

ФОРМИРОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СОБСТВЕННОЙ ЭНЕРГИИ ТЕРМИЧЕСКИМИ ФЛУКТУАЦИЯМИ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА

А. Г. Грошев*, А. К. Аржников**

Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук
426067, Ижевск, Россия

Поступила в редакцию 12 ноября 2021 г.,
после переработки 12 ноября 2021 г.
Принята к публикации 26 ноября 2021 г.

Исследуется структура энергетической зависимости нормальной и аномальной компонент собственной энергии одночастичной функции Грина в сверхпроводящем состоянии, рассчитанной с учетом рассеяния носителей заряда на термических флуктуациях электрон-дырочных пар. Исследование проводится в рамках самосогласованной теории континуального интегрирования на основе квазидвумерной однозонной модели с притяжением между электронами, находящимися на соседних узлах. В приближении средней t -матрицы получены асимптотические выражения для компонент собственной энергии, которые по структуре совпадают с аналогичными выражениями феноменологической модели гибридизации электронов со скрытыми фермионными возбуждениями. Анализ результатов показывает, что энергетические зависимости обеих компонент собственной энергии имеют характерные пики, которые при достаточно низких температурах гасят друг друга в полной собственной энергии. Это поведение сохраняется в области аномально низких температур и исчезает только в квантовом пределе $T \rightarrow 0$, где определяющую роль играют квантовые флуктуации. С ростом температуры взаимное сокращение сменяется на взаимное усиление и затем на взаимную компенсацию в области температур близких к сверхпроводящему переходу.

DOI: 10.31857/S0044451022030063

1. ВВЕДЕНИЕ

Прогресс в области методов машинного обучения открывает новые возможности для определения теоретически важных физических величин, скрытых в экспериментальных данных. В частности, такой подход использовался для изучения структуры энергетической зависимости собственной энергии электрона, извлекаемой из спектров фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) [1]. Интерес к изучению такой структуры вызван возможностью продвинуться в решении давней проблемы о природе высокотемпературной сверхпроводимости.

В результате смешивания электронов и дырок в сверхпроводящем состоянии собственная энергия состоит из нормального Σ_{nor} и аномального Σ_{anom}

вкладов [2–4]. Аномальная часть Σ_{anom} определяет сверхпроводящие свойства, в то время как в Σ_{nor} содержатся эффекты рассеяния и корреляции электронов, приводящие к перенормировке массы и времени жизни. Поскольку эти вклады представляют собой физически различные части эффектов взаимодействия, для понимания механизма сверхпроводимости важно их раздельное рассмотрение. Однако одночастичные методы, такие как сканирующая туннельная микроскопия (STM), метод интерференции квазичастиц [5] и ARPES [6], предоставляют нам информацию исключительно о поведении полной собственной энергии Σ_{tot} [7–9], которая состоит из определенной комбинации этих двух вкладов [1, 10]. Метод машинного обучения на основе машины Больцмана, предложенный в работе [1], позволил выделить эти вклады из экспериментальных данных. Проанализированные в таком подходе спектры ARPES при антинодальном значении импульса $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{a.n.} = (\pi, 0)$ для оптимально допированного Bi2212 с $T_c = 90$ К при $T = 11$ К [11] и недоопированного Bi2201 с $T_c = 29$ К при $T = 12$ К [12] обнару-

* E-mail: groshev_a.g@mail.ru

** E-mail: arzhnikof@bk.ru

живают сингулярные структуры в энергетических зависимостях Σ_{nor} и Σ_{anom} при значениях энергии близких к значению сверхпроводящей щели. Однако в результате взаимного сокращения эти особенности отсутствуют в полной собственной энергии Σ_{tot} .

В настоящее время рассматриваются два основных сценария при объяснении формирования особенностей на энергетической зависимости обеих компонент собственной энергии в ВТСП-соединениях. В первом сценарии наблюдаемые аномалии объясняются на основе моттовской физики в результате гибридизации квазичастиц со скрытыми фермионными возбуждениями, возникающими в результате сильных электронных корреляций [13–15]. Простые феноменологические уравнения в таком подходе описывают переходы электрона в скрытое фермионное состояние и обратно. Они хорошо воспроизводят низкочастотную часть обеих компонент собственной энергии, рассчитанных с помощью теории динамического среднего поля (DMFT) и ее кластерного расширения (CDMFT) для двумерной модели Хаббарда как с притягивающим, так и с отталкивающим взаимодействием. Подгонка к численным данным DMFT решений этих уравнений позволяет определить параметры, характеризующие скрытый фермион в зависимости от температуры, электронной плотности и силы межэлектронного взаимодействия, и предположить возможный механизм его происхождения. Успешное описание с помощью этой простой феноменологической модели поддерживает идею о «скрытых» и «явных» фермионах в качестве бистабильных возбуждений свободного электрона в допированных диэлектриках Мотта. Кроме того, простые выражения для компонент собственной энергии предлагают полезный инструмент для анализа спектроскопических экспериментальных данных. Во втором сценарии особенности в энергетической зависимости обеих компонент собственной энергии определяются термическими флуктуациями в рамках фермион-бозонной модели [10, 16], в которой вместо гибридизации со скрытыми фермионными возбуждениями спаривающее взаимодействие происходит посредством бозонных возбуждений (типа мягкой бозонной моды). Поскольку сингулярные структуры наблюдаются при значениях температур, которые значительно ниже T_c , обнаруженные особенности могут быть вызваны также квантовыми флуктуациями и, таким образом, существенно ограничить круг возможных механизмов спаривания. В обоих случаях авторы опираются на одно и то же экспериментально наблюдаемое поведение собственной энергии, в то время как физика возникающих

особенностей на энергетической зависимости аномальной и нормальной частей собственной энергии в них различна.

