

ФРАГМЕНТАЦИЯ ЗОН И ПОВЕРХНОСТЕЙ ФЕРМИ В СТРАЙП-ФАЗАХ КУПРАТОВ

*М. Я. Овчинникова**

*Институт химической физики Российской академии наук
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 13 июля 2004 г.

В приближении среднего поля исследована зонная структура и эволюция поверхностей Ферми страйп-фаз $t-t'-U$ -модели Хаббарда. Подтверждено появление внутри хаббардовской щели квазиодномерных «примесных» подзон, обязанных локализации частиц на доменных стенках. Среди вертикальных параллельных y -связям страйп-фаз выявлена устойчивость структур Y_8, Y_4 с расстоянием $l = 8a, 4a$ между доменными стенками. Показано, что сегменты поверхности Ферми в антиузельных либо узельных направлениях отвечают «примесной» зоне либо основной зоне, связанной со всей областью антиферромагнитного домена. Это могло бы объяснить наблюдавшееся в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ различие свойств ARPES-спектров на разных участках поверхности Ферми. Для структуры Y_8 показано, что при $p = 1/8$ происходит смена топологии поверхности Ферми и открытие изотропной псевдощели в самой точке $p = 1/8$. Попытки связать это свойство с аномальным подавлением T_c в LSCO при $p = 1/8$ имеют свои трудности. Подтверждено, что для реализующихся при $p < 0.05$ диагональных страйп-фаз малая дисперсия «примесной» зоны и большая щель, отделяющая ее от нижней хаббардовской зоны, создают предпосылки существования диэлектрического состояния при ненулевом допировании.

PACS: 71.10.Fd, 74.20.Rp, 74.20.-z

1. ВВЕДЕНИЕ

Разрешенная по углу фотоэмиссионная спектроскопия (ARPES) [1, 2] осуществляет прямые пробы квазичастиц в купратах. Так, была измерена сверхпроводящая (SC) щель и обнаружена псевдощель в нормальном состоянии недодопированных купратов на основе Bi (BSCCO). Подобно SC-щели d -симметрии, псевдощель отсутствует в узельных диагональных направлениях (на линии узлов SC-щели) и открывается в антиузельных направлениях квазиимпульса вблизи точек $M(\pm\pi, 0), (0, \pm\pi)$. Существует много аргументов [1–3] в пользу того, что псевдощель определяется свойствами антиферромагнитно (AF) коррелированной ферми-жидкости, а именно, профилем энергии нижней хаббардовской зоны. Этот профиль хорошо прослеживается в ARPES-данных для диэлектрических недодопированных AF-соединений. При малом допировании этот профиль определяет дырочные карманы в узельных направлениях вокруг точки

$(\pi/2, \pi/2)$ и PG в спектре возбуждений в антиузельных направлениях квазиимпульса. Однородные решения $t-t'-U$ - или $t-t'-J$ -моделей подтверждают такую картину при малом h -допировании и предсказывают смену топологии поверхности Ферми (FS) от малых дырочных карманов до большой FS электронного типа при увеличении степени допирования.

Однако наблюдаемая эволюция FS при h -допировании противоречит FS e -типа. Для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) дуга FS и при значительном допировании сохраняет дырочный характер и всегда пересекает отрезок $M(0, \pi) - Y(\pi, \pi)$. Из ARPES-данных для LSCO [4–6] следует, что FS в нем имеет два разных типа сегментов. Первый из них — это прямые участки FS, параллельные CuO-связям, вблизи точки M . Вторые — сегменты вблизи узельных диагональных направлений с систематическим подавлением интенсивности фотоэмиссии на них. Такая картина в недодопированном LSCO была получена при фотоэмиссии фотонами с энергией $h\nu = 29$ эВ [4–6] в главной зоне Бриллюэна. Измерения с лучшим разре-

*E-mail: movchin@center.chph.ras.ru

шением при $h\nu = 55$ эВ во второй зоне Бриллюэна показали, что наряду с яркими сегментами FS в антиузельных направлениях имеются FS вдоль границы магнитной зоны Бриллюэна с узкой кривой распределения по импульсам и малой интегральной интенсивностью [7, 8]. В [7] такое поведение связывалось с образованием страйп-структур — противофазных AF-доменов, выстроенных в одном направлении. Было высказано предположение, что в области перехода из диэлектрического в сверхпроводящее состояние LSCO при малом допировании ($\delta \sim 0.03\text{--}0.07$) имеет место переход между двумя типами структур — от диагональных к выстроенным по CuO-связям страйп-структурам.

Подтверждением существования таких квазистатических структур служат несоизмеримые (IC) пики в неупругом нейтронном рассеянии, наблюдаемые при $Q = (\pi, \pi) \pm (\delta, \pm\delta)$ либо при $Q = (\pi \pm \delta, \pi)$, $(\pi, \pi \pm \delta)$ соответственно в диэлектрической или сверхпроводящей фазе (см. [9–11]). Сравнительное изучение IC-пигов от сверхрешеток в упругом рассеянии нейтронов и IC-пигов в неупругом рассеянии говорит в пользу происхождения последних от медленно флуктуирующих страйп-структур [12]. Это подтверждает и пиннинг таких структур при допировании цинком [13] или под действием магнитного поля [14]. Со страйп-фазами связывалось и дополнительное уширение квазичастиц в точках $k = (k_0, \pi - k_0)$, $k_0 \sim 0.175\pi$, где происходит поворот FS от направления $M(\pi, 0) - M'(0, \pi)$ к участкам, параллельным $\Gamma(0, 0) - M(\pi, 0)$ [7].

Поверхность Ферми в электронно-допированных купратах существенно отличается от таковой в случае h -допирования. В недопированной области наблюдаемая FS ограничивает электронные карманы вокруг точек $M(\pm\pi, 0)$, $(0, \pm\pi)$ [15] в соответствии с профилем энергии верхней хаббардовской зоны [16, 17]. Дальнейшее допирование приводит к фрагментарной FS с дополнительным сегментом в диагональном направлении [18]. Такой заплаточный характер FS объяснен в [19] формированием одновременно электронных и дырочных карманов от верхней и нижней хаббардовских подзон t - t' - U -модели. В [20] обсуждается и гипотеза о связи фрагментарной структуры FS со страйп-фазами.

Цель настоящей работы — показать, что фрагментарная структура FS и ряд других особенностей зон и спектральных интенсивностей могут возникать при формировании страйп-фаз. Будет показано, что фрагментация FS для периодической страйп-структуры обязана расщеплению исходной

зоны на несколько подзон, в отличие от расщепления на две — нижнюю и верхнюю — хаббардовские подзоны в однородном AF-состоянии. При этом отщепляются «примесные» квазиодномерные подзоны, которые находятся внутри хаббардовской щели однородного AF-состояния. Эти внутрищелевые зоны связаны с локализованными на доменных стенках частицами. Будет показано, что разные участки FS отвечают либо частицам, принадлежащим «примесной» зоне и ассоциируемым с доменными стенками, либо частицам от всей области AF-доменов.

