

# НЕМАТИЧЕСКИЙ ПОРЯДОК СПИНОВЫХ СТРУКТУР КЛАСТЕРОВ МОДЕЛИ ХАББАРДА

*М. Я. Овчинникова\**

*Институт химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук  
119334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 18 января 2011 г.

Возможность интерпретации нормального псевдощелевого состояния купратов как результата формирования спиновых и зарядовых структур изучена на примере решений методом среднего поля модели Хаббарда для конечного двумерного кластера. Итерационная процедура самосогласования приводит начальные некоррелированные распределения спинов к стабильным структурам. Фурье-компоненты распределений зарядов и спинов в них имеют максимумы при характерных несоизмеримых квазиимпульсах, зависящих от допирования. Показано, что при любом допировании плотность состояний системы имеет резкий минимум — псевдощель — на уровне Ферми. Это значит, что привязанность щели к уровню Ферми не является свойством только сверхпроводящего состояния, но типична также и для нормального состояния спиновых стекол. Обсуждаются характеристики поверхности Ферми, усредненные по реализуемым структурам, и свойства квазичастиц в узельной и антиузельной областях квазиимпульса.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Выяснение природы псевдощелевого состояния недодопированных (UD) купратов остается актуальной проблемой, по ней нет единой точки зрения. К ранее изученным проявлениям псевдощели (см. обзор [1]) добавилось много новых деталей, касающихся электронных свойств псевдощелевого (PG) состояния. Так, фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES) указывает на фрагментарный характер поверхности Ферми в PG-состоянии [2, 3]. А именно, в  $V_i$ -содержащих купратах поверхность Ферми состоит из несвязанных сегментов — ферми-дуг, расположенных в диагональных (узельных) направлениях квазиимпульса. При этом длина этих дуг увеличивается с допированием. С другой стороны, недавнее обнаружение магнитных квантовых осцилляций в иттриевых купратах  $YB_2Cu_3O_{6.5}$  и  $YB_2Cu_4O_8$  (YBCO) наряду с отрицательным знаком константы Холла [4–6] свидетельствует о наличии замкнутых участков поверхности Ферми, огибающих карманы носителей заряда малой площади. По зависимости квантовых осцилляций от направления магнитного поля было доказано [6] существование в YBCO малых электронных и

дырочных карманов одновременно. Несоответствие формы поверхности Ферми в виде замкнутых участков либо ферми-дуг можно было бы снять, предположив, что ARPES «видит» только «яркие» участки границ карманов. Такое деление сегментов поверхности Ферми на яркие и темновые имеет место для дырочных карманов антиферромагнитно коррелированной ферми-жидкости в модели двух хаббардовских зон при дырочном допировании.

Наряду с ARPES, сканирующая туннельная микроскопия (STM, STS) с фурье-анализом локальной плотности состояний [7–9] подтверждают наличие щели в антиузельных областях квазиимпульса даже при температурах  $T > T_c$  выше температуры сверхпроводящего (SC) перехода. В частности, STM выявляет наличие двух щелей в плотности состояний. Одна из них возникает при  $T < T_c$  и ассоциируется с конденсацией SC-пар. Другая — псевдощель — сохраняется во всей области  $T_c < T < T^*$  и объясняется в работе [7] образованием связанных пар, являющихся предвестниками куперовских SC-пар, но без фазовой когерентности. Обнаружение методами туннельной микроскопии характерной «октетной» картины интерференции квазичастиц [10–13] при  $T > T_c$ , по мнению авторов работы [7], подтверждает такую интерпретацию.

В альтернативной интерпретации [14] псевдо-

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

щель связывается со спиновыми флуктуациями антиферромагнитного (AF) типа. Полуфеноменологический подход [15, 16] качественно описывает частичную диэлектризацию электронного спектра в результате рассеяния квазичастиц на флуктуациях, усреднение по которым подразумевает пространственную однородность системы. Между тем ряд данных указывает на возможность расслоения фаз на микроуровне, на размерах порядка нескольких постоянных решетки. Примером микронеоднородности являются страйп-фазы — периодические спиновые и зарядовые структуры, обнаруживаемые по несоизмеримым пикам в нейтронном рассеянии [17]. В работах [18, 19] псевдощель и реконструкция поверхности Ферми связывается со страйп-фазами. Моделирование таких структур введением «внешнего» периодического потенциала показало принципиальную возможность карманов как дырочного, так и электронного типов даже для дырочно-допированных моделей [18]. В отличие от двух Хаббардовских зон однородного AF-состояния, периодические структуры с  $n_c$ -центрами в элементарной ячейке характеризуются  $n_c$ -подзонами. Их сечения на уровне Ферми могут генерировать сегменты поверхности Ферми разного типа, в том числе и  $e$ -карманы.

Реальность самоорганизации периодических структур с  $e$ -карманами была проверена в работе [19] в приближении среднего поля на двумерной модели Хаббарда. В этом приближении характеристики структур и «периодического возмущения» определялись самосогласованно. Было показано, что для вертикальных (вдоль Cu–O-связей) страйпов наиболее типична ситуация, когда поверхность Ферми состоит из замкнутого кармана дырочного типа в узельном направлении и сегментов квазиодномерной подзоны состояний, локализованных на доменных стенках. Самая нижняя из незаполненных подзон структуры оказалась близка к уровню Ферми в антиузельных областях. Поэтому любое дополнительное возмущение зон, как-то: бислойное расщепление в моделях с двумя близкими  $\text{CuO}_2$ -плоскостями или возмущение, связанное с орторомбичностью, возможно, приведет к появлению  $e$ -карманов вблизи  $k \sim (0, \pi)$ .

