

ОБОЗРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Обобщённая теория динамического среднего поля
в физике сильнокоррелированных систем

Э.З. Кучинский, И.А. Некрасов, М.В. Садовский

Обзор посвящён обобщению теории динамического среднего поля (DMFT) для сильнокоррелированных электронных систем (СКС) с целью учёта дополнительных взаимодействий, что необходимо для последовательного описания физических эффектов в СКС. В качестве дополнительных взаимодействий рассматриваются: 1) взаимодействие электронов с антиферромагнитными (или зарядовыми) флуктуациями параметра порядка в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП), приводящее к формированию псевдощелевого состояния; 2) рассеяние на статическом беспорядке и его роль в общей картине перехода металл–диэлектрик Андерсона–Хаббарда; 3) электрон-фононное взаимодействие и особенности электронного спектра в СКС. Предлагаемый DMFT+ Σ -подход основан на учёте указанных взаимодействий путём введения в общую схему DMFT дополнительной (в общем случае зависящей от квазиимпульса) собственной-энергетической части Σ , которая вычисляется самосогласованным образом без нарушения общей структуры итерационного цикла DMFT. Формулируется общая схема расчёта как одночастичных (спектральная плотность, плотность состояний) свойств, так и двухчастичных (оптическая проводимость). Рассматриваются задачи о формировании псевдощели, включая картину "разрушения" ферми-поверхности и формирования "дуг Ферми", переход металл–диэлектрик в неупорядоченной модели Андерсона–Хаббарда, а также общая картина формирования особенностей электронной дисперсии в системах с сильными корреляциями. DMFT+ Σ -подход обобщается для расчётов электронных свойств реальных СКС на основе метода LDA+DMFT. Рассматривается общая схема LDA+DMFT-подхода и его применение к ряду реальных систем. Обобщённый LDA+DMFT+ Σ -подход применяется для расчёта псевдощелевого состояния в электроно- и дырочно-легированных ВТСП-купратах. Проводится сравнение с результатами экспериментов с использованием фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением.

PACS numbers: 71.10.Fd, 71.10.Hf, 71.20.–b, 71.27.+a, 71.30.+h, 72.15.Rn, 74.72.–h DOI: 10.3367/UFNr.0182.201204a.0345

Содержание

1. Введение (345).
2. Сильнокоррелированные системы и теория динамического среднего поля (DMFT) (346).
 - 2.1. Модель Хаббарда и основы DMFT.
 - 2.2. Обобщённый DMFT+ Σ -подход.
 - 2.3. Некоторые другие обобщения DMFT.
3. Применение обобщённого DMFT+ Σ -подхода к модельным задачам (350).
 - 3.1. Сильнокоррелированные системы в псевдощелевом состоянии.
 - 3.2. Переход Мотта–Андерсона в неупорядоченных систе-

- мах. 3.3. Особенности электронной дисперсии сильнокоррелированных систем в DMFT- и DMFT+ Σ -подходах.
 4. Электронная структура реальных сильнокоррелированных систем: LDA+DMFT и LDA+DMFT+ Σ (367).
 - 4.1. Теория функционала электронной плотности (DFT). Приближение локальной электронной плотности (LDA).
 - 4.2. Расчётная схема LDA+DMFT.
 - 4.3. Примеры LDA+DMFT-расчётов.
 - 4.4. Электронная структура оксидов меди в псевдощелевом состоянии: LDA+DMFT+ Σ .
 5. Заключение (375).
- Список литературы (376).