Анализ проводится на основе самосогласованных решений модели Хаббарда по методу среднего поля. Результаты находятся в соответствии с полученными ранее в работах [20, 21] с упрощенным описанием страйп-фаз, где они моделировались вручную введенным потенциалом. Метод среднего поля позволяет в грубом приближении оценить устойчивость страйп-структур и исключить из рассмотрения нереализуемые гипотетические структуры, например, страйп-структуры с модуляцией заряда, но с дальним спиновым AF-порядком. Наши расчеты подтверждают многие свойства квазичастичных возбуждений в страйп-фазах, обнаруженные в модельных расчетах или расчетах по методу среднего поля [20–24]. В частности, подтверждается интерпретация квазиодномерных квазичастичных состояний внутри хаббардовской щели как состояний, локализованных на доменных стенках.

Рассматриваем t - t' - U -модель Хаббарда с зонной энергией ϵ_k и одноцентровым взаимодействием $U > 0$ (далее $t = 1$ и все энергии в единицах t). Модель не включает дальнедействующих кулоновских взаимодействий, однако она вполне адекватна для описания свойств квазичастиц вблизи границы Ферми, характеризующихся большим квазиимпульсом. В приближении среднего поля гамильтониан модели недостаточен для описания SC-состояния и должен быть дополнен эмпирическим взаимодействием электронов соседних центров, выводимым при более аккуратном учете корреляций. Но для изучения страйп-структур в нормальном состоянии сохраняем исходную t - t' - U -модель Хаббарда. Процедура поиска решения по методу среднего поля с периодической структурой стандартна [24]. Такая структура определяется двумерными векторами трансляции E_i и B_i в прямой и обратной решетках:

$$\mathbf{E}_i = (E_{ix}, E_{iy}), \quad \mathbf{B}_i = (B_{ix}, B_{iy}) \quad i = 1, 2, \quad (1)$$

удовлетворяющими условиям $E_i B_j = 2\pi\delta_{ij}$.

Произвольный узел $n = n(L, j) = E_1 L_1 + E_2 L_2 + j$ периодической структуры с n_c -центрами в эле-

ментарной ячейке описывается координатами $L = (L_1, L_2)$ и $j = (j_x, j_y)$ элементарной ячейки и узла внутри нее. Любой квазиимпульс $k \in G$ внутри зоны Бриллюэна исходной решетки выражается через импульс \tilde{k} , приведенный к зоне Бриллюэна \tilde{G} периодической структуры: $k = \tilde{k} + B_1 m_1 + B_2 m_2$. Набор целых чисел m_1, m_2 нумерует все независимые векторы переброса. Области \tilde{G} и G ограничены соответственно условиями $|\tilde{k} B_i| \leq |B_i|^2/2$ и $|k_{x(y)}| \leq \pi$.

Параметрами порядка периодических решений по методу среднего поля будут служить плотности электронов и векторы среднего спина каждого из узлов элементарной ячейки,

$$r_j = \langle r_{n(L,j)} \rangle, \quad S_{\alpha j} = \langle S_{\alpha, n(L,j)} \rangle. \quad (2)$$

Усреднение ведется по всем $N_L = N/n_c$ элементарным ячейкам, α нумерует компоненты вектора спина.

В приближении среднего поля средняя энергия находится как явная функция параметра порядка (2) [24], а волновая функция определяется заселением одноэлектронных собственных состояний $\chi_{k\lambda}^\dagger$ линейаризованного гамильтониана:

$$H_{lin} = T + N_L \sum_j \{2U r_j \hat{r}_j - 2U S_{\mu j} \hat{S}_{\mu j}\} = \sum_{\tilde{k} \in \tilde{G}} \hat{h}_{\tilde{k}}.$$

Последний разбивается на независимые вклады для каждого значения приведенного квазиимпульса \tilde{k} . Здесь T — кинетическая энергия, и $\hat{r}_j, \hat{S}_{\mu j}$ — операторы, отвечающие одноэлектронным средним (2). В импульсном представлении собственные состояния гамильтониана H_{lin} разлагаются по набору из $2n_c$ ферми-операторов:

$$\chi_{k\lambda}^\dagger = \sum_{m,\sigma} c_{k+Bm,\sigma}^\dagger W_{m\sigma,\lambda}(\tilde{k}), \quad (3)$$

где $\lambda = 1, \dots, 2n_c$, $Bm = B_1 m_1 + B_2 m_2$ и векторы $\tilde{k} + Bm$ охватывают все фазовое пространство G .

Матрица собственных векторов $W_{m\sigma,\lambda}$ и собственные значения $E_{\tilde{k},\lambda}$ определяются диагонализацией матрицы $h_{\tilde{k}}$ в базисе $\{c_{k+Bm,\sigma}^\dagger\}$:

$$(h_{\tilde{k}})_{m,\sigma,m',\sigma'} W_{m',\sigma',\lambda} = W_{m,\sigma,\lambda} E_{\tilde{k},\lambda}. \quad (4)$$

Здесь

$$(h_{\tilde{k}})_{m,\sigma,m',\sigma'} = \delta_{mm'} \delta_{\sigma\sigma'} \epsilon_{\tilde{k}+Bm} + U \sum_j \varphi(j, m' - m) [r_j \delta_{\sigma\sigma'} - S_{\mu j}(\sigma_\mu)_{\sigma\sigma'}], \quad (5)$$

где $\varphi(j, m) = \exp[iBmj]$ и $j = (j_x, j_y)$ перебирает все n_c -центры элементарной ячейки. В свою очередь сами параметры порядка (2) вычисляются через матрицу собственных векторов W и фермиевские функции f согласно формуле

$$\{r_j, S_{\alpha j}\} = \frac{1}{2N} \sum_{\tilde{k} \in \tilde{G}} \sum_{m,s,m',s'} \{\sigma_0, \sigma_\alpha\}_{ss'} \varphi(j, m' - m) \times W_{m,s,\lambda}^*(\tilde{k}) W_{m',s',\lambda}(\tilde{k}) f(E_{\tilde{k}\lambda} - \mu). \quad (6)$$

Матрицы Паули σ_α, σ_0 в (7) отвечают соответственно компонентам $S_{\alpha j}, r_j$. Уравнения (4), (6) определяют самосогласованные решения по методу среднего поля периодической структуры.

Интенсивность фотоэмиссии электронов с проекцией k импульса на плоскость ab и энергией $E = h\nu - \omega$ равна

$$I(k, \omega) = |M(k)|^2 A(k\omega) f(\omega) \otimes R_{\omega k}. \quad (7)$$

Она определяется матричным элементом $M(k)$, спектральной плотностью $A(k\omega)$ и функцией Ферми f и сопровождается сверткой с гауссовой функцией $R_{\omega k}$ [25], имитирующей конечное разрешение по k и энергии. Зависимость матричного элемента M от k изучалась в [26]. Здесь мы берем для него постоянное значение, так как наша цель — исследовать влияние структуры на спектральную плотность A .

