

ПО ИТОГАМ ПРОЕКТОВ  
РОССИЙСКОГО ФОНДА ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ  
Проект РФФИ 09-02-00127

## Электронная структура и свойства ВТСП-купратов в нормальной и сверхпроводящей фазах в рамках LDA+GTV-подхода

Е. И. Шнейдер<sup>+,1)</sup>, С. Г. Овчинников<sup>+×</sup>, М. М. Коршунов<sup>+×</sup>, С. В. Николаев<sup>×</sup>

<sup>+</sup> Институт физики им. Киренского СО РАН, 660036 Красноярск, Россия

<sup>\*</sup> Сибирский государственный аэрокосмический университет, 660014 Красноярск, Россия

<sup>×</sup> Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 5 июля 2012 г.

В настоящем обзоре представлены результаты теоретических исследований свойств высокотемпературно сверхпроводящих купратов в рамках LDA+GTV-метода, а именно концентрационно зависящей электронной структуры, квантовых фазовых переходов с изменением топологии поверхности Ферми, а также сверхпроводящей фазы  $d_{x^2-y^2}$ -симметрии, с учетом магнитного и фононного механизмов спаривания.

**1. Введение.** Несмотря на уже достаточно долгую историю исследования высокотемпературно сверхпроводящих (ВТСП) купратов, две глобальные проблемы, а именно природа “аномального” нормального состояния и механизмы сверхпроводимости с  $d_{x^2-y^2}$ -симметрией спаривания, не получили достаточно полного решения. Какова роль, играемая электронными (магнитными, зарядовыми, токовыми) бозеподобными флуктуациями наряду с фононами в формировании сверхпроводящего состояния? Как происходит переход от мотт-халбардовского диэлектрика при допировании дырками или электронами к ферми-жидкостному нормальному металлу в сильно-допированных купратах через неферми-жидкостное псевдощелевое состояние в области слабого допирования? Эти, а также многие другие фундаментальные проблемы физики ВТСП продолжают оставаться в центре внимания исследователей. По нашему мнению, причиной столь медленного прогресса в теории ВТСП являются сильные электронные корреляции (СЭК) в купратах. Традиционные методы теории функционала плотности в этой ситуации неприменимы. Несколько групп в мире развивают многоэлектронные подходы к описанию электронной структуры систем с СЭК (см. сборник [1]). В настоящем обзоре мы сфокусиру-

ем внимание на результатах, полученных в рамках комбинированного метода LDA+GTV (Local Density Approximation + Generalized Tight-Binding method), объединяющего первопринципный LDA-расчет параметров многоэлектронного гамильтониана сильной связи с кулоновскими взаимодействиями и кластерную теорию возмущений в рамках обобщенного метода сильной связи [2, 3]. В рамках этого подхода можно построить набор эффективных гамильтонианов, вид которых зависит от рассматриваемого масштаба энергий. Например, для изучения оптических и фотоэлектронных спектров в масштабе 10 эВ необходимо работать в рамках многозонной  $p-d$ -модели, учитывающей различные  $d$ -орбитали меди и  $p$ -орбитали кислорода [4]. Для анализа данных спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) на масштабах 1–2 эВ можно построить двухзонную модель Хаббарда с синглетными и триплетными зонами халбардовских фермионов, из которой в пределе сильных корреляций получается синглет-триплетная  $t-J$ -модель [5]. Наконец, для расчетов поверхности Ферми и сверхпроводящего спаривания достаточно ограничиться низкоэнергетическим пределом с одной зоной халбардовских фермионов, который описывается расширенной  $t-J$ -моделью, например с учетом трехцентровых коррелированных перескоков ( $t-J^*$ -модель [6]) или кольцевого четырехспинового обмена ( $t-J^*-J_c$ -модель [7]). В большинстве случаев параметры этих

<sup>1)</sup> e-mail: shneyder@iph.krasn.ru

модельных гамильтонианов удается найти из первопринципных расчетов, что не всегда тривиально. Так, для расчета эффективного обменного параметра между ближайшими соседями в купратах пришлось учесть вклады всех межзонных переходов в рамках многозонной  $p-d$ -модели, причем знак обменного взаимодействия с участием синглетных зон был антиферромагнитным, а триплетных – ферромагнитным [8]. Полученные таким образом микроскопические модельные гамильтонианы исследуются в различных приближениях, начиная со среднего поля для систем с СЭК (приближение “Хаббард 1”) и вплоть до обобщенного приближения среднего поля с учетом зависимости статического массового оператора от волнового вектора в рамках кластерной теории возмущений с точным учетом ближнего порядка в кластерах  $2 \times 2$ . Получаемые результаты, как правило, качественно согласуются с данными экспериментов, а также с расчетами других групп (в России – группы А.Ф. Барабанова, В.В. Валькова, Н.М. Плакиды и многих групп за рубежом; ссылки см. далее по тексту). Ниже будут рассмотрены поверхности Ферми для различных концентраций допирования, сопоставлены вклады магнитного и фононного механизмов спаривания, описаны изменения электронной структуры в рамках кластерного подхода.

**2. Электронная структура купратов.** В рамках метода LDA+GTV исследования купратов начинаются с расчетов электронной структуры из первых принципов. Несмотря на то что приближение локальной плотности не воспроизводит правильно основного состояния сильно коррелированных систем, полученные данные позволяют определить, во-первых, минимальный набор орбиталей, которые необходимо включить в эффективную модель, и, во-вторых, параметры этой модели. С этой целью электронная структура купратов, найденная в LDA-расчетах, проектируется на функции Ванье в базе  $p$ -орбиталей кислорода и  $e_g$ -орбиталей меди [9]. Отметим, что записанная таким образом многозонная  $p-d$ -модель учитывает кулоновское взаимодействие электронов как на одном, так и на нескольких соседних узлах. Далее в рамках метода сильной связи осуществляется переход от реалистичной многозонной модели к эффективной низкоэнергетической синглет-триплетной модели Хаббарда, в которой параметр  $U_{\text{eff}} = E_{ct}$  описывает щель с переносом заряда. В пределе сильных электронных корреляций модель упрощается исключением по теории возмущений межзонных переходов и двухчастичных состояний электронов [10, 11]. Отметим, что при записи эффективного гамильтониана и повсюду в дальнейших вычислениях мы ис-

пользуем представление операторов Хаббарда. Это позволяет точно учитывать ограничение на заполнение двухчастичных состояний на одном узле. В данном случае операторы Хаббарда строятся на собственных состояниях гамильтониана  $\text{CuO}_6$ -кластера,  $X_f^{pq} = |p\rangle\langle q|$ , и описывают дырочные квазичастичные возбуждения. Для однослойных купратов эффективный гамильтониан верхней хаббардовской зоны дырок имеет вид

$$H_{tJ^*} = H_{tJ} + H_{(3)}, \quad (1)$$

$$H_{tJ} = \sum_{f,\sigma} (\varepsilon - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_f (2\varepsilon - 2\mu + U_{\text{eff}}) X_f^{22} + \sum_{f \neq g, \sigma} t_{fg} X_f^{2\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}2} + \frac{1}{2} \sum_{f \neq g, \sigma} J_{fg} (X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}\sigma} - X_f^{\sigma\sigma} X_g^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}),$$

$$H_{(3)} = \sum_{f \neq m \neq g, \sigma} \frac{\tilde{t}_{fm} \tilde{t}_{mg}}{U_{\text{eff}}} (X_f^{2\bar{\sigma}} X_m^{\sigma\sigma} X_g^{\bar{\sigma}2} - X_f^{2\sigma} X_m^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}2}).$$

Здесь  $\mu$  – химпотенциал системы,  $t_{fg}$  и  $\tilde{t}_{fg}$  – амплитуды внутризонных и межзонных перескоков,  $J_{fg} = t_{fg}^2/U_{\text{eff}}$  – параметр обменного взаимодействия,  $\bar{\sigma} \equiv -\sigma$ . Для соединения  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  в описанной выше схеме получены следующие значения (в эВ) параметров модели:  $t = 0.932$ ,  $t' = -0.12$ ,  $t'' = 0.152$ ,  $J = 0.298$ ,  $J' = 0.003$ ,  $J'' = 0.007$ . Схема LDA+GTV позволяет на микроскопическом уровне объяснить необходимость учета внутризонных перескоков вплоть до третьей координационной сферы. Более удаленные перескоки дают лишь незначительные количественные поправки к дисперсии квазичастиц [9]. Также подчеркнем роль трехцентровых коррелированных перескоков  $H_{(3)}$ . Необходимость их учета связана не просто с тем, что параметр  $\tilde{t}_{fm} \tilde{t}_{mg}/U_{\text{eff}}$  имеет один порядок малости с обменным интегралом  $J_{fg}$ . Ранее было показано [6, 12], что трехцентровые взаимодействия существенно влияют на спектр квазичастичных возбуждений при наличии ближнего магнитного порядка в системе.

