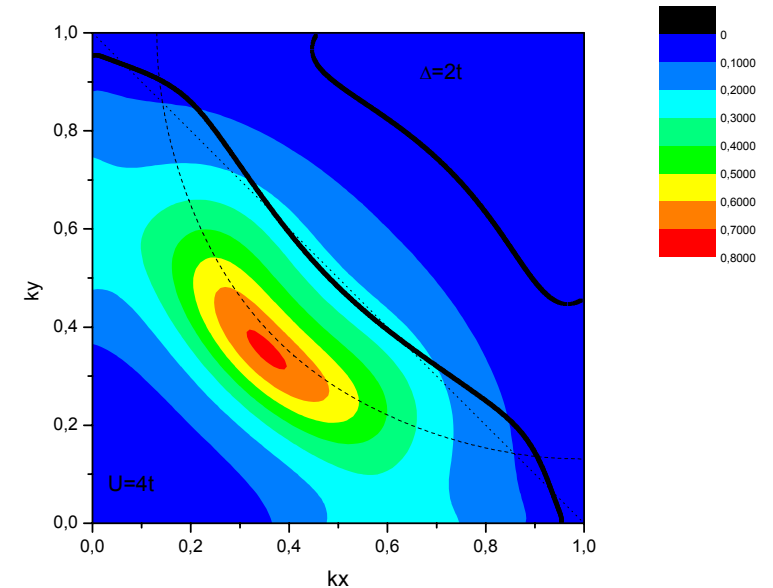
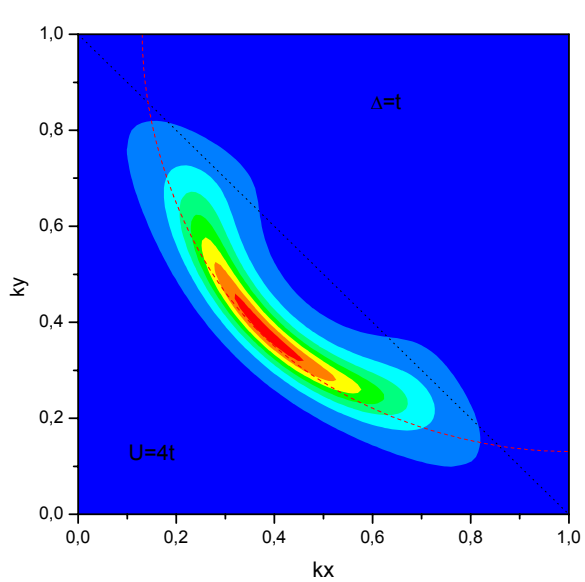
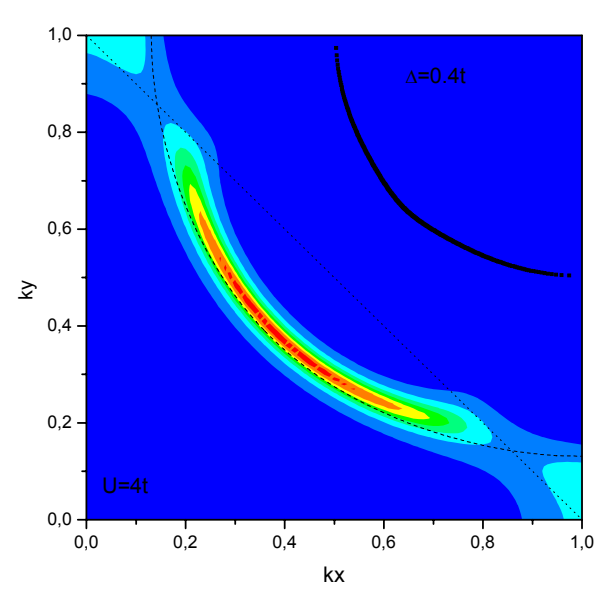
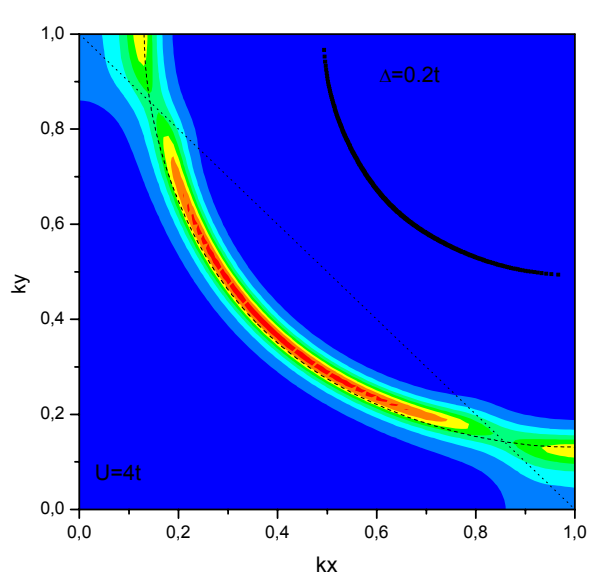


$$f(\omega)A(\mathbf{k}\omega)$$

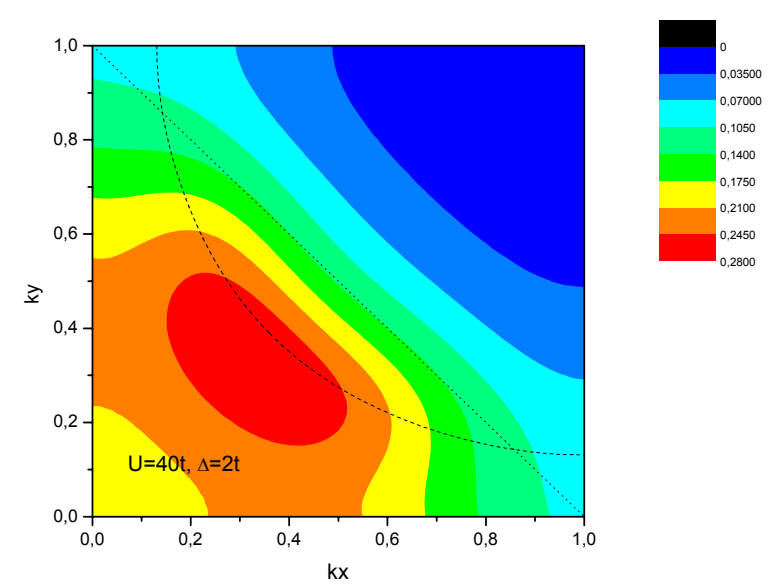
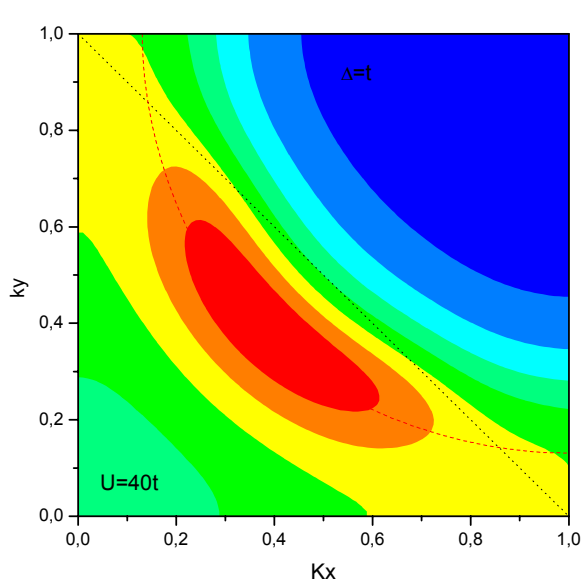
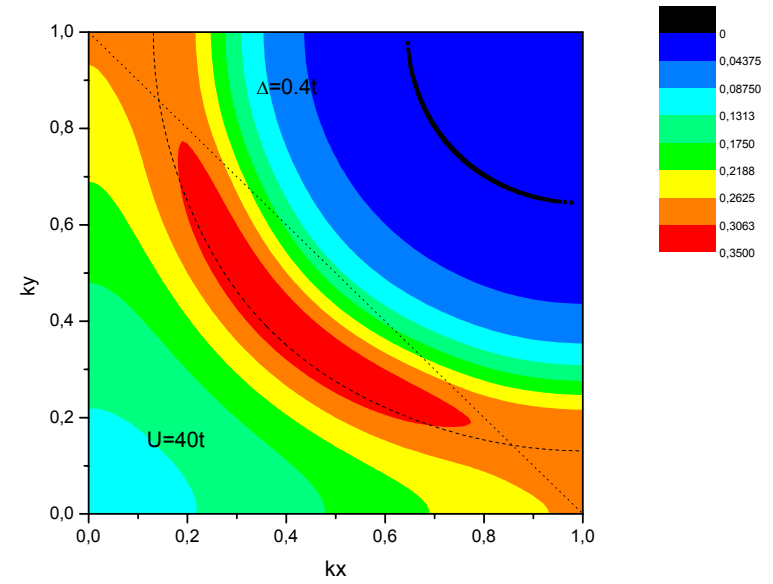
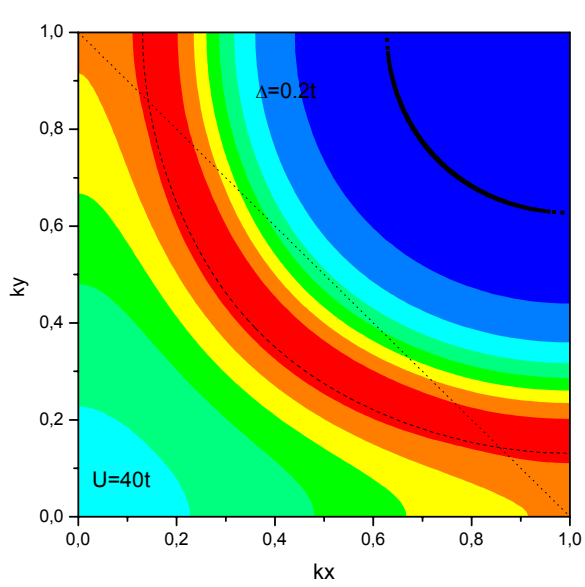
ARPES



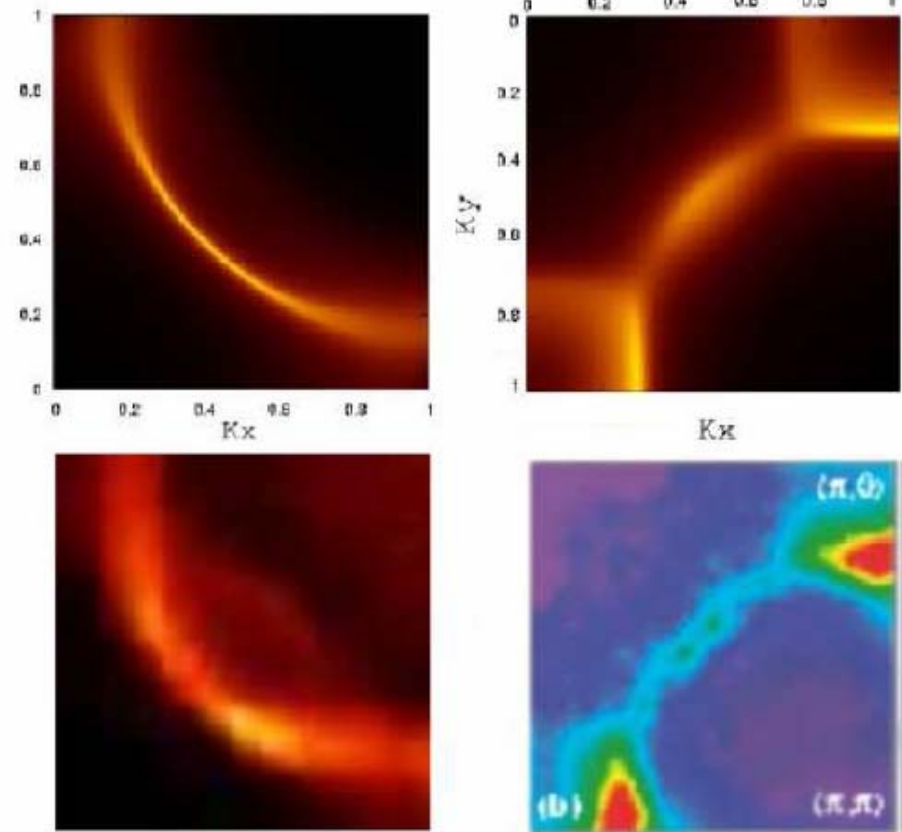
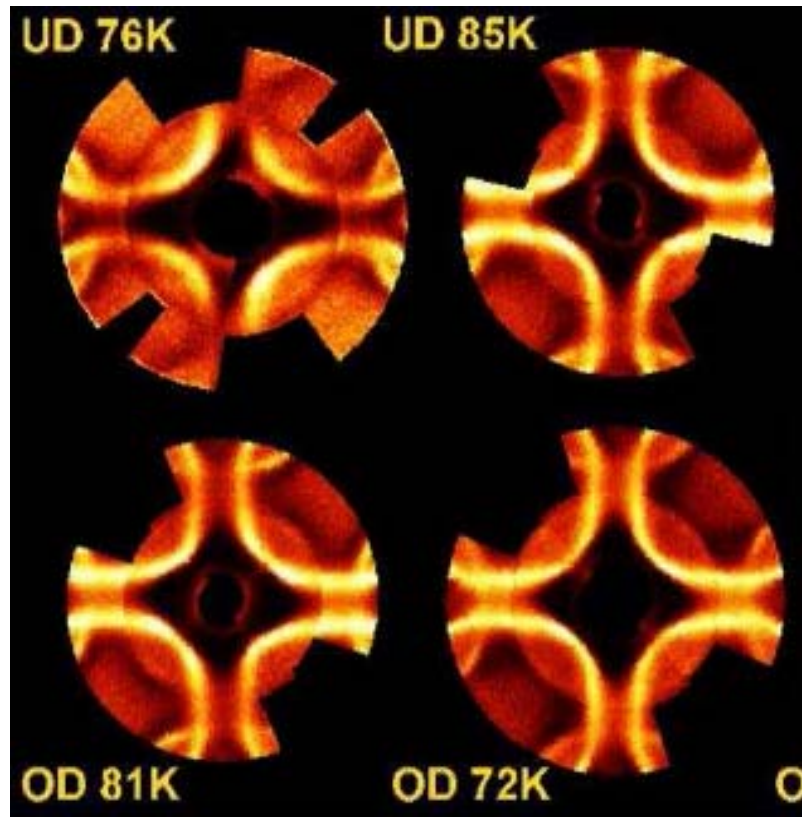
“Destruction” of the Fermi surface in correlated metal ($U=4t$)



“Destruction” of the Fermi surface in doped Mott insulator ($U=40t$)



ARPES Fermi surface - (Bi,Pb)2212, NCCO



A.Kordyuk, S.Borisenko, J.Fink et al. (2002)

LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ Fermi surfaces for Bi2212 (upper left panel) and NCCO (upper right panel) 1/4 of BZ (k_x, k_y in units of π/a). Experimental FS for Bi2212 (lower left panel, Ref.³⁶) and NCCO (lower right panel, Ref.³³).

ARPES and LDA+DMFT+ Σ :

Electronic structure of $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ studied via ARPES and LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$

I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, E. Z. Kuchinskii, and M. V. Sadovskii

Institute for Electrophysics, Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg 620016, Russia

Z. V. Pchelkina

Institute for Metal Physics, Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg 620219, Russia

V. B. Zabolotnyy, J. Geck, B. Büchner, and S. V. Borisenko

Institute for Solid State Research, IFW-Dresden, P.O. Box 270116, D-01171 Dresden, Germany

D. S. Inosov

Max-Planck-Institute for Solid State Research, Heisenbergstrasse 1, D-70569 Stuttgart, Germany

and Institute for Solid State Research, IFW-Dresden, P.O. Box 270116, D-01171 Dresden, Germany

A. A. Kordyuk

Institute for Solid State Research, IFW-Dresden, P.O. Box 270116, D-01171 Dresden, Germany

and Institute of Metal Physics of National Academy of Sciences of Ukraine, 03142 Kyiv, Ukraine

M. Lambacher and A. Erb

Walther-Meißner-Institut, Bayerische Akademie der Wissenschaften, Walther-Meißner Strasse 8, 85748 Garching, Germany

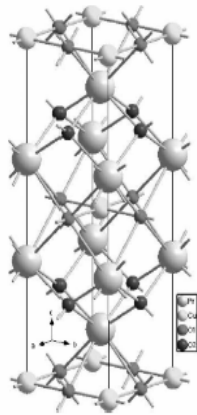


FIG. 1. The crystal structure of Pr_2CuO_4 . Medium size gray spheres correspond to the copper atoms, small dark and black spheres are O1 and O2 atoms, respectively, and big gray spheres correspond to praseodymium atoms.