В одноэлектронном приближении

$$A(k, \omega) = \frac{1}{N} \times \sum_{\tilde{k} \in \tilde{G}} \sum_{m,\sigma,\lambda} |W_{m,\sigma,\lambda}(\tilde{k})|^2 \bar{\delta}(E_{\tilde{k}\lambda} - \mu - \omega) \delta_{k, \tilde{k}+Bm}. \quad (8)$$

Здесь $\lambda = 1, \dots, 2n_c$ и $m = (m_1, m_2)$ нумеруют независимые векторы переброса $Bm = B_1 m_1 + B_2 m_2$. Стандартная замена δ -функции в (8) функцией с конечной шириной Ω подразумевается. Карта $I(k_x, k_y, \omega = 0)$ визуализирует как основные, так и теньевые сегменты FS. Хотя зонные энергии — периодические функции в k -пространстве, интенсивность (7) и спектральная плотность (8) не обладают такой периодичностью. Поэтому даже при не зависящем от k матричном элементе в (7) различные участки FS проявляются с разной интенсивностью из-за составной природы зонных операторов при наличии структуры.

Помимо карт $I(k_x, k_y, \omega = 0)$, мы приводим также карты интенсивности, усредненной внутри определенного частотного окна $2\Delta\omega$:

$$I_{\Delta\omega}(k, \omega) = \int d\omega' I(k\omega') R\left(\frac{\omega - \omega'}{\Delta\omega}\right). \quad (9)$$

Здесь R — соответствующая гауссова функция с шириной $\Delta\omega$, имитирующая конечное разрешение по ω . Построение подобных карт предполагает нормировку функции по максимальному значению. Следовательно, яркость и ширина границ Ферми на них зависят от ширины частотного окна $\Delta\omega$ в (9). В частности, при большой ширине $\Delta\omega$ на карте функции $I_{\Delta\omega}$ видны не только истинные границы Ферми с резкой ступенькой заселенности, но и границы с более плавным изменением $n(k)$. Такие участки отвечают открытию диэлектрической щели или псевдощели.

Наконец, если $k = k(l)$ менять вдоль определенного контура, то карта функции $A(k, \omega)$ на плоскости двух переменных $k(l)$ и ω воспроизводит дисперсию электронных уровней $E_\lambda(k)$ вдоль выбранного контура. Каждый уровень при этом будет взвешен с множителем $|W_{k,\sigma,\lambda}|^2$, отражающим вклад $c_{k\sigma}^\dagger$ в собственном зонном состоянии (3). Чтобы увидеть все зоны $E_\lambda(k)$ целиком, а не только их «яркие» фрагменты, достаточно построить карту функции (8) с заменой множителя $|W|^2$ на единицу.

2. СТРУКТУРА ВЕРТИКАЛЬНЫХ СТРАЙП-ДОМЕНОВ

Среди страйп-фаз с доменами, выстроенными вдоль CuO -связей y -ориентации, были рассчитаны структуры с центрированными на x -связях доменными стенками и расстоянием между стенками $l = 4, 6, 8, 10$, и $n_c = 2l$ (l в постоянных решетках). Назовем эти фазы соответственно Y_4, \dots, Y_{10} . Без учета взаимодействий с решеткой и подгонки параметров модели приближение среднего поля дает лишь тенденцию изменения структур, но не точный порядок их следования при допировании.

На рис. 1 представлены средние энергии $\bar{H}(p)$ на один узел решетки как функции допирования $p = 1 - n$ для дырочно-допированной модели с параметрами $U = 4, t' = 0.1$ (в единицах t) для ряда структур и для однородного АФ-состояния. Последнее обладает низшей энергией при $p \rightarrow 0$. В соответствии с прежними результатами [24] в дырочно-допированных моделях страйп-состояния более устойчивы, чем однородное АФ-состояние. С ростом p наиболее стабильными структурами последовательно становятся структуры Y_{10}, Y_8, Y_6, Y_4 . Для структур Y_8, Y_{10} начиная с некоторого $p > p^*(l)$ внутри интервала l появляются две дополнительные доменные стенки, а ширина истинно АФ-домена сужа-

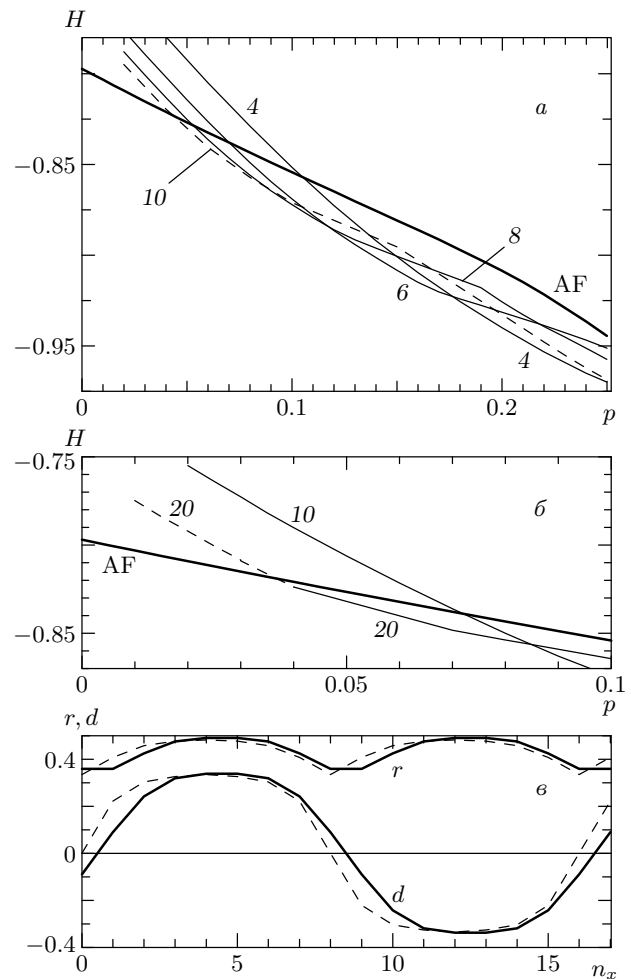


Рис. 1. а) Зависимости от допирования $p = 1 - n$ средней энергии на один узел дырочно-допированной модели с параметрами $U = 4.0, t' = 0.1$ для вертикальных страйп-структур и однородного АФ-состояния (жирная кривая АФ). Кривые, отвечающие структурам Y_l , отмечены соответствующими значениями $l = 4, 6, 8, 10$. б) То же при малом p для диагональных страйп-фаз D_{10}, D_{20} . Штрихи — приближенный результат в области неполной сходимости (расчет по методу среднего поля). в) Вариации средней плотности и спина (2) как функции от координаты n_x узлов решетки для структур Y_8 (сплошные кривые) и D_8 (штрихи)

ется до $4a, 5a$. Соответствующие значения p^* отвечают излому в зависимости средней энергии от допирования и лежат в области, где наиболее стабильной является структура Y_4 . При больших p выделенность структуры Y_4 с $\Delta l = 4$, как наиболее стабильной, очевидна.

