

ОПТИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ПСЕВДОЩЕЛЕВОГО СОСТОЯНИЯ

*М. В. Садовский**, *Н. А. Стригина***

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

Поступила в редакцию 28 марта 2002 г.

Рассматривается двумерная модель псевдощелевого состояния, основанная на картине сильного рассеяния электронов на флуктуациях ближнего порядка «диэлектрического» типа (антиферромагнитных или типа волн зарядовой плотности). Построена система рекуррентных уравнений для одночастичной функции Грина и вершинной части, описывающей взаимодействие электронов с внешним полем, учитывающая все фейнмановские диаграммы для рассеяния электронов на флуктуациях ближнего порядка. Приводятся результаты детальных расчетов оптической проводимости для различных форм (топологий) поверхности Ферми, демонстрирующие как эффекты образования псевдощели в электронном спектре, так и эффекты локализации. Полученные результаты находятся в качественном соответствии с экспериментальными данными для недодопированных ВТСП-купратов.

PACS: 74.25.-q, 74.25.Jb, 74.72.-h, 74.20.Mn

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из центральных вопросов физики высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) на основе оксидов меди является выяснение природы так называемого псевдощелевого состояния [1, 2], существующего в широкой области фазовой диаграммы. Предпочтительным сценарием формирования псевдощелевого состояния в ВТСП-оксидах является, с нашей точки зрения [2], картина, основанная на существовании в этой области фазовой диаграммы сильного рассеяния носителей тока на флуктуациях ближнего порядка «диэлектрического» типа (антиферромагнитных (AFM) или типа волн зарядовой плотности (CDW)). Это рассеяние происходит, в основном, в окрестности характерного вектора $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ (a — постоянная двумерной решетки), соответствующего удвоению периода (вектор антиферромагнетизма) и является предвестником перестройки спектра, возникающей при установлении дальнего AFM-порядка. Соответственно, в этой предпереходной области фазовой диаграммы возникает существенно нефермижидкост-

ная перестройка электронного спектра в определенных областях импульсного пространства в окрестности так называемых горячих точек на поверхности Ферми [2], где происходит ее эффективное разрушение. Прямое экспериментальное подтверждение такой картины формирования псевдощели получено в недавних ARPES-экспериментах на системе $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$ [3], в которых удалось изучить упомянутую перестройку спектра в окрестности отдельных горячих точек.

В рамках описанного сценария формирования псевдощелевого состояния удается построить упрощенную «почти точно» решаемую модель, описывающую основные особенности этого состояния [2] и учитывающую вклад всех фейнмановских диаграмм теории возмущений по рассеянию на (гауссовых) флуктуациях ближнего порядка с характерным импульсом рассеяния из окрестности \mathbf{Q} , определяемой соответствующей корреляционной длиной ξ [4, 5]. Эта модель основана на обобщении на двумерный случай модели образования псевдощели в одномерной системе за счет развитых флуктуаций ближнего порядка CDW-типа, предложенной ранее одним из авторов настоящей работы [6, 7]. Упрощенный вариант такой двумерной модели (модель горячих участков) использовался в работах [8–11] для описа-

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

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

ния основных свойств сверхпроводящего состояния, формирующегося на фоне псевдощели диэлектрического типа.

В работах [4, 5] анализировались, в основном, одночастичные свойства рассматриваемой модели, такие как спектральная плотность и плотность состояний. Замечательной особенностью этой модели является возможность суммирования всего ряда фейнмановских диаграмм также и в двухчастичной задаче вычисления вершинной части, описывающей отклик системы на внешнее возмущение (например электромагнитное поле) [6, 12, 13]. В упрощенном варианте модели горячих участков на поверхности Ферми соответствующие расчеты оптической проводимости в двумерном случае были проведены в работе [14]. Целью настоящей работы является детальное рассмотрение как теоретических основ расчета двухчастичных свойств в рамках общей модели [4, 5], так и проведение расчетов оптической проводимости для различных геометрий (топологий) поверхности Ферми, возникающих при использовании достаточно реалистического вида спектра свободных электронов.

2. МОДЕЛЬ ГОРЯЧИХ ТОЧЕК

2.1. Описание модели и «почти точное» решение для одночастичной функции Грина

В модели «почти антиферромагнитной» ферми-жидкости, активно используемой для объяснения микроскопического механизма ВТСП [15, 16], вводится эффективное взаимодействие электронов со спиновыми флуктуациями ближнего АФМ-порядка, описываемое динамической спиновой восприимчивостью $\chi_{\mathbf{q}}(\omega)$, форма которой определяется из подгонки к данным ЯМР-экспериментов [16]:

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

где g — константа связи, ξ — корреляционная длина спиновых флуктуаций, $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ — вектор антиферромагнитного упорядочения в диэлектрической фазе, ω_{sf} — характерная частота спиновых флуктуаций. Динамическая восприимчивость, а с ней и эффективное взаимодействие (1), имеют максимум в области $\mathbf{q} \sim \mathbf{Q}$, соответственно в системе возникает два типа квазичастиц — горячие, импульсы которых расположены в окрестности горячих точек на поверхности Ферми (рис. 1), и холодные, импульсы которых находятся вблизи участков поверхности Ферми, окружающих диагонали зоны Бриллюэна [4]. Дело в том, что квазичастицы из

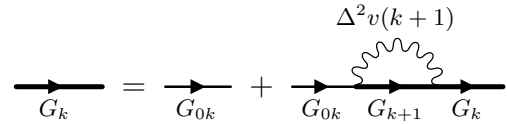


Рис. 1. Диаграммное представление рекуррентного соотношения для функции Грина

окрестности горячих точек сильно рассеиваются на вектор упорядочения \mathbf{Q} за счет взаимодействия со спиновыми флуктуациями (1), тогда как для частиц с импульсами вдали от горячих точек это взаимодействие является достаточно слабым.

Имея в виду область достаточно высоких температур $\pi T \gg \omega_{sf}$, можно пренебречь спиновой динамикой [4], ограничившись в (1) статическим приближением. Существенное упрощение расчетов, позволяющее проанализировать вклад высших порядков теории возмущений, возникает, если перейти от (1) к модельному взаимодействию следующего вида [5]:

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

где Δ — эффективный параметр размерности энергии. В дальнейшем, как и в работах [4, 5], параметры Δ и ξ рассматриваются как феноменологические (определяемые из эксперимента). Выражение (2) качественно вполне аналогично статическому пределу (1) и мало от него отличается количественно в наиболее интересной области $|\mathbf{q} - \mathbf{Q}| < \xi^{-1}$, определяющей рассеяние в окрестности горячих точек.

Спектр исходных (свободных) квазичастиц возьмем в виде [4]

$$\xi_{\mathbf{p}} = -2t(\cos p_x a + \cos p_y a) - 4t' \cos p_x a \cos p_y a - \mu, \quad (3)$$

где t — интеграл переноса между ближайшими соседями, а t' — между вторыми ближайшими соседями на квадратной решетке, μ — химический потенциал. Это выражение дает достаточно хорошее приближение к результатам зонных расчетов реальных ВТСП-систем. Например, для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ имеем $t = 0.25$ эВ, $t' = -0.45t$ [4]. Химический потенциал μ фиксируется концентрацией носителей. В данной работе мы рассмотрим различные характерные соотношения параметров t и t' , приводящие к различным формам (топологиям) поверхности Ферми, имея в виду анализ общей картины, не обязательно связанной с известными конкретными системами.