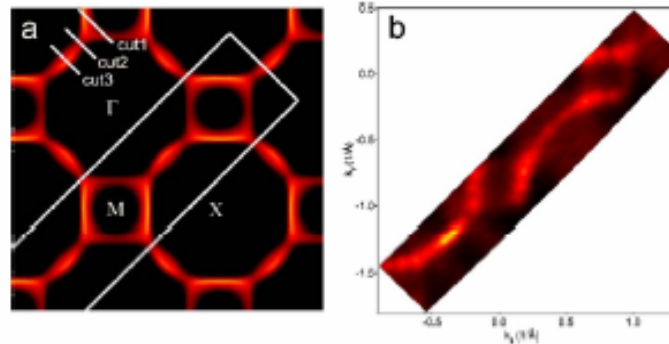


FIG. 3. (Color online) (a) Extended Fermi surfaces for PCCO-LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ data. White rectangle in (a) schematically shows the part of reciprocal space measured experimentally (b). Lower left corner is X point $(\pi, 0)$.

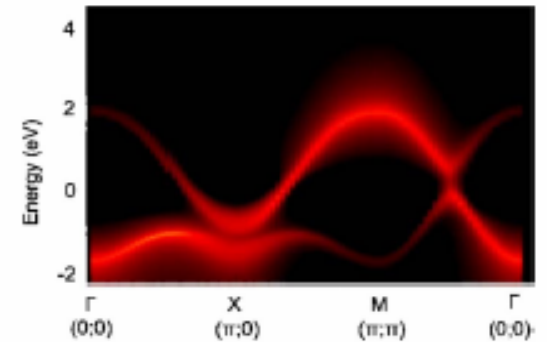


FIG. 2. (Color online) LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ quasiparticle energy dispersion of PCCO $\text{Cu-}3d(x^2-y^2)$ orbital for high symmetry directions of square Brillouin zone. The Fermi level is zero. Here and below intensity goes down as yellow-red-black.

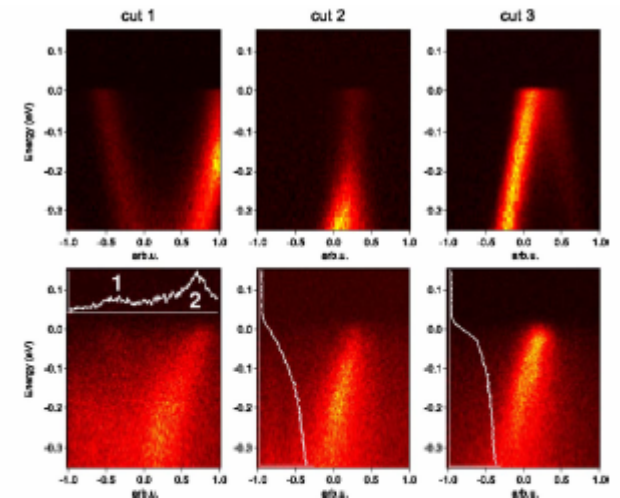


FIG. 4. (Color online) Energy-momentum intensity distributions for the specific cuts drawn in Fig. 3 (upper panels: theoretical data; lower panels: experimental photoemission intensity). To judge about the absolute intensities of the shadow (1) and main band (2), cut 1 contains momentum distribution curves (MDC) integrated in an energy window of 60 meV centered at the FL. Similarly, integral energy distribution curves (EDC) for cut 2 (hot spot) show suppression of the intensity at the FL as compared to cut 3, which is located further away from the hot spot. The FL is zero.

Оптическая проводимость в DMFT+ Σ

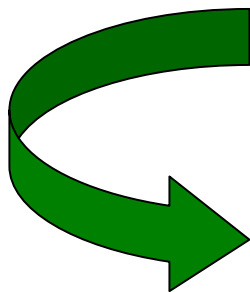
M.V.Sadovskii, I.A.Nekrasov,
E.Z.Kuchinskii (2006)

A. Basic expressions for optical conductivity

To calculate dynamic conductivity we use the general expression relating it to retarded density – density correlation function $\chi^R(\omega, \mathbf{q})$

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

where e is electronic charge.

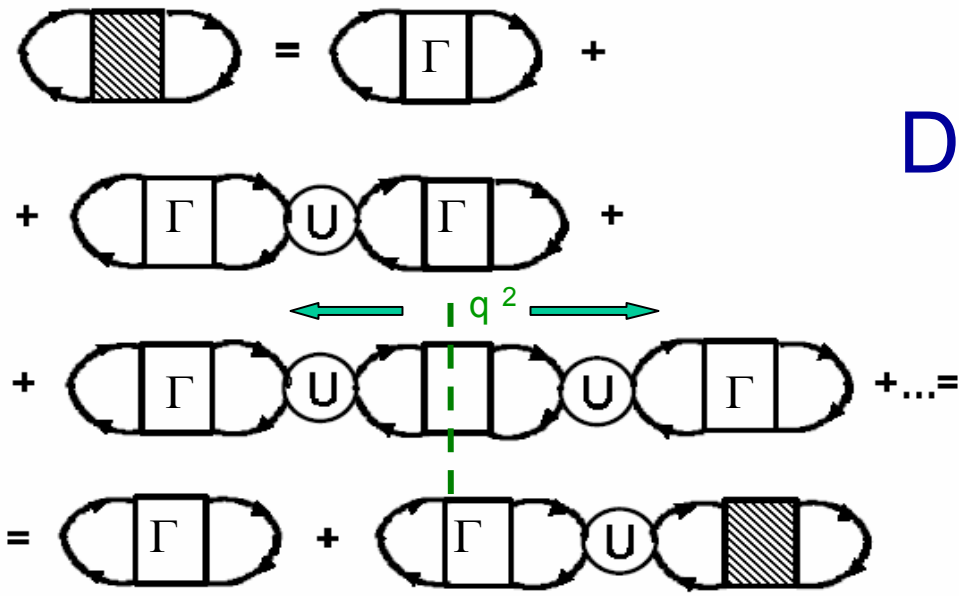


$$\Phi_{\varepsilon}^{\text{ORA}}(\mathbf{q}, \omega) = \begin{array}{c} \text{R} \\ \text{A} \\ \varepsilon_- \quad \mathbf{p}_- \end{array} \Gamma^{\text{RA}}$$

$$\Phi_{\varepsilon}^{\text{ORR}}(\mathbf{q}, \omega) = \begin{array}{c} \text{R} \\ \text{R} \\ \varepsilon_- \quad \mathbf{p}_- \end{array} \Gamma^{\text{RR}}$$

$$\chi^R(\omega, \mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi i} \{ [f(\varepsilon_+) - f(\varepsilon_-)] \Phi_{\varepsilon}^{\text{RA}}(\mathbf{q}, \omega) + f(\varepsilon_-) \Phi_{\varepsilon}^{\text{RR}}(\mathbf{q}, \omega) - f(\varepsilon_+) \Phi_{\varepsilon}^{\text{AA}}(\mathbf{q}, \omega) \}$$

$$\sigma(\omega) = \lim_{q \rightarrow 0} \left(-\frac{e^2 \omega}{2\pi q^2} \right) \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \left\{ [f(\varepsilon_+) - f(\varepsilon_-)] [\Phi_{\varepsilon}^{RA}(\mathbf{q}, \omega) - \Phi_{\varepsilon}^{RA}(0, \omega)] + f(\varepsilon_-) [\Phi_{\varepsilon}^{RR}(\mathbf{q}, \omega) - \Phi_{\varepsilon}^{RR}(0, \omega)] - f(\varepsilon_+) [\Phi_{\varepsilon}^{AA}(\mathbf{q}, \omega) - \Phi_{\varepsilon}^{AA}(0, \omega)] \right\}$$



DMFT+Σ!

$$\Phi_{i\varepsilon i\varepsilon'}(i\omega \mathbf{q}) = \Phi_{i\varepsilon}^0(i\omega \mathbf{q}) \delta_{\varepsilon\varepsilon'} + \Phi_{i\varepsilon}^0(i\omega \mathbf{q}) \sum_{\varepsilon''} U_{i\varepsilon i\varepsilon''}(i\omega) \Phi_{i\varepsilon'' i\varepsilon'}(i\omega, \mathbf{q})$$

$$\phi(i\omega) \equiv \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\Phi(i\omega, \mathbf{q}) - \Phi(i\omega, 0)}{q^2} = \sum_{\varepsilon} \gamma_{i\varepsilon}^2(i\omega, q=0) \phi_{i\varepsilon}^0(i\omega)$$

$$\phi_{i\varepsilon}^0(i\omega) \equiv \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\Phi_{i\varepsilon}^0(i\omega, \mathbf{q}) - \Phi_{i\varepsilon}^0(i\omega, 0)}{q^2}$$

Only impurity scattering here!

$$\gamma_{\varepsilon}(i\omega, q=0) = 1 + \text{diagram} + \dots = 1 + \sum_{\varepsilon' \varepsilon''} U_{i\varepsilon i\varepsilon''}(i\omega) \Phi_{i\varepsilon'' i\varepsilon'}(i\omega, q=0)$$

Ward \rightarrow

$$\gamma_{i\varepsilon}(i\omega, q=0) = 1 - \frac{\Delta\Sigma(i\omega)}{i\omega}$$

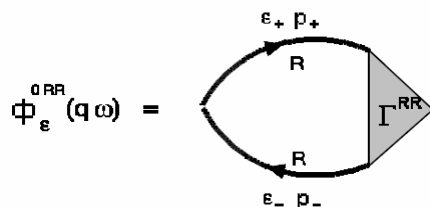
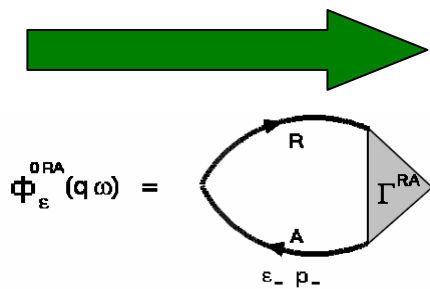
$$\Delta\Sigma(i\omega) = \Sigma(i\varepsilon + i\omega) - \Sigma(i\varepsilon)$$

$$\phi(i\omega) = \sum_{\varepsilon} \phi_{i\varepsilon}^0(i\omega) \left[1 - \frac{\Delta\Sigma(i\omega)}{i\omega} \right]^2$$

Общее выражение для проводимости в DMFT+ Σ :

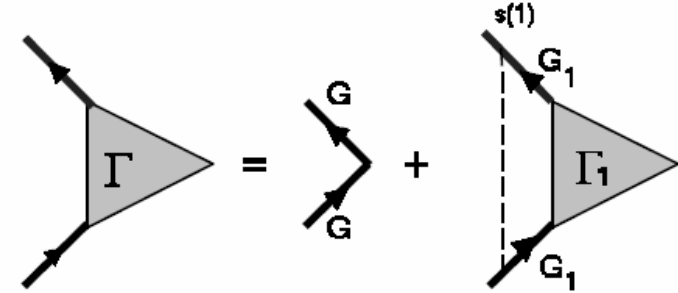
$$Re\sigma(\omega) = \frac{e^2\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon [f(\varepsilon_-) - f(\varepsilon_+)] Re \left\{ \phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega) \left[1 - \frac{\Sigma^R(\varepsilon_+) - \Sigma^A(\varepsilon_-)}{\omega} \right]^2 - \phi_{\varepsilon}^{0RR}(\omega) \left[1 - \frac{\Sigma^R(\varepsilon_+) - \Sigma^R(\varepsilon_-)}{\omega} \right]^2 \right\}$$

No Hubbard U in vertices here!



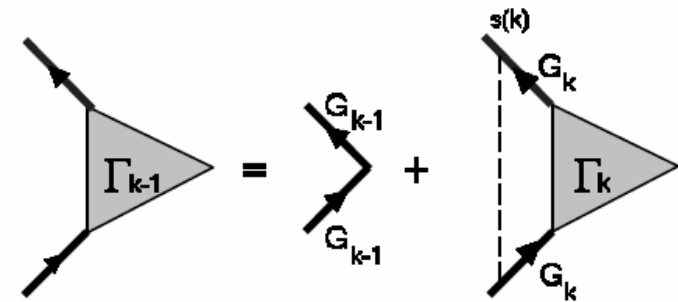
$$\phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega) = \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega, \mathbf{q}) - \Phi_{\varepsilon}^{0RA}(\omega, 0)}{q^2}$$

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



Recursion relations for effective vertex - interaction with pseudogap fluctuations.

M.V.Sadovskii, N.A.Strigina (2002)



$$\Gamma_{k-1}^{RR}(\varepsilon, \mathbf{p}; \varepsilon + \omega, \mathbf{p} + \mathbf{q}) = 1 + \Delta^2 s(k) G_k^R(\varepsilon_-, \mathbf{p}_-) G_k^R(\varepsilon_+, \mathbf{p}_+) \Gamma_k^{RR}(\varepsilon, \mathbf{p}; \varepsilon + \omega, \mathbf{p} + \mathbf{q})$$

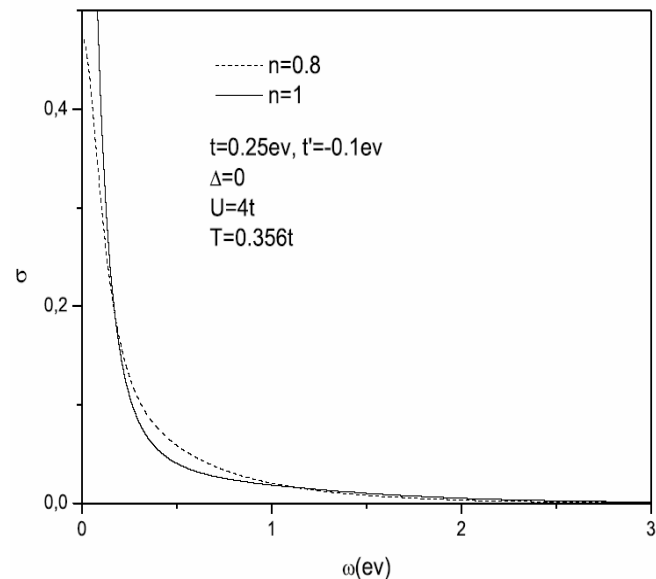
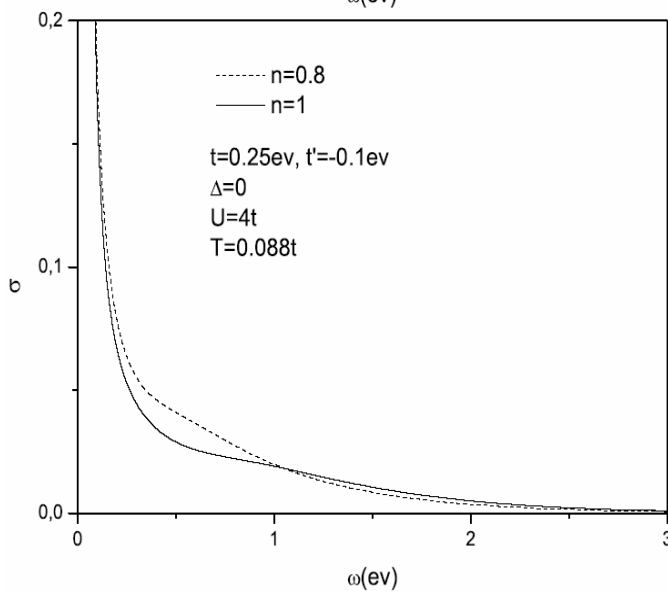
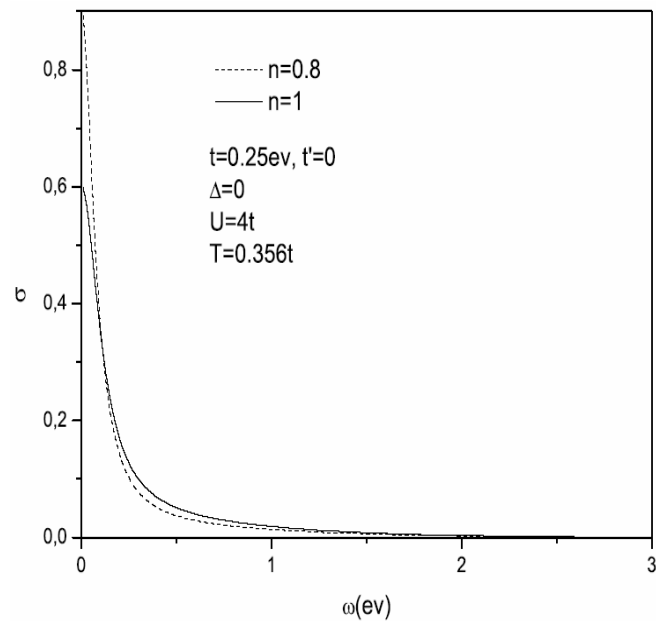
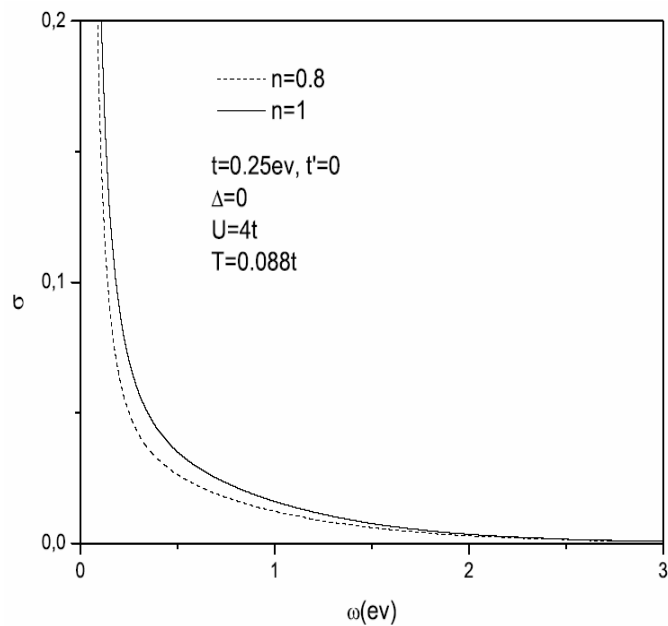
$$\Gamma_{k-1}^{RA}(\varepsilon_-, \mathbf{p}_-; \varepsilon_+, \mathbf{p}_+) = 1 + \Delta^2 s(k) G_k^A(\varepsilon_-, \mathbf{p}_-) G_k^R(\varepsilon_+, \mathbf{p}_+) \times$$

