

# ВЛИЯНИЕ ДЫРОЧНОГО ДОПИРОВАНИЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И ПОВЕРХНОСТЬ ФЕРМИ В МОДЕЛИ ХАБДАРДА В РАМКАХ КЛАСТЕРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ С КОНТРОЛИРУЕМЫМ СПЕКТРАЛЬНЫМ ВЕСОМ

*С. В. Николаев<sup>a,b\*</sup>, С. Г. Овчинников<sup>a,c\*\*</sup>*

<sup>a</sup> *Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук  
660036, Красноярск, Россия*

<sup>b</sup> *Омский государственный университет им. Ф. М. Достоевского  
644077, Омск, Россия*

<sup>c</sup> *Сибирский федеральный университет  
660041, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 3 мая 2011 г.

Исследованы концентрационные зависимости зонной структуры, спектрального веса, плотности состояний и поверхности Ферми в парамагнитном состоянии модели Хаббарда в теории возмущений с  $2 \times 2$ -кластерами. Представление  $X$ -операторов Хаббарда позволяет контролировать сохранение спектрального веса при построении теории возмущений. Вычисленная энергия основного состояния находится в хорошем согласии с такими непertурбативными методами, как квантовый метод Монте-Карло, точная диагонализация  $4 \times 4$ -кластера и вариационный метод Монте-Карло. Показано, что внутрищелевые состояния при дырочном допировании расположены вблизи потолка нижней зоны Хаббарда при больших  $U$  и вблизи дна верхней зоны при малых  $U$ . Концентрационная зависимость поверхности Ферми сильно зависит от перескоков на вторые ( $t'$ ) и третьи ( $t''$ ) соседи. При характерных для ВТСП-купратов значениях параметров показано существование трех концентрационных областей с разными поверхностями Ферми. Показано, что уширение спектральной плотности электронов с типичным для современного ARPES энергетическим разрешением приводит к картинке арок с длиной, зависящей от концентрации. Только уменьшение ширины линии на порядок позволит получить из спектральной плотности истинную поверхность Ферми. В законе дисперсии ниже уровня Ферми обнаружены кинки, обусловленные сильными электронными корреляциями.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что высокотемпературные сверхпроводящие купраты относятся к классу материалов с сильными электронными корреляциями (СЭК). За последнее время исследования высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) методами сканирующей туннельной спектроскопии (STS) и фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) выявили ряд характерных особенностей нормальной фазы подобных материалов [1, 2]. Во-первых, это наличие псевдощели в широкой

области допирования [3–6]. Существует несколько взглядов на природу псевдощели, но вопрос до сих пор остается открытым. Второй отличительной чертой подобных материалов является необычное поведение поверхности Ферми (ПФ) с изменением степени допирования. Эксперименты ARPES показывают наличие арочной структуры, связанной с неравномерным распределением спектрального веса фермиевских квазичастиц вдоль поверхности Ферми [7–9]. Результаты теоретических расчетов указывают на наличие кармана в окрестности точки  $(\pi/2, \pi/2)$  в первом квадранте первой зоны Бриллюэна при слабом допировании [10–15]. Специфика поверхности Ферми в области псевдощеле-

\*E-mail: 25sergeyn@mail.ru

\*\*E-mail: sgo@iph.krasn.ru

вого состояния заключается в различной величине спектрального веса электронов на разных участках поверхности [10]. Еще одной экспериментально наблюдаемой особенностью является резкое изменение наклона дисперсионной кривой ниже уровня Ферми (кинк) [7, 16]. Возникновение кинка связывается и с электрон-фононным взаимодействием, и со спин-флуктуационным механизмом, и с чисто электронным вследствие корреляционных эффектов [17, 18].

В связи с попытками понять происхождение высокотемпературной сверхпроводимости при допировании мотт-хаббардовского диэлектрика особый интерес сконцентрирован на исследовании изменений топологии поверхности Ферми от степени допирования. В работе [10] эволюция ферми-поверхности описывается в рамках спин-поляронного подхода, причем величина допирования учитывается через параметр фрустрации в спиновом гамильтониане. Исследование изменения поверхности Ферми в ВТСП-купратах в рамках эффективной  $p-d$ -модели Хаббарда проведено в работе [11]. Выявлена арочная структура ПФ в области слабого допирования. В этой же работе обсуждается вопрос природы кинков на дисперсионной зависимости. Исследование квантовых фазовых переходов в рамках обобщенного метода сильной связи с привлечением расчетов *ab initio* для вычисления параметров модели (GTB+LDA) выполнено в работах [12, 15]. Данный расчет был проведен для LSCO-системы и показал хорошее качественное согласие с экспериментальными данными. В частности, показано существование кармана вблизи точки  $(\pi/2, \pi/2)$  в области слабого допирования, который при переходе через критическую точку  $p_{c1}$  превращается в два кармана вокруг точки  $(\pi, \pi)$ , после перехода через вторую критическую точку  $p_{c2}$  остается только одна большая поверхность вокруг точки  $(\pi, \pi)$ . Похожие результаты получены также в рамках кластерного обобщения теории динамического среднего поля (CDMFT) [14, 19].

В настоящей работе используется широко распространенный в последнее время кластерный подход [20]. Преимуществом данного подхода является непосредственный учет СЭК и ближнего порядка, который играет существенную роль при описании низкоразмерных магнитных систем. Основа метода была заложена достаточно давно и успешно применена при исследовании ВТСП-купратов в работах [21–23]. Схема кластерной теории возмущений содержит два основных этапа построения решения: первый — это выбор кластера с учетом сим-

метрии первоначальной решетки и построение собственных многоэлектронных состояний для данного кластера методом точной диагонализации; второй — это учет межкластерного взаимодействия по теории возмущений. В данной работе в качестве базовой модели используется модель Хаббарда [24], записанная в представлении операторов Хаббарда [25] ( $X$ -представление). Кластер был выбран в форме квадрата  $2 \times 2$  с четырьмя узлами. Такая конфигурация полностью отражает симметрию исходной решетки.  $X$ -представление позволяет достаточно просто перейти от гамильтониана первоначальной решетки к кластерному гамильтониану и получить решение для функции Грина в приближении «Хаббард-I». Как было показано в работе [26],  $X$ -представление позволяет ввести понятие  $f$ -фактора, который определяет меру спектрального веса фермиевской квазичастицы. Контроль этой величины на первых этапах расчета позволяет существенно сократить машинное время вычислений, не внося существенных искажений в конечный результат вычисления.

Определим структуру статьи. В разд. 2 кратко рассматривается кластерная теория возмущений в  $X$ -представлении. Описывается процедура нахождения функций Грина для бесконечной решетки в антиферромагнитном и парамагнитном состояниях. Представлена схема формирования хаббардовских квазичастиц при ненулевой величине допирования. В разд. 3 проводятся тестирование предложенного метода путем вычисления зависимости энергии основного состояния от параметра кулоновского взаимодействия  $U$  и от концентрации и сравнение с другими работами. В разд. 4 описан процесс формирования внутрищелевых состояний и перераспределения спектрального веса между этими состояниями и хаббардовскими подзонами. В разд. 5 представлена эволюция поверхности Ферми от концентрации дырок. В разд. 6 исследуется влияние перескоков между вторыми и третьими ближайшими соседями на перераспределение спектрального веса в законе дисперсии и на поверхности Ферми. В разд. 7 проводятся обсуждение и качественное сравнение полученных результатов с другими экспериментальными и теоретическими работами.

## 2. МЕТОД

В настоящей работе мы ограничились рассмотрением двумерной квадратной решетки. Нет сомнений, что для описания систем с сильными элект-

ронными корреляциями хорошим приближением является модель Хаббарда [24]. Несмотря на свою внешнюю простоту, эта модель, предложенная более 40 лет назад, содержит в себе богатейшую физику и до сих пор остается базовой моделью при рассмотрении большого класса материалов с СЭК. Гамильтониан двумерной однозонной модели Хаббарда имеет вид

$$H = \sum_{i\sigma} \left\{ (\varepsilon - \mu) n_{i\sigma} + \frac{U}{2} n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} \right\} - \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma}, \quad (1)$$

где  $a_{i\sigma}^\dagger$  и  $a_{i\sigma}$  — оператор 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.

Выберем в качестве элементарной ячейки квадратный кластер  $2 \times 2$  и перегруппируем слагаемые в гамильтониане (1) таким образом, чтобы отделить внутривыделенные взаимодействия от межкластерных:

$$H = \sum_f H_0^c(f) + \sum_{f \neq g} H_1^c(f, g), \quad (2)$$

где  $f, g$  — кластерные индексы. Последующая процедура расчета включает в себя вычисление полного набора собственных состояний и собственных векторов гамильтониана  $H_0^c(f)$  методом точной диагонализации, а также построение соответствующих кластерных  $X$ -операторов и переход к гамильтониану  $H$  в  $X$ -представлении. В результате для оператора уничтожения электрона на узле  $i$ , принадлежащего кластеру  $f$ , получаем следующее представление:

$$a_{i\sigma} = \sum_\alpha \gamma_{i\sigma}(\alpha) X_f^\alpha, \quad \gamma_{i\sigma}(\alpha) = \langle n | a_{i\sigma} | m \rangle, \quad (3)$$

означающее, что электрон описывается суперпозицией различных 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 [26]. 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  $m$  — соответственно конечное и начальное состояние кластера,  $f$  — кластерный индекс. Более подробно свойства  $X$ -операторов описаны в работах [25, 27–29]. После преобразований гамильтониан (2) примет вид

$$H = \sum_{fn} \varepsilon_n X_f^{nn} + \sum_{f \neq g} \sum_{\alpha\beta} t_{fg}^{\alpha\beta} X_f^{\dagger\alpha} X_g^\beta, \quad (4)$$

где  $\varepsilon_n$  — энергия кластера в состоянии  $n$ ,  $t_{fg}^{\alpha\beta}$  — межкластерные интегралы перескока.