В работе [5] был проведен детальный анализ вкладов всех диаграмм для собственно-энергети-

ческой части электрона $\Sigma(\varepsilon_n \mathbf{p})$. Оказывается, что в случае, когда знаки проекций скоростей в горячих точках на поверхности Ферми $v_x^{\mathbf{p}}$ и $v_x^{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}$, а также $v_y^{\mathbf{p}}$ и $v_y^{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}$ совпадают, фейнмановские интегралы в диаграмме любого порядка определяются только вкладами от полюсов лоренцианов в (2) и легко вычисляются¹⁾. В этом случае вклад произвольной диаграммы для собственно-энергетической части N -го порядка по взаимодействию с флуктуациями (2) имеет вид ($\varepsilon_n = (2n + 1)\pi T$)

$$\Sigma^{(N)}(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \Delta^{2N} \prod_{j=1}^{2N-1} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_j(\mathbf{p}) + in_j v_j \kappa}, \quad (4)$$

где $\xi_j(\mathbf{p}) = \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}$ и $v_j = |v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^x| + |v_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^y|$ для нечетных j и $\xi_j(\mathbf{p}) = \xi_{\mathbf{p}}$ и $v_j = |v_{\mathbf{p}}^x| + |v_{\mathbf{p}}^y|$ для четных j , $\kappa = \xi^{-1}$. Здесь n_j — число линий взаимодействия, охватывающих j -ю функцию Грина в данной диаграмме, для определенности полагаем, что $\varepsilon_n > 0$.

В работе [5] были подробно проанализированы условия, при которых выполняются указанные требования для скоростей в точках поверхности Ферми, связанных вектором \mathbf{Q} (горячих точках), и приведены примеры соответствующих геометрий поверхности Ферми, реализующихся при определенных соотношениях параметров t и t' в (3). В этих случаях выражение (4) является практически точным. Во всех остальных случаях (при других соотношениях t и t') используем выражение (4) в качестве удачного анзаца для вклада произвольного порядка, получающегося простым продолжением спектра по параметрам t и t' в интересующую нас область. Даже в наиболее неблагоприятном одномерном случае [7], соответствующем квадратной форме поверхности Ферми, возникающей из (3) при $t' = 0$ и $\mu = 0$, использование этого анзаца дает результаты (например для плотности состояний), очень близкие количественно [17] к результатам точного численного моделирования этой задачи [18]. В этом смысле мы и употребляем термин «почти точное» решение.

В случае использования анзаца (4) оказывается, что вклад любой диаграммы с пересечением линий взаимодействия оказывается равным вкладу некоторой диаграммы того же порядка без пересечения этих линий [7]. Поэтому фактически можно учитывать лишь диаграммы без пересечения линий взаимодействия, учитывая вклад диаграмм с пересечением с помощью дополнительных комбинаторных мно-

¹⁾ Аналогичная ситуация возникает и в том частном случае, когда скорости в горячих точках, связанных вектором \mathbf{Q} , в точности перпендикулярны [4].

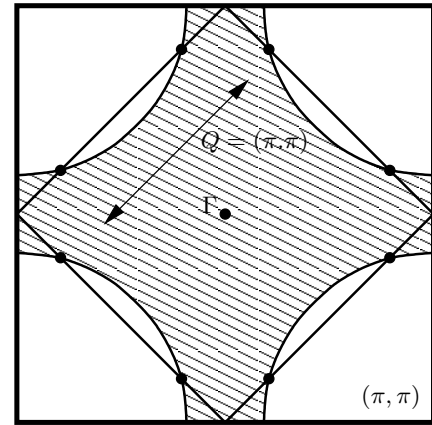


Рис. 2. Поверхность Ферми с горячими точками, связанными импульсом рассеяния порядка $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$

жителей, сопоставляемых с «начальными» вершинами (или линиями) взаимодействия [7]. В результате для одноэлектронной функции Грина возникает следующее рекуррентное соотношение (представление в виде цепной дроби [7]), которое дает эффективный алгоритм для последующих численных расчетов [5]:

$$G_k(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_k(\mathbf{p}) + ikv_k \kappa - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}})} \equiv \{G_{0k}^{-1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}})\}^{-1}, \quad (5)$$

$$\Sigma_k(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) = \Delta^2 \frac{v(k)}{i\varepsilon_n - \xi_k(\mathbf{p}) + ikv_k \kappa - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}})}. \quad (6)$$

Графически это рекуррентное представление для функции Грина показано на рис. 2. Интересующая нас физическая функция Грина $G(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) = G_{k=0}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}})$. В (5) мы ввели также вспомогательное обозначение:

$$G_{0k}(\varepsilon_n \xi_{\mathbf{p}}) = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_k(\mathbf{p}) + ikv_k \kappa}. \quad (7)$$

Комбинаторный множитель

$$v(k) = k \quad (8)$$

в рассматриваемом нами случае соизмеримых флуктуаций с $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ [7], если не учитывать их спиновой структуры (флуктуации CDW-типа). Если учесть спиновую структуру взаимодействия в рамках модели почти антиферромагнитной ферми-жидкости (спин-фермионная модель [4]), то комбинаторика диаграмм становится более сложной. В

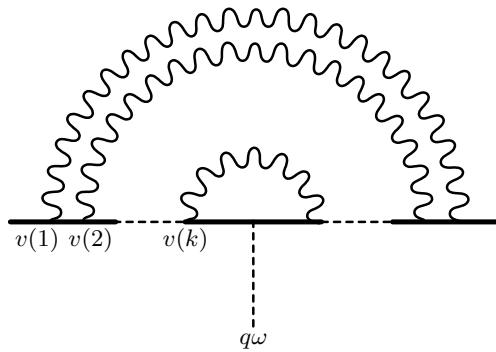


Рис. 3. Общий вид поправки высшего порядка для вершинной части

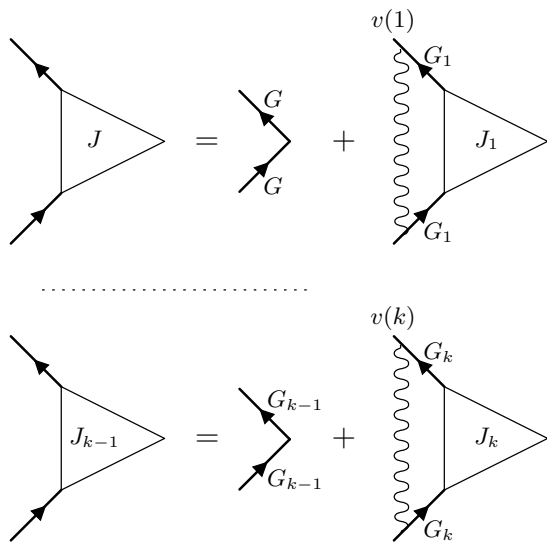


Рис. 4. Рекуррентные уравнения для вершинной части

частности, рассеяние с сохранением спина дает формально соизмеримую комбинаторику, тогда как рассеяние с переворотом спина описывается диаграммами несоизмеримого случая («заряженного» случайного поля в терминах работы [4]). В результате рекуррентное соотношение для функции Грина по-прежнему имеет вид (6), но комбинаторный множитель $v(k)$ имеет вид [4]

$$v(k) = \begin{cases} \frac{k+2}{3} & \text{при нечетных } k, \\ \frac{k}{3} & \text{при четных } k. \end{cases} \quad (9)$$

Ниже ограничимся рассмотрением случаев (8) и (9), подробности, относящиеся к случаю несоизмеримых флуктуаций CDW-типа, можно найти в [5–7].

Полученное решение для одночастичной функ-

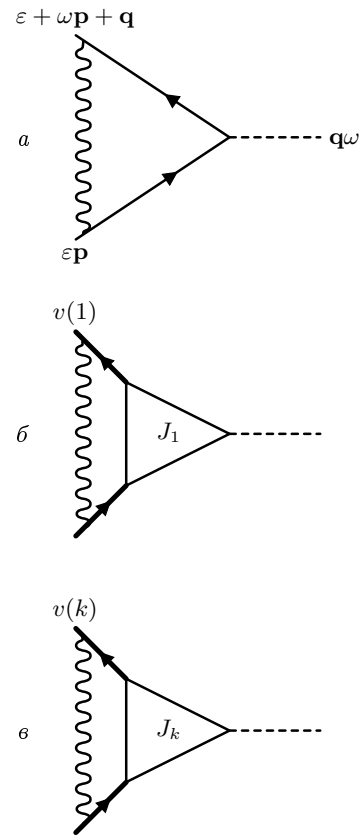


Рис. 5. Простейшие поправки к вершинным частям

ции Грина является точным в пределе $\xi \rightarrow \infty$, когда можно найти решение в аналитическом виде [4, 6]. Оно точно и в тривиальном пределе $\xi \rightarrow 0$, когда при фиксированном значении Δ взаимодействие (2) просто исчезает. Для всех промежуточных значений ξ оно дает, как отмечено выше, очень хорошую интерполяцию, являясь практически точным для определенных геометрий поверхности Ферми, возникающих для конкретных областей изменения параметров спектра (3) [5].

