

ПСЕВДОЩЕЛЕВОЕ ПОВЕДЕНИЕ В МОДЕЛИ ЭМЕРИ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННО-ДОПИРОВАННОГО СВЕРХПРОВОДНИКА $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$: МНОГОЗОННЫЙ $\text{LDA}+\text{DMFT}+\Sigma_{\mathbf{k}}$ -ПОДХОД

Э. З. Кучинский, И. А. Некрасов*, Н. С. Павлов

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

Поступила в редакцию 8 февраля 2012 г.

Предложено обобщение $\text{LDA}+\text{DMFT}+\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подхода на многозонный случай, когда одновременно в модели присутствуют коррелированные и некоррелированные состояния. Для модели Эмери при помощи многозонной версии $\text{LDA}+\text{DMFT}+\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подхода рассчитаны плотности состояний и спектральные функции в широком энергетическом интервале вокруг уровня Ферми, а также получены поверхности Ферми электронно-допированного высокотемпературного сверхпроводника $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ в псевдощелевой фазе. Дополнительно введенная для учета псевдощелевых флуктуаций собственно-энергетическая часть $\Sigma_{\mathbf{k}}$ описывает нелокальное взаимодействие коррелированных электронов с коллективными гейзенберговскими спиновыми флуктуациями ближнего порядка. Для решения эффективной примесной модели в DMFT -уравнениях применен метод численной ренормгруппы (NRG). Получено хорошее количественное согласие рассчитанных в рамках $\text{LDA}+\text{DMFT}+\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подхода поверхностей Ферми с экспериментальными данными по фотоэмиссии с угловым разрешением. В Приложении исследован вопрос устойчивости диэлектрического решения с переносом заряда в модели Эмери от величины поправки на двойной учет.

DOI: 10.7868/S0044451013080142

1. ВВЕДЕНИЕ

Содержащие медь высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) интенсивно изучаются не первое десятилетие. Семейство ВТСП на основе меди является достаточно обширным и превышает по количеству другие известные классы ВТСП-соединений. Фазовая диаграмма ВТСП-купратов достаточно богата с точки зрения физики. Кроме непосредственно сверхпроводящей фазы большое количество экспериментальных и теоретических работ направлено на изучение так называемой псевдощелевой фазы (в качестве обзора см. [1]). Данная фаза наблюдается выше температуры сверхпроводящего перехода при уровне легирования немного меньше оптимального. Электронные свойства ВТСП-систем в псевдощелевой фазе были исследованы в рамках различных экспериментальных [1] и теоретических подходов (теоретические подходы кратко описаны в работе [3]). В частности, для

теоретического исследования псевдощелевого состояния мы предложили $\text{LDA}+\text{DMFT}+\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подход [2]. В данном подходе гибридная расчетная схема $\text{LDA}+\text{DMFT}$ [4–8] — теория функционала плотности в приближении локальной электронной плотности (DFT/LDA) [9, 10] + теория динамического среднего поля (DMFT) [11–15], предназначенная для описания реальных сильно коррелированных систем в рамках модели Хаббарда, — дополняется «внешними», не содержащимися в модели Хаббарда, взаимодействиями [2]. В частности, для учета псевдощелевых флуктуаций собственно-энергетическая часть $\Sigma_{\mathbf{k}}$ описывает нелокальное взаимодействие коррелированных электронов с коллективными гейзенберговскими спиновыми флуктуациями ближнего порядка [16]. Ранее $\text{LDA}+\text{DMFT}+\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подход успешно применялся в однозонном случае для описания поверхностей Ферми и энергетических дисперсий фотоэмиссионных спектров с угловым разрешением (ARPES) для систем $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8-\delta}$ (Bi2212) [17], $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (NCCO) [18], $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (PCCO) [19], $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) [20].

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

Однако из эксперимента известно, что в нелегированном состоянии ВТСП-купраты являются диэлектриками с переносом заряда [21], которые в рамках однозонной модели Хаббарда описать невозможно. Для описания диэлектрика с переносом заряда в ВТСП-купратах была предложена модель Эмери [22]. По сути модель Эмери является обобщением модели Хаббарда и включает в себя три состояния: $3d_{x^2-y^2}$ -орбиталь меди, которая обычно учитывается в однозонном подходе, а также $2p_x$ -, $2p_y$ -орбитали кислорода, с которыми данная орбиталь меди сильно гибридизована в CuO_2 -слое. Такая трехзонная модель Эмери в последние годы часто применялась для описания электронных свойств ВТСП-купратов в разных фазовых состояниях (см. для краткого обзора [3]). В данной работе предложено многозонное обобщение LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подхода для модели Эмери и рассчитаны плотности состояний и спектральные функции в широком энергетическом интервале вокруг уровня Ферми, а также получены поверхности Ферми электронно-легированного высокотемпературного сверхпроводника $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ в псевдощелевой фазе.

В разд. 2 описываются формулировка модели Эмери и детали LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -расчета. В разд. 3 изложено многозонное обобщение LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подхода. Раздел 4 содержит результаты LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -расчетов для $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ в рамках трехзонной модели Эмери. В Приложении рассматриваются детали LDA+DMFT-расчета в многозонном случае (влияние поправки на двойной учет на диэлектрическое решение с переносом заряда в модели Эмери).

2. ДЕТАЛИ РАСЧЕТА

Гамильтониан модели Эмери [22] записывается в виде

$$\hat{H} = \sum_{ij\sigma} \epsilon_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ij,\sigma\sigma'} U_{ij} \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{j\sigma'}, \quad (1)$$

где диагональные элементы ϵ_{ii} — энергетическое положение медной E_d и кислородных E_p орбиталей; кулоновское взаимодействие U_{ii} соответствует взаимодействию на кислородных U_p и медной U_d орбиталях. Величина $\epsilon_{ij} = \pm t_{pd}$ является интегралами перескока между ближайшими медными и кислородными узлами, а $U_{ij} = V_{pd}$ — межузельное кулоновское взаимодействие.

В предыдущих работах нами были получены величины интегралов перескока из LDA-расчетов

Таблица. Энергетические параметры (в эВ) для трехзонной модели (из работы [25])

$E_d - E_p$	t_{pd}	t_{pp}	t'_{pp}	t'_{pd}	t''_{pd}	t_{dd}	U
1.61	1.16	-0.54	-0.21	-0.05	0.01	0.07	8

для модели Эмери в системах NCCO [23] и $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ [24]. Последующий учет корреляционных эффектов был проведен в рамках обобщенной теории сильной связи (GTB) [23]. Однако здесь решение модели Эмери ищется в рамках LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подхода, и для сравнения с другими DMFT-результатами мы будем использовать величины интегралов перескока из соответствующих работ других авторов. Тем более, что «затравочная» электронная дисперсия в значительной мере определяет LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -результаты, как было показано в работе [18].