Учитывая условие однородности, перепишем равенство (4) в терминах обратного пространства:

$$H = \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_n \varepsilon_n X_{\tilde{\mathbf{k}}}^{nn} + \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{\alpha\beta} T_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}) X_{\tilde{\mathbf{k}}}^{\dagger\alpha} X_{\tilde{\mathbf{k}}}^\beta, \quad (5)$$

где  $\tilde{\mathbf{k}}$  — волновой вектор, принимающий значения в редуцированной зоне Бриллюэна. Ниже мы еще вернемся к обсуждению этого шага вычислений.

Воспользовавшись приближением «Хаббард-I» для межкластерных перескоков  $T_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}})$ , можно получить 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 следующем матричном виде:

$$D^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = (D^0(\omega))^{-1} - T(\tilde{\mathbf{k}}), \quad (6)$$

где

$$D_{\alpha\beta}^0(\omega) = \frac{F(\alpha)}{\omega - \Omega(\alpha)} \delta_{\alpha,\beta}, \quad (7)$$

$$\Omega(\alpha) = \varepsilon_m(N+1) - \varepsilon_n(N) - \mu, \quad (8)$$

$$F(\alpha) \equiv F(n, m) = \langle X^{nm} \rangle + \langle X^{mm} \rangle. \quad (9)$$

Здесь  $D^0(\omega)$  — локальная (кластерная) функция Грина,  $F(\alpha)$  — фактор заполнения,  $\mu$  — химический потенциал,  $N$  — число электронов в кластере.

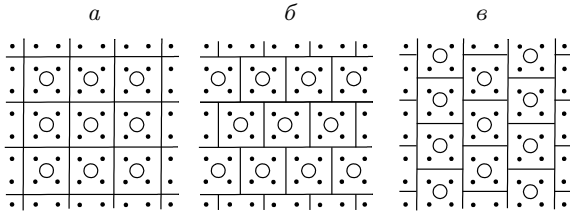
Связь электронной функции Грина  $G_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \langle \langle a_{k\sigma} | a_{k\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega$ , определенной на первоначальной решетке, с функцией Грина в  $X$ -представлении, определенной на сверхрешетке, имеет вид [26, 30]

$$G_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{N_c} \sum_{\alpha\beta} \sum_{i,j=1}^{N_c} \gamma_{i\sigma}(\alpha) \gamma_{j\sigma}^*(\beta) \times D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}, \quad (10)$$

где  $N_c$  — число узлов в кластере (в нашем случае равно 4),  $\mathbf{k}$  — волновой вектор, определенный в исходной зоне Бриллюэна,  $i$  и  $j$  — индексы внутривыделенных 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  $D_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega)$  [20]. Вычисление функции Грина  $G_\sigma(\mathbf{k}, \omega)$  и соответствующей спектральной функции

$$A_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\delta \rightarrow +0} (\text{Im } G_\sigma(\mathbf{k}, \omega + i\delta + \mu)) \quad (11)$$

осуществляется в исходной зоне Бриллюэна.



**Рис. 1.** Возможные варианты покрытия первоначальной квадратной решетки кластерами  $2 \times 2$ . Точками обозначены узлы исходной решетки, кружками — узлы сверхрешетки кластеров. В тексте используются следующие обозначения покрытий:  $K1$  (а),  $K2$  (б),  $K3$  (в)

Полное число состояний в кластере  $2 \times 2$  равно  $4^4 = 256$ . При точном учете всех возможных возбуждений в представлении  $X$ -операторов (3) выполняется правило сумм

$$\langle \{a_{i\sigma}, a_{i\sigma}^\dagger\}_+ \rangle = \sum_{\alpha} |\gamma_{i\sigma}(\alpha)|^2 F(\alpha) = 1. \quad (12)$$

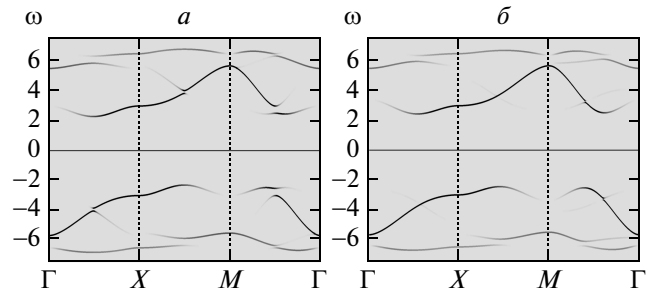
В кластерной теории возмущений [20, 30], как правило, используется процедура Ланцоша для определения основного и ближайших возбужденных состояний гамильтониана  $H_0$ . При этом большая часть высокоэнергетических состояний отбрасывается, что ведет к нарушению правила сумм.

Во всех расчетах, проведенных в настоящей работе, отслеживается величина  $f$ -фактора, который был введен в работе [26] для контроля полного спектрального веса фермиевских квазичастиц:

$$\int d\omega A_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\alpha} |\gamma_{i\sigma}(\alpha)|^2 F(\alpha) \equiv f. \quad (13)$$

При точном расчете  $f = 1$ . Все представленные ниже результаты получены при  $f > 0.995$ . Оказалось, что можно существенно сократить число рассматриваемых уровней энергии, оставив около 30 состояний, 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 более подробно процедуру формирования кластерной решетки (сверхрешетки). Выбор кластера является отдельной задачей и ей уделяется большое значение в кластерных теориях [20, 30], но в настоящей работе мы на этом останавливаться не будем и ограничимся кластером  $2 \times 2$ . Такой выбор кластера дает нам три варианта покрытия исходной квадратной решетки (см. рис. 1). Пер-



**Рис. 2.** Дисперсионные зависимости для недопированного случая  $n_e = 1$  вдоль симметричного направления  $\Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma$  в первом квадранте первой зоны Бриллюэна (а — при варианте покрытия  $K1$ , б — с применением методики усреднения по двум конфигурациям  $K2$  и  $K3$ ). Здесь использованы обозначения  $\Gamma = (0, 0)$ ,  $X = (\pi, 0)$ ,  $M = (\pi, \pi)$

вый вариант  $K1$  (рис. 1а) является наиболее очевидным вследствие совпадения точечной группы симметрии с исходной решеткой и является наиболее распространенным. Но два других варианта  $K2$  и  $K3$  (рис. 1б,в) также могут быть использованы при построении сверхрешетки. Вариант  $K2$  получается из  $K1$  смещением соседних по оси  $y$  цепочек кластеров на вектор элементарной трансляции вдоль оси  $x$  исходной решетки, а вариант  $K3$  — при смещении вдоль оси  $y$ , причем видно, что точечная группа симметрии последних конфигураций не совпадает с исходной решеткой. В данном случае возможны парамагнитное (пространственно-однородное) и антиферромагнитное (с редуцированной зоной Бриллюэна) состояния. Покрытие  $K1$  соответствует антиферромагнитному состоянию [20]. Это видно из закона дисперсии на рис. 2а, где есть расщепление верхней и нижней хаббардовских зон на границе антиферромагнитной зоны Бриллюэна в точке  $(\pi/2, \pi/2)$ . Для построения пространственно-однородного решения мы выбираем линейную суперпозицию покрытий  $K2$  и  $K3$ . Это достигается усреднением матрицы перескоков, определяющей обратную функцию Грина (6):

$$T_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} (T_{\alpha\beta}^{K2}(\mathbf{k}) + T_{\alpha\beta}^{K3}(\mathbf{k})), \quad (14)$$

где  $\mathbf{k}$  — волновой вектор, принимающий значения в исходной зоне Бриллюэна.

Остановимся на данном этапе подробней. Использование любого покрытия ( $K1$ ,  $K2$  или  $K3$ ) позволяет ввести матрицу межкластерных перескоков  $T_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}})$  (см. (5)) как функцию волнового вектора  $\tilde{\mathbf{k}}$ ,

определенного в соответствующей редуцированной зоне Бриллюэна. В силу трансляционной симметрии обратного пространства можно записать

$$T_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}) = T_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}),$$

где  $\mathbf{K}$  — вектор трансляции обратного пространства сверхрешетки (зависит от покрытия). Пусть  $\mathbf{g}_x$ ,  $\mathbf{g}_y$  — элементарные векторы трансляции в обратном пространстве первоначальной решетки. Тогда для покрытия  $K1$ ,  $K2$  и  $K3$  справедливы следующие равенства:

$$T_{\alpha\beta}^{K1}(\tilde{\mathbf{k}}) = T_{\alpha\beta}^{K1}(\tilde{\mathbf{k}} + 0.5n\mathbf{g}_x + 0.5m\mathbf{g}_y), \quad (15)$$

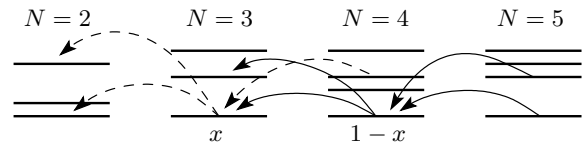
$$T_{\alpha\beta}^{K2}(\tilde{\mathbf{k}}) = T_{\alpha\beta}^{K2}(\tilde{\mathbf{k}} + n\mathbf{g}_x + 0.5m\mathbf{g}_y), \quad (16)$$

$$T_{\alpha\beta}^{K3}(\tilde{\mathbf{k}}) = T_{\alpha\beta}^{K3}(\tilde{\mathbf{k}} + 0.5n\mathbf{g}_x + m\mathbf{g}_y), \quad (17)$$

где  $n$ ,  $m$  — целые числа. Обращаем внимание на то, что зависимость функции Грина  $D_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$  от волнового вектора определяется матрицей перескоков  $T_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}})$  (6), т.е. аналогичные равенства (15)–(17) можно записать и для данной функции Грина. С другой стороны, функция Грина, определяемая выражением (10), должна отвечать симметрии квадратной решетки. Использование покрытия  $K1$  позволяет восстановить симметрию первоначальной квадратной решетки, так как соответствующая матрица перескоков обладает симметрией относительно переносов на векторы  $\mathbf{g}_x$  и  $\mathbf{g}_y$  (коэффициент при целых числах одинаков и равен 0.5). Но такой симметрией не обладают матрицы перескоков в случае покрытий  $K2$  и  $K3$ , и следовательно, использование данных покрытий по отдельности не даст корректного результата.