Таким образом, часть явлений, наблюдаемых в UD-купратах в PG-области температур  $T_c < T < T^*$ , по-видимому, могла бы быть объяснена формированием страйп-структур без привлечения гипотезы об образовании некогерентных куперовских пар [7] или гипотезы о DDW-порядке типа орбитального антиферромагнетика [20]. Это относится к электронным карманам в YBCO, к различию свойств

квазичастиц на узельных и антиузельных сегментах поверхности Ферми в  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  (LSCO) [21], к наблюдению сегментов открытой поверхности Ферми в соединении LSCO, допированном атомами Nd, в котором хорошо различимы статические страйпы [22, 23]. Остается, однако, непонятным происхождение измеряемой в STM и ARPES псевдощели — щели в плотности состояний и ее анизотропия для Bi-содержащих купратов во всем интервале допирования  $p \leq p_{opt}$  вплоть до оптимального. Такое поведение нельзя объяснить идеальными периодическими структурами. Наблюдаемая привязанность псевдощели к химическому потенциалу при любом допировании в PG-области, казалось бы, однозначно указывает на образование SC-пар в системе при температуре выше  $T_c$ . Но существует и другое возможное объяснение указанных свойств псевдощели.

В настоящей работе на основе MF-расчетов конечного кластера будет показано, что самоорганизующиеся спиновые структуры — состояния типа спинового стекла, но с характерными спектральными свойствами, — также приводят к тому, что положение щели в плотности состояний оказывается привязанным к уровню Ферми. Аналогичная ситуация имеет место в кулоновских стеклах, где самоорганизация зарядов по системе случайно распределенных доноров и акцепторов приводит к щели в плотности состояний на уровне химического потенциала [24, 25].

В связи со сказанным выше представляет интерес более широкий поиск возможных спиновых и зарядовых структур, предположительно определяющих PG-состояние и исследование их свойств. Поиск структур без требования их идеальной периодичности может относиться лишь к кластеру конечных размеров. В настоящей работе для прояснения природы PG-состояния проведено исследование характеристик типичных спиновых и зарядовых структур произвольного вида конечного кластера из  $L \times L$ , ( $L = 30, 32$ ) узлов двумерной модели Хаббарда методом среднего поля (MF).

Если предположить, что каждая из формирующихся спиновых структур кластера конечных размеров отражает локальные свойства бесконечной двумерной модели Хаббарда, тогда проведенные MF-расчеты помогают выяснить локальную симметрию спиновых структур, в частности, возможное нарушение  $C_4$ -симметрии. Постановка вопроса связана с недавними STM-экспериментами с атомным разрешением в пределах одной элементарной ячейки (sub-unit-cell resolution) [26]. Такое разрешение позволило [26] изучать локальную плотность состо-

яний  $\rho(r, \omega)$  как в координатном, так и в импульсном пространстве. Измерение локальной дифференциальной проводимости  $g(r, \omega) = dI(r, V)/dV$  как функции приложенного напряжения  $\omega = eV$  в точках  $r$  нахождения Cu-,  $O_x$ -,  $O_y$ -центров каждой ячейки  $\text{CuO}_2$ -плоскости обнаружило нарушение локальной симметрии электронной структуры. А именно, обнаружена ее локальная нематичность, заключающаяся в изменении  $C_4$ -симметрии на  $C_2$ -симметрию.

В недавних STM-исследованиях UD-купратов [27] были обнаружены векторы  $Q^*$ ,  $Q^{**}$  модуляции локальной плотности состояний, отличные от описываемых октетной моделью векторов модуляции, обязанных квантовой интерференции квазичастиц в сверхпроводящем состоянии (или в области SC-флуктуаций вблизи  $T_c$ ). Новые векторы модуляции не исчезают во всей PG-области температур  $T \leq T^*$ . В работе [27] они связываются с «флуктуирующими» страйпами, т. е. с флуктуациями зарядов и спинов, но не с флуктуациями сверхпроводящего параметра порядка. Мы надеемся, что изучение зарядовых и спиновых структур кластеров поможет хотя бы частично расшифровать понятие флуктуирующих или статических разупорядоченных страйпов.

Проблема поиска произвольного вида MF-структур конечного кластера отличается от проблемы поиска MF-решений периодической структуры фиксированной симметрии по нескольким аспектам.

1. В периодических решениях число независимых параметров порядка (заряды  $\rho_i$  и спины  $S_i$  на узлах и порядки  $\rho_{ij\sigma} = \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$  связей  $\langle ij \rangle$ ) пропорционально числу узлов элементарной ячейки, а с учетом симметрии и того меньше. В кластере число параметров порядка пропорционально числу центров всего кластера и самосогласованное решение не обязано обладать симметрией. При этом необходимо набрать статистику по значительному количеству почти вырожденных по энергии структур.

2. Для конечного кластера уровни линейаризованного гамильтониана дискретны и нет оснований ожидать абсолютной сходимости итерационной процедуры самосогласования. Тем не менее при не слишком малых температурах эта процедура, запускаемая со случайно выбранных начальных некоррелированных значений  $\{\rho_i, S_i\}$ , приводит к весьма устойчивым структурам, близким по энергии и другим характеристикам. Дальнейшее увеличение числа итераций приводит к блужданиям текущих значений параметра порядка с малыми отклонениями их от средних значений при неизменной структуре. Устойчивость структур позволяет доверять результатам

расчета спектральных и других свойств коррелированной системы несмотря на остаточную «рассогласованность» расчета (неполную сходимость процедуры самосогласования).

3. Еще одно упрощение модели: ограничиваемся структурами со средними спинами, направленными вдоль одной оси. Это ограничение можно оправдать в свете представлений о том, что в реальных UD-купратах существует медленноменяющаяся (в пространстве/времени) локальная ориентация спинов коррелированной системы.

## 2. МЕТОД СРЕДНЕГО ПОЛЯ В ПРИМЕНЕНИИ К КЛАСТЕРУ СО СПИНОВОЙ СТРУКТУРОЙ

Рассмотрим двумерный кластер из  $N = L_x \times L_y$  узлов квадратной решетки с гамильтонианом Хаббарда

$$\hat{H} = \hat{T} + U \sum_i \hat{\rho}_{i\uparrow} \hat{\rho}_{i\downarrow}, \quad \hat{T} = \sum_{\sigma, \langle ij \rangle} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}. \quad (1)$$

Здесь  $\hat{\rho}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ ,  $U$  — одноцентровое отталкивание и  $t_{ij}$  — стандартные параметры перескока  $t, t', t''$  для связей с длиной  $a, \sqrt{2}a, 2a$  ( $a$  — постоянная решетки). Большая часть расчетов выполнена для модели с периодическими граничными условиями. В этом случае элементы матрицы отличны от нуля не только при  $|i_x - j_x| = 1, 2$ , но и при  $\|i_x - j_x\| - L_x = 1, 2$  (аналогично для  $y$ -компонент). Другой тип граничных условий отвечал обращению в нуль всех взаимодействий  $t_{ij}$  с номерами узлов вне кластера.