В настоящей работе особенности в энергетической зависимости компонент собственной энергии и их взаимное сокращение рассматриваются в рамках альтернативного подхода, в котором наблюдаемые аномалии возникают в результате резонансного рассеяния носителей заряда термическими флуктуациями электрон-дырочных пар [17]. Решение рассматриваемой задачи проводится в рамках самосогласованной теории континуального интегрирования на основе квазидвумерной однозонной модели $d_{x^2-y^2}$ -спаривания с притяжением между электронами, находящимися на соседних узлах. В приближении средней t -матрицы (АТА) уравнения теории континуального интегрирования позволяют получить приближенные аналитические выражения для компонент собственной энергии, которые совпадают с соответствующими выражениями феноменологической модели гибридизации квазичастиц со скрытыми фермионными возбуждениями. Фактически, представление собственной энергии в модели гибридизации квазичастиц со скрытыми фермионными возбуждениями является феноменологической заменой двухчастичного взаимодействия в модели Хаббарда одночастичным, но имеющим дополнительные фермионные степени свободы. В используемом нами методе вычисление статистической суммы взаимодействующих электрон-дырочных пар с помощью преобразования Хаббарда–Стратоновича сводится к одночастичной задаче с электрон-дырочной парой, взаимодействующей со вспомогательным случайным полем, не зависящим от времени (в статическом приближении). Как отмечалось в [18–20], при решении этой задачи важен одновременный учет амплитудных $|\Delta|$ и фазовых ϕ флуктуаций параметра порядка (ПП) $\Delta = |\Delta| \exp(i\phi)$. Такая взаимосвязь рассматривалась в работах [21, 22] в рамках вариационного приближения и в [20, 23] на основе самосогласованных уравнений теории континуального интегрирования в приближении когерентного потенциала (CPA). Используемые в [20] приближения, в отличие от [21, 22], учитывают перенормировку одночастичных состояний, возникающую в результате рассеяния носителей заряда флуктуациями электрон-дырочных пар. Такая перенормировка описывается в [20] собственно-энергетической частью одночастичной функции Грина, самосогласованное вычисление которой представляется необходимым при объяснении ее энергетической зависимости.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД

Рассматривается однозонный гамильтониан t - V -модели с притяжением между электронами, находящимися на ближайших узлах квадратной решетки:

$$\hat{H} = \sum_{i,j,s} t_{ij} \hat{c}_{is}^\dagger \hat{c}_{js} - \sum_j \mu \hat{n}_j - V \sum_{j,\delta} \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j+\delta\downarrow}, \quad (1)$$

где $t_{ij} = -t$ — матричные элементы электронных перескоков на ближайшие узлы; \hat{c}_{js}^\dagger (\hat{c}_{js}) — операторы рождения (уничтожения) электрона на узле j с проекцией спина s ; $n_{js} = \hat{c}_{js}^\dagger \cdot \hat{c}_{js}$ — оператор числа электронов на узле j с проекцией спина s , n_j — оператор полного числа электронов на узле j ; μ — химический потенциал; V — параметр межэлектронного притяжения. В данной работе мы не конкретизируем природу взаимодействия между электронами. Предполагается, что такое спаривающее взаимодействие может быть обусловлено либо антиферромагнитными спиновыми флуктуациями [24], либо состояниями резонирующих валентных связей [25], либо иными механизмами (например, поляронным), которые в простейшем приближении описываются эффективным притяжением электронов, находящихся на соседних узлах [26–29]. Сверхпроводящие свойства рассматриваемой модели определяются итерационным решением системы самосогласованных уравнений с минимальным значением термодинамического потенциала (см. [20]). Для получения этой системы необходимо сделать ряд приближений. Отбрасывая флуктуации, разрушающие сверхпроводимость в системах с размерностью $D \leq 2$, мы учитываем квазидвумерный характер рассматриваемых соединений, поскольку согласно теореме Мермина–Вагнера–Хоэнберга [30–32] в строго двумерной вырожденной системе дальний порядок отсутствует при любой отличной от нуля температуре и сверхпроводящие состояния могут проявляться лишь в фазовых переходах типа Березинского–Костерлица–Таулесса [33]. Самосогласованный учет перенормировки одночастичных состояний и эффективной взаимосвязи между амплитудными и фазовыми флуктуациями проводится в рамках метода, основанного на уравнениях теории континуального интегрирования [20]. Аналогичный подход использовался ранее при исследовании влияния температуры [34] и атомного беспорядка [35] на магнитное фазовое расслоение и параметры спиральных магнитных структур в рамках квазидвумерной однозонной t - t' -модели Хаббарда в СРА-приближении.

Задача вычисления статистической суммы взаимодействующих электронных пар сводится к вычислению статистической суммы независимых электронных пар, находящихся в пространстве не зависящих от времени (в статическом приближении) вспомогательных флуктуирующих полей. Роль таких полей играют модуль $\Delta_{j,\delta}$ и фаза $\phi_{j,\delta}$ флуктуирующего комплексного ПП $\Delta_{j,\delta} \exp(i\phi_{j,\delta})$ в узельном представлении. В используемом статическом приближении не учитываются квантовые флуктуации сверхпроводящего ПП, вследствие чего метод функционального интегрирования при $T = 0$ сводится к приближению Хартри–Фока (ХФ). Обоснованием статического приближения служит оценка вклада квантовых флуктуаций в подавление температуры сверхпроводящего перехода [36], которая позволяет считать, что квантовые флуктуации становятся важны только при достаточно низких температурах.

В данной работе мы ограничиваемся синглетной сверхпроводящей фазой с $d_{x^2-y^2}$ -симметрией, которая реализуется в ВТСП, рассматриваемых в работе [1]. Сверхпроводящая щель при $d_{x^2-y^2}$ -спаривании имеет зависимость от волнового вектора $\Delta(k) \propto \cos(k_x) - \cos(k_y)$ [37], где $k_{x(y)}$ — значения волнового вектора вдоль основных векторов обратной решетки. Такая зависимость определяется взаимодействием между электронами только в пределах первой координационной сферы. В этом случае фаза усредненного ПП

$$\overline{\Delta}_{j,\delta} \exp(i\alpha_{j,\delta}) = \overline{\Delta} \exp(i\alpha_\delta)$$

зависит от ближайших соседей по закону $\alpha_{\pm\delta_x} = \pm\pi/2$, $\alpha_{\pm\delta_y} = \mp\pi/2$, где δ_x и δ_y являются проекциями вектора ближайших соседей δ на координатные оси. В результате приближения «седловой точки», используемого для упрощения задачи вычисления интегралов по амплитудному полю Δ , наиболее вероятные амплитудные $\Delta(\phi)$ и фазовые ϕ флуктуации оказываются связанными. Это справедливо, когда амплитудные флуктуации становятся быстрее флуктуаций фазы настолько, что амплитудное поле успевает подстроиться под распределение фазы равновесным образом. Как было показано в [20], такое приближение неплохо работает в широком диапазоне температур вплоть до T_c . Уравнение для нахождения «седловой точки», определяемое из условия минимума термодинамического потенциала, при $T = 0$ совпадает с уравнением самосогласования для сверхпроводящего ПП теории среднего поля (ХФ, БКШ). При конечных температурах это уравнение не содержит решения $\Delta = 0$ (см. [20]). По-

этому переход в нормальное состояние при T_c происходит в результате потери фазовой когерентности флуктуирующего комплексного ПП, т. е. при обращении в нуль усредненного ПП $\langle \Delta(\phi) \exp(i\phi) \rangle = 0$.

