

БЕСПОРЯДОК И ПСЕВДОЩЕЛЬ В СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ: ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА В DMFT+ Σ -ПОДХОДЕ

*Н. А. Кулеева**, *Э. З. Кучинский***

*Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук
620016, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 15 января 2013 г.

В рамках DMFT+ Σ -обобщения теории динамического среднего поля исследуется влияние беспорядка и псевдощелевых флуктуаций на моттовский переход металл–диэлектрик в сильно коррелированных системах. На основании исследований плотности состояний и оптической проводимости построена фазовая диаграмма (в осях: беспорядок, Хаббардовское взаимодействие, температура) парамагнитной модели Андерсона–Хаббарда, позволяющей рассмотреть как эффекты сильных электронных корреляций, так и влияние сильного беспорядка. Сильные корреляции учитываются с помощью DMFT, а сильный беспорядок — путем некоторого обобщения самосогласованной теории локализации. Исследованы плотность состояний и оптическая проводимость в рамках парамагнитной модели Хаббарда в псевдощелевом состоянии, вызываемом антиферромагнитными спиновыми (или зарядовыми) флуктуациями ближнего порядка с конечной корреляционной длиной, которые моделировались статическим гауссовым случайным полем. Исследовано влияние псевдощели на моттовский переход металл–диэлектрик. Показано, что в обоих случаях статическое гауссово случайное поле (связанное с беспорядком или псевдощелевыми флуктуациями) приводит к затруднению моттовского перехода металл–диэлектрик, а также к уширению области сосуществования диэлектрической и металлической фаз и росту критической температуры, при которой область сосуществования пропадает.

DOI: 10.7868/S0044451013060190

1. ВВЕДЕНИЕ

Вершиной современной теории в описании сильно коррелированных систем (СКС) является теория динамического среднего поля (DMFT) [1–3]. Однако для последовательного описания электронных свойств СКС необходим учет и других взаимодействий (беспорядок, электрон-фононное взаимодействие, рассеяние на флуктуациях ближнего порядка и т. д.) с неизбежностью присутствующих в таких системах. В частности, в чистом виде DMFT не пригодна для изучения «антиферромагнитного» сценария формирования псевдощели в сильно коррелированных металлах вследствие полного пренебрежения нелокальными корреляциями. Для преодоления этого недостатка нами предложен DMFT+ Σ -подход [4–7], который в работах [8, 9] был развит и для ана-

лиза оптической проводимости. Этот подход оказался очень удобен для исследования влияния и других внешних (по отношению к модели Хаббарда) взаимодействий (беспорядка [9, 10], электрон-фононного взаимодействия [11]). В данной работе в рамках DMFT+ Σ -подхода мы подробно исследуем влияние дополнительного взаимодействия и температуры на моттовский переход металл–диэлектрик в двух типичных моделях СКС: в неупорядоченной модели Андерсона–Хаббарда [9] и в модели «горячих точек» псевдощелевого состояния [5, 8].

2. ОБОБЩЕННЫЙ DMFT+ Σ -ПОДХОД

Обобщающий теорию динамического среднего поля DMFT+ Σ -подход [4–7] дополняет стандартную теорию DMFT [1–3] добавочной «внешней» собственной энергетической частью (СЭЧ) $\Sigma_p(\epsilon)$ (в общем случае импульсно зависимой), являющейся следствием любого вида взаимодействия за пределами

*E-mail: strigina@iep.uran.ru

**E-mail: kuchinsk@iep.uran.ru

DMFT, и дает эффективный метод вычисления как одночастичных, так и двухчастичных свойств [8, 9]. Успех такого обобщенного подхода (и его основной недостаток) связан с выбором одночастичной функции Грина в виде

$$G(\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{1}{\varepsilon + \mu - \varepsilon(\mathbf{p}) - \Sigma(\varepsilon) - \Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)}, \quad (1)$$

где $\varepsilon(\mathbf{p})$ — «затравочная» электронная дисперсия, а полная СЭЧ, вследствие пренебрежения интерференцией между хаббардовским и «внешним» взаимодействием, является аддитивной суммой локальной СЭЧ $\Sigma(\varepsilon)$, определяемой DMFT, и «внешней» $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)$. Это позволяет сохранить систему самосогласованных уравнений стандартной DMFT [1–3]. Однако существуют два отличия от традиционной DMFT. На каждой DMFT-итерации мы пересчитываем «внешнюю» СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)$ с помощью некоторой приближенной схемы, учитывающей взаимодействие с коллективными модами или флуктуациями параметра порядка, и локальная функция Грина «одета» $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)$ на каждом шаге стандартной DMFT-процедуры. Для решения эффективной однопримесной андерсоновской задачи мы далее используем метод численной ренормгруппы [12]. В рамках DMFT+ Σ -подхода удобно исследовать и двухчастичные свойства, в частности, для действительной части оптической проводимости в DMFT+ Σ -подходе имеем [8, 9]

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

где e — заряд электрона, $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon \pm \omega/2$,

$$\begin{aligned} \phi_{\varepsilon}^{0RR(RA)}(\omega) &= \\ &= \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\Phi_{\varepsilon}^{0RR(RA)}(\omega, \mathbf{q}) - \Phi_{\varepsilon}^{0RR(RA)}(\omega, 0)}{q^2}, \quad (3) \end{aligned}$$

а двухчастичные функции Грина $\Phi_{\varepsilon}^{0RR(RA)}(\omega, \mathbf{q})$ содержат все вершинные поправки от «внешнего» взаимодействия, но не включают вершинных поправок от хаббардовского взаимодействия. Таким образом достигается существенное упрощение, для вычисления оптической проводимости в DMFT+ Σ -приближении мы должны решить только одночастичную задачу определения локальной

СЭЧ $\Sigma(\varepsilon_{\pm})$ с помощью DMFT+ Σ -процедуры, а нетривиальный вклад от нелокальных корреляций входит посредством $\Phi_{\varepsilon}^{0RR(RA)}(\omega, \mathbf{q})$, которые могут быть вычислены в подходящем приближении с учетом только «внешнего» взаимодействия.