$$\times \left\{ 1 + \frac{2i v_k \kappa k}{\omega - \varepsilon_k(\mathbf{p}_+) + \varepsilon_k(\mathbf{p}_-) - \Sigma^R(\varepsilon_+) + \Sigma^A(\varepsilon_-) - \Sigma_{k+1}^R(\varepsilon_+, \mathbf{p}_+) + \Sigma_{k+1}^A(\varepsilon_-, \mathbf{p}_-)} \right\}$$

$$\times \Gamma_k^{RA}(\varepsilon_-, \mathbf{p}_-; \varepsilon_+, \mathbf{p}_+),$$

$$G_k^{R,A}(\varepsilon_{\pm}, \mathbf{p}_{\pm}) = \frac{1}{\varepsilon_{\pm} - \varepsilon_k(\mathbf{p}_{\pm}) \pm i k v_k \kappa - \Sigma^{R,A}(\varepsilon_{\pm}) - \Sigma_{k+1}^{R,A}(\varepsilon_{\pm}, \mathbf{p}_{\pm})}$$

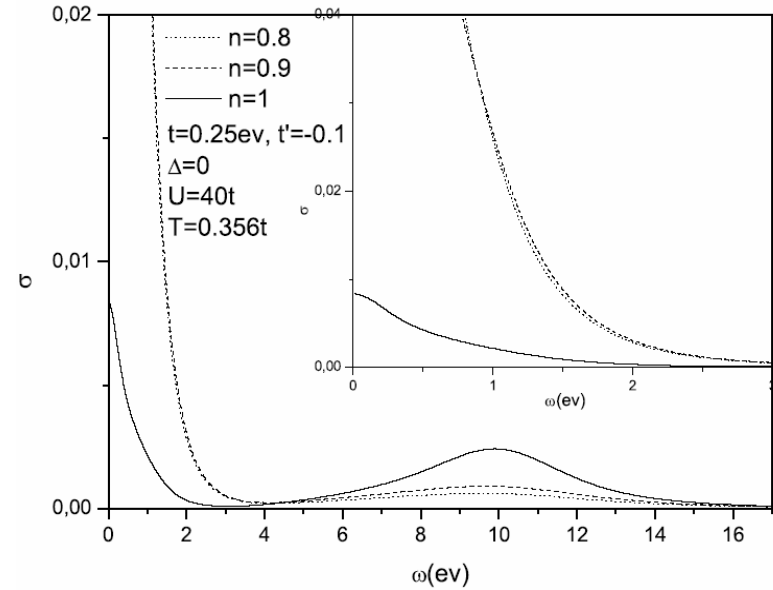
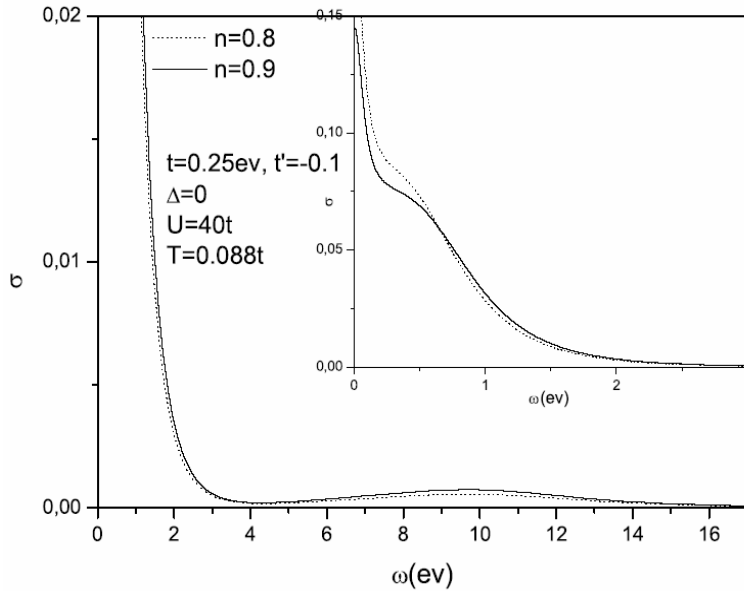
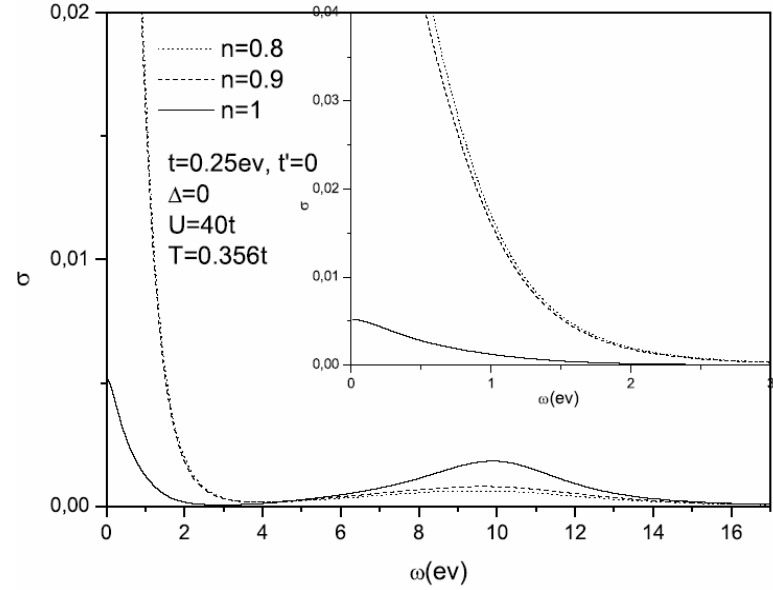
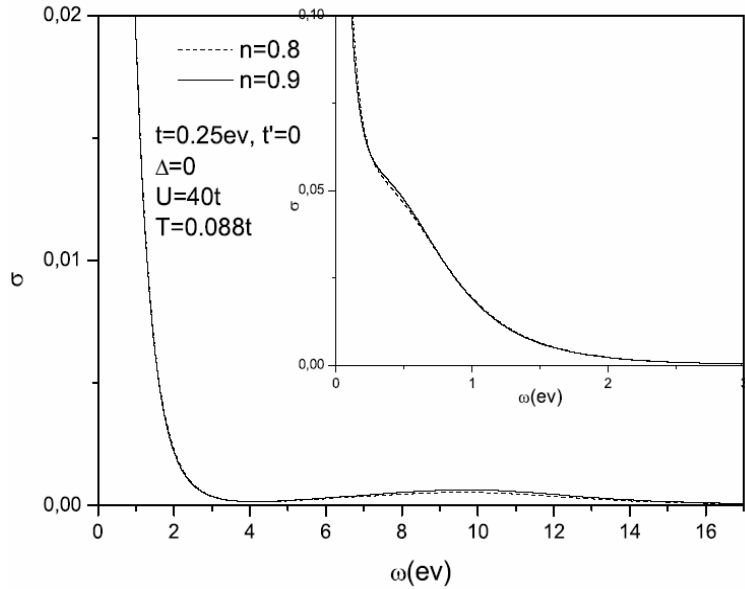
DMFT оптическая проводимость в коррелированном металле ($U=4t$)



Проводимость в единицах

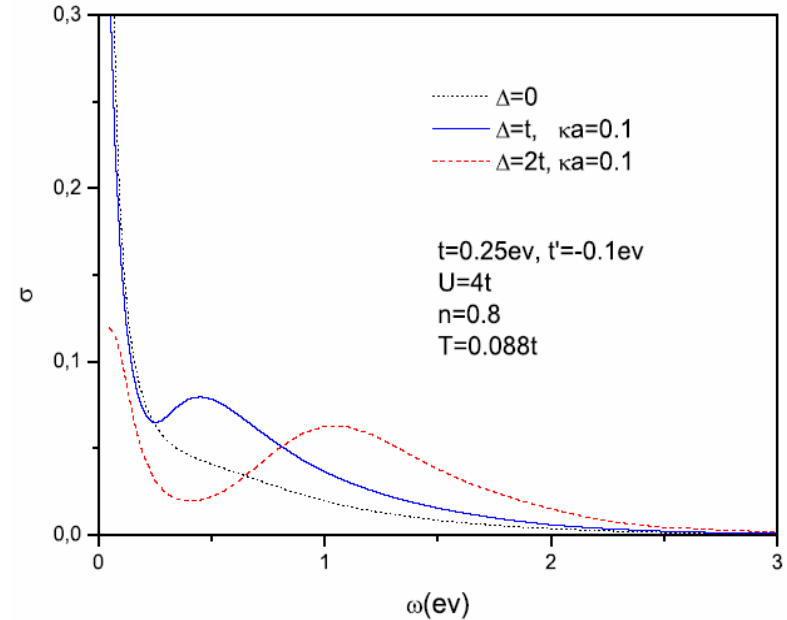
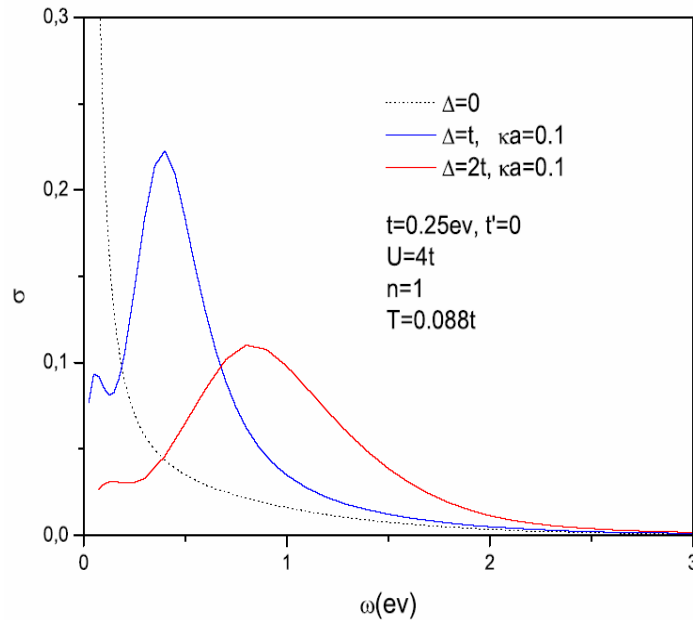
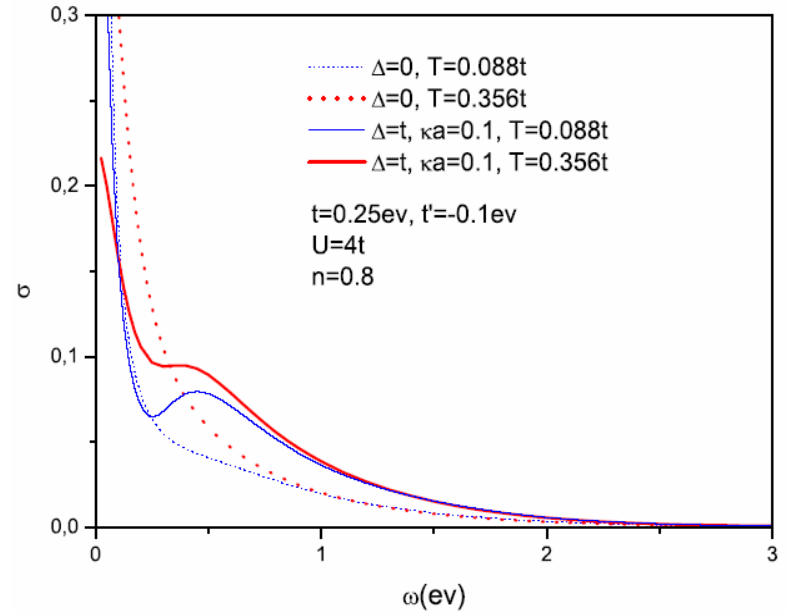
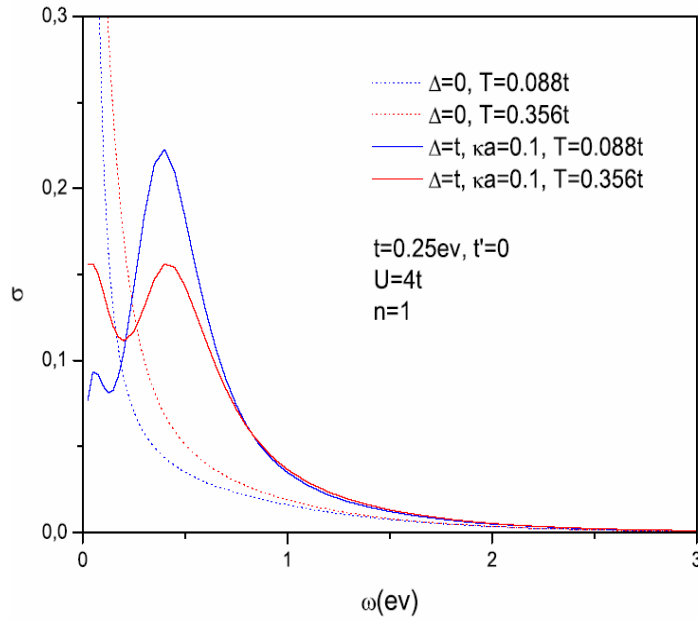
$$\sigma_0 = \frac{e^2}{\hbar} = 2.5 \cdot 10^{-4} \text{ Ohm}^{-1}$$

DMFT оптическая проводимость в легированном моттовском изоляторе ($U=40t$)