Недавно в рамках кластерных DMFT-расчетов для электронно-допированного сверхпроводника NCCO была показана важность учета интегралов перескока во вторую и третью координационные сферы [25]. Поэтому в данной работе были учтены интегралы перескока до третьей координационной сферы, представленные в таблице: t_{dd} , t_{pp} — интегралы перескока для ближайших медных и кислородных узлов, t'_{pp} — перескоки между кислородными узлами во вторую координационную сферу, а также медь-кислородные перескоки во вторую и третью координационные сферы — t'_{pd} и t''_{pd} . Параметр $E_d - E_p$ (см. таблицу) характеризует так называемую энергию переноса заряда из зоны кислорода в зону меди и наоборот. В данной работе в отличие от классической модели Эмери кулоновское взаимодействие учитывалось только на узлах меди $U \equiv U_d$. Величина кулоновского взаимодействия U была получена методом «constrained-LDA» [26] в работах других авторов [25, 27, 28] и приведена в таблице.

С учетом выбранных параметров гамильтониан (1) в обратном пространстве записывается в виде

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta + U \hat{n}_d \hat{n}_d, \quad (2)$$

где индексы α и β соответствуют $dx^2 - y^2$ -, p_x -, p_y -орбиталям. Энергетическая дисперсия матричных элементов $\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ в приближении сильной связи имеет следующую форму:

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{dd} & i2\varepsilon_{dp_x} & i2\varepsilon_{dp_y} \\ -i2\varepsilon_{dp_x} & \varepsilon_{p_x p_x} & \varepsilon_{p_x p_y} \\ -i2\varepsilon_{dp_y} & \varepsilon_{p_x p_y} & \varepsilon_{p_y p_y} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon_{dd} &= E_d + 2t_{dd}(\cos k_x + \cos k_y), \\ \varepsilon_{p_x p_x} &= E_p + 2t'_{pp} \cos k_x, \\ \varepsilon_{p_y p_y} &= E_p + 2t'_{pp} \cos k_y, \\ \varepsilon_{p_x p_y} &= 4t_{pp} \sin \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y}{2}, \\ \varepsilon_{dp_x} &= \varepsilon_{dp_x} + 2t'_{pd} \sin \frac{k_x}{2} \cos k_y - t''_{pd} \sin \frac{3k_x}{2}, \\ \varepsilon_{dp_y} &= \varepsilon_{dp_y} + 2t'_{pd} \sin \frac{k_y}{2} \cos k_x - t''_{pd} \sin \frac{3k_y}{2}, \end{aligned} \quad (4)$$

а $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ — волновой вектор в первой зоне Бриллюэна.

Запишем функцию Грина для гамильтониана (2):

$$\hat{G}(\mathbf{k}E) = ((E - \mu)\hat{I} - \hat{H}(\mathbf{k}) - (\Sigma(\mathbf{k}E) - E_{dc})\delta_{id}\delta_{jd})^{-1}, \quad (5)$$

где \hat{I} — единичная матрица (« $\hat{\cdot}$ » обозначает матрицу в орбитальном пространстве), μ — химический потенциал, \hat{H} — кинетическая часть LDA-гамильтониана ($\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$), $\Sigma(\mathbf{k}E)$ — собственно-энергетическая часть (СЭЧ), E_{dc} — энергия локальных корреляционных взаимодействий, учтенных в LDA (поправка на двойной учет, см. также Приложение).

DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подход позволяет учесть в DMFT-уравнениях дополнительное, не содержащееся в модели Хаббарда, в общем случае импульсно зависимое, взаимодействие, которому соответствует некоторая СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{k}}$. Например, можно учесть беспорядок (наличие примесей), электрон-фононное взаимодействие или АФМ-флуктуации ближнего порядка [2]. Здесь для описания электронных свойств псевдощелевой фазы NCCO используется LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подход с нелокальной СЭЧ, соответствующей АФМ-флуктуациям ближнего порядка. Уравнение для функции Грина (5) в LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подходе переписывается следующим образом:

$$\hat{G}(\mathbf{k}E) = \left((E - \mu)\hat{I} - \hat{H}(\mathbf{k}) - (\Sigma(E) + \Sigma_{\mathbf{k}}(E) - E_{dc})\delta_{id}\delta_{jd} \right)^{-1}, \quad (6)$$

где $\Sigma_{\mathbf{k}}(E)$ — «внешняя» нелокальная часть СЭЧ. Здесь предполагается аддитивность СЭЧ $\Sigma(\mathbf{k}E)$ и

не учитывается интерференция между локальной DMFT СЭЧ $\Sigma(E)$ и АФМ СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{k}}(E)$. Строго говоря, АФМ-флуктуации ближнего порядка в модели Хаббарда порождаются самими коррелированными электронами, и в этом смысле есть опасность двойного учета такого рода взаимодействий при добавлении $\Sigma_{\mathbf{k}}(E)$. Но как было показано в работе [29], в DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подходе этого не происходит, так как DMFT — локальная теория [11–15] (предел бесконечной размерности пространства), а $\Sigma_{\mathbf{k}}(E)$ — существенно нелокальна [16] и в пределе бесконечной размерности пространства исчезает, а значит, заведомо не содержится в DMFT. Однако существуют примеры самосогласованного расчета электронной структуры и спиновых флуктуаций [30].

Для АФМ-корреляций ближнего порядка $\Sigma_{\mathbf{k}}(E)$ имеет вид [16]

$$\Sigma_n(E\mathbf{k}) = \Delta^2 s(n) \{E + \mu - \Sigma(E) - \varepsilon_n(\mathbf{k}) + mv_n(\mathbf{k})\kappa - \Sigma_{n+1}(E\mathbf{k})\}^{-1} \quad (7)$$

и характеризуется двумя параметрами: энергетической величиной псевдощели Δ и корреляционной длиной $\xi = \kappa^{-1}$. Величина $s(n)$ — комбинаторный множитель, который для случая коллективных гейзенберговских АФМ-флуктуаций [16] для нечетных n равен $s(n) = (n+2)/3$, а для четных $s(n) = n/3$. Энергетическая дисперсия квазичастиц $\varepsilon_n = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ и скорость квазичастиц $v_n = |v_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^x| + |v_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^y|$ для нечетных n , $\varepsilon_n = \varepsilon_{\mathbf{k}}$ и $v_n = |v_{\mathbf{k}}^x| + |v_{\mathbf{k}}^y|$ для четных n ; n — номер итерации. Величина $\Sigma_{\mathbf{k}}(E) = \Sigma_1(E\mathbf{k})$ определяет физическую СЭЧ.

Обратная корреляционная длина для ВТСП-соединения NCCO определена экспериментально и составляет $\kappa_e = 0.02a^{-1}$ [31]. Амплитуда псевдощели $\Delta = 0.2$ эВ взята из нашей работы [18].

Для расчета функции Грина модели Эмери в данной работе используется теория динамического среднего поля (DMFT) [14]. В качестве метода решения примесной задачи Андерсона применяется численная ренормгруппа (NRG) [32, 33]. Соответствующая температура DMFT(NRG)-расчетов составляла 0.01 эВ; 1000 состояний оставалось в NRG на каждой итерации.

3. МНОГОЗОННОЕ ОБОБЩЕНИЕ DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -ПОДХОДА

Представленная выше формулировка LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подхода успешно использовалась в однозонном случае [2], но требует некоторого обобщения на многозонный случай.