С помощью (5) нетрудно провести численные расчеты одноэлектронной спектральной плотности и плотности состояний:

$$\begin{aligned} A(E\mathbf{p}) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im } G^R(E\mathbf{p}), \\ N(E) &= \sum_{\mathbf{p}} A(E\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (10)$$

В (10) величина $G^R(E\mathbf{p})$ представляет собой запаздывающую функцию Грина, полученную обычным аналитическим продолжением (5) с мацубаровских частот на вещественную ось E . Детали соответств-

ющих расчетов и обсуждение полученных результатов для рассматриваемой нами двумерной модели можно найти в цитированных выше работах [4, 5].

2.2. Рекуррентные уравнения для вершинной части и проводимость

Для расчета оптической проводимости требуется вычисление вершинной части, описывающей электромагнитный отклик системы. Эта вершина может быть найдена методом, предложенным для аналогичной одномерной модели в работах [12, 13]. Любой график для неприводимой вершинной части может быть получен с помощью вставки линии внешнего поля в соответствующий график для собственно-энергетической части [6]. Поскольку в нашей модели можно учитывать только диаграммы для собственно-энергетической части без пересечения линий взаимодействия с дополнительными комбинаторными множителями $v(k)$ в начальных вершинах, при вычислении вершинных поправок достаточно рассмотреть только диаграммы типа показанной на рис. 3. Отсюда сразу же возникает система рекуррентных уравнений для вершинных частей, показанная графически на рис. 4. Чтобы получить соответствующие аналитические выражения, рассмотрим простейшую вершинную поправку, показанную на рис. 5а. Проводя вычисления при $T = 0$ в RA -канале, легко получаем соответствующий вклад в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_1^{(1)RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega, \mathbf{p} + \mathbf{q}) &= \\ &= \sum_{\mathbf{K}} V_{eff}(\mathbf{K}) G_{00}^A(\varepsilon\xi_{\mathbf{p}-\mathbf{K}}) G_{00}^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}-\mathbf{K}+\mathbf{q}}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \Delta^2 \{ G_{00}^A(\varepsilon, \xi_1(\mathbf{p}) + iv_1\kappa) - \\ &\quad - G_{00}^R(\varepsilon + \omega, \xi_1(\mathbf{p} + \mathbf{q}) - iv_1\kappa) \} \times \\ &\quad \times \frac{1}{\omega + \xi_1(\mathbf{p}) - \xi_1(\mathbf{p} + \mathbf{q})} = \\ &= \Delta^2 G_{00}^A(\varepsilon, \xi_1(\mathbf{p}) + iv_1\kappa) \times \\ &\quad \times G_{00}^R(\varepsilon + \omega, \xi_1(\mathbf{p} + \mathbf{q}) - iv_1\kappa) \times \\ &\quad \times \left\{ 1 + \frac{2iv_1\kappa}{\omega + \xi_1(\mathbf{p}) - \xi_1(\mathbf{p} + \mathbf{q})} \right\} \equiv \\ &\equiv \Delta^2 G_{01}^A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) G_{01}^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \times \\ &\quad \times \left\{ 1 + \frac{2iv_1\kappa}{\omega + \xi_1(\mathbf{p}) - \xi_1(\mathbf{p} + \mathbf{q})} \right\}, \quad (11) \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} G_{00}^A(\varepsilon\xi_{\mathbf{p}}) G_{00}^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) &= \\ &= \{ G_{00}^A(\varepsilon\xi_{\mathbf{p}}) - G_{00}^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \} \times \\ &\quad \times \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{p}}}. \quad (12) \end{aligned}$$

«Одевая» внутренние электронные линии, переходим к диаграмме рис. 5б и, используя тождество

$$\begin{aligned} G^A(\varepsilon\xi_{\mathbf{p}}) G^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) &= \\ &= \{ G^A(\varepsilon\xi_{\mathbf{p}}) - G^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \} \times \\ &\quad \times \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \xi_{\mathbf{p}} - \Sigma_1^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) + \Sigma_1^A(\varepsilon\xi_{\mathbf{p}})}, \quad (13) \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_1^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega, \mathbf{p} + \mathbf{q}) &= \Delta^2 v(1) G_1^A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) G_1^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \times \\ &\quad \times \left\{ 1 + \frac{2iv_1\kappa}{\omega - \xi_1(\mathbf{p} + \mathbf{q}) + \xi_1(\mathbf{p}) - \Sigma_2^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) + \Sigma_2^A(\varepsilon\xi_{\mathbf{p}})} \right\} \times \\ &\quad \times J_1^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega, \mathbf{p} + \mathbf{q}). \quad (14) \end{aligned}$$

Здесь мы предположили, что линия взаимодействия в диаграмме для вершинной поправки рис. 5б «преобразует» собственно-энергетические части $\Sigma_1^{R,A}$ внутренних электронных линий в $\Sigma_2^{R,A}$ в соответ-

ствии с использованным выше основным приближением для собственно-энергетической части (см. рис. 2)²⁾.

²⁾ Мотивировкой в пользу такой записи является то обстоятельство, что в результате обеспечивается выполнение обсуждаемого ниже тождества Уорда.

Теперь не представляет труда выписать аналогичное выражение для графика общего вида, показанного на рис. 5в:

$$\begin{aligned}
 J_k^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega, \mathbf{p} + \mathbf{q}) &= \Delta^2 v(k) G_k^A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) G_k^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \times \\
 &\times \left\{ 1 + \frac{2iv_k \kappa k}{\omega - \xi_k(\mathbf{p} + \mathbf{q}) + \xi_k(\mathbf{p}) - \Sigma_{k+1}^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) + \Sigma_{k+1}^A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}})} \right\} \times \\
 &\times J_k^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega, \mathbf{p} + \mathbf{q}). \quad (15)
 \end{aligned}$$

Соответственно, фундаментальное рекуррентное соотношение для вершинной части рис. 4 записывается в виде

$$\begin{aligned}
 J_{k-1}^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega, \mathbf{p} + \mathbf{q}) &= 1 + \Delta^2 v(k) G_k^A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}}) G_k^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \times \\
 &\times \left\{ 1 + \frac{2iv_k \kappa k}{\omega - \xi_k(\mathbf{p} + \mathbf{q}) + \xi_k(\mathbf{p}) - \Sigma_{k+1}^R(\varepsilon + \omega, \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) + \Sigma_{k+1}^A(\varepsilon, \xi_{\mathbf{p}})} \right\} \times \\
 &\times J_k^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega, \mathbf{p} + \mathbf{q}). \quad (16)
 \end{aligned}$$

Физическая вершина $J_k^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega, \mathbf{p} + \mathbf{q})$ определяется как $J_{k=0}^{RA}(\varepsilon\mathbf{p}; \varepsilon + \omega, \mathbf{p} + \mathbf{q})$. Рекуррентная процедура (16) учитывает все графики теории возмущений для вершинной части. При $\kappa \rightarrow 0$ ($\xi \rightarrow \infty$) выражение (16) сводится к ряду, изучавшемуся в работах [6] (см. также [4]), который удается точно просуммировать в аналитическом виде. Стандартному лестничному приближению в нашей схеме рассмотрения соответствует случай, когда все комбинаторные множители $v(k)$ в (16) полагаются равными единице [13].

Проводимость системы выражается [19] через запаздывающую функцию отклика плотность–плотность $\chi^R(q, \omega)$:

$$\sigma(\omega) = e^2 \lim_{q \rightarrow 0} \left(-\frac{i\omega}{q^2} \right) \chi^R(q, \omega), \quad (17)$$

где e — заряд электрона,

$$\chi^R(q, \omega) = \omega \{ \Phi^{RA}(0, q, \omega) - \Phi^{RA}(0, 0, \omega) \}, \quad (18)$$

а двухчастичная функция Грина $\Phi^{RA}(\varepsilon, q, \omega)$ определяется петлевым графиком, показанным на рис. 6.