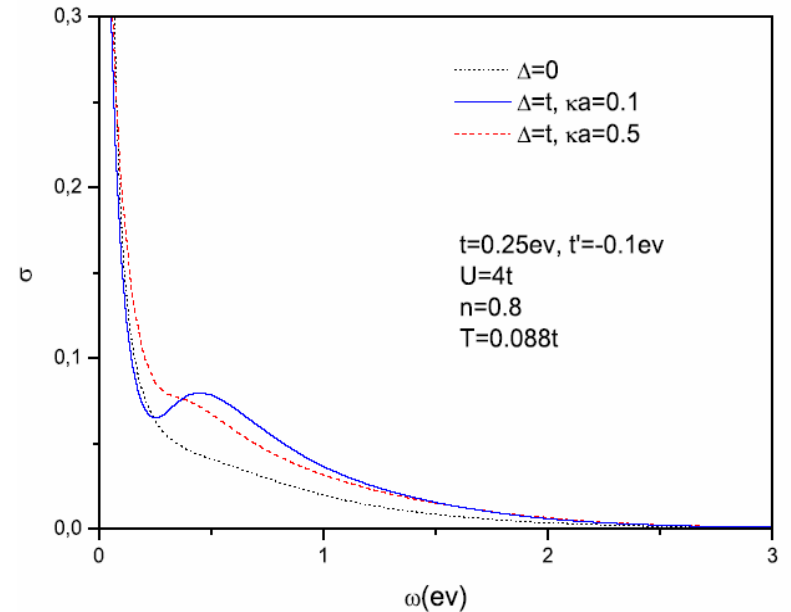
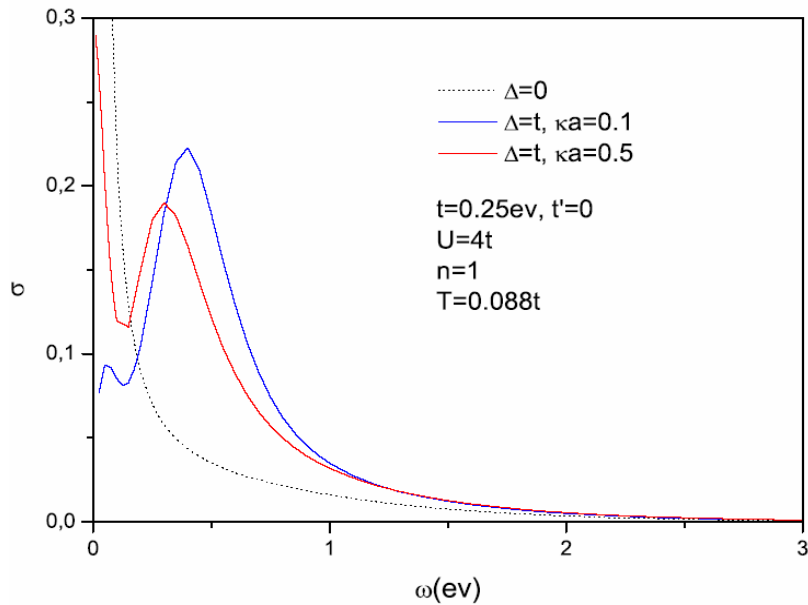
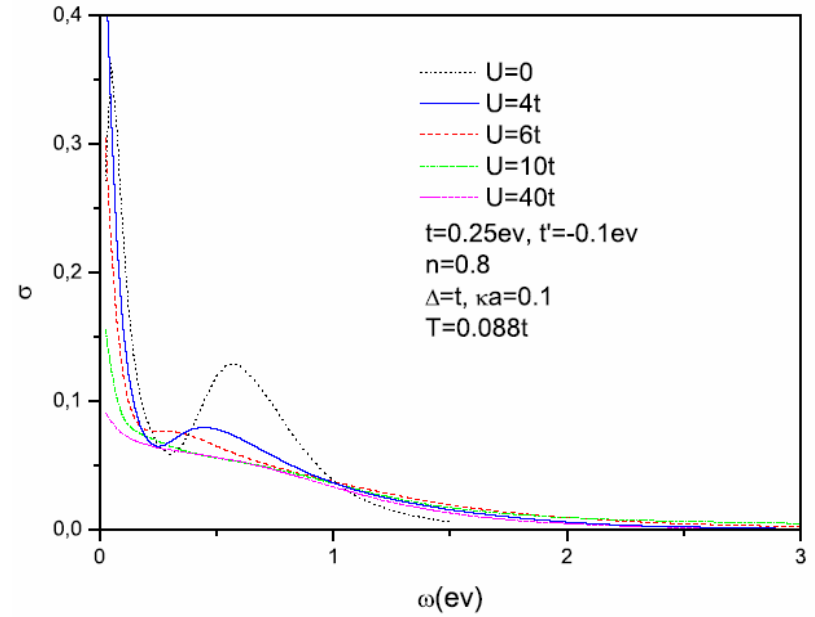
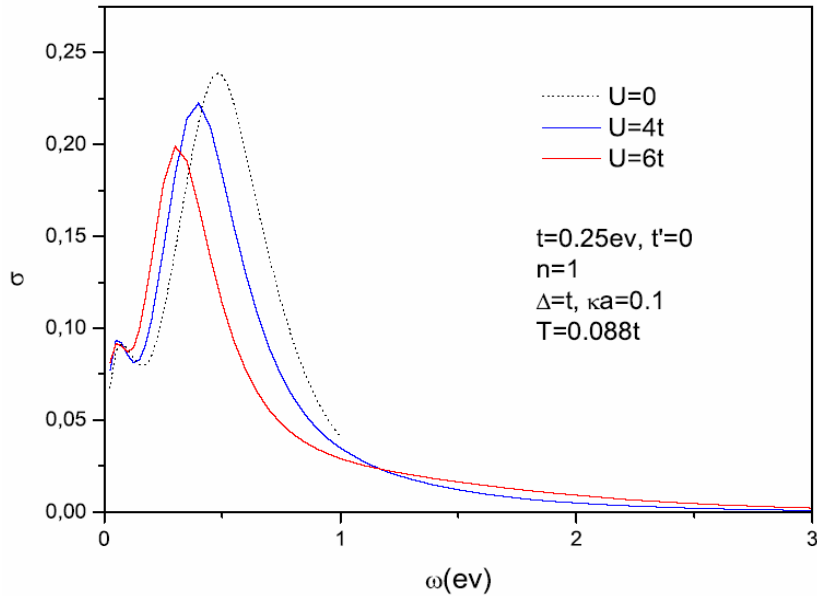
Проводимость в единицах $\sigma_0 = \frac{e^2}{\hbar} = 2.5 \cdot 10^{-4} \text{ Ohm}^{-1}$

DMFT+ Σ κ проводимость в коррелированном металле ($U=4t$): T и Δ зависимость



Проводимость в единицах $\sigma_0 = \frac{e^2}{h} = 2.5 \cdot 10^{-4} \text{ Ohm}^{-1}$

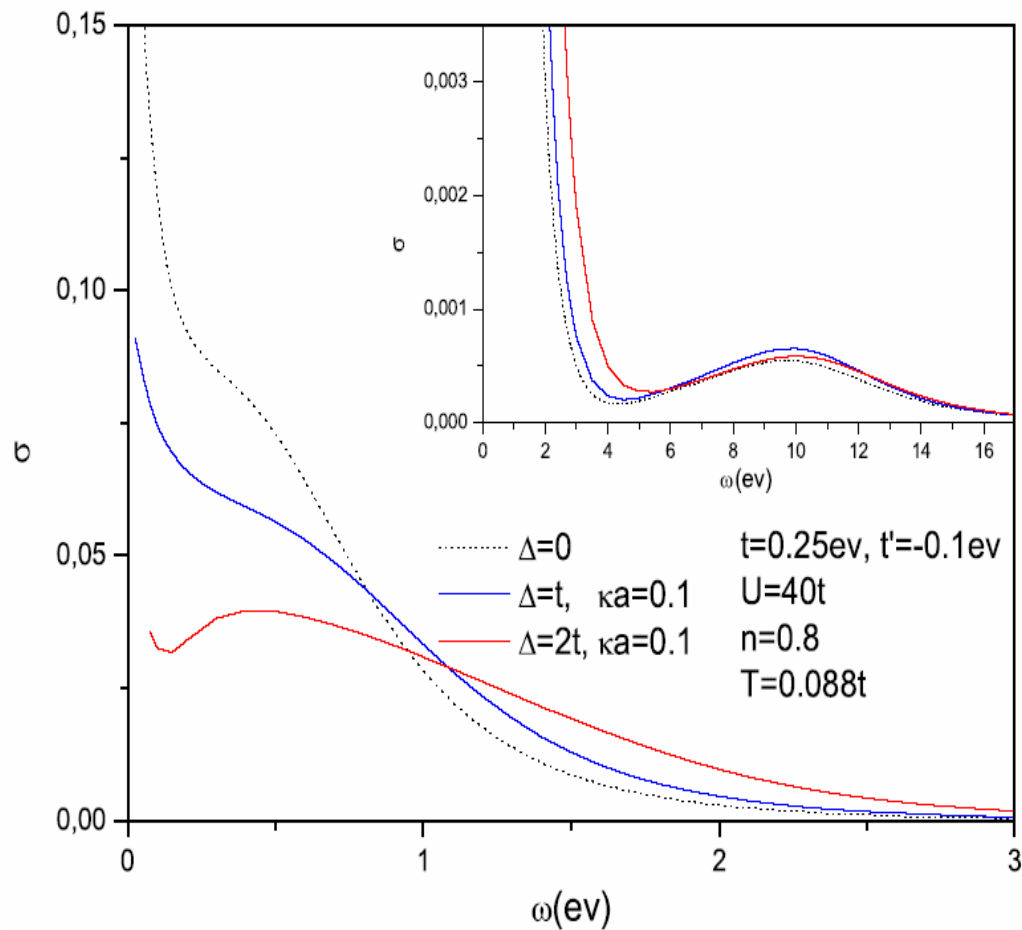
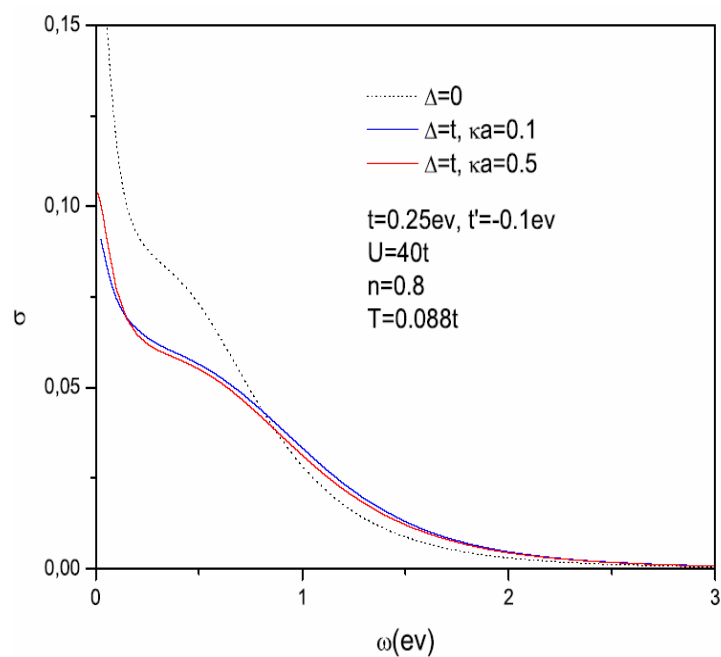
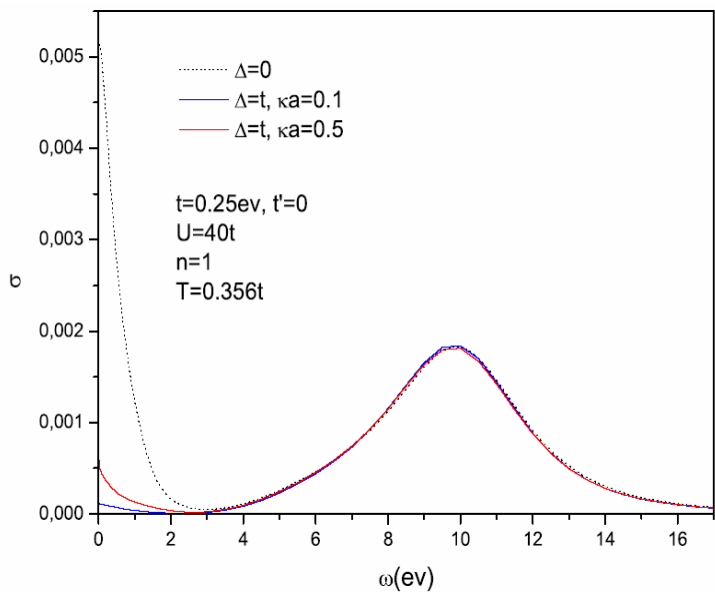
DMFT+ Σ k проводимость (коррелированный металл): U и ξ зависимость



Проводимость в единицах

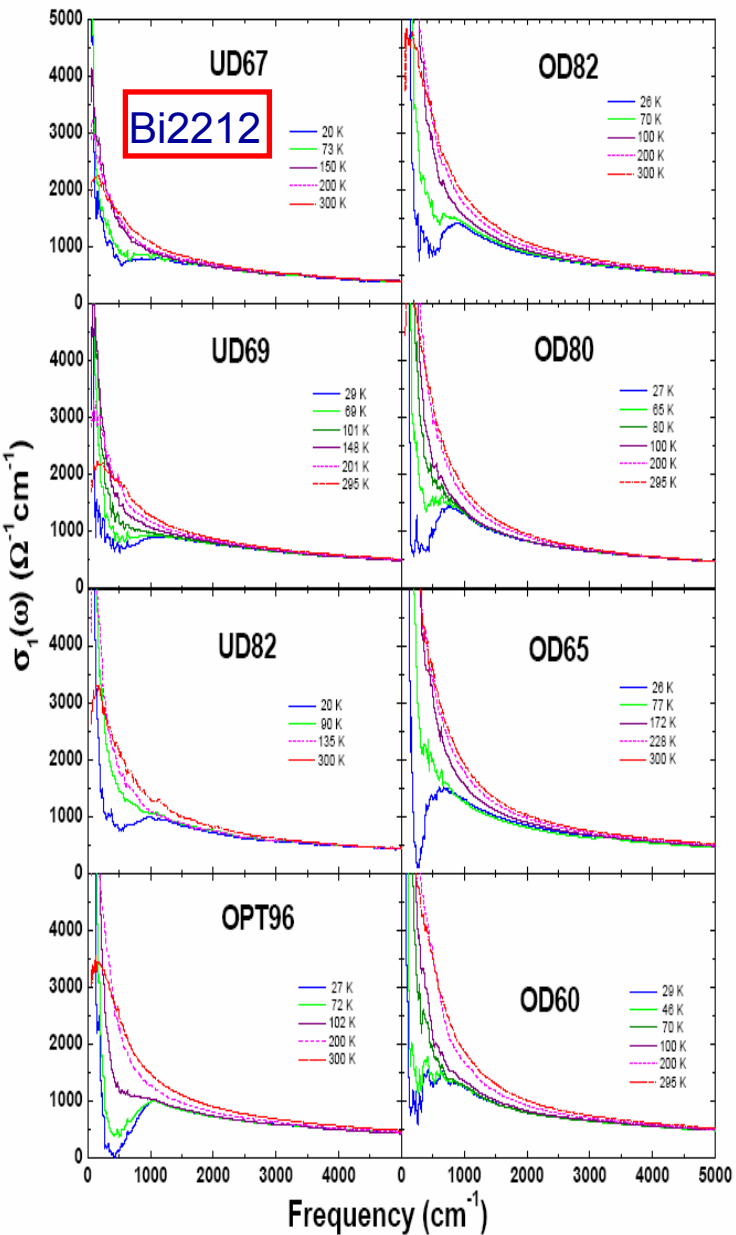
$$\sigma_0 = \frac{e^2}{\hbar} = 2.5 \cdot 10^{-4} \text{ Ohm}^{-1}$$

DMFT+ Σ_k проводимость в моттовском изоляторе ($U=40t$)