3. ПРИБЛИЖЕНИЕ СРЕДНЕЙ t -МАТРИЦЫ И МОДЕЛЬ СКРЫТЫХ ФЕРМИОНОВ

Учет флуктуаций в модели (1) приводит к проблеме недиагонального беспорядка в неупорядоченных системах. Эта проблема может быть решена в двухузельном АТА-приближении. При решении задачи удобно использовать представление узельных матриц Намбу:

$$\hat{c}_{j\delta}(\tau) = \begin{bmatrix} \hat{c}_{j\uparrow}(\tau) \\ \hat{c}_{j+\delta\downarrow}(\tau) \end{bmatrix}, \quad (2)$$

$$\hat{c}_{j\delta}^\dagger(\tau) = \begin{bmatrix} \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger(\tau) & \hat{c}_{j+\delta\downarrow}(\tau) \end{bmatrix}.$$

В этом представлении мацубаровская функция Грина определяется стандартными выражениями

$$G_{j\delta}(\tau - \tau') = - \langle T_\tau \hat{c}_{j\delta}(\tau) \hat{c}_{j\delta}^\dagger(\tau') \rangle =$$

$$= \begin{bmatrix} G_{j,j}^{\uparrow\uparrow}(\tau - \tau') & G_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(\tau - \tau') \\ G_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(\tau - \tau') & G_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow\downarrow}(\tau - \tau') \end{bmatrix}, \quad (3)$$

где $G_{j,j}^{\uparrow\uparrow}(\tau - \tau')$ и $G_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow\downarrow}(\tau - \tau')$ — нормальные, а $G_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}(\tau - \tau')$ и $G_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}(\tau - \tau')$ — аномальные мацубаровские функции Грина. Для учета термических флуктуаций ПП вводится флуктуирующий потенциал

$$\Delta \hat{U}(\Delta, \phi, \tau) = \sum_{j,\delta} \hat{c}_{j\delta}^\dagger(\tau) \Delta \mathcal{U}_{j\delta} \hat{c}_{j\delta}(\tau),$$

$$\Delta \mathcal{U}_{j\delta} = \begin{bmatrix} 0 & \Delta \hat{U}_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} \\ \Delta \hat{U}_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} & 0 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

$$\Delta \hat{U}_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} = V \exp(i\alpha\delta) [\bar{\Delta} - \Delta(\phi) \exp(i\phi)],$$

$$\Delta \hat{U}_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} = V \exp(-i\alpha\delta) [\bar{\Delta} - \Delta(\phi) \exp(-i\phi)],$$

где $\bar{\Delta}$ — значение амплитуды среднего ПП. Флуктуирующий потенциал определяет матрицу рассеяния в узельном представлении уравнения Дайсона:

$$G_{j\delta}(i\omega_n) =$$

$$= G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n) + G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n) \Delta \mathcal{U}_{j\delta} G_{j\delta}(i\omega_n) =$$

$$= G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n) + G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n) T_{j\delta}(i\omega_n) G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n), \quad (5)$$

где $G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n)$ — фурье-образ мацубаровской функции Грина с усредненным ПП; $T_{j\delta}(i\omega_n)$ — фурье-образ матрицы рассеяния электронной пары; $\omega_n = (2n - 1)\pi T$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) — мацубаровские

частоты для ферми-частиц. Эффективная (средняя) мацубаровская функция Грина

$$F_{j\delta}(i\omega_n) = \langle G_{j\delta}(i\omega_n) \rangle$$

определяется собственной энергией в узельном представлении уравнения Дайсона:

$$F_{j\delta}(i\omega_n) =$$

$$= G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n) + G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n) \Sigma_{j\delta}(i\omega_n) F_{j\delta}(i\omega_n), \quad (6)$$

где $F_{j\delta}(i\omega_n)$ — фурье-образ эффективной мацубаровской функции Грина; $\Sigma_{j\delta}(i\omega_n)$ — фурье-образ собственной энергии. Тогда из матричных уравнений (5) и (6) собственная энергия $\Sigma_{j\delta}(i\omega_n)$ выражается через среднюю T -матрицу:

$$\Sigma_{j\delta}(i\omega_n) =$$

$$= [1 + \langle T_{j\delta}(i\omega_n) \rangle G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n)]^{-1} \langle T_{j\delta}(i\omega_n) \rangle, \quad (7)$$

где

$$T_{j\delta}(i\omega_n) = [1 - \Delta \mathcal{U}_{j\delta} G_{j\delta}^{AV}(i\omega_n)]^{-1} \Delta \mathcal{U}_{j\delta}. \quad (8)$$

Переход в квазиимпульсное представление осуществляется в результате преобразования Фурье узельных матриц Намбу (2). В этом представлении гамильтониан рассматриваемой системы с усредненным ПП $\hat{\mathcal{H}}_{AV}$ имеет следующий вид:

$$\hat{\mathcal{H}}_{AV}(\bar{\Delta}, \alpha) = \frac{1}{N} \sum_k \hat{c}_k^\dagger \mathcal{H}_{AV}(k) \hat{c}_k,$$

$$\mathcal{H}_{AV}(k) = \begin{bmatrix} \mathcal{H}_{AV}^{\uparrow\uparrow}(k) & \mathcal{H}_{AV}^{\uparrow\downarrow}(k) \\ \mathcal{H}_{AV}^{\downarrow\uparrow}(k) & \mathcal{H}_{AV}^{\downarrow\downarrow}(k) \end{bmatrix},$$

$$\mathcal{H}_{AV}^{\uparrow\uparrow}(k) = \varepsilon_k, \quad \mathcal{H}_{AV}^{\downarrow\downarrow}(k) = -\varepsilon_k \quad (9)$$

$$\mathcal{H}_{AV}^{\uparrow\downarrow}(k) = -2V\bar{\Delta}V_k,$$

$$\mathcal{H}_{AV}^{\downarrow\uparrow}(k) = \left(\mathcal{H}_{AV}^{\uparrow\downarrow}(k) \right)^*,$$

$$\varepsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y - \mu,$$

$$V_k = i(\cos k_x - \cos k_y),$$

где $\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_k$ — матрицы Намбу (2) в квазиимпульсном представлении; ε_k — закон дисперсии энергии электронов на квадратной решетке с перескоками в пределах первой и второй координационных сфер; V_k — закон дисперсии сверхпроводящего ПП. Таким образом, эффективная среда определяется гамильтонианом