Прямые численные расчеты подтверждают, что рекуррентная процедура (16) удовлетворяет точно соотношению, следующему (при $\omega \rightarrow 0$) из тождества Уорда [19]:

$$\Phi^{RA}(0, 0, \omega) = -N(E_F)/\omega, \quad (19)$$

где $N(E_F)$ — плотность состояний на уровне Ферми $E_F = \mu$. Это является основным аргументом

в пользу анзаца, использованного при выводе (14), (15) и (16).

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

$$\begin{aligned}
 \sigma(\omega) &= \frac{e^2 \omega^2}{\pi} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} \sum_{\mathbf{p}} \left\{ G^R\left(\frac{\omega}{2}, \mathbf{p} + \frac{\mathbf{q}}{2}\right) \times \right. \\
 &\times J^{RA}\left(\frac{\omega}{2}, \mathbf{p} + \frac{\mathbf{q}}{2}; -\frac{\omega}{2}, \mathbf{p} - \frac{\mathbf{q}}{2}\right) G^A\left(-\frac{\omega}{2}, \mathbf{p} - \frac{\mathbf{q}}{2}\right) - \\
 &\left. - G^R\left(\frac{\omega}{2}, \mathbf{p}\right) J^{RA}\left(\frac{\omega}{2}, \mathbf{p}; -\frac{\omega}{2}, \mathbf{p}\right) \times \right. \\
 &\left. \times G^A\left(-\frac{\omega}{2}, \mathbf{p}\right) \right\}, \quad (20)
 \end{aligned}$$

где учли еще дополнительный множитель 2, связанный с суммированием по спину.

Численные расчеты проводились непосредственно по формулам (20), (16), (5), причем рекуррентная процедура обрывалась на достаточно высоком «этаже» k , где все Σ_k и J_k полагались равными нулю. Интегрирование в (20) осуществлялось по всей двумерной зоне Бриллюэна. Исходный спектр электронов брался в виде (3). Импульсы интегрирования естественным образом приводятся к безразмерному виду с помощью постоянной решетки a , а все энергии далее приводятся в единицах интеграла переноса t . Проводимость при этом измеряется в единицах универсальной проводимости двумерной системы $\sigma_0 = e^2/\hbar = 2.5 \cdot 10^{-4}$ Ом⁻¹, а плотность состояний — в единицах $1/ta^2$.

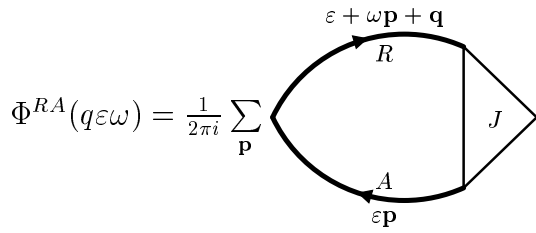


Рис. 6. Диаграммное представление для двухчастичной функции $\Phi^{RA}(q\omega)$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ОБСУЖДЕНИЕ

Оптическая проводимость и другие характеристики рассматриваемой модели вычислялись для различных значений параметров, определяющих спектр свободных квазичастиц (3) и значения $\Delta = t$. Рассмотрим сначала случай поверхностей Ферми вблизи половинного заполнения зоны $\mu = 0$ и $t' = 0$, которые показаны (для первого квадранта зоны Бриллюэна) на рис. 7а. Для $\mu = 0$ и $t' = 0$ поверхность Ферми представляет собой, как хорошо известно, квадрат (полный «нестинг»), так что ситуация, в известном смысле, эквивалентна одномерному случаю, рассматривавшемуся в [6, 12, 13]. Результаты расчетов для действительной части оптической проводимости в рассматриваемой здесь двумерной модели для случая спин-фермионной комбинаторики диаграмм и различных значений корреляционной длины ближнего AFM-порядка (параметра $\kappa = \xi^{-1}$, где ξ измеряется в единицах постоянной решетки a) приведены на рис. 8. Качественный вид проводимости вполне аналогичен найденному для одномерной модели (для случая несоизмеримых флуктуаций CDW-типа) в работах [12, 13]. Он характеризуется наличием ярко выраженного пика поглощения через псевдощель (соответствующие кривые для плотности состояний, демонстрирующие наличие псевдощели вблизи уровня Ферми, показаны на вставке на рис. 8) при $\omega \sim 2\Delta$ и наличием максимума в области малых частот, связанного с локализацией носителей в статическом случайном поле AFM-флуктуаций. Локализационная природа этого максимума подтверждается его превращением в характерный друдевский пик (с максимумом при $\omega = 0$) при расчетах в лестничном приближении, когда комбинаторные множители $v(k) = 1$, что соответствует «выключению» вклада перекрестных графиков, непосредственно приводящих к двумерной андерсоновской локализации [19, 20]. Каче-

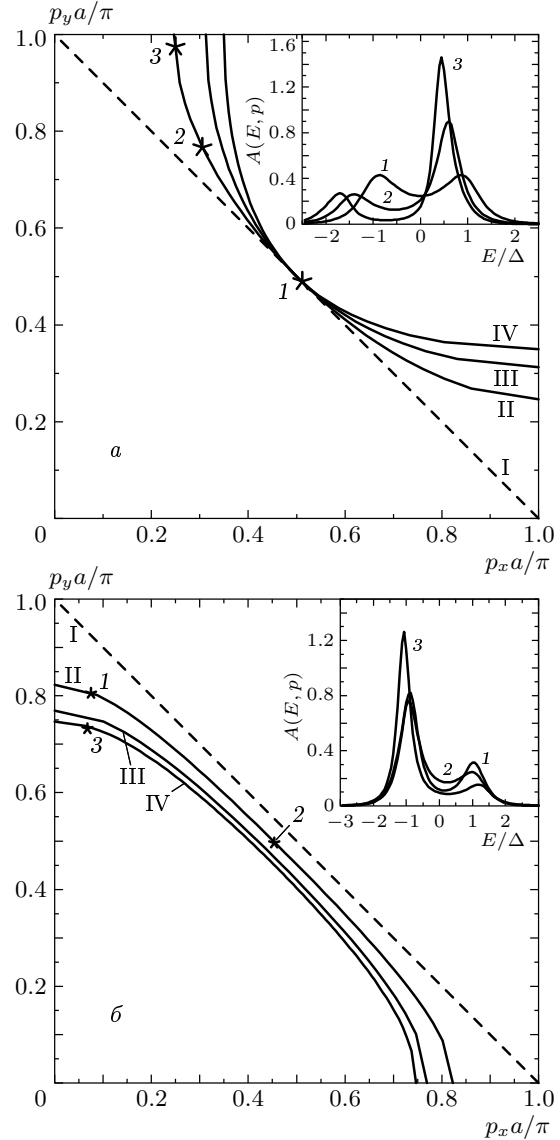


Рис. 7. Поверхности Ферми для различных значений параметра t' и химического потенциала μ : *a* соответствует $\mu = 0$ и $t'/t = 0$ (I), -0.2 (II), -0.4 (III), -0.6 (IV); *б* соответствует $t' = 0$ и $\mu/t = 0$ (I), -0.3 (II), -0.5 (III), -0.6 (IV). На вставках изображены энергетические зависимости спектральной плотности для спин-фермионной модели при $\kappa a = 0.1$ в точках импульсного пространства, отмеченных звездочками

ственный вид проводимости в этом случае также вполне аналогичен найденному в [13]. Сужение локализационного пика при уменьшении корреляционной длины флуктуаций объясняется, как это отмечалось в [13], уменьшением эффективного взаимодействия (2) при уменьшении ξ (при фиксированной