Выведем вид соответствующего поля Вейсса \mathcal{G}_{dd} , определяющего эффективную примесную задачу Андерсона, для случая, когда кулоновские взаимодействия учитываются явно только для одной из трех орбиталей ($3d_{x^2-y^2}$ -орбитали Cu).

Покажем, что выражение для поля Вейсса \mathcal{G}_{dd} содержит только dd -элемент функции Грина

$$G_{dd} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} G_{ij}(\mathbf{k}E) \delta_{id} \delta_{jd},$$

что значительно упрощает формулировку DMFT-уравнений. Сперва запишем уравнение Дайсона, включающее только одно взаимодействующее состояние — « d » (матрица СЭЧ содержит только один ненулевой элемент $\Sigma_{dd} = \Sigma$):

$$G_{ij} = \mathcal{G}_{ij} + \mathcal{G}_{il} \Sigma \delta_{ld} \delta_{dm} G_{mj}. \quad (8)$$

Затем из уравнения (8) величину \mathcal{G}_{id} можно выразить как $\mathcal{G}_{id} = G_{id} (1 + \Sigma G_{dd})^{-1}$. Тогда соответствующее поле Вейсса \mathcal{G}_{ij} примет вид

$$\mathcal{G}_{ij} = G_{ij} - G_{id} (1 + \Sigma G_{dd})^{-1} \Sigma G_{dj}. \quad (9)$$

Далее после простых алгебраических преобразований \mathcal{G}_{dd} -элемент матрицы \mathcal{G}_{ij} получается в форме

$$\mathcal{G}_{dd}^{-1}(E) = \Sigma(E) + G_{dd}^{-1}(E). \quad (10)$$

В многозонном случае требуется переопределение затравочной дисперсии $\epsilon_{\mathbf{k}}$ и соответствующей скорости $v_{\mathbf{k}}$ в формуле (7). В предыдущих работах для однозонной реализации LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подхода выражения для $\epsilon_{\mathbf{k}}$ и $v_{\mathbf{k}}$ имели аналитический вид [17–20]. Также аналитически удалось обобщить LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ для двухслойной ВТСП-системы Bi2212 на случай двух взаимодействующих орбиталей, связанных межслойной гибридизацией [17]. Однако в общем многозонном случае для гамильтонианов большой размерности записать аналитический вид величин $\epsilon_{\mathbf{k}}$ и $v_{\mathbf{k}}$ для коррелированных орбиталей практически невозможно. Поэтому для вычисления нелокальной СЭЧ (7) предлагается определять $\epsilon_{\mathbf{k}}$ и $v_{\mathbf{k}}$ для коррелированной орбитали численно по следующему алгоритму.

1. Энергетическую дисперсию $\epsilon_{\mathbf{k}}$ и скорость $v_{\mathbf{k}}$ определять через невзаимодействующую функцию Грина:

$$\hat{G}^0(\mathbf{k}E) = ((E - \mu)\hat{I} - \hat{H}(\mathbf{k}))^{-1}. \quad (11)$$

2. Поскольку нелокальные корреляции учитываются только для $3d_{x^2-y^2}$ -орбитали меди, рассматриваем только dd -элемент матрицы \hat{G}^0 . Для него мы предполагаем следующую зависимость:

$$G_{dd}^0(\mathbf{k}E) = \frac{1}{E - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}. \quad (12)$$

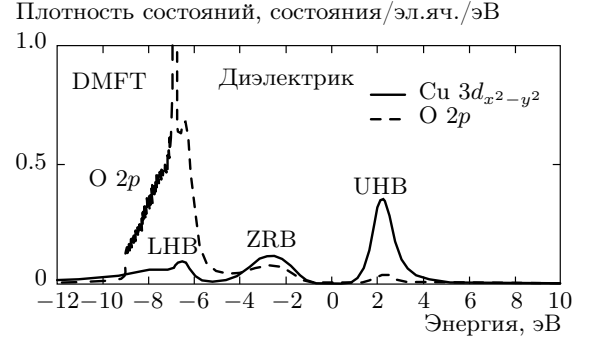


Рис. 1. Плотность состояний системы NCCO для фазы диэлектрика с переносом заряда в модели Эмери (LDA+DMFT(NRG)-расчет). Сплошная линия соответствует $3d_{x^2-y^2}$ -орбитали меди, штриховая линия — $2p$ -орбитали кислорода. UHB обозначает верхнюю хаббардовскую зону, LHB — нижнюю хаббардовскую зону, ZRB — зону Жанга–Райса (смотри текст). Нуль энергии соответствует химическому потенциалу

3. Используя формулу (12), выражаем эффективную энергетическую дисперсию:

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}(E) = E - G_{dd}^{0-1}(\mathbf{k}E). \quad (13)$$

Поскольку невзаимодействующая функция Грина G_{dd}^0 вещественная, величина $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$ также будет вещественной.

4. Эффективную скорость квазичастицы $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$ считаем численным дифференцированием:

$$\tilde{v}(\mathbf{k}, E) = \frac{\partial \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}(E)}{\partial \mathbf{k}}. \quad (14)$$

4. LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

4.1. Диэлектрик с переносом заряда в модели Эмери

В качестве стартовой точки для дальнейших исследований псевдощелевой фазы ВТСП-систем обычно выбирается диэлектрическое решение с переносом заряда. Несмотря на наличие достаточно большого числа работ по трехзонной модели, насколько нам известно, только в работе [25] приводятся и подробно обсуждаются результаты для диэлектрика с переносом заряда без допирования в парамагнитной фазе. В остальных работах обсуждение начинается непосредственно со случая допирования. В данной работе мы также стартуем с диэлектрика с переносом заряда.