Метод среднего поля с ограничением  $\langle \mathbf{S} \rangle = S_z \mathbf{e}_z$  предполагает, что матрица плотности нормального состояния кластера определяется заселением одноэлектронных состояний, являющихся собственными состояниями линейаризованного гамильтониана

$$\begin{aligned} \hat{H}_{Lin} &= \hat{T} + U \sum_i [\hat{\rho}_{i1} \rho_{i2} + \hat{\rho}_{i2} \rho_{i1} - \rho_{i1} \rho_{i2}] = \\ &= \sum_{\sigma ij} h_{ij}(\sigma) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{const}. \quad (2) \end{aligned}$$

Параметрами порядка служат плотности  $\rho_{i\sigma}$  на узлах с проекцией спина  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  (или  $\sigma = 1, 2$ ) и  $\hat{\rho}_{i\sigma}$  — соответствующие операторы.

Стандартный способ нахождения самосогласованного решения состоит из четырех этапов: 1) выбор начальных значений  $\rho_{i\sigma}$  и подстановка их в  $\hat{H}_{Lin}$ ; 2) диагонализация линейаризованного гамильтониана, собственные энергии и собственные векторы которого имеют вид

$$\chi_{\lambda\sigma}^\dagger = c_{i\sigma}^\dagger W_{i\lambda}(\sigma), \quad h_{ij}(\sigma)W_{j\lambda}(\sigma) = W_{i\lambda}E_{\lambda\sigma}, \quad (3)$$

3) вычисление новых значений параметров порядка  $\rho_{i\sigma}$  и порядков связей  $\rho_{ij\sigma}$  по формулам

$$\begin{aligned} \rho_{i\sigma} &= \sum_{\lambda} |W_{i\lambda}(\sigma)|^2 f(E_{\lambda\sigma}), \\ \rho_{ij\sigma} &= \sum_{\lambda} W_{i\lambda}(\sigma)W_{j\lambda}(\sigma)f(E_{\lambda\sigma}), \end{aligned} \quad (4)$$

4) вычисление величины рассогласования новых и старых параметров порядка —

$$\Delta = \left\{ \frac{1}{2N} \sum_{i\sigma} [\rho_{i\sigma} - \rho_{i\sigma}^{(0)}]^2 \right\}^{1/2}, \quad (5)$$

где  $f(E)$  — функция Ферми. При  $\Delta$ , большем определенной величины, повторение расчета с использованием новых значений параметра порядка  $\rho_{i\sigma}$  в качестве начальных в линеаризованном гамильтониане (2).

Заметим, что никаких доказательств сходимости описанной итерационной процедуры не существует, тем более для конечного кластера с дискретным набором собственных значений. Наблюдения за счетом показывают, что при малых температурах,  $kT \lesssim 0.01t$ , величина  $\Delta(\nu)$  как функция номера итерации  $\nu$  после начального периода уменьшения с дальнейшим ростом  $\nu$  начинает расти. Обычно это является признаком неустойчивости предполагаемого состояния одноэлектронного приближения.

В рассчитываемых моделях двумерных кластеров из  $L \times L$  центров ( $L = 30, 32$ ) существует область температур  $kT \gtrsim 0.02t$ , в которой имеется ограниченная сходимость. Результаты ее можно интерпретировать как сходимость к одной из многих возможных устойчивых (метастабильных) структур с относительно близкими характеристиками: энергией, химическим потенциалом, спектральными характеристиками. Остается усреднить результаты, набирая статистику по разным структурам, полученным из случайно выбираемых значений параметров порядка для первого шага итерационной процедуры. Для этого вклады от каждой структуры берутся с весовым множителем  $\exp[-\beta(\langle H \rangle - \mu N)]$ ,  $\beta = 1/kT$ . Средняя для данной структуры энергия  $\langle H \rangle$  может быть представлена в двух видах:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle^I &= \sum_{ij\sigma} t_{ij} W_{i\lambda}(\sigma)W_{j\lambda}(\sigma) f_{\lambda\sigma} + U \sum_i \rho_{i1}\rho_{i2}, \\ \langle H \rangle^{II} &= \sum_{\lambda\sigma} E_{\lambda\sigma} f_{\lambda\sigma} - U \sum_i \rho_{i1}\rho_{i2}. \end{aligned} \quad (6)$$

Все величины определены в формулах (3), (4). Разность двух значений  $\langle H \rangle^I - \langle H \rangle^{II}$  равна нулю при полной сходимости итерационной процедуры, так что малость этой разности служит еще одним критерием самосогласованности MF-решения.

Начальные значения заселенностей узлов  $\rho_{i\sigma}$  для старта итерационной процедуры характеризуются случайным некоррелированным разбросом спинов на узлах при постоянной плотности заряда

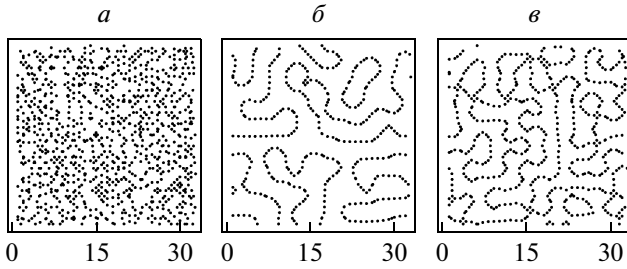
$$\begin{aligned} \rho_{i1} + \rho_{i2} &= (1 - p), \\ S_{zi} &= (\rho_{i1} - \rho_{i2})/2 = \alpha(1 - p)(x_i - 0.5) \end{aligned} \quad (7)$$

при данном дырочном допировании  $p$ . Здесь  $\{x_i\}$  — набор случайных чисел в интервале  $(0, 1)$ , константа  $\alpha \sim 0.4$  оценена из величины локального спина в однородном AF-решении. Испытывался также способ задания начальных значений параметра порядка со случайными флуктуациями как зарядов, так и спинов на узлах. С точностью до статистических погрешностей результат не зависел ни от способа задания начальных значений параметра порядка, ни от  $\alpha$ .