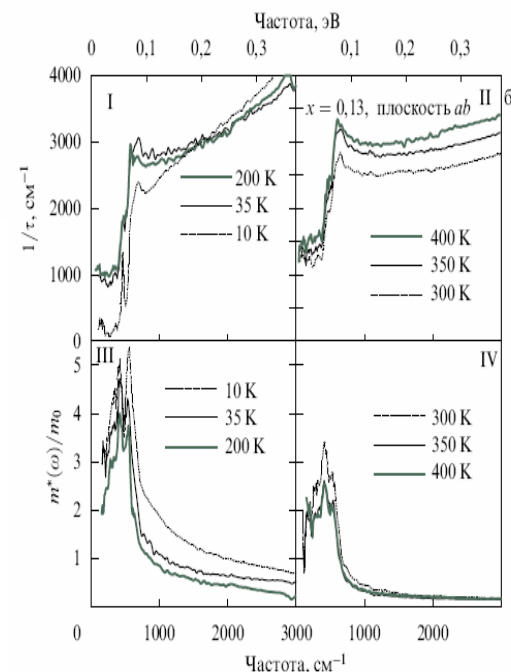
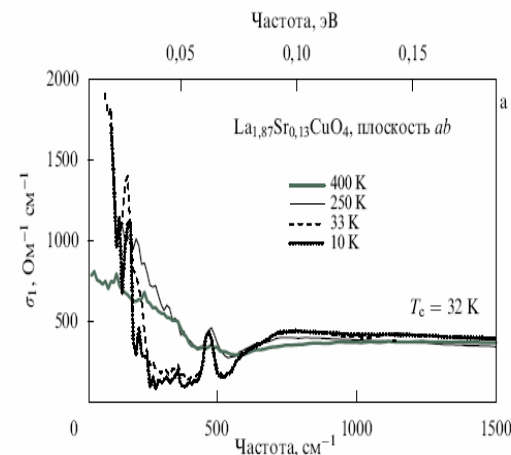
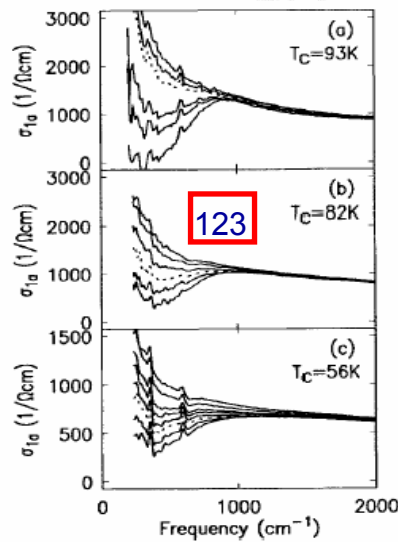
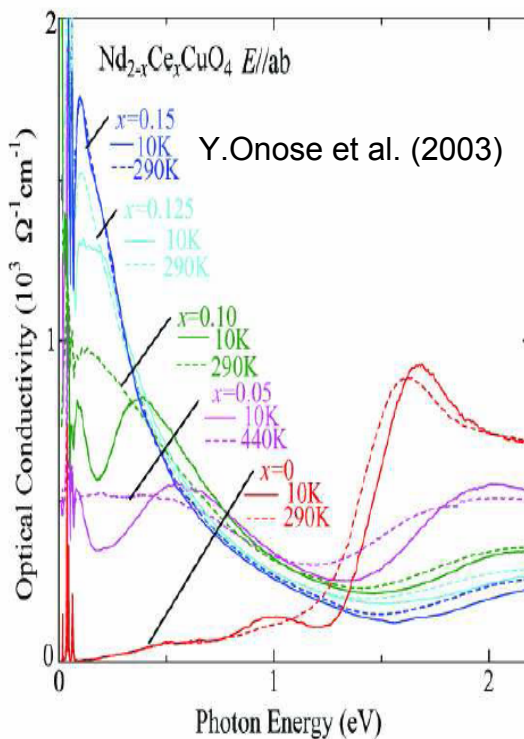


Проводимость в единицах $\sigma_0 = \frac{e^2}{h} = 2.5 \cdot 10^{-4} \text{ Ohm}^{-1}$.

Псевдощель в оптической проводимости купратов



T.Timusk et al. (2006)



T.Startseva et al. (1999)

Особенности нефермижидкостного поведения

Let us start with some qualitative discussion of possible manifestations of NFL behavior. Green's function of interacting system of electrons is expressed via Dyson equation (in Matsubara representation, $\varepsilon_n = (2n + 1)\pi T$, $\xi_p = v_F(p - p_F)$) as¹:

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

In the following, we shall use rather *unusual* definition of renormalization (“residue”) Z - factor, introducing it via⁹:

$$G(\varepsilon_n, \xi_p) = Z(\varepsilon_n, \xi_p)G_0(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{Z(\varepsilon_n, \xi_p)}{i\varepsilon_n - \xi_p} \quad (2)$$

or

$$Z(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{i\varepsilon_n - \xi_p}{i\varepsilon_n - \xi_p - \Sigma(\varepsilon_n, \xi_p)} = (i\varepsilon_n - \xi_p)G(\varepsilon_n, \xi_p) \quad (3)$$

Note that $Z(\varepsilon_n, \xi_p)$ is in general complex and actually determines full renormalization of free - electron Green's function $G_0(\varepsilon_n, \xi_p)$ due to interactions. At the same time, it is in some sense similar to standard residue renormalization factor used in Fermi liquid theory.

A. Fermi liquid behavior.

In normal Fermi liquid we can perform the usual expansion (close to Fermi level and in obvious notations), assuming the absence of any singularities in $\Sigma(\varepsilon_n, p)$:

$$\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p) \approx \Sigma(0, 0) + i\varepsilon_n \left. \frac{\partial \Sigma(\varepsilon_n, \xi_p)}{\partial (i\varepsilon_n)} \right|_0 + \xi_p \left. \frac{\partial \Sigma(\varepsilon_n, \xi_p)}{\partial \xi_p} \right|_0 + \dots \quad (4)$$

In the absence of static impurity scattering $\Sigma(0, 0)$ is real and just renormalizes the chemical potential. Then we can rewrite (1) as:

$$G(\varepsilon) = \frac{1}{i\varepsilon_n \left\{ 1 - \frac{\partial \Sigma}{\partial (i\varepsilon_n)} \right\}_0 - \xi_p \left\{ 1 + \frac{\partial \Sigma}{\partial \xi_p} \right\}_0} \equiv \frac{\tilde{Z}}{i\varepsilon_n - \tilde{\xi}_p} \quad (5)$$

where we have introduced the usual renormalized residue at the pole:

$$\tilde{Z} = \frac{1}{1 - \left. \frac{\partial \Sigma}{\partial (i\varepsilon_n)} \right|_0} \quad \tilde{Z}^{-1} = 1 - \left. \frac{\partial \Sigma}{\partial (i\varepsilon_n)} \right|_0 \quad (6)$$

and spectrum of quasiparticles:

$$\tilde{\xi}_p = \tilde{Z} \left(1 + \frac{\partial \Sigma}{\partial \xi_p} \right)_0 \xi_p \quad (7)$$

The usual analytic continuation to real frequencies gives now the standard expressions of normal Fermi liquid theory^{10,11} with real $0 < \tilde{Z} < 1$, conserving the quasiparticle pole of the Green's function.

B. Impure Fermi liquid.

In case of small concentration of random static impurities we have $\Sigma(\varepsilon_n \rightarrow 0, \xi_p \rightarrow 0) \rightarrow \text{const}$, with $\text{Re}\Sigma(0, 0)$ giving again the shift of the chemical potential, while $\text{Im}\Sigma(0, 0) \sim \gamma$, where γ is impurity scattering rate. For the Green's function we have:

$$G(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{\tilde{Z}}{i\varepsilon_n - \tilde{\xi}_p + i\gamma \frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|}} \quad (9)$$

so that renormalization factor defined by (3) is given by:

$$Z(\varepsilon_n, \xi_p) = \tilde{Z} \frac{i\varepsilon_n - \xi_p}{i\varepsilon_n - \tilde{\xi}_p + i\gamma \frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|}} \quad (10)$$

For $\xi_p = 0$ we just have:

$$Z(\varepsilon_n, \xi_p = 0) = \tilde{Z} \frac{i\varepsilon_n}{i\varepsilon_n + i\gamma \frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|}} \sim \frac{|\varepsilon_n|}{\gamma} \rightarrow 0 \quad \text{for } |\varepsilon_n| \rightarrow 0 \quad (11)$$

while for $|\varepsilon_n| \ll |\xi_p|$:

$$Z(\varepsilon_n \rightarrow 0, \xi_p) = \tilde{Z} \frac{\xi_p}{\xi_p - i\gamma \frac{\varepsilon_n}{|\varepsilon_n|}} \sim i \frac{\xi_p}{\gamma} \text{sign}\varepsilon_n \rightarrow 0 \quad \text{for } \xi_p \rightarrow 0 \quad (12)$$

i.e. impurity scattering leads to Z - factor being zero at the Fermi surface, just removing the usual Fermi liquid *pole* singularity and producing a finite *discontinuity* of the Green's function at $\varepsilon_n = 0$. This behavior is due to the loss of translational invariance of the Fermi liquid theory (momentum conservation) because of impurities.

C. Superconductors, Peierls and excitonic insulators.

Consider now the case of s - wave superconductor. Normal Gorkov Green's function is given by:

$$G(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\Delta|^2} \quad (13)$$

where Δ is *superconducting* gap. The same form normal Green's function takes also in excitonic or Peierls insulator, where Δ denotes appropriate *insulating* gap in the spectrum¹¹.

Then:

$$Z(\varepsilon_n, \xi_p) = \frac{(i\varepsilon_n)^2 - (\xi_p)^2}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\Delta|^2} \sim \frac{Max(\varepsilon_n^2, \xi_p^2)}{|\Delta|^2} \rightarrow 0 \quad \text{for } \varepsilon_n, \xi_p \rightarrow 0 \quad (14)$$

i.e. we have NFL behavior with *pole* of the Green's function at the Fermi surface replaced by *zero*, due to Fermi surface being “closed” by superconducting (or insulating) gap.

Again, Fermi liquid type behavior with finite Z - factor is “restored” for $|\varepsilon_n|, |\xi_p| \gg |\Delta|$.

However, the complete description of superconducting (excitonic, Peierls) phase is achieved only after the introduction also of anomalous Gorkov function. Excitation spectrum on both sides of the phase transition is determined by different Green's functions with different topological properties⁹.

D. Non – Fermi liquid behavior due to interactions.

Non – Fermi liquid behavior of Green's function due to interactions may appear also in case of singular behavior of $\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p) \rightarrow \infty$ for $\varepsilon_n \rightarrow 0$ and $\xi_p \rightarrow 0$, e.g. power – like divergence² of $\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p) \sim \text{Max}(\varepsilon_n^{-\alpha}, \xi_p^{-\alpha})$ with $\alpha > 0$. Obviously, in this case we have $Z(\varepsilon_n \rightarrow 0, \xi_p \rightarrow 0) \rightarrow 0$, and we again have *zero* of the Green's function at the Fermi surface.

Another possibility is singular behavior of derivatives of self - energy in (4), e.g. in case of $\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p) \sim \text{Max}(\varepsilon_n^\alpha, \xi_p^\alpha)$ with $0 < \alpha < 1$, leading to weaker than the usual pole singularity of Green's function at the Fermi surface.

Both types of behavior are realized within Tomonaga – Luttinger model in one – dimension¹², where asymptotic behavior of $G(i\varepsilon_n, \xi_p)$ in the region of small $\xi_p \sim \varepsilon_n$ can be expressed as:

$$G(\varepsilon_n \sim \xi_p) \sim \frac{1}{\varepsilon_n^{1-2\alpha'}} \quad (15)$$

with $\alpha' < 1/2$. For $\alpha' > 1/2$:

$$G(\varepsilon_n \sim \xi_p) \sim A + B\varepsilon_n^{2\alpha'-1} \quad (16)$$

For $3/2 > \alpha' > 1$:

$$G(\varepsilon_n \sim \xi_p) \sim A + B\varepsilon_n + C\varepsilon_n^{2\alpha'-1}, \quad \text{etc.} \quad (17)$$

with the value of α' determined by the strength of interaction.

Special case is the so called “marginal” Fermi liquid behavior *assumed*¹³ for interpretation of electronic properties of CuO_2 planes of copper oxides. This is given by:

$$\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p) \sim \lambda i\varepsilon_n \ln \frac{Max(\varepsilon_n, \xi_p)}{\omega_c} \quad (18)$$

where λ is some dimensionless interaction constant, and ω_c is characteristic cut – off frequency. If we formally use (6) at finite ε_n , we obtain:

$$\tilde{Z}(\varepsilon_n, \xi_p) \sim \frac{1}{1 - \lambda \ln \frac{Max(\varepsilon_n, \xi_p)}{\omega_c}} \quad (19)$$

Модель с флуктуирующей щелью

A. One – dimension.

We shall limit ourselves here only to the case of incommensurate pseudogap (CDW) fluctuations^{4,5}. Commensurate case^{5,6} can be analyzed in a similar way. Note that the same expressions apply also for the case of superconducting (s - wave) fluctuations in all dimensions.

In the limit of infinite correlation length of pseudogap fluctuations we have the following *exact* solution for a single – electron Green's function^{4,11}:

$$\begin{aligned} G(\varepsilon_n, \xi_p) &= \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - \zeta\Delta^2} = \\ &= \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{\Delta^2} \exp\left(\frac{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2}{\Delta^2}\right) Ei\left(\frac{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2}{\Delta^2}\right) \approx \\ &\approx \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{\Delta^2} \ln\left(\gamma' \frac{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2}{\Delta^2}\right) \quad \text{for } \varepsilon_n \rightarrow 0, \xi_p \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (20)$$

where $Ei(-x)$ denotes integral exponential function and we used the asymptotic behavior $Ei(-x) \sim \ln(\gamma'x)$ for $x \rightarrow 0$ ($\ln \gamma' = 0.577$ – Euler constant). Then, using (3) we immediately obtain:

$$Z(\varepsilon_n, \xi_p) = -\frac{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2}{\Delta^2} \ln\left(\gamma' \frac{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2}{\Delta^2}\right) \rightarrow 0 \quad \text{for } \varepsilon_n \rightarrow 0, \xi_p \rightarrow 0 \quad (21)$$

Consider self – energy corresponding to Green’s functions (20):

$$\Sigma(\varepsilon_n, \xi_p) = i\varepsilon_n - \xi_p - \left[\int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - \zeta\Delta^2} \right]^{-1} \quad (23)$$

so that taking, for brevity, $\xi_p = 0$ and $\varepsilon_n \rightarrow 0$ we get:

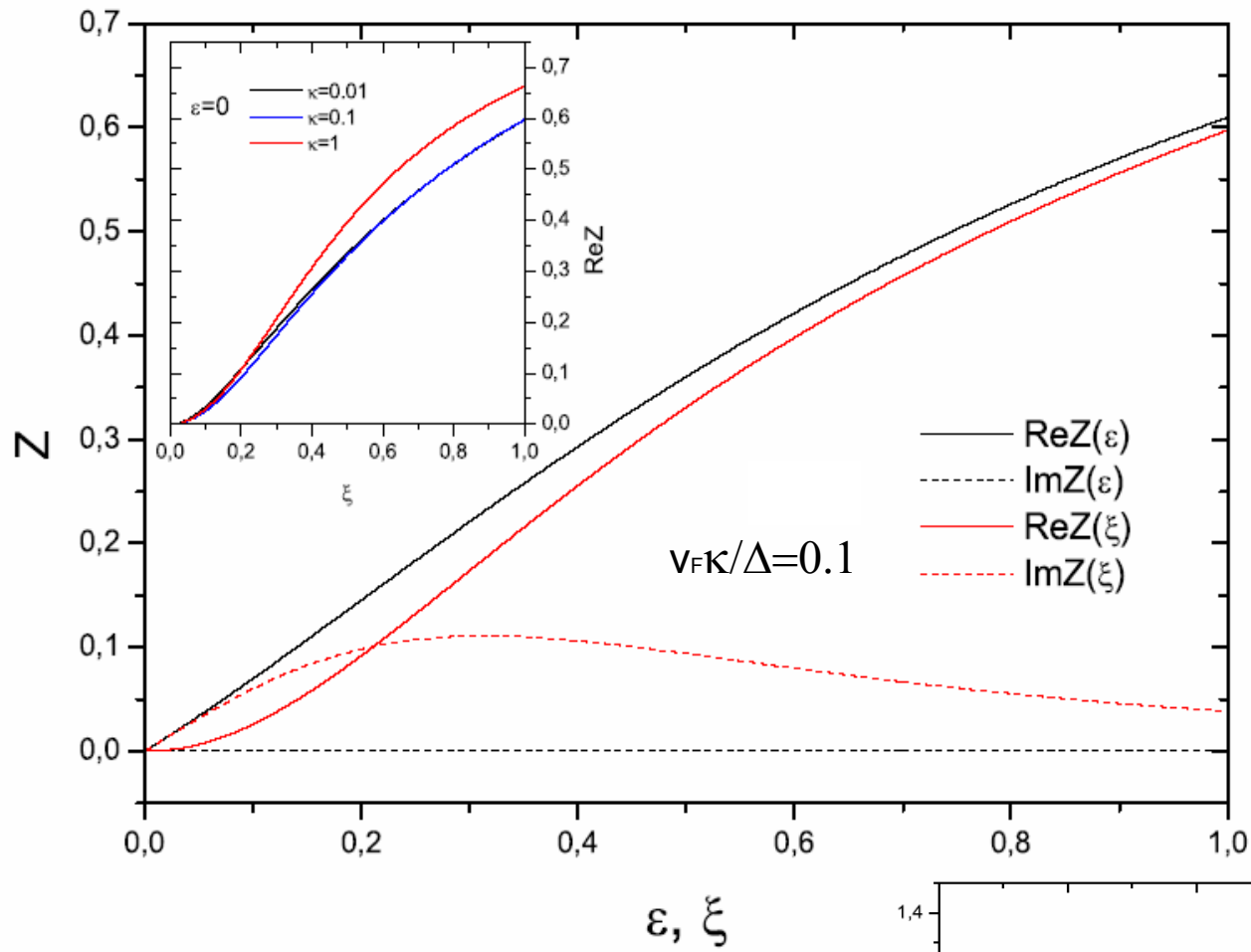
$$\begin{aligned} \Sigma(\varepsilon_n \rightarrow 0, \xi_p = 0) &= \frac{1}{i\varepsilon_n} \left[\int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \frac{1}{\varepsilon_n^2 + \zeta\Delta^2} \right]^{-1} \approx \\ &\approx -\frac{\Delta^2}{i\varepsilon_n \ln\left(\gamma' \frac{\varepsilon_n^2}{\Delta^2}\right)} \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (24)$$

i.e. the divergence of the type discussed above.