На том же рисунке представлены вариации электронной и спиновой плотностей $r(n)$,

$d(n) = (-1)^{n_x+n_y} \langle S_z(n) \rangle$ на узлах вдоль координаты n_x , параллельной CuO-связям, для некоторых структур в дырочно-допированной системе с $U = 4$, $t' = 0.1$. Они показывают степень локализации заряда и искажения спиновой плотности вблизи доменных стенок. Самосогласованное спиновое периодическое поле $F(n) = U(-1)^n d(n)$ (или спиновый структурный фактор) несколько отличается от вручную вводимого потенциала с прямоугольной модуляцией [20, 21]. При малых t' оно фактически содержит лишь две гармоники F_q с векторами $q = Bm$, ближайшими к вектору $Q = (\pi, \pi)$ однородного АФ-состояния.

Основные и темновые сегменты поверхности Ферми на полной плоскости фазового пространства $|k_{x(y)}| \leq \pi$ для выстроенной по y -связям страйп-структуры Y_4 с $l = 4a$, $n_c = 8$ видны на рис. 2а, представляющем карту интенсивности фотоэмиссии $I(k, \omega = 0)$ при допировании $p = 0.15$. Поверхности Ферми страйп-структуры сильно отличаются от таковых в случае однородного АФ-решения модели с таким же допированием. В последнем случае FS представляют собой вытянутые вдоль магнитной зоны Бриллюэна границы вокруг дырочных карманов. Периодическое поле спинов антифазных АФ-доменов формирует квазиодномерные участки FS, нормальные к направлению страйп-доменов. Карта интенсивностей $I(k_x, k_y, \omega = 0)$, симметризованная по x - и y -ориентациям страйп-доменов, дана на рис. 2б. Отсутствие границы Ферми в диагональном направлении означает открытие псевдощели в этом направлении вместо псевдощели в области точки $M = (0, \pi)$, $(\pi, 0)$ в случае однородного решения.

На рис. 2в приведена карта интенсивности $I_{\Delta\omega}$, усредненной внутри частотного окна $\Delta\omega = 0.08t$ согласно формуле (9). Помимо ярких сегментов FS, расширение $\Delta\omega$ делает видимыми и квазичастицы с энергией, превышающей псевдощель на диагональном направлении.

Структура зон периодической страйп-структуры и перенос спектрального веса между подзонами видны из карт спектральной плотности $A(k, \omega)$ на плоскости (k, ω) при изменении значения k вдоль определенного контура. На рис. 3 представлены взвешенные согласно формуле (8) зонные энергии и система тех же зонных уровней $E_\lambda(k) - \mu$ периодической структуры с единичным весом как функция k при изменении k вдоль пути $\Gamma(0, 0) - M(\pi, 0) - Y(\pi, \pi)$. Как и должно быть, $E_\lambda(k)$ (но не интенсивности $A(k)$) являются периодическими функциями k с периодом $2\pi/l$ на участках контура, нормальных к на-

правлению страйп-доменов. Реально для каждого k лишь малое число нетеневых зонных уровней вносит вклад в спектральную функцию и соответственно проявляет себя в фотоэмиссии. В согласии с результатами работ [20, 21, 24] из рис. 2 следует, что перенос спектрального веса с одной подзоны периодической структуры на другую происходит таким образом, что яркие участки зон стремятся повторить невозмущенную зону. При этом вблизи границы магнитной зоны Бриллюэна яркие фрагменты зон появляются внутри хаббардовской щели спектра возбуждений однородного АФ-состояния.

Рисунок 4 демонстрирует детали поведения «взвешенных» зон $E(k) - \mu$ в окрестности границы магнитной зоны Бриллюэна при изменении k вдоль трех сечений $\Gamma - M(\pi, 0) \rightarrow Y(\pi, \pi)$, $\Gamma - S(\pi/4, 3\pi/4) \rightarrow Y$ и $\Gamma - (\pi/2, \pi/2) \rightarrow Y$. На двух последних из них ни одна из зон не пересекает уровень химического потенциала, что означает открытие псевдощели в этих направлениях и согласуется с отсутствием диагонального сегмента FS на рис. 2б. Таким же образом исчезает и FS вблизи $M_y(0, \pi)$. Согласно интерпретации [20–22], возникает «примесная» 1D-зона квазичастиц, локализованных на доменных стенках и движущихся вдоль них. Для вертикальных страйп-доменов дисперсия вдоль k_y такой зоны велика, порядка t .

Расчеты структур Y_8 и Y_{10} показывают, что форма FS, подобная описанной выше (рис. 2а, б), имеет место лишь при допировании соответственно $p < 1/8$ и $p < 1/10$. В то же время для $p > 1/l$ появляются сегменты FS в узельных диагональных направлениях, а вблизи точек $M(\pi, 0)$, $(0, \pi)$ вновь открывается псевдощель, привычная для недопированного BSCCO. На рис. 5 представлены FS для структуры Y_8 при допировании $p = 0.1 < 1/8$ и $p = 0.15 > 1/8$. В сам момент смены топологии FS — при допировании $p = 1/8$ — псевдощель открывается вдоль всей границы магнитной зоны Бриллюэна. «Примесная» зона целиком лежит выше химического потенциала μ и полностью свободна, в то время как при любом k оставшиеся семь нижних уровней «основной» зоны от состояний, делокализованных по АФ-домену, лежат выше μ и полностью заняты. Щель между ними на уровне химического потенциала видна на рис. 6, где представлены карты спектральных плотностей $A(k, E - \mu)$ при изменении k на трех сечениях $\Gamma - M(\pi, 0) - Y(\pi, \pi)$, $\Gamma - S(\pi/4, 3\pi/4) - Y$ и $\Gamma - Y$ и соответствующие им невзвешенные собственные значения. Расположение последних объясняет схему заполнения основной и «примесной» внутрищелевой зон. Появление

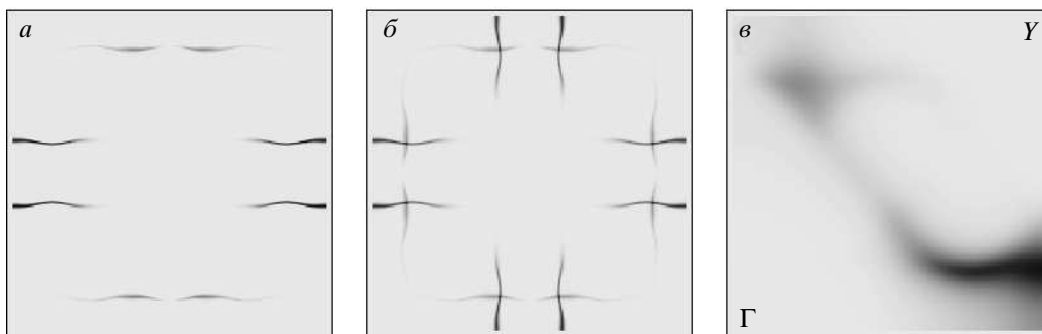


Рис. 2. *а)* Карта интенсивности (7) на плоскости $|k_{x,y}| \leq \pi$, отражающая FS структуры Y_4 вертикальных страйп-доменов с $l = 4$ для модели с $U = 4, t' = 0.1$ при допировании $p = 0.15$. *б)* То же, но усредненное по страйп-структурам x - и y -ориентаций. *в)* Карта интенсивности (8), усредненной внутри частотного окна $\Delta\omega = 0.08t$ в первом квадранте фазового пространства $0 < k_{x(y)} \leq \pi$