При разработке программы используем прежний опыт [19] поиска MF-решений для периодических страйпов с относительно малым числом параметров порядка. В работе [19] сходимости итерационной процедуры удавалось добиться только в том случае, когда значения параметра порядка при  $\nu$ -м шаге итераций вычислялись при фиксированном числе частиц, но не при фиксированном химическом потенциале  $\mu$ . В настоящей работе на каждом шаге итераций также ищутся решения для  $H_{Lin}$  с постоянным числом частиц  $N_\sigma = 0.5(1 - p)N_c$  для каждой проекции спина ( $p$ -допирование,  $N_c = L_x \times L_y$  — число центров кластера).

### 3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Наиболее наглядно эволюция состояния системы и самоорганизация спиновых структур в ходе итераций демонстрируется на рис. 1. Точками на нем отмечены только «ферромагнитные» связи (F-связи), т. е. те связи  $\langle i, j \rangle$  соседних узлов, средние спины которых однонаправленны:  $S_{zi}S_{zj} \geq 0$ . Более точно, координаты точек на рис. 1 рассчитывались по формуле  $(x, y) = (i_x, i_y) + \mathbf{e}S_{zi}/S_{zj}$ , где вектор  $\mathbf{e} = \mathbf{j} - \mathbf{i}$  равен  $(1, 0)$  или  $(0, 1)$  для связей соответственно вдоль осей  $x$  или  $y$ . Если в начальном распределении спинов, генерированном с помощью уравнения (7), нет корреляций в положении F-связей, то при числе итераций  $\nu = 50$  F-связи объединяются в одномерные



**Рис. 1.** а, б) Представление распределения спинов для начального шага ( $\nu = 0$ ) итерационной процедуры и после  $\nu = 50$  шагов для квадратного кластера из  $32 \times 32$  узлов для одной из структур с периодическими граничными условиями при  $p = 0.125$ . Точки отмечают координаты «ферромагнитных» связей  $\langle ij \rangle$  соседних узлов, для которых  $S_{zi}S_{zj} \geq 0$ . Форма доменов после 100-го шага практически совпадает с тем же при  $\nu = 50$ . в) Образ одной из структур при  $p = 0.2$

объекты — линии, представляющие собой доменные стенки, разделяющие АФ-домены.

Следующие итерации ( $\nu = 50-100$ ) несколько уменьшают величину рассогласования  $\Delta(\nu)$  при практически неизменной структуре доменных стенок. Дальнейшие итерации не меняют величину  $\Delta$ , которая остается почти неизменной на уровне  $\Delta \sim 0.5 \cdot 10^{-3}$ . Большей точности добиться не удастся, что, возможно, связано с дискретностью спектра линеаризованного гамильтониана конечного кластера. В частности, при малых температурах  $kT \lesssim 0.01t$  процедура расходится:  $\Delta(\nu)$  растет с  $\nu$  при  $\nu > 20$ . Однако при  $kT \gtrsim 0.02t$  стабильность результирующей спиновой структуры, малость величины  $\Delta(\nu)$ , независимость от  $\nu$  многих физических величин позволяют считать, что при  $\nu \sim 50-100$  результат является приближенно самосогласованным и полученное состояние отражает свойства одной из метастабильных структур кластера. Усреднение любой физической величины  $\hat{A}$  по таким структурам  $\eta$  состоит в суммировании результатов для конкретных структур с соответствующим весовым множителем

$$\langle A \rangle = \sum_{\eta} \langle A \rangle_{\eta} \exp[-\beta(\langle H \rangle_{\eta} - \mu_{\eta} N)] / Z, \quad (8)$$

где  $Z = \sum_{\eta} \exp[-\beta(\langle H \rangle_{\eta} - \mu_{\eta} N)]$ .

Для кластера тетрагональной симметрии ( $L_x = L_y = L$ ) ожидаем, что усредненные по различным генерируемым структурам характеристики кластера сохраняют симметрию  $C_4$ . Это не относится, однако, к каждой конкретной реализуемой структуре.

На рис. 1б,в даны образы двух из наборов структур, возникающих соответственно при допировании  $p = 0.125$  и  $p = 0.2$ . Размеры антиферромагнитных доменов уменьшаются с ростом допирования.

При кажущейся неупорядоченности возникающей аперриодической структуры она обладает характерными спектральными свойствами. В этом можно убедиться при расчете структурных факторов системы  $Z(q), R(q)$ . Они характеризуют распределения квадратов фурье-компонент соответственно спина и заряда:

$$\begin{aligned} Z(q) &= \frac{1}{N_c} \sum_{j,j'} S_{zj} S_{zj'} e^{iq(j-j')}, \\ R(q) &= \frac{1}{N_c} \sum_{j,j'} (n_j - \bar{n})(n_{j'} - \bar{n}) e^{iq(j-j')}. \end{aligned} \quad (9)$$

Если МФ-решения удовлетворяют периодическим граничным условиям, то величины (9) разлагаются в ряды по конечному числу пространственных гармоник  $q = q_m$ :