С учетом равенств (16), (17) и замечаний относительно волновых векторов  $\mathbf{k}$  и  $\tilde{\mathbf{k}}$  после выражения (10) можно в каждой точке  $\mathbf{k}$  исходной зоны Бриллюэна провести процедуру усреднения (14), которая позволит получить новую матрицу перескоков, обладающую трансляционной симметрией обратного пространства первоначальной решетки. Это позволяет рассчитать по формуле (6) (сделав замену  $\tilde{\mathbf{k}} \rightarrow \mathbf{k}$ ) лучшее приближение функции Грина в  $X$ -представлении, которая непосредственно используется в выражении (10).

Отметим, что после подобной процедуры функция Грина (6) определена на исходной зоне Бриллюэна, и функция Грина (10) обладает симметрией квадратной решетки. Действительно, полученный таким образом закон дисперсии (рис. 2б) не содержит щели и соответствует парамагнитному состоянию.

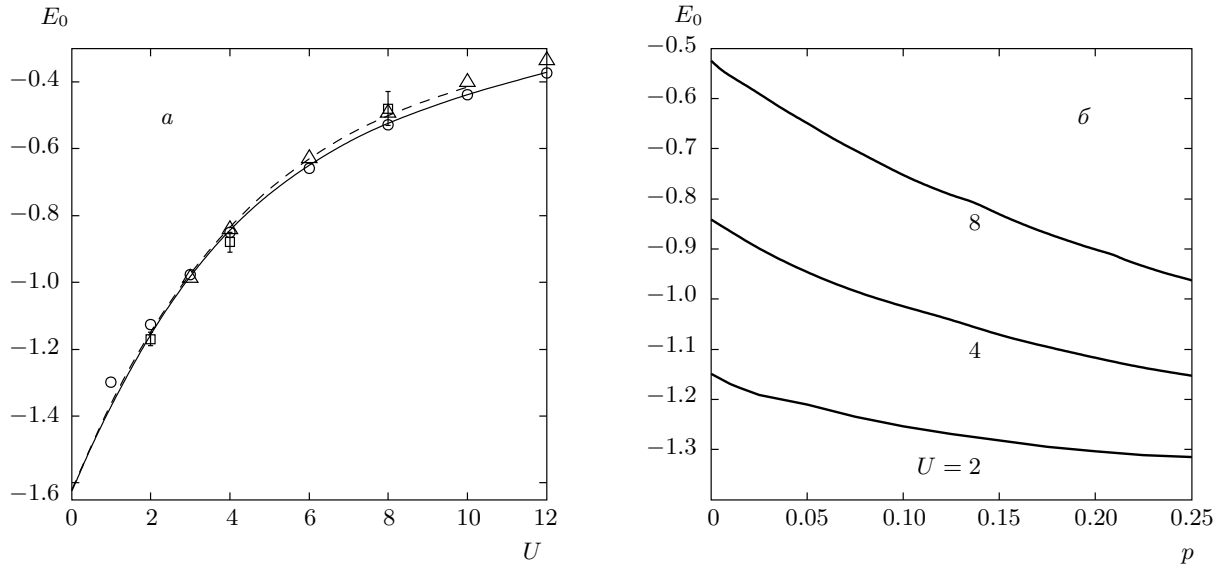


**Рис. 3.** Схема низкоэнергетической части гильбертова пространства для кластера  $2 \times 2$ . Основной терм с  $N = 4$  заполнен с вероятностью  $1 - x$ , а терм с  $N = 3$  — с вероятностью  $x$ . Сплошные стрелки — процессы уничтожения электрона в случае без допирования ( $x = 0$ ), штриховые стрелки — дополнительные переходы, которые необходимо учитывать при допировании ( $x \neq 0$ ),  $N$  — число электронов в кластере

В дальнейшем мы ограничиваемся исследованием именно парамагнитного состояния, в котором имеется ближний антиферромагнитный порядок за счет спиновых корреляций первых и вторых соседей внутри кластера. Отметим, что аналогичная процедура усреднения по граничным условиям часто используется в работах по точной диагонализации конечных кластеров [31, 32].

В принципе, возможно усреднять и более физическую величину, например, спектральную функцию. Однако технически это гораздо сложнее, так как требуется провести весь объем вычислений для каждого покрытия отдельно с разными наборами полюсов, т.е. вычислить функции  $A_{\sigma}^{K1}(\mathbf{k}, \omega)$ ,  $A_{\sigma}^{K2}(\mathbf{k}, \omega)$  и уже потом усреднять. Преимущество нашего подхода заключается в том, что усреднение проводится на начальном этапе расчета. Это позволяет однозначно определить полюса функции Грина и их спектральный вес для каждого значения волнового вектора  $\mathbf{k}$  в первой зоне Бриллюэна и существенно сократить машинное время вычислений.

В настоящей работе исследуются свойства систем с СЭК с различной степенью допирования  $x$ , где  $x$  — концентрация дырок на кластере. Прежде чем переходить к анализу результатов, необходимо пояснить, каким образом величина допирования учитывается в используемой схеме вычисления. Процедура точной диагонализации гамильтониана кластера  $2 \times 2$  дает полный набор собственных значений и собственных векторов, которые определяют гильбертово пространство. На рис. 3 схематично представлена низкоэнергетическая часть этого пространства. При половинном заполнении (без допирования) и  $T = 0$  ненулевой фактор заполнения (9) имеет переходы между основным состоянием в подпространстве с  $N = 4$  и состояниями в подпро-



**Рис. 4.** Зависимость энергии основного состояния  $E_0$  в недопированном случае от параметра  $U$  (а) и от концентрации дырок при  $U/t = 2, 4, 8$  (б). Сплошные кривые — наш расчет, штрихпунктирные кривые — вариационная кластерная теория возмущений (V-CPT) [37], треугольники — вариационный метод Монте-Карло (VMC) [34], кружки — точная диагонализация (ED) кластера  $4 \times 4$  [36], квадраты — квантовый метод Монте-Карло (QMC) [35]

странствах с  $N = 3$  и  $N = 5$  (на рис. 3 отмечены сплошными стрелками). При дырочном (электронном) допировании необходимо учесть возможность заселения основного состояния в подпространстве с  $N = 3$  ( $N = 5$ ). В результате появляются дополнительные переходы с ненулевым фактором заполнения (на рис. 3 отмечены штриховыми стрелками для случая дырочного допирования). Отметим, что мы рассматриваем только одноэлектронные переходы с изменением числа частиц на  $\pm 1$ . Обратим внимание на обозначения, используемые в работе. Поскольку в нашем случае число узлов в кластере равно четырем, допирование на кластер  $x$  и допирование на узел  $p$  связаны равенством  $x = 4p$ .

### 3. ЭНЕРГИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

Хорошей проверкой предложенного в предыдущем разделе метода является сравнение энергии основного состояния, полученной в рамках данного метода, с результатами непертурбативных расчетов.

Рассчитаем энергию основного состояния, ограничиваясь учетом перескоков только между ближайшими соседями. В нашем случае для расчета энергии основного состояния на один узел удобно использовать следующую формулу:

$$E_0 = \frac{1}{2N} \sum_{\sigma \mathbf{k}} \int_{-\infty}^0 d\omega (\varepsilon_{\mathbf{k}} + \omega + \mu) A_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega), \quad (18)$$

вывод которой можно найти, например, в работах [30, 33]. Здесь  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$  — спектр квазичастиц при отсутствии взаимодействия (постоянная решетки принята за единицу),  $\mathbf{k}$  — волновой вектор, принимающий значения в исходной зоне Бриллюэна,  $N$  — число узлов в исходной решетке.

На рис. 4а представлены зависимости энергии основного состояния на один узел, рассчитанные разными методами, в том числе непертурбативными. Видно, что наш результат хорошо согласуется с результатами, полученными методами вариационного и квантового Монте-Карло [34, 35]. Очень хорошее согласие наблюдается с результатами расчета методом точной диагонализации для кластера  $4 \times 4$  [36]. Сравнение нашего расчета с работой [37], где авторы используют кластерную теорию возмущений, дополненную вариационной процедурой, показывает хорошее согласие при малых  $U$  и дает лучший результат в оставшейся области значений.