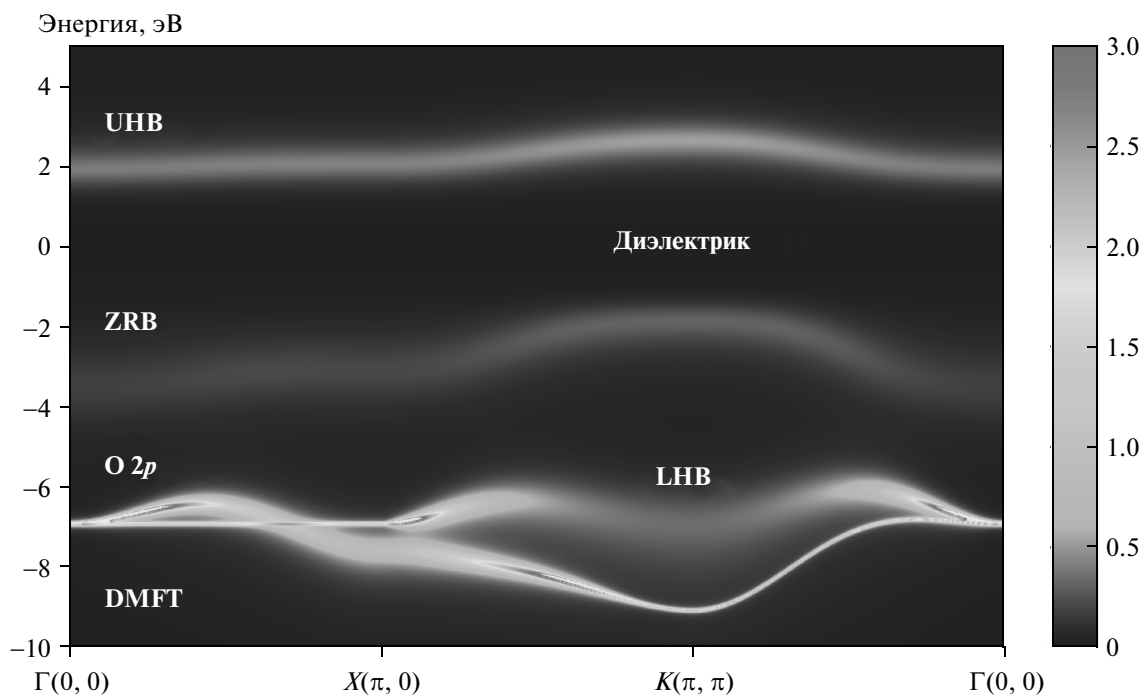


Рис. 2. Спектральная функция системы NCCO для фазы диэлектрика с переносом заряда в модели Эмери (LDA+DMFT(NRG)-расчет)

В рамках LDA+DMFT(NRG)-подхода в трехзонной модели Эмери нами было получено диэлектрическое решение с переносом заряда для выбранных параметров модели (см. таблицу, а также Приложение). Начнем описание данного диэлектрика с плотностей состояний, а не с квазичастичных дисперсий.

На рис. 1 представлены плотности состояний $3d_{x^2-y^2}$ -орбитали Cu и $2p_x$ -, $2p_y$ -орбиталей O. Нижняя хаббардовская зона (ЛНВ) орбитали меди расположена в интервале $(-10--6)$ эВ. Зона Жанга–Райса (ZRB), возникающая из-за наличия гибридизации между коррелированными d - и коллективизированными p -состояниями [34], находится в промежутке энергии $(-4.5--1)$ эВ. Верхняя хаббардовская зона (УНВ) для состояний меди расположена в области энергий $(1--4)$ эВ. Состояния кислорода, расположенные между -9 эВ и -6 эВ, практически не гибридизуются с орбиталью меди. Связывающая часть состояний кислорода дает небольшой вклад в ЛНВ и УНВ, а основной ее вклад наблюдается в зоне Жанга–Райса. Контурная карта спектральной функции (квазичастичные дисперсии), соответствующей плотности состояний, представленной на рис. 1, приведена на рис. 2.

4.2. Электронно-допированный случай: $x = 0.15$

Псевдощелевая фаза возникает при температурах выше сверхпроводящей фазы и при относительно небольших уровнях допирования. В данном разделе рассмотрены LDA+DMFT- и LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -результаты для допированного электронами (15%) диэлектрического решения из разд. 4.1. Плотность состояний, соответствующая выбранной степени допирования, представлена на рис. 3 (вверху LDA+DMFT-расчет, внизу LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -расчет). Часть спектрального веса при допировании переходит из зоны ZRB в зону УНВ. Чуть ниже уровня Ферми в зоне УНВ формируется квазичастичный пик (QP). На вставке в нижней части рис. 3 хорошо видно псевдощелевое поведение [29] — небольшой провал прямо под уровнем Ферми.

На рис. 4 представлена контурная карта спектральных функций, полученных из расчетов LDA+DMFT (вверху) и LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ (внизу), соответствующих рис. 3. Квазичастичная зона (QP) в обоих расчетах узкая и интенсивная, практически не имеющая дисперсии. Низкоинтенсивная зона

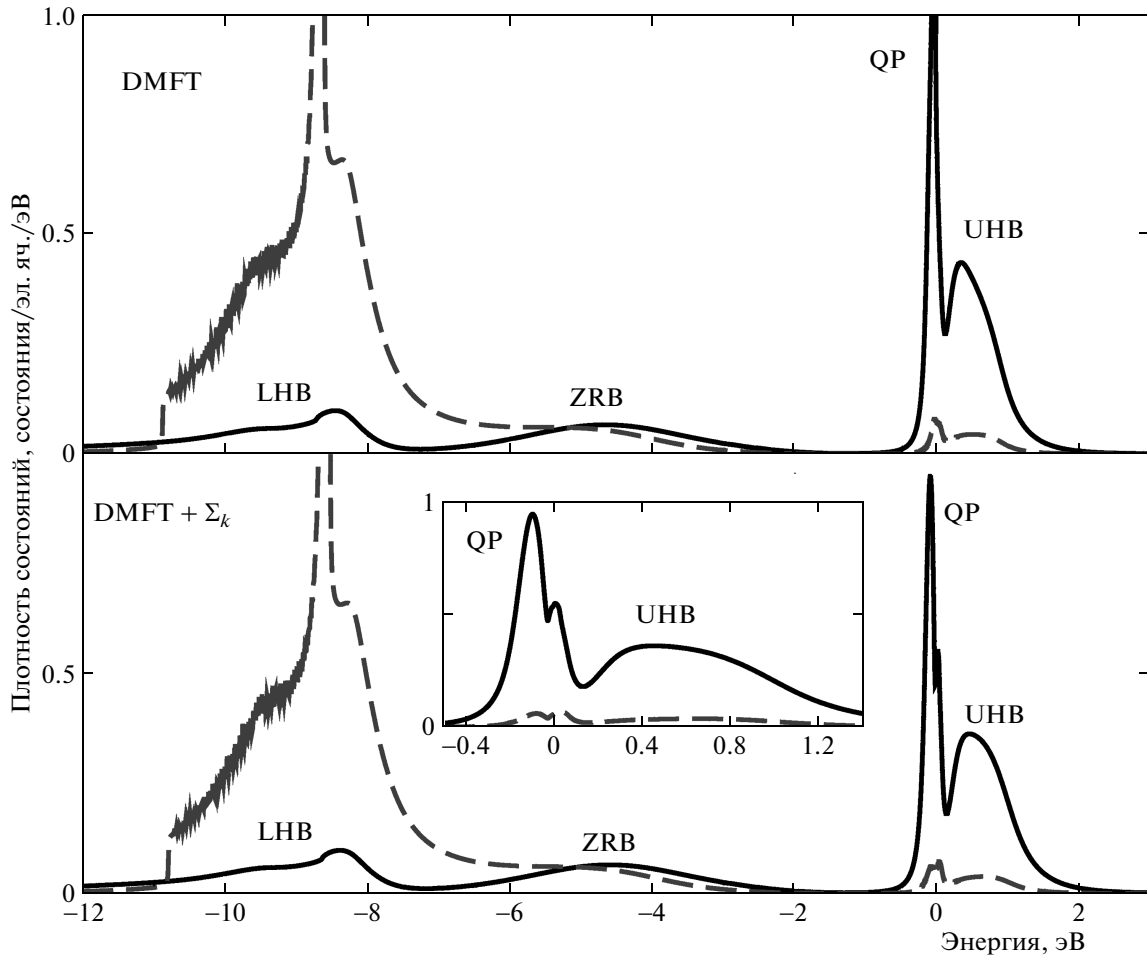


Рис. 3. Сравнение расчетов LDA+DMFT (вверху) и LDA+DMFT+ Σ_k (внизу) плотностей состояний для $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$ (трехзонная модель, $x = 0.15$). Сплошная линия соответствует $3d_{x^2-y^2}$ -состояниям меди, штриховая линия — $2p_x$ - и $2p_y$ -состояниям кислорода. Эффекты учета АФМ-флуктуаций заметны в увеличенном масштабе на вставке в нижней панели. Химический потенциал совпадает с нулем энергии

ZRB расположена в области от -6 эВ до -3 эВ. Зоны состояний кислорода находятся в интервале между -11 эВ и -7 эВ. Верхняя зона кислорода плохо определена около точки $K(\pi, \pi)$, поскольку там присутствует гибридизация с LHB-зоной меди, имеющей достаточно малое время жизни при данной энергии. Оставшаяся часть данной зоны кислорода достаточно узкая, поскольку она является несвязывающей линейной комбинацией состояний кислорода.