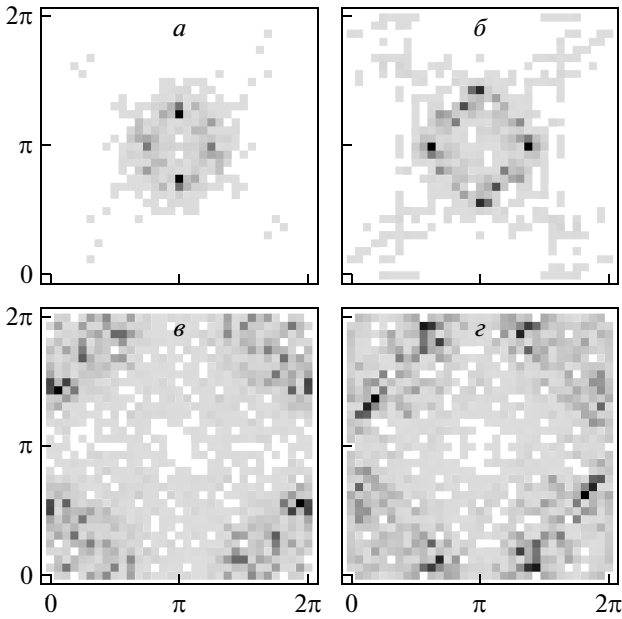
$$Z(q) = \sum_m \delta(q - q_m) |S_z(q_m)|^2, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} |S_z(q_m)|^2 &= \left[ \sum_j \cos(q_m j) S_{zj} \right]^2 + \\ &+ \left[ \sum_i \sin(q_m j) S_{zj} \right]^2, \end{aligned} \quad (11)$$

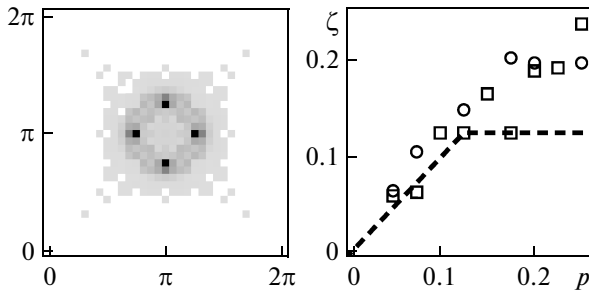
$$q_m = \frac{2\pi}{L} ((m_x - 1), (m_y - 1)), \quad 1 \leq m_{x(y)} \leq L. \quad (12)$$

Аналогичные выражения имеют место для квадратов фурье-компонент заряда  $R(q)$ .

Для структуры, возникающей из конкретной реализации случайных начальных данных, распределения  $Z(q), R(q)$  не обладают симметрией по отношению к каждой из операций отражения ( $q_x \rightarrow -q_x$  или  $q_y \rightarrow -q_y$  или  $q_x \leftrightarrow q_y$ ). На рис. 2 представлены карты квадратов амплитуд фурье-компонент  $S_z(q_m)$  и  $R(q_m)$  спина и заряда для структур, представленных на рис. 1б,в. Максимумы  $|S_z(q_m)|^2$  на сетке квазиимпульсов (12) имеют место при «несоизмеримых» значениях  $q_m^{max}$  в окрестности антиферромагнитного вектора  $Q = (\pi, \pi)$ . Сдвиг вектора  $q_m^{max}$  относительно  $Q$  определяет параметр несоизмеримости  $\zeta = |q_m^{max} - Q|/2\pi$ . Значение  $\bar{\zeta}(p)$  для усредненного по структурам спинового формфактора  $Z(q_m)$  является монотонной функцией допирования,  $\bar{\zeta} = \bar{\zeta}(p)$ . Уменьшение размеров антиферромагнитных доменов с допированием отвечает росту



**Рис. 2.** Карты плотности для структурных факторов спина  $Z(q)$  (*a, б*) и заряда  $R(q)$  (*в, г*), определенных уравнениями (8), на плоскости  $0 < q_x, q_y < 2\pi$ . Карты *a, в* относятся к одной из структур, формирующихся при  $p = 0.125$ , а карты *б, г* — при  $p = 0.2$



**Рис. 3.** Слева — симметризованная и усредненная по структурам карта плотности структурного фактора спина  $Z(q)$ , определенного уравнениями (8) на плоскости  $0 < q_x, q_y < 2\pi$  при  $p = 0.125$ . Справа — зависимость от допирования параметра несоизмеримости  $\zeta(p) = |q_{max} - (\pi, \pi)|/2\pi$ , характеризующего положение максимумов  $Z(q)$  в окрестности точки  $Q = (\pi, \pi)$ . Символы в виде квадрата и круга относятся соответственно к кластерам  $L \times L$  с  $L = 32, 30$

$\bar{\zeta}(p)$ . На рис. 3 представлены карта усредненного по структурам и симметризованного спинового фактора  $Z(q)$  для  $p = 0.225$  и зависимости  $\zeta(p)$  для кластеров с  $L = 30, 32$ . Там же схематически дана экспериментальная зависимость параметра несо-

измеримости  $\zeta(p)$ , отражающая положения пиков в нейтронном рассеянии при  $q = (2\pi/a)(1/2, 1/2 \pm \zeta)$ ,  $(2\pi/a)(1/2 \pm \zeta, 1/2)$  [28]. Заметим, что на языке страйпов наблюдаемый при  $p > 0.125$  период модуляции спина отвечает «соизмеримому» эффективному расстоянию  $d = 4a$  ( $a$  — постоянная решетки) между доменными стенками. В отличие от этого кластерные расчеты  $\zeta(p)$  дают меньшие значения для эффективного  $d$  при  $0.125 \leq p \leq 0.25$ . Возможно, наблюдаемая в эксперименте стабилизация «соизмеримых» структур обязана электрон-фононному взаимодействию.

В отличие от спина гармоники в распределении заряда в формирующихся структурах имеют максимальные амплитуды в точках  $q_m$ , расположенных вокруг точки  $\Gamma(0, 0)$  и эквивалентных ей точек. Если предполагать, что каждая из существенных структур кластера отражает локальные свойства неограниченной двумерной модели Хаббарда, то можно говорить о локальной нематичности электронной структуры модели. Это находится в соответствии с наблюдаемой в STM локальной нематичностью  $Vi$ -содержащих купратов. Лишь величины  $Z(q), R(q)$ , усредненные по многим реализуемым структурам, обладают тетрагональной симметрией. Это позволяет улучшить статистику усреднения за счет того, что к решениям каждой из спиновых структур добавляем решения для симметрично отраженных (или повернутых) структур. Предварительно проверялось совпадение энергий и других характеристик таких вырожденных структур. Что касается положения  $q_r^{max}$  максимума  $R(q)$  среди гармоник заряда, то ее зависимость от допирования приблизительно удовлетворяет ожидаемому соотношению

$$q_r^{max} \sim \frac{2\pi}{a} 2\zeta(p).$$

Такое соотношение между периодами модуляции спина и заряда характерно для периодических страйпов.