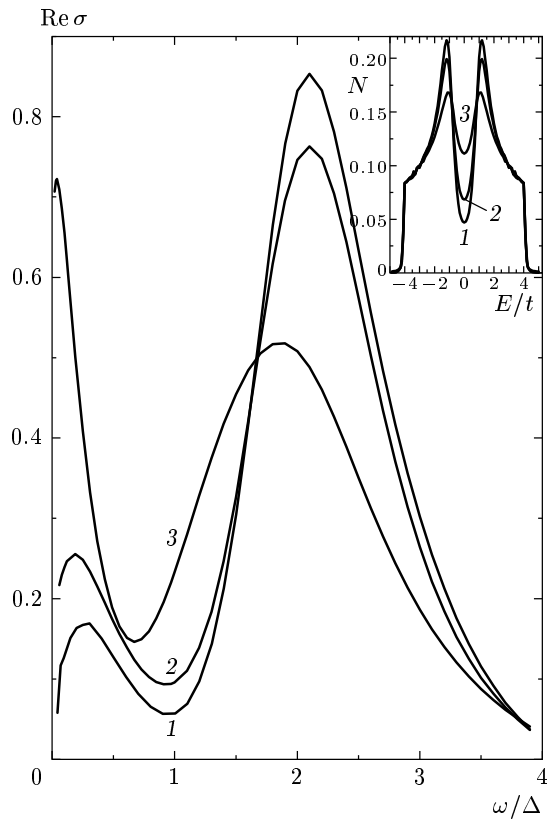


Рис. 8. Действительная часть оптической проводимости в спин-фермионной модели для случая квадратной формы поверхности Ферми ($\mu = 0$, $t' = 0$) при различных значениях обратной корреляционной длины ближнего порядка: $\kappa a = 0.1 - 1$, $0.2 - 2$, $0.5 - 3$. На вставке показаны соответствующие плотности состояний

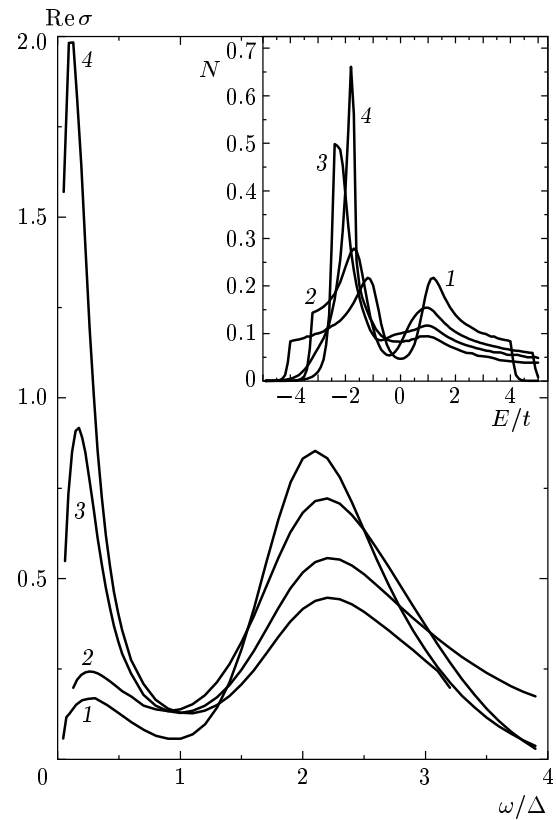


Рис. 9. Действительная часть оптической проводимости в спин-фермионной модели при $\mu = 0$ и $\kappa a = 0.1$ для различных форм поверхностей Ферми, получающихся из квадратной при учете интеграла переноса: $t'/t = 0 - 1$, $-0.2 - 2$, $-0.4 - 3$, $-0.6 - 4$. На вставке показаны соответствующие плотности состояний

величине Δ), что приводит к общему уменьшению рассеяния, в том числе и на холодной части поверхности Ферми. Отметим, что найденное здесь поведение плотности состояний и оптической проводимости находится в полном качественном соответствии с результатами, полученными для аналогичной двумерной модели пайерлсовского перехода квантовым методом Монте-Карло в недавней работе [21].

Если теперь, сохраняя значение $\mu = 0$, «включить» интеграл переноса t' между вторыми ближайшими соседями в (3), мы перейдем к отличным от квадрата формам поверхности Ферми, показанным на рис. 7а. На этом рисунке (см. вставку) показано поведение спектральной плотности (10) в нескольких характерных точках на этих поверхностях Ферми. Видно, что она имеет характерное нефермижидкостное поведение типа изучавшегося в работах [4, 5] практически везде на поверхности Ферми,

пока форма этой поверхности не очень сильно отличается от квадратной, несмотря на то что горячая точка в рассматриваемой ситуации лежит строго на пересечении поверхности Ферми с диагональю зоны Бриллюэна. Соответствующие кривые для действительной части оптической проводимости показаны на рис. 9, на котором на вставке приведен вид соответствующих плотностей состояний. Видно, что по мере отхода от ситуации полного «нестинга» пик поглощения через псевдощель уменьшается, а локализационный пик (в соответствии с общим правилом сумм для проводимости) растет. Заметим, однако, что пик поглощения через псевдощель остается достаточно заметным, даже когда псевдощель в плотности состояний практически незаметна (кривые 4 на рис. 9).

Вернемся к случаю $t' = 0$, но будем менять величину μ , переходя к поверхностям Ферми, фор-

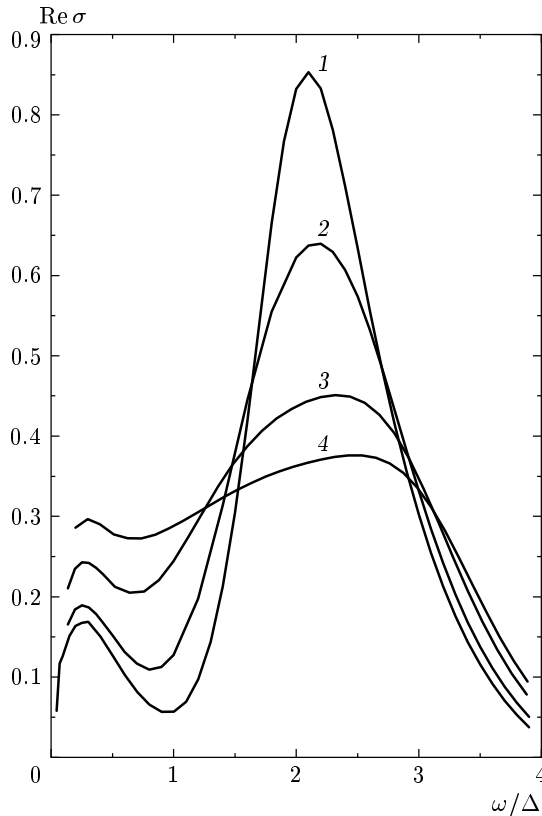


Рис. 10. Действительная часть оптической проводимости в спин-фермионной модели при $t' = 0$ и $\kappa a = 0.1$ для различных форм поверхностей Ферми, получающихся из квадратной при отходе от половинного заполнения зоны. Химический потенциал соответствует значениям $\mu/t = 0 - 1, -0.3 - 2, -0.5 - 3, -0.6 - 4$

ма которых достаточно близка к квадратной, показанным на рис. 7б. Строго говоря, горячие точки на этих поверхностях Ферми вообще отсутствуют, однако спектральная плотность, показанная на вставке на рис. 7б, сохраняет характерный псевдощелевой вид. Соответствующие зависимости для действительной части оптической проводимости показаны на рис. 10.