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{eff}(i\omega_n) &= \hat{\mathcal{H}}_{AV} + \hat{\Sigma}(i\omega_n), \\ \hat{\Sigma}(i\omega_n) &= \frac{1}{N} \sum_k \hat{c}_k^\dagger \Sigma(k, i\omega_n) \hat{c}_k, \\ \Sigma(k, E) &= \begin{bmatrix} \Sigma_{nor}^\uparrow(k, E) & \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(k, E) \\ \Sigma_{anom}^{\downarrow\uparrow}(k, E) & \Sigma_{nor}^\downarrow(k, E) \end{bmatrix}, \quad (10) \\ \Sigma_{nor}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E) &= 4\Sigma^{\uparrow(\downarrow)}(E), \\ \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k, E) &= \Sigma^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k, E) + \mathcal{H}_{AV}^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k) = \\ &= 2V_k^{(*)} [\Sigma^{\uparrow\downarrow}(E) - V\bar{\Delta}], \end{aligned}$$

где $\Sigma(k, E)$ — собственная энергия (7) в квазиимпульсном представлении. При определении собственной энергии в (10) мы, так же как в [1, 10], включили в определение аномальной части собственной энергии недиагональные матричные элементы гамильтониана системы с усредненным ПП (9). Рассматриваемая нами $d_{x^2-y^2}$ -симметрия ПП определяется зависимостью недиагональных матричных элементов от квазиимпульса. Поэтому коэффициент $\Sigma^{\uparrow\downarrow}(E)$ в аномальной части собственной энергии (10), так же как и нормальные части $\Sigma^\uparrow(E)$ и $\Sigma^\downarrow(E)$, в общем случае, являются комплексными функциями. Эффективная мацубаровская функция Грина (6) в квазиимпульсном представлении определяется гамильтонианом эффективной среды $\hat{\mathcal{H}}_{eff}(E)$ (10):

$$\begin{aligned} F(k, E) &= \frac{1}{E - \mathcal{H}_{eff}(k)} = \\ &= \begin{bmatrix} F^\uparrow(k, E) & F^{\uparrow\downarrow}(k, E) \\ F^{\downarrow\uparrow}(k, E) & F^\downarrow(k, E) \end{bmatrix}, \\ F^{\uparrow(\downarrow)}(k, E) &= \frac{1}{E \mp \varepsilon_k - \Sigma_{tot}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)}, \\ F^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k, E) &= \frac{\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k, E)}{[E - E_+(k)][E - E_-(k)]}, \quad (11) \\ E_\pm(k) &= [\Sigma_{nor}^\uparrow(k, E) + \Sigma_{nor}^\downarrow(k, E)] / 2 \pm \\ &\pm \left[(\varepsilon_k + [\Sigma_{nor}^\uparrow(k, E) - \Sigma_{nor}^\downarrow(k, E)] / 2)^2 + \right. \\ &\quad \left. \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(k, E) \Sigma_{anom}^{\downarrow\uparrow}(k, E) \right]^{1/2}, \\ \Sigma_{tot}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E) &= \Sigma_{nor}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E) + W^{\uparrow(\downarrow)}(k, E), \\ W^{\uparrow(\downarrow)}(k, E) &= \frac{\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(k, E) \Sigma_{anom}^{\downarrow\uparrow}(k, E)}{E \pm \varepsilon_k - \Sigma_{nor}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)}. \end{aligned}$$

Собственная энергия в уравнении Дайсона (6) определяется матричными элементами мацубаровских функций Грина в узельном представлении, явные выражения которых можно получить из симметричных свойств рассматриваемой системы при преобразовании Фурье (см. [20]).

Поскольку $\langle \Delta \mathcal{U}_{j\delta} \rangle = 0$, разложение $\langle T_{j\delta}(E) \rangle$ по флуктуирующему потенциалу в (8) начинается с квадратичного слагаемого

$$\langle T_{j\delta}(E) \rangle = \langle \Delta \mathcal{U}_{j\delta} G_{j\delta}^{AV}(E) \Delta \mathcal{U}_{j\delta} \rangle + \dots \quad (12)$$

Если ограничиться приближением, квадратичным по флуктуирующему потенциалу, то собственно-энергетическая часть в узельном представлении (7) имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \Sigma_{j\delta} &= \begin{bmatrix} \Sigma_{j,j}^\uparrow & \Sigma_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} \\ \Sigma_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} & \Sigma_{j+\delta,j+\delta}^\downarrow \end{bmatrix}, \\ \Sigma_{j,j}^\uparrow &= \langle \Delta \mathcal{U}_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} (G^{AV})_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow\downarrow} \Delta \mathcal{U}_{j+\delta,j}^{\uparrow\downarrow} \rangle, \\ \Sigma_{j+\delta,j+\delta}^\downarrow &= \langle \Delta \mathcal{U}_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} (G^{AV})_{j,j}^{\uparrow\uparrow} \Delta \mathcal{U}_{j,j+\delta}^{\downarrow\uparrow} \rangle, \\ \Sigma_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} &= \langle \Delta \mathcal{U}_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} (G^{AV})_{j+\delta,j}^{\downarrow\downarrow} \Delta \mathcal{U}_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} \rangle, \\ \Sigma_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} &= \langle \Delta \mathcal{U}_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} (G^{AV})_{j,j+\delta}^{\uparrow\uparrow} \Delta \mathcal{U}_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} \rangle. \end{aligned} \quad (13)$$

Учитывая свойство

$$\exp(i\alpha_\delta)(G^{AV})_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} = \exp(-i\alpha_\delta)(G^{AV})_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}$$

недиагональных матричных элементов, справедливое для $d_{x^2-y^2}$ -симметрии, можно избавиться в (13) от фазовых множителей $\exp(\pm i\alpha_\delta)$. В результате получим

$$\begin{aligned} \Sigma_{j,j}^\uparrow &= V_1^2 (G^{AV})_{j+\delta,j+\delta}^{\downarrow\downarrow}, \\ \Sigma_{j+\delta,j+\delta}^\downarrow &= V_1^2 (G^{AV})_{j,j}^{\uparrow\uparrow}, \\ \Sigma_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow} &= (-V_1^2 + V_2^2) (G^{AV})_{j,j+\delta}^{\uparrow\downarrow}, \\ \Sigma_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow} &= (-V_1^2 + V_2^2) (G^{AV})_{j+\delta,j}^{\downarrow\uparrow}, \end{aligned} \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} V_1^2 &= V^2 [\langle \Delta(\phi)^2 \rangle - \bar{\Delta}^2], \\ V_2^2 &= 2V^2 [\langle \Delta(\phi)^2 \cos^2(\phi) \rangle - \bar{\Delta}^2]. \end{aligned}$$