При введении в гамильтониан или в форму кластера орторомбических искажений происходит вытягивание AF-доменов вдоль одного из двух направлений. Например, если взять различные интегралы перескока  $t_{x(y)} = (1 \pm 0.05)t$  вдоль  $x$ - и  $y$ -связей соседних атомов, то происходит выстраивание доменных стенок вдоль направления  $y$  с меньшим  $t_y$  (см. рис. 4). Соответственно, явно нематический характер имеет и распределение гармоник  $Z(q_m)$  на сетке квазиимпульсов (12).

Таким образом, даже в отсутствие строго периодических страйпов фурье-компоненты заряда и спи-

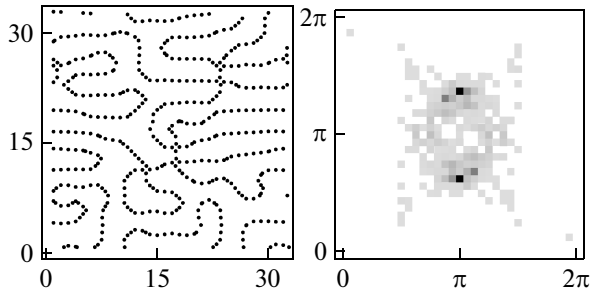


Рис. 4. Система доменных стенок и карта плотности спинового фактора  $Z(q)$  для одной из структур модели с орторомбическим искажением со значениями параметров перескока  $t_x = 1.05t$ ,  $t_y = 0.95t$  для  $x$ - и  $y$ -связей модели при  $p = 0.2$

на имеют пики в областях  $q$ , характерных для периодических страйп-структур. Хотя в нашем подходе спиновые структуры и статичны, их можно назвать неупорядоченными флуктуирующими в пространстве страйпами по поведению их структурных факторов  $Z(q)$ ,  $R(q)$  в импульсном пространстве.

Другая важная характеристика — плотность состояний  $DOS(\omega)$ . Для кластера с дискретным набором одноэлектронных уровней  $\{E_{\lambda\sigma}\}$ , характерных для определенной спиновой структуры  $\eta$ ,  $DOS(\omega)$  рассчитывалась по формуле

$$DOS(\omega)^{(\eta)} = \sum_{\lambda\sigma} \tilde{\delta}(E_{\lambda\sigma} - \mu - \omega), \quad (13)$$

$$\tilde{\delta}(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{x^2 + \gamma^2}.$$

Здесь  $\tilde{\delta}$  — уширенная  $\delta$ -функция, для которой использовалась лоренцевская форма с параметром  $\gamma = 0.01t$ . Усреднение по структурам проводилось согласно формуле (8).

На рис. 5 приведены типичные зависимости  $DOS(\omega)$  вблизи уровня Ферми для допирования  $p = 0.125, 0.2$ . Знаменательно то, что спиновые структуры самоорганизуются таким образом, что щель в плотности состояний возникает именно на уровне Ферми во всей области допирования  $0.05 \leq p \leq 0.3$ , хотя сам уровень Ферми существенно меняется с допированием. Это свойство является отличительной чертой псевдощели в  $Vi$ -содержащих купратах. Явление подобно образованию щели в кулоновских стеклах — полупроводниках, где распределение зарядов по случайно расположенным донорам и акцепторам организуется так, что щель в  $DOS(\omega)$  также возникает именно на уровне Ферми [24, 25]. Естественно ассоциировать полученную

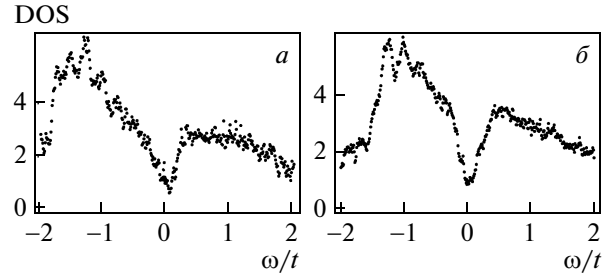


Рис. 5. Усредненная по структурам плотность состояний  $DOS(\omega)$  для энергий в окрестности уровня Ферми  $|\omega| = |E_\lambda - \mu| \leq 2t$  при  $p = 0.125$  (а) и  $p = 0.2$  (б),  $DOS$  вычислялась по формуле (13) с параметром уширения  $\gamma = 0.01t$

щель в  $DOS(\omega)$  с псевдощелью. Важно, что при фиксированном допировании разброс  $\Delta\mu$  химического потенциала среди существенных структур (для которых  $|\langle H \rangle - \langle H \rangle_{min}| \leq kT$ ) оказывается меньше, чем ширина псевдощели. Поэтому усреднение по структурам не замазывает псевдощели. Таким образом, привязанность щели к химическому потенциалу независимо от допирования является не только свойством сверхпроводящего состояния, но может иметь место и в нормальном состоянии спиновых стекол, в котором распределение спинов и зарядов подстраивается так, чтобы обеспечить щель именно на уровне Ферми.

Отметим, что осцилляции в зависимости  $DOS(\omega)$  с амплитудой, зависящей от уширения  $\gamma$ , связаны с дискретностью уровней и их кластеризацией в системе конечного размера ( $L \times L$  узлов). Убеждает в этом сравнение  $DOS(\omega)$  конечного кластера и бесконечной плоскости в случае невзаимодействующих электронов при  $U = 0$ . Тогда плотности зарядов на узлах не зависят от спинов и положения узла, однако дискретность уровней с периодическими граничными условиями определяют немонотонность  $DOS(\omega)$  конечной системы (рис. 5) в отличие от бесконечной. Но в отсутствие взаимодействия не происходит формирования спиновых структур, и псевдощель на уровне Ферми отсутствует.