3. ПРИМЕСНАЯ МОДЕЛЬ АНДЕРСОНА – ХАББАРДА

Важность учета электронного взаимодействия и неупорядоченности при исследовании конденсированного состояния хорошо известна [13]. Кулоновские корреляции и беспорядок являются двумя движущими силами, приводящими к переходам металл–диэлектрик, связанными с локализацией и делокализацией носителей заряда. Основной моделью, позволяющей учесть как электронные корреляции, приводящие к моттовскому переходу металл–диэлектрик [14], так и эффекты сильного беспорядка, приводящие к андерсоновскому переходу металл–диэлектрик [15], является модель Андерсона–Хаббарда [9, 16].

В работах [9, 10] мы применили DMFT+ Σ -подход для расчета плотности состояний, оптической проводимости и фазовой диаграммы в рамках парамагнитной модели Андерсона–Хаббарда с сильными электронными корреляциями и с сильным гауссовским узельным беспорядком. Сильные корреляции рассматривались с помощью DMFT, а беспорядок учитывался с помощью подходящего обобщения самосогласованной теории локализации [19, 20]. В работе [9] рассматривалась трехмерная система с полуэллиптической плотностью состояний. Фазы коррелированного металла, моттовского диэлектрика и коррелированного андерсоновского диэлектрика определялись по эволюции плотности состояний и динамической проводимости, которые демонстрируют как переход Мотта–Хаббарда, так и андерсоновский переход металл–изолятор, что позволило построить полную фазовую диаграмму в модели Андерсона–Хаббарда при нулевой температуре.

Для «внешней» СЭЧ, входящей в DMFT+ Σ -цикл, мы использовали самое простое приближение, пренебрегающее «пересекающимися» диаграммами для примесного рассеяния, т.е. самосогласованное борновское приближение, которое в случае гауссовского распределения узельных энергий имеет вид

$$\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon) = \Delta^2 \sum_{\mathbf{p}} G(\varepsilon, \mathbf{p}), \quad (4)$$

где $G(\varepsilon, \mathbf{p})$ — одноэлектронная функция Грина (1), Δ — степень узельного беспорядка.

Как уже отмечалось выше, вычисление оптической проводимости с использованием (2) значительно упрощается вследствие отсутствия вкладов в проводимость от вершинных поправок, определяемых локальным хаббардовским взаимодействием. Для получения петлевых вкладов $\Phi_\varepsilon^{0RR(RA)}(\omega, \mathbf{q})$, определяемых беспорядком, следуя [9], можно использовать некоторое обобщение самосогласованной теории локализации [19, 20]. В конечном счете, проводимость определяется, главным образом, обобщенным коэффициентом диффузии, получаемым из подходящего обобщения самосогласованного уравнения [19, 20] этой теории, которое и решалось в совокупности с DMFT+ Σ -процедурой.

Полученная в DMFT+ Σ -подходе фазовая диаграмма парамагнитной модели Андерсона–Хаббарда при нулевой температуре оказалась качественно похожей на диаграмму, построенную ранее для этой модели в работе [16], где электронные корреляции также учитывались в рамках DMFT, а критический беспорядок для андерсоновского перехода определялся из поведения средней логарифмической плотности состояний [16–18], полученной путем прямого численного усреднения по различным реализациям беспорядка.

В данной работе мы, следуя подходу работы [9], подробно рассмотрим как беспорядок влияет на моттовский переход металл–диэлектрик при конечных температурах в трехмерной системе с «затравочной» модельной полуэллиптической плотностью состояний:

$$N_0(\varepsilon) = \frac{2}{\pi D^2} \sqrt{D^2 - \varepsilon^2} \quad (5)$$

с шириной зоны $W = 2D$. Ниже представлены результаты для фазовой диаграммы парамагнитной модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением, полученные путем расчетов плотности состояний и оптической проводимости в DMFT+ Σ -приближении.

Рассчитанная фазовая диаграмма в плоскости беспорядок–корреляции (Δ, U) при нулевой температуре приведена на рис. 1а. Линия перехода Андерсона $\Delta_c \approx 0.37W = 0.74D$ определялась как величина беспорядка, для которого статическая проводимость обращается в нуль при $T = 0$. В DMFT+ Σ -подходе критический беспорядок Δ_c не зависит от хаббардовского взаимодействия U [9]. Поскольку при андерсоновском переходе не возникают какие-либо особенности в плотности состояний [20],

а статическая проводимость отлична от нуля при конечной температуре для любого беспорядка, затруднительно дать ясное определение андерсоновского перехода при конечных температурах. Поэтому далее мы будем лишь кратко исследовать температурную эволюцию локализационных эффектов в оптической проводимости, а в основном сосредоточимся на анализе температурной и примесной зависимости мотт-хаббардовского перехода в модели Андерсона–Хаббарда.

Переход Мотта–Хаббарда может быть определен по исчезновению центрального пика (квазичастичной зоны) в плотности состояний или по проводимости, например, по наблюдению закрытия щели в оптической проводимости в диэлектрической фазе, или по исчезновению друдевского пика в металлической фазе. Качественно кривая перехода Мотта–Хаббарда $U_{c2}(\Delta, T = 0)$ может быть получена в предположении, что основным параметром, контролирующим такой переход, является отношение хаббардовского взаимодействия U к ширине зоны $W(\Delta)$, которая растет с ростом беспорядка, приводя к росту $U_{c2}(\Delta) = U_{c2}(0) \sqrt{1 + 16\Delta^2/W^2}$ [9]. Такая кривая $U_{c2}(\Delta, T = 0)$ приведена на рис. 1а и демонстрирует отличное согласие с точками моттовского перехода (сплошные квадратики), полученными непосредственно DMFT+ Σ -расчетами плотности состояний и проводимости для различной степени беспорядка Δ . Видим, что рост беспорядка затрудняет моттовский переход металл–диэлектрик (требуются все большие U), а увеличение беспорядка в фазе моттовского диэлектрика приводит к восстановлению металлического состояния [9]. Такое интересное поведение с ростом беспорядка сохраняется и при конечной температуре, что ясно демонстрирует поведение плотности состояний и оптической проводимости¹⁾ (рис. 2), сосчитанных при температуре $T = 0.0073W$ в DMFT+ Σ -подходе в точках (U, Δ) , обозначенных большими квадратами на фазовой диаграмме рис. 1а. Увеличение температуры, в отличие от беспорядка, облегчает моттовский переход и вся кривая $U_{c2}(\Delta, T = 0.0073W)$ (штриховая кривая со светлыми квадратами) смещается влево в область меньших U .