Подставляя в (14) явные выражения для функции Грина с усредненным ПП и собственной энергии в узельном представлении, получим в квазиимпульсном представлении выражения для компонент собственной энергии, которые имеют структуру выражений феноменологической модели со скрытыми фермионными возбуждениями [13, 15]:

$$\begin{aligned} \Sigma_{nor}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E) &= V_1^2 \frac{E \mp \varepsilon_k}{E^2 - \varepsilon_k^2 - |D^{\uparrow\downarrow}(k)|^2}, \\ \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k, E) &= D^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k) + \\ &+ (-V_1^2 + V_2^2) \frac{D^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k)}{E^2 - \varepsilon_k^2 - |D^{\uparrow\downarrow}(k)|^2}, \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$D^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k) = \mathcal{H}_{AV}^{\uparrow\downarrow(\downarrow\uparrow)}(k) = -2V\overline{\Delta}V_k^{(*)}.$$

Подставляя (15) в выражение для $W^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)$, получим

$$W^{\uparrow(\downarrow)}(k, E) = \frac{E_k^2 - \varepsilon_k^2}{E \pm \varepsilon_k} \left[1 + \frac{-V_1^2 + V_2^2}{(E - E_k)(E + E_k)} \right] \times \left[1 + \frac{V_2^2}{(E - E_k)(E + E_k) - V_1^2} \right]. \quad (16)$$

Все компоненты собственной энергии имеют полюсы на границах энергетической щели при

$$E = \pm E_k, \quad E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + |D^{\uparrow\downarrow}(k)|^2}.$$

Кроме того, $W^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)$ имеет полюс, а $\Sigma_{nor}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)$ обращается в нуль при $E = \pm \varepsilon_k$ (при выбранных параметрах $\varepsilon_k = 0$ в антинодальной точке). В условиях, когда можно пренебречь слагаемым V_2 по сравнению с V_1 , вычеты в полюсах $E = \pm E_k$ нормального $\Sigma_{nor}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)$ и аномального $W^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)$ вкладов в $\Sigma_{tot}^{\uparrow(\downarrow)}(k, E)$ (11) различаются только знаками и взаимно сокращаются. В этом случае сокращение особенностей на энергетической зависимости компонент собственной энергии в рассматриваемой нами модели происходит по той же причине, что и в феноменологической модели со скрытыми фермионными возбуждениями. Однако следует отметить, что в отличие от [15], где параметры модели со скрытыми фермионными возбуждениями определяются путем простой подгонки, в нашем случае температурные зависимости всех параметров обусловлены термическими флуктуациями и должны вычисляться в ходе самосогласованных расчетов.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ

Расчеты проводились при типичных для купратов значениях параметра межэлектронного притяжения $V = t$ и параметра перескока в пределах второй координационной сферы $t' = -0.2t$ [38] для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания. При этих параметрах выбранное значение концентрации носителей заряда $n \simeq 0.828$ соответствует наибольшему значению температуры сверхпроводящего перехода. В качестве единицы измерения энергии в дальнейшем выбран интеграл перескока между ближайшими соседями t . Результаты расчета типичных энергетических зависимостей вещественных и мнимых частей аномальной и нормальной собственных энергий при антинодальном значении импульса $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{a.n.} = (\pi, 0)$ и различных

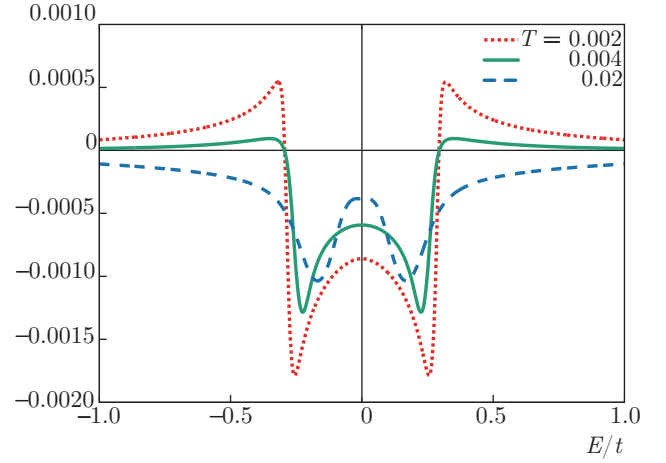


Рис. 1. Энергетические зависимости вещественной части аномальной собственной энергии $\text{Re} [\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E) - D^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}_{a.n.})]$ при различных температурах для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания

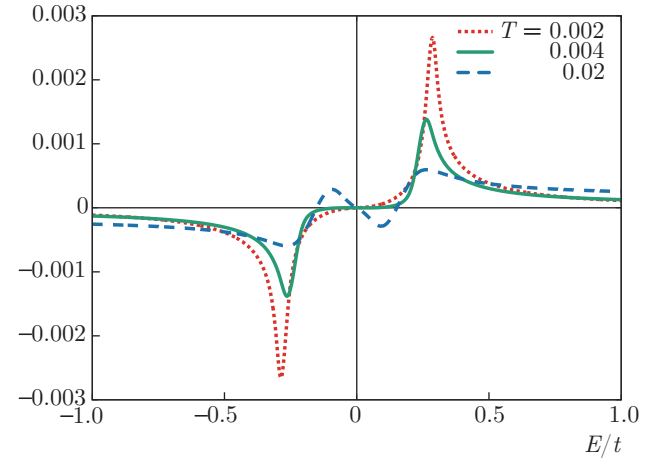


Рис. 2. Энергетические зависимости мнимой части аномальной собственной энергии $\text{Im} \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E)$ при различных температурах для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания

температурах приведены соответственно на рис. 1, 2 и рис. 3, 4. Поскольку $\overline{\Delta}$, входящее в определение $\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E)$, сильно зависит от температуры и не зависит от энергии, вещественная часть аномальной собственной энергии на рисунках представлена в виде разности

$$\text{Re} [\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E) - D^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}_{a.n.})].$$

На рисунках видно, что при низких температурах ($T = 0.002$ и $T = 0.004$ на рис. 2 и рис. 4) $\text{Im} \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E)$ и $\text{Im} \Sigma_{nor}^{\uparrow(\downarrow)}(E)$ на границах энергетической щели при $E \simeq \pm E_k$ имеют особенности, соответствующие пикам на их энергетической зависимо-

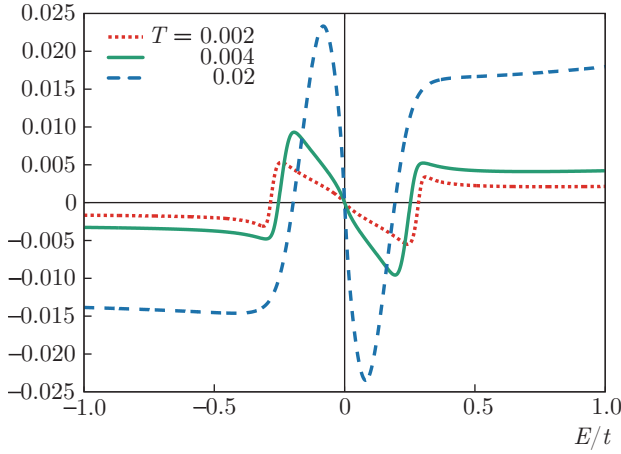


Рис. 3. Энергетические зависимости вещественной части нормальной собственной энергии $\text{Re} \Sigma_{nor}^{\uparrow}(E)$ при различных температурах для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания

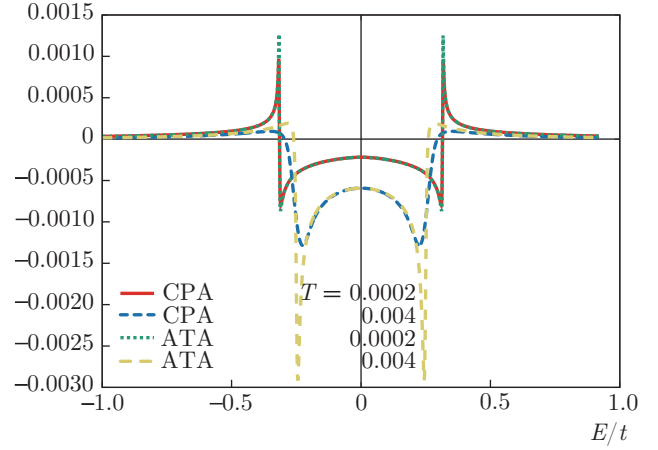


Рис. 5. Энергетические зависимости вещественной части аномальной собственной энергии $\text{Re} [\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E) - D^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}_{a.n.})]$, вычисленные в CPA- и ATA-приближениях при различных температурах

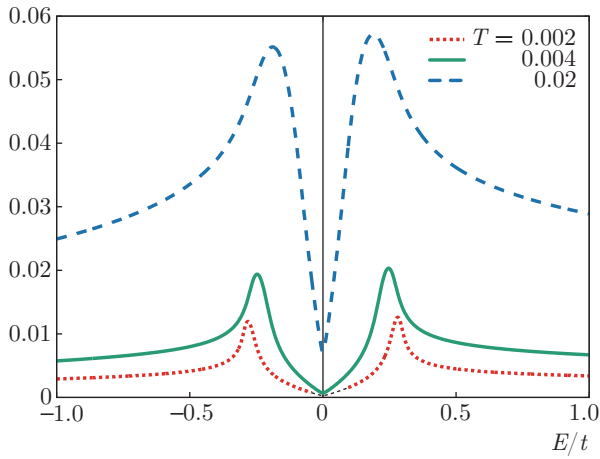


Рис. 4. Энергетические зависимости мнимой части нормальной собственной энергии $\text{Im} \Sigma_{nor}^{\uparrow}(E)$ при различных температурах для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания

сти. Им соответствуют нули в энергетической зависимости

$$\text{Re} [\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E) - D^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}_{a.n.})], \text{Re} \Sigma_{nor}^{\uparrow}(E)$$

($T = 0.002$ и $T = 0.004$ на рис. 1 и рис. 3). Пики на энергетической зависимости этих функций имеют при значениях энергии $|E| \gtrsim E_k$ и $|E| \lesssim E_k$. В области $|E| \gtrsim E_k$ вещественные части меняют знак ($T = 0.002$ и $T = 0.004$ на рис. 1 и рис. 3). При более высоких температурах ($T = 0.02$ на рис. 1 и рис. 2) ситуация для $\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E)$ меняется на обратную. Теперь нули исчезают в энергетической зависимости $\text{Re} [\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E) - D^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}_{a.n.})]$, а появляются в $\text{Im} \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E)$. В результате значениям $E \simeq \pm E_k$ соответствуют пики в $\text{Re} [\Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E) - D^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}_{a.n.})]$ и

нули в $\text{Im} \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E)$. Для мнимой части аномальной собственной энергии $\text{Im} \Sigma_{anom}^{\uparrow\downarrow}(E)$ в этой области температур также наблюдается смена знака. Смена знака в энергетической зависимости компонент собственной энергии была получена в [10] для модели квантовых флуктуаций. Поскольку такое же поведение наблюдается и для рассматриваемой нами модели термических флуктуаций, можно утверждать, что оно не связано с квантовым характером флуктуаций. Интересно, что при низких температурах эти величины, выделенные в [1] из данных ARPES для оптимально допированного Bi2212 [11] и недопированного Bi2201 [12], также меняют знак в этой области энергий. Мнимая часть нормальной собственной энергии $\text{Im} \Sigma_{nor}^{\uparrow}(E)$ во всей области изменения энергии E остается одного знака. В нашей работе основные расчеты проводятся в рамках CPA-приближения. Однако, как показано в разд. 3, аналитические выражения для компонент собственной энергии, аналогичные по структуре выражениям феноменологической модели гибридизации электронов со скрытыми фермионными возбуждениями, получены нами непосредственно из уравнений ATA-приближения. Поэтому полезно сравнить результаты вычислений в CPA- и ATA-приближениях. Для этого на рис. 5 представлены энергетические зависимости вещественной части аномальной собственной энергии, вычисленные в CPA- и ATA-приближениях при различных температурах. Видно, что результаты в CPA- и ATA-приближениях неплохо согласуются друг с другом, однако начинают совпадать только при достаточно низких температурах.

