

На правах рукописи

УДК 538.915



НЕКРАСОВ ИГОРЬ АЛЕКСАНДРОВИЧ

**ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ
СТРУКТУРЫ СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ
СИСТЕМ ОБОБЩЕННЫМИ МЕТОДАМИ НА ОСНОВЕ
ТЕОРИИ ДИНАМИЧЕСКОГО СРЕДНЕГО ПОЛЯ**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени

доктора физико-математических наук

Екатеринбург

2014

Работа выполнена в лаборатории теоретической физики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института электрофизики Уральского отделения Российской академии наук

Официальные оппоненты: П.И. Арсеев, член-корреспондент РАН,

доктор физико-математических наук,

ФГБУН Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, г. Москва,

Отдел теоретической физики им. И.Е. Тамма,

заведующий сектором теории твердого тела

А.Н. Рубцов, доктор физико-математических наук,

ФГБОУ ВПО “Московский государственный университет

им. Ломоносова”, Ленинские горы, г. Москва,

профессор кафедры квантовой электроники

физического факультета

В.Ю. Ирхин, доктор физико-математических наук,

ФГБУН Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург,

г.н.с. лаборатории квантовой теории конденсированного состояния

отдела теоретической и математической физики

Ведущая организация: ФГАОУ “Сибирский федеральный университет” (СФУ), г. Красноярск

Защита состоится “ 11 ” марта 2014 г. в 13 часов на заседании Диссертационного совета Д004.024.01 в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте электрофизики Уральского отделения Российской академии наук (620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д.106).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБУН Института электрофизики УрО РАН.

Автореферат разослан “ 20 ” января 2014 г.

Учёный секретарь
Диссертационного совета,
доктор физико-математических наук



Н.Н.Сюткин

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Изучение систем с сильными кулоновскими электронными корреляциями является одним из наиболее актуальных направлений в области физики конденсированного состояния. В последние два десятилетия системы с сильными кулоновскими электронными корреляциями широко исследуются во всем мире как экспериментально, так и теоретически. Особенно интересным является компьютерное моделирование аномалий электронной структуры, экспериментально наблюдаемых в сильно коррелированных системах на основе переходных элементов (например, высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) на основе меди (например, La_2CuO_4 , см. обзор [1]) и железа (например, BaFe_2As_2 , см. обзоры [2, 3]), сильно коррелированные металлы (SrVO_3), изоляторы Мотта-Хаббарда (V_2O_3), изоляторы с переносом заряда (NiO) и т.д. (для обзора см. [4]).

В течение пятнадцати лет были предложены различные гибридные методики расчета электронной структуры реальных сильно коррелированных материалов [5, 6, 7], которые в связи с бурным ростом компьютерной техники в настоящий момент стали реализуемы [8]. Как правило, к таким вычислительным методам относятся методы расчета электронной структуры, основанные на объединении теории функционала плотности [9] в приближении локальной электронной плотности (LDA^1) [9] с подходами, используемыми при решении модели Хаббарда.

В последние годы большие успехи были достигнуты в модельном описании состояний сильно коррелированного парамагнитного металла и изолятора, а также перехода металл-изолятор в многозонной модели Хаббарда с помощью теории динамического среднего поля (DMFT^2), в качестве обзора см. работу [10].

Экспериментально было установлено, что в реальных системах данная физика может играть определяющую роль (см. обзор [4]). Так, например, классическим примером перехода парамагнитный изолятор – парамагнитный металл является переход металл-изолятор в V_2O_3 при легировании атомами Sr, такой же переход может происходить при некоторых условиях и по температуре в стехиометрическом V_2O_3). Возникающее при этом металлическое парамагнитное состояние не является орбитально-, зарядово- или спиново-упорядоченным и для его описания приближение статического среднего поля (Хартри-Фока) непригодно. Также классическими примерами парамагнитного сильно коррелированного металла является SrVO_3 , а парамагнитного диэлектрика с переносом заряда – NiO .

В настоящий момент объединенная вычислительная схема без подгоночных параметров $\text{LDA}+\text{DMFT}$ [6] для расчета электронной структуры реальных сильно коррелированных систем является общепринятым мощным инструментом. Расчетная схема $\text{LDA}+\text{DMFT}$ гармонично объединяет достоинства неэмпирического приближения локальной электронной плотности (LDA) и теории динамического среднего поля (DMFT). К основными достоинствами предлагаемых методов можно отнести учет корреляционных эффектов явным образом и учет специфики конкретных материалов для исключения подгоночных параметров из расчетных схем. Важно, что данные расчетные схемы имеют самосогласованный набор основных уравнений.

¹LDA - Local Density Approximation. Этот термин был введен в англоязычной литературе и стал общепринятым. Поэтому далее в тексте будет использоваться аббревиатура LDA. Такая система обозначений будет использована для всех англоязычных аббревиатур.

²DMFT – Dynamical Mean-Field Theory

Интенсивное использование DMFT подхода, а также объединенной схемы LDA+DMFT привели к практическому пониманию физических ограничений уравнений DMFT. В частности, в настоящее время ведется активная разработка методов, позволяющих учесть пространственные корреляции, т.е. учесть импульсную зависимость собственно-энергетической части модели Хаббарда, которая в DMFT строго локальна. Одним из методов, разработанных с этой целью, является приближение динамических кластеров (DCA³) [11]. Несмотря на свою универсальность, данный подход имеет серьезные ограничения в плане численного счета, а также в интерпретации результатов и поэтому необходимо дальнейшее методологическое исследование в данном направлении.

Еще одной фундаментальной проблемой объединенной схемы LDA+DMFT является так называемая проблема двойного учета электронных кулоновских взаимодействий (впервые данная проблема была систематически изучена в работе [12]). В LDA расчете содержится часть локальных взаимодействий в виде Хартри вклада и обменно-корреляционного потенциала. Так как DMFT, в свою очередь, дает точное локальное решение модели Хаббарда, становится ясно, что для объединения LDA и DMFT необходимо вычитать некоторую величину из LDA гамильтониана во избежании двойного учета локальных взаимодействий. Суть проблемы заключается в том, что на данный момент не существует связи между LDA и DMFT на микроскопическом уровне. Поэтому сейчас существуют несколько феноменологических подходов, базирующихся на предположении, что LDA в каком-то смысле приближение “среднего поля” по отношению к модели Хаббарда [13, 14]. Безусловно данная проблема также требует систематического изучения, которое на данный момент не представлено в научной литературе.

В связи с активным развитием рентгеновской фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES⁴) стало возможным более детальное изучение дисперсий электронных состояний в сильно-коррелированных системах, а также поверхностей Ферми [15, 16, 17]. В частности, экспериментально обнаружены различные особенности зонной структуры в окрестности уровня Ферми (изломы или “кинки”), которые не являются следствием взаимодействия коррелированных электронов с какими-либо бозонными модами (например, фононами) [15, 16, 17]. Также экспериментально обнаружены эффекты частичного разрушения поверхности Ферми (например, в медных ВТСП) [15, 16, 17]. В этой области также хорошо себя зарекомендовали гибридные расчетные схемы на основе LDA.

В диссертационной работе все вышеперечисленные вопросы серьезно проработаны. В частности, предложена обобщенная расчетная схема LDA+DMFT+ Σ , позволяющая учитывать пространственные корреляции и электрон-фононное взаимодействие в стандартном LDA+DMFT подходе. Предложен согласованный метод исключения двойного учета – LDA'+DMFT метод. В качестве объектов исследования выбраны ВТСП системы на основе меди и железа, а также оксиды переходных металлов. Все данные системы находятся под пристальным вниманием как экспериментаторов, так и теоретиков. Все вышеперечисленное определяет актуальность данной работы.

Цель работы. Целью данной работы является дальнейшее методическое совершенствование и обобщение теории динамического среднего поля – DMFT+ Σ , а также гибридной расчет-

³DCA- Dynamical Cluster Approximation

⁴ARPES – Angular Resolved Photoemission Spectroscopy.

ной схемы LDA+DMFT для моделирования и изучения электронной структуры и магнитных свойств реальных сильно коррелированных систем на основе переходных металлов: ВТСП оксидов меди, ВТСП пниктидов и халькогенидов железа, а также оксидов переходных металлов.

Научная новизна.

- Предложен LDA'+DMFT метод [A1,A2] – согласованный метод исключения двойного учета локальных кулоновских электрон-электронных корреляций, неизбежно возникающего в стандартной LDA+DMFT схеме из-за наличия части локального взаимодействия в LDA, которое затем в DMFT учитывается точно. LDA'+DMFT метод основан на исключении коррелированных состояний из определения зарядовой плотности, используемой для расчета обменно-корреляционного потенциала в LDA расчетах, что оставляет в LDA только локальные взаимодействия типа Хартри (имеющие известный аналитический вид), которые затем дополнительно вычитаются из LDA гамильтониана.
- Новый LDA'+DMFT метод апробирован на примере хорошо изученных в литературе типичных представителей сильно коррелированных систем: диэлектриков с переносом заряда MnO, NiO, CoO и сильно коррелированных металлов SrVO₃ и Sr₂RuO₄ [A2]. Обнаружено, что для всех выбранных систем LDA'+DMFT метод приводит к увеличению энергии зарядового переноса за счет более отталкивающего потенциала. Для сильно коррелированных металлов в рамках согласованного метода исключения двойного учета не наблюдается существенных отличий от результатов общепринятого LDA+DMFT расчета. Однако для диэлектриков с переносом заряда, в частности NiO и CoO, применение нового LDA'+DMFT метода дает корректное диэлектрическое решение, в то время как стандартный LDA+DMFT метод при таком же выборе всех модельных параметров приводит к металлическому решению.
- Проведены LDA расчеты электронной структуры новейших слоистых ВТСП на основе ферропниктидов: ReOFeAs (Re=La,Ce,Pr,Nd,Sm) [A3] и AFe₂As₂ (A=Ba,Sr) [A4], LiFeAs [A5], AFeAs (A=Sr,Ca) [A6]. Показано, что во всех перечисленных системах электронные свойства в окрестности уровня Ферми определяются Fe-3d(*t_{2g}*) состояниями двумерного слоя, состоящего из FeAs₄ тетраэдров. Также показано, что все системы имеют схожую квазидвумерную топологию поверхности Ферми: 2-3 дырочных цилиндра в центре зоны Бриллюэна и 2 электронных цилиндра в углах. Предложена минимальная модель, достаточная для описания электронных свойств данных систем.
- Проведены LDA расчеты электронных свойств новейших слоистых ВТСП на основе железа – халькогенидов железа (K,Cs)Fe₂Se₂ [A7]. Проведен сравнительный анализ электронных свойств ВТСП пниктидов и халькогенидов железа в несверхпроводящей фазе. Система FeSe имеет схожую электронную структуру вблизи поверхности Ферми с представленными ранее пниктидами. Однако для системы (K,Cs)Fe₂Se₂ обнаружена существенно отличная топология поверхности Ферми. Аналогичная пниктидам структура поверхности Ферми в (K,Cs)Fe₂Se₂ возникает при 60% дырочном легировании из расчета на один атом железа.
- Проведены LDA расчеты целой серии тернарных соединений, открытых вслед за ВТСП

пниктидами железа и имеющих сходный химический состав. В частности, SrPt_2As_2 [A8], BaFe_2As_3 [A9], $(\text{Ca},\text{Sr},\text{La})\text{Pt}_3\text{P}$ [A10], $(\text{Ca},\text{Sr},\text{Ba})\text{Pd}_2\text{As}_2$ [A11]. Показано, что несмотря на сходный химический состав данные системы обладают существенно отличными электронными свойствами, например, отличной топологией Ферми поверхности.

- Получено теоретическое объяснение экспериментальной зависимости температуры сверхпроводящего перехода в новых ВТСП на основе железа от высоты аниона над плоскостью атомов железа [A12,A13]. Показано, что данную зависимость полуколичественно описывает выражение Аллена-Дайнса для T_c , причем основной эффект в данном случае обеспечивается изменением величины полной LDA плотности состояний на уровне Ферми, которая в свою очередь зависит от силы гибридизации железо-лиганд и имеет максимум при $\Delta z_a = 1.38 \text{ \AA}$.
- Методами LDA+DMFT и LDA'+DMFT рассчитана электронная структура ВТСП халькогенида железа $\text{K}_{1-x}\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ [A14]. Показано, что в отличие от пниктидов данная система более коррелирована: квазичастичная масса в сравнении с зонной массой возрастает в 5 раз в $\text{K}_{0.76}\text{Fe}_{1.72}\text{Se}_2$ (дырочное легирование около 25%), в отличие от пниктидов с перенормировкой квазичастичной массы равной 2 при одинаковых величинах параметров кулоновского взаимодействия. Также обнаружено, что с ростом величины дырочного легирования от стехиометрического состава KFe_2Se_2 к дырочно легированному $\text{K}_{0.76}\text{Fe}_{1.72}\text{Se}_2$ сила корреляционных эффектов возрастает. Показано, что в силу многозонности данного соединения корреляционные эффекты для различных зон, расположенных в разных частях зоны Бриллюэна различны [A15].
- Предложен обобщенный метод DMFT+ Σ , позволяющий учитывать дополнительные, не входящие в модель Хаббарда или исчезающие в пределе бесконечной размерности пространства взаимодействия (см. обзор [A16]). Учет таких дополнительных взаимодействий проводится в приближении аддитивности “хаббардовской” и “дополнительной” собственно-энергетических частей. В частности, в качестве “дополнительных взаимодействий” были выбраны взаимодействия коррелированных электронов с псевдощелевыми АФМ флуктуациями ближнего порядка [A17] и электрон-фононное взаимодействие [A18,A19].
- Методом DMFT+ Σ проведены модельные расчеты профилей спектральной плотности двумерной модели Хаббарда, продемонстрировавшие качественную картину “разрушения” поверхностей Ферми и образования “дуг” Ферми в сильно коррелированном металле и легированном моттовском диэлектрике [A20,A21], качественно согласующуюся с ARPES экспериментами в ВТСП купратах. Рассчитана дисперсия электронных возбуждений и их затухание, вызванное псевдощелевыми флуктуациями, неоднородное по зоне Бриллюэна. В рамках этого же подхода проанализирована роль рассеяния на случайных примесях [A17].
- Проведены LDA+DMFT+ Σ расчеты псевдощелевого поведения в нормальной фазе недопированных дырочных ВТСП купратов $\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{SrCu}_2\text{O}_{8-\delta}$ (Bi2212) [A22,A23] и $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) [A24], а также электронных ВТСП $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (NCCO) [A25,A26] и $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$

(PCCO) [A27]. Параметры, характеризующие конкретное соединение (включая величину хаббардовского отталкивания U и ширину псевдощели), рассчитывались в рамках приближений LDA, LDA+DMFT и NRG (с учетом двуслойного расщепления спектра возбуждений в случае Bi2212). Полученные результаты демонстрируют полуколичественное согласие с результатами ARPES экспериментов. Показано, что отличия электронной структуры, полученной в рамках зонных расчетов, приводят к качественно разной картине разрушения поверхности Ферми в данных классах ВТСП систем [A22,A25,A28].

- Выполнены DMFT и DMFT+ Σ расчеты для ВТСП купатов в трехзонной модели Эмери [A29], учитывающей наиболее важные с физической точки зрения орбитали в CuO_2 слое. Из полученных в рамках DMFT расчетов данных построены фазовые диаграммы в координатах величина кулоновского взаимодействия и величина поправки на двойной учет, а также величина полной заселенности и величина поправки на двойной учет. Показано, что область диэлектрика с переносом заряда на данных фазовых диаграммах достаточно мала. Показано, что Ферми поверхности в DMFT+ Σ расчетах, выполненных для однозонной и трехзонных моделей, качественно идентичны.
- Обнаружен новый (чисто электронный) механизм формирования изломов (“кинков”) в электронном спектре сильно коррелированных систем, связанный с особенностями спектральной плотности таких систем - существованием в ней вклада от хорошо разделенных (по энергии) хаббардовских зон и центрального пика. Показано, что эти “кинки” возникают при энергиях, существенно превышающих характерные энергии фононов, и определяются только зонной структурой и факторами перенормировки теории Ферми–жидкости [A30]. Таким образом, показано, что исследование спектров ARPES в широком интервале энергий может дать новую и неожиданную информацию об электронной структуре сильно коррелированных систем. Подобного рода аномалии уже наблюдались в ARPES экспериментах на SrVO_3 .
- В рамках DMFT+ Σ приближения изучены особенности (“кинки”) в электронном спектре сильно коррелированных систем, обусловленные электрон-фононным взаимодействием и их соотношение с “кинками” чисто электронной (корреляционной) природы. Корреляционные “кинки” в значительной мере маскируются фононными “кинками”, так что для их наблюдения требуется выполнение достаточно жестких ограничений на параметры модели, такие как дебаевская частота фононов, величина константы электрон-фононного взаимодействия, а также величина межэлектронных (хаббардовских) корреляций [A18,A19].

Теоретическая и практическая значимость работы. В настоящей работе автором предложены обобщения LDA+DMFT метода расчета электронной структуры реальных сильно коррелированных систем – (1) LDA'+DMFT, позволяющего согласованно исключить двойной учет кулоновских взаимодействий в LDA+DMFT и (2) обобщенные DMFT+ Σ и LDA+DMFT+ Σ методы, позволяющие учесть “дополнительные” по отношению к модели Хаббарда взаимодействия в стандартной LDA+DMFT схеме, например, псевдощелевые антиферромагнитные флуктуации ближнего порядка или взаимодействие фононов с коррелированными электронами. Предложенные в данной работе обобщенные методы использованы для описания элект-

тронных свойств следующих реальных сильно коррелированных систем: сильно коррелированных металлов SrVO_3 , Sr_2RuO_4 диэлектриков с переносом заряда MnO , NiO , CoO , дырочных ВТСП купратов $\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{SrCu}_2\text{O}_{8-\delta}$, $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, а также электронных ВТСП $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ и $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$, ВТСП халькогенида железа KFe_2Se_2 и ряда сопутствующих систем. Также в ходе диссертационной работы были обобщены и усовершенствованы уже существующие компьютерные программы для реализации описанных приближений, которые в дальнейшем могут быть использованы для расчета электронной структуры и свойств твердых тел, обладающих соответствующими свойствами. Полученные в работе результаты представляют как самостоятельный интерес для описания свойств рассмотренных соединений, так и могут служить базой для построения новых теоретических подходов.

Методы исследования. Методы изучения электронных свойств, использованные в диссертации основаны на теории функционала электронной плотности в приближении локальной электронной плотности (DFT/LDA), теории динамического среднего поля (DMFT) и объединенной расчетной схеме – LDA+DMFT. Практическая реализация данных методов осуществлена в программных пакетах TB-LMTO-ASA⁵ v.47 [18, 19], разработанном в группе профессора О.К. Андерсена (Институт им. М. Планка, г. Штутгарт, Германия); программа для LDA+DMFT(HF-QMC⁶) расчетов, разработанная А.И. Потеряевым (Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург); программа для DMFT(NRG⁷) расчетов [20], разработанная профессором Т. Прушке (Институт теоретической физики университета г. Геттингена, Германия); также в ходе выполнения диссертационной работы были разработаны собственные компьютерные программы.