Как известно, именно учет взаимодействий электрона с флуктуирующим ближним антиферромагнитным (АФМ) порядком позволил примирить [13–16] данные по квантовым осцилляциям [17, 18] и ARPES [19, 20] при малых концентрациях допирования. Между тем, ближний АФМ-порядок с корреляционной длиной  $\xi_{\text{AFM}} \approx 10 \text{ \AA}$  имеет место и в области оптимального допирования [21]. Поэтому его учет актуален не только в слабо допированных системах. При низких температурах ( $T < 10^\circ\text{K}$ ) флуктуации происходят достаточно медленно с характерным

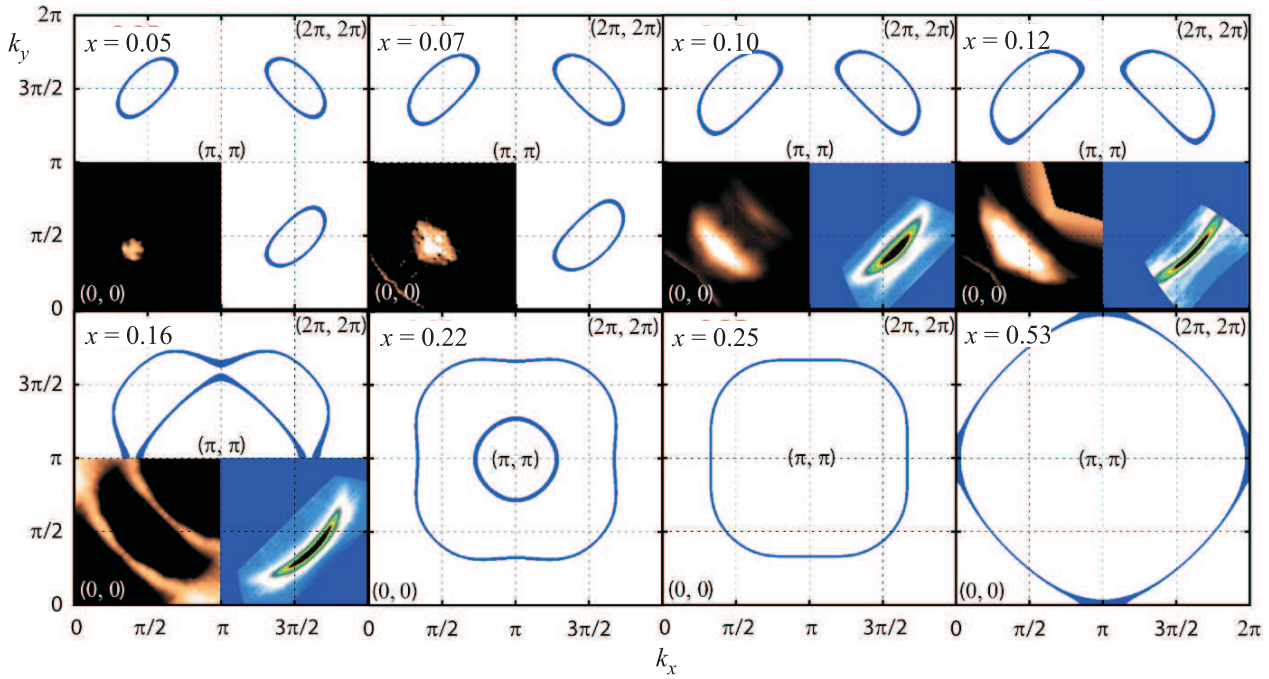


Рис. 1. Рассчитанные сечения поверхности Ферми в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  при различном допировании [27]. Для сравнения в правых [28] и левых [20] нижних углах наложены экспериментальные данные ARPES с различным разрешением

временем жизни порядка  $10^{-9}$  с на масштабах порядка размера АФМ-микродомена  $\xi_{AFM}$  [22]. Это время заметно превосходит характерные времена восстановления равновесия ферми-системы при ARPES-измерениях ( $10^{-13}$  с) [23] и период обращения электрона на поверхности Ферми по циклотронной орбите ( $2\pi\omega_c^{-1} \approx 10^{-12}$  с, где  $\omega_c$  – циклотронная частота) в экспериментах [17, 18]. Таким образом, при расчете динамики квазичастицы на фоне ближнего АФМ-порядка можно пренебречь динамикой самого магнитного порядка, учитывая лишь его пространственную неоднородность. Для вычисления соответствующих поправок к массовому оператору функции Грина  $G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \langle\langle X_{\mathbf{k}}^{\sigma 2} | X_{\mathbf{k}}^{\sigma 2} \rangle\rangle_E$  мы используем метод [24, 25], в основе которого лежит проектирование функций Грина высших порядков на функцию  $G_{\mathbf{k}\sigma}(E)$ . Пренебрегая динамическими поправками, получим [26, 12]

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{(1+x)/2}{E - \varepsilon_0 + \mu - \frac{1+x}{2}t_{\mathbf{k}} - \frac{1-x^2}{4}\frac{\tilde{t}_{\mathbf{k}}^2}{U_{\text{eff}}} - \Sigma_{\mathbf{k}}}, \quad (2)$$

где массовый оператор  $\Sigma_{\mathbf{k}}$  определяется статическими спиновыми  $\left(C_{\mathbf{q}} = 2 \sum_{(\mathbf{f}-\mathbf{g})} e^{-i(\mathbf{f}-\mathbf{g})\mathbf{q}} \langle S_{\mathbf{f}}^z S_{\mathbf{g}}^z \rangle\right)$  и

кинематическими  $\left(K_{\mathbf{q}} = \sum_{(\mathbf{f}-\mathbf{g})} e^{-i(\mathbf{f}-\mathbf{g})\mathbf{q}} \langle X_{\mathbf{f}}^{2\sigma} X_{\mathbf{g}}^{\sigma 2} \rangle\right)$  корреляционными функциями:

$$\Sigma_{\mathbf{k}} = \frac{2}{1+x} \frac{1}{N} \times \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \left[ t_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \frac{1-x}{2} \left( J_{\mathbf{q}} - \frac{\tilde{t}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^2}{U_{\text{eff}}} \right) - \frac{(1+x)\tilde{t}_{\mathbf{k}}\tilde{t}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}{U_{\text{eff}}} \right] \times \right. \\ \left. \times \frac{3}{2} C_{\mathbf{q}} - \left[ t_{\mathbf{q}} - \frac{1-x}{2} J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - x \frac{\tilde{t}_{\mathbf{q}}^2}{U_{\text{eff}}} - \frac{(1+x)\tilde{t}_{\mathbf{k}}\tilde{t}_{\mathbf{q}}}{U_{\text{eff}}} \right] K_{\mathbf{q}} \right\}.$$

Самосогласованный расчет корреляторов  $C_{\mathbf{q}}, K_{\mathbf{q}}$  и химпотенциала  $\mu$  позволил построить семейство поверхностей Ферми для разных концентраций допирования (рис. 1). Как оказалось, поверхность Ферми дважды меняет топологию с допированием. При малом допировании, когда реализуется ближний магнитный порядок, имеют место четыре дырочных кармана около точек  $(\pi/2, \pi/2)$ , как это ожидалось бы для дырки в АФМ-фазе. С ростом допирования размер дырочных карманов растет. В окрестности первой критической точки,  $x_{c1} \approx 0.15$ , образуется перемычка на линии  $(\pi, 0) - (\pi, \pi)$ . В интервале между первой и второй критическими концентрациями,  $x_{c1} < x < x_{c2} \approx 0.24$ , мы получаем две поверхности, центрированные в точке  $(\pi, \pi)$ . Меньший карман имеет электронный характер и исчезает при  $x \rightarrow x_{c2}$ .

Большой дырочный карман с ростом  $x$  становится все более округлым. При  $x > x_{c2}$  сохраняется только он. Следует отметить, что значения критических концентраций вычислены с некоторой ошибкой. Во-первых, параметры модели получены в результате сложной процедуры проектирования LDA волновых функций на базисе функций Ванье. Они могут несколько измениться при изменении базиса последних. Во-вторых, метод нахождения функций Грина является приближенным. Учет вкладов более высокого порядка может изменить количественные значения критических точек. Качественная картина при низких температурах, как мы представляем, вряд ли изменится, поскольку она обусловлена общими свойствами дисперсии электрона на фоне флуктуирующего ближнего АФМ-порядка [27]. Отметим также, что подобные изменения поверхности Ферми были получены для модели Хаббарда с учетом не только действительной, но и мнимой части массового оператора [29], а также при вычислениях в рамках спин-фермионной модели [30]. Аналогичная трансформация с появлением двухсвязной поверхности Ферми в промежуточной области составов получена недавно в первопринципных квантовохимических расчетах с учетом различных многоэлектронных конфигураций [31]. Качественное совпадение наших результатов с указанными расчетами, выполненными в различных приближениях, обусловлено единством главной идеи: электронная структура везде определяется ближним магнитным порядком.