In case of finite correlation lengths $\xi = \kappa^{-1}$ of pseudogap fluctuations we have to use continuous fraction representation of single – electron Green’s function derived in Ref.⁵ to obtain renormalization factor as ($\varepsilon_n > 0$):

$$\begin{aligned} Z(\varepsilon_n, \xi_p) &= \\ &= \frac{i\varepsilon_n - \xi_p}{\Delta^2} \\ &= \frac{i\varepsilon_n - \xi_p - \frac{\Delta^2}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F\kappa} - \frac{\Delta^2}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_F\kappa} - \frac{2\Delta^2}{i\varepsilon_n + \xi_p + 3iv_F\kappa} - \dots}{\Delta^2} \end{aligned} \quad (25)$$

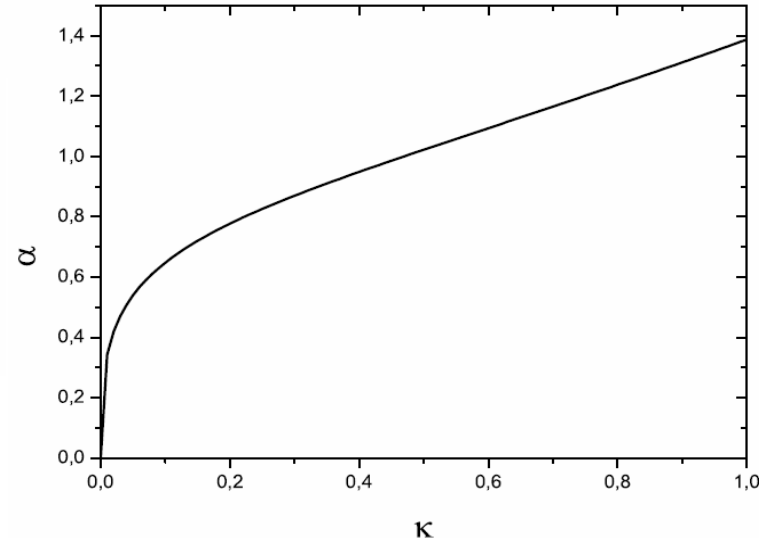
which can be studied numerically.



However, the role of finite correlation lengths ξ (finite κ) is qualitatively similar to static impurity scattering⁴ and more detailed calculation shows, that the behavior of Z - factor at small $\varepsilon_n \ll v_F\kappa$ and $|\xi_p| \ll v_F\kappa$ (with $\varepsilon_n > 0$) is as follows:

$$Z(\varepsilon_n, \xi_p) \approx \alpha \left(\frac{v_F\kappa}{\Delta} \right) \left(\frac{\varepsilon_n + i\xi_p}{\Delta} \right) \rightarrow 0 \quad \text{for } \varepsilon_n \rightarrow 0, \xi_p \rightarrow 0, \quad (26)$$

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

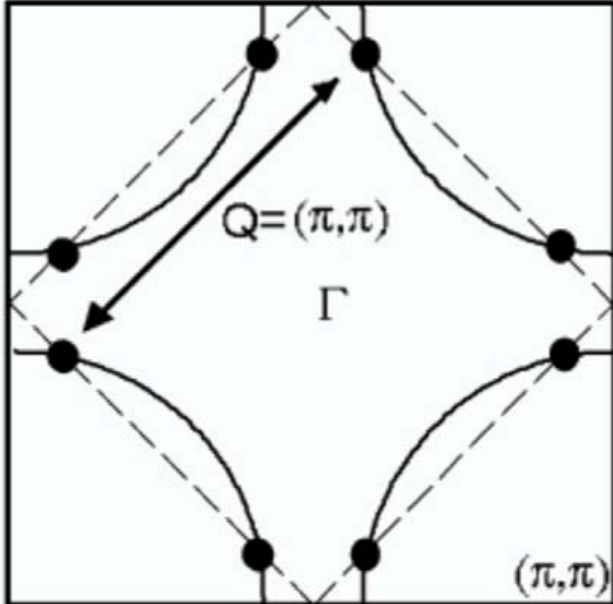


B. “Hot spots” model in two – dimensions.

In two dimensions we introduce the so called “hot spots” model. Consider typical Fermi surface of electrons moving in the CuO_2 plane of copper oxides as shown in Fig. 3. If we neglect fine details, the observed (e.g. in ARPES experiments) Fermi surface (and also the spectrum of elementary excitations) in CuO_2 plane, in the first approximation are described by the usual tight – binding model:

$$\epsilon(\mathbf{p}) = -2t(\cos p_x a + \cos p_y a) - 4t' \cos p_x a \cos p_y a \quad (28)$$

where t is the nearest neighbor transfer integral, while t' is the transfer integral between second – nearest neighbors, a is the square lattice constant.



In the most part of underdoped region of cuprate phase diagram antiferromagnetic long – range order is absent, however, a number of experiments support the existence of well developed fluctuations of antiferromagnetic short – range order which scatter electrons with characteristic momentum transfer of the order of Q . Similar effects may appear due CDW fluctuations. These pseudogap fluctuations are again considered to be static and Gaussian, and characterized by two parameters: amplitude Δ and correlation length $\xi = \kappa^{-11}$. In this case we can obtain rather complete solution for single – electron Green’s function via summation of *all* Feynman diagrams of perturbation series, describing scattering by these fluctuations¹⁻³. This solution is again exact in the limit of $\xi \rightarrow \infty^2$, and apparently very close to an exact one in case of finite ξ ¹⁵. Generalizations of this approach for two – particle properties (vertex – parts) are also quite feasible.

We shall start again with an exact solution for $\xi \rightarrow \infty$ (or $\kappa = 0$)². First, let us introduce (normal) Green's function for SDW (CDW) state with long - range order (see e.g.¹¹):

$$G(\varepsilon_n, \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}-\mathbf{Q}}}{(i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}})(i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p}-\mathbf{Q}}) - W^2} \quad (29)$$

where W denotes the amplitude of SDW (CDW) periodic potential and $\xi_{\mathbf{p}} = \varepsilon(\mathbf{p}) - \mu$. Then we can write down appropriate Z - factor as:

$$Z(\varepsilon_n, \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{(i\varepsilon_n - \xi_1)(i\varepsilon_n - \xi_2)}{(i\varepsilon_n - \xi_1)(i\varepsilon_n - \xi_2) - W^2} \quad (30)$$

where we have denoted for brevity: $\xi_{\mathbf{p}} = \xi_1$ and $\xi_{\mathbf{p}-\mathbf{Q}} = \xi_2$. In the following we shall be mainly interested in the limit of $\varepsilon_n \rightarrow 0$ and $\xi_1 \rightarrow 0$, i.e. on the approach to the “bare” Fermi surface. Note that $\xi_2 = 0$ defines the so called “shadow” Fermi surface. We have $\xi_1 = \xi_2 = 0$ precisely at the “hot spots”. In the following it is convenient to introduce a complex variable:

$$z = (i\varepsilon_n - \xi_1)(i\varepsilon_n - \xi_2) \quad (31)$$

1. *Incommensurate combinatorics.*

In case of incommensurate (CDW) pseudogap fluctuations, an exact solution for the Green's function of FGM in the limit of correlation length $\xi \rightarrow \infty$ takes the form similar to (20)^{1,2} and we get (averaging (30) with Rayleigh distribution for W):

$$Z(z) = \int_0^\infty dW \frac{2W}{\Delta^2} e^{-\frac{W^2}{\Delta^2}} \frac{z}{z - W^2} = \int_0^\infty \frac{d\zeta}{\Delta^2} e^{-\frac{\zeta}{\Delta^2}} \frac{z}{z - \zeta} = \frac{z}{\Delta^2} e^{-\frac{z}{\Delta^2}} Ei\left(\frac{z}{\Delta^2}\right) \quad (32)$$

Then, for $z \rightarrow 0$ we get:

$$Z(z \rightarrow 0) \approx \frac{z}{\Delta^2} \left[\ln\left(\gamma' \frac{z}{\Delta^2}\right) - i\pi \right] \quad (33)$$

At the “bare” Fermi surface we have $\xi_1 = 0$ and in the following we limit ourselves to $\varepsilon_n > 0$. Then, from (33) we can easily find limiting behavior of $Z(z)$. Just quoting some results we have:

1. For $\varepsilon_n \ll |\xi_2|$:

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

i.e. “impure” – like linear behavior in ε_n .

2. For $\varepsilon_n \gg |\xi_2|$ (i.e. also at the “hot spot”, where $\xi_2 = 0$):

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

i.e. (for $\xi_2 = 0$) NFL behavior similar to one – dimensional case.

Note that we always have $ImZ = 0$ for $\xi_2 = 0$, i.e. at the “shadow” Fermi surface and in particular at the “hot spot” itself.

2. *Spin – fermion combinatorics.*

Consider now spin – fermion (Heisenberg) model for pseudogap (SDW) fluctuations². In this case we again obtain FGM, but with gap distribution is different (from Rayleigh distribution) and instead of (32) we have:

$$\begin{aligned}
 Z(z) &= \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty dW \frac{W^2}{\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)^{3/2}} e^{-\frac{W^2}{2\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)}} \frac{z}{z - W^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty d\zeta \frac{\sqrt{\zeta}}{\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)^{3/2}} e^{-\frac{\zeta}{2\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)}} \frac{\zeta}{z - \zeta} = \\
 &= \frac{\Gamma(3/2)}{\sqrt{2\pi}} \frac{(-z)^{3/2}}{\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)^{3/2}} \exp\left[-\frac{z}{2\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)}\right] \Gamma\left(-\frac{1}{2}; -\frac{z}{2\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)}\right) \quad (36)
 \end{aligned}$$

Thus, for $z \rightarrow 0$ we obtain:

$$Z(z) \approx \frac{2\Gamma(3/2)}{\sqrt{\pi}} \left[-\frac{z}{2\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)} + \Gamma(-1/2) \left(-\frac{z}{2\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)} \right)^{3/2} \right] \quad (37)$$

1. For $\varepsilon_n \ll |\xi_2|$:

$$\text{Re}Z(\varepsilon_n \ll |\xi_2|, \xi_1 = 0) = \frac{2\Gamma(3/2)}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{\varepsilon_n^2}{2\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)} + \sqrt{2\pi} \left(\frac{\varepsilon_n |\xi_2|}{2\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)} \right)^{3/2} \right]$$

i.e. NFL “zero” behavior.

2. For $\varepsilon_n \gg |\xi_2|$ (i.e. also at the “hot spot” where $\xi_2 = 0$):

$$\text{Re}Z(\varepsilon_n \gg \xi_2, \xi_1 = 0) = \frac{\Gamma(3/2)}{\sqrt{\pi}} \frac{\varepsilon_n^2}{\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)}$$

i.e. again NFL “zero” behavior.

$$\Sigma(\varepsilon_n, \xi_{\mathbf{p}}) = \Sigma_{k=1}(\varepsilon_n, \xi_{\mathbf{p}}) \quad (42)$$

with $\xi_{\mathbf{p}} = \varepsilon(\mathbf{p}) - \mu$ (cf. (28)) and

$$\Sigma_k(\varepsilon_n, \xi_{\mathbf{p}}) = \Delta^2 \frac{s(k)}{i\varepsilon_n + \mu - \varepsilon_k(\mathbf{p}) + inv_k\kappa - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n, \xi_{\mathbf{p}})} \quad (43)$$

The quantity Δ again characterizes the energy scale of pseudogap fluctuations and $\kappa = \xi^{-1}$ is the inverse correlation length of short range SDW fluctuations, $\varepsilon_k(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{Q})$ and $v_k = |v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x| + |v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y|$ for odd k while $\varepsilon_k(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p})$ and $v_k = |v_{\mathbf{p}}^x| + |v_{\mathbf{p}}^y|$ for even k . The velocity projections $v_{\mathbf{p}}^x$ and $v_{\mathbf{p}}^y$ are determined by usual momentum derivatives of the “bare” electronic energy dispersion $\varepsilon(\mathbf{p})$ given by (28). Finally, $s(k)$ represents a combinatorial factor with

$$s(k) = k \quad (44)$$

for the case of commensurate charge (CDW type) fluctuations with $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)^5$. For incommensurate CDW fluctuations⁵ one finds

$$s(k) = \begin{cases} \frac{k+1}{2} & \text{for odd } k \\ \frac{k}{2} & \text{for even } k. \end{cases} \quad (45)$$

For spin – fermion model of Ref.², the combinatorics of diagrams becomes more complicated. Spin - conserving scattering processes obey commensurate combinatorics, while spin - flip scattering is described by diagrams of incommensurate type (“charged” random field in terms of Ref.²). In this model the recursion relation for the single-particle Green function is again given by (43), but the combinatorial factor $s(n)$ now acquires the following form²:

$$s(k) = \begin{cases} \frac{k+2}{3} & \text{for odd } k \\ \frac{k}{3} & \text{for even } k. \end{cases} \quad (46)$$