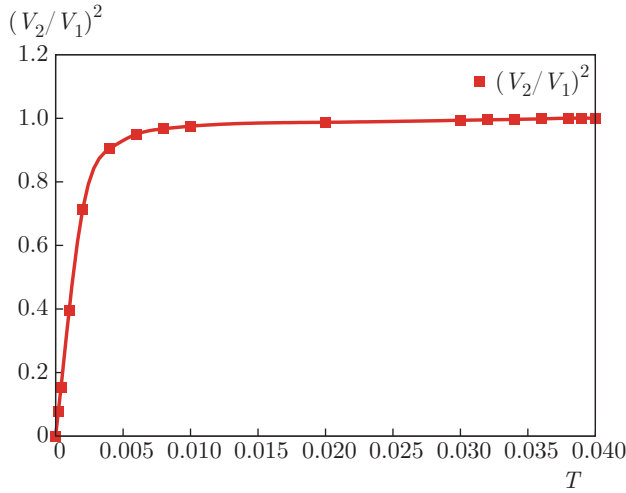


Рис. 6. Температурная зависимость квадрата отношения констант V_2 и V_1

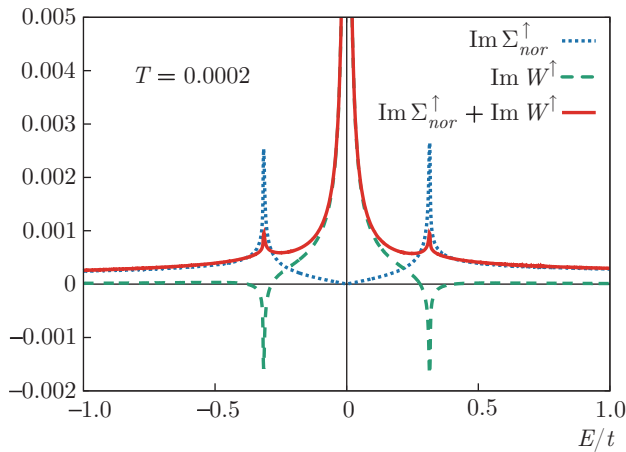


Рис. 7. Энергетические зависимости мнимых частей нормальной $\text{Im } \Sigma_{nor}^{\uparrow}$, спаривающей $\text{Im } W^{\uparrow}$ и общей $\text{Im } \Sigma_{tot}^{\uparrow}$ собственных энергий при $T = 0.0002$ для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания

Как было показано в разд. 3, взаимное сокращение особенностей нормальной $\Sigma_{nor}^{\uparrow}(E)$ и спаривающей $W^{\uparrow}(E)$ компонент собственной энергии в энергетической зависимости полной собственной энергии $\Sigma_{tot}^{\uparrow}(E)$ в рассматриваемой нами модели происходит по той же причине, что и в феноменологической модели гибридизации электронов со скрытыми фермионными возбуждениями, когда можно пренебречь слагаемым V_2 по сравнению с V_1 . Наши расчеты показывают (см. рис. 6), что это возможно в области достаточно низких температур. Такое сокращение при температуре $T = 0.0002t$ продемонстрировано на рис. 7. В этом случае $\text{Im } \Sigma_{nor}^{\uparrow}(E)$ имеет особенности при значениях энергии, соответствующих

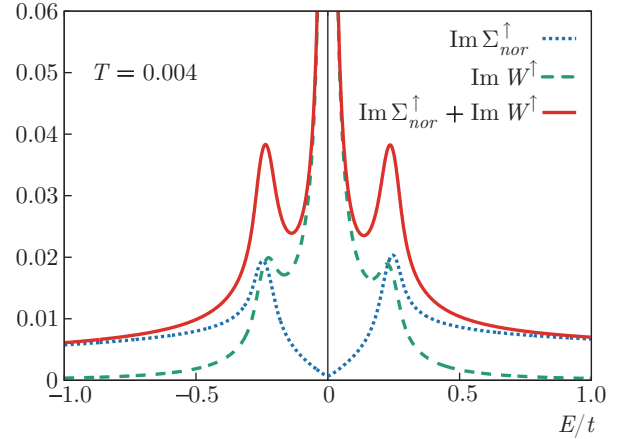


Рис. 8. Энергетические зависимости мнимых частей нормальной $\text{Im } \Sigma_{nor}^{\uparrow}$, спаривающей $\text{Im } W^{\uparrow}$ и общей $\text{Im } \Sigma_{tot}^{\uparrow}$ собственных энергий при $T = 0.004$ для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания

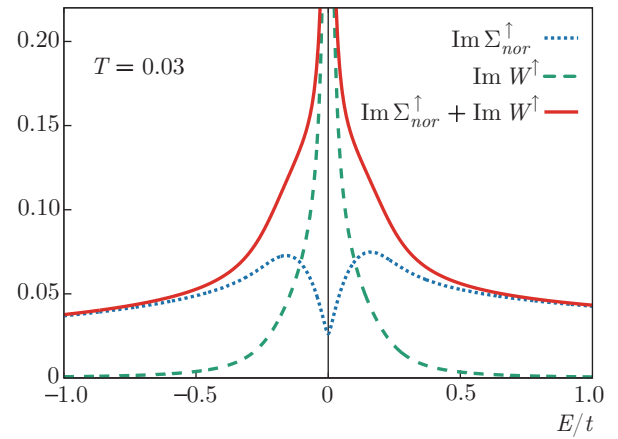


Рис. 9. Энергетические зависимости мнимой части нормальной $\text{Im } \Sigma_{nor}^{\uparrow}$, спаривающей $\text{Im } W^{\uparrow}$ и общей $\text{Im } \Sigma_{tot}^{\uparrow}$ собственных энергий при $T = 0.03$ для $d_{x^2-y^2}$ -спаривания

этим границам энергетической щели при $E \simeq \pm E_k$, а $\text{Im } W^{\uparrow}(E)$ кроме этих особенностей имеет особенность при $E = 0$. Значения $\text{Im } \Sigma_{nor}^{\uparrow}(E)$ и $\text{Im } W^{\uparrow}(E)$ в особенностях $E \simeq \pm E_k$ имеют разные знаки, что и приводит к их взаимному сокращению в полной $\text{Im } \Sigma_{tot}^{\uparrow}(E)$ собственной энергии. С ростом температуры особенности на границах энергетической щели становятся менее выражены, а значения $\text{Im } \Sigma_{nor}^{\uparrow}(E)$ и $\text{Im } W^{\uparrow}(E)$ становятся одного знака. Это происходит при температурах примерно $0.004t$, когда слагаемое V_2 становится сравнимым с V_1 (см. рис. 6). В результате этого особенности в $\text{Im } \Sigma_{tot}^{\uparrow}(E)$ при $E \simeq \pm E_k$ в этой области температур даже усиливаются. Это продемонстрировано на рис. 8. При приближении к сверхпроводящему переходу особен-

ности на энергетической зависимости $\text{Im} W^\dagger(E)$ на границах щели при $E \simeq \pm E_k$ исчезают, а оставшиеся в $\text{Im} \Sigma_{nor}^\dagger(E)$ полностью компенсируются в полной собственной энергии $\text{Im} \Sigma_{tot}^\dagger(E)$ расходимостью $\text{Im} W^\dagger(E)$, которая определяется полюсом при $E = 0$. Это продемонстрировано на рис. 9. Необходимо отметить, что согласно [13] взаимное сокращение особенностей на границах энергетической щели $E \simeq \pm E_k$ является своеобразным тестом на их фермионное происхождение. Однако в работе [13] в рамках DMFT на решетке Бете для модели Хаббарда с притягивающим взаимодействием такое сокращение наблюдается при температурах близких к T_c , а при низких температурах оно отсутствует, поскольку согласно [13] в этой области справедливо описание в рамках фермион-бозонной модели. В отличие от [13] в рассматриваемой нами модели сокращение особенностей происходит при достаточно низких температурах (вплоть до квантового предела $T \rightarrow 0$), а при температурах близких к T_c происходит их компенсация. Как отмечалось во введении, сингулярные структуры и их сокращение в оптимально дошированном Bi2212 с $T_c = 90$ К [11] и недодошированном Bi2201 с $T_c = 29$ К [12] обнаруживаются соответственно при $T = 11$ К и $T = 12$ К, т. е. при температурах гораздо ниже температур сверхпроводящего перехода.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для квазидвумерной однозонной модели с притяжением между электронами, находящимися на соседних узлах, исследована структура энергетической зависимости нормальной и аномальной компонент собственной энергии одночастичной функции Грина, возникающая в результате рассеяния носителей заряда на термических флуктуациях электрон-дырочных пар. Резонансный характер этого рассеяния является причиной возникновения особенностей на энергетической зависимости компонент собственной энергии. Показано, что в рамках рассматриваемой нами модели в квадратичном приближении по флуктуирующему потенциалу в АТА компоненты собственной энергии имеют структуру аналитических выражений феноменологической модели гибридизации электронов со скрытыми фермионными возбуждениями. Однако параметры в полученных нами выражениях определяются в самосогласованных расчетах и зависят от температуры, электронной плотности и силы межэлектронного взаимодействия. Проведенный