Перейдем теперь к рассмотрению различных геометрий поверхности Ферми с горячими точками, показанных на рис. 11. На рис. 12, 13 показана действительная часть оптической проводимости, рассчитанная (при различных комбинаториках диаграмм) для двух характерных значений $t' = -0.4t$ и $t' = -0.6t$ при значении химического потенциала $\mu = 0$, когда горячие точки находятся на диагонали зоны Бриллюэна (кривая 5 на рис. 11а и кривая 4 на рис. 11б). Видно, что псевдощелевое поведение проводимости

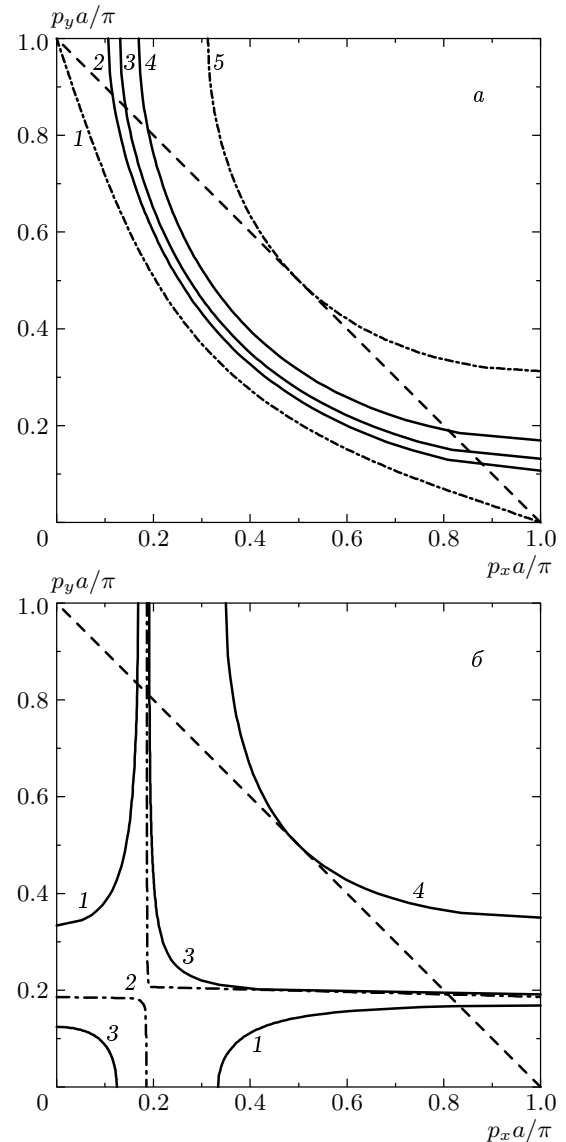


Рис. 11. Поверхности Ферми для различных значений параметра t' и химического потенциала μ : а соответствует случаю $t'/t = -0.4$, что характерно для ВТСП-купратов, и значениям $\mu/t = -1.6 - 1, -1.4 - 2, -1.3 - 3, -1.1 - 4, 0 - 5$. Горячие точки существуют при $-1.6 < \mu/t < 0$; б соответствует случаю $t'/t = -0.6$ и значениям $\mu/t = -1.8 - 1, -1.666 - 2, -1.63 - 3, 0 - 4$. Горячие точки существуют при $\mu < 0$. Пунктиром показана граница магнитной зоны Бриллюэна

сохраняется и при практическом отсутствии псевдощели плотности состояний (показанной на вставках на рис. 12, 13). Пунктирной кривой на рис. 12 показаны результаты лестничного приближения, демонстрирующие типичное исчезновение двумерной ло-

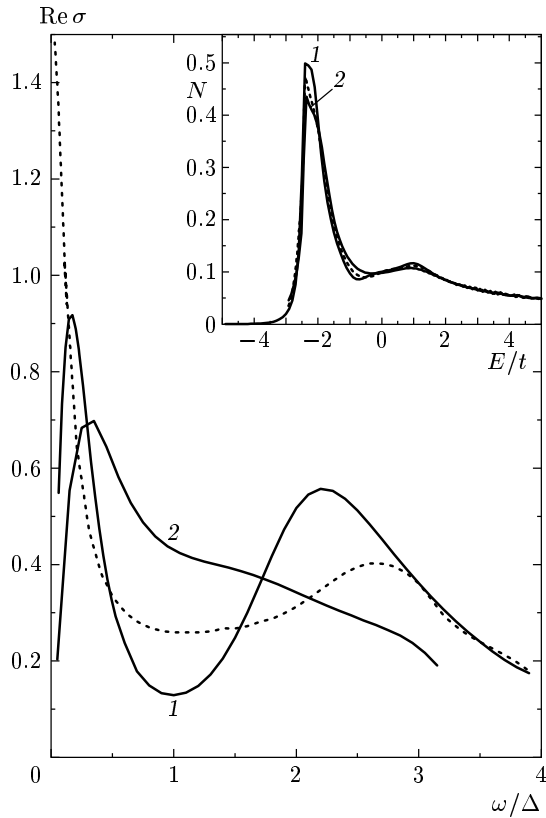


Рис. 12. Действительная часть оптической проводимости при $t'/t = -0.4$ для случая $\mu = 0$ при $\kappa a = 0.1$ для различных комбинаторик диаграмм: 1 — комбинаторика спин-фермионной модели; 2 — соизмеримый случай. Пунктир — лестничная комбинаторика. На вставке приведены соответствующие плотности состояний

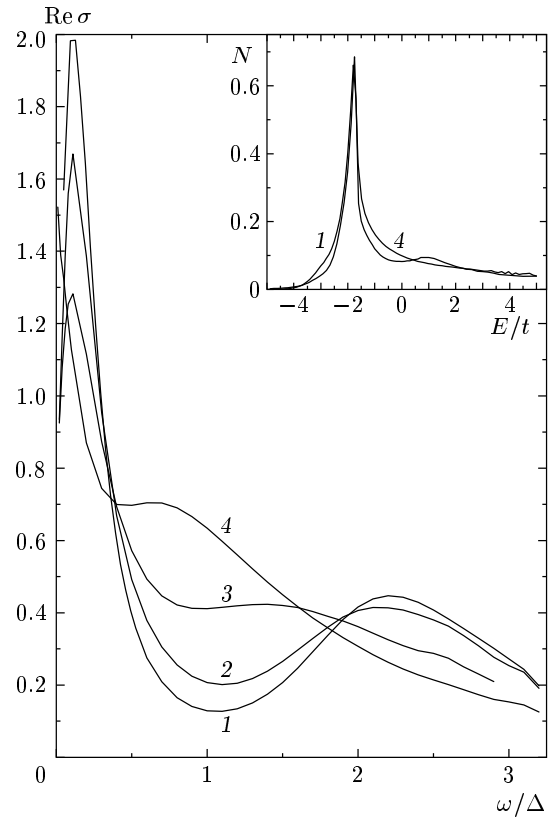


Рис. 13. Действительная часть оптической проводимости в спин-фермионной модели для случая $t'/t = -0.6$, $\mu = 0$ при значениях обратной корреляционной длины $\kappa a = 0.1 - 1, 0.2 - 2, 0.5 - 3, 1 - 4$. На вставке показаны плотности состояний, соответствующие случаям 1 и 4

кализации. На рис. 13 видно, как происходит размытие псевдощелевого максимума проводимости при уменьшении корреляционной длины ближнего порядка.

Для большинства высокотемпературных сверхпроводников на основе оксидов меди характерна геометрия поверхности Ферми, описываемая случаем $t' = -0.4t$ и $\mu = -1.3t$ [4] (показанная кривой 3 на рис. 11a). Результаты расчетов оптической проводимости для этого случая при различных значениях обратной корреляционной длины κ приведены на рис. 14 (для случая спин-фермионной комбинаторики диаграмм). При этом мы ввели дополнительное слабое рассеяние за счет неупругих процессов путем стандартной замены $\omega \rightarrow \omega + i\gamma$ [22], которое приводит к появлению узкого друдевского пика в области частот $\omega < \gamma$ (разрушение двумерной локализации за счет процессов сбоя фазы). Нетрудно убедиться,

что с ростом частоты неупругого рассеяния γ локализационный максимум размывается и переходит в обычный друдевский пик в области малых частот. Максимум поглощения через псевдощель становится более заметным с ростом корреляционной длины ξ (уменьшением параметра κ). На рис. 15 приведены частотные зависимости эффективной частоты рассеяния $1/\tau(\omega)$ и эффективной массы $m^*(\omega)$, определяемых по результатам наших расчетов с помощью обобщенной формулы Друде, часто используемой при обработке экспериментальных данных [1]:

$$\frac{1}{\tau(\omega)} = \frac{\omega_p^2}{4\pi} \operatorname{Re} \left(\frac{1}{\sigma(\omega)} \right), \quad (21)$$

$$\frac{m^*(\omega)}{m} = -\frac{1}{\omega} \frac{\omega_p^2}{4\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{1}{\sigma(\omega)} \right). \quad (22)$$