Образование спиновых структур влияет и на спектр одноэлектронных возбуждений. В MF-приближении соответствующая спектральная функция  $A(k, \omega)$ , связанная с измеряемой в ARPES интенсивностью фотоэмиссии  $I(k, \omega)$ , вычисляется по формуле

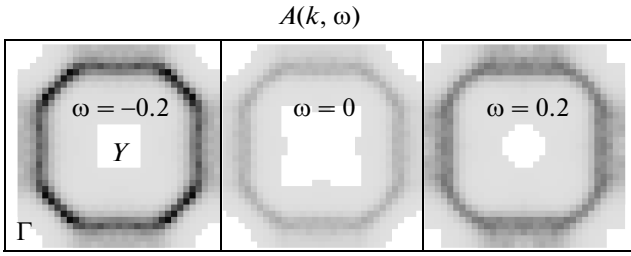


Рис. 6. Карты спектральной плотности  $A(k, \omega)$  на плоскости  $0 < k_x, k_y < 2\pi$  для  $\omega/t = -0.2, 0, 0.2$  при  $p = 0.2$ . Расчет выполнен с параметром  $\gamma = 0.01t$  лоренцевского уширения  $\delta$ -функции в формуле (14). Амплитуды  $A(k, \omega)$  даны в едином масштабе для всех значений  $\omega$ . Средняя карта с  $\omega = 0$  визуализирует эффективную поверхность Ферми, огибающую центр панели  $Y(\pi, \pi)$

$$A(k, \omega) = \sum_{\lambda\sigma} |\langle c_{k\sigma} | \chi_{\lambda\sigma}^\dagger \rangle|^2 \tilde{\delta}(E_{\lambda\sigma} - \mu - \omega), \quad (14)$$

$$I(k, \omega) = A(k, \omega) f(\omega).$$

Здесь  $f(\omega)$  — функция Ферми и

$$|\langle c_{k\sigma} | \chi_{\lambda\sigma}^\dagger \rangle|^2 = \sum_{i,j} W_{i\lambda}(\sigma) W_{j\lambda}(\sigma) e^{ik(i-j)}. \quad (15)$$

Усреднение по структурам проводилось согласно формуле (8). Как и структурные факторы  $Z(q), R(q)$  спина и заряда, спектральная функция для MF-решений конечного кластера с периодическими граничными условиями разлагается в ряды Фурье по набору пространственных гармоник (12). Функция  $A(k, \omega)$ , рассчитанная для конкретной спиновой структуры, демонстрирует нарушение  $C_4$ -симметрии, что можно соотнести с локально нематическим спиновым порядком бесконечной двумерной системы. Усреднение по структурам восстанавливает  $C_4$ -симметрию  $A(k, \omega)$ . На рис. 6 приведены карты усредненной спектральной плотности  $A(k, \omega)$  на плоскости  $k = (k_x, k_y)$  ( $0 \leq k_{x(y)} \leq 2\pi$ ) для  $\omega/t = -0.2, 0, 0.2$ . Образы  $A(k, \omega)$  для всех трех значений  $\omega$  даны в единой (не логарифмической) шкале, в которой черный цвет отвечает максимальному значению  $A(k, \omega)$  среди всех  $k, \omega$ . Средняя панель для  $\omega = 0$  визуализирует поверхность Ферми, которая состоит из сегментов («ферми-дуг») в узельных направлениях. Малая амплитуда  $A(k, \omega = 0)$  в сравнении с  $A(k, \omega)$  при  $\omega \neq 0$  отвечает малой плотности состояний в центре псевдощели. Различная яркость карт  $A(k, \omega)$  с  $\omega > 0$  и  $\omega < 0$  связана с асимметрией DOS( $\omega$ ), обязанной дисперсии исходной зоны  $\epsilon^0(k)$  с сингулярностью ван Хова при  $\omega < 0$ .

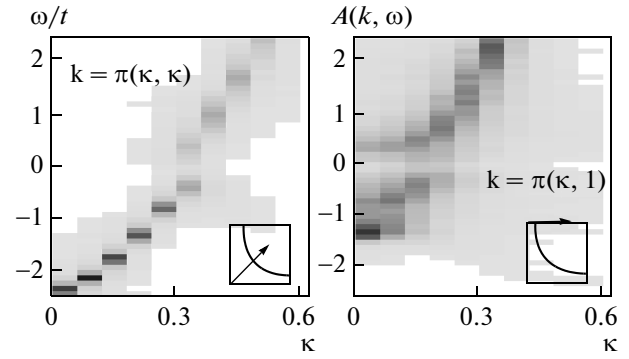


Рис. 7. Карты спектральной плотности  $A(k, \omega)$  на плоскости переменных  $(\kappa, \omega)$ , где  $\kappa$  ( $0 \leq \kappa \leq 0.6$ ) описывает изменение квазиимпульса  $k = \pi(\kappa, \kappa)$  либо  $k = \pi(\kappa, 1)$  вдоль диагонального либо горизонтального разрезов, указанных на вставках стрелками. Масштабы амплитуд на панелях различные: черный цвет отвечает максимальным амплитудам  $A_{max}(k, \omega)$ , отношение которых для двух разрезов равно примерно 3.5. Допирование  $p = 0.2, L = 32$ , параметр уширения  $\gamma = 0.01t$

Расчеты  $A(k, \omega)$  выявляют важное различие электронных возбуждений в узельной и антиузельной областях квазиимпульса. В узельной области максимумы  $A(k, \omega)$  очень узки и распространяются фактически на одно значение  $k$  из набора дискретных импульсов (12). В то же время в антиузельной области ширина  $\Delta k$  функции распределения по импульсам значительно больше. Различие узельных и антиузельных квазичастиц хорошо видно на картах спектральной плотности  $A(k, \omega)$  на плоскости переменных  $(\kappa, \omega)$ , где  $\kappa$  ( $0 < \kappa < 0.6$ ) описывает изменение квазиимпульса  $k = \pi(\kappa, \kappa)$  либо  $k = \pi(\kappa, 1)$  вдоль диагонального либо горизонтального разрезов, соответственно. На рис. 7 видно, что  $A(k, \omega = 0)$  имеет узкие по  $\omega$  максимумы с явной дисперсией  $\omega^{max}(k)$  на диагональном разрезе и широкие максимумы на горизонтальном. Последние оказываются почти бездисперсионными в антиузельной области вблизи  $k = (0, \pi)$ .