Основные положения, выносимые на защиту.

- Согласованный метод исключения двойного учета локальных кулоновских электрон-электронных корреляций – LDA'+DMFT, основанный на явном исключении коррелированных состояний из определения зарядовой плотности, используемой для расчета обменно-корреляционного потенциала в LDA расчетах, оставшиеся локальные взаимодействия типа Хартри имеют известный аналитический вид и затем дополнительно вычитаются из LDA гамильтониана, а затем локальные корреляции точно описываются в рамках DMFT.
- Результаты LDA'+DMFT расчетов, хорошо изученных в литературе типичных представителей сильно коррелированных систем: диэлектриков с переносом заряда MnO , NiO , CoO и сильно коррелированных металлов SrVO_3 и Sr_2RuO_4 : карты спектральных плотностей и парциальные и поорбитальные плотности состояний. Увеличение энергии зарядового переноса за счет более отталкивающего потенциала для всех выбранных систем в LDA'+DMFT методе. Хорошее согласие с экспериментальными данными по рентгеновской фотоэмиссии.

⁵TB-LMTO-ASA – tight-binding linearized muffin-tin orbitals within atomic spheres approximation

⁶HF-QMC – quantum Monte-Carlo method within Hirsh-Fye algorithm

⁷NRG – numerical renormalization group

- LDA расчеты электронной структуры новейших слоистых ВТСП на основе ферропниктидов: ReOFeAs ($\text{Re}=\text{La, Ce, Pr, Nd, Sm}$) и AFe_2As_2 ($\text{A}=\text{Ba, Sr}$), LiFeAs , AFFeAs ($\text{A}=\text{Sr, Ca}$), демонстрирующие, что во всех перечисленных системах электронные свойства в окрестности уровня Ферми определяются $\text{Fe-3d}(t_{2g})$ состояниями двумерного слоя, состоящего из FeAs_4 тетраэдров, а также показавшие схожесть квазидвумерной топологии поверхности Ферми: 2-3 дырочных цилиндра в центре зоны Бриллюэна и 2 электронных цилиндра в углах для всех упомянутых систем, что привело к формулировке минимальной модели, достаточной для описания электронных свойств данных систем.
- LDA расчеты электронных свойств новейших слоистых ВТСП на основе железа – халькогенидов железа $(\text{K, Cs})\text{Fe}_2\text{Se}_2$ и сравнение их электронных свойств с ВТСП пниктидами в несверхпроводящей фазе, из которого видно, что система $(\text{K, Cs})\text{Fe}_2\text{Se}_2$ имеет существенно отличную топологию поверхности Ферми, а аналогичная пниктидам структура поверхности Ферми в $(\text{K, Cs})\text{Fe}_2\text{Se}_2$ возникает при 60% дырочном легировании из расчета на один атом железа.
- Теоретическое объяснение экспериментальной зависимости температуры сверхпроводящего перехода в новых ВТСП на основе железа от высоты аниона над плоскостью атомов железа Δz_a в рамках формулы Аллена-Дайнса для T_c , где в основном изменения величины T_c зависят от величины полной LDA плотности состояний на уровне Ферми, которая в свою очередь зависит от силы гибридизации железо-лиганд и имеет максимум при $\Delta z_a=1.38\text{\AA}$.
- Расчет электронной структуры ВТСП халькогенида железа $\text{K}_{1-x}\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ в рамках метода $\text{LDA}+\text{DMFT}$ и $\text{LDA}'+\text{DMFT}$, показавший, что в отличие от пниктидов данная система более коррелирована: квазичастичная масса в сравнении с зонной массой возрастает в 5 раз в $\text{K}_{0.76}\text{Fe}_{1.72}\text{Se}_2$ (дырочное легирование около 25%), в отличие от пниктидов с перенормировкой квазичастичной массы, равной 2, при одинаковых величинах параметров кулоновского взаимодействия, однако при уменьшении величины дырочного легирования система $\text{K}_{0.76}\text{Fe}_{1.72}\text{Se}_2$ становится менее коррелирована, чем стандартные пниктиды.
- Обобщенный метод $\text{DMFT}+\Sigma$, позволяющий учитывать взаимодействия сильно коррелированных электронов с коллективными возбуждениями, не содержащимися в модели Хаббарда. В частности, в качестве дополнительных взаимодействий были выбраны взаимодействия коррелированных электронов с псевдощелевыми АФМ флуктуациями ближнего порядка, а также взаимодействия коррелированных электронов с фононами. Результаты $\text{DMFT}+\Sigma$ расчетов модельных расчетов согласуются с ARPES данными для ВТСП купратов в псевдощелевой фазе: на картах поверхности Ферми видна качественная картина “разрушения” поверхностей Ферми и образования “дуг” Ферми. В случае электрон-фононного взаимодействия $\text{DMFT}+\Sigma$ расчеты позволяют описать характерные кинки (изломы) электронной дисперсии также наблюдающиеся в эксперименте.
- Результаты $\text{LDA}+\text{DMFT}+\Sigma$ расчетов без подгоночных параметров псевдощелевого поведения в нормальной фазе недодопированных дырочных ВТСП купратов $\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{SrCu}_2\text{O}_{8-\delta}$

и $\text{La}_2\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, а также электронных ВТСП $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ и $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$, демонстрирующие полуколичественное согласие с результатами ARPES экспериментов. Отличия электронной структуры, полученной в рамках зонных расчетов, приводящие к качественно разной картине разрушения поверхности Ферми в данных классах ВТСП систем.

- Новый (чисто электронный) механизм формирования изломов (“кинков”) в электронном спектре сильно коррелированных систем, связанный с особенностями спектральной плотности таких систем - существованием в ней вклада от хорошо разделенных (по энергии) хаббардовских зон и центрального пика, причем данные “кинки” возникают при энергиях, существенно превышающих характерные энергии фононов, и определяются только зонной структурой и факторами перенормировки теории Ферми–жидкости. Критерий сосуществования “кинков” чисто электронной (корреляционной) природы и фононных “кинков” получен в рамках DMFT+ Σ расчетов.

Достоверность. Достоверность полученных в диссертационной работе результатов обеспечивается применением широко апробированных методов изучения электронной структуры сильнокоррелированных соединений, обоснованным выбором физических приближений, а также согласием результатов работы с результатами других авторов и данными экспериментов.

Апробация работы. Основные положения диссертации и отдельные ее результаты докладывались на следующих конференциях:

XXXI международная зимняя школа физиков-теоретиков “Коуровка-2006”, Кыштым, 19-25 февраля 2006 г.; XVI Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников, Кыштым, 27 февраля - 4 марта 2006 г.; Workshop “First-principles approaches to optical and photoelectron spectra”, Munchen, Germany, 9-12 March 2006; Вторая международная конференция “Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости”, Москва, 9-13 октября 2006 г.; 8th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors (M2S-HTSC-VIII), Dresden, Germany, July 9 - 14, 2006; The Physical Society of Japan the 62nd Annual Meeting (Hokkaido University (Sapporo Campus) Sep.21-24,2007); The 8th International Conference on Spectroscopies in Novel Superconductors (SNS2007), (August 20 - 24, 2007, Sendai, Japan); VIII Российская конференция по физике полупроводников. (Екатеринбург, 30 сентября – 5 октября 2007); VIII молодежный семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества, (Екатеринбург, 19-25 ноября 2007); XXXII международная зимняя школа физиков-теоретиков “Коуровка-2008”, Новоуральск, 18-24 февраля 2008 г. (Новоуральск); XXXII международная зимняя школа физиков-теоретиков “Коуровка-2010”, Новоуральск, 20-29 февраля 2010 г.; Междкнародная конференция “Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости”, Москва, 2011; Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка» 34, (Новоуральск 26 февраля-2 марта); “Электронные спектры и электронная структура ES&ES” (20 мая - 23 мая 2013 г. Киев (Украина); HTS-2013 (Звенигород, 30 сентября - 4 октября 2013).

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 30 работ – [A1]–[A30].

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, шести глав, выводов и списка литературы. Содержит 315 страниц машинописного текста, в том числе 134 рисунка и 17 таблиц. Список литературы включает 456 наименований.

Основное содержание работы

Диссертационная работа состоит из введения, шести глав и заключения.

Во введении обоснована актуальность темы, сформулированы цель и задачи работы, а также основные положения, выносимые на защиту. Кроме того, во введении описана научная новизна и практическая ценность результатов работы и приведена краткая характеристика основных разделов диссертации.

Во второй главе подробно рассматривается общепринятый метод зонных расчетов электронной структуры реальных сильно коррелированных систем LDA+DMFT по уже опубликованным материалам. В частности изложены основы теории функционала электронной плотности и приближение локальной электронной плотности (LDA), а также основные положения теории динамического среднего поля (DMFT). В данной главе детально рассмотрены как недостатки, так и достоинства LDA (см. [9]) и DMFT (см. обзор [10]) расчетов по отдельности и гибридного LDA+DMFT метода (см. обзор [6]), а именно, ограниченность учета локальных корреляционных электрон-электронных эффектов, возникающая в LDA приближении, отсутствие пространственных корреляционных эффектов в DMFT и проблема двойного учета локальных электронных корреляций в LDA+DMFT.

Наиболее важным в главе два является изложение систематического изучения влияния величины поправки на двойной учет на LDA+DMFT решение модели Эмери [A29] для ВТСП купрата Nd_2CuO_4 . Модель Эмери является минимальной моделью для описания электронных состояний CuO_2 слоя медных ВТСП оксидов. Данная модель является обобщением модели Хаббарда, в которой есть не только коррелированная $\text{Cu-3d}_{x^2-y^2}$ орбиталь, но и некоррелированные O-2p_x и O-2p_y орбитали. Именно этот факт дает нетривиальную зависимость LDA+DMFT решения модели Эмери для Nd_2CuO_4 от величины поправки на двойной учет.

Гамильтониан модели Эмери в обратном пространстве имеет вид:

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = t_{\alpha\beta}(\mathbf{k})\hat{c}_{\mathbf{k}\alpha}^+\hat{c}_{\mathbf{k}\beta} + U\hat{n}_d\hat{n}_d, \quad (1)$$

здесь индексы α и β соответствуют $\text{Cu-3d}_{x^2-y^2}$, O-2p_x , O-2p_y орбиталям, которые для краткости обозначены d , p_x и p_y , соответственно.

Величины интегралов перескока и кулоновского взаимодействия U , используемые в диссертационной работе, представлены в Таблице 1, где: t_{dd} , t_{pp} – интегралы перескока для ближайших медных и кислородных узлов, t'_{pp} – интеграл перескока между кислородными узлами во вторую координационную сферу, t'_{pd} и t''_{pd} интеграл перескока между медными и кислородными узлами во вторую и третью координационные сферы.

Таблица 1: Энергетические параметры модели Эмери (в эВ) (из работы [21]).

$E_d - E_p$	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

Решение модели Эмери в рамках LDA+DMFT имеет три фазы – диэлектрик с переносом заряда, дырочно легированный металл с квазичастичным пиком на потолке зоны Жанга-Райса и электронно легированный металл с квазичастичным пиком на дне верхней хаббардовской зоны

[A29]. По результатам LDA+DMFT расчетов определены области существования диэлектрического решения с переносом заряда для модели Эмери в зависимости от величины поправки на двойной учет при различных параметрах модели: энергии переноса заряда $E_d - E_p$, интеграла перескока t_{pd} , полного заполнения n_{tot} (и соответствующего ему заполнения $\text{Cu-3d}_{x^2-y^2}$ состояния n_d), величины кулоновского взаимодействия U . Основные результаты опубликованы в работе [A29] и представлены ниже.

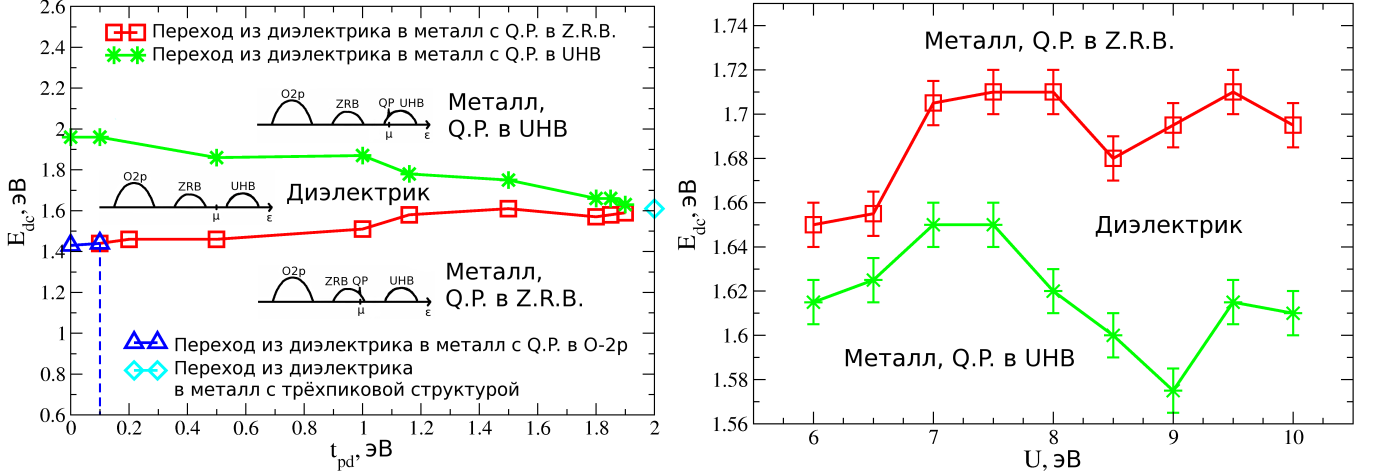


Рисунок 1: Фазовые диаграммы E_{dc} от t_{pd} при $U = 8$ эВ (слева) и E_{dc} от U при $n_{tot} = 2.5$ (справа) для модели Эмери, полученные на основе LDA+DMFT(NRG) расчетов. Линия с квадратами соответствует переходу из диэлектрической фазы в металлическую фазу с квазичастичным пиком (Q.P.) в зоне Жанга-Райса (Z.R.B.), а линия со звездочками – переходу в металлическую фазу с квазичастичным пиком в верхней хаббардовской зоне (U.H.B.).

Слева на рисунке 1 приведена фазовая диаграмма в переменных E_{dc} и t_{pd} при постоянном $U = 8$ эВ. В отличие от однозонного случая, переход из диэлектрической фазы может быть в металл с квазичастичным пиком в верхней хаббардовской зоне (звездочки) или в металл с квазичастичным пиком в зоне Жанга-Райса (квадраты).

Справа на рисунке 1 представлена область существования диэлектрика с переносом заряда в переменных $E_{dc} - U$ при постоянном полном заполнении $n_{tot} = 2.5$, что соответствует полностью заполненным $O-2p_x$ и $O-2p_y$ состояниям и наполовину заполненному $\text{Cu-3d}_{x^2-y^2}$ состоянию. Для выбранных параметров модели не существует диэлектрического решения при $U < 5$ эВ и $n_{tot} = 2.5$. Область существования решения для диэлектрика с переносом заряда достаточно узкая по величине поправки на двойной учет E_{dc} для большой области значений U .

В третьей главе описан новый метод согласованного исключения поправки на двойной учет в объединенном LDA+DMFT методе – LDA'+DMFT, изложенный в работах [A1], [A2]. Формально гамильтониан LDA+DMFT метода [8] состоит из трех вкладов:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{LDA}} + \frac{1}{2} \sum_{i=i_d, l=l_d} \sum'_{m\sigma, m'\sigma'} U_{mm'}^{\sigma\sigma'} \hat{n}_{ilm\sigma} \hat{n}_{ilm'\sigma'} - \frac{1}{2} \sum_{i=i_d, l=l_d} \sum'_{m\sigma, m'\bar{\sigma}} J_{mm'} \hat{c}_{ilm\sigma}^\dagger \hat{c}_{ilm'\bar{\sigma}}^\dagger \hat{c}_{ilm'\sigma} \hat{c}_{ilm\bar{\sigma}} - \hat{H}^{DC}. \quad (2)$$

Первым вкладом в (2) является гамильтониан, который используется в стандартных LDA рас-

четах

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{LDA}} &= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + V_{\text{ion}}(\mathbf{r}) + \int d^3r' \rho(\mathbf{r}')V_{ee}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \\ &+ \frac{\delta E_{\text{xc}}^{\text{LDA}}(\rho)}{\delta\rho(\mathbf{r})},\end{aligned}\quad (3)$$

здесь Δ – оператор Лапласа, m_e – масса электрона, e – заряд электрона, а члены

$$V_{\text{ion}}(\mathbf{r}) = -e^2 \sum_i \frac{Z_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|}, \quad V_{ee}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{e^2}{2} \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\quad (4)$$

представляют одночастичный потенциал, создаваемый всеми ионами i с зарядом eZ_i в точке \mathbf{R}_i , а также потенциал электрон-электронного взаимодействия типа “плотность-плотность”.

Величина $E_{\text{xc}}^{\text{LDA}}(\rho(\mathbf{r}))$ в выражении (3) является функцией локальной зарядовой электронной плотности, которая является приближением для истинного обменно-корреляционного функционала $E_{\text{xc}}[\rho]$, возникающего в рамках теории функционала электронной плотности [9]. Явный вид функции $E_{\text{xc}}^{\text{LDA}}(\rho(\mathbf{r}))$ может быть получен либо в рамках теории возмущений по малой величине электронной плотности [22], либо из численного решения модели “желе” (однородный электронный газ на постоянном положительной фоне $V_{\text{ion}}(\mathbf{r}) = \text{const}$, создаваемом ионами) [23]. Если выбрать явный вид базисных функций φ_i для разложения полной волновой функции системы, для непосредственного численного вычисления матричных элементов гамильтониана (3)), тогда зарядовая плотность электронов ρ может быть получена как:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (5)$$

Второй член в (2) описывает локальное кулоновское (хаббардовское) электрон-электронное взаимодействие на сильно коррелированных орбиталях, обозначенных индексами i_d и l_d (предполагаются, например, d -орбитали переходных металлов). Величины наиболее существенных прямого и обменного кулоновских взаимодействий представлены в виде матрицы $U_{mm'}^{\sigma\sigma'}$. Матрица $J_{mm'}$ характеризует электрон-электронные взаимодействия с переворотом спина. Штрих над знаком суммы означает, что как минимум два индекса должны быть отличны друг от друга. Для спиновых индексов приняты следующие обозначения: $\bar{\sigma} = \downarrow(\uparrow)$ и $\sigma = \uparrow(\downarrow)$.