анализ показывает, что на энергетических зависимостях обеих компонент собственной энергии на границах энергетической щели имеются характерные пики. Однако в отличие от результатов других работ, взаимное сокращение этих пиков в полной собственной энергии в нашем случае происходит при достаточно низких температурах (вплоть до квантового предела $T \rightarrow 0$, где определяющую роль играют квантовые флуктуации). С ростом температуры это взаимное сокращение сменяется на взаимное усиление, а в области температур близких к сверхпроводящему переходу происходит взаимная компенсация особенностей. Кроме того, смена знака в обеих компонентах собственной энергии за пределами энергетической щели не связана с квантовым характером флуктуаций, поскольку также наблюдается для рассматриваемой нами модели термических флуктуаций. В данном случае это происходит в области достаточно низких температур для вещественной части аномальной собственной энергии и при достаточно высоких температурах для мнимой части аномальной собственной энергии. Эти величины, извлеченные из экспериментальных данных ARPES, при низких температурах действительно меняют знак в этой области энергий.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема № 121030100005-1).

ЛИТЕРАТУРА

1. Youhei Yamaji, Teppei Yoshida, Atsushi Fujimori, and Masatoshi Imada arXiv:1903.08060v4 0 [cond-mat.str-el] 2020.
2. G. M. Eliashberg, Sov. Phys. **11**(3), 696 (1960).
3. A. B. Migdal, Sov. Phys. **34**(7), 996 (1958).
4. Yoichiro Nambu, Phys. Rev. **117**(3), 648 (1960).
5. J. E. Hoffman, K. McElroy, D.-H. Lee, K. M. Lang, H. Eisaki, S. Uchida, and J. C. Davis, Science **297**, 1148 (2002); DOI: 10.1126/science.1072640.
6. Andrea Damascelli, Zahid Hussain, and Zhi-Xun Shen, Rev. Mod. Phys. **75**, 473 (2003).
7. W. L. McMillan and J. M. Rowell, Phys. Rev. Lett. **14**(4), 108 (1965).
8. J. M. Howell, W. L. McMillan, and W. L. Feldmann, Phys. Rev. B **3**(12), 4065 (1971).

9. M. R. Norman, H. Ding, H. Fretwell, M. Randeria, and J. C. Campuzano, *Phys. Rev. B* **60**(10), 7585 (1999).
10. Andrey V. Chubukov and Jörg Schmalian, *Phys. Rev. B* **101**(12), 180510(R) (2020).
11. T. Kondo, Y. Hamaya, A. D. Palczewski, T. Takeuchi, J. S. Wen, Z. J. Xu, G. Gu, J. Schmalian, and A. Kaminski, *Nature Phys.* **7**, 21 (2011).
12. T. Kondo, R. Khasanov, T. Takeuchi, J. Schmalian, and A. Kaminski, *Nature (London)* **457**, 296 (2009).
13. Shiro Sakai, Marcello Civelli, Yusuke Nomura, and Masatoshi Imada, *Phys. Rev. B* **92**, 180503(R) (2015).
14. Shiro Sakai, Marcello Civelli, and Masatoshi Imada, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 057003 (2016).
15. Shiro Sakai, Marcello Civelli, and Masatoshi Imada, *Phys. Rev. B* **94**, 115130 (2016).
16. A. Abanov, A. V. Chubukov, and J. Schmalian, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **117–118**, 129 (2001).
17. Yu. A. Izyumov, *Adv. Phys.* **14**(56), 569 (1965).
18. V. J. Emery and S. A. Kivelson, *Nature* **374**, 434 (1995).
19. D. Bormann and H. Beck, *J. Stat. Phys.* **76**, 361 (1994).
20. А. Г. Грошев, А. К. Аржников, *ЖЭТФ* **157**, 295 (2020).
21. P. Curty and H. Beck, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 796 (2000).
22. P. Curty and H. Beck, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 257002 (2003).
23. A. G. Groshev and A. K. Arzhnikov, *J. Phys.: Condens. Matter* **33**, 215604 (2021).
24. Н. Б. Иванова, С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов, И. М. Ерёмин, Н. В. Казак, *УФН* **179**, 837 (2009).
25. P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
26. D. J. Scalapino, E. Loh, and J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **34**(11), 8190(R) (1986).
27. J. R. Schrieffer, X. G. Wen, and S. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **39**(16), 11663 (1989).
28. Ю. А. Изюмов, *УФН* **169**, 225 (1999).
29. D. J. Scalapino, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1383 (2012).
30. N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1136 (1966); P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.* **158**, 383 (1967); S. Coleman, *Commun. Math. Phys.* **31**, 264 (1973).
31. G. Su, A. Schadschneider, and J. Zittartz, *Phys. Lett. A* **230**,99 (1997).
32. G. Su and M. Suzuki, *Phys. Rev. B* **58**, 117 (1998).
33. В. Л. Березинский, *ЖЭТФ* **59**, 907 (1970); J. Kosterlitz and D. Thouless, *J. Phys. C* **6** 1181 (1973).
34. A. G. Groshev and A. K. Arzhnikov, *Europhys. Lett.* **102**, 57005 (2013).
35. A. G. Groshev and A. K. Arzhnikov, *J. Phys.: Condens. Matter* **30**, 185801 (2018).
36. V. J. Emery and S. A. Kivelson, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3253 (1995).
37. T. K. Lee and S. Feng, *Phys. Rev. B* **41**, 11110 (1990).
38. М. А. Тимиргазин, V. F. Gilmutdinov, and A. K. Arzhnikov, *Physica C* **557**, 7 (2019).