Дополним исследование энергии основного состояния, проследив ее зависимость от допирования. На рис. 4б представлены графики зависимости энергии основного состояния на узел  $E_0$  от величины допирования для трех значений параметра  $U/t = 2, 4,$

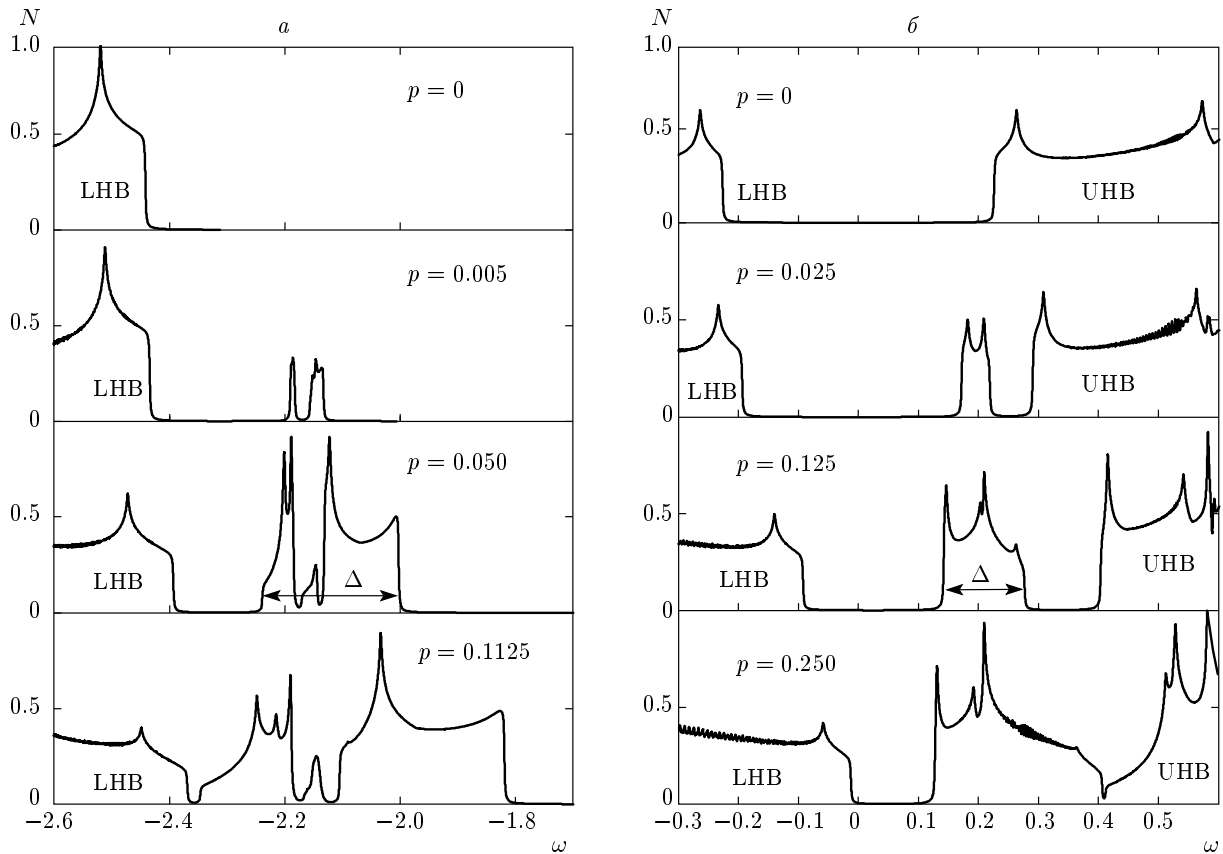


Рис. 5. Плотность состояний вблизи потолка нижней хаббардовской подзоны (LHB), дна верхней хаббардовской подзоны (UHB) и внутрищелевых состояний. Концентрация дырок указана на рисунке. Параметры модели:  $U = 8t$  (а),  $U = 2t$  (б),  $t' = t'' = 0$ ; полуширина лоренциана  $\delta = 0.001t$ ,  $\Delta$  — ширина зоны внутрищелевых состояний

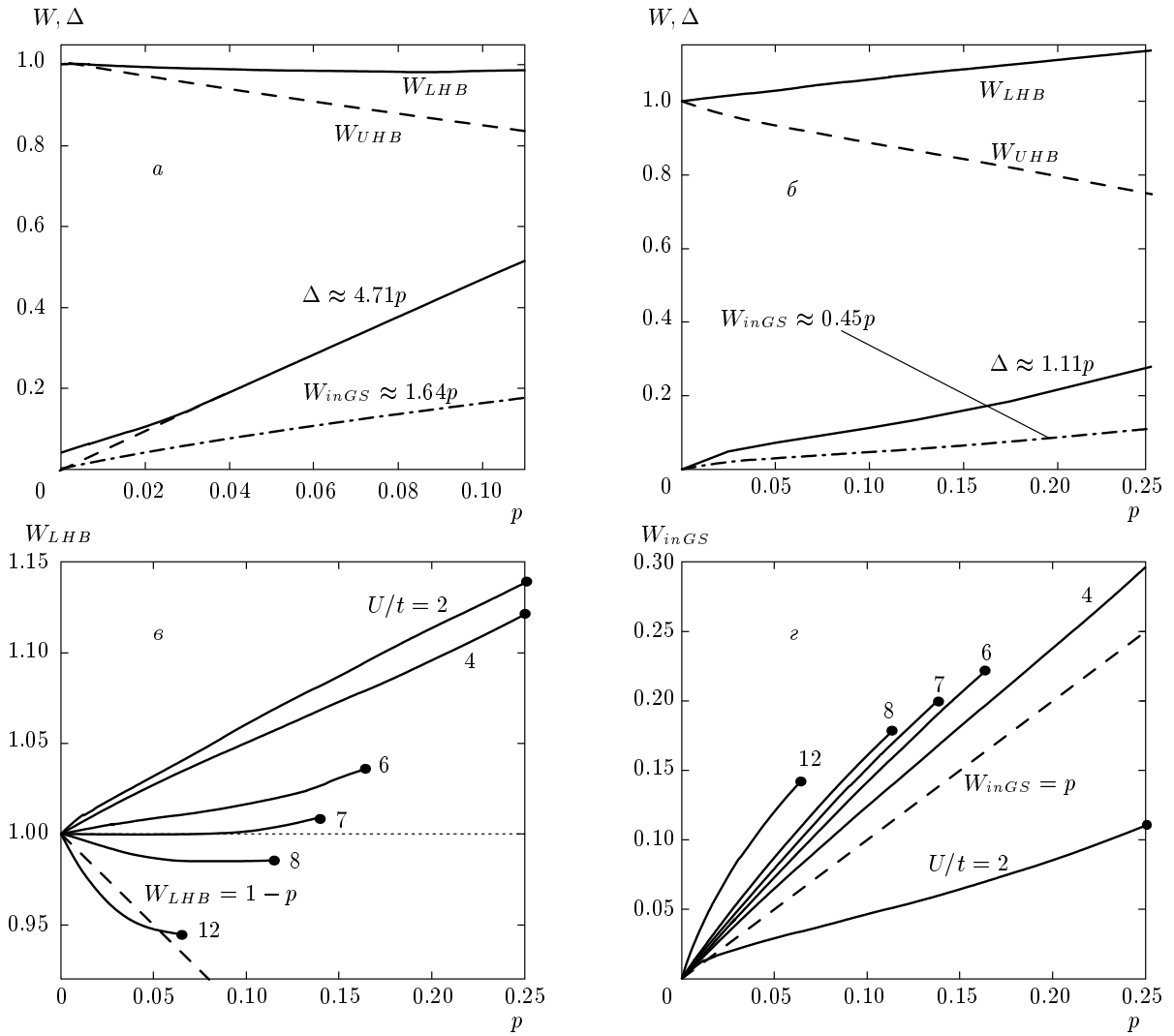
8. Видно, что с увеличением концентрации дырок до величины допирования 25 %  $E_0$  уменьшается при всех  $U$ , причем данное изменение происходит медленнее при меньших значениях  $U$ . При этом величина энергии возрастает с увеличением параметра кулоновского отталкивания.

#### 4. ВНУТРИЩЕЛЕВЫЕ СОСТОЯНИЯ

Исследования систем с СЭК показали, что допирование влияет на энергетическую зону в целом и требует отказаться от представления «жесткой зоны». В частности, было обнаружено, что допирование приводит к образованию внутрищелевых состояний [38]. В данном разделе мы представляем результаты исследования этих состояний в рамках кластерного подхода с учетом перескоков только между ближайшими соседями  $t$ . Ниже все энергии представлены в единицах  $t$  со смещением на величину  $U/2$ .

Информацию о зонной структуре можно получить из исследования плотности состояний. Как

и ожидалось, в пределе нулевого допирования наблюдается расщепление зоны на нижнюю и верхнюю хаббардовские подзоны (соответственно LHB и UHB). При увеличении концентрации дырок происходит перестройка двух подзон с образованием внутрищелевых состояний между ними. На рис. 5 хорошо видно, что незначительная величина концентрации приводит к формированию внутрищелевых состояний вблизи потолка LHB при  $U = 8$ . Такие же состояния появляются и вблизи дна UHB при  $U = 2$ . Дальнейшее увеличение концентрации приводит и к росту спектральной интенсивности, и к уширению зоны этих состояний. Расчеты показали, что при  $U > U_1 \approx 3.5$  внутрищелевые состояния локализованы вблизи потолка LHB, а в диапазоне значений  $U_0 < U < U_1$  — вблизи дна UHB. Здесь мы определили нижний предел  $U$  существования внутрищелевых состояний  $U_0 \approx 1.5$ , меньше которого подобные состояния не наблюдаются. Это объясняется слиянием этих состояний с UHB при любой степени допирования (см. ниже).