Здесь ω_p — плазменная частота, m — масса свободного электрона. На рис. 15 видно, что величина $1/\tau(\omega)$ (выраженная на этом рисунке в едини-

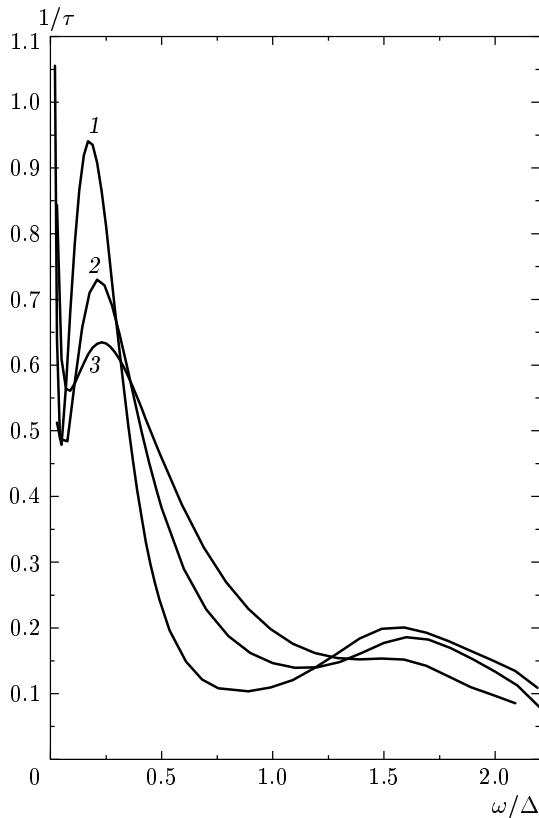


Рис. 14. Действительная часть оптической проводимости в спин-фермионной модели при $t'/t = -0.4$ и $\mu/t = -1.3$ для значений корреляционной длины $ka = 0.05 - 1, 0.1 - 2, 0.2 - 3$. Фактор затухания $\gamma/t = 0.005$

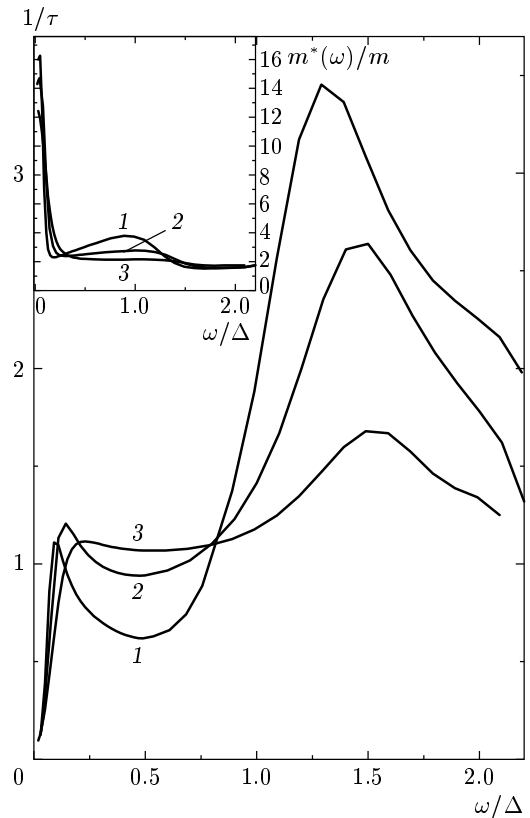


Рис. 15. Обобщенная частота рассеяния и эффективная масса для случая $t'/t = -0.4$ и $\mu/t = -1.3$, характерного для высокотемпературных сверхпроводников. Параметры обобщенной модели Друде получены в спин-фермионной модели при значениях корреляционной длины $ka = 0.05 - 1, 0.1 - 2, 0.2 - 3$. Фактор затухания $\gamma/t = 0.005$

цах $\omega_p^2 \hbar / 4\pi e^2$) демонстрирует достаточно типичное псевдощелевое поведение в области частот $\omega < 2\Delta$. Заметим, что плотность состояний при этом имеет лишь слабо выраженную псевдощель [5] (вставка на рис. 12). На рис. 16 приведены аналогичные результаты для этого же (типичного для ВТСП-оксидов) случая, полученные для модели с комбинаторикой диаграмм, соответствующей соизмеримым флуктуациям CDW -типа. Видно, что в этом случае максимум поглощения через псевдощель почти незаметен.

Как видно на рис. 11б, при изменении химического потенциала в интервале от $\mu = 0$ до $\mu = -1.666t$ поверхность Ферми приобретает плоские участки все больших размеров и превращается при $\mu \approx 1.666t$ практически в крестообразную. Такая поверхность Ферми наблюдалась в ARPES-экспериментах на системе $La_{1.28}Nd_{0.6}Sr_{0.12}CuO_4$ [23, 24]. При этом проекции скоростей в горячих точках, связанных вектором $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$, становятся перпендикулярными.

При $\mu/t = -1.666\dots$ топология поверхности Ферми меняется (рис. 11б) и во всей области $\mu/t < -1.666\dots$ эти проекции имеют одинаковый знак, что обеспечивает точное выполнение нашего основного анзаца (4) для вкладов диаграмм высших порядков [5]. Представляет интерес привести данные расчетов оптической проводимости и в этой области изменения μ . Соответствующие результаты для случая соизмеримой (CDW) комбинаторики приведены на рис. 17, где можно проследить изменение локализационного пика проводимости при прохождении химического потенциала через область топологического перехода. Слабый максимум, соответствующий поглощению через псевдощель, при этом практически не меняется. На вставке на рис. 17 показана эволюция локализационного пика с учетом неупругих процессов рассеяния (параметра γ) для случая $\mu = -1.8t$. Ясно видно,

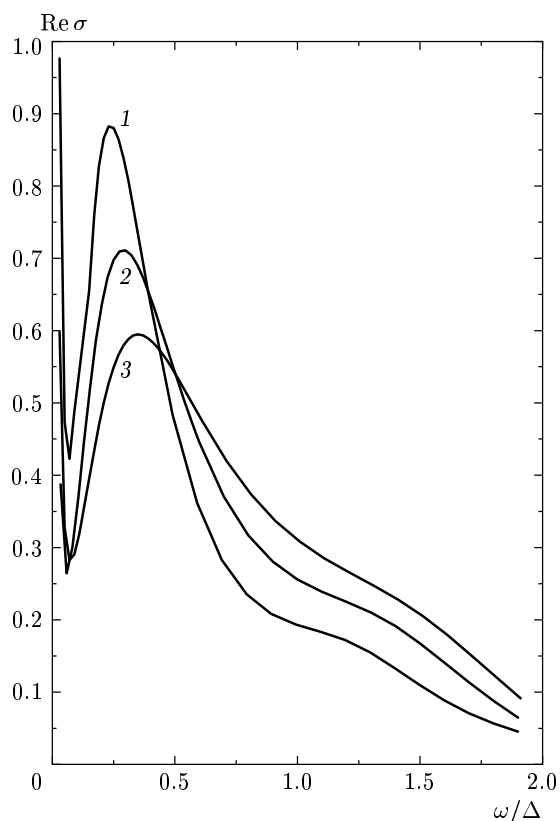


Рис. 16. Действительная часть оптической проводимости для соизмеримого случая при $t'/t = -0.4$ и $\mu/t = -1.3$ при значениях обратной корреляционной длины $ka = 0.05 - 1, 0.1 - 2, 0.2 - 3$. Фактор затухания $\gamma/t = 0.005$

как происходит переход от локализационного к друдевскому поведению за счет процессов сбоя фазы. Полученные результаты показывают, что само по себе изменение топологии поверхности Ферми не приводит к сильным качественным изменениям в оптической проводимости в рамках рассматриваемой модели.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное выше рассмотрение демонстрирует многообразие результатов, которые могут быть получены в рассматриваемой модели для различных геометрий и топологий поверхности Ферми, возникающих при изменении параметров «затравочного» спектра квазичастиц (3). Интересно сравнить эти данные с результатами, полученными ранее в упрощенной модели горячих участков на поверхности