И наконец последний вклад \hat{H}^{DC} вычитается в (2) для предотвращения двойного учета *локального* кулоновского взаимодействия, которое уже содержится в \hat{H}_{LDA} в виде Хартри вклада и $E_{\text{xc}}^{\text{LDA}}(\rho(\mathbf{r}))$, которое затем точно будет учтено в рамках DMFT. Однако, отсутствие диаграммного представления LDA вклада в гамильтониане (2) исключает возможность точно выразить \hat{H}^{DC} в терминах U , J и ρ . Таким образом не существует однозначного выражения для \hat{H}^{DC} (см. [12]), что и называется *проблемой поправки на двойной учет* в LDA+DMFT расчетной схеме.

Одним из наиболее часто используемых выражений для \hat{H}^{DC} является выражение, полученное из полного хаббардовского взаимодействия (второй член в гамильтониане (2)) в рамках приближения Хартри [13] (FLL – fully localized limit):

$$H_{\text{FLL}}^{DC} = \frac{1}{2}Un_d(n_d - 1) - \frac{1}{2}J \sum_{\sigma} n_{d\sigma}(n_{d\sigma} - 1). \quad (6)$$

Где, $n_{d\sigma} = \sum_m n_{il_d m \sigma} = \sum_m \langle \hat{n}_{il_d m \sigma} \rangle$ – полное число электронов на взаимодействующих орбиталях с учетом спина, $n_d = \sum_{\sigma} n_{d\sigma}$; U – величина кулоновского (хаббардовского) отталкивания, а J – величина обменного (хундовского) взаимодействия. Обычно, эти величины вычисляются в рамках “constrained-LDA” метода) [24]. Величина n_d может быть получена непосредственно из LDA расчета и затем оставаться фиксированной во время DMFT расчета, либо обновляться на каждой DMFT итерации. Величины n_d , полученные разным способом, достаточно близки к друг другу, однако, из-за большой величины U различия в величине энергии H_{FLL}^{DC} могут быть значительными. Также стоит отметить, что данный подход и большинство аналогичных подходов для вычисления величины поправки на двойной учет строятся в предположении, что полученные в LDA результаты являются неким приближением Хартри-Фока для результатов, которые могут быть получены в модели Хаббарда.

Существуют несколько альтернативных подходов для решения проблемы двойного учета в LDA+DMFT. Например, если вместо зонных LDA расчетов выполнять зонные расчеты в приближении Хартри-Фока, а затем выполнять DMFT вычисления, тогда вид поправки на двойной учет будет точно известен. Однако, такие Hartree-Fock+DMFT расчеты насколько нам известно не проводились, и более того известно, что зонные расчеты в приближении Хартри-Фока для твердых тел хуже согласуются с экспериментом нежели LDA расчеты.

Также возможным решением проблемы двойного учета в LDA+DMFT является использование так называемого метода GW+DMFT, который в котором для расчета затравочной зонной структуры вместо LDA приближения используется GW приближение, которое по сути есть первое уравнение в цепочке уравнений движения для кулоновского потенциала. Поскольку GW приближение по определению имеет диаграммное представление теоретически его достаточно легко объединить с DMFT, исключив проблему двойного учета. Однако, не смотря на активное развитие данного перспективного метода существует ряд нерешенных проблем при его практическом применении.

Ввиду всего выше сказанного в качестве возможного подхода к решению проблемы двойного учета локального кулоновского взаимодействия в LDA+DMFT нами был предложен некий компромиссный вариант между расчетами в приближении Хартри-Фока и LDA расчетами. Основная идея данного подхода состоит в том, чтобы с самого начала явным образом исключить из самосогласованного LDA расчета локальное обменно-корреляционное взаимодействие только для сильно коррелированных состояний, так как затем это взаимодействие будет точным образом учтено в методе DMFT. С этой целью предложено переопределить зарядовую плотность (5), которая используется для вычисления E_{xc}^{LDA} , следующим образом:

$$\rho'(\mathbf{r}) = \sum_{i \neq i_d} |\varphi_i(\mathbf{r})|^2, \quad (7)$$

явным образом исключая из суммы вклады от сильно коррелированных орбиталей. Таким образом переопределенная $\rho'(\mathbf{r})$ используется для задания E_{xc}^{LDA} в самосогласованном LDA расчете, результаты которого затем используются в DMFT части объединенной расчетной схемы LDA+DMFT. Таким образом, в LDA остаются только локальные кулоновские корреляции типа Хартри, представленные в выражении (3). Следовательно, для согласованного исключения двойного учета в LDA+DMFT необходимо использовать Хартри вклад вида (6). Предло-

женный метод согласованного исключения двойного учета в LDA+DMFT получил название LDA'+DMFT.

Также в данной главе представлен сравнительный анализ LDA+DMFT и LDA'+DMFT результатов для типичных представителей сильно коррелированных систем – диэлектриков с переносом заряда MnO, CoO и NiO и сильно коррелированных металлов SrVO₃ и Sr₂RuO₄. Для расчета зонных структур данных систем в рамках LDA и LDA' вычислений использован базис линейаризованных маффин-тин орбиталей (LMTO) [18, 19]. В данных расчетах обменно-корреляционный потенциал E_{xc}^{LDA} выбран в виде, предложенном фон Бартом и Хединым в работе [25]. Для данных соединений были проведены LDA'+DMFT и LDA+DMFT расчеты с постоянной поправкой на двойной учет FLL(LDA) и самосогласованно перевычисляемой поправкой на двойной учет FLL(SC). Для диэлектриков были получены плотности состояний, спектральные функции, оптические проводимости и проведено сравнение с оптическими и фотоэмиссионными спектрами. Для сильно коррелированных металлов также получены плотности состояний и представлено сравнение с фотоэмиссионными спектрами. Для задания решеточной задачи в DMFT были использованы полные LDA и LDA' гамильтонианы без какого-либо проектирования. Эффективная примесная задача в DMFT решалась методом квантового Монте-Карло с применением алгоритма Хирша-Фая (HF-QMC).

Для иллюстрации LDA и LDA' расчетов приведем в автореферате только соответствующие результаты для NiO (результаты для MnO и CoO аналогичны). На Рисунке 2 представлены плотности состояний и энергетические дисперсии LDA и LDA' расчётов для NiO.

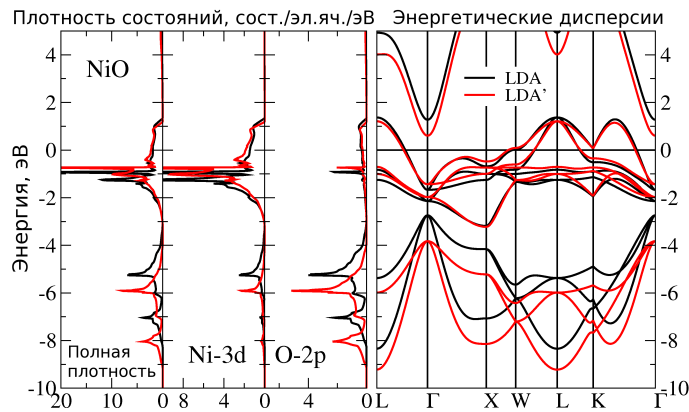


Рисунок 2: Плотности состояний (слева) и энергетические дисперсии (справа), полученные из LDA (черные линии) и LDA' (красные линии) расчетов для NiO. Ноль энергии – уровень Ферми.

Видно, что форма плотностей состояний в LDA' и LDA расчетах отличается положением O-2p состояний. В LDA' расчете O-2p состояния примерно на 1 эВ ниже по энергии, однако, ее форма остается практически неизменной. Это возникает в следствии более отталкивательного потенциала в LDA' расчете, что приводит к смещению вверх по энергии Ni-3d. Однако, положение Ni-3d состояний зафиксировано относительно уровня Ферми, что приводит к смещению всех остальных состояний кроме Ni-3d вниз. Такая небольшая величина смещения может быть объяснена уменьшением обменно-корреляционной энергии в LDA' расчете, которая для металлических систем (с плотностью электронного газа $r_s=2-6$) имеет величину порядка 1 эВ на одно электронное d состояние [22]. Также отметим, что форма дисперсий электронных состояний в обоих расчетах практически не отличается друг от друга. Для двух других оксидов,

рассмотренных в диссертации (MnO и CoO), LDA' и LDA зоны и плотности состояний ведут себя сходным образом.

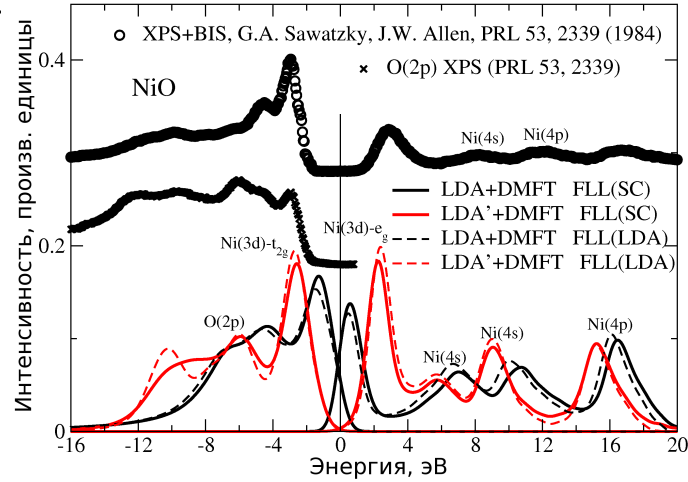


Рисунок 3: Сравнение экспериментальных фотоэмиссионных (кружки и крестики) и теоретических спектров, рассчитанных в рамках LDA+DMFT (чёрные линии) и LDA'+DMFT (красные линии) подходов с E_{dc} в виде FLL(LDA) (пунктирные линии) и FLL(SC) (сплошные линии) для NiO. Ноль энергии – уровень Ферми.

На рисунке 3 представлено сравнение теоретических фотоэмиссионных спектров, рассчитанных в рамках LDA+DMFT (черные линии) и LDA'+DMFT (красные линии) подходов и экспериментальных данных для NiO. Расчеты в рамках LDA'+DMFT метода дают корректное описание системы NiO, в то время как стандартный LDA+DMFT расчет дает металлическое решение (аналогичное поведение отмечено в работе [12]).

Отметим, что LDA'+DMFT результаты для сильно коррелированных металлов SrVO₃ и Sr₂RuO₄ мало отличаются от LDA+DMFT расчетов (хотя и есть некоторые улучшения при сравнении с экспериментальными данными) [A1], а также хорошо согласуются с результатами других авторов: SrVO₃ [26] и Sr₂RuO₄ [27].

В четвертой главе рассмотрены LDA (в первой части данной главы), а затем LDA+DMFT и LDA'+DMFT расчеты (во второй части этой главы) для различных представителей нового класса сверхпроводников на основе железа, открытие которых привлекло огромное научное внимание к синтезу такого рода систем и привело к существенному всплеску количества экспериментальных и теоретических работ (см. обзоры [2, 3]). Сверхпроводники на основе железа делятся на два класса: это, так называемые, пниктиды и холькогениды. Далее перечислены основные представители этих классов (для краткости автореферата соответствующие ссылки на первоисточники приведены в работе [A12,A13]):

1. Легированные системы RE1111 (RE=La,Ce,Pr,Nd,Sm,Tb,Dy) с температурой сверхпроводящего перехода T_c порядка 25–55 К, имеющих химическую формулу REO_{1-x}F_xFeAs.
2. Легированные A122 (A=Ba,Sr) пниктиды, такие как Ba_{1-x}K_xFe₂As₂ с T_c около 38 К.
3. Так называемые 111 системы типа Li_{1-x}FeAs с $T_c \sim 18$ К.
4. (Sr,Ca,Eu)FFeAs с $T_c \sim 36$ К.
5. Sr₄(Sc,V)₂O₆Fe₂(P,As)₂ с $T_c \sim 17$ К.
6. FeSe_x, FeSe_{1-x}Te_x с T_c до 14 К.

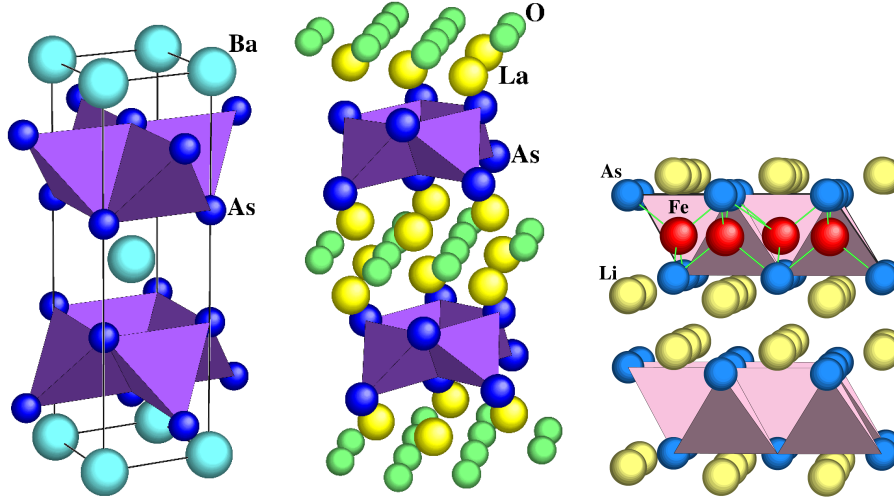


Рисунок 4: Кристаллическая структура BaFe_2As_2 (слева), LaOFeAs (справа) и LiFeAs (в центре). Слои, состоящие из FeAs_4 тетраэдров, выделены фиолетовым цветом.

Таблица 2: Параметры кристаллической структуры BaFe_2As_2 и LaOFeAs . Позиции атомов в BaFe_2As_2 : Ba (0, 0, 0), Fe (0.5, 0, 0.25), As (0, 0, z_{As}); LaOFeAs – La(0.25, 0.25, z_{La}), Fe (0.75, 0.25, 0.5), As (0.25, 0.25, z_{As}), O (0.75, 0.25, 0); LiFeAs – Fe (0.75, 0.25, 0.5), Li (0.25, 0.25, z_{Li}), As (0.25, 0.25, z_{As}).

Параметры решетки	BaFe_2As_2	LaOFeAs	LiFeAs
Группы симметрии	I4/mmm	P4/nmm	P4/nmm
a , Å	3.9090(1)	4.03533(4)	3.7914(7)
c , Å	13.2122(4)	8.74090(9)	$c=6.364(2)$
z_{La}	-	0.14154(5)	-
z_{As}	0.3538(1)	0.6512(2)	0.26351
z_{Li}	-	-	0.845915

7. $(\text{K,Cs})_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ системы с T_c до 31 К.

В качестве иллюстрации рассмотрим электронную структуру нескольких типичных представителей новейших ВТСП систем на основе железа: LiFeAs [A5] в сравнении с LaOFeAs [A3] и BaFe_2As_2 [A4] системами. Отметим, что электронная структура BaFe_2As_2 впервые в мире была изложена в [A4].

Согласно экспериментальным работам, описанным в [A3,A4,A5] данные системы кристаллизуются в тетрагональной структуре. Кристаллографические данные приведены в таблице 2, а соответствующие кристаллические структуры изображены на рисунке 4. Все кристаллические структуры имеют выраженную слоистую структуру, что предполагает квазидвумерные электронные свойства. Кристаллическая структура LiFeAs напоминает кристаллическую структуру La111 и Ba122 и ее основным элементом является слой FeAs_4 тетраэдров. Не смотря на то, что наиболее физически важные геометрические характеристики LiFeAs такие как межатомные расстояния Fe-Fe и Fe-As, а также величины As-Fe-As углов слегка отличны от La111 и Ba122 , это приводит лишь к небольшим отличиям в электронной структурах LiFeAs , La111 и Ba122 .

Для описанных выше кристаллических структур проведены LDA расчеты электронной структуры, используя базис линеаризованных маффин-тин орбиталей (LMTO) [18, 19]. На верх-

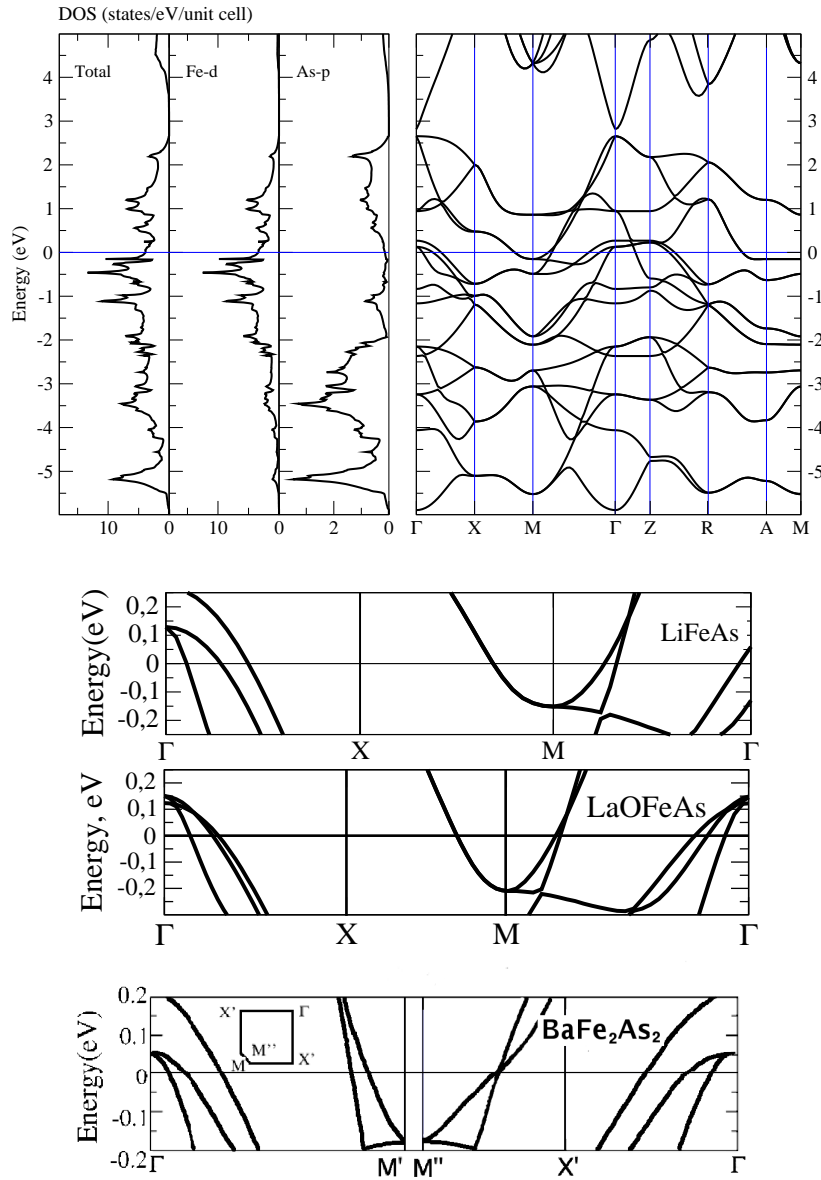


Рисунок 5: Верхняя панель: LDA плотности состояний (слева) и зонные дисперсии (справа) для LiFeAs. Нижняя панель: зонные дисперсии вблизи уровня Ферми в плоскости $k_z = 0$ для LiFeAs, La111 и Ba112. Уровень Ферми – ноль энергий.