В отсутствие беспорядка характерной особенностью перехода Мотта–Хаббарда является гистерезисное поведение плотности состояний, возникающее при уменьшении U из диэлектрической фазы [2, 3, 21]. При движении с ростом U моттовский

¹⁾ Величина проводимости приводится в единицах e^2/ha (a — параметр решетки).

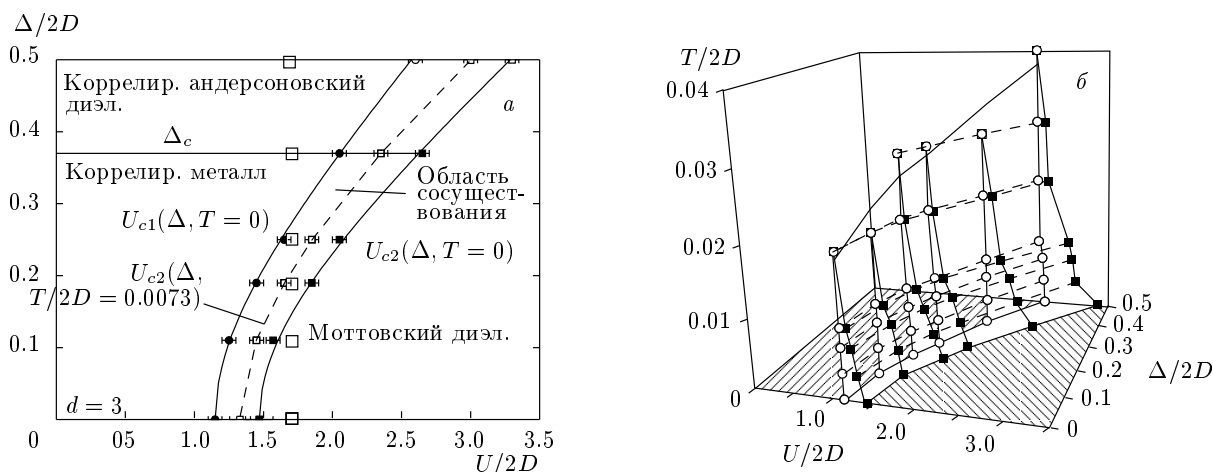


Рис. 1. Фазовая диаграмма парамагнитной модели Андерсона–Хаббарда: *a* — случай нулевой температуры [9]. Линия перехода Андерсона $\Delta_c/2D = 0.37$. Сплошные кривые для границ фазы моттовского диэлектрика и области сосуществования $U_{c1,c2}(\Delta, T = 0)$ получены из аналитической оценки, а точками на кривых показаны значения этих границ, полученные из расчетов плотности состояний и проводимости. Светлыми квадратами показаны значения для границы фазы моттовского диэлектрика, полученные из расчетов плотности состояний и проводимости при $T/2D = 0.0073$. Большими квадратами обозначены точки (U, Δ) , поведение плотности состояний и оптической проводимости в которых приведено на рис. 2 при $T/2D = 0.0073$; *b* — границы фазы моттовского диэлектрика и области сосуществования при различных температурах. Точки получены из расчетов плотности состояний. Сплошная кривая, проведенная по точкам критической температуры T_c исчезновения области сосуществования, — линейная подгонка по формуле $(T_c/2D = 0.019(1 + \Delta/D))$

переход металл–диэлектрик наступает при критическом $U_{c2} \approx 1.5W$. При уменьшении U диэлектрическое состояние сохраняется для величин U достаточно глубоко в фазе коррелированного металла, получаемой с увеличением U . Металлическая фаза восстанавливается только при $U_{c1} \approx 1.15W$. Соответствующий интервал $U_{c1} < U < U_{c2}$ обычно рассматривается как область сосуществования металлической и моттовской диэлектрической фаз, где металлическая фаза является термодинамически более стабильной [2, 21]. Такое гистерезисное поведение плотности состояний (см. [9]) сохраняется и в присутствии беспорядка. Качественная кривая границы области сосуществования $U_{c1}(\Delta, T = 0)$ и точки (кружки), полученные для нее DMFT+ Σ -расчетами плотности состояний и проводимости, приведены на рис. 1*a*. Видим, что с ростом беспорядка область сосуществования расширяется.

На рис. 1*b* показана температурная зависимость границ фазы моттовского диэлектрика $U_{c2}(\Delta, T)$ (квадраты) и области сосуществования $U_{c1}(\Delta, T)$ (кружки). Хорошо известно, что в отсутствие беспорядка в DMFT ширина области сосуществования уменьшается с ростом температуры T , исчезая при некоторой критической температуре T_c . В

DMFT+ Σ -приближении рост беспорядка при нулевой температуре приводит к уширению области сосуществования, такое поведение сохраняется и при конечных температурах. Видно, что рост беспорядка приводит к практически линейному росту (сплошная кривая на рисунке) этой критической температуры. Следует отметить также очень слабую зависимость от температуры границы области сосуществования $U_{c1}(\Delta, T)$.

На рис. 2 мы видим, что при конечной температуре (как и при $T \rightarrow 0$ [9]) рост степени беспорядка Δ приводит к восстановлению металлического состояния в моттовском диэлектрике. Переход металл–диэлектрик с изменением беспорядка (при фиксированном U) также будет переходом первого рода с гистерезисным поведением плотности состояний и проводимости и областью сосуществования диэлектрической и металлической фаз в диапазоне беспорядка Δ между кривыми $U_{c1}(\Delta)$ и $U_{c2}(\Delta)$. Поэтому если мы стартуем с фазы моттовского диэлектрика, то восстановление металлического состояния с ростом беспорядка (рис. 2*в,г*) наблюдается лишь при $\Delta > \Delta_{c1}$, определяемой границей области сосуществования, т. е. уравнением $U = U_{c1}(\Delta_{c1})$, а в диапазоне беспорядка между кривыми $U_{c1}(\Delta)$ и $U_{c2}(\Delta)$