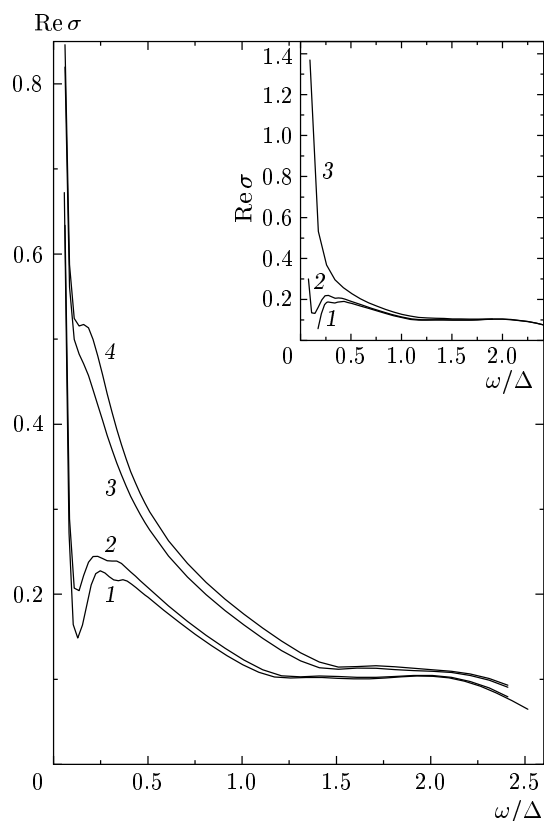


Рис. 17. Эволюция действительной части оптической проводимости в соизмеримом случае при $t'/t = -0.6$ и $ka = 0.2$ с изменением химического потенциала в области топологического перехода. Кривые соответствуют значениям $\mu/t = -1.79 - 1, -1.77 - 2, -1.66 - 3, -1.63 - 4$. Фактор затухания $\gamma/t = 0.01$. На вставке показана действительная часть оптической проводимости для случая $\mu/t = -1.8$ при значениях $\gamma/t = 0 - 1, 0.01 - 2, 0.05 - 3$

Ферми [14]. В силу того что псевдощелевые особенности в модели горячих участков определяются, в основном, сильным рассеянием именно на этих (плоских) участках поверхности Ферми и их относительным размером, локализационный пик проводимости в этой модели был почти незаметен, а доминирующую роль в области малых частот играл друдевский пик, связанный с рассеянием на холодных участках, определявшийся дополнительным параметром рассеяния γ (аналогичным по смыслу вводимой выше частоте рассеяния за счет неупругих процессов). Из рассмотрения более реалистичной модели, проведенного выше, видно, что вклад локализационного пика может быть весьма заметным и именно этот пик может переходить в доста-

точно узкий друдевский пик при учете процессов сбоя фазы.

Возможно, главным недостатком рассмотренной модели является пренебрежение динамикой флуктуаций ближнего порядка. Это приближение оправдано, как отмечалось в [4, 5], лишь при достаточно высоких температурах, но как раз тогда и становятся более существенными процессы неупругого рассеяния, ответственные за сбой фазы и разрушение локализации. Другим недостатком, как не раз отмечалось [5, 7], является ограничение гауссовым приближением для статистики флуктуаций, что также может быть оправдано только для области достаточно высоких температур.

При обсуждении возможной связи полученных выше результатов с реальными экспериментами на ВТСП-оксидах следует иметь в виду, что в большинстве этих экспериментов [1, 2] локализационный пик вообще не наблюдался, что, по-видимому, может быть связано с заметной ролью неупругих процессов (сбоя фазы) при достаточно высоких температурах, использовавшихся в этих экспериментах. Пики оптической проводимости в области малых частот, приписывавшиеся локализации, наблюдались в неупорядоченных образцах системы YBaCuO в работах [25, 26]. Особо следует отметить недавние эксперименты на системе NdCeCuO [27, 28], где такой пик наблюдался особенно четко. В частности, качественное поведение оптической проводимости, найденное в работе [28], для набора образцов NdCeCuO разных составов (от недодопированных до оптимально-допированных) находится в полном согласии с поведением, представленным выше на рис. 14, которое, как отмечалось, может быть типичным для ВТСП-купратов. Таким образом, по нашему мнению, модель горячих точек может претендовать на достаточно реалистичное описание аномалий оптической проводимости в высокотемпературных сверхпроводниках.

Авторы признательны Э. З. Кучинскому за многочисленные обсуждения и помощь в работе. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект 02-02-16031), CRDF № REC-005 и программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Квантовая макрофизика», а также в рамках проекта Министерства промышленности и науки «Исследование коллективных и квантовых эффектов в конденсированных средах».

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Timusk and B. Statt, Rep. Progr. Phys. **62**, 61 (1999).
2. М. В. Садовский, УФН **171**, 539 (2001).
3. N. P. Armitage, D. H. Lu, C. Kim, A. Damascelli, K. M. Shen, F. Ronning, D. L. Feng, P. Bogdanov, and Z.-X. Shen, Phys. Rev. Lett. **87**, 147003 (2001).
4. J. Schmalian, D. Pines, and B. Stojkovic, Phys. Rev. Lett. **80**, 3839 (1998); Phys. Rev. B **60**, 667 (1999).
5. Э. З. Кучинский, М. В. Садовский, ЖЭТФ **115**, 1765 (1999).
6. М. В. Садовский, ЖЭТФ **66**, 1720 (1974); ФТТ **16**, 2504 (1974).
7. М. В. Садовский, ЖЭТФ **77**, 2070 (1979).
8. А. И. Посаженикова, М. В. Садовский, ЖЭТФ **115**, 632 (1999).
9. Э. З. Кучинский, М. В. Садовский, ЖЭТФ **117**, 613 (2000).
10. Э. З. Кучинский, М. В. Садовский, ЖЭТФ **119**, 553 (2001).
11. Э. З. Кучинский, М. В. Садовский, ЖЭТФ **121**, 758 (2002).
12. М. В. Садовский, А. А. Тимофеев, СФХТ **4**, 11 (1991).
13. M. V. Sadovskii and A. A. Timofeev, J. Moscow Phys. Soc. **1**, 391 (1991).
14. М. В. Садовский, Письма в ЖЭТФ **69**, 447 (1999); M. V. Sadovskii, Physica C **341-348**, 939 (2000).
15. P. Monthoux, A. Balatsky, and D. Pines, Phys. Rev. B **46**, 14803 (1992).
16. P. Monthoux and A. Balatsky, Phys. Rev. B **47**, 6069 (1993); Phys. Rev. B **48**, 4261 (1994).
17. M. V. Sadovskii, Physica C **341-348**, 811 (2000).
18. L. Bartosch and P. Kopietz, Phys. Rev. B **60**, 15488 (1999).
19. D. Vollhardt and P. Wolfle, Phys. Rev. B **22**, 4666 (1980).
20. Л. П. Горьков, А. И. Ларкин, Д. Е. Хмельницкий, Письма в ЖЭТФ **30**, 248 (1979).
21. P. Monthoux and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **65**, 235104 (2002).

22. A. A. Gogolin and G. T. Zimanyi, *Sol. St. Comm.* **46**, 469 (1983).
23. X. J. Zhou, P. Bogdanov, S. A. Kellar, T. Noda, H. Eisaki, S. Uchida, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, *Science* **286**, 268 (1999).
24. A. Damascelli, D. H. Lu, and Z.-X. Shen, E-print archives, cond-mat/0107042.
25. D. N. Basov, A. V. Puchkov, R. A. Hughes, T. Strach, J. Preston, and T. Timusk, *Phys. Rev. B* **49**, 12165 (1994).
26. D. N. Basov, B. Dabrowski, and T. Timusk, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2132 (1998).
27. E. J. Singley, D. N. Basov, K. Kurahashi, T. Uefuji, and K. Yamada, E-print archives, cond-mat/0103480.
28. Y. Onose, Y. Taguchi, K. Ishizaka, and Y. Tokura, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 317001 (2001).