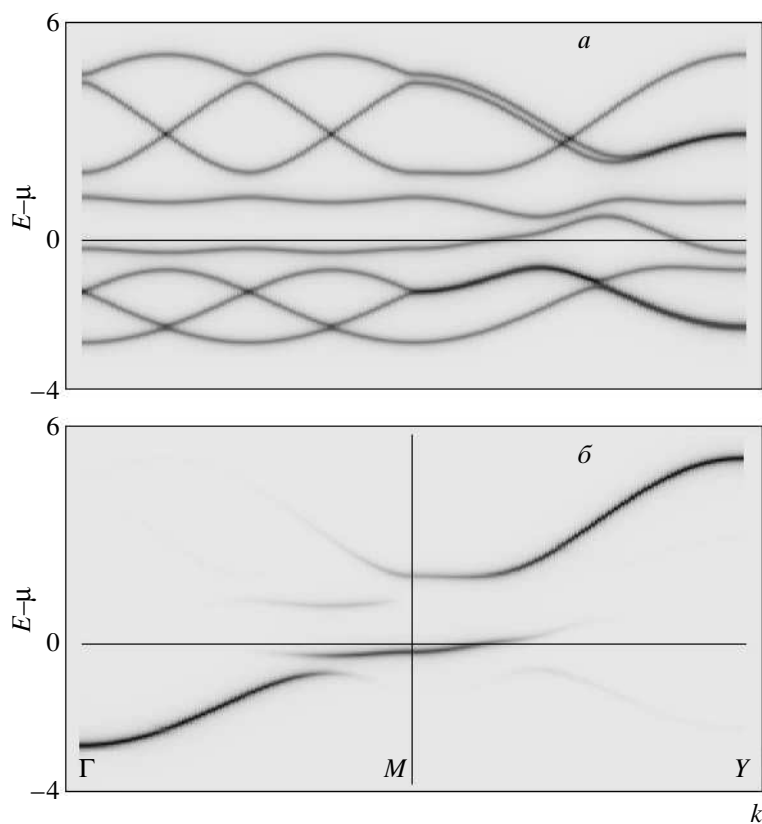


Рис. 3. *а)* Карты спектральной плотности (8), проявляющие зонные энергии $E_\lambda(k) - \mu$ страйп-структуры Y_4 при изменении k вдоль контура $\Gamma - M(\pi, 0) - Y(\pi, \pi)$. *б)* Те же зоны из карты плотности уровней с единичным весом в (8). Параметры модели и допирование те же, что на рис. 2

диагонального сегмента FS при $p > 1/8$ в структуре Y_8 означает образование дырочного кармана в оставшейся основной зоне (содержащей семь уровней на один слой домена) при полной депопуляции примесной зоны, отщепленной от основной внутрь

хаббардовской щели. Решения для структуры Y_{10} демонстрируют такую же смену топологии FS при $p = 1/10$. Однако при таком p средняя энергия структуры Y_{10} выше, чем для структуры Y_8 .

Более правдоподобно описывать LSCO как ан-

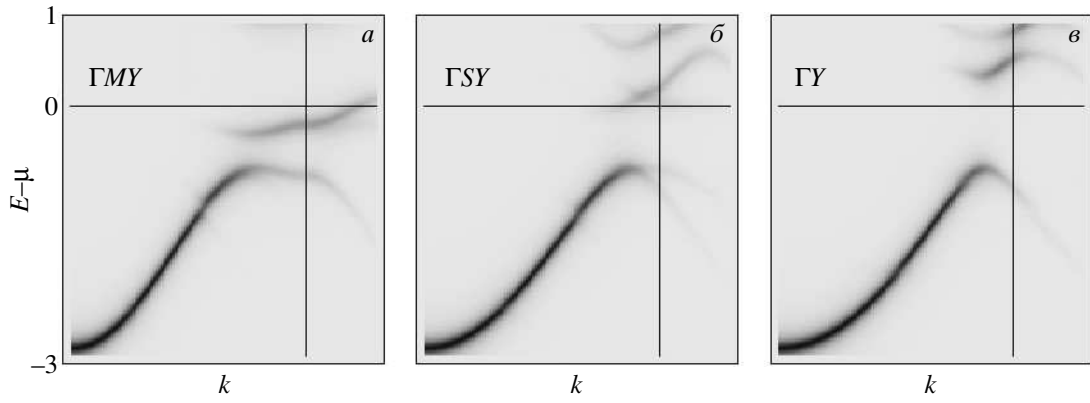


Рис. 4. Поведение зон и перенос спектральной плотности между ними вблизи границы магнитной зоны Бриллюэна из карты $A(k, \omega)$. Значение k меняется вдоль трех контуров $\Gamma - M(\pi, 0) - Y(\pi, \pi)$, $\Gamma - S(3\pi/4, \pi/4) - Y$, $\Gamma - Y$ в области, ограниченной условием $k_x + k_y \leq 1.3\pi$. Вертикальные линии отмечают значения k на пересечении контуров с магнитной зоной Бриллюэна. Карты б, в демонстрируют открытие псевдощели в соответствующих точках этой зоны. Структура Y_4 , допирование и модель те же, что на рис. 2, 3

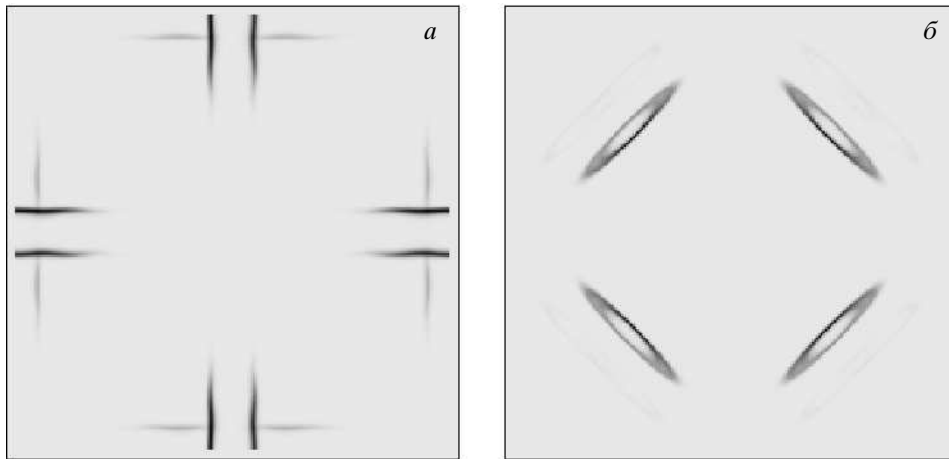


Рис. 5. Карты интенсивностей фотоэмиссии $I(k, \omega = 0)$, проявляющие FS для страйп-структуры Y_8 (с усреднением по x - и y -ориентациям); карты а, в соответствуют допированию $p = 0.1 < 1/8$ и $p = 0.15 > 1/8$. Аномальное допирование $1/8$ отвечает открытию псевдощели вдоль границы магнитной зоны Бриллюэна