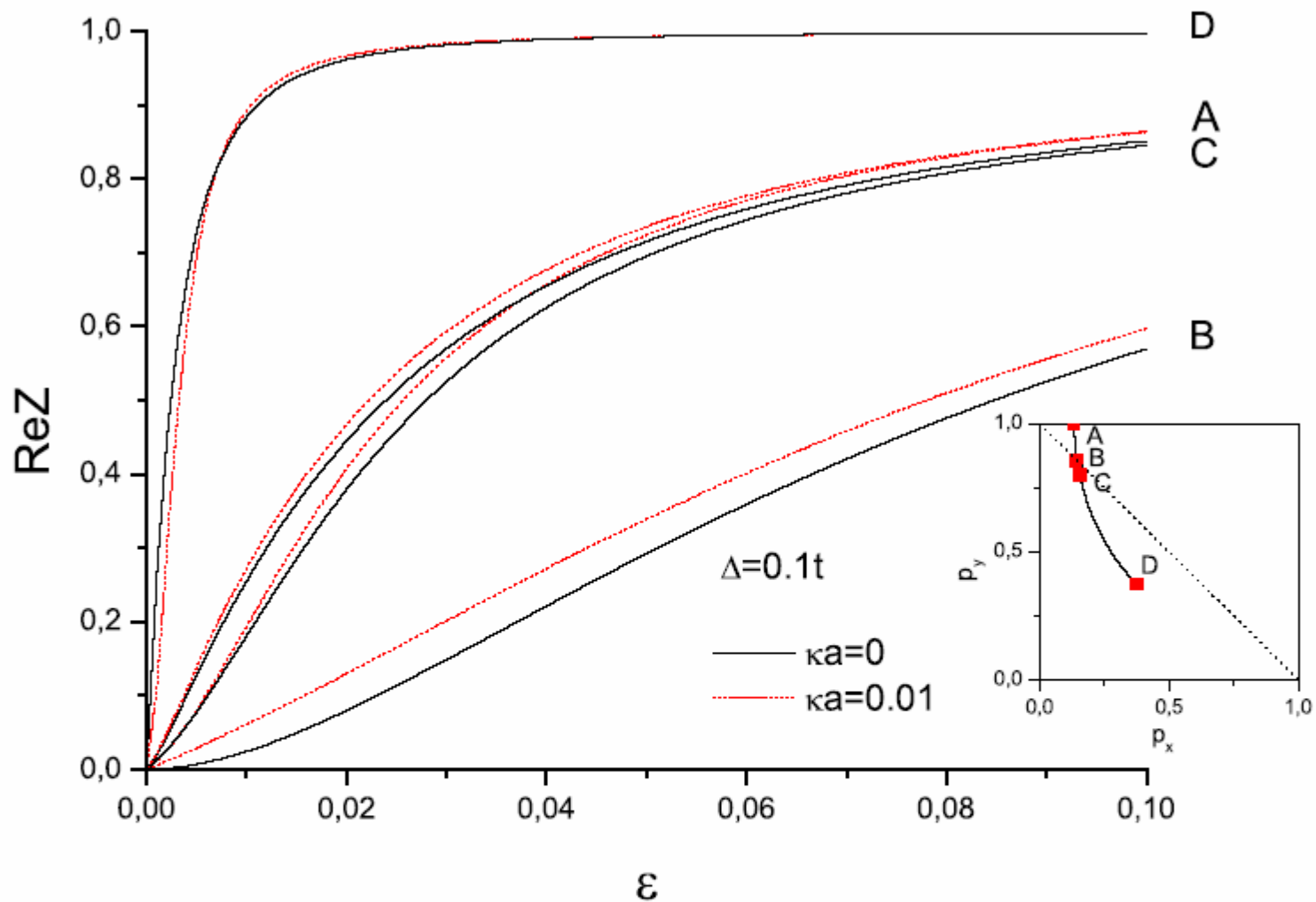


FIG. 4: Dependence of ReZ on ε_n (in units of t) at different points Fermi surface (corresponding to $t' = -0.4t$ and $\mu = -1.3t$) in “hot spots” model (spin – fermion combinatorics of diagrams) with correlation lengths $\xi \rightarrow \infty$ ($\kappa = 0$) and $\xi^{-1}a = \kappa a = 0.01$. Pseudogap amplitude $\Delta = 0.1t$. At the insert we show the “bare” Fermi surface and points, where calculations were done.

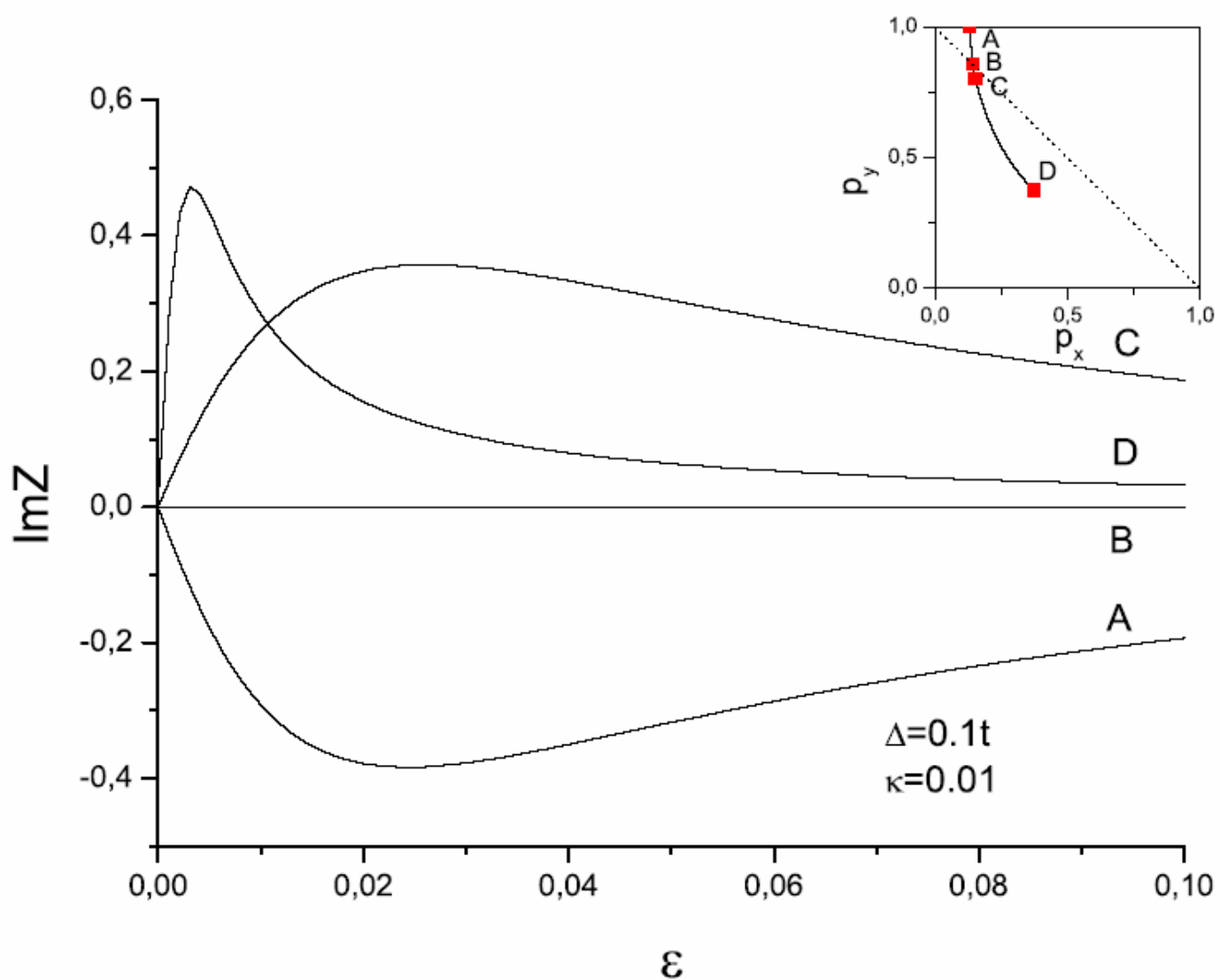


FIG. 5: Dependence of ImZ on ε_n (in units of transfer integral t) at different points Fermi surface (corresponding to $t' = -0.4t$ and $\mu = -1.3t$) in “hot spots” model with finite correlation length $\xi^{-1}a = \kappa a = 0.01$ (spin – fermion combinatorics of diagrams). Pseudogap amplitude $\Delta = 0.1t$. At the insert — the “bare” Fermi surface and points, where calculations were done.

C. Spectral density and Fermi surface “destruction” in “hot spots” model.

Let us return to (29) and perform the usual analytic continuation to real frequencies: $i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon + i\delta$. Then we obtain:

$$G^R(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{\varepsilon - \xi_2}{(\varepsilon + i\delta - \xi_1)(\varepsilon - \xi_2 + i\delta) - W^2} = \frac{\varepsilon - \xi_2}{(\varepsilon - \xi_1)(\varepsilon - \xi_2) - W^2 + i\delta(2\varepsilon - \xi_1 - \xi_2)} \quad (47)$$

so that spectral density in the case of long – range (CDW,SDW) order has the following form:

$$A_W(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^R(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) = (\varepsilon - \xi_2) \delta[(\varepsilon - \xi_1)(\varepsilon - \xi_2) - W^2] \text{sign}(2\varepsilon - \xi_1 - \xi_2) \quad (48)$$

Accordingly, for FGM with correlation length $\xi \rightarrow \infty$ we have:

$$A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) = \int_0^\infty dW \mathcal{P}_W A_W(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) \quad (49)$$

1. *Incommensurate combinatorics.*

In the case of incommensurate CDW – like pseudogap fluctuations we have:

$$\mathcal{P}_W = \frac{2W}{\Delta^2} e^{-\frac{W^2}{\Delta^2}} \quad (50)$$

– Rayleigh distribution^{4,11}. Then, from (49) we obtain:

$$A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{\varepsilon - \xi_2}{\Delta^2} e^{-\frac{(\varepsilon - \xi_1)(\varepsilon - \xi_2)}{\Delta^2}} \theta[(\varepsilon - \xi_1)(\varepsilon - \xi_2)] \text{sign}(2\varepsilon - \xi_1 - \xi_2) \quad (51)$$

For $\varepsilon = 0$ we have:

$$A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{\xi_2}{\Delta^2} e^{-\frac{\xi_1 \xi_2}{\Delta^2}} \theta[\xi_1 \xi_2] \text{sign}(\xi_1 + \xi_2) \quad (52)$$

For $\xi_1 \rightarrow \pm 0$ we get:

$$A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}} \rightarrow \pm 0, \xi_2) = \pm \frac{\xi_2}{\Delta^2} \theta(\pm \xi_2) \quad (53)$$

so that within the Brillouin zone $A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}})$ is nonzero only in the space between “bare” Fermi surface and “shadow” Fermi surface. This qualitative result is confirmed below, for all other combinatorics, for the case of “pure” FGM with $\xi^{-1} = \kappa = 0$.

3. Spin – fermion combinatorics.

In the case of SDW – like pseudogap fluctuations of (Heisenberg) spin – fermion model² we have gap distribution:

$$\mathcal{P}_W = \frac{2}{\pi} \frac{W^2}{\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)^{3/2}} e^{-\frac{W^2}{2\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)}} \quad (56)$$

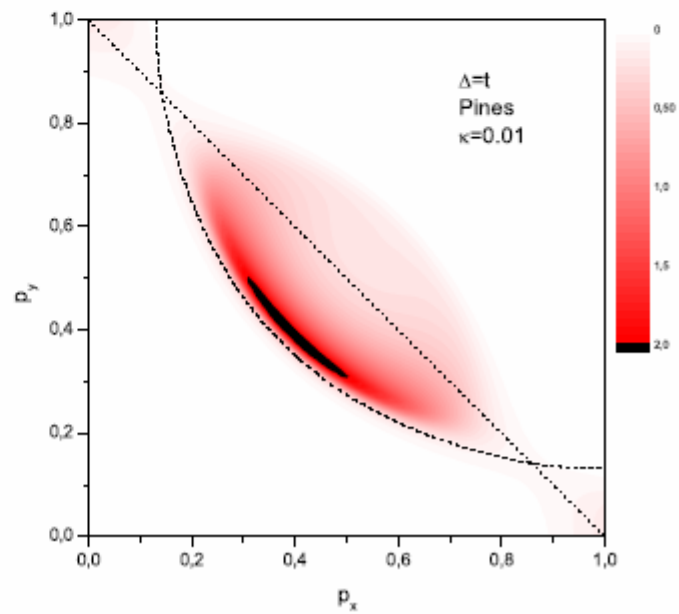
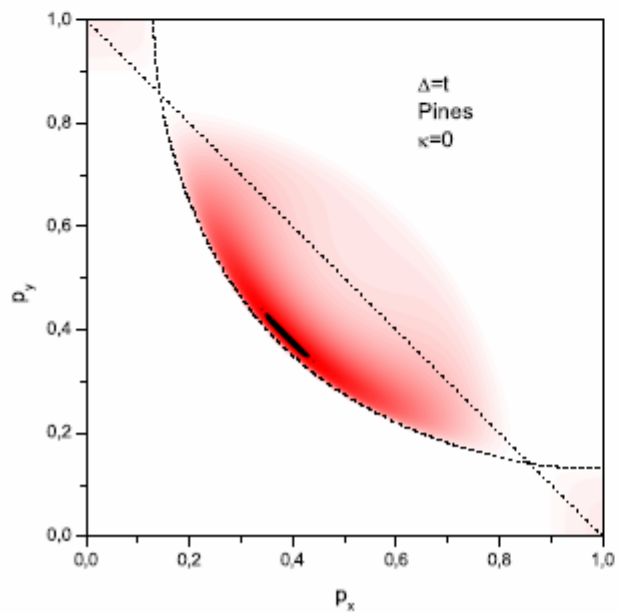
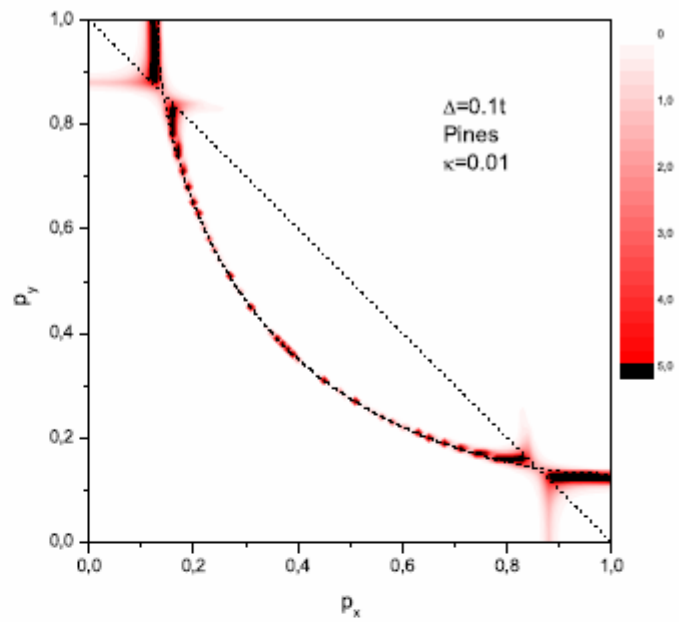
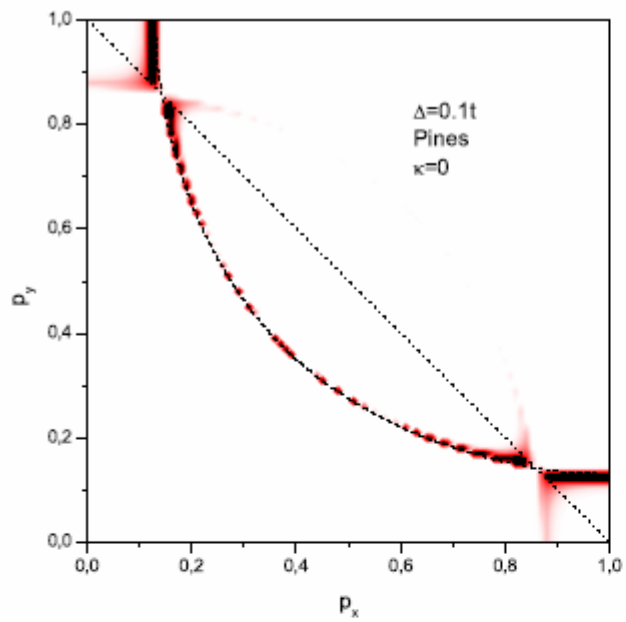
Then, from (49) we obtain:

$$A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{(\varepsilon - \xi_1)(\varepsilon - \xi_2)}}{\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)^{3/2}} e^{-\frac{(\varepsilon - \xi_1)(\varepsilon - \xi_2)}{2\left(\frac{\Delta^2}{3}\right)}} \theta[(\varepsilon - \xi_1)(\varepsilon - \xi_2)] \text{sign}(2\varepsilon - \xi_1 - \xi_2) \quad (57)$$

again with the same qualitative conclusions as in incommensurate case.

For the general case of finite correlation lengths $\xi = \kappa^{-1}$ spectral densities can be directly computed using analytic continuation of recursion relations (42), (43) to real frequencies^{2,3}.