**Рис. 6.** Зависимость полного спектрального веса  $W$  нижней хаббардовской подзоны (ЛНВ), верхней хаббардовской подзоны (УНВ), зоны внутрищелевых состояний (inGS) и ширины зоны внутрищелевых состояний  $\Delta$  от величины дырочного допирования. Параметры модели:  $U = 8t$  (а),  $2t$  (б);  $t' = t'' = 0$ . Зависимость полного спектрального веса нижней хаббардовской подзоны  $W_{LHB}$  (в) и зоны внутрищелевых состояний  $W_{inGS}$  (г) от величины допирования  $p$  при различных значениях параметра  $U/t$ . Жирные точки определяют максимальную величину допирования, в которой происходит слияние хаббардовской подзоны с зоной внутрищелевых состояний. Штриховые прямые необходимы при анализе результатов

Зависимость полного спектрального веса внутрищелевой зоны  $W_{inGS}$  от величины дырочного допирования показала монотонный рост при различных значениях кулоновского параметра  $U$  (см. рис. 6). При  $U = 8$  на рис. 6а видно, что спектральный вес ЛНВ  $W_{LHB}$  изменяется незначительно, в то время как спектральный вес УНВ  $W_{UHB}$  уменьшается с ростом допирования в соответствии с изменением  $W_{inGS}$ . Можно сказать, что происходит перетекание

спектрального веса с УНВ в зону внутрищелевых состояний. На рис. 6б представлены аналогичные зависимости для  $U = 2$ . Однако наблюдается существенное отличие зависимости  $W_{LHB}$  от концентрации. В последнем случае полный вес ЛНВ заметно растет с увеличением величины допирования. В целом, происходит перетекание спектрального веса с УНВ в ЛНВ и внутрищелевые состояния, причем на рис. 6а и 6б указаны числовые значения скорости



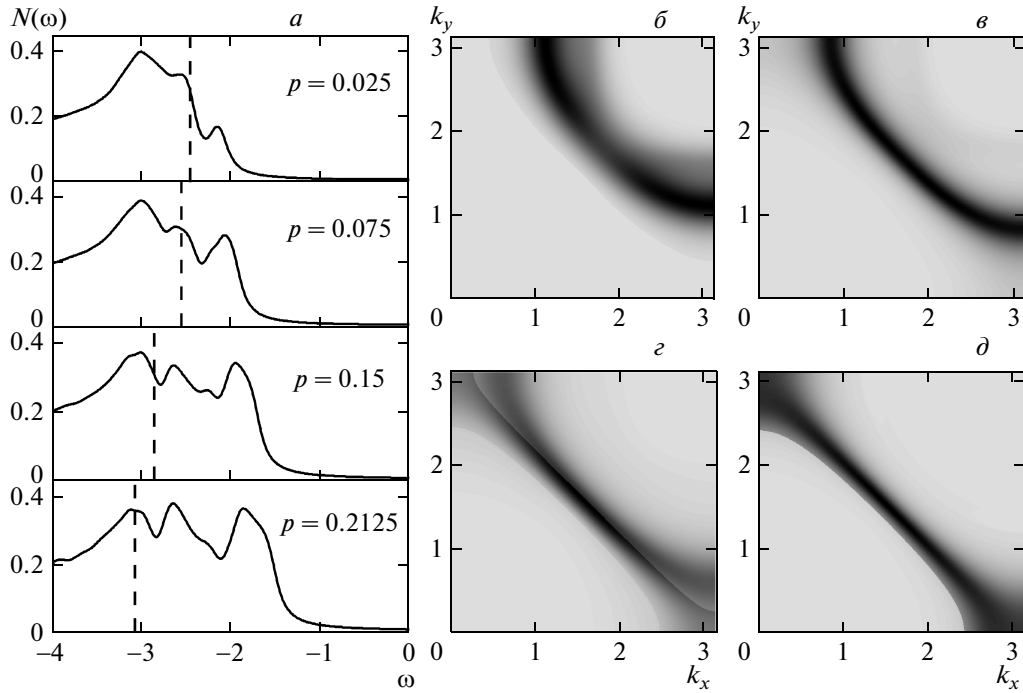
роста полного спектрального веса  $W_{inGS}$  и ширины  $\Delta$  зоны внутрищелевых состояний от концентрации. Значение этих величин при  $U = 8$  больше приблизительно в 4 раза от соответствующих значений при  $U = 2$ . Такое различие сильно влияет на диапазон концентрации, в котором можно строго определить внутрищелевые состояния. В силу этой причины зависимость спектральных весов была отслежена только до значений  $p = 0.11$  при  $U = 8$  и  $p = 0.25$  при  $U = 2$ , так как дальнейшее увеличение концентрации ведет к слиянию внутрищелевых состояний с хаббардовской подзоной и формированию единой зоны. Здесь следует отметить, что в случае  $U = 8$  такое слияние происходит с ЛНВ, а при  $U = 2$  — с УНВ.

Исследование распределения спектрального веса между хаббардовскими подзонами и внутрищелевыми состояниями выявило интересную особенность. На рис. 6 представлены графики функций полного спектрального веса ЛНВ (рис. 6а) и зоны внутрищелевых состояний (рис. 6б) от величины допирования для различных  $U$ . В силу приведенного выше анализа функции  $W_{LHB}(p)$  и  $W_{inGS}(p)$  невозможно определить для всего диапазона концентраций, поэтому представленные графики заканчиваются жирными точками. Видно, что изменение параметра кулоновского отталкивания  $U$  приводит к существенному изменению функции  $W_{LHB}(p)$ . Для  $U > 7$  наблюдается уменьшение  $W_{LHB}$  с увеличением концентрации дырок, а для  $U < 7$  — рост. Особого внимания заслуживает зависимость при  $U = 12$  (рис. 6а). Видно, что большая часть этой кривой расположена под штриховой линией, отвечающей функции  $W_{LHB} = 1 - p$ , определяющей нижнюю величину плотности состояний, необходимую для заселения всех электронов в ЛНВ. Это указывает на то, что в ЛНВ недостаточно состояний для заселения всех электронов системы, поэтому часть электронов будет заселять внутрищелевые состояния. Как показывает расчет, число состояний в зоне внутрищелевых состояний имеет достаточную для этого величину (рис. 6б), что хорошо заметно при сравнении с функцией  $W_{inGS} = p$  (штриховая линия). Таким образом, при  $U = 12$  в области слабого допирования будет наблюдаться попадание уровня Ферми в зону внутрищелевых состояний (пиннинг уровня Ферми). Отметим, что при меньших значениях  $U$  уровень Ферми расположен в ЛНВ во всем диапазоне допирования. Похожая ситуация пиннинга уровня Ферми из-за перераспределения спектрального веса между зонами наблюдается и при использовании покрытия  $K_1$  [39].

## 5. ПЕРЕСТРОЙКА ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ

Перейдем к исследованию поверхности Ферми при различной степени дырочного допирования. В данном разделе мы ограничимся рассмотрением модели Хаббарда со следующими параметрами:  $U = 8t$ ,  $t' = t'' = 0$ . Отметим, что в процессе вычисления осуществлялся контроль величины  $f$ -фактора и во всех представленных ниже результатах выполнено условие  $f > 0.995$ . Экспериментальные работы последних лет выявили две основные особенности поведения ПФ от концентрации в высокотемпературных сверхпроводящих материалах. Это изменение топологии и неоднородное перераспределение спектрального веса квазичастиц по ПФ. Такое поведение, в первую очередь, связывается с наличием ближнего магнитного порядка. Кластерный подход позволяет непосредственно учесть этот порядок и оценить его влияние на спектр квазичастиц.

Прежде чем переходить к анализу полученных результатов, хотелось бы отметить следующее. В силу используемого приближения мы получаем квазичастицы с бесконечным временем жизни, что не дает возможности оценить уширение спектральных линий. Тем не менее уширение появляется при численных расчетах при замене дельта-функции лоренцианом с заданной полушириной. В данном разделе величина полуширины лоренциана  $\delta = 0.1t$ . Такой выбор обусловлен, прежде всего, желанием согласовать теоретические расчеты с экспериментальными данными ARPES, причем при расчете спектрального веса квазичастиц на ПФ учитывался вклад состояний в диапазоне  $\pm 0.2t$  от уровня Ферми, что также связано с методикой проведения эксперимента ARPES. Типичное энергетическое разрешение ARPES-методик составляет 10–45 эВ [7, 40–42], а подгоночное значение параметра перескока для ближайших соседей в методе сильной связи  $t = 0.25$ –0.4 эВ [7, 43, 44]. Поэтому значение параметра уширения обычно варьируется от  $0.02t$  до  $0.15t$  [14, 19]. Например, в работе [7] представлены результаты ARPES с разрешением  $\delta = 0.02$  эВ, а параметр  $t$  подгоняется к величине 0.25 эВ. Отсюда имеем  $\delta = 0.08t$ . В настоящей работе мы используем типичные значения параметра уширения  $\delta$ . При этом очевидно, что истинная ширина линии в ARPES определяется не только разрешением по энергии и волновому вектору, но и динамическими процессами. Их моделирование шириной лоренциана слишком упрощенно и может рассматриваться только как качественное. Поэтому мы не при-



**Рис. 7.** Плотность состояний вблизи потолка нижней хаббардовской подзоны (а) и поверхность Ферми по распределению спектрального веса электронов (б–д). Величина дырочного допирования  $p = 0.025$  (б),  $0.075$  (в),  $0.15$  (г),  $0.2125$  (д). Вертикальной штриховой линией отмечено положение уровня Ферми. Параметры модели:  $U = 8t$ ,  $t' = t'' = 0$ ; полуширина лоренциана  $\delta = 0.1t$

взвываемся к конкретным экспериментальным спектрам, ограничиваясь модельными расчетами.