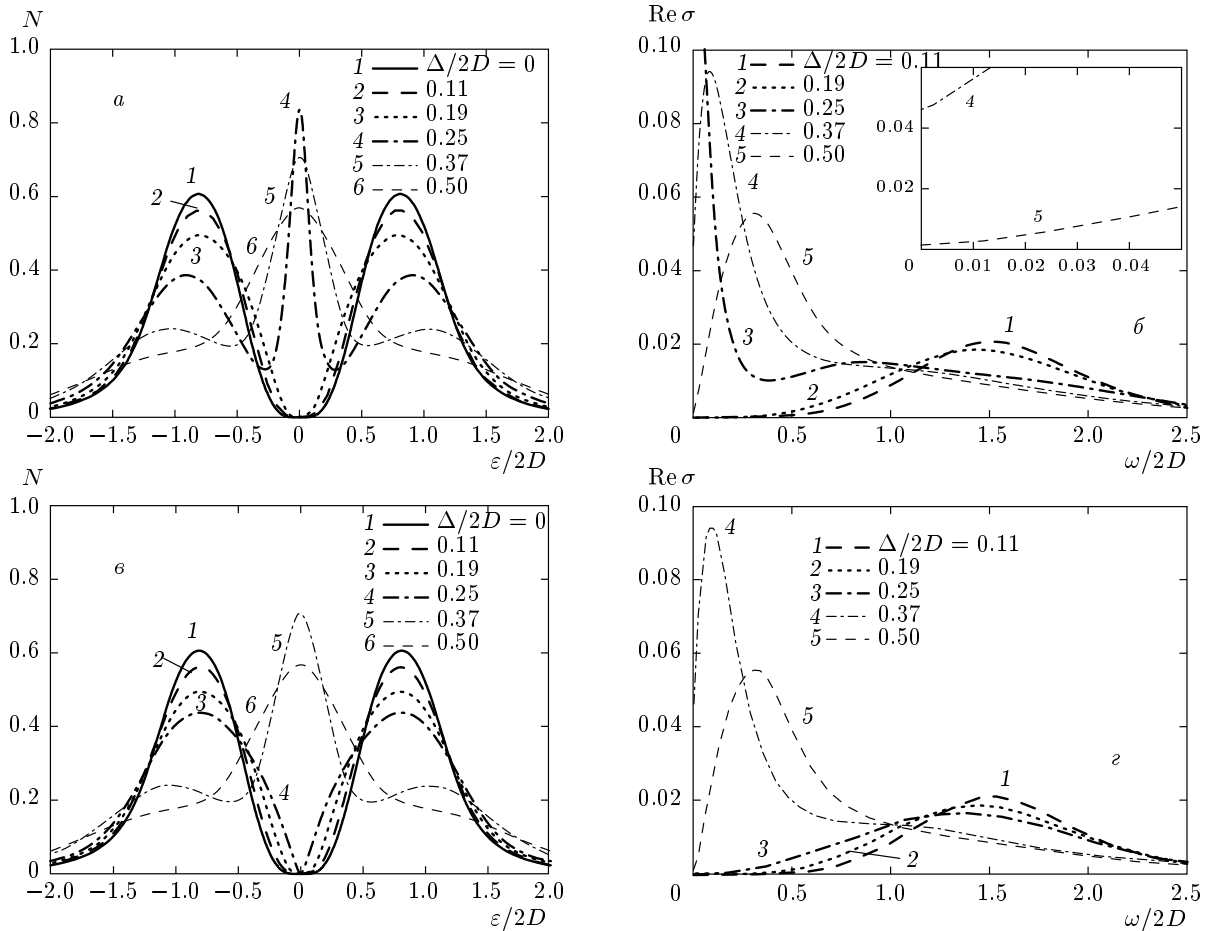


Рис. 2. Плотность состояний N и оптическая проводимость $\text{Re } \sigma$ в модели Андерсона–Хаббарда с половинным заполнением при $U/2D = 1.7$, $T/2D = 0.0073$ для различных степеней беспорядка Δ : *a, б* — при уменьшении степени беспорядка из металлической фазы, *в, г* — при увеличении беспорядка из диэлектрической фазы. На вставке — низкочастотное поведение оптической проводимости

будет наблюдаться метастабильное диэлектрическое состояние. С ростом степени беспорядка Δ из диэлектрической фазы в плотности состояний (рис. 2*в*) на месте моттовской щели (кривые 1–4) восстанавливается квазичастичный пик (кривые 5, 6), что связано с уширением зоны (в отсутствие U) беспорядком [9]. В оптической проводимости (рис. 2*г*) рост беспорядка приводит к возникновению друдевского пика (кривые 4, 5) на месте диэлектрической щели (кривые 1, 2). При обратном изменении степени беспорядка (рис. 2*а, б*) снова восстанавливается моттовская диэлектрическая фаза — диэлектрическая щель в плотности состояний (кривые 1–3 на рис. 2*а*) и в оптической проводимости (кривые 1, 2 на рис. 2*б*). Однако восстановление диэлектрической фазы при уменьшении беспорядка наблюдается лишь при заметно меньшей степени беспорядка, в

частности, кривая 4 для плотности состояний и кривая 3 для оптической проводимости, соответствующие беспорядку $\Delta/2D = 0.25$ из области сосуществования, имеют выраженный квазичастичный и друдевский пик²⁾, а аналогичные кривые для этого беспорядка на рис. 2*в, г*, соответствующие движению с ростом беспорядка, — моттовскую щель.

При большом беспорядке оптическая проводимость (кривые 4, 5 на рис. 2*б, г*) ярко демонстрирует эффекты андерсоновской локализации. При степени

²⁾ Отметим, что при данной температуре ($T/2D = 0.0073$) максимум друдевского пика расположен на нулевой частоте, что свидетельствует о заметном подавлении локализационных эффектов температурой. При более низкой температуре роль эффектов локализации существенна и максимум друдевского пика находится на конечной частоте [9] (кривая 1 на рис. 3*в*).