Итак, исследования эволюции поверхности Ферми купратов с допированием демонстрируют нежесткое поведение квазичастичных зон, общее для всех сильно коррелированных систем. Согласно идеям Лившица [32, 33], в трехмерном соединении преобразования топологии поверхности Ферми, в равной степени вызванные как появлением нового сегмента, так и изменением связности, сопровождаются возникновением особенности в плотности состояний,  $\delta N(\varepsilon) \sim (\varepsilon - \varepsilon_c)^{1/2}$ , и изменением термодинамического потенциала  $\delta\Omega \sim (\varepsilon_F - \varepsilon_c)^{5/2}$ . Иначе говоря, квантовые фазовые переходы в трехмерных системах классифицируются как переходы 2.5-го рода. Здесь  $\varepsilon_c$  соответствует энергии квазичастиц в критической точке, а  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми. Рассмотрим особенности в плотности состояний купратов в области первой и второй критических точек. При этом будем учитывать, что вследствие сильной анизотропии электронных и магнитных свойств данные соединения нельзя рассматривать как изотропные трехмерные системы. Это позволяет нам при анализе однослойных купра-

тов ограничиться расчетами внутри одной плоскости  $\text{CuO}_2$ .

Вычисления показывают, что первой критической точке  $x_{c1}$  соответствует логарифмическая особенность в плотности состояний. Исчезновение же электронного кармана в окрестности второй критической точки,  $x_{c2} \approx 0.24$ , описывается особенностью типа ступеньки Хевисайда [34]. Подчеркнем, что оба типа особенностей полностью согласуются с общими свойствами сингулярностей Ван Хова для двумерных систем электронов [35]. В отличие от универсального поведения в трехмерных системах, термодинамический потенциал двумерных электронов имеет сингулярный добавочный вклад  $\delta\Omega \sim (\varepsilon_F - \varepsilon_c)^2$  в случае особенности типа ступеньки в плотности состояний или вклад  $\delta\Omega \sim (\varepsilon_F - \varepsilon_c)^2 \ln|\varepsilon_F - \varepsilon_c|$  в случае логарифмической особенности [36]. Таким образом, в купратах квантовый фазовый переход при  $x_{c2}$  относится к переходам второго рода. Особенность же в окрестности первой критической точки  $x_{c1}$  является более сильной. Отсюда сразу следует, что параметр Зоммерфельда, определяемый электронной теплоемкостью,  $\gamma = C_e/T$ , также имеет сингулярный вклад типа ступеньки в области  $x \approx 0.24$ , а в области  $x \approx 0.15$  испытывает логарифмический скачок:  $\delta\gamma \propto \ln(\varepsilon_F - \varepsilon_c) \propto \ln(x - x_{\text{opt}})$ . Аналогичный скачок удельной теплоемкости был обнаружен в модели Хаббарда методом динамического кластерного квантового метода Монте-Карло с непрерывным временем [37].

Тот факт, что эволюция свойств купратов с допированием от мотт-хаббардовского диэлектрика к нормальному металлу не является гладкой и проходит через ряд квантовых критических точек, широко обсуждается в литературе. Некоторые авторы [38–42] связывают с критической концентрацией формирование псевдощелевого состояния при  $x < p^*$ , где  $p^* = 0.19–0.24$ . Согласно же измерениям эффекта Холла [43, 44] квантовый фазовый переход имеет место при оптимальном допировании  $p_{\text{opt}} = 0.15$ . Расчеты концентрационных зависимостей температуры сверхпроводящего перехода  $T_c(x)$  и кинетической энергии дырок  $E_{\text{kin}}(x)$ , проведенные в предложенном подходе, показывают, что совпадения величин  $x_{c1}$  и  $p_{\text{opt}}$ , а также  $x_{c2}$  и  $p^*$  не являются случайными (рис. 2, 3). Во-первых, в теории типа БКШ максимум критической температуры определяется максимумом в плотности состояний. Поэтому рассматривая обменный механизм сверхпроводящего спаривания в модели (1), мы видим [45], что величина оптимального допирования действительно соответствует критической концентрации:  $x_{\text{opt}} = 0.15 = x_{c1}$  (рис. 2). Во-вторых, анализ кинетической энер-

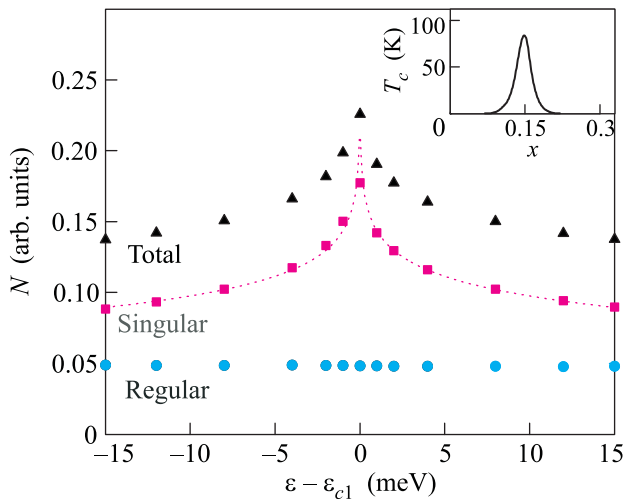


Рис. 2. Плотность состояний, рассчитанная для критической концентрации  $x_{c1} = 0.15$  как сумма регулярного и сингулярного вкладов,  $\epsilon_{c1} = \epsilon_F(x_{c1})$  [34]. Пунктир соответствует логарифмической аппроксимации для сингулярного вклада. На вставке показана концентрационная зависимость температуры сверхпроводящего перехода с величиной  $x_{opt} = x_{c1}$

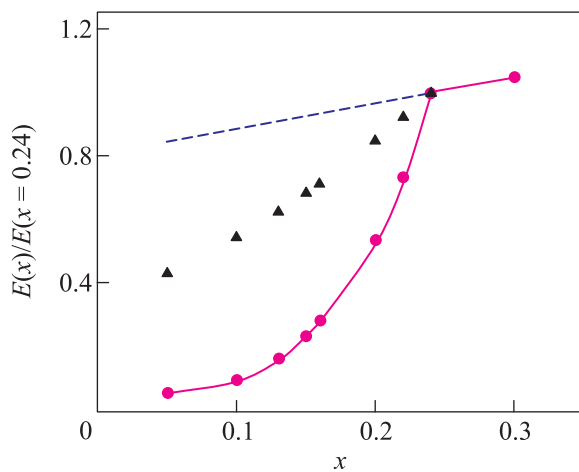


Рис. 3. Концентрационная зависимость кинетической энергии дырок [34]. Штриховой линией показано обычное поведение, характерное для нормального двумерного металла, треугольниками – расчет в модели идеализированной псевдощели [38, 40], кружками – расчет с функцией Грина (2)

гии носителей тока,  $E_{kin}(x) = \sum_n t_{0n} K_{0n}(x)$ , обнаруживает существенное падение величины  $E_{kin}$  для концентраций  $x < 0.24$  (рис. 3). При этом уменьшение кинетической энергии описывается экспоненциальным законом:  $E_{kin}(x)/E_{kin}(x_{c2}) = \exp[-4\Delta_{pg}/J]$ , с параметром псевдощели  $\Delta_{pg}$ , зависящим от допирования. Для концентраций допирования, больших критической,  $x > 0.24$ , наблюдается обычное поведе-

ние функции  $E_{kin}$ , характерное для нормального двумерного металла с концентрацией дырок  $n_h = 1 + x$ , т.е. кинетическая энергия пропорциональна энергии Ферми и числу дырок:  $E_{kin} \sim \xi_F \sim n_h$ . Мы связываем подавление кинетической энергии для концентраций  $x < x_{c2}$  с формированием псевдощели, что качественно подтверждают расчеты зависимости  $E_{kin}(x)$  в простейшей модели [38, 40] электронного газа с треугольной псевдощелью.

Аналогичные последовательности преобразований поверхности Ферми с допированием были получены в  $p-d$ -модели авторами [29], которые учитывали динамические поправки к массовому оператору функции Грина в приближении непересекающихся диаграмм, а также авторами [46, 47] для мотт-халлардовского диэлектрика в кластерном обобщении теории динамического среднего поля. Несмотря на отличия в деталях (в работах [46, 47] обнаружены как полюса, так и нули функции Грина), схожие эволюции электронной структуры в нашем подходе и работах, учитывающих динамические корреляции, свидетельствуют о применимости предложенного метода по крайней мере при низких температурах. По-видимому, в этом пределе свойства нормальной фазы сильно коррелированных систем в значительной степени определяются пространственной неоднородностью корреляций. Характер  $\mathbf{k}$ -зависимости собственно-энергетической части функции Грина в принципе играет существенную роль при описании электронных корреляций в CuO-плоскостях [48, 49] и фазовой диаграммы купратов [50, 51]. Несомненно, что дальнейшее развитие предложенного метода требует учета динамических эффектов. Ниже будет представлен один из вариантов такого развития.