Соответствующие псевдощелевые эффекты в LDA+DMFT+ Σ_k -расчетах проявляются для состояний, расположенных около уровня Ферми, поэтому на рис. 5 представлены контурные карты спектральной функции только зоны UHB и квазичастичного пика для расчетов LDA+DMFT

(вверху) и LDA+DMFT+ Σ_k (внизу). В данном интервале заметна дисперсия квазичастичной зоны в окрестности уровня Ферми. На нижнем рисунке в квазичастичной зоне хорошо заметна так называемая теневая зона — расщепление квазичастичной зоны за счет взаимодействия коррелированных электронов с псевдощелевыми АФМ-флуктуациями. В точках пересечения квазичастичной зоны и теневой зоны формируются так называемые горячие точки [16] (окрестность точки $X(\pi, 0)$ и середина направления $K(\pi, \pi)$ – $\Gamma(0, 0)$). Данное поведение также наблюдалось в предыдущих однозонных LDA+DMFT+ Σ_k -расчетах [18].

Контурные карты поверхностей Ферми, полученных из расчетов LDA+DMFT (вверху) и LDA+DMFT+ Σ_k (внизу), представлены на рис. 6.

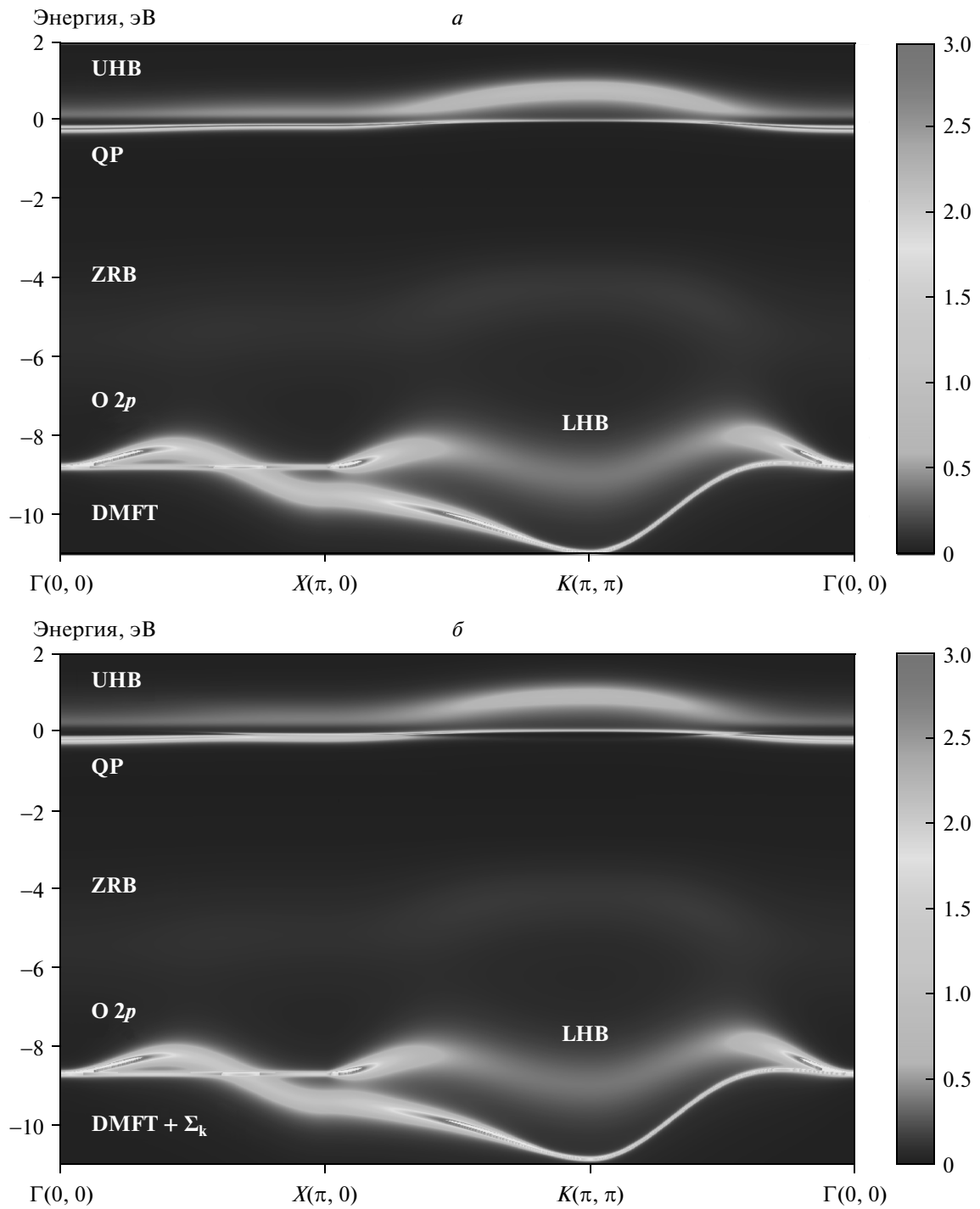


Рис. 4. Контурная карта спектральной функции в симметричных направлениях зоны Бриллюэна для расчетов LDA+DMFT (а) и LDA+DMFT+ Σ_k (б) при электронном допировании с $x = 0.15$ (трехзонная модель, NCCO). Химический потенциал совпадает с нулем энергии