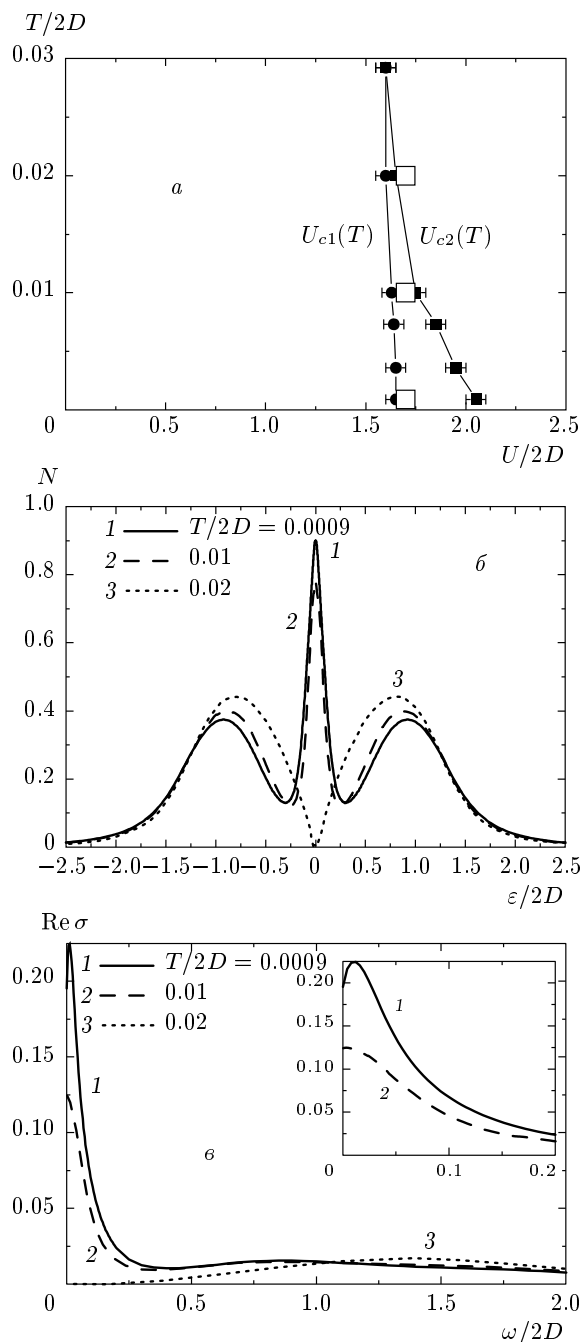


Рис. 3. Переход металл–диэлектрик Мотта–Хаббарда с ростом температуры в модели Андерсона–Хаббарда: *a* — сечение трехмерной фазовой диаграммы рис. 1б при $\Delta/2D = 0.25$. Большими квадратами обозначены точки (U, T) , для которых приведено поведение плотности состояний (*б*) и оптической проводимости (*в*). На вставке — низкочастотное поведение оптической проводимости; $U/2D = 1.7$

беспорядка $\Delta/2D = 0.37$ (кривая 4) при $T = 0$ произошел бы андерсоновский переход металл–диэлектрик, при конечной температуре мы видим, что статическая проводимость отлична от нуля (см. вставку на рис. 2б). Конечной (хоть и экспоненциально малой) остается статическая проводимость и в глубоко локализованной фазе (кривая 5), однако на вставке рис. 2б ясно видна локализационная квадратичная зависимость от частоты оптической проводимости в этом случае.

Температурное поведение $U_{c2}(\Delta, T)$, показанное на рис. 1б, свидетельствует о том, что рост температуры для любой степени беспорядка Δ облегчает моттовский переход металл–диэлектрик (для диэлектризации требуются меньшие U). Это приводит к тому, что если при низкой температуре система является сильно коррелированным металлом и достаточно близка к моттовскому переходу, то рост температуры вызывает такой переход, т. е. система становится диэлектриком. Такой зависящий от температуры переход в поведении плотности состояний и оптической проводимости продемонстрирован на рис. 3. Следует отметить, что при обратном изменении температуры из полученной диэлектрической фазы переход отсутствует, и система будет оставаться в метастабильном диэлектрическом состоянии вплоть до $T = 0$. Заметим, что беспорядок, расширяя область сосуществования, увеличивает и область U , в которой такой зависящий от температуры переход металл–диэлектрик может наблюдаться. Можно отметить слабую температурную зависимость плотности состояний при температурах ниже температуры перехода (см. кривые 1, 2 на рис. 3б). Быстрое сужение и «схлопывание» квазичастичного пика наблюдается лишь в непосредственной окрестности температуры перехода. Слабо зависит от температуры в металлической фазе и оптическая проводимость (рис. 3в) при достаточно высоких частотах, однако при низких частотах мы наблюдаем сильное ослабление локализационных эффектов с ростом температуры — для кривой 2 ($T/W = 0.01$) имеем обычный друдевский пик на нулевой частоте, для кривой 1 ($T/W = 0.0009$) максимум смещен на конечную частоту (см. вставку на рис. 3в), что свидетельствует о существенности эффектов локализации.

Итак, мы показали, что примесное рассеяние, т. е. рассеяние электронов в статическом гауссовом случайном поле с коррелятором типа «белый шум», затрудняет моттовский переход металл–диэлектрик и беспорядок может восстанавливать металлическое состояние из фазы моттовского диэлектрика. Ниже мы покажем, что аналогичная ситуация наблюдает-

ся и при рассеянии на псевдощелевых флуктуациях, которое при достаточно высоких температурах также можно рассматривать как рассеяние в статическом гауссовом случайном поле, но с другим характерным коррелятором [22].

4. ПСЕВДОЩЕЛЕВОЕ СОСТОЯНИЕ И МОДЕЛЬ «ГОРЯЧИХ ТОЧЕК»

Ярким примером сильно коррелированных систем являются ВТСП-купраты. Среди многочисленных аномалий нормальной фазы этих высокотемпературных сверхпроводников особый интерес вызывает наблюдение псевдощели в электронном спектре недодопированных купратов [22]. Псевдощелевые явления в сильно коррелированных системах имеют существенную зависимость от пространственного масштаба длины [22]. Для соединения физики псевдощели и сильных электронных корреляций мы обобщили теорию динамического среднего поля [1–3] путем включения зависимости от корреляционной длины псевдощелевых флуктуаций через дополнительную (импульсно зависимую) СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)$. Эта СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)$ описывает нелокальные динамические корреляции, вызываемые флуктуациями ближнего порядка либо антиферромагнитными спиновыми флуктуациями (SDW-типа), либо зарядовыми флуктуациями (CDW-типа) [23, 24].