**3. Проблемы описания сверхпроводящего состояния в системах с сильными электронными корреляциями.** Общепринятой концепции механизма формирования сверхпроводящего состояния в купратах на сегодняшний день не сформировано. Проблема заключается в том, что такая концепция должна объяснять не только высокие температуры перехода, но и целую совокупность необычных свойств данных соединений. В то же время образование изломов в дисперсии, наблюдаемой методом фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением [19], возбуждения в спектрах, полученных с помощью неупругого рассеяния нейтронов и рентгеновского рассеяния [52–54], особенности туннельных экспериментов [55, 56] допускают интерпретацию в рамках альтернативных сценариев спаривания, т.е. за счет взаимодействия электронов как со спиновыми возбуждениями, так и с фононами. В работе [57] с

помощью метода неравновесной оптической спектроскопии с фемтосекундным разрешением было проведено разделение фононного и электронного вкладов в функцию  $\Pi(\Omega)$ , описывающую взаимодействие фермиевских квазичастиц с бозонными возбуждениями. Вычисление соответствующих констант связи показало, что фононный вклад всего в два раза меньше электронного и потому не может считаться пренебрежимо малым. В отсутствие явно доминирующего механизма спаривания описание сверхпроводящего состояния купратов необходимо проводить в рамках самосогласованной теории, учитывающей взаимодействия электронов с различными бозонными возбуждениями, как электронными, так и фононными. Характерные времена этих взаимодействий различны. Поэтому в полной реалистичной картине необходимо учитывать динамические эффекты запаздывания (см., например, работу [58]). В общем случае это очень сложная задача. Ее стартовой точкой является теория среднего поля, сформулированная в режиме сильных электронных корреляций. Ниже мы кратко представим некоторые результаты, полученные в модели (1) с учетом электрон-фононного взаимодействия.

Один из ключевых вопросов физики высокотемпературных сверхпроводников связан с исследованием температурного изотопического эффекта (ИЭ). Этот эффект заключается в сильно немонотонном поведении показателя ИЭ  $\alpha(x)$  с допированием [59]. В точке оптимального допирования величина  $\alpha(x)$  минимальна и практически на порядок меньше величины  $1/2$ , предсказанной в теории БКШ для нормальных металлов. На границах сверхпроводящего состояния  $\alpha(x)$  достигает своих локальных максимумов. При этом в слабо допированном образце величина показателя ИЭ значительно больше  $1/2$ . Такое поведение трактовалось некоторыми авторами как доказательство малости электрон-фононного вклада в величину спаривающего потенциала. Однако рассматривая теорию сверхпроводимости типа БКШ с учетом конкурирующих обменного и фононного механизмов спаривания, мы показали, что вид концентрационной зависимости константы ИЭ, т.е. положения минимума и максимумов функции  $\alpha(x)$ , определяется логарифмической особенностью в плотности состояний вблизи критической точки  $x_{c1} = x_{opt}$ . При этом он не связан с соотношением констант спаривающих взаимодействий [60], зависимость которых от допирования не имеет сильных особенностей [61]. Заметим, что мы не обсуждаем несимметричный рост показателя ИЭ при движении к границам области сверхпроводимости. Во-первых, наш подход стартует с атомного

предела и потому в зонном пределе, т.е. для сильно допированного образца, переоценивает вклад в собственную энергию. Во-вторых, мы не учитываем возможную примесь к сверхпроводящему параметру порядка компоненты  $d_{x^2-y^2}$ -типа с  $s$ -симметрией в области слабого допирования [62–64], где реальные соединения испытывают переход из тетрагональной фазы в орторомбическую. Кроме того, мы не принимаем во внимание эффекты зарядового упорядочения, приводящие к аномалиям свойств соединения  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  при  $x = 1/8$ .

Рассмотрим далее проблему описания сверхпроводимости в системах с СЭК в рамках численных непертурбативных кластерных подходов. Как правило, вычисленные парные корреляционные функции оказываются весьма малы. Это вызывает противоречивые выводы авторов о возможности  $d_{x^2-y^2}$ -сверхпроводимости в режиме сильных корреляций в рамках модели Хаббарда или  $t$ - $J$ -модели (см. дискуссию в работе [65]). В то же время во всех численных методах, таких, как квантовый метод Монте-Карло или точная диагонализация кластера, исследования магнитных механизмов спаривания ограничены конечным размером кластера. Поэтому возникает вопрос о том, насколько достоверны результаты, полученные при учете спаривания только на ближайших соседях. Мы рассмотрели корреляционную функцию  $B_{\mathbf{q}} = \langle X_{\mathbf{q}}^{\sigma_2} X_{-\mathbf{q}}^{\sigma_2} \rangle$ , описывающую сверхпроводящее спаривание хаббардовских фермионов в  $t$ - $J$ -модели для теории типа БКШ [66]. Оказалось, что корреляции не являются локальными. Они распределены в пространстве и медленно убывают с расстоянием. Полученный размер куперовской пары близок к экспериментальному значению корреляционной длины в высокотемпературных сверхпроводниках:  $\xi \approx 30 \text{ \AA}$ . Для двумерной квадратной решетки мы проанализировали также произведение корреляционной функции  $|B(\mathbf{r})|$  и числа соседей  $z_n$  в  $n$ -й координационной сфере (рис. 4а) и, соответственно, процент корреляций  $P_n$ , учитываемых при ограничении  $n$ -й координационной сферой (рис. 4б). Согласно расчетам вклад первой координационной сферы не является определяющим и составляет не более 20% от суммарного. Эти результаты показывают, что численные расчеты для малых кластеров сильно недооценивают выигрыш в энергии сверхпроводящей фазы по сравнению с нормальной.

В заключение пункта приведем пример, демонстрирующий конкуренцию различных обменных механизмов спаривания в купратах. Как известно, целый ряд экспериментальных наблюдений в купратах не поддается объяснению в рамках обычного гейзен-

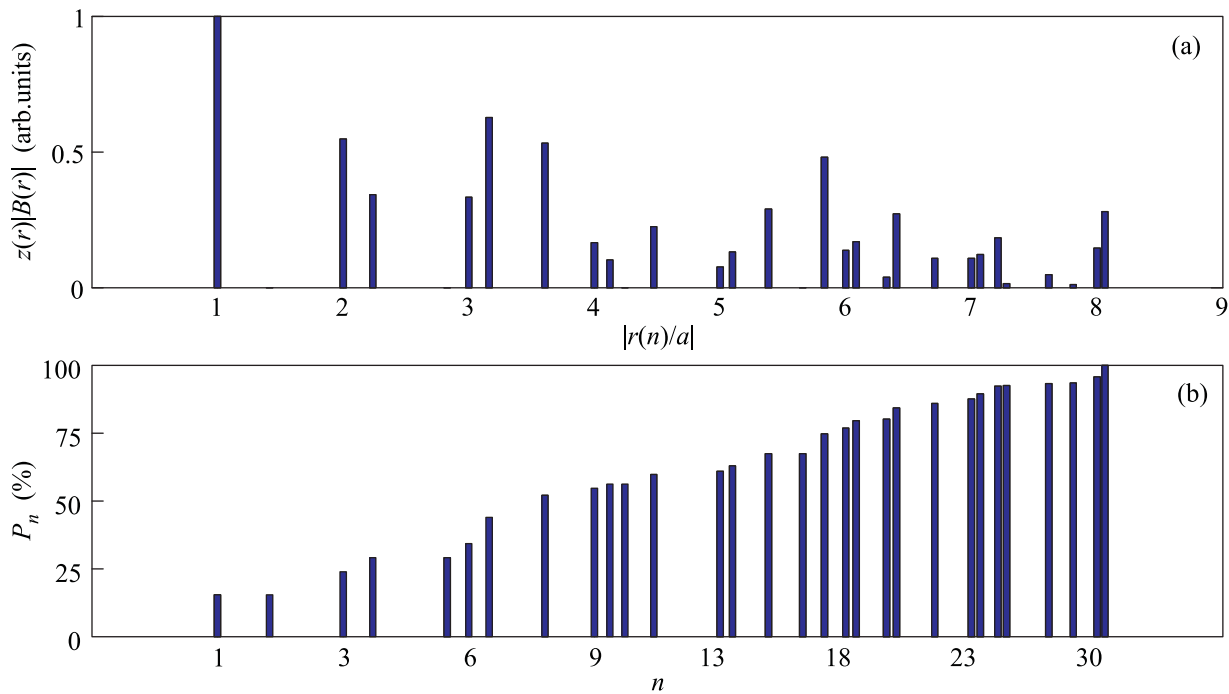


Рис. 4. Корреляционная функция (а) и процент учитываемых корреляций (б) для  $n$ -й координационной сферы [66]

берговского гамильтониана. Наблюдаемая аномальная структура спектров спиновых возбуждений может быть описана только с учетом процессов четырехспинового кольцевого обмена [67–71]. Согласно указанным работам величина кольцевого обмена  $J_c$  в  $\text{CuO}_2$ -плоскости всего в 3–5 раз меньше гейзенберговского  $J$ . Поэтому возникает вопрос о том, насколько существенно его влияние на куперовское спаривание за счет магнитных взаимодействий. Мы показали [7], что в теории типа БКШ уравнение на температуру сверхпроводящего перехода для гамильтониана (1) с учетом кольцевого обмена можно представить в виде, аналогичном уравнению на  $T_c$  в  $t$ - $J$ -модели:

$$1 = \tilde{J} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{(\cos p_x - \cos p_y)^2}{\xi_{\mathbf{p}}} \tanh \frac{\xi_{\mathbf{p}}}{2k_B T_c}. \quad (3)$$

Здесь  $\xi_{\mathbf{p}}$  – дисперсия квазичастиц в сверхпроводящей фазе,  $k_B$  – постоянная Больцмана. Выделим в перенормированной константе связи вклады гейзенберговского обмена, трехцентровых перескоков и кольцевого обмена отдельными слагаемыми:  $\tilde{J} = (1 - \frac{1+x}{2} + C_{01} \frac{J_c}{J}) J$ . Оказывается, что кольцевой обмен, так же как и трехцентровые коррелированные перескоки [6], подавляет сверхпроводящее спаривание, индуцированное Гейзенберговским обменом. Это становится очевидным, если заметить, что антиферромагнитный спиновый коррелятор  $C_{01}$  для ближайших соседей имеет знак минус. Хотя вклад коль-

цевого обмена в константу связи значительно меньше гейзенберговского, при последовательном построении теории, а именно при учете трехцентровых перескоков, на порядок понижающих критическую температуру, его относительная роль возрастает. Для характерных значений параметров системы LSCO [9] критическая температура в  $t$ - $J^*$ - $J_c$ -модели уменьшается на 25–30% по сравнению с  $t$ - $J^*$ -моделью. Напомним, что еще одним механизмом, компенсирующим гейзенберговский обменный вклад в куперовское спаривание, является слабоэкранированное в купратах межузельное кулоновское взаимодействие [72, 73]. Это демонстрирует, насколько нетривиален вопрос о соотношении различных механизмов сверхпроводящего спаривания в реальных соединениях.