ней панели рисунка 5 показаны полная, Fe-3d и As-4p плотности состояний (слева) и энергетические дисперсии (справа). Из рисунка 5 видно, что в интервале от -2.5 эВ до +2.5 эВ вокруг уровня Ферми в основном расположены Fe-3d состояния, в то время как As-4p состояния расположены ниже по энергии от -2.5 эВ до -6.0 эВ. В плоскости $k_z = 0$ энергетические дисперсии для LiFeAs в окрестности уровня Ферми имеют схожую форму для всех трех систем La111 [A3] и Ba112 [A4] (см. рисунок 5 внизу).

Чтобы провести прямое сравнение системы LiFeAs с La111 и Ba122 соединениями Fe-3d плотности состояний данных систем наложены друг на друга на рисунке 6 слева в широком энергетическом интервале (сверху) и вблизи уровня Ферми (внизу). Небольшое увеличение ширины Fe-3d состояний в LiFeAs связано с более сжатым тетраэдром FeAs₄. По той же причине As-4p состояния ниже по энергии в LiFeAs, чем в La111 и Ba112. Величина полной плотности состояний на уровне Ферми в LiFeAs 3.86 сост./эВ/эл.яч., что немного ниже чем в La111 (4.01) и

в Ba122 (4.22) [A4]. В принципе, только этого факта достаточно для понижения T_c в сравнении с 1111 ферропниктидами. Из правой части рисунка 6 можно заключить, что в LiFeAs (как впрочем и в остальных системах) Fe-3d орбитали t_{2g} симметрии $-xz$, yz , xz дают основной вклад в плотность состояний на уровне Ферми.

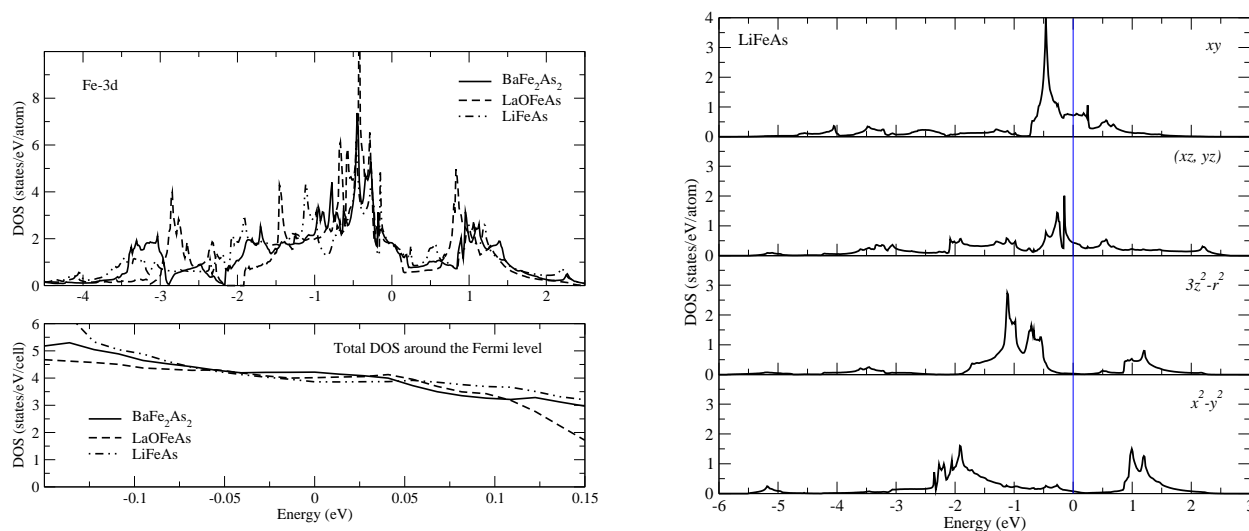


Рисунок 6: Верхняя панель слева: сравнение полученных в LDA плотностей состояний для Fe-3d оболочки для LiFeAs (линия точка-пунктир), La111 (линия точек) и Ba122 (сплошная линия). Нижняя панель слева: Полные плотности LiFeAs, La111 и Ba122 вблизи уровня Ферми. Правая панель: Рассчитанные в LDA плотности состояний различных Fe-3d орбиталей для LiFeAs. Уровень Ферми – ноль энергий.

На рисунке 7 показаны рассчитанные в LDA поверхности Ферми для LiFeAs, Ba122 и La111. Во всех системах имеется два дырочных цилиндра в окрестности Γ точки и два электронных эллиптических цилиндра в углах зоны Бриллюена. Данный факт также видно в дисперсионных кривых на рисунке 5. Однако, в отличие от Ba122 и La111 электронные цилиндры в LiFeAs сильнее отделены друг от друга возле точки A и больше диспергируют вдоль оси k_z .

Далее в данной главе рассмотрено влияние высоты аниона над плоскостью атомов железа на температуру сверхпроводящего перехода в новейших ВТСП системах на основе железа [A13]. Как показано в начале главы четыре основные состояния, пересекающие уровень Ферми принадлежат Fe-3(d) ионам которые образуют квадратную решетку. Ионы мышьяка, форми-

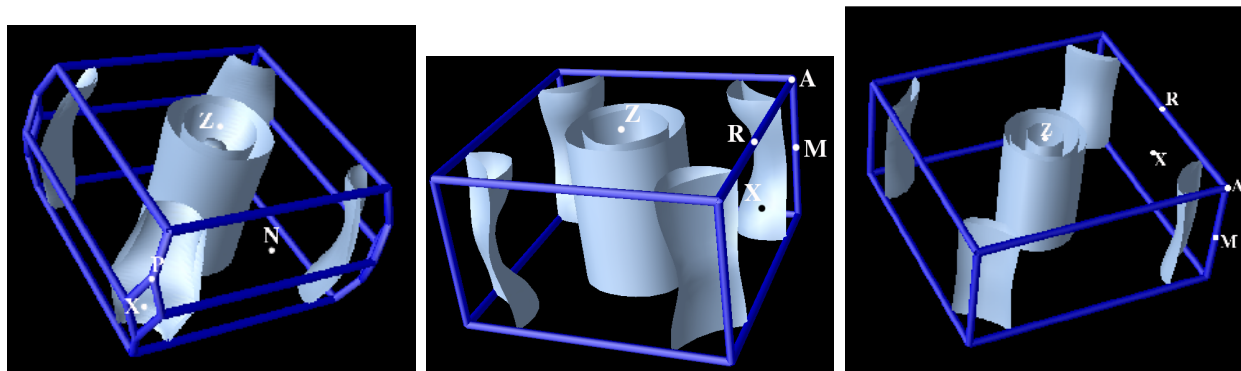


Рисунок 7: Полученная в LDA расчетах Ферми поверхность для BaFe₂As₂ (слева), LaOFeAs (справа) и LiFeAs (в центре).

рующие октаэдры вокруг ионов железа расположены в шахматном порядке над и под плоскостью железа. В экспериментальной работе [28] была установлена нелинейная и немонотонная зависимость температуры сверхпроводящего перехода от высоты аниона (фосфора, мышьяка или селена) над уровнем плоскости ионов железа. Максимум T_c соответствует высоте аниона ($a=P, As, Se$) $\Delta z_a \sim 1.37\text{\AA}$. Поскольку на данный момент вопрос о механизме сверхпроводимости в данных системах является предметом дискуссий здесь предложено объяснение зависимости T_c от $\Delta z_a \sim$ в рамках теории сверхпроводимости Бардина-Купера-Шриффера (БКШ) и ее наиболее адаптированной для электрон-фононного взаимодействия формулой Аллена-Дайнса.

Следуя обобщению экспериментальных данных по температурам сверхпроводящего перехода относительно высоты аниона над плоскостью атомов железа [28] были проведены LDA расчеты величины полной плотности состояний на уровне Ферми $N(E_F)$ с использованием базиса линейризованных маффин-тин орбиталей (LMTO) [18, 19].

На рисунке 8 кружочками изображена величина $N(E_F)$ в зависимости от высоты аниона Δz_a . Хорошо видно, что $N(E_F)$ имеет максимум при $\Delta z_a \sim 1.37\text{\AA}$. Это качественно согласуется с поведением экспериментальных значений T_c как функции Δz_a , обозначенных на рисунке 8 треугольниками, которые также имеют максимум около $\Delta z_a \sim 1.37\text{\AA}$.

Такое немонотонное поведение величины $N(E_F)$ может быть объяснено изменением силы гибридизации между анионом a и железом в тетраэдре $FeAs_4$. Наибольшая сила гибридизации между этими ионами будет наблюдаться в идеальном тетраэдре с углом $a-Fe-a$ 109.45° , таким образом отклонение величины этого угла от данного значения будет приводить к уменьшению $Fe-a$ гибридизации. В работе [A13] показано, что системы с наибольшей величиной $N(E_F)$ соответствуют величине угла $a-Fe-a$ близкому к идеальному значению 109.45° .

Зависимость Δz_a от $N(E_F)$ неизбежно приводит к возникновению соответствующей зависимости и для T_c . Простейшая связь величины полной плотности состояний $N(E_F)$ с температурой сверхпроводящего перехода T_c возникает в теории БКШ: $T_c = 1.14\omega_D e^{-1/\lambda}$, где ω_D – характеристическая частота коллективных возбуждений, обеспечивающих спаривательное взаимодействие (фононы, спиновые флуктуации и т.д.), а $\lambda = gN(E_F)/2$ – безразмерная константа взаимодействия (g – размерная константа связи). Далее выберем $\omega_D=350$ К, что соответствует результатам по нейтронному рассеянию для фононной плотности состояний в La_{111} [29] и Ba_{122} [30] системах. Выберем для всех систем в качестве g экспериментальную оценку ее величины для Ba_{122} (зная T_c получим $\lambda=0.4$) т.к. экспериментальное значение $T_c=38$ К в данной системе наиболее стабильно относительно способа приготовления образца и способа его легирования. Теперь T_c может быть пересчитано для всех остальных систем, принимая во внимание влияние только от $N(E_F)$.

Для объяснения недавно полученных спектров фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES) для состава $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ [31] в завершении главы четыре представлены результаты LDA'+DMFT метода (примененного ранее к оксидам переходных металлов) для нового сверхпроводника на основе железа $K_{1-x}Fe_{2-y}Se_2$ [A14,A15], открытого в 2010 г. и принадлежащего к новому классу ВТСП соединений – селенидам железа. Хотя соединения AFe_2As_2 (описанное выше) и AFe_2Se_2 изоструктурны, однако, электронные структуры соединений AFe_2As_2 и AFe_2Se_2 , полученные в LDA расчетах, значительно отличаются [A7].

На рисунке 9 представлено сравнение спектральных функций, полученных в LDA+DMFT

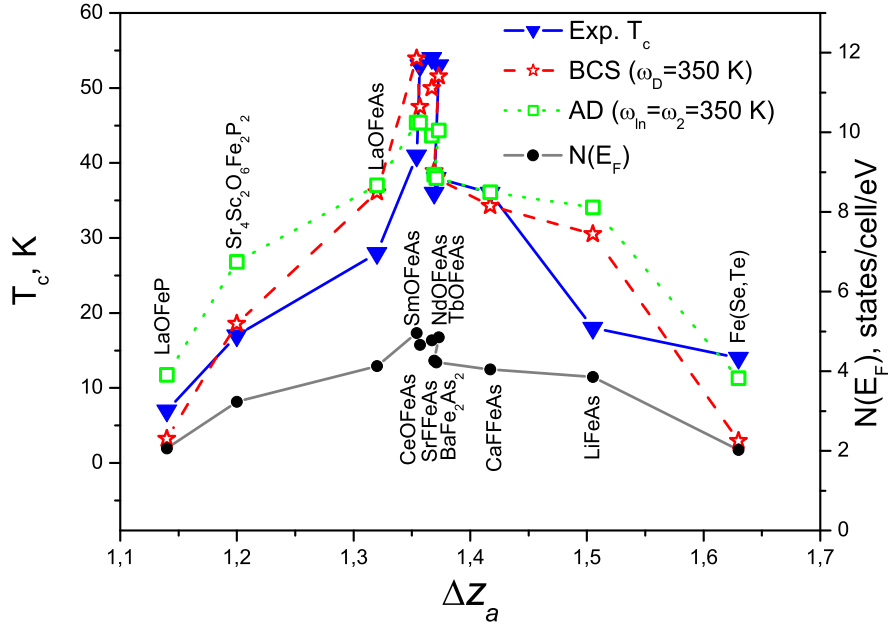


Рисунок 8: Рассчитанные в LDA приближении величины полных плотностей состояний $N(E_F)$ (кружки, правая шкала) и температуры сверхпроводящего перехода T_c (шкала слева), полученные в рамках БКШ теории (звездочки), уравнения Аллена-Дайнса (квадратики) и экспериментальные значения T_c (треугольники) как функция высоты аниона Δz_a над плоскостью ионов железа для новых ВТСП систем.

и LDA'+DMFT расчетах, с ARPES спектром [31] для $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$. Теоретические спектраль-

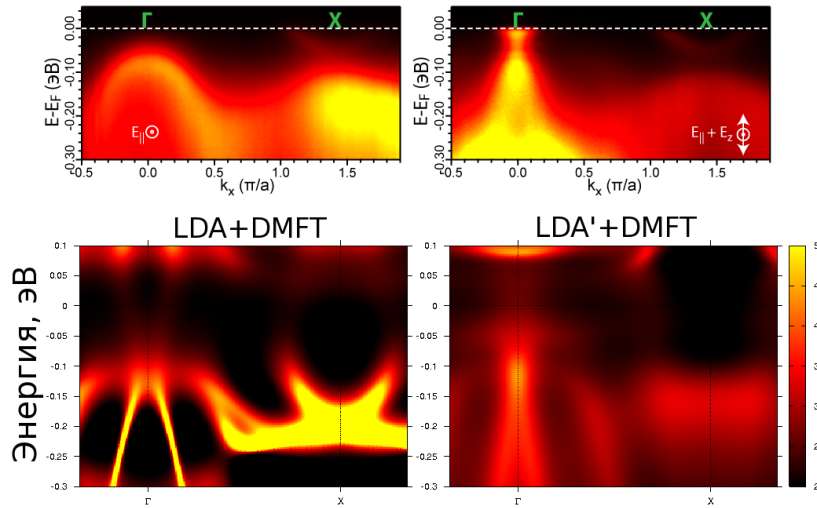


Рисунок 9: Сравнение спектральных функций LDA+DMFT (внизу слева) и LDA'+DMFT (внизу справа) расчетов с ARPES спектрами с разной поляризацией (вверху) для $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$. Интенсивность спектральной функции обозначена цветом. Ноль энергии – уровень Ферми.

ные функции приведены вдоль направления $\Gamma - X$ зоны Бриллюэна аналогично экспериментальным данным. Спектральная функция LDA'+DMFT расчета (рисунок e) по интенсивности в области X точки и форме энергетических дисперсий около Γ точки немного лучше согласуется с ARPES спектром (справа вверху), чем спектральная функция LDA+DMFT расчета (слева внизу). Из анализа теоретических и экспериментальных данных видно, что система $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$

более коррелирована нежели ВТСП пниктиды. Поскольку экспериментально были синтезированы образцы $K_{1-x}Fe_{2-y}Se_2$ с разной степенью легирования, то в работе [A15] было изучено изменение электронных свойств с легированием в рамках LDA'+DMFT расчетов с E_{dc} в виде FLL(SC). Для этого были выбраны еще три уровня легирования: один, соответствует стехиометрическому составу (полное число электронов $n_e=29.00$), а два других промежуточных $n_e=28.00$ и $n_e=27.20$ (для $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2 - n_e=26.52$).

Для определения влияния локального кулоновского взаимодействия на каждую из зон в Fe-3d полосе были найдены соответствующие перенормировки массы за счет корреляционных эффектов и величины смещений для различных частей LDA' зон (см. таблицу 3), необходимые для совмещения LDA' зон с максимумами спектральных функций, полученных из LDA'+DMFT расчетов для различных уровней легирования. На рисунке 10 пунктирными линиями представ-

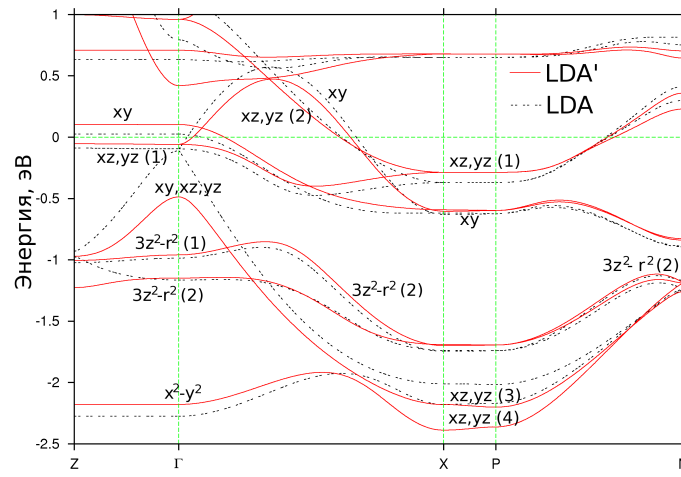


Рисунок 10: Энергетические дисперсии LDA' расчета (сплошные линии) KFe_2Se_2 вдоль симметричных направлений зоны Бриллюэна с обозначением зон, для которых были подобраны коэффициенты корреляционной перенормировки. Пунктирные линии – энергетические дисперсии LDA расчета. Ноль энергии соответствует уровню Ферми.

лены рассчитанные в LDA энергетические дисперсии, которые по форме и положению схожи с LDA' энергетическими дисперсиями. Поэтому коэффициенты корреляционной перенормировки в LDA+DMFT расчетах будут примерно такими же, как в LDA'+DMFT расчетах.

В результате для соединения $K_{1-x}Fe_{2-y}Se_2$ установлено, что при дырочном легировании от стехиометрического состава KFe_2Se_2 до состава $K_{0.76}Fe_{1.72}Se_2$ растет роль корреляционных эффектов при постоянной величине хаббардовского U и обменного хундовского J взаимодействий. Данные эффекты различны для разных квазичастичных зон, а также для различных частей зоны Бриллюэна, что не наблюдалось в арсенидах железа, в которых установлено однородное сжатие LDA зон. Выше указанные результаты опубликованы в работе [A15].