Для вычисления $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon)$ в двумерной модели горячих точек [22] для электрона, движущегося в статическом гауссовом случайном поле псевдощелевых флуктуаций с импульсами рассеяния в окрестности характерного вектора $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ (a — параметр решетки), мы использовали [5, 6] следующее рекуррентное соотношение (представление непрерывной дробью [23, 24]) для СЭЧ:

$$\Sigma_n(\varepsilon, \mathbf{p}) = \Delta^2 \frac{s(n)}{\varepsilon + \mu - \Sigma(\varepsilon) - \varepsilon_n(\mathbf{p}) + i n v_n \kappa - \Sigma_{n+1}(\varepsilon, \mathbf{p})}, \quad (6)$$

которое позволяет при $n = 1$ получить физическую нелокальную СЭЧ от взаимодействия с псевдощелевыми флуктуациями $\Sigma_{\mathbf{p}}(\varepsilon) = \Sigma_{n=1}(\varepsilon, \mathbf{p})$ и использовать ее в расчетной схеме DMFT+ Σ . Величина Δ здесь характеризует энергетический масштаб (ширину) псевдощели, $\kappa = \xi^{-1}$ — обратная корреляционная длина SDW (CDW)-флуктуаций, $\varepsilon_n(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{Q})$ и $v_n = |v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x| + |v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y|$ для нечетных n , а $\varepsilon_n(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p})$ и $v_n = |v_{\mathbf{p}}^x| + |v_{\mathbf{p}}^y|$ для четных n , где проекции скоростей электрона $v_{\mathbf{p}}^x$ и $v_{\mathbf{p}}^y$ определяются обычными производными по соответствующим

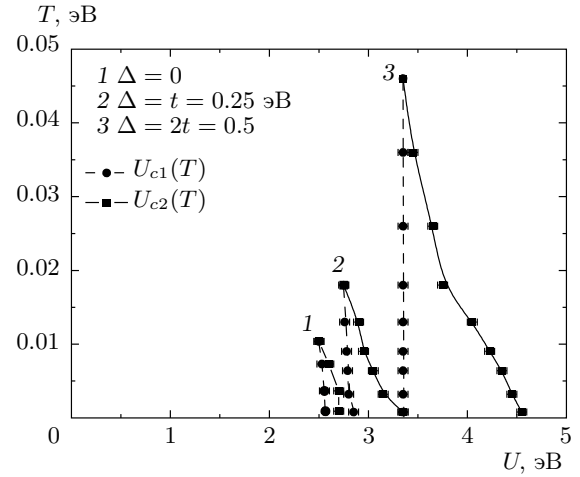


Рис. 4. Влияние псевдощели на моттовский переход металл–диэлектрик. $U_{c1,c2}(T)$ — кривые границ фазы моттовского диэлектрика $U_{c2}(T)$ (сплошные кривые) и области сосуществования $U_{c1}(T)$ (штриховые линии) для разных значений ширины псевдощели Δ . Точками на этих кривых показаны значения, полученные из DMFT+ Σ -расчетов плотности состояний и оптической проводимости

щим проекциям импульса от «голой» электронной дисперсии $\varepsilon(\mathbf{p})$. Наконец, $s(n)$ представляет собой комбинаторные множители. Для гейзенберговских спиновых флуктуаций в модели «почти антиферромагнитной ферми-жидкости» (спин-фермионная модель [23]):

$$s(n) = \begin{cases} \frac{n+2}{3} & \text{для нечетных } n, \\ \frac{n}{3} & \text{для четных } n. \end{cases} \quad (7)$$

Энергетическая дисперсия, квазичастичное затухание, спектральные функции и ARPES-спектр, вычисленные в DMFT+ Σ -подходе демонстрируют псевдощелевые эффекты вблизи уровня Ферми квазичастичной зоны [4–6].

В работе [8] DMFT+ Σ -схема была обобщена для расчета двухчастичных свойств, таких как оптическая проводимость, с помощью развитой ранее рекуррентной процедуры для вершинных поправок от псевдощелевых флуктуаций [25]. Такая схема воспроизводит типичные псевдощелевые аномалии оптической проводимости и зависимость этих аномалий от корреляционной длины и величины хаббардовского взаимодействия U .

Для спектра «свободных» квазичастиц мы используем приближение сильной связи:

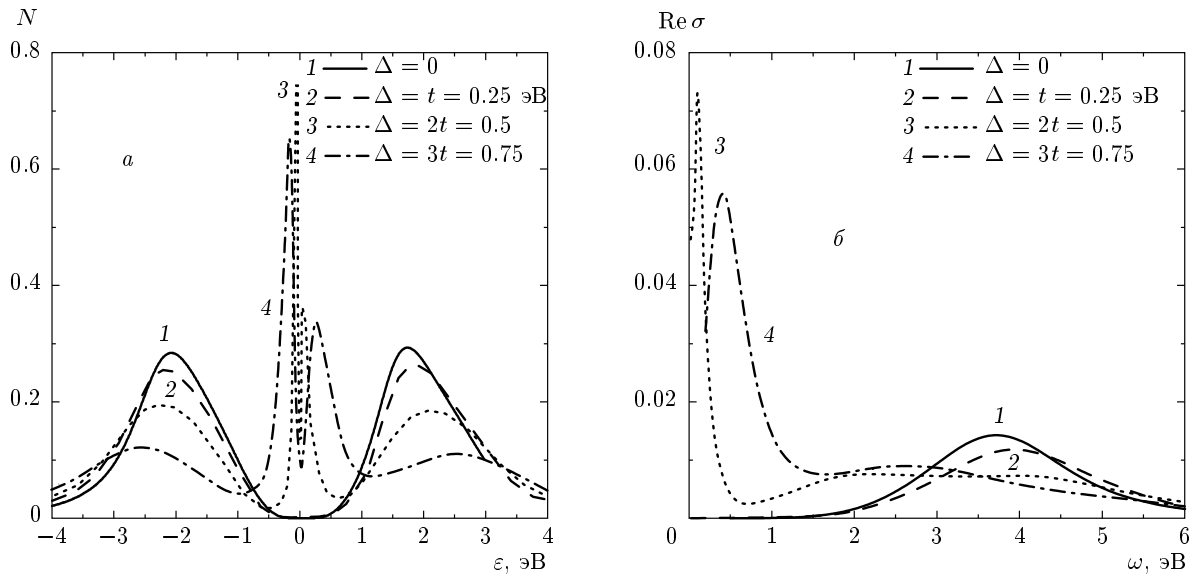


Рис. 5. Плотность состояний (а) и оптическая проводимость (б) в модели Хаббарда с половинным заполнением ($U = 4$ эВ, $T = 0.013$ эВ) в псевдощелевом состоянии с различной величиной Δ

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = -2t(\cos p_x a + \cos p_y a) - 4t' \cos p_x a \cos p_y a \quad (8)$$