самбль нескольких квазистатических структур с доменами разной ширины или с флуктуациями средней плотности заряда в пространстве или во времени. Упрощенные модельные расчеты разупорядоченной страйп-фазы проводились в [20]. С учетом пространственных флуктуаций заряда или (и) вариации структур можно ожидать одновременного проявления в спектрах ARPES как квазиодномерных сегментов FS в антиузельных направлениях, так и сегментов FS в узельных направлениях. Из проведенного рассмотрения следует, что разные сегмен-

ты FS имеют разное происхождение: антиузельные сегменты происходят от «примесных» данных состояний, локализованных на доменных стенках, в то время как сегменты FS в узельных направлениях обязаны делокализованным по AF-домену состояниям. Очевидно, первые более подвержены влиянию дефектов, примесей и вариациям структуры. Это может объяснить разницу в форме сигналов ARPES от LSCO для узельных и антиузельных сегментов FS, состоящую в наличии либо отсутствии резкого пика в кривых распределения фотоэлектронов по

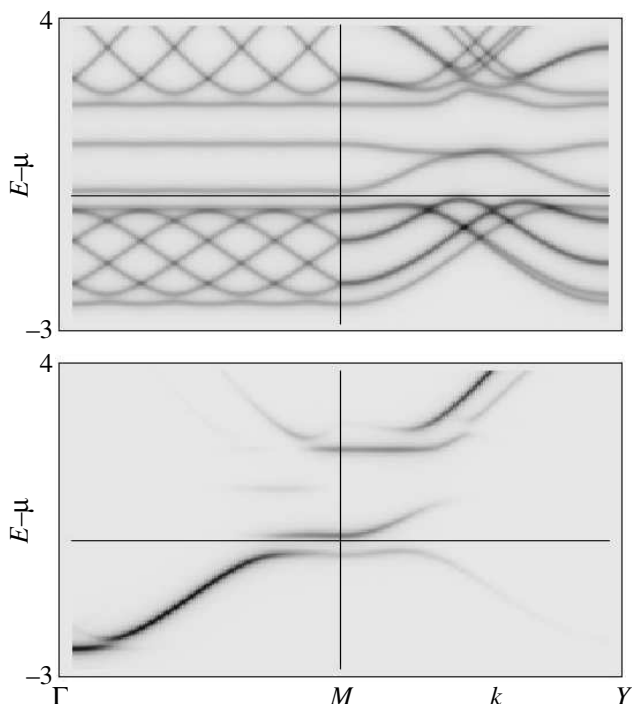


Рис. 6. Поведение зон $E_\lambda(k) - \mu$ для структуры Y_8 при аномальном допировании $p = 1/8$ на картах спектральной (внизу) и невзвешенной (вверху) плотностей состояний. Квазиимпульс k меняется вдоль контура $\Gamma - M(\pi, 0) - Y$. Горизонтальная линия отмечает уровень химического потенциала

энергии [6, 7] для соответствующих сегментов.

Из описанной выше фрагментации зон следует также, что в области пересечения стандартной дуги FS с границей магнитной зоны Бриллюэна, в окрестности точки $S(\pi/4, 3\pi/4)$, сохраняется псевдощелевой участок магнитной зоны Бриллюэна с подавленной интенсивностью фотоэмиссии. Подобные точки на магнитной зоне Бриллюэна называются в [7] горячими точками, поскольку начиная с этих точек наблюдается уширение пика фотоэмиссии, интерпретируемое как включение дополнительного механизма рассеяния квазичастиц с таким k . В концепции страйп-фаз исчезновение FS на данном сечении обязано специфике зон, а именно, сохранению псевдощели в области между двумя сегментами FS разной природы. В области горячих точек происходит перенос спектрального веса с делокализованных по AF-домену зонных состояний на «примесную» квазиодномерную зону, более чувствительную к периоду страйп-структур. Как уже говорилось, уширение пика в кривой распределения фотоэлектронов по энергиям в антиузельных направлениях начиная

с горячих точек может быть следствием неупорядоченного расположения доменных стенок.

Можно попытаться связать аномалию в электронных свойствах структуры Y_8 при $p = 1/8$ с аномальным подавлением сверхпроводимости и T_c в LSCO при таком p . Однако остается противоречие между положениями $q = \pi(1, 1 \pm 1/8)$ пиков в неупругом рассеянии нейтронов, ожидаемыми для страйп-структуры Y_8 , и $q = \pi(1, 1 \pm 1/4)$, наблюдаемыми в LSCO при $p = 1/8$. Последние указывают в пользу структуры Y_4 .

При исследовании других периодических структур было выяснено, что в приближении среднего поля модуляция заряда, т.е. CDW, возможна только при наличии антифазных AF-доменов с границами между ними. Искусственные параметры порядка, описывающие CDW со сфазированными AF-доменами, не выживают: решение по методу среднего поля сходится к однородному AF-решению. Это относится и к периодическому варианту структур, типа «пузырь» [20], с ячейкой 4×4 , и к двумерным структурам с антифазными AF-доменами размера 4×4 с модуляцией заряда по осям x и y . Для последних рассмотрение в приближении среднего поля приводит к однородному парамагнитному решению. Из двумерных структур при определенных параметрах существуют состояния со спиновыми токами на плакетках 4 и векторами среднего спина, лежащими в ab -плоскости (32 центра в элементарной ячейке). Их энергия выше энергии вертикальной страйп-структуры Y_4 , и FS никак не соответствуют сегментам наблюдаемой FS.

3. ДИАГОНАЛЬНЫЕ СТРАЙП-ФАЗЫ

Интересно исследовать отличия диагональных страйп-структур от рассмотренных выше структур, выстроенных вдоль связей. Введем обозначение D_l для диагональных структур с расстоянием $l/\sqrt{2}$ между доменными стенками и числом $n_c = 2l$ узлов в элементарной ячейке. Указанием на присутствие таких структур в диэлектрической фазе LSCO служат пики с $Q = (\pi, \pi) \pm (\delta, \pm\delta)$ в неупругом нейтронном рассеянии в этой фазе при допировании $p < 0.05$ [9–11]. Мы рассчитывали структуры D_l с векторами трансляции $E_1 = (-1, 1)$, $E_2 = (l, l)$ и с центрированными на узлах (но не на связях) доменными стенками, так как энергия диагональных структур возрастает при центрировании доменных стенок на связях. Энергии структур D_{10} и D_{20} с числом узлов $n_c = 2l = 20, 40$ в элементарной ячейке от-