В пятой главе диссертации рассматривается обобщенный DMFT+ Σ подход (см. обзор [A16]). Основная идея DMFT+ Σ подхода - ввести в стандартные уравнения DMFT “внешние” (дополнительные) по отношению к модели Хаббарда коллективные возбуждения в приближении аддитивности собственно-энергетической части (СЭЧ), возникающей в DMFT, и СЭЧ, соответствующей взаимодействию “внешних” коллективных возбуждений и коррелированных электронов.

Наиболее существенным приближением DMFT+ Σ подхода является аддитивность СЭЧ Σ , связанной, например, с хаббардовским взаимодействием и Σ_k – СЭЧ от взаимодействия

Таблица 3: Величины коэффициентов корреляционной перенормировки отдельных LDA' зон, которые обозначены на Рисунке 10. В скобках приведены смещения в шкале энергий LDA' зон (эВ).

Орбитальный характер	$n_e=26.52$	$n_e=27.20$	$n_e=28.00$	$n_e=29.00$
xy LHB	1.5 (-0.23)	3.9 (-0.73)	2.65 (-0.61)	1.7 (-0.35)
xy UHB	нет	~ 4.0 (+0.60)	1.7 (+0.25)	~ 4.0 (+0.75)
xz, yz (1) LHB	4.2 (-0.78)	3.0 (-0.75)	2.6 (-0.69)	1.7 (-0.38)
xz, yz (1) UHB	1.6 (+0.19)	~ 2.5 (+0.48)	3.0 (+0.56)	4.0 (+0.77)
xz, yz (2)	2.3 (-0.48)	~ 2.5 (-0.60)	2.6 (-0.69)	1.7 (-0.38)
xz, yz, xy	1.2 (-0.1)	1.3 (-0.09)	1.3 (-0.10)	1.4 (-0.17)
$3z^2-r^2$ (1)	4.7 (-0.85)	2.0 (-0.30)	1.3 (-0.03)	1.25 (0.00)
$3z^2-r^2$ (2)	1.1 (+0.25)	1.3 (0.00)	1.3 (-0.03)	1.25 (0.00)
xz, yz (3)	1.1 (+0.10)	1.1 (+0.17)	1.0 (+0.40)	1.4 (-0.10)
xz, yz (4)	1.1 (+0.10)	1.1 (+0.15)	1.0 (+0.35)	1.4 (-0.17)
x^2-y^2	1.1 (+0.20)	1.0 (+0.32)	1.3 (-0.07)	1.3 (-0.07)
Fe3d полоса	1.3	1.3	1.25	1.25

“внешних” коллективных возбуждений и коррелированных электронов. Тогда функция Грина метода DMFT+ Σ может быть записана как

$$G_{\mathbf{k}}(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(\omega) - \Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)}. \quad (8)$$

Главное достоинство обобщенного DMFT+ Σ подхода заключается в том, что аддитивная форма СЭЧ (8) [A16,A17] позволяет сохранить структуру самосогласованных уравнений общепринятого DMFT метода [10]. Однако, в самосогласованном цикле DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ подхода есть дополнительный шаг, а именно, вычисление “внешней” СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{k}}(\mu, \omega, [\Sigma(\omega)])$ в некотором приближении, которая зависит от химпотенциала μ и локальной СЭЧ $\Sigma(\omega)$. Соответствующая локальная решеточная функция Грина в DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ методе определяется следующим образом на каждой итерации:

$$G_{ii}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(\omega) - \Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)}. \quad (9)$$

В результате получается искомая функция Грина (8), в которой $\Sigma(\omega)$ и $\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)$ найдены при самосогласовании.

В частности, в данной диссертационной работе в качестве “дополнительных взаимодействий” были выбраны взаимодействия коррелированных электронов с псевдощелевыми АФМ флуктуациями ближнего порядка [A17] и электрон-фононное взаимодействие [A18,A19].

Одним из наиболее ярких физических эффектов, наблюдаемых экспериментально для ВТСП систем на основе меди являются так называемые псевдощелевые эффекты [32]. Псевдощель возникает при относительно небольшом легировании (до величины оптимального легирования) ВТСП систем и температурах выше температуры сверхпроводящего перехода. Экспериментально это выражается в понижении величины фотоэмиссионного спектра на уровне Ферми с ростом легирования или при понижении температуры. В псевдощелевой фазе в медных ВТСП системах экспериментально наблюдается некоторый ближний порядок, что приводит к

необходимости учета пространственных корреляционных эффектов для адекватного описания псевдощелевого режима [32]. Напомним, что медные ВТСП оксиды являются сильно коррелированными системами.

Рассмотрим псевдощелевые эффекты в сильно коррелированных системах в рамках обобщенного DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ подхода как предложено в работах [A16,A17]. Для вычисления $\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)$, соответствующей движению электрона в гауссовом случайном поле псевдощелевых флуктуаций с основным рассеянием электрона на характерный антиферромагнитный вектор $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$ в модели “горячих точек”, используется следующая рекуррентная процедура [32]:

$$\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega) = \Sigma_{n=1}(\omega\mathbf{k}) \quad (10)$$

где

$$\Sigma_n(\omega\mathbf{k}) = \Delta^2 \frac{s(n)}{i\omega + \mu - \Sigma(\omega) - \varepsilon_n(\mathbf{k}) + inv_n\kappa - \Sigma_{n+1}(\omega\mathbf{k})}. \quad (11)$$

Величина Δ характеризует псевдощелевой потенциал, а $\kappa = \xi^{-1}$ является обратной корреляционной длиной, характеризующей флуктуации зарядовой (CDW) или спиновой плотности ближнего порядка (SDW). Соответствующие дисперсии и скорости определены как $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ и $v_n = |v_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^x| + |v_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^y|$ для четных шагов рекурсии n и $\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k})$ и $v_n = |v_{\mathbf{k}}^x| + |v_{\mathbf{k}}^y|$ для нечетных шагов рекурсии n . Компоненты скорости $v^{x,y}(\mathbf{p})$ вычисляются обычным образом как производная невзаимодействующей электронной дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$ по волновому числу. Комбинаторный множитель $s(n)$ определяет число фейнмановских диаграмм, включенных в суммирование для различных типов флуктуаций ближнего порядка [32]. Физически рекуррентная процедура (11) соответствует введению флуктуаций ближнего порядка с пространственным масштабом ξ^{-1} в однородный фермионный резервуар окружающий эффективную примесь Андерсона, возникающую в рамках стандартного DMFT подхода. В принципе величины обоих параметров Δ и ξ , характеризующих псевдощелевые флуктуации могут быть вычислены в рамках модели Хаббарда [A16]. Для решения эффективной однопримесной модели Андерсона используем численную ренормгруппу (NRG) [20].

Нетривиальная импульсная зависимость $\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)$ приводит к существенной трансформации Ферми поверхности из-за формирования псевдощели [A20,A21]. Для демонстрации “разрушения” поверхности Ферми, полученного в DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ расчетах для случая сильно коррелированного металла $U = 4t$ при заполнении $n = 0.8$, соотношения интегралов перескока $t'/t = -0.4$, корреляционной длине $\xi = 10a$ (a – параметр решетки) на рисунке 11 представлены карты спектральной плотности при $\omega = 0$ для различных величин псевдощелевого потенциала: (a) – $\Delta = 0.2t$; (b) – $\Delta = 0.4t$; (c) – $\Delta = t$; (d) – $\Delta = 2t$. Для сравнения пунктиром изображена невзаимодействующая поверхность Ферми, которая совпадает с точностью до небольшого температурного размытия с DMFT результатами, в силу локальности DMFT. С ростом псевдощелевой амплитуды Δ хорошо определенная квазичастичная поверхность Ферми (пунктир) подавляется (“разрушается”) в окрестности точек пересечения поверхности Ферми и границы АФМ зоны Бриллюэна (точки) – так называемые “горячие точки”. При $\Delta = 0.4t$ хорошо видно формирование горячих точек, при больших значениях Δ хорошо видимой остается только дуга Ферми в нодальном направлении, в то время как на границах зоны Бриллюэна поверхность Ферми становится не видна. Эти результаты качественно на модельном уровне иллюстриру-

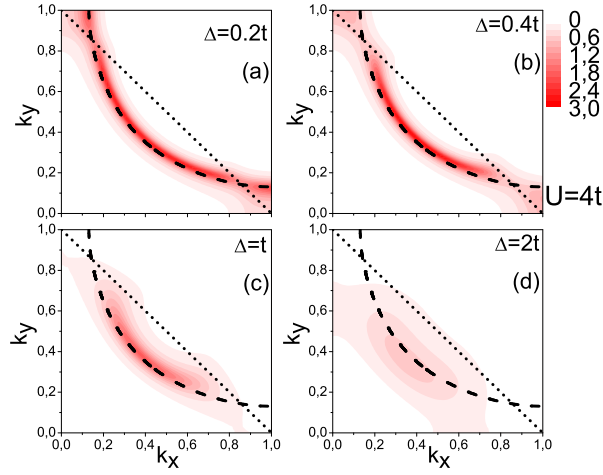


Рисунок 11: “Разрушение” поверхности Ферми, полученное в DMFT+ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ расчетах для случая сильно коррелированного металла $U = 4t$ для заполнения $n = 0.8$, соотношения интегралов перескока $t'/t = -0.4$, $\xi = 10a$ (a – параметр решетки) для различных величин псевдощелевого потенциала: (a) – $\Delta = 0.2t$; (b) – $\Delta = 0.4t$; (c) – $\Delta = t$; (d) – $\Delta = 2t$. Пунктир – невзаимодействующая поверхность Ферми.

ют экспериментальные ARPES данные, полученные для ВТСП купратов, что описано далее в главе шесть.

Во второй части главы пять представлены результаты DMFT+ Σ расчетов для модели Хаббарда, дополненной взаимодействием с дебаевскими (или эйнштейновскими) фононами в адиабатическое приближении (выполняется теорема Мигдала). Такое приближение разумно для константы электрон-фононного взаимодействия $\lambda < E_F/\omega_{ph} \sim 10$, где E_F – энергия Ферми, ω_{ph} – дебаевская или эйнштейновская частота. Рассмотрено влияние дебаевских (или эйнштейновских) фононов на слабо и сильно коррелированные электроны, в том числе и в окрестности мотт-хаббардовского перехода металл-диэлектрик. Дальнейшее рассмотрение в этом разделе в основном следует работам [A18,A19].

Проблема взаимовлияния сильно коррелированных электронов фононов одна из центральных в физике сильно коррелированных систем. Фактически история таких исследований достаточно долгая, например, одной из наиболее популярных моделей для электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) в сильно коррелированных системах является модель Хаббарда-Холстейна (ХХМ) [34]. С одной стороны модель Хаббарда описывает локальное кулоновское взаимодействие на решетке, включая, например мотт-хаббардовский переход металл-диэлектрик. С другой стороны, модель Холстейна содержит локальное линейное по отклонениям плотности взаимодействие электронов проводимости с локальными (эйнштейновскими) фононными модами [33]. Однако, до настоящего времени, по-видимому, не исследовались сильно коррелированные электроны, взаимодействующие с дебаевскими фононами. Это является тем более удивительным ввиду широкого обсуждения физики “кинков” (переломов) в электронной дисперсии, наблюдаемых в ARPES экспериментах в ВТСП на 40-70 meV ниже уровня Ферми (см. подробности в [A30]). Проблема формирования кинков в электронной дисперсии, вызываемых электрон-фононным взаимодействием в сильно коррелированных системах в рамках ХХМ кратко изложена в обзоре [A16]. Для рассмотрения взаимодействия фононов с сильно коррелированными электронами введем “внешнюю” СЭЧ $\Sigma_{ph}(\varepsilon, \mathbf{p})$, возникающую в рамках обычной модели



Рисунок 12: Вклад в электрон-фононную СЭЧ в адиабатическом приближении, включаемый в DMFT+ Σ_{ph} схему.

Фрелиха. Для решения однопримесной андерсоновской задачи как и ранее будет использована численная ренормгруппа NRG [20]. Все расчеты проводятся для почти нулевой температуры при половинном заполнении. В качестве затравочной электронной плотности состояний выбрана полуэллиптическая плотность состояний с полушириной зоны D .

В соответствии с теоремой Мигдала [35] в адиабатическом приближении ограничимся только простейшим вкладом первого порядка для $\Sigma_{ph}(\varepsilon, \mathbf{p})$:

$$\Sigma_{ph}(\varepsilon, \mathbf{p}) = ig^2 \sum_{\omega, \mathbf{k}} \frac{\omega_0^2(\mathbf{k})}{\omega^2 - \omega_0^2(\mathbf{k}) + i\delta} \frac{1}{\varepsilon + \omega + \mu - \varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{k}) - \Sigma(\varepsilon + \omega) - \Sigma_{ph}(\varepsilon + \omega, \mathbf{p} + \mathbf{k})}, \quad (12)$$

где g – обычная константа электрон-фононного взаимодействия, $\omega_0(\mathbf{k})$ – фононный закон дисперсии, который берется либо в модели Дебая, либо в модели Эйнштейна:

$$\omega_0(\mathbf{k}) = \begin{cases} u|\mathbf{k}|, & |\mathbf{k}| < \frac{\omega_D}{u} \\ \omega_0, & |\mathbf{k}| < k_0 \end{cases}. \quad (13)$$

Здесь u – скорость звука, ω_D , ω_0 – частоты Дебая и Эйнштейна, а величина k_0 порядка импульса Ферми p_F .

Так как $\Sigma_{ph}(\varepsilon, \mathbf{p})$ (12) слабо зависит от импульса учтем только существенную частотную зависимость и в случае дебаевского спектра [36]) выражение (12) примет вид:

$$\Sigma_{ph}(\varepsilon) = \frac{-ig^2}{4\omega_c^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left\{ \omega_D^2 + \omega^2 \ln \left| \frac{\omega_D^2 - \omega^2}{\omega^2} \right| + i\pi\omega^2 \theta(\omega_D^2 - \omega^2) \right\} I(\varepsilon + \omega), \quad (14)$$

а в случае эйнштейновского спектра:

$$\begin{aligned} \Sigma_{ph}(\varepsilon) = & \frac{ig^2}{16\pi} \frac{k_0^2}{p_F^2} \left\{ -i\pi(I(\varepsilon + \omega_0) + I(\varepsilon - \omega_0)) + \right. \\ & \left. + \int_0^{\infty} d\omega \frac{I(\varepsilon + \omega_0 + \omega) + I(\varepsilon - \omega_0 - \omega) - I(\varepsilon + \omega_0 - \omega) - I(\varepsilon - \omega_0 + \omega)}{\omega} \right\} \end{aligned} \quad (15)$$

с

$$I(\varepsilon) = \int_{-D}^{+D} d\xi \frac{N_0(\xi)}{E_\varepsilon - \xi}. \quad (16)$$

где $E_\varepsilon = \varepsilon - \Sigma(\varepsilon) - \Sigma_{ph}(\varepsilon)$ и $\omega_c = p_F u$ – характерная частота порядка ω_D . Для случая полуэллиптической “затравочной” плотности состояний $N_0(\varepsilon)$ с полушириной зоны D получаем:

$$I(\varepsilon) = \frac{2}{D^2} (E_\varepsilon - \sqrt{E_\varepsilon^2 - D^2}), \quad (17)$$

Далее введем безразмерную константу электрон-фононного взаимодействия:

$$\lambda = g^2 N_0(\varepsilon_F) \frac{\omega_D^2}{4\omega_c^2}. \quad (18)$$

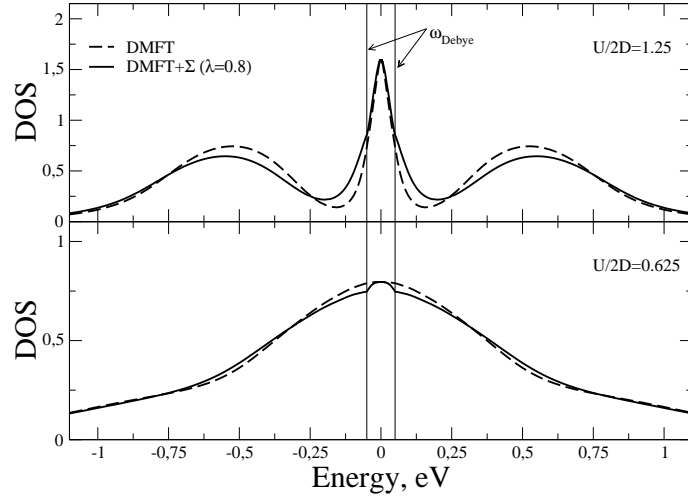


Рисунок 13: Сравнение плотностей состояний, полученных в стандартной DMFT (пунктир) и DMFT+ Σ_{ph} (сплошные кривые) методом для сильного (верхняя панель, $U/2D = 1.25$) и слабого (нижняя панель, $U/2D = 0.625$) хаббардовского взаимодействия. Безразмерная константа EPI $\lambda = 0.8$.

Отметим, что в данном случае перенормировка фононов вследствие электрон-фононного взаимодействия [36] не учитывается, в предположении, что фононный спектр (13) задан экспериментом.

На рисунке 13 представлено сравнение между плотностями состояний из DMFT и DMFT+ Σ_{ph} расчетов для сильного ($U/2D = 1.25$) и слабого ($U/2D = 0.625$) хаббардовского взаимодействия, представленного сверху и внизу соответственно. Безразмерная константа ЭФВ (18), использованная в этих расчетах выбрана $\lambda = 0.8$, а частота Дебая $\omega_D = 0.125D$. В обоих слабо и сильно коррелированном случаях наблюдается перераспределение спектрального веса из-за электрон-фононного взаимодействия. Для $U/2D = 1.25$ (верхняя панель рисунка 13) хорошо видна развитая трехпиковая структура характерная для сильно коррелированного металла. В энергетическом интервале большем $\pm\omega_D$ в DMFT+ Σ_{ph} расчете квазичастичный пик становится значительно шире за счет переноса части спектрального веса из хаббардовских зон. Это уширение DMFT+ Σ_{ph} квазичастичного пика ведет в свою очередь к “задержке” перехода металл-диэлектрик. Этот результат аналогичен тому, что наблюдается для ХХМ в режиме слабого электрон-фононного взаимодействия [34].

В случае слабых корреляций $U/2D = 0.625$ хаббардовские зоны не формируются, а наблюдаются лишь некоторые “боковые крылья” в плотности состояний. Основное отличие между DMFT и DMFT+ Σ_{ph} результатами видно в интервале $\pm\omega_D$, где наблюдается образование “шапочки” в DMFT+ Σ_{ph} плотности состояний.

В заключении [главы пять](#) рассмотрено поведение фононных кинков в электронном спектре, в зависимости от величины хаббардовского взаимодействия U [A19]. Прямые DMFT+ Σ_{ph} расчеты показывают, что с ростом величины отношения $U/2D$ величина скорости Ферми падает и положение кинка сдвигается по импульсной оси все дальше от p_F , в то время как энергия кинка сохраняет величину ω_D (см. рисунок 14).