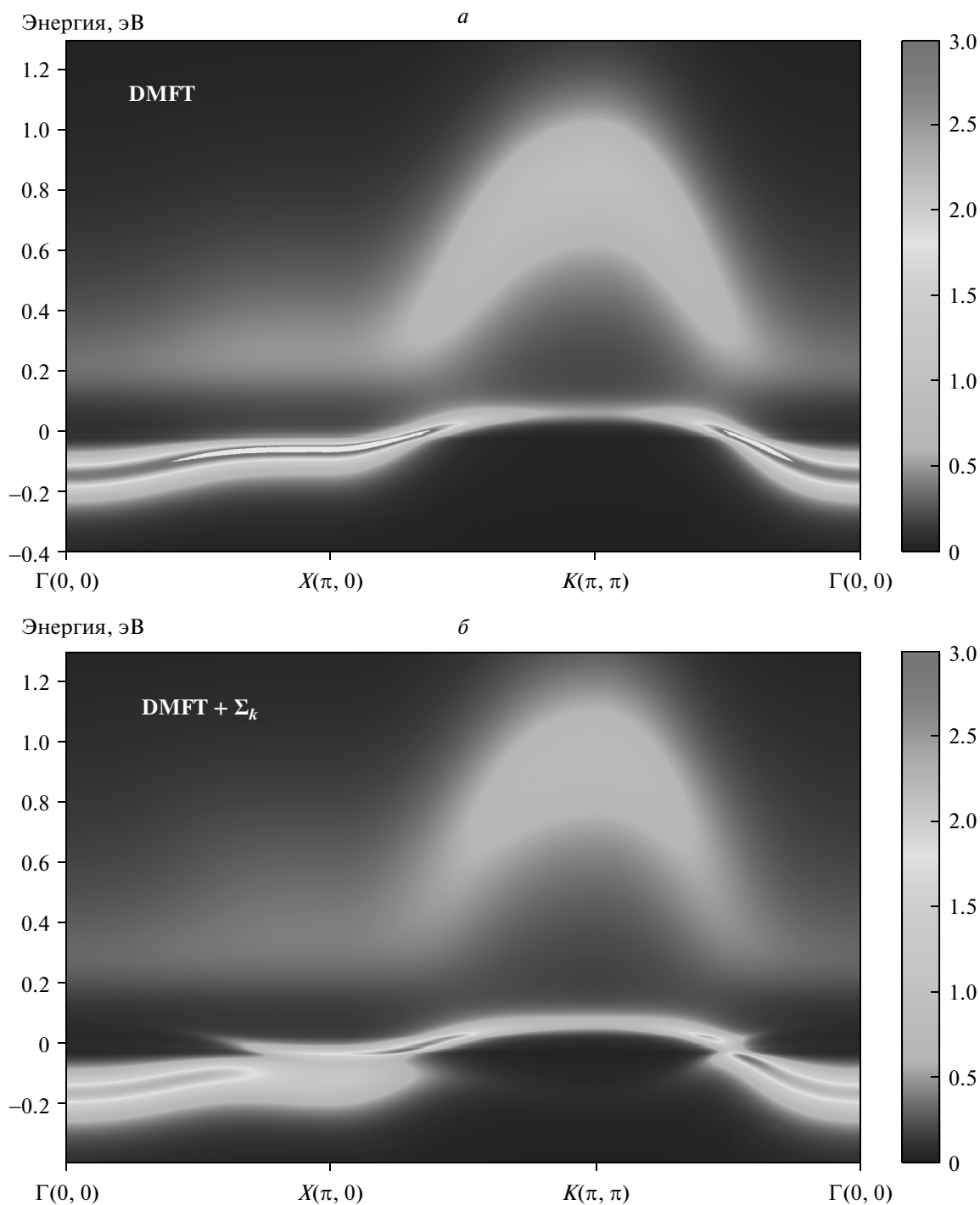


Рис. 5. Дисперсия квазичастичной зоны. Обозначения аналогичны рис. 4

В LDA+DMFT-расчете интенсивность спектральной функции на поверхности Ферми однородна, ввиду отсутствия импульсной зависимости СЭЧ в DMFT. Учет АФМ-флуктуаций ближнего порядка (импульсной зависимости СЭЧ) в рамках LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ приводит к частичному «раз-

рушению» поверхности Ферми в горячих точках (точки пересечения между поверхностью Ферми и АФМ-зоной Бриллюэна). Поскольку поверхность Ферми близка к АФМ-зоне Бриллюэна, около точки $(\pi/2, \pi/2)$ на поверхности Ферми в LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -расчете появляется доста-

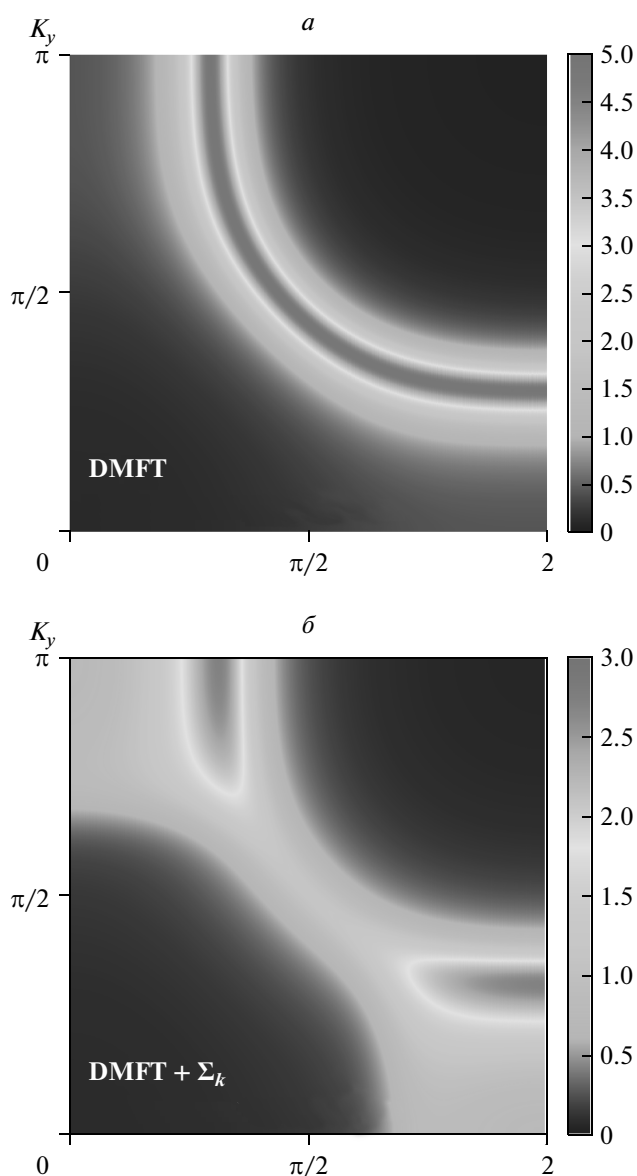


Рис. 6. Контурные карты поверхностей Ферми из расчетов LDA+DMFT (а) и LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ (б) трехзонной модели Эмери при электронном допировании с $x = 0.15$ в NCCO

точно большая область горячих точек. Теневая поверхность Ферми слабо различима около точки $(\pi/2, \pi/2)$, однако видна около точек $(\pi, 0)$ и $(0, \pi)$.