**4. Кластерная теория возмущения в представлении операторов Хаббарда.** Приведенные выше результаты получены в обобщенном приближении Хартри–Фока. Его главный недостаток, как уже отмечалось, заключается в отсутствии динамических корреляций. Один из возможных вариантов развития теории – кластерная теория возмущений [74, 75], достаточно давно предложенная для исследования ВТСП-купратов [76–78]. С каждым годом появляется все больше работ, в которых для исследования систем с сильными электронными корреляциями применяется кластерный подход [49]. Это свя-

зано с основным достоинством данного метода – непосредственным учетом СЭЖ и ближнего порядка, что играет существенную роль при описании низкоразмерных магнитных систем.

Отличительной особенностью предлагаемого подхода является использование представления  $X$ -операторов Хаббарда. Это позволяет упростить реализацию метода и, главное, ввести величину, контролирующую ошибку вычислений, что существенно сокращает время расчетов [79]. На первом этапе задачи выполняется точная диагонализация кластера (структурного элемента сверхрешетки), выбор которого определяется возможностью покрыть исходную решетку. Далее производится учет межкластерного взаимодействия по теории возмущений. Рассмотрим гамильтониан двумерной однозонной модели Хаббарда:

$$H = \sum_{i\sigma} \left[ (\varepsilon - \mu) n_{i\sigma} + \frac{U}{2} n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} \right] - \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma}. \quad (4)$$

Здесь  $a_{i\sigma}^\dagger$  и  $a_{i\sigma}$  – операторы рождения и уничтожения электрона со спином  $\sigma$  на узле  $i$ ,  $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$  – оператор числа электронов со спином  $\sigma$  ( $\bar{\sigma} = -\sigma$ ),  $\varepsilon$  – энергия электрона на узле,  $\mu$  – химический потенциал,  $t_{ij}$  – интеграл перескока с узла  $j$  на узел  $i$ ,  $U$  – параметр кулоновского взаимодействия на узле. Уравнение (4) записано для квадратной решетки, структурным элементом которой является один узел. В этой же решетке можно определить другой структурный элемент. Выберем его в виде квадратного кластера  $2 \times 2$ . Таким образом, мы получаем возможность описывать исходную решетку на языке новой решетки с базисом (сверхрешетки). Перегруппируем слагаемые в гамильтониане (4) так, чтобы отделить внутривкластерные взаимодействия от межкластерных:

$$H = \sum_f H_0^c(f) + \sum_{f \neq g} H_1^c(f, g), \quad (5)$$

где  $f, g$  – кластерные индексы. Если мы описываем электронную структуру гамильтонианом (4),  $X$ -операторы Хаббарда определяются на одноузельных собственных состояниях. Обобщая данную процедуру на случай нашей сверхрешетки, определим  $X$ -операторы на кластерных собственных состояниях. Для этого методом точной диагонализации получим полный набор собственных состояний и собственных векторов гамильтониана  $H_0^c(f)$ . В результате для оператора уничтожения электрона на узле  $i$ , принадлежащем

кластеру  $f$ , получаем следующее разложение по кластерным  $X$ -операторам:

$$a_{fi\sigma} = \sum_{\alpha} \gamma_{i\sigma}(\alpha) X_f^\alpha, \quad \gamma_{i\sigma}(\alpha) = \langle n | a_{i\sigma} | m \rangle. \quad (6)$$

Выражение (6) показывает, что электрон можно представить в виде суперпозиции некоторых квазичастиц – хаббардовских фермионов  $X_f^\alpha$ , каждая из которых соответствует возбуждению из многоэлектронного начального состояния  $|m\rangle$  в многоэлектронное конечное состояние  $|n\rangle$ . Более подробно эта процедура описана в работе [79]. Здесь использованы следующие обозначения для  $X$ -операторов:  $X_f^\alpha \equiv X_f^{nm} = |n\rangle \langle m|$ , где  $\alpha = \alpha(n, m)$ ,  $n$  и  $m$  – конечное и начальное состояния кластера соответственно,  $f$  – кластерный индекс. Подробное описание свойств  $X$ -операторов можно найти в [80–83].

Используя разложение (6), гамильтониан (4) можно записать в следующем виде:

$$H = \sum_{fn} \varepsilon_n X_f^{nn} + \sum_{f \neq g} \sum_{\alpha\beta} t_{fg}^{\alpha\beta} X_f^{\dagger\alpha} X_g^\beta, \quad (7)$$

где  $\varepsilon_n$  – энергия кластера в состоянии  $n$ ,  $t_{fg}^{\alpha\beta}$  – межкластерные интегралы перескока. Чтобы получить зависимость от волнового вектора, необходимо перейти от прямого пространства к обратному. В дальнейших расчетах нас будет интересовать только межкластерное взаимодействие в гамильтониане (7). Учитывая однородность решетки, данное взаимодействие можно записать как

$$H_1 = \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{\alpha\beta} T_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}) X_{\tilde{\mathbf{k}}}^{\dagger\alpha} X_{\tilde{\mathbf{k}}}^\beta, \quad (8)$$

где  $\tilde{\mathbf{k}}$  – волновой вектор, принимающий значения в редуцированной зоне Бриллюэна. Подробно процедура формирования кластерной решетки описана в работе [84].

Будем искать решение для функции Грина  $D_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = \langle \langle X_{\tilde{\mathbf{k}}}^\alpha | X_{\tilde{\mathbf{k}}}^{\dagger\beta} \rangle \rangle_\omega$  в приближении “Хаббард-I”. В матричном виде уравнение на функцию Грина имеет вид

$$D^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = [D^0(\omega)]^{-1} - T(\tilde{\mathbf{k}}), \quad (9)$$

где

$$D_{\alpha\beta}^0(\omega) = \frac{F(\alpha)}{\omega - \Omega(\alpha)} \delta_{\alpha\beta}, \quad (10)$$

$$\Omega(\alpha) = \varepsilon_m(N+1) - \varepsilon_n(N) - \mu, \quad (11)$$



$$F(\alpha) \equiv F(n, m) = \langle X^{nn} \rangle + \langle X^{mm} \rangle. \quad (12)$$

Здесь  $D^0(\omega)$  – локальная (т.е. кластерная) функция Грина,  $F(\alpha)$  – фактор заполнения,  $\mu$  – химический потенциал,  $N$  – число электронов в кластере. Для исследования электронных свойств нам необходимо рассчитать одночастичную функцию Грина,  $G_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \langle \langle a_{\mathbf{k}\sigma} | a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega$ , определенную на исходной решетке. Вычислив функцию Грина в  $X$ -представлении, определенную на сверхрешетке, из уравнения (9), не нарушая трансляционной симметрии, можно определить одночастичную функцию Грина как [75, 79]

$$G_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{N_c} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{i, j=1}^{N_c} \gamma_{i\sigma}(\alpha) \gamma_{j\sigma}^*(\beta) \times \\ \times D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}, \quad (13)$$

где  $N_c$  – число узлов в кластере (в нашем случае  $N_c = 4$ ),  $\mathbf{k}$  – волновой вектор, определенный в исходной зоне Бриллюэна,  $i$  и  $j$  – индексы внутрикластерных узлов. Здесь учтено, что функция Грина  $D_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$  является периодической функцией в обратном пространстве сверхрешетки и волновой вектор  $\mathbf{k}$  можно представить в виде  $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \tilde{\mathbf{k}}$ , где  $\mathbf{K}$  – вектор трансляции обратной сверхрешетки. Это позволяет записать равенство  $D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = D_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$  [49]. Отметим, что вычисление функции Грина  $G_\sigma(\mathbf{k}, \omega)$  и соответствующей спектральной функции

$$A_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\delta \rightarrow +0} [\text{Im} G_\sigma(\mathbf{k}, \omega + i\delta + \mu)] \quad (14)$$

осуществляется в исходной зоне Бриллюэна.