В [главе шесть](#) рассматривается электронная структура оксидов меди в псевдощелевом состоянии в рамках обобщенного LDA+DMFT+ Σ метода [A23]–[A29]. Псевдощелевое состояние, как уже отмечалось выше, является одной из основных аномалий нормального состояния ВТСП

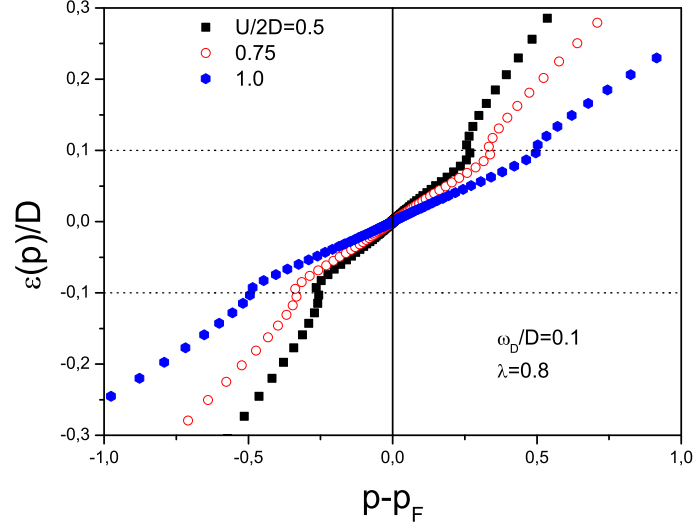


Рисунок 14: Квазичастичная дисперсия с фоновыми кинками вблизи уровня Ферми, полученная DMFT+ Σ_{ph} расчетами для различных величин хаббардовского взаимодействия $U/2D = 0.5, 0.75, 1.0$; $\lambda = 0.8, \omega_D = 0.1D$.

купратов, считается, что выяснение его физической природы является ключевым для понимания механизма ВТСП [32]. В данной главе показано, что учет AFM флуктуаций ближнего порядка (рассмотренных в [главе пять](#)), достаточен для описания целого ряда ARPES экспериментов. С одной стороны схема LDA+DMFT+ Σ наследует все преимущества LDA+DMFT [6], т.е. объединения первопринципной одноэлектронной теории функционала плотности в приближении локальной плотности (DFT/LDA) [9] и теории динамического среднего поля (DMFT) для сильно коррелированных электронов [10]. С другой стороны, эта схема позволяет учесть нелокальные корреляции, вводя импульсно зависящую СЭЧ с сохранением обычной системы самосогласованных DMFT уравнений [A16,A20,A21]. Для решения однопримесной задачи DMFT, в обсуждаемых ниже работах, был использован метод численной ренормгруппы (NRG) [20].

В рамках LDA+DMFT+ Σ подхода были проведены расчеты для ряда дырочно допированных высокотемпературных сверхпроводников $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8-\delta}$ (Bi2212) [A22,A23] и $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) [A24], а также электронно допированных систем $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (NCCO) [A25,A26,A29] и $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (PCCO) [A27]. Кристаллографические данные, использованные в LDA+DMFT+ Σ расчетах и детали расчетов также приведены в данных работах.

Хорошо известно, что физические свойства купратов, во многом определяются квазидвумерностью их электронных свойств. С этой точки зрения, наибольший интерес представляют электронные состояния в плоскостях CuO_2 , где имеется частично заполненная антисвязывающая $\text{Cu-}3d(x^2-y^2)$ орбиталь с электронной дисперсией, пересекающей уровень Ферми. В приближении сильной связи этот закон дисперсии имеет вид:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) = & -2t (\cos k_x a + \cos k_y a) - 4t' \cos k_x a \cos k_y a & (19) \\ & -2t'' (\cos 2k_x a + \cos 2k_y a) - 2t''' (\cos k_x a \cos 2k_y a + \cos 2k_x a \cos k_y a). \end{aligned}$$

Здесь t, t', t'', t''' – интегралы переноса Cu-Cu в первых четырех координационных сферах плоскости CuO_2 , a – постоянная решетки. Значения эффективных интегралов переноса, полученные в рамках метода линейаризованных muffin-tin орбиталей (LMTO) [18, 19], с последующим использованием функций Ванье LMTO N -го порядка (NMTO), полученных в рамках

Таблица 4: Рассчитанные энергетические модельные параметры (эВ) и экспериментальная корреляционная длина ξ . Первые четыре интеграла переноса Cu-Cu в плоскости CuO₂ t, t', t'', t''' ; эффективный межплоскостной интеграл переноса t_{\perp} , локальное кулоновское взаимодействие U и амплитуда псевдощели Δ .

	t	t'	t''	t'''	t_{\perp}	U	Δ	ξ
Bi2212	-0.627	0.133	0.061	-0.015	0.083	1.51	0.21	10a
NCCO	-0.44	0.153	0.063	-0.01	—	1.1	0.36	50a
PCCO	-0.438	0.156	0.098	—	—	1.1	0.275	50a
LSCO	-0.476	0.077	-0.025	-0.015	—	1.1	0.21	10a

подхода работы [37], приведены в Таблице 4. В дальнейшем мы используем рассчитанную в LDA эффективную антисвязывающую Cu-3d(x^2-y^2) зону как “затравочную” в LDA+DMFT+ Σ вычислениях.

В двуслойных системах, например в Bi2212, существенны также перескоки между двумя соседними плоскостями. В приближении сильной связи выражение для соответствующей межплоскостной дисперсии (см. детали в [A22]) имеет вид:

$$t_{\perp}(\mathbf{k}) = \frac{t_{\perp}}{4}(\cos k_x a - \cos k_y a)^2 \quad (20)$$

Величина t_{\perp} приведена в Таблице 4. Учет межплоскостных перескоков и возникающих эффектов межплоскостного расщепления “bilayer splitting” требует некоторого обобщения расчетной схемы DMFT+ Σ схемы [A23].

Для проведения DMFT расчетов необходимо также рассчитать величину одноузельного кулоновского взаимодействия. Величина такого взаимодействия U для эффективной Cu-3d(x^2-y^2) орбитали, полученная из LDA в методе constrained LDA [24], также приведена в Таблице 4.

Для учета AFM спиновых флуктуаций применялась двумерная модель псевдощелевого состояния [32], обобщенная для DMFT+ Σ расчетов согласно [A16,A17]. Дополнительная “внешняя” \mathbf{k} -зависимая СЭЧ $\Sigma_{\mathbf{k}}$ [A16,A17] описывает нелокальные псевдощелевые АФМ флуктуации.

Для определения $\Sigma_{\mathbf{k}}$ необходимо знание двух важных параметров – амплитуды псевдощели Δ , представляющей энергетический масштаб флуктуирующей SDW, и корреляционной длины флуктуаций ξ . Величины Δ рассчитывались как описано в работах [A16,A17,A22]. Величины корреляционной длины брались в соответствии с величинами, получаемыми из экспериментов по нейтронному рассеянию для NCCO и LSCO (см. детали в [A24,A25]). Используемые величины Δ и ξ для всех рассматриваемых систем приведены в Таблице 4. Температура DMFT(NRG) расчетов выбиралась равной 0.011 эВ, а величина концентрации электронов или дырок (допирование) – 15%.

В результате проведенных LDA+DMFT+ Σ расчетов, возникает ярко выраженная картина “горячих точек” в поведении спектральной плотности и на картах поверхности Ферми для электронно допированных систем [A25,A26,A27], в то время как в дырочно допированных системах возникают только “дуги” Ферми [A22,A23,A24].

На рисунке 15 приведены полученные в LDA+DMFT+ Σ расчетах спектральные плотности вдоль 1/8 части невзаимодействующей поверхности Ферми в направлении от нодальной точки на диагонали зоны Бриллюэна (верхняя кривая) к антинодальной на границе этой зоны (нижняя кривая). Результаты для Bi2212 показаны на левой панели, для NCCO — на правой панели

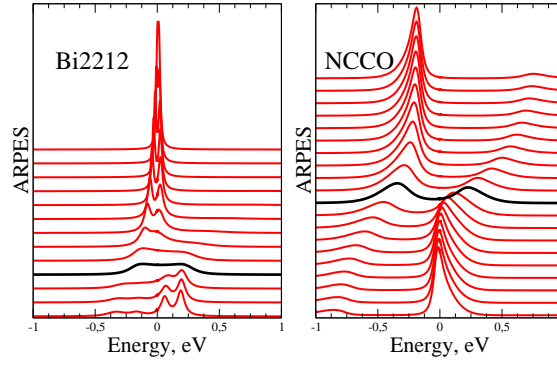


Рисунок 15: LDA+DMFT+ Σ спектральные плотности для Bi2212 (левая панель) и NCCO (правая панель) вдоль “затравочной” поверхности Ферми в $1/8$ зоны Бриллюэна. Пунктирная черная кривая соответствует “горячей точке” [A24,A25,A26]

рисунка 15. Для обеих систем в нодальном направлении квазичастицы хорошо определены — видим острый пик спектральной плотности, расположенный практически на уровне Ферми. При движении к антинодальной точке квазичастичное затухание растет, достигая максимума в “горячей точке” (пунктир), а пик сдвигается от уровня Ферми. Такое поведение находится в полном соответствии с экспериментом [15, 16, 17] (сравнение с экспериментом см. работах [A23]-[A29]). Непосредственно из LDA+DMFT+ Σ результатов, показанных на рисунке 15 видим, что для Bi2212 антинодальные состояния формируются низкоэнергетическим краем псевдощели, а для NCCO — высокоэнергетическим. Для Bi2212 мы также наблюдаем межплоскостное расщепление квазичастичного пика, что связано с наличием двух плоскостей CuO_2 в элементарной ячейке.

“Горячие точки” для NCCO расположены ближе к диагонали зоны Бриллюэна [A24,A25,A26], что можно видеть по черным линиям на рисунке 15, соответствующим “горячим точкам”. Кроме того корреляционная длина в NCCO гораздо больше, чем в Bi2212. Поэтому для NCCO (в отличие от Bi2212) в антинодальном направлении квазичастицы снова достаточно хорошо определены. Для Bi2212 рассеяние вблизи границ зоны Бриллюэна сильно везде и вместо картины “горячих точек” мы наблюдаем достаточно сильное “разрушение” поверхности Ферми вблизи этих границ. Качественно такая же картина наблюдается также в LSCO.

На рисунке 16 на верхней панели представлена LDA+DMFT+ Σ карта поверхности Ферми в четверти первой зоны Бриллюэна для Bi2212 (слева) и NCCO (справа). В Bi2212 наблюдается существенное “разрушение” поверхности Ферми рассеянием на псевдощелевых флуктуациях вблизи границ зоны Бриллюэна. Напротив, в NCCO поверхность Ферми почти полностью восстанавливается вблизи границ зоны Бриллюэна. С другой стороны Ферми дуга вокруг нодального направления в Bi2212 достаточно четко выражена, а в NCCO заметно размыта. Это еще одно последствие того, что “горячие точки” в NCCO расположены ближе к диагонали зоны Бриллюэна. Немного большая величина амплитуды псевдощели Δ также способствует большому размытию Ферми дуг в NCCO. Необходимо отметить появление и “теневого” поверхности Ферми, которая заметно более интенсивна для NCCO.

Качественно, именно такие поверхности Ферми наблюдались экспериментально для реальных Bi [17] и Nd [16] систем (нижняя панель Рис. 16). Таким образом, различие карт поверхностей Ферми для этих систем связано, в основном, с различием зонных параметров этих

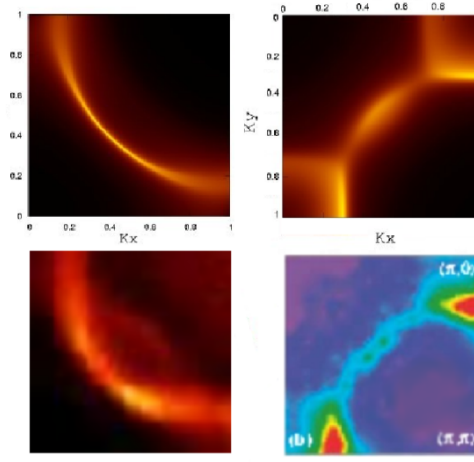


Рисунок 16: LDA+DMFT+ Σ карты поверхности Ферми, полученные в [A23,A26] для Bi2212 (верхняя левая панель) и NCCO (верхняя правая панель) в четверти зоны Бриллюэна, (k_x, k_y в единицах π/a). Экспериментальные FS для Bi2212 (нижняя левая панель [17]) и NCCO (нижняя правая панель [16]).

материалов. В частности, LDA поверхности Ферми NCCO более искривлены и “горячие точки” оказываются достаточно далеко от границ зоны Бриллюэна, соответственно поверхность Ферми вблизи этих границ почти не испытывает рассеяния на AFM флуктуациях. В Bi2212 LDA поверхность Ферми подходит к границам зоны Бриллюэна достаточно близко к точке $(\pi/a, 0)$, близки к ней и “горячие точки”. Поэтому в Bi2212 горячие точки “замыты” общим сильным псевдощелевым рассеянием вблизи точки $(\pi/a, 0)$ и не наблюдаются. “Горячие точек” в NCCO ярче проявляются также благодаря гораздо большей величине корреляционной длины флуктуаций.

Не менее яркие результаты получены в LDA+DMFT+ Σ расчетах и ARPES экспериментах для системы PCCO [A27]. На рисунке 17 представлена карта поверхности Ферми PCCO (панель (a) – LDA+DMFT+ Σ результаты, панель (b) – экспериментальные данные ARPES). Поверхность Ферми здесь ясно различима, лишь вблизи границ первой зоны Бриллюэна и вокруг точки $(\pi/a/2, \pi/a/2)$ (дуга Ферми). Опять, как и в NCCO, наблюдается “разрушение” поверхности Ферми в “горячих точках”, расположенных на пересечении поверхности Ферми и ее AFM теневой “реплики”.

Сравним (см. рисунок 17 слева) теоретические (верхняя панель) и экспериментальные (нижняя панель) квазичастичные дисперсии вдоль наиболее характерных сечений поверхности Ферми, показанных на рисунке 17. Теоретические данные домножены на функцию Ферми с температурой 30K и свернуты (по энергии) с распределением Гаусса для имитации экспериментального разрешения.

Разрез 1 пересекает квазичастичную и “теневую” поверхности Ферми вблизи границы зоны Бриллюэна. Соответственно, на нем можно обнаружить “вилко”-подобную структуру, сформированную подавленной “теневой” зоной и гораздо лучше определенной квазичастичной зоной. Такая структура соответствует началу формирования цилиндра поверхности Ферми вокруг $(\pi/a, 0)$ точки. Разрез 2 проходит точно через “горячую точку”. Здесь мы видим сильное подавление квазичастичной зоны вблизи уровня Ферми. Разрез 3 пересекает дугу Ферми и мы можем видеть достаточно хорошо определенную квазичастичную зону. Однако, “теневая” зона слабой интенсивности также присутствует. В случае дальнего AFM порядка и полного удвоения периода, поверхность Ферми и ее “тень” формируют замкнутый “карман” поверхности Ферми вокруг

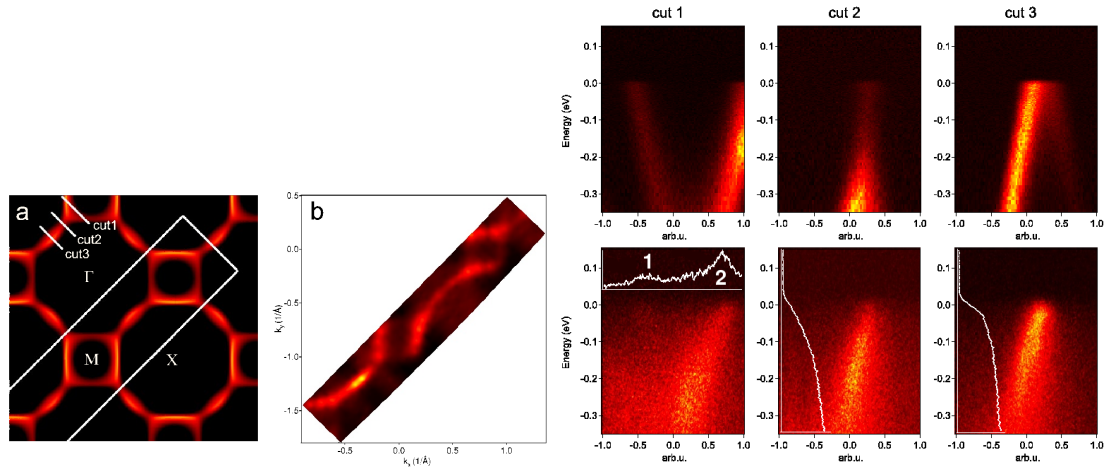


Рисунок 17: Слева: карта поверхности Ферми для PCCO по результатам LDA+DMFT+ Σ расчетов (a). Белый прямоугольник на панели (a) выделяет показывает часть обратного пространства, в которой велись ARPES измерения (панель b в центре). Справа: Спектральные функции на характерных разрезах в зоне Бриллюэна, показанных на панели (a).

точки $(\pi/2a, \pi/2a)$, а в данном случае часть кармана, формируемая “теновой” зоной, достаточно сильно размыта. Как можно видеть наблюдается хорошее соответствие между расчетными и экспериментальными данными.

Отметим, что в рамках LDA+DMFT+ Σ схемы можно рассчитать и двухчастичные свойства [38], что позволило исследовать оптическую проводимость Bi и Nd купратов [A25,A26], также демонстрирующую существенные различия во влиянии псевдощелевых флуктуаций. В частности, в оптической проводимости NCCO в качественном согласии с экспериментом наблюдается характерный псевдощелевой провал и плавный максимум поглощения через псевдощель на частотах $\sim 2\Delta$, а в оптической проводимости Bi2212 характерной псевдощелевой структуры практически не возникает ни в теории, ни в эксперименте, что связано с достаточно малыми значениями Δ и корреляционной длины флуктуаций в этой системе.

В главе семь подробно рассмотрен новый механизм формирования “кинков” в электронной дисперсии сильно коррелированных систем, который не предполагает взаимодействия коррелированных электронов с фононами или другими возбуждениями [A30]. Электронные свойства кристаллических твердых тел определяются одночастичными и коллективными возбуждениями электронной подсистемы и взаимодействиями между ними. Эти возбуждения характеризуются энергией E и квазиимпульсом \mathbf{k} , которые связаны друг с другом через *дисперсию* (спектр) $E_{\mathbf{k}}$. Взаимодействие одночастичных и коллективных возбуждений может привести к достаточно резким изменениям (изломам) дисперсии $E_{\mathbf{k}}$ - так называемым “кинкам”. Форма и величина этих особенностей характеризует взаимодействия в многочастичной системе. Например, экспериментально обнаруженные в ARPES кинки в оксидах меди с энергиями 40-70 мэВ ниже уровня Ферми в электронных дисперсиях являются свидетельством электрон-фононного [15, 16, 17] или же электрон-магнетонного (спинфлуктуационного) взаимодействия.