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Процедура самосогласования MF-приближения в применении к кластерам двумерной модели Хаббарда приводит случайное некоррелированное распределение спинов к стабильным (метастабильным) структурам спинов и зарядов на узлах кластера. Возникающие структуры антиферромагнитных доменов и доменных стенок отличны от регулярных страйпов. Однако при кажущейся разупоряд-



доченности структур они обладают характерными спектральными свойствами: фурье-компоненты распределений спинов и заряда имеют максимумы при определенных «несоизмеримых» квазиимпульсах, зависящих от допирования аналогично тому, что характерно для регулярных страйпов. При этом каждая из почти вырожденных структур обладает нарушенной  $C_4$ . Это соответствует нематичности локальной плотности состояний, обнаруженной в STM-экспериментах в  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$  [6]. Лишь при усреднении по многим структурам восстанавливается  $C_4$ -симметрия электронных свойств кластера. Существенно, что при любом допировании во всей PG-области плотность состояний системы  $\text{DOS}(\omega)$  имеет резкий минимум, псевдощель, на уровне Ферми даже в отсутствие сверхпроводящих флуктуаций или порядка. Привязанность псевдощели к уровню Ферми аналогична ситуации в кулоновских стеклах — в полупроводниках, где самоорганизация заряда по случайно распределенным донорам и акцепторам приводит к щели в  $\text{DOS}(\omega)$  на уровне Ферми.

Несмотря на ограниченность MF-приближения и существенное влияние конечности и формы кластера на результат, расчеты подтверждают, что псевдощель в нормальном состоянии происходит от спиновых и зарядовых флуктуаций. В данном описании речь идет о возможных локальных структурах, т.е. о статических или очень медленных флуктуациях заряда и спина в пространстве — разупорядоченных страйпах, отличных от статических регулярных страйпов, наблюдаемых в соединениях  $\text{La}_{2-x-y}\text{Sr}_x\text{Nd}_y\text{CuO}_4$  [22, 23].

Автор благодарит С. Я. Уманского, Л. Г. Мамсурову и К. С. Пигальского за поддержку и интерес к работе.

## ЛИТЕРАТУРА

1. T. Timusk and B. Statt, Rep. Progr. Phys. **253**, 1 (1995).
2. A. Kanigel, M. R. Norman, M. Randeria et al., Nature Phys. **2**, 447 (2006).
3. H. B. Yang, J. D. Rameau, P. D. Johnston et al., Nature **456**, 77 (2008).
4. D. LeBoeuf, N. Doiron-Leyraud, J. Levallois et al., Nature **450**, 533 (2007).
5. N. Doiron-Leyraud, C. Proust, D. LeBoeuf et al., Nature **447**, 565 (2007).
6. M. J. Lawler, K. Fujita, Jinhvan Lee et al., Nature **466**, 347 (2010).
7. J. Lee, K. Fujita, A. R. Schmidt et al., Science **325**, 1099 (2009).
8. U. Chatterjee, M. Shi, D. Ai et al., Nature Phys. **6**, 99 (2010).
9. A. Pushp, C. V. Parker, A. N. Pasupathy et al., Science **324**, 1689 (2009).
10. T. Hanaguri, Y. Kohsaka, J. C. Davis et al., Nature Phys. **3**, 865 (2007).
11. J. E. Hoffman, K. McElroy, D. H. Lee et al., Science **297**, 1150 (2002).
12. Y. Kohsaka, C. Taylor, P. Wahl et al., Nature **454**, 1072 (2008).
13. I. M. Vishik, E. A. Nowadnick, W. S. Lee et al., Nature Phys. **5**, 718 (2010).
14. М. В. Садовский, УФН **171**, 539 (2001).
15. J. Schmalian, D. Pines, and B. Stojkovic, Phys. Rev. B **60**, 667 (1999).
16. Э. Э. Кучинский, М. В. Садовский, ЖЭТФ **115**, 1765 (1999).
17. S. A. Kivelson, I. P. Bindlos, E. Fradkin et al., Rev. Mod. Phys. **75**, 1201 (2003).
18. A. J. Millis and M. R. Norman, Phys. Rev. B **76**, 220503 (2007).
19. М. Я. Овчинникова, Письма в ЖЭТФ **88**, 620 (2008).
20. I. Dimov, P. Goswami, X. Jia, and S. Chakravarty, Phys. Rev. B **78**, 134529 (2008).
21. T. Yoshida, X. J. Zhou, D. H. Lu et al., J. Phys.: Condens. Matter **19**, 125209 (2007).
22. T. Noda, H. Eisaki, and S. Uchida, Science **286**, 265 (1999).
23. X. J. Zhou, P. Bogdanov, S. A. Kellar et al., Science **286**, 268 (1999).
24. Б. И. Шкловский, Ф. Л. Эфрос, *Электронные свойства легированных полупроводников*, Наука, Москва (1979).
25. S. A. Bazylo, V. A. Onischouk, and A. Rosengren, Phys. Rev. B **70**, 024201 (2004).
26. S. T. Sebastian, N. Harrison, P. A. Goddard et al., Phys. Rev. B **81**, 214529 (2010).
27. C. V. Parker, P. Aynajian, E. H. da Silva Neto et al., Nature **468**, 677 (2010).
28. S. A. Kivelson, I. P. Bindloss, E. Fradkin et al., Rev. Mod. Phys. **75**, 1201 (2003).