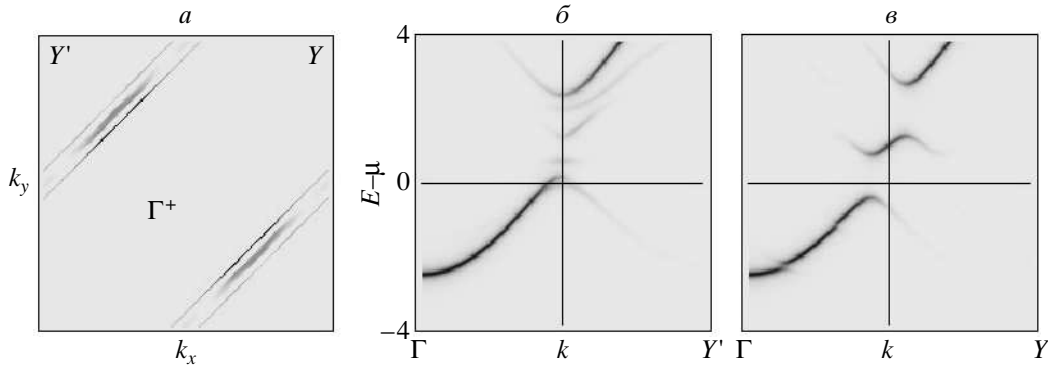


Рис. 7. а) Карта интенсивностей для структуры D_8 со страйп-доменами, параллельными вектору $B_2 = (-\pi, \pi)$ при допировании $p = 0.15$. Проявляются лишь сегменты FS, нормальные к направлению доменов. Графики б, в — поведение зон для значения k , меняющегося вдоль диагоналей $\Gamma(0, 0) - Y'(-\pi, \pi)$ и $\Gamma - Y(\pi, \pi)$

носителю энергии АФ-состояния в области $p < 0.1$ даны на рис. 1б. Исходя из данных на рис. 1 и экспериментальных результатов [9–11], в области малого допирования $p \leq 0.05$ можно ожидать существования диагональных страйп-фаз D_l с $l > 20$. Тем не менее мы продемонстрируем особенности FS и «примесной» зоны внутри хаббардовской щели на примере диагональной страйп-структуры D_8 с меньшим числом уровней.

На рис. 7 представлены образ FS и поведение зон на сечениях $\Gamma - Y(\pi, \pi)$ и $\Gamma - Y'(-\pi, \pi)$ для диагональной страйп-структуры D_8 с векторами трансляций $E_1 = (-1, 1)$, $E_2 = (8, 8)$, $n_c = 16$ и доменами, параллельными E_1 . Как и предсказывалось ранее [20, 21], квазиодномерные сегменты FS нормальны направлениям страйп-доменов. В середине хаббардовской щели возникает примесная внутрищелевая зона с малой дисперсией. Согласно рассуждениям в [20, 22], дисперсия этой зоны пропорциональна малому интегралу перескока t' , в отличие от ширины $\sim t$ подобной внутрищелевой зоны для вертикальных страйп-доменов. При такой малой дисперсии внутрищелевой примесной зоны и большой щели, отделяющей ее от остальной нижней хаббардовской зоны, вариации допирования и периода страйп-структуры позволяют смоделировать систему с диэлектрическим состоянием даже при ненулевом допировании $p_h \neq 0$ [22].

На рис. 8 представлена карта спектральной плотности $A(k, \omega)$ на двух диагональных сечениях для периодической структуры D_8 с $n_c = 16$, $E_2 = (8, 8)$ при допировании $p = 1/8$. Она отражает структуру «взвешенных» зон вдоль двух диагоналей — параллельной и поперечной страйп-доменам. На нижних

графиках представлена система «невзвешенных» одноэлектронных уровней. Вдоль всей границы магнитной зоны Бриллюэна большая щель отделяет основную часть нижней хаббардовской зоны от отщепившейся «примесной» зоны состояний, локализованных вдоль доменных стенок. При $p = 1/8$ «примесная» зона структуры D_8 пуста. Следовательно, при таком допировании структура D_8 проявляла бы свойства диэлектрика с большой щелью до зоны проводимости. Ситуация аналогична аномальному поведению вертикальной страйп-структуры Y_8 при допировании $p = 1/8$ с той разницей, что в силу большой дисперсии примесной зоны в структуре Y_8 щель возбуждений была малой.

Вопрос о реализуемости самой структуры D_8 при $p = 1/8$, т. е. вопрос о стабильности ее по отношению к вертикальным страйп-структурам, вряд ли можно окончательно решить на основе расчетов в приближении среднего поля. В соответствии с положением низкочастотных ИС-пиков в неупругом рассеянии нейтронов на LSCO [9, 10] можно ожидать формирования диагональных страйп-структур D_l с $l \geq 20$ лишь при очень малом допировании $p < 0.05$.

Любая диагональная структура D_l при соответствующем допировании $p = 1/l$ сохраняет отмеченные выше свойства структуры D_8 — остается диэлектриком с такой же большой щелью, отделяющей основную заполненную зону от пустой «примесной» зоны проводимости. Следовательно, при любом малом допировании в области $p < 0.05$, где диагональные структуры D_l с $l > 20$ более стабильны, всегда сформируется такой набор диагональных доменных стенок со средним расстоянием $\bar{l} > 20/\sqrt{2}$ между ними, который обеспечит диэлектрическое состояние

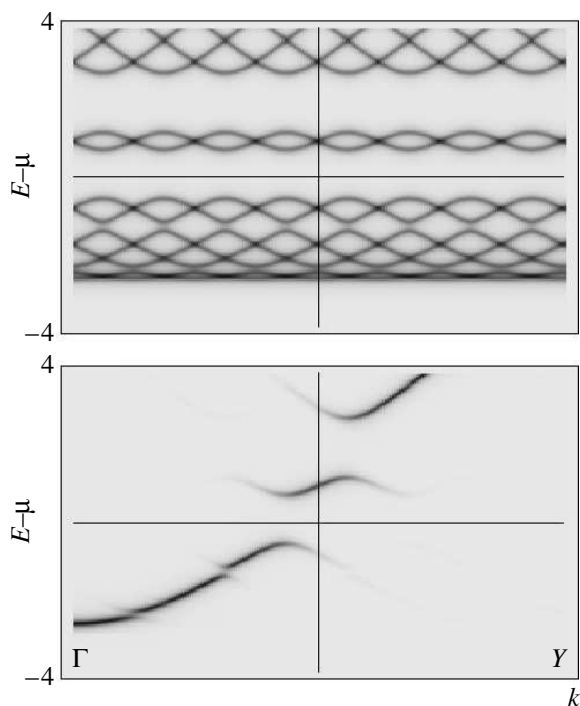


Рис. 8. Карты спектральной плотности $A(k, \omega)$ (внизу) и зонные энергии $E(k) - \mu$ (вверху) страйп-структуры D_8 при допировании $p = 1/8$ для значения k , меняющегося вдоль диагонали $\Gamma - Y$, нормальной к направлению страйп-доменов

системы путем отщепления нужного количества пустых примесных зон от оставшейся полностью заполненной основной зоны. Такие аргументы, впервые высказанные в работе [22], объясняют существование диэлектрической фазы в LSCO при отличном от нуля допировании ($p < 0.05$).

В отличие от диагональных структур, в случае вертикальных страйп-доменов дисперсия «примесной» зоны $\Delta E \sim t$ велика, порядка самой хаббардовской щели. С учетом этого, а также с учетом дисперсии края нижней хаббардовской зоны такие структуры не могут обеспечить диэлектрическое состояние системы в значительной области допирования. Аномалия при $p = 1/8$ является исключением для вертикальной страйп-структуры Y_8 .