В тоже время в ARPES экспериментах на целом ряде систем наблюдаются кинки в электронной дисперсии при существенно больших энергиях (до 800 мэВ) (см. детали в [A30]). Физическая природа этих кинков остается неясной. В попытках найти объяснения таких аномалий электронного спектра был предложен существенно новый, чисто электронный механизм их

возникновения [A30]. Данный механизм применим к сильно коррелированным металлам, в которых спектральная функция содержит хорошо выделенные хаббардовские подзоны, а также центральный пик как, например, в оксидах переходных металлов. При этом энергетическое положение кинков определяет границы применимости обычной теории ферми-жидкости Ландау.

Чтобы понять природу данного механизма, рассмотрим сначала, слабо коррелированную систему, описываемую стандартной теорией ферми-жидкости. Вследствие достаточно большого времени жизни квазичастиц вблизи уровня Ферми и слабости корреляций, в первом приближении, взаимодействие приводит к простой перенормировке исходной дисперсии (невзаимодействующих) квазичастиц $\epsilon_{\mathbf{k}}$, которая заменяется на $E_{\mathbf{k}} = Z_{\text{FL}}\epsilon_{\mathbf{k}}$, где Z_{FL} – фермижидкостной коэффициент перенормировки массы электрона, что меняет наклон дисперсии в окрестности уровня Ферми, по сравнению со “свободным” случаем. Если же рассмотреть электрон с энергией далеко от уровня Ферми, то при слабом взаимодействии можно ожидать, что его дисперсия практически не изменяется, так что $E_{\mathbf{k}} \approx \epsilon_{\mathbf{k}}$, хотя затухание здесь может быть уже достаточно большим. В этом смысле можно говорить о том, что межэлектронное взаимодействие, само по себе, также может приводить к образованию изломов (кинков) в обобщенной дисперсии (спектральной плотности), а положение такого кинка на шкале энергий как раз и определяется, как энергия при которой простая фермижидкостная картина становится неприменима. Однако в слабо коррелированных металлах $Z_{\text{FL}} \lesssim 1$, соответственно угол наклона $E_{\mathbf{k}}$ будет изменяться незначительно, делая такие кинки малозаметными.

Данная картина может сильно отличаться в сильно коррелированных системах, где величина Z_{FL} может быть много меньше единицы, тем самым делая кинки более явными. Сильные корреляционные взаимодействия приводят к сильному перераспределению спектрального веса в одночастичной спектральной функции – происходит формирование хаббардовских подзон. Кроме того в сильно коррелированных металлах также имеется квазичастичный пик, который возникает вблизи уровня Ферми, между хаббардовскими подзонами. В работе [A30] показано, что “обычные” фермижидкостные квазичастицы существуют в таких системах только в очень узкой окрестности уровня Ферми, тогда как за пределами фермижидкостного режима, но все еще “внутри” квазичастичного пика существует некий промежуточный режим с дисперсией $E_{\mathbf{k}} \approx Z_{\text{CP}}\epsilon_{\mathbf{k}}$, где перенормировочный множитель Z_{CP} определяется спектральным весом центрального пика, а его величина существенно отличается от Z_{FL} . При таких промежуточных энергиях, которые много меньше величины энергии взаимодействия, электроны или дырки сильно взаимодействуют, а их дисперсия отличается как от фермижидкостной дисперсии, так и от дисперсии невзаимодействующих квазичастиц. В этой области энергий можно говорить о “промежуточно” коррелированной ситуации, когда $Z_{\text{FL}} < Z_{\text{CP}} < 1$. Соответственно, при некоторых энергиях $\pm\omega_{\star}$ внутри квазичастичного пика происходит переход от перенормировки Z_{FL} к Z_{CP} , что и приводит к появлению кинков в дисперсии электронов, причем энергетическое положение этих кинков напрямую связано с энергетической границей применимости обычной теории ферми-жидкости. Подчеркнем, что данный механизм приводит к образованию кинков без дополнительного взаимодействия с фононами или другими коллективными модами, а единственным необходимым условием формирования таких кинков является наличие в системе сильных межэлектронных корреляций.

Микроскопическое описание энергетического положения электронных кинков проведено в

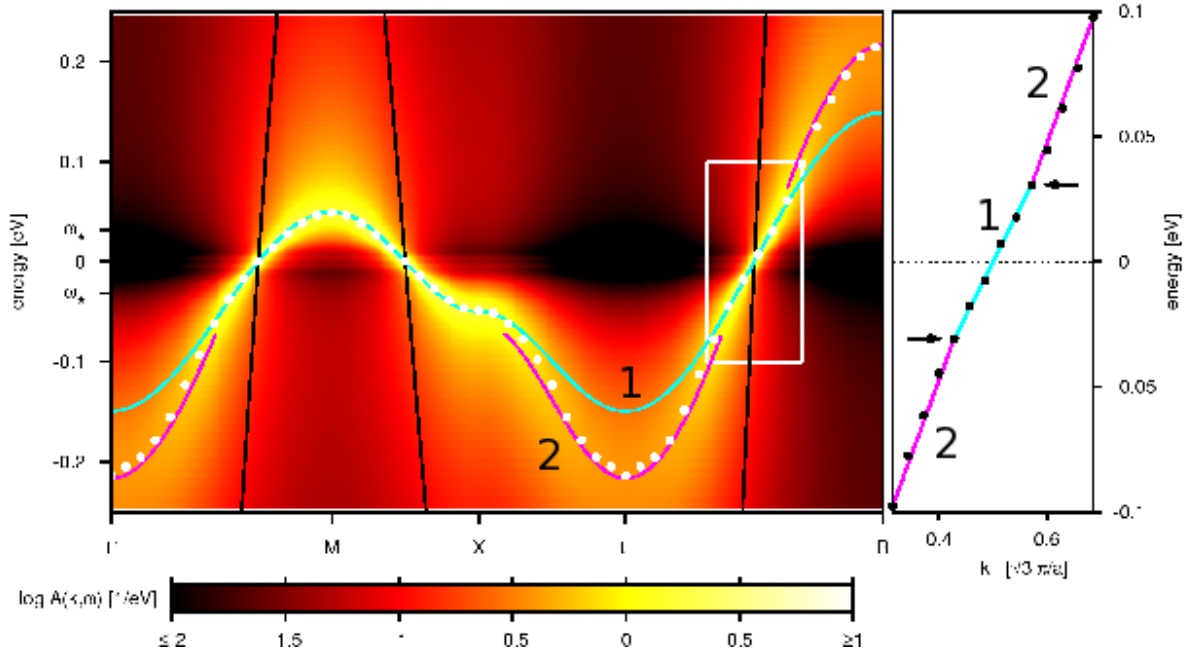


Рисунок 18: Контурная карта спектральной функции $A(\mathbf{k}, \omega)$, полученная из DMFT решения модели Хаббарда для кубической решетки. Величина хаббардовского взаимодействия выбрана $U=3.5$ эВ, ширина зоны $W \approx 3.64$ эВ, заполнение зоны $n=1$, рассчитанная величина фермижидкостной перенормировки $Z_{FL}=0.086$, температура $T = 5$ К. Вблизи уровня Ферми, максимумы $A(\mathbf{k}, \omega)$ (белые точки) соответствуют перенормированной зоне $E_{\mathbf{k}} = Z_{FL}\epsilon_{\mathbf{k}}$ (линия 1). При энергиях $|\omega| > \omega_*$ дисперсия $A(\mathbf{k}, \omega)$ имеет ту же форму, но соответствует другой перенормировке $E_{\mathbf{k}} = Z_{CP}\epsilon_{\mathbf{k}} - c \operatorname{sgn}(E_{\mathbf{k}})$ (линия 2). Величины $\omega_*=0.03$ эВ, $Z_{CP} = 0.135$, и $c = 0.018$ эВ вычислены в [A30] исходя из величин Z_{FL} и $\epsilon_{\mathbf{k}}$, соответствующих черной линии. На вставке справа более подробно показана часть дисперсии, выделенная белым прямоугольником в направлении Γ -R, кинки (изломы дисперсии) при энергиях $\pm\omega_*$ показаны стрелками. Черные линии – спектр “затравочных” (невзаимодействующих) квазичастиц.

работе [A30] в рамках стандартного DMFT решения однозонной модели Хаббарда для случая половинного заполнения в сильно коррелированном режиме $U \approx W$ для кубической решетки. Соответствующие квазичастичные зоны показаны на рисунке 18. Ясно видно, как дисперсия переходит из фермижидкостного режима (линия 1 на рисунке 18) в описанный выше “промежуточный” режим (линия 2 на рисунке 18), при этом на энергиях $\omega_* = 0.03$ эВ образуются хорошо заметные изломы в дисперсии – кинки. Энергия такого кинка для гауссовоой “голой” плотности состояний порядка $\omega^* = Z_{FL}(\sqrt{2} - 1)D$, где D – полуширина “затравочной” зоны и $Z_{FL} = (1 - \frac{\partial \operatorname{Re}\Sigma}{\partial \epsilon}|_{\epsilon=E_F})^{-1}$ – фермижидкостной фактор перенормировки. Грубо можно сказать, что ω^* определяется полушириной квазичастичного пика в плотности состояний.

Впервые кинки электронной природы были обнаружены в LDA+DMFT расчетах для системы SrVO_3 [39]. На рисунке 19 изображена карта спектральной плотности, полученная в работе [39] для SrVO_3 . В этой многозонной системе (с вырожденными зонами) дальнейший анализ очень схож с проведенным выше для однозонного случая. Белые точки представляют дисперсионные кривые $E_{n\mathbf{k}}$, полученные для SrVO_3 в LDA+DMFT расчете. В узкой окрестности уровня Ферми они совпадают с зонной структурой LDA $\epsilon_{n\mathbf{k}}$ (линии 1), перенормированной фермижидкостным фактором $Z_{FL} = 0.35$, так что $E_{n\mathbf{k}} = Z_{FL}\epsilon_{n\mathbf{k}}$ (линии 2). За пределами фер-

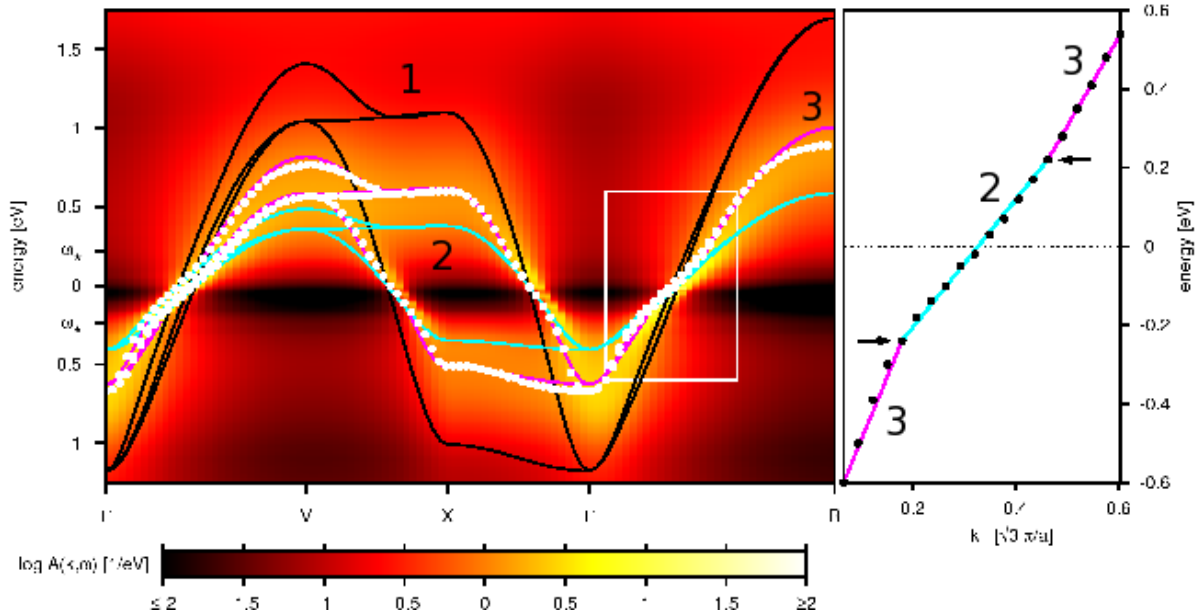


Рисунок 19: Кинки в дисперсионном соотношении E_{nk} (белые точки), полученные для SrVO_3 в LDA+DMFT расчете. Линии 1 – зонная структура LDA ϵ_{nk} ; линии 2 – перенормированные LDA зоны на величину фермижидкостной перенормировки массы; линии 3 – зонная структура в промежуточном режиме. Кинки отмечены стрелками на рисунке справа, что соответствует области ограниченной белым прямоугольником на основной рисунке.

мижидкостной области дисперсионные кривые соответствуют LDA зонной структуре с другим перенормировочным фактором: $E_{nk} = Z_{\text{CP}}\epsilon_{nk} + c_{\pm}$ (линии 3), где $Z_{\text{CP}} = 0.64$, $c_+ = 0.086$ эВ, $c_- = 0.13$ эВ. Вдоль высокосимметричных направлений в зоне Бриллюэна Γ -M и Γ -R переход между двумя режимами приводит к образованию кинков в эффективных дисперсиях при энергиях $\omega_{*,+} = 0.22$ эВ и $\omega_{*,-} = -0.24$ эВ. Эти кинки отмечены стрелками на правой части рисунка 19, соответствующей области ограниченной белым прямоугольником на основной части рисунка. Кинки электронной природы были обнаружены в данной системе в ARPES экспериментах [40], для направления Γ -M, при энергиях около 0.25 эВ, что хорошо согласуется с полученными приведенными результатами LDA+DMFT(QMC) расчетов.

В конце главы семь сформулирован критерий сосуществования электронных и фононных кинков [A18]. Электронный кинк достаточно гладок и его наблюдение затруднено. Расчеты в DMFT+ Σ_{ph} приближении показывают, что электронные кинки плохо наблюдаемы на фоне фононных кинков и требуется тонкая “настройка” параметров модели для их выделения. Прежде всего необходимо обеспечить $\omega_D \ll \omega^*$ (в других случаях плавные электронные кинки будут практически неразличимы на фоне достаточно резких кинков от электрон-фононного взаимодействия). Для $U/2D=1$ при $U=3.5$ эВ имеем $\omega^* \sim 0.1D$, а дебаевскую частоту можно взять достаточно малой, например $\omega_D \sim 0.01D$. Чтобы сделать кинк от фононов достаточно выраженным при такой относительно малой дебаевской частоте, нужно увеличить константу электрон-фононного взаимодействия до величины $\lambda=2.0$. Для демонстрации возможности сосуществования обоих типов кинков в спектре рассмотрим энергетическую дисперсию для простой кубической решетки с интегралом переноса только между ближайшими соседями. Наиболее удобным для рассмотрения является высокосимметричное направление $\Gamma - (\pi, \pi, \pi)$ зоны Бриллюэна [A30]. На рисунке 20 показана электронная дисперсия вблизи уровня Ферми вдоль данного на-

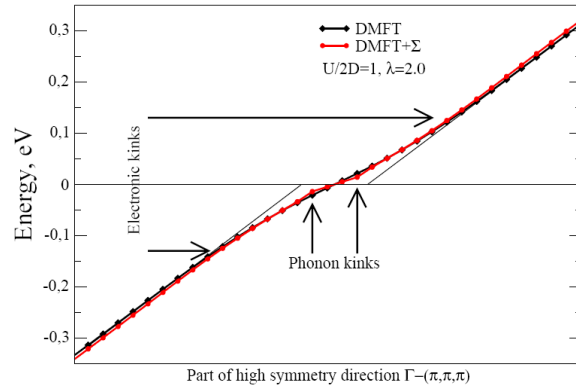


Рисунок 20: Квазичастичная дисперсия с “электронными” и фоновыми кинками вблизи уровня Ферми вдоль высоко симметричного направления $\Gamma - (\pi, \pi, \pi)$ зоны Бриллюэна, полученная в DMFT приближении (черная кривая с ромбами) и в DMFT+ Σ_{ph} (красная кривая с кружками) ($\lambda = 2$, $\omega_D = 0.01D$) [A18].

правления. Черные линии с ромбами – электронный спектр в обычной DMFT (без фононов), а красные линии с кружками представляют результат DMFT+ Σ_{ph} расчетов. Электронные и фоновые кинки отмечены стрелками. В общем случае, однако, кинки в электронной дисперсии от электрон-фононного взаимодействия доминируют для наиболее типичных величин модельных параметров, затрудняя наблюдение кинков чисто электронной природы, предсказанных в работе [A30].

В заключении обсуждаются новизна, научная и практическая ценность работы, а также делается обзор основных полученных результатов.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Систематически изучено влияние величины поправки на двойной учет на LDA+DMFT решение модели Эмери. Определена область существования диэлектрика с переносом заряда в зависимости от параметров модели.
2. Предложен метод согласованного исключения поправки на двойной учет в LDA+DMFT подходе LDA'+DMFT метод. Методом LDA'+DMFT исследованы типичные представители сильно коррелированных систем, получено хорошее согласие теоретических и экспериментальных данных.
3. Впервые изучена электронная структура новых ВТСП систем на основе железа. На основе схожести электронной структуры различных систем предложена минимальная модель для описания электронных свойств таких систем — четыре Fe(3d)- t_{2g} орбитали. Показано, что температура перехода в сверхпроводящее состояние определяется величиной полной плотности состояний на уровне Ферми.
4. Изучена серия систем, аналогичных ВТСП материалам на основе железа.
5. LDA'+DMFT метод использован для описания ВТСП системы KFe_2Se_2 . Получено Хорошее согласие с ARPES экспериментом. Показано, что данная система является более коррелированной по сравнению с пниктидами.
6. Предложено DMFT+ Σ обобщение теории динамического среднего поля (DMFT), позволяющее рассматривать взаимодействие коррелированных электронов с коллективными возбуждениями, не содержащимися в модели Хаббарда. Исследованы плотность состояний, спектральная плотность, картина “разрушения” поверхности Ферми сильно коррелированных систем в псевдощелевом состоянии, а также влияние электрон-фононного взаимодействия на свойства сильнокоррелированного металла.

7. Предложена новая расчетная схема LDA+DMFT+ Σ , позволяющая ввести нелокальные псевдоцелевые флуктуации в первопринципный подход LDA+DMFT. Исследована электронная структура в псевдоцелевом состоянии ряда ВТСП купратов. Получено хорошее согласие с ARPES данными.
8. Впервые предложен механизм формирования кинков чисто электронной природы.
9. В DMFT+ Σ подходе исследована модель Хаббарда с взаимодействием между сильно коррелированными электронами и дебаевскими фононами. Проанализировано взаимовлияние “кинков” чисто электронной природы и обычных фононных “кинков” в электронном спектре.