Однако в экспериментальных данных [35] и в наших предыдущих LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -результатах для однозонной модели [18] горячие точки достаточно хорошо отделены друг от друга. Это связано с затравочной LDA-поверхностью Ферми, как отмечалось в работе [18]. В данной работе LDA-поверхность Ферми задается интегралами переноса из работ [25, 27]

для сравнения LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -результатов с кластерными DMFT-расчетами. Тем не менее наблюдается достаточно хорошее качественное согласие с фотоэмиссионным спектром с угловым разрешением (ARPES) для данной системы [35]. Нужно отметить, что поверхность Ферми трехзонной модели Эмери лучше определена, чем поверхность Ферми однозонной модели в LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -расчетах с аналогичными параметрами [29] (для U много больше ширины затравочной LDA-зоны). Представленные LDA+DMFT(NRG)+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -результаты для NCCO находятся в хорошем согласии с работами [25, 27], где использовался «численно точный», но более затратный в смысле компьютерного времени кластерный LDA+DMFT (CT-QMC)-подход.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе предложено обобщение DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подхода на многозонный случай для описания ВТСП-купратов в псевдощелевом состоянии. В рамках LDA+DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ -подхода рассчитаны плотности состояний, спектральные функции, поверхности Ферми для электронно-допированного ВТСП-соединения $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ в псевдощелевой фазе. Получено типичное псевдощелевое поведение. Данные результаты согласуются с результатами «численно точных» кластерных расчетов [25, 27] и экспериментальным ARPES-спектром [35]. При схожем поведении плотностей состояний и спектральных функций трехзонной и однозонной моделей в рамках DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ поверхности Ферми в трехзонной модели лучше определены, чем в однозонной модели при эквивалентных наборах параметров.

Авторы выражают благодарность М. В. Садовскому за многочисленные обсуждения; Т. Прушке за предоставленную компьютерную программу, реализующую расчеты DMFT(NRG); А. И. Потеряеву и А. И. Лихтенштейну за полезные советы.

Работа выполнена в рамках программ фундаментальных исследований РАН (12-П-2-1002), РФФИ (грант № 11-02-00147), а также совместного проекта УрО-СО. Н. С. П. выражает благодарность некоммерческому фонду «Династия» и Международному центру физики в Москве.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Проблема поправки на двойной учет

Проблема поправки на двойной учет возникает при реализации LDA+DMFT-подхода [4–8], так как

локальное кулоновское взаимодействие, которое точно учитывается в методе DMFT, частично уже учтено в рамках LDA-приближения. Это означает, что перед тем как ввести LDA-гамильтониан в уравнения DMFT-метода, необходимо вычесть уже содержащуюся в нем энергию локального кулоновского взаимодействия, чтобы избежать ее двойного учета. Основной проблемой здесь является невозможность выразить вклад от локального кулоновского взаимодействия, имеющегося в LDA-приближении (величину поправки на двойной учет), в терминах модели Хаббарда. Это приводит к различным приближенным выражениям для поправки на двойной учет, применяемым в LDA+DMFT-расчетах, либо к простому подбору ее величины [36, 37].

Однако известно, что величина поправки на двойной учет значительно влияет на результат LDA+DMFT-расчета [36, 37]. В данном случае для выбранных параметров модели (см. таблицу) было получено, что диэлектрик с переносом заряда [21] с полным заполнением $n_{tot} = 2.5$ (без учета спиновой степени свободы) существует при величине поправки на двойной учет равной $E_{dc} = 1.66$ эВ. Полное заполнение $n_{tot} = 2.5$ соответствует полностью заполненным $2p_x$ - и $2p_y$ -состояниям кислорода и половине заполненному $3d_{x^2-y^2}$ -состоянию меди.

Для выявления качественного и количественного влияния поправки на двойной учет на диэлектрическое решение модели Эмери были получены фазовые диаграммы при различных параметрах: полного заполнения n_{tot} , величины кулоновского взаимодействия U от величины поправки на двойной учет E_{dc} при фиксированных остальных параметрах (таблица). Для каждой диаграммы стартовым расчетом было диэлектрическое решение. Граница фазового перехода металл–диэлектрик определялась по плотности состояний.

На рис. 7а изображена область существования диэлектрической фазы при $U = 8$ эВ в зависимости от величины E_{dc} и химического потенциала μ . При небольших значениях μ уровень Ферми попадает в зону Жанга–Райса, где формируется квазичастичный пик. При увеличении μ происходит переход металл–диэлектрик. Затем при больших значениях μ на уровень Ферми выходит верхняя хаббардовская зона, происходит переход диэлектрик–металл. На рис. 7б представлена та же фазовая диаграмма, только в переменных E_{dc} и n_{tot} . Линии, изображающие соответствующие переходы, аналогичны рис. 7а (E_{dc} от μ). Однако поскольку задача многозонная, существует перераспределение спектрального веса между зонами. В данном случае при пе-

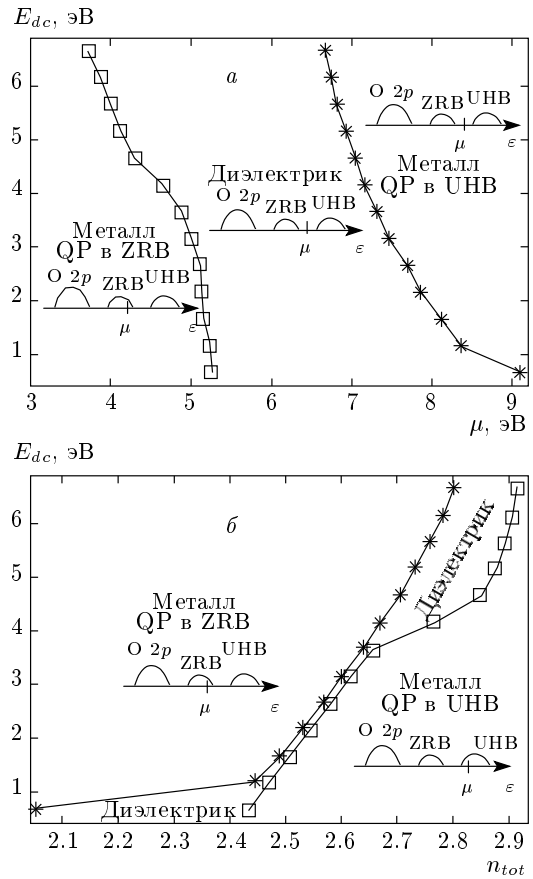


Рис. 7. Фазовая диаграмма E_{dc} от μ (а) и E_{dc} от n_{tot} (б) при $U = 8$ эВ для модели Эмери на основе расчетов LDA+DMFT. Линия с квадратами соответствует переходу из диэлектрической фазы в металлическую фазу с квазичастичным пиком в зоне Жанга–Райса, а линия со звездочками — переходу в металл с квазичастичным пиком в верхней хаббардовской зоне

реходе из металла с квазичастичным пиком в зоне Жанга–Райса в диэлектрик начинает уменьшаться полное заполнение и только после перехода в металл с квазичастичным пиком в верхней хаббардовской зоне полное заполнение опять начинает расти. При достаточно больших (больше 4 эВ) и маленьких (меньше 1 эВ) величинах E_{dc} сильнокоррелированное поведение начинает пропадать, т.е. начинают исчезать либо верхняя хаббардовская зона при больших E_{dc} , либо зона Жанга–Райса при маленьких E_{dc} . Область, где существует диэлектрическое решение и хорошо выражены зона Жанга–Райса и верхняя хаббардовская зона, очень узкая по величине n_{tot} — около 5% допирования.