с интегралами переноса между первыми (t) и вторыми (t') ближайшими соседями на квадратной решетке, неплохо описывающее характерную поверхность Ферми в купратах. В дальнейшем мы полагаем $t = 0.25$ эВ, $t' = -0.1$ эВ. В данной работе мы исследуем, влияние рассеяния на псевдощелевых флуктуациях на моттовский переход металл–диэлектрик. Оба параметра Δ и ξ , определяющие псевдощелевое поведение, в принципе, могут быть вычислены из микроскопической модели Хаббарда [5] и, вообще говоря, сами зависят от допирования, силы корреляций U и температуры. Однако при дырочном допировании в таком подходе ширина псевдощели Δ достаточно слабо зависит от U и температуры и лежит в пределах $t < \Delta < 2t$ [5]. Кроме того, величина Δ и особенно корреляционная длина ξ во многом определяются в реальных купратах эффектами квазидвумерности, никак не учитываемыми в нашей чисто двумерной модели, поэтому в дальнейшем и Δ и ξ мы будем рассматривать как независимые феноменологические параметры. Во всех расчетах далее мы полагаем $\xi = 10a$.

Поскольку параметры псевдощели Δ и ξ не являются контролируемыми и сами зависят от температуры и силы корреляций U , достаточно бессмысленно строить фазовую диаграмму в осях (Δ, U, T) , однако можно проанализировать, как

псевдощель влияет на моттовский переход металл–диэлектрик. Точки границы диэлектрической фазы $U_{c2}(T)$ (квадраты) и границы области сосуществования $U_{c1}(\Delta, T = 0)$ (кружки), полученные из поведения плотности состояний и оптической проводимости, рассчитанных в DMFT+ Σ -подходе для различной величины Δ , приведены на рис. 4. Мы видим, что псевдощель, аналогично беспорядку, затрудняет моттовский переход металл–диэлектрик (для диэлектризации требуются большие U). По аналогии с беспорядком такое затруднение перехода связано с общим уширением зоны (в отсутствие U) псевдощелевыми флуктуациями. Псевдощель приводит к уширению области сосуществования и увеличению критической температуры, при которой эта область сосуществования пропадает.

Увеличение Δ в фазе моттовского диэлектрика аналогично росту беспорядка приводит к восстановлению металлического состояния. Такой переход диэлектрик–металл с ростом псевдощели ясно демонстрирует поведение плотности состояний и оптической проводимости, сосчитанных при температуре $T = 0.013$ эВ и $U = 4$ эВ, приведенное на рис. 5. В плотности состояний (рис. 5а) с ростом Δ на месте моттовской щели (кривые 1, 2) восстанавливается квазичастичный пик (кривая 3), на котором формируется псевдощелевой провал [5]. Дальнейший рост Δ приводит к уширению и квазичастичного пика и псевдощели на нем (кривая 4). В оптической про-

димости³⁾ (рис. 5б) рост величины псевдощели приводит к возникновению друдевского пика с псевдощелевым провалом и максимумом поглощения через псевдощель [8, 25] (кривые 3, 4) на месте диэлектрической щели (кривые 1, 2).

Температурное поведение $U_{c2}(T)$ на рис. 4 показывает, что и в присутствии псевдощелевых флуктуаций рост температуры облегчает моттовский переход металл–диэлектрик (для диэлектризации требуются меньшие U). Поэтому в псевдощелевом состоянии, так же как в модели Андерсона–Хаббарда, наблюдается переход сильно коррелированный металл–моттовский диэлектрик с ростом температуры. Такой переход по температуре в поведении плотности состояний и оптической проводимости продемонстрирован на рис. 6. Псевдощелевые флуктуации (как и беспорядок), расширяя область сосуществования, увеличивают область U , в которой такой переход металл–диэлектрик, зависящий от температуры, может наблюдаться. Отметим также, что как и в модели Андерсона–Хаббарда, здесь мы наблюдаем очень слабую зависимость от температуры границы области сосуществования $U_{c1}(T)$, поэтому и в псевдощелевом состоянии при обратном понижении температуры из полученной диэлектрической фазы переход металл–диэлектрик отсутствует и система будет оставаться в метастабильном диэлектрическом состоянии вплоть до $T = 0$.

5. ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

В рамках DMFT+ Σ -обобщения теории динамического среднего поля мы детально исследовали влияние беспорядка, псевдощелевых флуктуаций и температуры на моттовский переход металл–диэлектрик в сильно коррелированных системах. Построенные на основании анализа поведения плотности состояний и оптической проводимости фазовые диаграммы при половинном заполнении парамагнитной модели Андерсона–Хаббарда и модели Хаббарда в псевдощелевом состоянии демонстрируют, что в обоих случаях статическое гауссово случайное поле (связанное с беспорядком или псевдощелевыми флуктуациями) приводит к затруднению моттовского перехода металл–диэлектрик, а также к уширению области сосуществования диэлектрической и металлической фаз и росту критической температуры, при которой область сосуществования пропадает. Рост как беспорядка,