При точном учете всех возможных возбуждений в представлении  $X$ -операторов (6) выполняется правило сумм:

$$\left\langle \left[ a_{i\sigma}, a_{i\sigma}^\dagger \right]_+ \right\rangle = \sum_{\alpha} |\gamma_{i\sigma}(\alpha)|^2 F(\alpha) = 1. \quad (15)$$

Как было отмечено выше, во всех расчетах, проведенных в настоящей работе, отслеживается величина  $f$ -фактора, введенная в [79] для контроля полного спектрального веса фермиевских квазичастиц:

$$\int d\omega A_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\alpha} |\gamma_{i\sigma}(\alpha)|^2 F(\alpha) \equiv f. \quad (16)$$

При точном расчете  $f = 1$ . Все представленные ниже результаты получены при  $f > 0.995$ . Оказалось, что можно существенно сократить число рассматриваемых уровней энергии таким образом, чтобы ошибка в правиле сумм не превышала одного процента.

Поэтому мы назвали нашу версию кластерной теории возмущений теорией с контролируемым спектральным весом (norm conserving cluster perturbation theory, NC-CPT).

Рассмотрим процедуру допирования в описанной схеме вычисления [84]. Определим величину допирования  $x$  как концентрацию дырок на кластере. После точной диагонализации гамильтониана кластера  $2 \times 2$  мы получим полный набор собственных значений и собственных векторов, которые определяют гильбертово пространство. При половинном заполнении и  $T = 0$  переходы между основным состоянием в подпространстве с  $N = 4$  и состояниями в подпространствах с  $N = 3$  и  $N = 5$  имеют ненулевой фактор заполнения (12). При дырочном допировании необходимо учесть возможность заселения основного состояния в подпространстве с  $N = 3$ . В результате появляются дополнительные переходы с ненулевым фактором заполнения. Отметим, что мы рассматриваем только одноэлектронные переходы с изменением числа частиц на 1. Обратим внимание на обозначения, используемые в работе. Так как в нашем случае число узлов в кластере равно 4, допирование на кластер  $x$  и допирование на узел  $p$  связаны равенством  $x = 4p$ .

Обсудим основные результаты, полученные в рамках NC-CPT-теории. Рассчитанное значение энергии основного состояния как функции  $U$  [84] хорошо согласуется с результатами, полученными непertурбативными методами вариационного и квантового метода Монте-Карло [85, 86]. Очень хорошее согласие наблюдается с результатами расчета методом точной диагонализации для кластера  $4 \times 4$  [87]. Сравнение с работой [88], в которой авторы использовали вариационную кластерную теорию возмущений, показало хорошее согласие при малых  $U$  и дало лучший результат при больших его значениях.

При исследовании систем с СЭК необходимо отказаться от представления “жесткой зоны”. Известно, что допирование таких систем приводит к образованию внутрищелевых состояний [89], которые образуются в запрещенной зоне и могут существенно изменить проводящие свойства этих систем. Наши расчеты в рамках кластерного подхода с учетом перескоков между ближайшими соседями показали наличие таких внутрищелевых состояний [84]. Исследование распределения спектрального веса между хаббардовскими зонами и внутрищелевыми состояниями выявило интересную особенность. При  $U = 12t$  в нижней хаббардовской зоне оказалось недостаточно состояний для заселения всех электронов системы. Поэтому часть электронов заселяет внутрищелевые состояния. Как показал расчет, числа состояний в

зоне внутрищелевых состояний для этого достаточно. Таким образом, в области слабо допирования и  $U = 12t$  уровень Ферми попадает в зону внутрищелевых состояний, где происходит его пиннинг [90, 84].

Для сопоставления полученных результатов с ситуацией в реальных купратах мы учли влияние перескоков между ближайшими узлами [84]. Заметим, что в случае кластера  $2 \times 2$  перескоки между первыми и вторыми ближайшими соседями учитываются уже при расчете собственных состояний кластера. Учет же перескоков между третьими ближайшими соседями происходит только в межкластерном взаимодействии. Расчеты, проведенные с параметрами [12], показали наличие псевдощелевых состояний и неоднородное распределение спектрального веса квазичастиц по поверхности Ферми [91]. Анализ серии квантовых фазовых переходов с допированием продемонстрировал, что в условиях эксперимента подобные изменения электронной структуры можно наблюдать только при соответствующем высоком разрешении. В наших расчетах роль величины, определяющей энергетическое разрешение, играет полуширина лоренциана  $\delta$ .

Следует отметить, что функция Грина имеет не только полюса, но и нули. Это было показано методом кластерной теории динамического среднего поля CDMFT+ED в работах [46, 92]. В нашем расчете мы также получаем структуру полюсов и нулей (рис. 5а, d, g), качественно совпадающую с результатами работы [92]. Последовательность топологических трансформаций поверхности Ферми соответствует результатам более ранних работ [12, 30, 27]. В принципе карты распределения спектрального веса  $A(\mathbf{k}, \varepsilon_F)$  в пределе  $\delta \rightarrow 0$  должны давать ту же картину поверхности Ферми, что получается из анализа законов дисперсии. Действительно, сопоставление первого и второго столбцов на рис. 5 дает похожую картину. Карты спектрального веса показывают также его неоднородное распределение в зоне Бриллюэна. Подобные участки с малым спектральным весом получались ранее в работе [30]. Однако реально наблюдаемым спектрам ARPES соответствует не второй ( $\delta = 0.01$ ), а третий столбец ( $\delta = 0.1$ ) на рис. 5. Соответствующее величине  $\delta = 0.1$  уширение линий настолько велико, что маленький карман замыкается в арку (рис. 5с), а в промежуточной области концентраций вместо двух концентрических карманов вокруг точки  $(\pi, \pi)$  прорисовывается лишь одна арка (рис. 5f). И только в области больших концентраций, когда имеется одна большая поверхность (рис. 5g, h, i), картина, наблюдаемая методом ARPES, соответствует истинной поверхности Ферми. Следу-

ет отметить, что несмотря на качественное сходство эволюции поверхности Ферми с допированием, описанной в предыдущем пункте [12], численные значения критических концентраций переходов Лифшица не совпадают. Эти значения, безусловно, зависят и от вида модели (спин-фермионная модель [30], модель Хаббарда [29],  $t$ - $J$ -модель [12]), и от численных значений параметров модели, и от рассматриваемого приближения.

Малые дырочные карманы в области слабо допированных купратов были экспериментально обнаружены при измерении квантовых осцилляций Ландау в сильных магнитных полях [17]. То, что карманы при уширении размываются в дуги, было выявлено многими авторами (см. [46, 13]). Нами показано, что уширение замыкает картину переходов Лифшица и приводит к плавному зарастанию псевдощели в окрестности антинодальной точки  $(\pi, 0)$ . Длина дуги, измеряемая в ARPES, мала в области допирования  $p \leq 0.05$  и постепенно растет с увеличением  $p$ . Постоянство спектрального веса вдоль поверхности Ферми при  $p \geq 0.25$  соответствует ожидаемому ферми-жидкостному поведению.

Обобщая полученные результаты, можно сделать следующий вывод. При ширине линии  $\delta = 0.1t$  распределение спектральной интенсивности по зоне Бриллюэна, наблюдаемое в ARPES, не позволяет дать полного ответа на вопрос об истинной топологии поверхности Ферми в ВТСП-купратах. Только уменьшение ширины линии на порядок позволяет получить истинную поверхность Ферми из распределения спектральной интенсивности.

Таким образом, использование кластерного подхода даже в приближении “Хаббард-I” для межкластерных взаимодействий позволило получить результаты, которые полностью отражают основные особенности систем с СЭК. В первую очередь это связано с точным учетом ближнего порядка в системе. Отличием нашей кластерной теории возмущений от аналогичных теорий является использование техники  $X$ -операторов Хаббарда. Это позволило ввести величину, названную  $f$ -фактором, с помощью которой можно контролировать полный спектральный вес квазичастиц в необходимых пределах точности [79, 84].