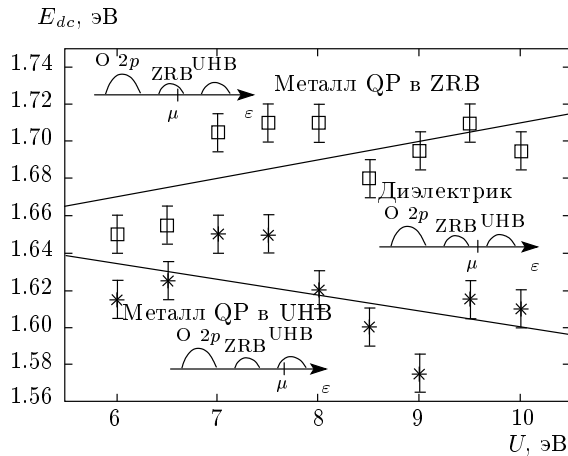


Рис. 8. Фазовая диаграмма E_{dc} от U при $n_{tot} = 2.5$. Квадратам соответствует переход из диэлектрической фазы в металлическую фазу с квазичастичным пиком в зоне Жанга–Райса, а звездочкам — переход в металл с квазичастичным пиком в верхней хаббардовской зоне

Фазовая диаграмма E_{dc} от U при $n_{tot} = 2.5$ изображена на рис. 8. Линии проведены по методу наименьших квадратов для наглядного изображения области существования диэлектрического решения с переносом заряда. Для выбранных параметров при $U < 5$ эВ не существует диэлектрического решения. Дальше, при увеличении U наблюдаются три фазы: диэлектрик с переносом заряда и две металлические, рассмотренные выше. Область существования диэлектрического решения достаточно узкая по параметру E_{dc} в большом интервале по U и незначительно расширяется при увеличении U .

Данные фазовые диаграммы демонстрируют нетривиальную зависимость диэлектрического решения с переносом заряда для модели Эмери от поправки на двойной учет и позволяют быстрее находить нужное решение модели Эмери при различном выборе параметров модели.

ЛИТЕРАТУРА

1. Т. Timusk and В. Statt, Rep. Progr. Phys. **62**, 61 (1999); М. В. Садовский, УФН **171**, 539 (2001); arXiv:0102111.
2. Э. З. Кучинский, И. А. Некрасов, М. В. Садовский, УФН **182**, 345 (2012); arXiv:1109.2305.
3. М. В. Садовский, в сб. *Струны, браны, решетки, сетки, псевдощели и пылинки*, Научный Мир, Москва (2007); arXiv:0408489.
4. V. I. Anisimov, A. I. Poteryaev, M. A. Korotin, A. O. Anokhin, and G. Kotliar, J. Phys.: Cond. Matter **9**, 7359 (1997).
5. A. I. Lichtenstein and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B **57**, 6884 (1998).
6. I. A. Nekrasov, K. Held, N. Blümer et al., Euro. Phys. J. B **18**, 55 (2000).
7. K. Held, I. A. Nekrasov, G. Keller et al., Psi-k Newsletter **56**, 65 (2003).
8. K. Held, I. A. Nekrasov, N. Blümer, V. I. Anisimov, and D. Vollhardt, Int. J. Mod. Phys. B **15**, 2611 (2001); K. Held, I. A. Nekrasov, G. Keller et al., in: *Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms*, ed. by J. Grotendorst, D. Marks, A. Muramatsu, NIC Series Vol. 10, NIC Directors, Forschungszentrum Jülich (2002), p. 175 (ISBN 3-00-009057-6); A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, G. Kotliar, in *Electron Correlations and Materials Properties*, ed. by A. Gonis, N. Kioussis, M. Ciftan, Kluwer Academic/Plenum, New York (2002), p. 428.
9. W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965); L. J. Sham and W. Kohn, Phys. Rev. **145**, 561 (1966).
10. L. Hedin and B. I. Lundqvist, J. Phys. C **4**, 2064 (1971); U. von Barth and L. Hedin, Phys. Rev. **5**, 1629 (1972).
11. W. Metzner and D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989).
12. D. Vollhardt, in *Correlated Electron Systems*, ed. by V. J. Emery, World Scientific, Singapore (1993), p. 57.
13. Th. Pruschke, M. Jarrell, and J. K. Freericks, Adv. in Phys. **44**, 187 (1995).
14. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
15. G. Kotliar and D. Vollhardt, Physics Today **57**, № 3, 53 (2004).
16. J. Schmalian, D. Pines, and B. Stojkovic, Phys. Rev. B **60**, 667 (1999); Э. З. Кучинский, М. В. Садовский, ЖЭТФ **115**, 1765 (1999).
17. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, ЖЭТФ **131**, 908 (2007).
18. E. E. Kokorina, E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov et al., ЖЭТФ **134**, 968 (2008).
19. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, E. Z. Kuchinskii et al., Phys. Rev. B **80**, 140510(R) (2009).

20. I. A. Nekrasov, E. E. Kokorina, E. Z. Kuchinskii et al., *ЖЭТФ* **137**, 1133 (2010).
21. J. Zaanen, G. A. Sawatzky, and J. W. Allen, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 418 (1985).
22. V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
23. V. A. Gavrichkov, M. M. Korshunov, S. G. Ovchinnikov et al., *Phys. Rev. B* **72**, 165104 (2005).
24. M. M. Korshunov, E. V. Zakharova, I. A. Nekrasov, Z. V. Pchelkina, and S. G. Ovchinnikov, *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 015701 (2010).
25. C. Weber, K. Haule, and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **82**, 125107 (2010).
26. O. Gunnarsson, O. K. Andersen, O. Jepsen, and J. Zaanen, *Phys. Rev. B* **39**, 1708 (1989).
27. C. Weber, K. Haule, and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **78**, 134519 (2008).
28. V. I. Anisimov, J. Zaanen, and O. K. Andersen, *Phys. Rev. B* **44**, 943 (1991);
29. M. V. Sadovskii, I. A. Nekrasov, E. Z. Kuchinskii, Th. Prushke, and V. I. Anisimov, *Phys. Rev. B* **72**, 155105 (2005).
30. M. M. Korshunov and S. G. Ovchinnikov, *Eur. J. Phys. B* **57**, 271 (2007).
31. I. A. Zobkalo, A. G. Gukasov, S. Yu. Kokovin, S. N. Barilo, and D. I. Zhigunov, *Sol. St. Comm.* **80**, 921 (1991); E. M. Motoyama, G. Yu, I. M. Vishik, O. P. Vajk, P. K. Mang, and M. Greven, *Nature* **445**, 186 (2007).
32. K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975); H. R. Krishna-Murthy, J. W. Wilkins, and K. G. Wilson, *Phys. Rev. B* **21**, 1003 (1980); **21**, 1044 (1980).
33. R. Bulla, A. C. Hewson, and Th. Pruschke, *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 8365 (1998);
34. F. C. Zhang and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **37**, 3759 (1988).
35. N. P. Armitage, F. Ronning, D. H. Lu et al., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 257001 (2002).
36. M. Karolak, G. Ulm, T. O. Wehling et al., *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **181**, 11 (2010).
37. I. A. Nekrasov, N. S. Pavlov, and M. V. Sadovskii, *Письма в ЖЭТФ* **95**, 659 (2012).