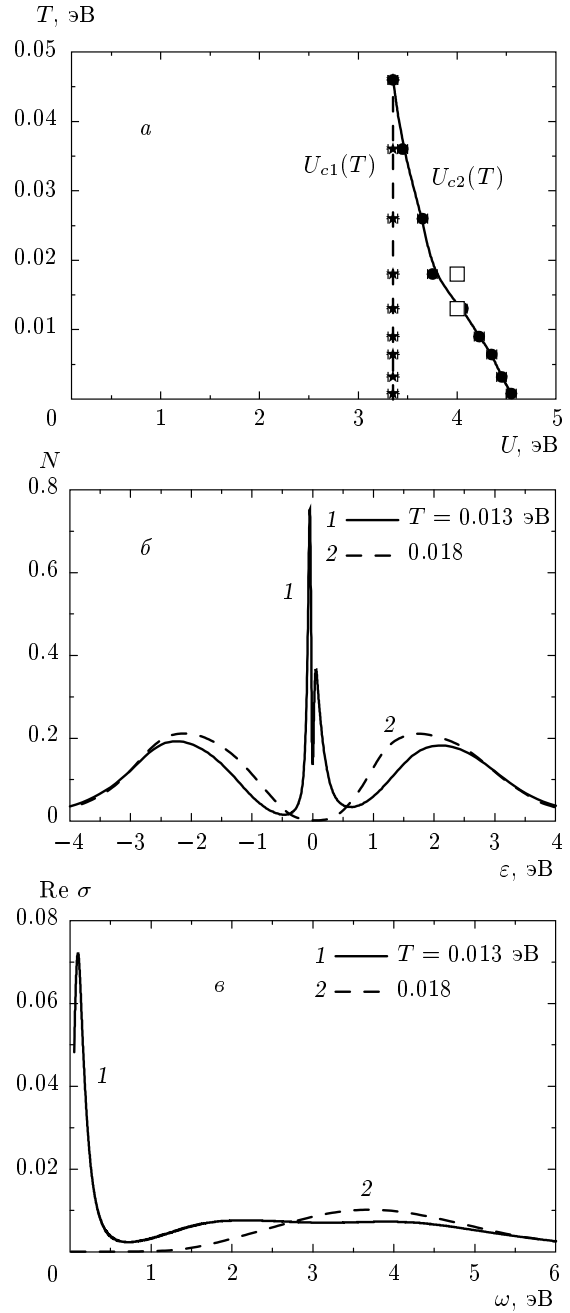


Рис. 6. Переход металл–диэлектрик Мотта–Хаббарда с ростом температуры в псевдощелевом состоянии: а — температурная зависимость границ фазы моттовского диэлектрика $U_{c2}(T)$ (сплошная кривая) и области сосуществования $U_{c1}(T)$ (штриховая кривая) при $\Delta = 2t = 0.5$ эВ. Большими квадратами обозначены точки ($U = 4$ эВ, T), для которых приведено поведение плотности состояний (б) и оптической проводимости (в)

³⁾ Величина проводимости в данной модели везде приводится в единицах универсальной двумерной проводимости e^2/h .

так и амплитуды псевдощели в фазе моттовского диэлектрика приводит к восстановлению металлического состояния, что в обоих случаях связано с общим уширением зоны (в отсутствие U) статическим гауссовым случайным полем. Как в чистой DMFT, так и при учете беспорядка или псевдощелевых флуктуаций, рост температуры облегчает моттовский переход металл–диэлектрик — для диэлектризации требуются меньшие U . Это приводит к возникновению перехода сильно коррелированный металл–моттовский диэлектрик с ростом температуры. Как беспорядок, так и псевдощелевые флуктуации увеличивают область значений U , при которых такой переход возможен.

Мы благодарны М. В. Садовскому за многочисленные полезные обсуждения. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 11-02-00147) и в рамках программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Квантовые мезоскопические и неупорядоченные структуры» (12-П-2-1002 — УрО РАН).

ЛИТЕРАТУРА

1. Th. Pruschke, M. Jarrell, and J. K. Freericks, *Adv. in Phys.* **44**, 187 (1995).
2. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
3. D. Vollhardt, in *Lectures on the Physics of Strongly Correlated Systems XIV*, ed. by A. Avella and F. Mancini, AIP Conference Proceedings Vol. 1297, American Institute of Physics, Melville, New York (2010), p. 339; arXiv:1004.5069.
4. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, *Письма в ЖЭТФ* **82**, 217 (2005); arXiv:cond-mat/0506215.
5. M. V. Sadovskii, I. A. Nekrasov, E. Z. Kuchinskii, Th. Pruschke, and V. I. Anisimov, *Phys. Rev. B* **72**, 155105 (2005); arXiv:cond-mat/0508585.
6. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, *ФНТ* **32**, 528 (2006); arXiv:cond-mat/0510376.
7. Э. З. Кучинский, И. А. Некрасов, М. В. Садовский, *УФН* **182**, 345 (2012); arXiv:1109.2305.
8. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, *Phys. Rev. B* **75**, 115102 (2007); arXiv:cond-mat/0609404.
9. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, *ЖЭТФ* **133**, 670 (2008); arXiv:0706.2618.
10. E. Z. Kuchinskii, N. A. Kuleeva, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, *ЖЭТФ* **137**, 368 (2010); arXiv:0908.3747.
11. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, *Phys. Rev. B* **80**, 115124 (2009); arXiv:0906.3865.
12. R. Bulla, T. A. Costi, and T. Pruschke, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 395 (2008).
13. P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985); D. Belitz and T. R. Kirkpatrick, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 261 (1994).
14. N. F. Mott, *Proc. Phys. Soc. A* **62**, 416 (1949); *Metal-Insulator Transitions*, 2nd edn., Taylor and Francis, London (1990).
15. P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
16. K. Byczuk, W. Hofstetter, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 056404 (2005).
17. V. Dobrosavljević and G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3943 (1997).
18. V. Dobrosavljević, A. A. Pastor, and B. K. Nikolić, *Europhys. Lett.* **62**, 76 (2003).
19. D. Vollhardt and P. Wölfle, *Phys. Rev. B* **22**, 4666 (1980); *Phys. Rev. Lett.* **48**, 699 (1982); in *Anderson Localization*, ed. by Y. Nagaoka and H. Fukuyama, Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 39, p. 26, Springer-Verlag, Berlin (1982).
20. M. V. Sadovskii, *The Theory of Electron Localization in Disordered Systems. Soviet Scientific Reviews — Physics Reviews*, ed. by I. M. Khalatnikov, Vol. 7, p. 1, Harwood Academic Publ., New York (1986); А. В. Мясников, М. В. Садовский, *ФТТ* **24**, 3569 (1982); Е. А. Котов and М. В. Садовский, *Zs. Phys. B* **51**, 17 (1983).
21. R. Bulla, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 136 (1999); R. Bulla, T. A. Costi, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B* **64**, 045103 (2001).
22. М. В. Садовский, *УФН* **171**, 539 (2001); arXiv:cond-mat/0102111; в сб. *Струны, браны, решетки, сетки, псевдощели и пылинки*, Труды семинара им. И. Е. Тамма, с. 357, Научный мир, Москва (2007); arXiv:cond-mat/0408489.
23. J. Schmalian, D. Pines, and B. Stojkovic, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3839 (1998); arXiv:cond-mat/9804129; *Phys. Rev. B* **60**, 667 (1999).
24. Э. З. Кучинский, М. В. Садовский, *ЖЭТФ* **115**, 1765 (1999); arXiv:cond-mat/9808321.
25. M. V. Sadovskii and N. A. Strigina, *ЖЭТФ* **122**, 610 (2002); arXiv:cond-mat/0203479.