На рис. 7 представлена эволюция плотности состояний и ПФ от концентрации дырок. Во-первых, хорошо заметно, что распределение спектрального веса вдоль ПФ неоднородно и зависит от величины допирования (см. рис. 7б–д). Существуют значения концентрации дырок, при которых ПФ имеет арочную структуру. При допировании около 22 % топология ПФ испытывает трансформацию и происходит переход от условно «дырочного» кармана (см. ниже) в точке  $(\pi, \pi)$  к электронному карману в точке  $(0, 0)$ . В совокупности это показывает, что в области сильного допирования электронная система переходит к фермижидковому поведению. Одновременно с эволюцией ПФ можно наблюдать за поведением плотности состояний на уровне Ферми (см. рис. 7а). Видно, что при 8-процентном допировании уровень Ферми попадает в область с пониженной плотностью состояний (псевдощель) и находится в ней до величины допирования 22 %. Минимума плотности состояний он достигает при величине допирования 13 %, причем в этом диапазоне концентраций распределение спектрального веса по ПФ является неоднородным.

Если теперь отойти от привязки к имеющейся на настоящий момент экспериментальной точности и промоделировать уменьшение ширины линии, то можно получить более полную картину происходящих изменений ПФ в том же диапазоне концентраций. Рассмотрим эволюцию ПФ для меньшего значения полуширины лоренциана ( $\delta = 0.01t$ ) и меньшим диапазон учитываемых состояний вблизи уровня Ферми до  $\pm 0.02t$ . Оказалось, что при таком разрешении плотность состояний содержит больше особенностей, а эволюция ПФ от величины допирования происходит более сложным образом, что проявляется в последовательности топологических изменений (рис. 8). На плотности состояний видно, что с увеличением величины допирования уровень Ферми проходит две особенности Ван Хова и попадает в первую псевдощель. На рис. 8б–д представлены ПФ с распределением спектрального веса для тех же значений концентрации, что и на рис. 8а, поэтому легко видеть соответствие между особенностями Ван Хова и топологическими перестройками ПФ. Хорошо заметно, что с принятым разрешением проявились участки ПФ со слабым спектральным весом, дополнив информацию о полной ПФ. Стало очевидно, что представление о простом дырочном

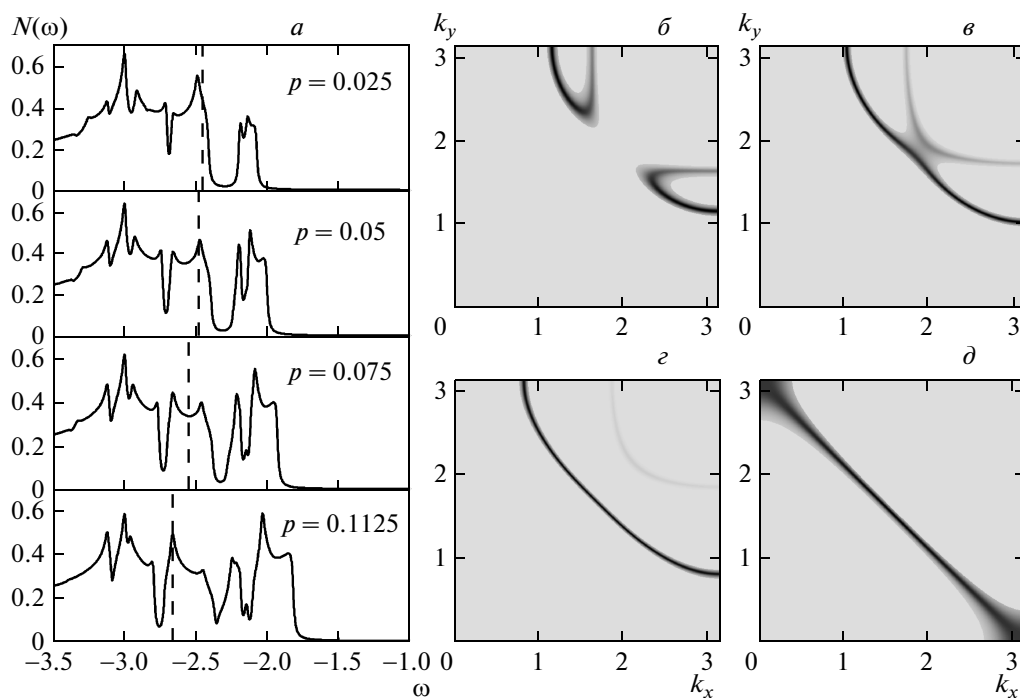


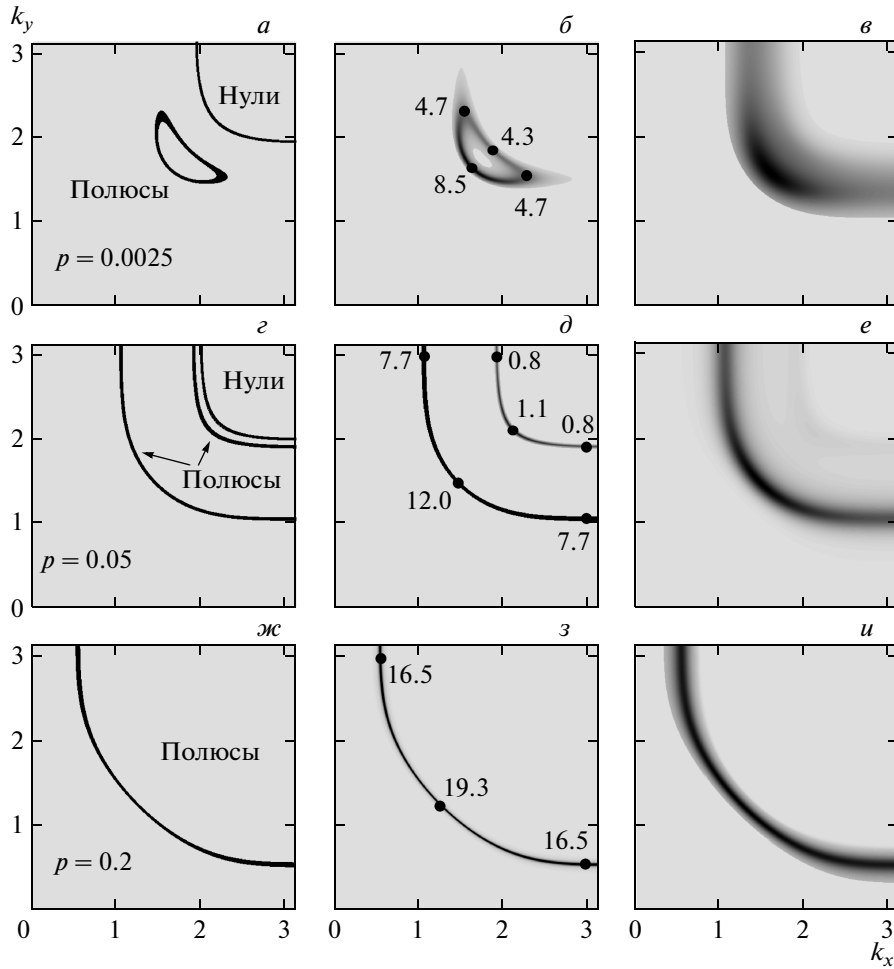
Рис. 8. То же самое, что на рис. 7, при  $p = 0.025$  (б),  $0.05$  (в),  $0.075$  (г),  $0.1125$  (д) и полуширине лоренциана  $\delta = 0.01t$

кармане вблизи точки  $(\pi, \pi)$  для этих параметров не реализуется. При сверхслабом допировании мы наблюдаем дырочные карманы в антинодальном направлении  $((\pi, 0) \rightarrow (\pi, \pi), (0, \pi) \rightarrow (\pi, \pi))$ , которые соединяются при определенной концентрации в точке нодального направления  $((0, 0) \rightarrow (\pi, \pi))$ , образуя более сложную топологию из двух поверхностей. Это изменение топологии проявляется в плотности состояний в виде первой особенности Ван Хова, причем поверхность со слабым спектральным весом образует электронный карман вокруг точки  $(\pi, \pi)$ . Поверхность с большим слаборавномерным распределением спектрального веса при увеличении концентрации дырок проходит через еще одно топологическое превращение. Это приводит к электронному карману вокруг точки  $(0, 0)$ . Соответственно это изменение топологии ПФ проявляется в плотности состояний в виде второй особенности Ван Хова.

Заканчивая данный раздел, подчеркнем, что выявленные особенности возникли вследствие наличия в системе ближнего магнитного порядка, который непосредственно учитывается в кластерном подходе.