Список публикаций по теме диссертации:

- A1. Nekrasov, I.A. Consistent LDA'+DMFT – an unambiguous way to avoid double counting problem: NiO test / I.A.Nekrasov, N.S.Pavlov, M.V.Sadovskii // Письма в ЖЭТФ. - 2012. - Т.95. - С.659.
- A2. Nekrasov, I.A. Consistent LDA'+DMFT fpproach to the electronic structure of transition metal oxides: charge transfer insulators and correlated metals / I.A.Nekrasov, N.S.Pavlov, M.V.Sadovskii // ЖЭТФ. - 2013. - Т.143. - С.713.
- A3. Nekrasov, I.A. High temperature superconductivity in transition metal oxypnictides: a rare-earth puzzle? / I.A.Nekrasov, Z.V.Pchelkina, M.V.Sadovskii // Письма в ЖЭТФ. - 2008. - Т.87. - С.647.
- A4. Nekrasov, I.A. Electronic structure of prototype AFe₂As₂ and ReOFeAs high-temperature superconductors: a comparison / I.A.Nekrasov, Z.V.Pchelkina, M.V.Sadovskii // Письма в ЖЭТФ. - 2008. - Т.88. - С.155.
- A5. Nekrasov, I.A. Electronic Structure of New LiFeAs High-Tc Superconductor / I.A.Nekrasov, Z.V.Pchelkina, M.V.Sadovskii // Письма в ЖЭТФ. - 2008. - Т.88. - С.621.
- A6. Nekrasov, I.A. Electronic Structure of New AFFeAs Prototype of Iron Arsenide Superconductors / I.A.Nekrasov, Z.V.Pchelkina, M.V.Sadovskii // Письма в ЖЭТФ. - 2008. - Т.88. - С.777.
- A7. Nekrasov, I.A. Electronic structure, topological phase transitions and superconductivity in (K,Cs)_xFe₂Se₂ / I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii // Письма в ЖЭТФ. - 2011. - Т.93. - С.182.
- A8. Nekrasov, I.A. Electronic structure of novel multiple-band superconductor SrPt₂As₂ / I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii // Письма в ЖЭТФ. - 2010 - Т.92. - С.833.
- A9. Medvedev, M.V. Electronic and magnetic structure of possible iron based superconductor BaFe₂Se₃ / M.V.Medvedev, I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii // Письма в ЖЭТФ. - 2012. - Т.95. - С.37.
- A10. Nekrasov, I.A. Electronic structure of new multiple band Pt-pnictide superconductors APt₃P / I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii // Письма в ЖЭТФ. - 2012. - Т.96. - С.243.
- A11. Nekrasov, I.A. Comparative study of electronic structure of new superconductors (Sr,Ca)Pd₂As₂ and related compound BaPd₂As₂ / I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii // Письма в ЖЭТФ. - 2013. -Т.98. - С.28.
- A12. Sadovskii, M.V. Iron based superconductors: Pnictides versus chalcogenides / M.V.Sadovskii, E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. - 2012. - V.324. - P.3481.
- A13. Kuchinskii, E.Z. Anion height dependence of Tc and density of states in iron based superconductors / E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii // Письма в ЖЭТФ. - 2010. - Т.91. - С.567.
- A14. Nekrasov, I.A. LDA'+DMFT investigation of electronic structure of K_{1-x}Fe_{2-y}Se₂ superconductor / I.A.Nekrasov, N.S.Pavlov, M.V.Sadovskii // Письма в ЖЭТФ. - 2013. - Т.97. - С.18.
- A15. Nekrasov, I.A. Doping Dependence of Correlation Effects in K_{1-x}Fe_{2-y}Se₂ Superconductor: LDA'+DMFT Investigation / I.A.Nekrasov, N.S.Pavlov, M.V.Sadovskii // ЖЭТФ. - 2013. - Т.144. - С.1061.
- A16. Кучинский, Э.З. Обобщённая теория динамического среднего поля в физике сильнокоррелированных систем / Э.З.Кучинский, И.А.Некрасов, М.В.Садовский // УФН. - 2012. - Т.182. - С.345.
- A17. Kuchinskii, E.Z. Pseudogaps: introducing the length scale into dynamical mean-field theory / E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii // ФНТ. - 2006. - Т.32. - С.528.

- A18. Kuchinskii, E.Z. Interplay of electron-phonon interaction and strong correlations: DMFT+ Σ study / E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii // *Phys. Rev. B.* - 2009. - V.80. - P.115124.
- A19. Sadovskii, M.V. Interplay of electron-phonon interaction and strong correlations: DMFT+ Σ approach / M.V.Sadovskii, E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov // *J. Phys. Chem. Solids.* - 2011. - V.72. - P.366.
- A20. Kuchinskii, E.Z. "Destruction" of the Fermi surface due to pseudogap fluctuations in strongly correlated systems / E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii // *Письма в ЖЭТФ.* - 2005. - Т.82. - С.217.
- A21. Sadovskii, M.V. Destruction of the Fermi Surface due to Pseudogap Fluctuations in Correlated Systems / M.V.Sadovskii, E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov // *Physica C.* - 2007. - V.460-462. - P.1084.
- A22. Kuchinskii, E.Z. Pseudogap behavior in $\text{Bi}_2\text{Ca}_2\text{SrCu}_2\text{O}_8$: results of generalized dynamical mean-field approach / E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii // *ЖЭТФ.* - 2007. - Т.131. - С.908.
- A23. Nekrasov, I.A. Pseudogap Behavior in Normal Underdoped Phase of $\text{Bi}2212$: LDA+DMFT+ Σ_k / I.A.Nekrasov, E.Z.Kuchinskii, Z.V.Pchelkina, M.V.Sadovskii // *Physica C.* - 2007. - V.460-462. - P.997.
- A24. Nekrasov, I.A. ARPES spectral functions and Fermi surface for $\text{La}_{1.86}\text{Sr}_{0.14}\text{CuO}_4$ compared with LDA+DMFT+ Σ calculations / I.A.Nekrasov, E.E.Kokorina, E.Z.Kuchinskii, M.V.Sadovskii, S.Kasai, A.Sekiyama, S.Suga // *ЖЭТФ.* - 2010. - Т.137. - С.1133.
- A25. Nekrasov, I.A. Comparative study of electron- and hole-doped high-Tc compounds in pseudogap regime: LDA+DMFT+ Σ_k approach / I.A.Nekrasov, E.E.Kokorina, E.Z.Kuchinskii, Z.V.Pchelkina, M.V.Sadovskii // *J. Phys. Chem. Solids.* - 2008. - V.69. - P.3269.
- A26. Kokorina, E.E. Origin of "hot-spots" in the pseudogap regime of $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$: LDA+DMFT+ Σ study / E.E.Kokorina, E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov, Z.V.Pchelkina, M.V.Sadovskii, A.Sekiyama, S.Suga, M.Tsunekawa // *ЖЭТФ.* - 2008 - Т.134. - С.968.
- A27. Nekrasov, I.A. Electronic structure of $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ studied via ARPES and LDA+DMFT+ Σ_k / I.A.Nekrasov, N.S.Pavlov, E.Z.Kuchinskii, M.V.Sadovskii, Z.V.Pchelkina, V.B.Zabolotny, J.Geck, B.Buchner, S.V.Borisenko, D.S.Inosov, A.A.Kordyuk, M.Lambacher, A.Erb // *Phys. Rev. B.* - 2009. - V.80. - P.140510(R).
- A28. Nekrasov, I.A. Pseudogap phase of high-Tc compounds described within the LDA+DMFT+ Σ approach / I.A. Nekrasov, E.Z. Kuchinskii, M.V. Sadovskii // *J. Phys. Chem. Solids.* - 2011. -V.72. -P.371.
- A29. Кучинский, Э.З. Псевдощелевое поведение в модели Эмери для электронно-допированного сверхпроводника $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$: многозонный LDA+DMFT+ Σ_k подход / Э.З.Кучинский, И.А.Некрасов, Н.С.Павлов // *ЖЭТФ.* - 2013. - Т.144. - С.379.
- A30. Byczuk K. Kinks in the dispersion of strongly correlated electrons / K. Byczuk, M. Kollar, K. Held, Y.-F. Yang, I. A. Nekrasov, Th. Pruschke, D. Vollhardt // *Nature Phys.* - 2007. -V.3. -P.168.

Список литературы

- [1] Pickett, W.E. Electronic structure of the high-temperature oxide superconductors / W.E.Pickett // *Rev. Mod. Phys.* - 1989. - V.61. - P.433.
- [2] Садовский, М.В. Высокотемпературная сверхпроводимость в слоистых соединениях на основе железа / М.В.Садовский // *УФН.* - 2008. - Т.178. -С.1243.
- [3] Ishida, K. To What Extent Iron-Pnictide New Superconductors Have Been Clarified: A Progress Report / K.Ishida, Y.Nakai, H.Hosono // *J. Phys. Soc. Jpn.* - 2009. - V.78. - P.062001.
- [4] Imada, M. Metal-insulator transitions / M.Imada, A.Fujimori, Y.Takura // *Rev. Mod. Phys.* - 1998. - V.70. — P.1039.
- [5] Anisimov, V.I. First-principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: the LDA+U method / V.I.Anisimov, F.Aryasetiawan, A.I.Lichtenstein // *J.Phys.: Condens.Matter.* - 1997. - V.9. - P. 767.
- [6] Held, K. Realistic modelling of strongly correlated systems / K.Held, I.A.Nekrasov, G.Keller, V.Eyert, N.Blümer, A.K.McMahan, R.T.Scalettar, T.Pruschke, V.I.Anisimov, D.Vollhardt // *Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms*, под редакцией J. Grotendorst, D. Marks, и A. Muramatsu (NIC Directors, Forschungszentrum Jülich), NIC Series. - 2002. - V.10. -P.175.

- [7] Korshunov, M.M. Hybrid LDA and generalized tight-binding method for electronic structure calculations of strongly correlated electron systems / M.M.Korshunov, V.A.Gavrichkov, S.G.Ovchinnikov, I.A.Nekrasov, Z.V.Pchelkina, V.I.Anisimov // *Phys. Rev. B.* - 2005. - V.72. - P.165104.
- [8] Изюмов, Ю.А. Электронная структура соединений с сильными корреляциями / Ю.А.Изюмов, В.И.Анисимов // М.-Ижевск: НИИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, 2009. - 376 с.
- [9] Jones, R.O. The density functional formalism, its applications and prospects / R.O.Jones, O.Gunnarsson // *Rev. Mod. Phys.* - 1989. - V.61. - P.689.
- [10] Georges, A. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions / A.Georges, G.Kotliar, W.Krauth, M.J.Rozenberg // *Rev. Mod. Phys.* - 1996. - V.68. - P.13.
- [11] Maier, Th. Quantum cluster theories / Th.Maier, M.Jarrell, Th.Pruschke, M.H.Hettler // *Rev. Mod. Phys.* - 2005. - V.77. - P.1027.
- [12] Karolak, M. Double counting in LDA+DMFT — The example of NiO / M.Karolak, G.Ulm, T.Webling, V.Mazurenko, A.Poteryaev, A.Lichtenstein // *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena.* - 2010. - V.181. - P.11.
- [13] Czyzyk, M.T. Local-density functional and on-site correlations: The electronic structure of La_2CuO_4 and LaCuO_3 . /M.T. Czyzyk and G.A. Sawatzky // *Phys. Rev. B.* - 1994. - V.49. - P.14211.
- [14] Anisimov, V.I. Density-functional theory and NiO photoemission spectra / V.I.Anisimov, I.V.Solovyev, M.A.Korotin, M.T.Czyzyk, G.A.Sawatzky // *Phys. Rev. B.* - 1993. - V.48. - P.16929.
- [15] Campuzano, J.C Photoemission in the High Tc Superconductors / J.C.Campuzano, M.R.Norman, M.Randeria // Berlin: Springer in *Physics of Superconductors* ed. K.H.Bennemann and J.B.Ketterson - 2004. - V.II. - P.167.
- [16] Damascelli, A. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors / A.Damascelli, Z.Hussain, and Zhi-Xun Shen // *Rev. Mod. Phys.* - 2003. - V.75. - P.473.
- [17] Kordyuk, A.A. ARPES on high-temperature superconductors: Simplicity vs. complexity / A.A., Kordyuk and S.V., Borisenko // *Low Temp. Phys.* - 2006. - V.32. - P.298.
- [18] Andersen, O.K. Linear methods in band theory / O.K.Andersen // *Phys. Rev. B.* - 1975. - V.12. - P.3060.
- [19] Andersen, O.K. Explicit, First-Principles Tight-Binding Theory / O.K.Andersen, O.Jepsen // *Phys. Rev. Lett.* - 1984. - V.53. - P.2571.
- [20] Bulla, R. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems / R.Bulla, T.A.Costi, T.Pruschke // *Rev. Mod. Phys.* - 2008. -V.80. - P.395.
- [21] Weber, C. Apical oxygens and correlation strength in electron- and hole-doped copper oxides / C.Weber, K.Haule, G.Kotliar // *Phys. Rev. B.* - 2010. - V.82. - P.125107.
- [22] Hedin, L. Explicit local exchange-correlation potentials / L.Hedin, B.Lundqvist // *J. Phys. C: Solid State Phys.* - 1971. - V.4. - P.2064.
- [23] Ceperley, D.M. Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method / D.M.Ceperley and B.J.Alder // *Phys. Rev. Lett.* - 1980. - V.45. - P.566.
- [24] Gunnarsson, O. Density-functional calculation of the parameters in the Anderson model: Application to Mn in CdTe / O.Gunnarsson, O.K.Andersen, O.Jepsen, J.Zaanen // *Phys. Rev. B.* - 1989. - V.39. - P.1708.
- [25] von Barth, U. A local exchange-correlation potential for the spin polarized case: I / U.von Barth, L.Hedin // *J. Phys. C: Solid State Phys.* - 1972. - V.5. - P.1629.
- [26] Anisimov, V.I. Full orbital calculation scheme for materials with strongly correlated electrons / V.I.Anisimov, D.E.Kondakov, A.V.Kozhevnikov, I.A.Nekrasov, Z.V.Pchelkina, J.W.Allen, S.-K.Мо, H.-D.Kim, P.Metcalf, S.Suga, A.Sekiyama, G.Keller, I.Leonov, X.Ren, D.Vollhardt // *Phys. Rev. B.* - 2005. - V.71. - P.125119.

- [27] Pchelkina, Z.V. Evidence for strong electronic correlations in the spectra of Sr_2RuO_4 / Z.V.Pchelkina, I.A.Nekrasov, Th.Pruschke, A.Sekiyama, S.Suga, V.I.Anisimov, D.Vollhardt // *Phys. Rev. B.* - 2007. - V.75. - P.035122.
- [28] Mizuguchi Y. Anion height dependence of T_c for the Fe-based superconductor / Y. Mizuguchi, Y. Hara, K. Deguchi, S. Tsuda, T. Yamaguchi, K. Takeda, H. Kotegawa, H. Tou and Y. Takano // *Supercond. Sci. Technol.* - 2010. - V. 23. - P.054013.
- [29] Christianson, A.D. Phonon Density of States of $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ / A.D.Christianson, M.D.Lumsden, O.Delaire, M.B.Stone, D.L.Abernathy, M.A.McGuire, A.S.Sefat, R.Jin, B.C.Sales, D.Mandrus, E.D.Mun, P.C.Canfield, J.Y.Y.Lin, M.Lucas, M.Kresh, J.B.Keith, B.Fultz, E.A. Goremychkin, R.J. McQueeney // *Phys. Rev. Lett.* - 2008. - V.101. - P.157004.
- [30] Mittal, R. Inelastic neutron scattering and lattice-dynamical calculations of BaFe_2As_2 / R.Mittal, Y.Su, S.Sols, T.Chatterji, S.L.Chaplot, H.Schober, M.Rotter, D.Johrendt, Th.Brueckel. // *Phys. Rev. B.* - 2008. - V.78 - P.104514.
- [31] Yi, M. Observation of Temperature-Induced Crossover to an Orbital-Selective Mott Phase in $\text{A}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$ (A=K, Rb) Superconductors / M.Yi, D.H.Lu, R.Yu, S.C.Riggs, J.-H.Chu, B.Lv, Z.K.Liu, M.Lu, Y.-T.Cui, M.Hashimoto, S.-K.Mo, Z.Hussain, C.W.Chu, I.R.Fisher, Q.Si, Z.-X.Shen // *Phys. Rev. Lett.* - 2013. - V.110. - P.067003.
- [32] Садовский, М.В / Псевдощель в высокотемпературных сверхпроводниках // М.В.Садовский УФН. - 2001. - V.171. - P.539.
- [33] Holstein, T. Studies of polaron motion : Part I. The molecular-crystal model / T.Holstein // *Ann. Phys. (N.Y.)* - 1959. - V.8. - P.325.
- [34] Koller, K. First- and second-order phase transitions in the Holstein-Hubbard model / W.Koller, D.Mayer, Y.Ono, A.C.Hewson // *Europhys. Lett.* - 2004. - V.66. - P.559.
- [35] Мигдал, А.Б. Взаимодействие электронов с колебаниями решетки в нормальном металле / А.Б., Мигдал // *ЖЭТФ.* - 1958. - V.34. - P.1438.
- [36] Садовский, М.В. Диаграмматика. Лекции по избранным задачам теории конденсированного состояния / М.В.Садовский 2-е изд., испр. и дополн. М.-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2010. - 376 с.
- [37] Andersen, O.K. Third-generation muffin-tin orbitals / O.K.Andersen, T.Saha-Dasgupta, S.Ezhov // *Bull. Mater. Sci.* - 2003. - V.26. - P.19.
- [38] Kuchinskii, E.Z. Pseudogaps in Strongly Correlated Metals: Optical Conductivity within the Generalized Dynamical Mean-Field Theory Approach / E.Z.Kuchinskii, I.A.Nekrasov, M.V.Sadovskii // *Phys. Rev. B.* -2007 - V.75 - P.115102.
- [39] Nekrasov, I.A. Momentum-resolved spectral functions of SrVO_3 calculated by LDA+DMFT / I.A.Nekrasov, K.Held, G.Keller, D.E.Kondakov, Th.Pruschke, M.Kollar, O.K.Andersen, V.I.Anisimov, D.Vollhardt // *Phys. Rev. B.* - 2006. - V.73. - P.155112.
- [40] Yoshida, T. Direct Observation of the Mass Renormalization in SrVO_3 by Angle Resolved Photoemission Spectroscopy / T.Yoshida, K.Tanaka, H.Yagi, A.Ino, H.Eisaki, A.Fujimori, Z.-X.Shen // *Phys. Rev. Lett.* - 2005. - V.95. - P.146404.