**5. Заключение.** Ввиду ограниченности объема статьи мы сконцентрировались на наших методах и результатах и не смогли уделить должного внимания множеству других теорий. Мы можем лишь упомянуть, что другие подходы к описанию сверхпроводимости в купратах и модели Хаббарда включают кластерные методы (VCA [94], CDMFT [95, 96], DCA [97,

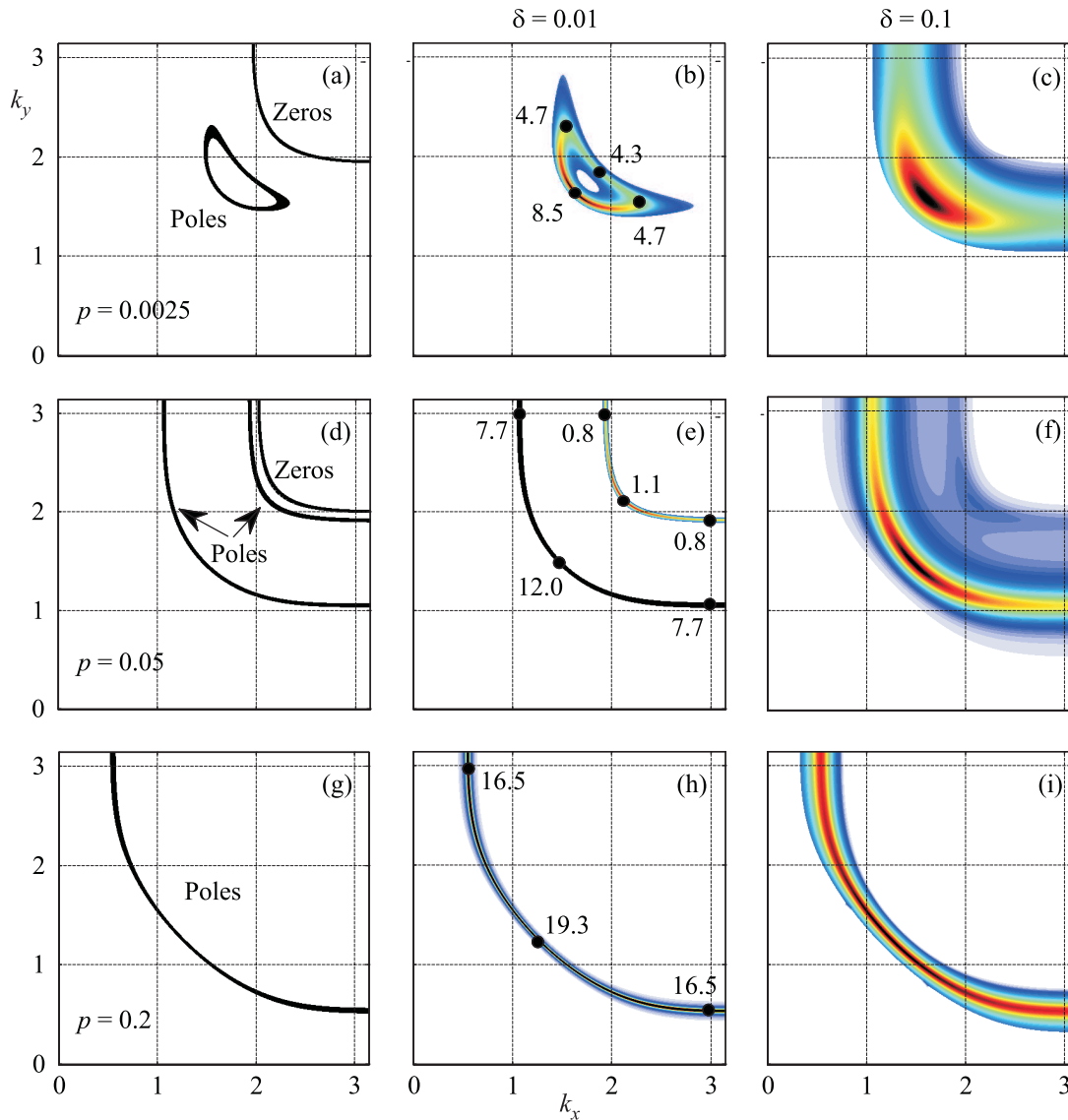


Рис. 5. Концентрационные зависимости поверхности Ферми (а, d, g) и карт спектрального веса при разных уровнях уширения:  $\delta$ : 0.01t (b, e, h) и 0.1t (c, f, i). Числа на картах (b, e, h) показывают неоднородное распределение спектрального веса [91]

98], см. также обзор [49]), функциональную ренорм-группу fRG [99, 100], квантовый метод Монте-Карло (QMC [101]), биполярные теории [102], новый интересный вариант многоэлектронной теории – теорию магнитных трехспиновых поляронов [103], спин-флуктуационные теории (FLEX [104, 105] и другие [58, 106]), теорию резонансных валентных связей (RVB [107]) и приближение Гутцвиллера [108].

На сегодняшний день можно считать общепринятым тот факт, что физика ВТСП-купратов определяется двумя характерными энергетическими масштабами: величинами сверхпроводящей щели и псевдощели [93]. В предложенном подходе мы пока-

ли, что эволюция электронной структуры купратов при низких температурах проходит через две критические квантовые точки (рис.6). Одна из них связана с формированием максимума на зависимости  $T_c(x)$ . Это точка оптимального допирования  $x_{c1}$ . Другая точка,  $x_{c2}$ , лежит на границе перехода от ферми-жидкостного состояния к неферми-жидкостному. Заметим, что вторая точка совпадает с результатом линейной экстраполяции концентрационной зависимости температуры формирования псевдощелевого состояния  $T^*(x)$  до пересечения с осью абсцисс (рис. 6). Первая критическая точка совпадает с экспериментальным значением  $x_{opt}$  на рис. 6.

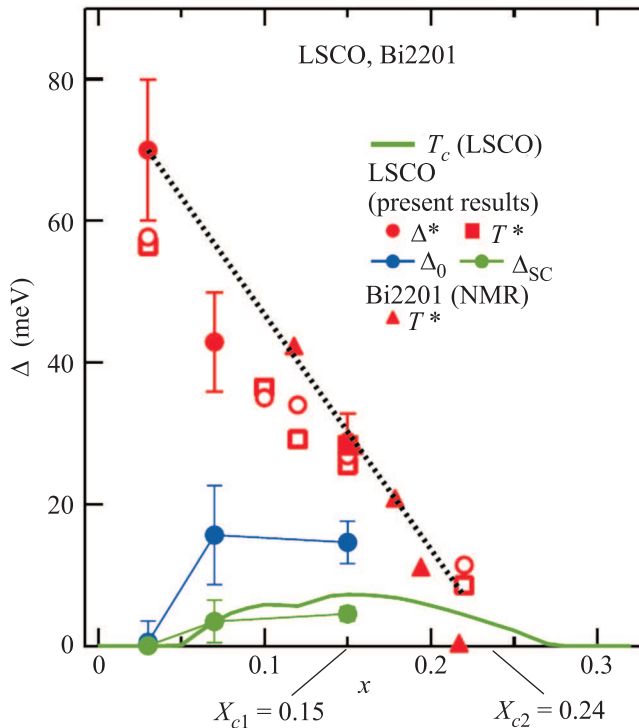


Рис. 6. Экспериментальная фазовая диаграмма однослойных купратов [93] и квантовые критические точки, полученные в расчетах [27]

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ # 09-02-00127, Программы Президиума РАН # 20.7, проектов ФЦП ГК П891 и ФЦП ГК 16.740.12.0731, грантов НШ-1044.2012.2 и МК-1168.2012.2. Е.И.Ш. и М.М.К. благодарят за поддержку фонд некоммерческих программ “Династия”.

1. *Theoretical Methods for Strongly Correlated Systems* (ed. by A. Avella and F. Mancini), Springer Series in Solid-State Sciences **171**, Springer-Verlag, 2012, p. 505.
2. M. M. Korshunov, V. A. Gavrichkov, S. G. Ovchinnikov et al., JETP **126**, 642 (2004).
3. S. G. Ovchinnikov, V. A. Gavrichkov, M. M. Korshunov, and E. I. Shneyder, *LDA+GTB method for band structure calculations in the strongly correlated materials*, in *Theoretical Methods for Strongly Correlated Systems* (ed. by A. Avella and F. Mancini), Springer Series in Solid-State Sciences **171**, Springer-Verlag, 2012, p. 143; W. F. Brinkman and M. C. Cross, in *Progress in Low Temperature Physics* (ed. by D. F. Brewer), North Holland Publ. Co., Vol. VIIA, 1978, p. 105.
4. В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, А. А. Борисов и др., ЖЭТФ **118**, 422 (2000).
5. М. М. Коршунов, С. Г. Овчинников, ФТТ **43**, 399 (2001).

6. В. В. Вальков, Т. А. Валькова, Д. М. Дзедзисашвили и др., Письма ЖЭТФ **75**, 450 (2002).
7. Е. И. Шнейдер, С. Г. Овчинников, А. Шнуренко, Письма в ЖЭТФ **95**, 211 (2012).
8. В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, ФТТ **50**, 1037 (2008).
9. M. M. Korshunov, V. A. Gavrichkov, S. G. Ovchinnikov et al., Phys. Rev. B **72**, 165104 (2005).
10. L. Bulaevskii, E. Nagaev, and D. Khomskii, JETP **27**, 836 (1968).
11. K. A. Chao, J. Spalek, and A. M. Oles, J. Phys. C **10**, L271 (1977).
12. M. M. Korshunov and S. G. Ovchinnikov, Eur. Phys. J. B **57**, 271 (2007).
13. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, Письма в ЖЭТФ **82**, 217 (2005).
14. E. Z. Kuchinskii and M. V. Sadovskii, ЖЭТФ **130**, 447 (2006).
15. N. Harrison, R. D. McDonald, and J. Singleton, Phys. Rev. Lett. **99**, 206406 (2007).
16. E. Z. Kuchinskii and M. V. Sadovskii, Письма в ЖЭТФ **88**, 224 (2008).
17. N. Doiron-Leyrand, C. Proust, D. LeBoeuf et al., Nature **447**, 565 (2007).
18. E. A. Yelland, J. Singleton, C. H. Mielke et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 047003 (2008).
19. A. Damacelli, Z. Hussein, and Z. X. Shen, Rev. Mod. Phys. **75**, 473 (2003).
20. J. Meng, G. Liu, W. Zhang et al., Nature **462**, 335 (2009).
21. T. R. Thurston, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner et al., Phys. Rev. B **40**, 4585 (1989).
22. S. M. Haden, G. Aeppli, H. Mook et al., Phys. Rev. Lett. **66**, 821 (1991).
23. D. Mihailovic and V. V. Kabanov, Supercon. In Complex Systems **114**, 331 (2005).
24. N. M. Plakida, V. Yu. Yushankhay, and I. V. Stasyuk, Physica C **162–164**, 787 (1989).
25. V. Yu. Yushankhay, N. M. Plakida, and P. Kalinay, Physica C **174**, 401 (1991).
26. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, ЖЭТФ **127**, 686 (2005).
27. С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов, Е. И. Шнейдер, ЖЭТФ **136**, 898 (2009).
28. M. Hashimoto, T. Yoshida, H. Yagi et al., Phys. Rev. B **77**, 094516 (2008).
29. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, ЖЭТФ **131**, 259 (2007).
30. А. Ф. Барабанов, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев и др., ЖЭТФ **119**, 777 (2001).
31. L. Hozoi, M. S. Laad, and P. Fulde, Phys. Rev. B **78**, 165107 (2008).
32. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **38**, 1569 (1960).

33. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов*, М.: Наука, 1971.
34. S. G. Ovchinnikov, E. I. Shneyder, and M. M. Korshunov, *J. Condens. Matter* **23**, 045701 (2011).
35. J. M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge University Press, Cambridge, 1964.
36. S. S. Nedorezov, *ЖЭТФ* **51**, 868 (1966).
37. K. Mikelsons, K. Khatami, E. Galanakis et al., *Phys. Rev. B* **80**, 140505(R) (2009).
38. J. R. Cooper and J. W. Loram, *J. Phys. IV France* **10**, Pr3-213 (2000).
39. J. W. Loram, J. Luo, J. R. Cooper et al., *J. Phys. Chem. Solids* **62**, 59 (2001).
40. J. L. Tallon, J. W. Loram, G. V. M. Williams et al., *Phys. Stat. Sol. (b)* **215**, 531 (1999).
41. C. Castellani, C. Di Castro, and M. Grilli, *Z. Phys. B* **103**, 137 (1997).
42. R. Daou, N. Doiron-Leyraud, D. LeBoeuf et al., *Nature Physics* **5**, 31 (2009).
43. F. F. Balakirev, J. B. Betts, A. Migliori et al., *Nature* **424**, 912 (2003).
44. F. F. Balakirev, J. B. Betts, A. Migliori et al., *Phys. Rev. Lett.* **102**, 017004 (2009).
45. Е. И. Шнейдер, С. Г. Овчинников, *Письма в ЖЭТФ* **83**, 462 (2006).
46. S. Sakai, Y. Motome, and M. Imada, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 056404 (2009).
47. S. Sakai, Y. Motome, and M. Imada, *Phys. Rev. B* **82**, 134505 (2009).
48. M. H. Hettler, A. N.-Z. Tahvildar, T. Pruschke et al., *Phys. Rev. B* **58**, R7475 (1998).
49. T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke et al., *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1027 (2005).
50. K. Haule and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **76**, 104509 (2007).
51. B. Kyung, D. Sénéchal, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B* **80**, 205109 (2009).
52. T. Dahm, V. Hinkov, S. V. Borisenko et al., *Nat. Phys.* **5**, 217 (2009).
53. D. Reznik, L. Pintschovius, M. Ito et al., *Nature* **440**, 1170 (2006).
54. M. Le Tacon, G. Ghiringhelli, J. Chaloupka et al., *Nat. Phys.* **7**, 725 (2011).
55. J. Lee, K. Fujita, K. McElroy et al., *Nature* **442**, 546 (2006).
56. O. Ahmadi, L. Coffey, J. F. Zasadzinski et al., *Phys. Rev. Lett.* **106**, 167005 (2011).
57. S. Dal Conte, C. Giannetti, G. Coslovich et al., *Science* **335**, 1600 (2012).
58. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, *Phys. Rev. B* **59**, 11949 (1999).
59. M. K. Crawford, W. E. Farneth, E. M. McCarron et al., *Science* **250**, 1390 (1990).
60. Е. И. Шнейдер, С. Г. Овчинников, *ЖЭТФ* **136**, 1177 (2009).
61. Е. И. Шнейдер, С. Г. Овчинников, *Письма в ЖЭТФ* **83**, 462 (2006).
62. A. G. Sun, D. A. Gajewski, M. B. Maple et al., *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2267 (1994).
63. R. Kleiner, A. S. Katz, A. G. Sun et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2161 (1996).
64. Q. Li, Y. N. Tsay, M. Suenaga et al., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4160 (1999).
65. T. Aimi and M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 084709 (2007).
66. С. Г. Овчинников, Е. И. Шнейдер, *ФТТ* **53**, 228 (2011).
67. S. Sugai, M. Sato, T. Kobayashi et al., *Phys. Rev. B* **42**, 1045 (1990).
68. J. Lorenzana, J. Eroles, and S. Sorella, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 5122 (1999).
69. R. Coldea, S. M. Hayden, G. Aeppli et al., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5377 (2001).
70. A. A. Katanin and A. P. Kampf, *Phys. Rev. B* **66**, 100403 (2002).
71. M. Roger and J. M. Delrieu, *Phys. Rev. B* **39**, 2299 (1989).
72. A. S. Alexandrov and V. V. Kabanov, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 136403 (2011).
73. N. M. Plakida, arXiv: 1110.6715v1.
74. A.-M. S. Tremblay, B. Kyung, and D. Sénéchal, *Low Temp. Phys.* **32**, 424 (2006).
75. D. Sénéchal, D. Perez, and D. Plouffe, *Phys. Rev. B* **66**, 075129 (2002).
76. А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, А. В. Михеенков, *ФТТ* **30**, 2518 (1988).
77. A. F. Barabanov, L. A. Maksimov, and A. V. Mikheyenkov, *J. Phys.: Cond. Matt.* **1**, 10143 (1989).
78. S. G. Ovchinnikov and I. S. Sandalov, *Physica C* **161**, 607 (1989).
79. С. В. Николаев, С. Г. Овчинников, *ЖЭТФ* **138**, 717 (2010).
80. J. Hubbard, *J. Proc. Roy. Soc. A* **285**, 542 (1965).
81. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильно коррелированных системах*, Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2001, 277 с.
82. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **68**, 207 (1975).
83. Р. О. Зайцев, *Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма*, М.: Издательство УРСС, 2004, 175 с.
84. С. В. Николаев, С. Г. Овчинников, *ЖЭТФ* **141**, 135 (2012).
85. H. Yokoyama and H. Shiba, *J. Phys. Soc. Jpn.* **56**, 3582 (1987).
86. J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **31**, 4403 (1985).
87. G. Fano, F. Ortolani, and A. Parola, *Phys. Rev. B* **42**, 6877 (1990).

88. C. Dahnken, M. Aichhorn, W. Hanke et al., Phys. Rev. B **70**, 245110 (2004).
89. С. Г. Овчинников, ЖЭТФ **102**, 534 (1992).
90. С. В. Николаев, С. Г. Овчинников, Журнал СФУ. Математика и физика **4**, 162 (2011).
91. S. G. Ovchinnikov and S. V. Nikolaev, Pis'ma v ZhETF **93**, 575 (2011).
92. T. D. Stanescu and G. Kotliar, Phys. Rev. B **74**, 125110 (2006).
93. T. Yoshida, M. Hashimoto, S. Ideta et al., Phys. Rev. Lett. **103**, 037004 (2009).
94. M. Aichhorn, E. Arrigoni, M. Potthoff et al., Phys. Rev. B **74**, 024508 (2006).
95. A. I. Lichtenstein and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B **62**, R9283 (2000).
96. M. Capone and G. Kotliar, Phys. Rev. B **74**, 054513 (2006).
97. T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke et al., Phys. Rev. Lett. **85**, 1524 (2000).
98. R. Arita and K. Held, Phys. Rev. B **73**, 064515 (2006).
99. C. J. Halboth and W. Metzner, Phys. Rev. B **61**, 7364 (2000).
100. C. Honerkamp and M. Salmhofer, Phys. Rev. B **64**, 184516 (2001).
101. S. Sorella, G. B. Martins, F. Becca et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 117002 (2002).
102. A. S. Alexandrov, Phys. Rev. B **61**, 12315 (2000).
103. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзашвили, А. Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ **92**, 683 (2010).
104. N. E. Bickers, D. J. Scalapino, and S. R. White, Phys. Rev. Lett. **62**, 961 (1989).
105. T. Dahm and L. Tewordt, Phys. Rev. Lett. **74**, 793 (1995).
106. T. A. Maier, D. Poilblanc, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **100**, 237001 (2008).
107. P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
108. D. Baeriswy, D. Eichenberger, and B. Gut, Phys. Stat. Sol. (b) **244**, 2299 (2007).