## 6. ВЛИЯНИЕ НЕБЛИЖАЙШИХ ПЕРЕСКОКОВ

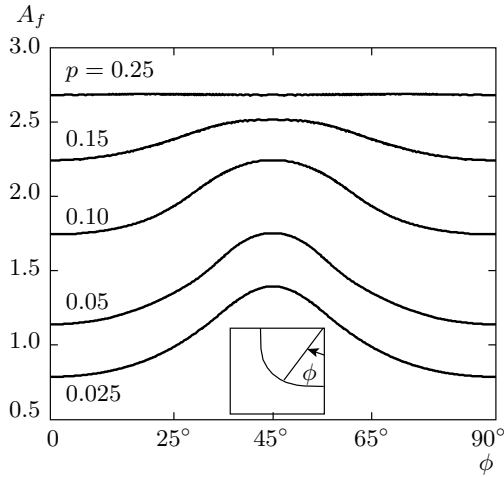
Для более полного сопоставления с реальными купратами необходимо учесть влияние перескоков между ближайшими узлами. В большинстве теоретических работ ограничиваются рассмотрением перескоков до третьего соседа включительно, так как учет перескоков большего порядка приводит к несущественным поправкам. Рассмотрим влияние перескоков между вторыми и третьими ближайшими соседями в рамках представленного выше кластерного подхода. При выборе параметров модели будем основываться на расчетах, проведенных в работе [12] для системы LSCO. Набор параметров имеет вид  $U = 4$  эВ,  $t = 0.93$  эВ,  $t' = -0.12$  эВ,  $t'' = 0.15$  эВ. В расчетах используем нормированные на  $t$  параметры:  $U = 4.3$ ,  $t' = -0.13$ ,  $t'' = 0.16$ . Заметим, что в случае кластера  $2 \times 2$  перескоки между первыми и вторыми ближайшими соседями учитываются уже при расчете собственных состояний кластера, в то время как учет перескоков между третьими ближайшими соседями происходит только во взаимодействии между кластерами.



**Рис. 9.** Концентрационные зависимости поверхности Ферми (*а, г, ж*) и карт спектрального веса при разных уровнях уширения  $\delta = 0.01t$  (*б, д, з*) и  $\delta = 0.1t$  (*в, е, и*). Числа на картах (*б, д, з*) показывают неоднородное распределение спектрального веса. Параметры модели:  $U = 4.3t$ ,  $t' = -0.13t$ ,  $t'' = 0.16t$

Следует отметить, что для систем с СЭК функция Грина имеет не только полюсы, но и нули. Этот результат был получен методом кластерной теории возмущений CDMFT+ED [14, 45]. В нашем расчете также воспроизводится структура полюсов и нулей (рис. 9*а, г, ж*), качественно совпадающая с результатами работы [45]. Последовательность изменений топологии поверхности Ферми такая же, как была получена ранее в работах [10, 12]. 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, сравнение данных из первого и второго столбцов рис. 9 дает похожие картины. Карты спектрального веса показывают также его неоднородное распределение в зоне Бриллюэна.

Подобные участки с малым спектральным весом получались ранее в работе [10]. Однако современному уровню разрешения в спектрах ARPES соответствует не второй столбец ( $\delta = 0.01$ ), а третий столбец ( $\delta = 0.1$ ) на рис. 9. Возникающее вследствие этого уширение настолько велико, что маленький карман замыкается в арку (рис. 9*в*). Вместо двух концентрических карманов вокруг точки  $(\pi, \pi)$  в промежуточной области концентраций большое уширение также дает одну арку (рис. 9*е*). И только в области больших концентраций, когда осталась лишь одна большая поверхность (рис. 9*ж, з, и*), картина из ARPES соответствует поверхности Ферми. Следует отметить, что несмотря на качественное сходство эволюции поверхности Ферми при допировании с предыдущими работами [12], численные значения



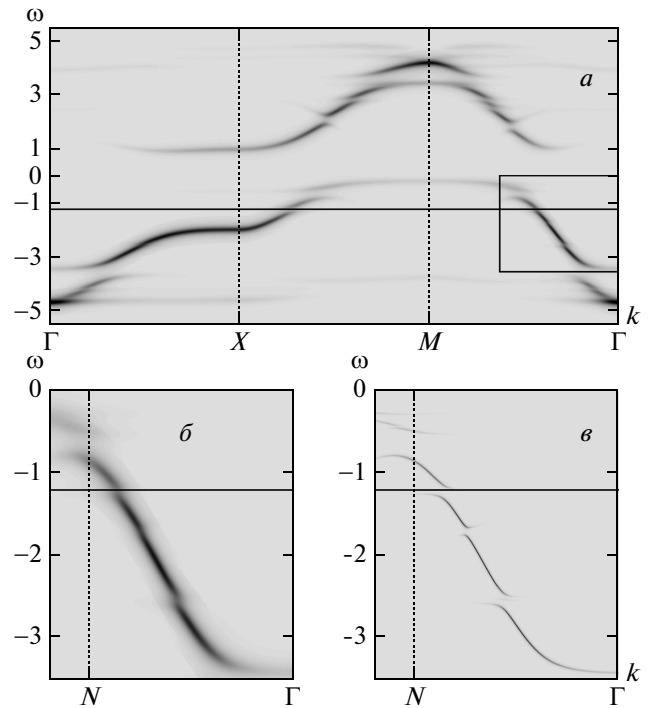
**Рис. 10.** Зависимость спектральной интенсивности на поверхности Ферми  $A_f$  от угла  $\varphi$  при различной величине допирования. Здесь  $\varphi = 0$  соответствует антинодальному направлению  $((\pi, 0) \rightarrow (\pi, \pi))$ ,  $\varphi = 45^\circ$  — нодальному направлению  $((0, 0) \rightarrow (\pi, \pi))$ . Параметры модели:  $U = 2.15t$ ,  $t' = -0.13t$ ,  $t'' = 0.16t$ . Величина  $\delta = 0.1t$

критических концентраций переходов Лифшица не совпадают. Эти значения, безусловно, зависят и от вида модели (спин-фермионная модель [10], модель Хаббарда [11] и  $t$ - $J$ -модель [12]), и от численных значений параметров модели.

Наличие псевдощели в окрестности антинодальной точки  $(\pi, 0)$  и ее постепенное зарастание при увеличении концентрации видно на рис. 10. 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  $p = 0.25$  соответствует ожидаемому фермижидкостному поведению.

Внутрищелевые состояния при  $U = 4.3t$  лежат вблизи ЛНВ и имеют наибольший спектральный вес в окрестности точки  $M = (\pi, \pi)$  (рис. 11).

Дисперсионная зависимость вдоль симметричного направления  $\Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma$  показала хорошее согласие с другими работами [19, 46] (см. рис. 11). В частности, в окрестности точки  $X$  наблюдается седловая особенность с большим спектральным весом, что согласуется с экспериментами по ARPES. Анализ дисперсии вдоль нодального направления выявил участки дисперсии с разным наклоном, причем при уширении  $\delta = 0.1t$  данная особенность лучше заметна при большем параметре  $U$ . Отметим, что подобное искажение дисперсии имеет большое сходство с существованием кинков, наблюдаемых в мно-



**Рис. 11.** Дисперсионные зависимости вдоль симметричного направления  $\Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma$  в первом квадранте первой зоны Бриллюэна (а) и выделенная рамкой нодальная область (б, в) при 10-процентном допировании и  $U = 4.3t$ ;  $t' = -0.13t$ ,  $t'' = 0.16t$ . Горизонтальная сплошная линия обозначает положение уровня Ферми. Полуширина лоренциана  $\delta = 0.1t$  (б),  $\delta = 0.01t$  (в). Использованы следующие обозначения:  $\Gamma = (0, 0)$ ,  $X = (\pi, 0)$ ,  $M = (\pi, \pi)$ ,  $N = (\pi/2, \pi/2)$

гочисленных экспериментах [13–16]. Увеличение разрешения (т.е. уменьшение величины  $\delta$ ) позволило увидеть участки дисперсии с разным наклоном, разделенные друг от друга щелями (рис. 11в). Анализ результатов показал, что с увеличением параметра кулоновского отталкивания  $U$  происходит увеличение этих щелей. Ранее электронный механизм формирования кинков был обнаружен в работе [18].

С помощью данных из работы [47] был рассмотрен еще один набор параметров модели для LSCO:  $U = 4.65t$ ,  $t' = -0.17t$ ,  $t'' = 0.085t$ . В целом, картина поведения основных характеристик электронной системы имеет сходный с описанной выше (для параметра  $U = 4.3$ ) вид. Существенным отличием является отсутствие дырочного кармана в нодальном направлении при малых концентрациях дырок. В данном случае эволюция ПФ начинается с расщепления дуги и образования структуры, подобной изоб-

раженной на рис. 9*д*. Исследование показало, что на наличие дырочного кармана в нодальном направлении влияет величина параметра перескока на третьи ближайшие соседи  $t''$ . Увеличение этого параметра приводит к стабилизации кармана ПФ.

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 полный ответ на вопрос об истинной топологии поверхности Ферми в ВТСП-купратах. Только уменьшение ширины линии на порядок позволяет получать истинную поверхность Ферми из распределения спектральной интенсивности.

## 7. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Подведем итоги настоящей работы. Проводя сравнение с результатами других теоретических и экспериментальных работ, можно констатировать хорошее согласие по ряду характерных общих особенностей систем с СЭК. Во-первых, это наличие внутрищелевых состояний в широкой области допирования. Наши расчеты показали, что спектральный вес внутрищелевой зоны увеличивается при возрастании концентрации дырок в основном за счет спектрального веса верхней хаббардовской подзоны (рис. 6). Выявлена зависимость положения внутрищелевых состояний от величины параметра кулоновского отталкивания  $U$ . В частности, при  $U = 8$  эти состояния появляются вблизи нижней хаббардовской подзоны, а при  $U = 2$  — вблизи верхней, причем существует различие и в распределении спектральной интенсивности. В первом случае спектральный вес отличен от нуля для квазичастиц вблизи точки  $M$ , а во втором — вблизи точек  $X$  и  $N$ . Аналогичное поведение наблюдается и при других параметрах модели.