Наконец, отметим еще одну проблему в описании электронно-допированного купрата $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (NCCO) при $p_e > 0.13$. Она касается интерпретации заплаточного характера поверхностей Ферми, наблюдаемых в картах интенсивности ARPES-сигнала от NCCO [18]. FS состояли из границ известных электронных карманов вокруг точек $M(\pi, 0)$, $(0, \pi)$ и дополнительных сегментов FS в диагональном

узельном направлении. В работе [19] это явление интерпретируется как сосуществование электронных карманов от заселения верхней хаббардовской зоны и дырочных карманов в окрестности $k \sim (\pi/2, \pi/2)$ от частичной депопуляции нижней хаббардовской зоны. Попытки связать появление дополнительных сегментов FS со страйп-структурами не привели к однозначному ответу [20]. Мы также пытались найти страйп-структуры, которые воспроизвели бы такие сегменты. В частности, для диагональной страйп-структуры D_{10} FS действительно имеет дополнительные сегменты в узельном направлении, нормальному направлению диагональных страйп-доменов. Однако энергия такого состояния для e -допированной модели Хаббарда оказывается выше энергии однородного AF-состояния аналогично другим исследованным ранее страйп-структурам [24] в e -допированных моделях.

Таким образом, формирование страйп-структур, связанные с этим процессы переброса и перенос спектрального веса между различными подзонами приводят к фрагментации зон и поверхностей Ферми, наблюдаемых в фотоэмиссии. Внутри хаббардовской щели отщепляется квазиодномерная «примесная» зона. Она отвечает состояниям, локализованным вдоль доменных стенок, разделяющих антифазные антиферромагнитные страйп-домены. В области устойчивости выстроенных вдоль связей страйп-структур Y_l с шириной домена $l = 4, 8, 10$ именно «примесная» зона ответственна за параллельные связям сегменты FS в антиузельных направлениях при допировании $p < 1/l$. В то же время сегменты FS в узельных направлениях обязаны зонным состояниям, делокализованным по узлам AF-доменов, и проявляются при допировании $p > 1/l$. Разное происхождение узельных и антиузельных сегментов FS объясняет различие характеристик фотоэмиссии на этих сегментах, наблюдаемое в ARPES-исследованиях LSCO [4–6]. Для структуры Y_8 само критическое значение $p = 1/8$ знаменует открытие псевдощели вдоль всей границы магнитной зоны Бриллюэна. Однако предположение о том, что структура Y_8 ответственна за аномальное подавление T_c в LSCO при допировании $p = 1/8$, не согласуется с размером $l = 4$ страйп-доменов, вытекающим из нейтронных измерений. Расчеты диагональных страйп-структур подтверждают особенности «примесных» зон в этом случае. Отмеченные ранее [20–22] малая дисперсия «примесной» зоны и большая щель, отделяющая ее от «основной» зоны, обеспечивают существование диэлектрической фазы при ненулевом допировании.

Полученные из расчетов по методу среднего поля детали поведения зон и FS конкретных структур полезно иметь в виду при обсуждении фотоэмиссионных спектров LSCO.

Работа поддержана РФФИ (проект № 03-03-32141). Автор выражает искреннюю благодарность В. Я. Кривнову за полезные замечания и помощь в работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Damascelli, Z.-X. Shen, and Z. Hussain, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473, (2003); E-print archives, cond-mat/0208504.
2. Z. M. Shen and D. S. Dessau, *Phys. Rep.* **253**, 1 (1995).
3. T. Timusk and B. Statt, *Rep. Progr. Phys.* **62**, 61 (1999).
4. T. Yoshida, X. J. Zhou, T. Sasagawa, W. L. Yang et al., *Phys. Rev. Lett.* **91**, 027001 (2002).
5. A. Ino, C. Kim, M. Nakamura et al., *Phys. Rev. B* **62**, 4137 (2000).
6. X. J. Zhou, T. Yoshida, S. A. Kellar, P. V. Bogdanov et al., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5578 (2001).
7. X. J. Zhou, T. Yoshida, D. H. Lee et al., *Phys. Rev. Lett.* **92**, 187001 (2004).
8. X. J. Zhou, J. Shi, T. Yoshida, T. Cuk et al., E-print archives, cond-mat/0405130.
9. S. A. Kivelson, I. P. Bindloss, E. Fradkin et al., *Rev. Mod. Phys.* **75**, 1201 (2003).
10. J. N. Tranquada, H. Woo, T. G. Perring et al., *Nature* **429**, 531 (2004).
11. M. Matsuda, M. Fujita, K. Yamada, R. J. Birgeneau et al., *Phys. Rev. B* **62**, 139148 (2000).
12. M. Fujita, H. Goka, K. Yamada, J. M. Tranquada, and L. P. Regnault, E-print archives, cond-mat/0403396.
13. H. Kimura, M. Kofu, Y. Matsumoto, and K. Hirota, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 067002 (2003).
14. B. Lake, H. M. Ronnow, N. B. Christensen, G. Aeppli et al., *Nature* **415**, 299 (2002).
15. N. P. Armitage, D. H. Lu, D. L. Feng et al., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1126 (2001).
16. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, Е. А. Плеханов, Письма в ЖЭТФ **67**, 350 (1998); ЖЭТФ **114**, 985 (1998), **115**, 649 (1999).
17. C. Kusko and R. S. Markiewicz, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 963 (2000).
18. N. P. Armitage et al., *Phys. Rev. Lett.* **87**, 147003 (2002).
19. C. Kusko, R. S. Markiewicz, M. Lindroos, and A. Bansil, *Phys. Rev. B* **84**, 140513 (R) (2002).
20. M. Granath, E-print archives, cond-mat/0401063.
21. M. Granath, V. Oganessian, D. Orgad, and S. A. Kivelson, *Phys. Rev. B* **65**, 184501 (2002).
22. H. J. Schulz, *J. de Phys.* **50**, 2833 (1989).
23. V. J. Emery, S. A. Kivelson, and O. Zachar, *Phys. Rev. B* **56**, 6120 (1997).
24. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, ЖЭТФ **125**, 618 (2004); E-print archives, cond-mat/0305685.
25. S. V. Borisenko, A. A. Kordyuk, S. Legner et al., *Phys. Rev. B* **64**, 094513 (2001).
26. M. Lindroos, S. Sahrakorpi, and A. Bansil, *Phys. Rev. B* **65**, 054514 (2002).
27. J. Lorenzana and G. Seibold, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 135401 (2002); **90**, 066404 (2003).
28. G. Seibold and J. Lorenzana, *Phys. Rev.* **69**, 134513 (2004).

Примечание при корректуре (1 ноября 2004 г.). Необходимо отметить, что существенный прогресс в описании страйп-фаз достигнут в работах [27, 28] на основе приближения Гутцвиллера. Авторам удалось объяснить зависимости от допирования периода структур, химического потенциала, транспортных свойств.