Actually, two – dimensional contour plots of $A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}})$ (which are in direct correspondence with ARPES intensity plots) can be used for “practical” definition of renormalized Fermi surface and provide a qualitative picture of its evolution in FGM with the change model parameters⁶.



D. Superconducting d - wave fluctuations.

As we noted above, the case of superconducting s - wave pseudogap fluctuations simply reduces to one - dimensional FGM. Much more interesting is the case of superconducting d - wave fluctuations in $2D$.

To obtain exact results for the case of infinite correlation length $\xi^{-1} = \kappa = 0$ we have only to make simple replacements in the above expressions for the “hot spots” model with incommensurate combinatorics: $\xi_2 \rightarrow -\xi_1 = -\xi_{\mathbf{p}}$ and $\Delta \rightarrow \Delta_{\mathbf{p}}$, where $\Delta_{\mathbf{p}}$ defines the amplitude of fluctuations with d - wave symmetry:

$$\Delta_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2} \Delta [\cos(p_x a) - \cos(p_y a)] \quad (58)$$

with Δ now characterizing the energy scale of pseudogap fluctuations.

Then (31) reduces to $z = -(\varepsilon_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2)$ and for Z -factor we immediately obtain an expression, similar to (21):

$$\begin{aligned} Z(\varepsilon_n, \xi_{\mathbf{p}}) &= -\frac{\varepsilon_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2}{\Delta_{\mathbf{p}}^2} \exp\left(-\frac{\varepsilon_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2}{\Delta_{\mathbf{p}}^2}\right) Ei\left(-\frac{\varepsilon_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2}{\Delta_{\mathbf{p}}^2}\right) \approx \\ &\approx -\frac{\varepsilon_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2}{\Delta_{\mathbf{p}}^2} \ln\left(\gamma' \frac{\varepsilon_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2}{\Delta_{\mathbf{p}}^2}\right) \rightarrow 0 \quad \text{for } \varepsilon_n \rightarrow 0, \xi_{\mathbf{p}} \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (59)$$

again replacing the pole singularity by zero at the “bare” Fermi surface, except the “nodal” at the diagonal of the Brillouin zone, where $\Delta_{\mathbf{p}} = 0$ (cf. (58)).

Instead of (51), we get spectral density as:

$$A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{\varepsilon + \xi_{\mathbf{p}}}{\Delta_{\mathbf{p}}^2} e^{-\frac{\varepsilon^2 - \xi_{\mathbf{p}}^2}{\Delta_{\mathbf{p}}^2}} \theta(\varepsilon^2 - \xi_{\mathbf{p}}^2) \text{sign} \varepsilon \quad (60)$$

which is nonzero only for $|\xi_{\mathbf{p}}| < \varepsilon$. As a result, for $\varepsilon = 0$ we have $A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}}) = 0$ for $\Delta_{\mathbf{p}} \neq 0$, and it is different from zero only at the intersection of Brillouin zone diagonal with “bare” Fermi surface, where $\Delta_{\mathbf{p}}$ given by (58) is zero. At Fermi surface itself we have:

$$A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}} = 0) = \frac{|\varepsilon|}{\Delta_{\mathbf{p}}^2} e^{-\frac{\varepsilon^2}{\Delta_{\mathbf{p}}^2}} \quad (61)$$

with two maxima at $\varepsilon = \pm \Delta_{\mathbf{p}} / \sqrt{2}$.

Considering the general case of finite correlation lengths $\xi = \kappa^{-1}$ we again perform numerical analysis using the recursion relations introduced for this problem in Ref.³, using the basic definition of Z - factor given in (3). To calculate self - energy $\Sigma(\varepsilon_n, \xi_{\mathbf{p}})$ of an electron scattered by static fluctuations of superconducting order parameter with d - wave symmetry, we use the following relation (similar to (43)), slightly generalizing relations derived in of Ref.³:

$$\Sigma_k(\varepsilon_n, \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{\Delta_{\mathbf{p}}^2 s(k)}{i\varepsilon_n - (-1)^k \xi_{\mathbf{p}} + ik\kappa(|v_{\mathbf{p}}^x| + |v_{\mathbf{p}}^y|) - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n, \xi_{\mathbf{p}})} \quad (62)$$

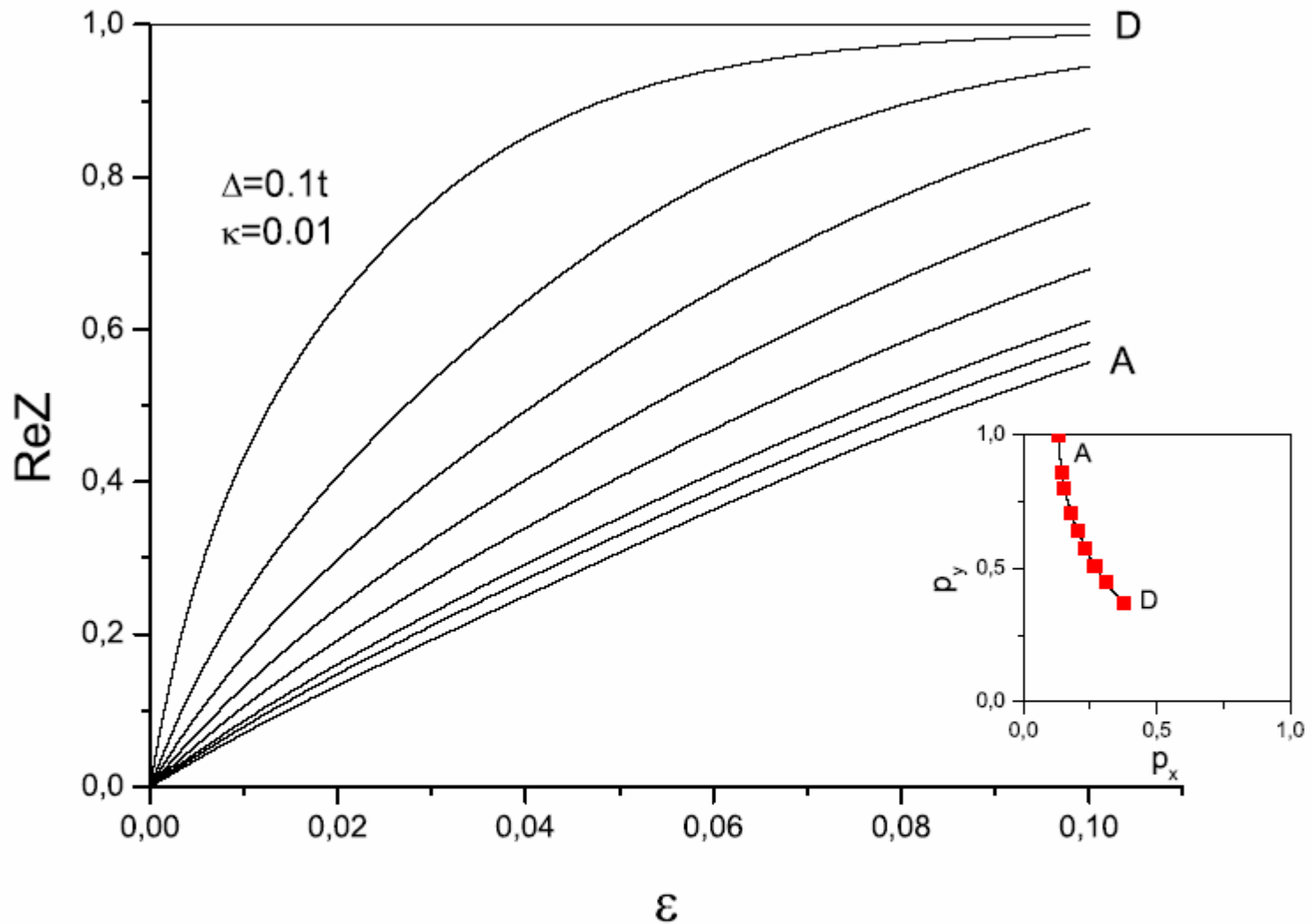


FIG. 7: Dependence of ReZ on ε_n (in units of t) at different points Fermi surface (corresponding to $t' = -0.4t$ and $\mu = -1.3t$) in the model of superconducting (d - wave) pseudogap fluctuations with correlation length $\xi^{-1}a = \kappa a = 0.01$. Pseudogap amplitude $\Delta = 0.1t$. At the insert we show the “bare” Fermi surface and points, where calculations were done.

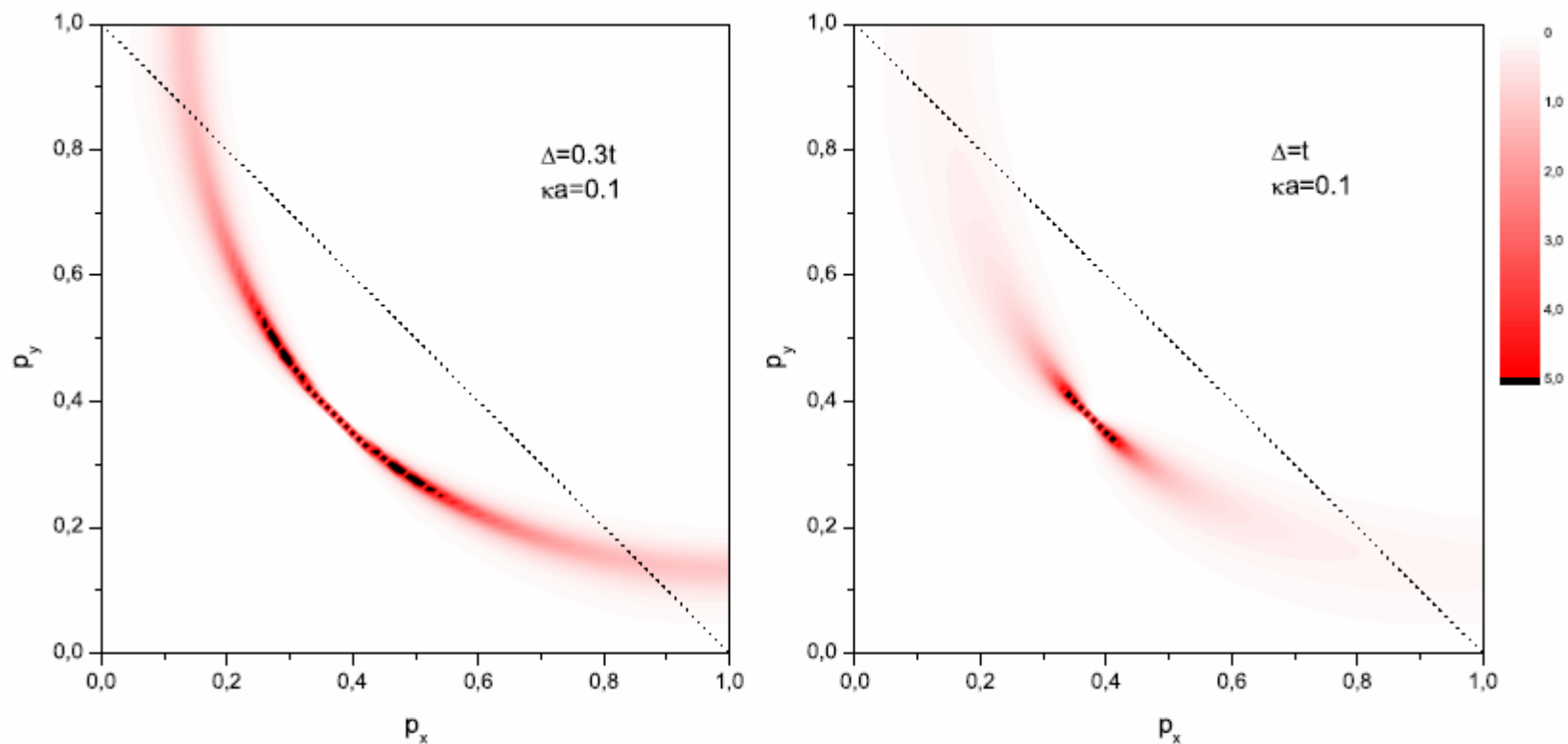
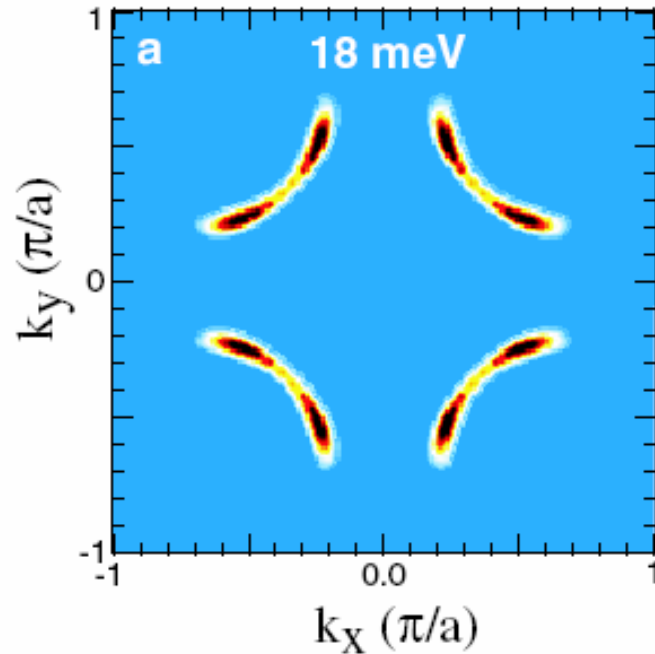


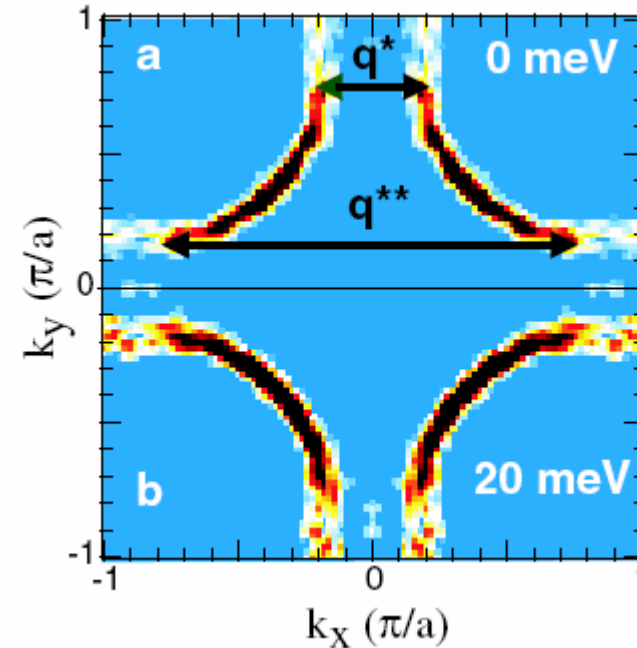
FIG. 8: Intensity plots of spectral density $A(\varepsilon = 0, \xi_{\mathbf{p}})$ in Brillouin zone ($t' = -0.4t$ and $\mu = -1.3t$) for the case of superconducting (d -wave) pseudogap fluctuations. Correlation length $\xi^{-1}a = \kappa a = 0.1$ (spin – fermion combinatorics of diagrams) for two different values of pseudogap amplitude $\Delta = 0.3t$ and $\Delta = t$.

Nondispersive Fermi Arcs and the Absence of Charge Ordering in the Pseudogap Phase of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$

U. Chatterjee,^{1,2} M. Shi,^{1,3} A. Kaminski,⁴ A. Kanigel,¹ H. M. Fretwell,⁴ K. Terashima,⁵ T. Takahashi,⁵ S. Rosenkranz,²
Z. Z. Li,⁶ H. Raffy,⁶ A. Santander-Syro,⁶ K. Kadowaki,⁷ M. R. Norman,² M. Randeria,⁸ and J. C. Campuzano^{1,2}



Superconducting state -
optimally doped sample



Pseudogap state -
underdoped sample

Выводы:

- Псевдощель – ближний порядок!
- Псевдощель в ВТСП – проявление флуктуаций конкурирующего (с сверхпроводимостью) параметра порядка
- Псевдощель проявляется, в основном, при промежуточных корреляциях
- Псевдощель ведет к нефермижидкостному поведению в определенных областях импульсного пространства