Как показало проведенное исследование, полный спектральный вес ЛНВ  $W_{LHV}$  также имеет зависимость от концентрации и параметра кулоновского отталкивания  $U$  (рис. 6), причем с увеличением значения последнего происходят существенные изменения в поведении системы. При  $U = 7$  наблюдается смена функциональной зависимости  $W_{LHV}(p)$ , а при  $U = 12$  в области слабого допирования спектральный вес  $W_{LHV}$  уменьшается так сильно, что число состояний в ЛНВ становится меньше полного числа электронов в системе. В результате уровень Ферми попадает в область внутрищелевых состояний.

В ходе исследования были обнаружены нали-

чие псевдощелевых состояний и неоднородное распределение спектрального веса квазичастиц по поверхности Ферми. Проведенный расчет выявил каскад квантовых фазовых переходов при увеличении концентрации дырок, который возможно наблюдать только при высоком разрешении (рис. 9). Здесь под разрешением мы понимаем энергетическое разрешение экспериментов ARPES. В наших расчетах роль такой величины играет полуширина лоренциана  $\delta$ , с помощью которой наиболее удобно моделировать теоретический расчет. Отметим, что мы проводим только качественное сравнение с данными ARPES.

В случае ненулевых неближайших перескоков получена поверхность Ферми в виде арки (рис. 9*в, е, и*), что согласуется с ARPES-данными [9, 48], причем выявлена еще одна часть поверхности Ферми с очень малым спектральным весом (рис. 9*д*), а также выявлены нули функции Грина в области малого допирования, соответствующие результатам метода CDMFT+ED [14]. Для определенного набора параметров модели в области сверхслабого допирования обнаружен малый карман ПФ в нодальном направлении (рис. 9*а, б*). Анализ результатов, полученных при разном разрешении, позволил оценить роль разрешения в ARPES-экспериментах при исследовании поверхности Ферми от концентрации дырок. Мы надеемся, что будущие эксперименты с лучшим разрешением позволят увидеть более тонкую энергетическую структуру электронной системы в материалах с СЭК.

Малые дырочные карманы в области слабодопированных купратов экспериментально были обнаружены при измерении квантовых осцилляций Ландау в сильных магнитных полях [9]. То, что карманы при уширении размываются в дуги, было получено многими авторами (см. [14, 18]). Нами показано, что уширение замыкает картину переходов Лифшица и приводит к плавному зарастанию псевдощели (см. рис. 10).

Дисперсионные зависимости вдоль симметричных направлений (рис. 11) хорошо согласуются с другими работами, в частности, с работой [19], выполненной в рамках кластерного обобщения теории динамического среднего поля. Существует ряд работ, посвященных исследованию изменений наклона дисперсии ниже уровня Ферми (кинков), причем уже выявлено несколько их видов [49, 50]. В настоящей работе было показано, что в нодальном направлении дисперсионная кривая разбита на участки с разным наклоном, разделенные щелями (рис. 11). И поскольку в используемом подходе мы не учитываем фононной компоненты, разность в наклоне свя-

зана с непосредственным взаимодействием в электронной подсистеме. Таким образом, наблюдаемые в экспериментах кинки могут быть следствием электрон-электронных взаимодействий, приводящих к искажению дисперсионной кривой. Этот вывод согласуется с результатами работы [50].

Отметим, что результаты настоящей работы получены в рамках кластерного подхода, позволяющего точно учитывать ближний порядок. В нашем подходе использовалась техника  $X$ -операторов Хаббарда, что позволило ввести величину ( $f$ -фактор), позволяющую контролировать полный спектральный вес квазичастиц в необходимых пределах точности. Вычисление энергии основного состояния (рис. 4) и все полученные в настоящей работе результаты подтверждают пригодность использованного подхода для исследования систем с сильными электронными корреляциями. Предварительные результаты этого исследования были опубликованы в работе [51].

Авторы благодарят В. В. Валькова за полезные обсуждения данной работы. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 10-02-90725-моб\_ст, 09-02-00127), а также в рамках Программы Президиума РАН (18.7), ФЦП «Кадры» (ГК П891) и интеграционного проекта СО РАН № 40.

## ЛИТЕРАТУРА

1. O. Fischer, M. Kugler, I. Maggio-Aprile et al., *Rev. Mod. Phys.* **79**, 353 (2007).
2. A. Damascelli, Z. Hussain, and Z. Shen, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473 (2003).
3. М. В. Садовский, *УФН* **171**, 539 (2001).
4. A. Kanigel, M. R. Norman, M. Randeria et al., *Nature Phys.* **2**, 447 (2006).
5. K.-Y. Yang, T. M. Rice, and F.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **73**, 174501 (2006).
6. P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17 (2006).
7. T. Yoshida, X. J. Zhou, D. H. Lu et al., *J. Phys.: Condens. Matt.* **19**, 125209 (2007).
8. M. Hashimoto, T. Yoshida, H. Yagi et al., *Phys. Rev. B* **77**, 094516 (2008).
9. N. Doiron-Leyrand, C. Proust, D. LeBoeuf et al., *Nature* **447**, 565 (2007).
10. А. Ф. Барабанов, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев и др., *ЖЭТФ* **119**, 777 (2001).
11. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, *ЖЭТФ* **131**, 259 (2007).
12. M. M. Korshunov and S. G. Ovchinnikov, *Eur. Phys. J. B* **57**, 271 (2007).
13. А. Ф. Барабанов, А. М. Белемук, *ЖЭТФ* **138**, 289 (2010).
14. S. Sakai, Y. Motome, and M. Imada, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 056404 (2009).
15. С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов, Е. И. Шнейдер, *ЖЭТФ* **136**, 898 (2009).
16. S. V. Borisenko, A. A. Kordyuk, V. Zabolotny et al., *Phys. Rev. Lett.* **96**, 117004 (2006).
17. A. Lanzara, P. V. Bogdanov, X. J. Zhou et al., *Nature* **412**, 510 (2001).
18. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, *Pis'ma v ZhETF* **82**, 217 (2005).
19. M. Civelli, *Phys. Rev. B* **79**, 195113 (2009).
20. T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. H. Hettler, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1027 (2005).
21. А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, А. В. Михеенков, *ФТТ* **30**, 2518 (1988).
22. A. F. Barabanov, L. A. Maksimov, and A. V. Mikheyenkov, *J. Phys.: Condens. Matt.* **1**, 10143 (1989).
23. S. G. Ovchinnikov and I. S. Sandalov, *Physica C* **161**, 607 (1989).
24. J. Hubbard, *J. Proc. Roy. Soc. A* **276**, 238 (1963).
25. J. Hubbard, *J. Proc. Roy. Soc. A* **285**, 542 (1965).
26. С. В. Николаев, С. Г. Овчинников, *ЖЭТФ* **138**, 717 (2010).
27. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильно коррелированных системах*, Изд-во СО РАН, Новосибирск (2001).
28. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **68**, 207 (1975).
29. Р. О. Зайцев, *Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма*, Едиториал УРСС, Москва (2004).
30. D. Senechal, D. Perez, and D. Plouffe, *Phys. Rev. B* **66**, 075129 (2002).
31. D. Poilblanc, *Phys. Rev. B* **44**, 9562 (1991).
32. T. Tohyama, *Phys. Rev. B* **70**, 174517 (2004).

33. Ч. Киттель, *Квантовая теория твердых тел*, Наука, Москва (1967).
34. Н. Yokooyama and Н. Shiba, *J. Phys. Soc. Jpn.* **56**, 3582 (1987).
35. J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **31**, 4403 (1985).
36. G. Fano, F. Ortolani, and A. Parola, *Phys. Rev. B* **42**, 6877 (1990).
37. C. Dahnken, M. Aichhorn, W. Hanke et al., *Phys. Rev. B* **70**, 245110 (2004).
38. С. Г. Овчинников, *ЖЭТФ* **102**, 534 (1992).
39. С. В. Николаев, С. Г. Овчинников, *Журнал СФУ. Математика и физика* **4**, 162 (2011).
40. D. S. Marshall, D. S. Dessau, A. G. Loeser et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4841 (1996).
41. A. Ino, C. Kim, M. Nakamura et al., *Phys. Rev. B* **62**, 4137 (2000).
42. T. Yoshida, M. Hashimoto, T. Takizawa et al., *Phys. Rev. B* **82**, 085119 (2010).
43. A. A. Kordyuk, S. V. Borisenko, M. Knupfer, and J. Fink, *Phys. Rev. B* **67**, 064504 (2003).
44. W. Prestel, F. Venturini, B. Muschler et al., *Eur. Phys. J. ST* **188**, 163 (2010).
45. T. D. Stanescu and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **74**, 125110 (2006).
46. A.-M. S. Tremblay, B. Kyung, and D. Senechal, *Low Temp. Phys.* **32**, 424 (2006).
47. E. Pavarini, I. Dasgupta, T. Saha-Dasgupta et al., *Phys. Rev. Lett.* **87**, 047003 (2001).
48. T. Yoshida, M. Hashimoto, S. Ideta et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 037004 (2009).
49. J. Graf, G.-H. Gweon, and A. Lanzara, *Physica C* **460**, 194 (2007).
50. K. Byczuk, M. Kollar, K. Held et al., *Nature Phys.* **3**, 168 (2007).
51. S. G. Ovchinnikov and S. V. Nikolaev, *Письма в ЖЭТФ* **93**, 575 (2011).