

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ La_2CuO_4 В МНОГОЭЛЕКТРОННОМ ПОДХОДЕ LDA+GTV

И. А. Макаров*, С. Г. Овчинников**

Институт физики Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 22 ноября 2014 г.

В рамках многоэлектронного метода LDA+GTV рассчитана зонная структура La_2CuO_4 при конечных температурах в антиферромагнитной и парамагнитной фазах. Температурная зависимость зонного спектра и спектрального веса хаббардовских фермионов обусловлена изменением чисел заполнения локальных многоэлектронных термов, расщепленных по спину в антиферромагнитной фазе. Уменьшение намагниченности подрешетки с температурой приводит к появлению новых зон вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны. Показано, что диэлектрическая щель уменьшается с ростом температуры, но La_2CuO_4 остается диэлектриком и в парамагнитной фазе. Эти результаты соответствуют экспериментам по красному сдвигу края поглощения в La_2CuO_4 с ростом температуры.

DOI: 10.7868/S0044451015090102

1. ВВЕДЕНИЕ

Сложная фазовая диаграмма ВТСП-купратов до сих пор продолжает оставаться предметом и теоретических, и экспериментальных исследований. В нормальной фазе неясной является природа псевдощелевого состояния. Довольно много указаний на определяющую роль спиновых флуктуаций ближнего антиферромагнитного (АФМ) порядка [1]. Однако недавно появилась серия работ, подчеркивающая важную роль локальных динамических зарядовых флуктуаций и искажений [2–5], а также возможность существования скрытых параметров порядка [6]. Причины, по которым уже почти 30 лет проблема нормального и сверхпроводящего состояний в ВТСП-купратах остается открытой, на наш взгляд, следующие. Во-первых, сложность и взаимосвязанность всех подсистем кристалла: электронной, магнитной и кристаллической решетки. Во-вторых, сильные электронные корреляции (СЭК), которые приводят к неприменимости методов стандартной квантовой теории твердого тела, основанных на нулевом приближении невзаимодействующих электро-

нов с последующим учетом их взаимодействия по теории возмущений.

Существует немало теоретических подходов, предлагающих методы расчета электронной структуры купратов с учетом СЭК в рамках простых моделей типа модели Хаббарда или t - J -модели [7–10]. Гибридный метод LDA+GTV, сочетающий расчет в многоэлектронной многозонной p - d -модели в обобщенном методе сильной связи (GTV) [11] с вычислением параметров модели в рамках *ab initio*-подхода LDA (приближение локальной плотности) [12] учитывает и зонную структуру купрата, и эффекты СЭК. В рамках подхода LDA+GTV была описана концентрационная зависимость зонной структуры $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ и было показано, что переход от допированного диэлектрика Мотта–Хаббарда при малых x к ферми-жидкостной системе при больших x происходит через два квантовых перехода Лифшица с изменением топологии поверхности Ферми [13]. Согласно расчетам LDA+GTV [14, 15], четыре дырочных кармана допированного диэлектрика с центром в $(\pi/2, \pi/2)$ увеличиваются и при $x_{c1} = 0.15$ пересекаются на границе зоны Бриллюэна, при $x > x_{c1}$ существует две поверхности вокруг точки (π, π) . Меньшая коллапсирует в точке $x_{c2} = 0.24$, и при $x > x_{c2}$ существует только одна большая,

*E-mail: macplay@mail.ru

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

характерная для ферми-жидкостного состояния. Качественно подобные поверхности Ферми при разных концентрациях были получены также в работах [8, 10], однако переходы Лифшица в этих работах не обсуждались. Исследование электронных свойств вблизи переходов Лифшица показало, что логарифмическая особенность в плотности состояний $N(\varepsilon_F)$ при $x = x_{c1}$ обеспечивает максимум температуры сверхпроводящего перехода, а переход в точке x_{c2} соответствует при $T = 0$ К переходу из псевдощелевого в ферми-жидкостное состояние [16, 17]. Обе эти концентрации соответствуют особым точкам на фазовой диаграмме: точке оптимального допирования (0.15) и пересечения псевдощелевой температуры $T^*(x)$ с осью $T = 0$ К [18].

Сильная концентрационная зависимость зонной структуры при учете СЭК возникает из-за присутствия чисел заполнения локальных состояний с одной и двумя дырками в элементарной ячейке в многоэлектронных подходах. Числа заполнения зависят не только от уровня допирования, но и от температуры. Поэтому зонная структура будет зависеть и от температуры. Экспериментально, по-видимому, это проявляется в зависимости температуры T^* от допирования. Теоретически вопрос о температурной зависимости зонной структуры купратов почти не исследован. В настоящей работе мы рассмотрим температурную зависимость зонной структуры La_2CuO_4 как в антиферромагнитном, так и в парамагнитном состоянии. В АФМ-фазе расщепление однодырочных уровней $S = 1/2$ по проекции спина пропорционально магнитному моменту $\langle S^z \rangle$ подрешетки и уменьшается с нагревом. Температурную зависимость $\langle S^z \rangle$ мы находим из эффективной модели Гейзенберга. С ростом температуры новые состояния внутри валентной зоны и зоны проводимости приобретают спектральный вес и дисперсию. Отщепившиеся от потолка валентной зоны и дна зоны проводимости новые зоны подвергаются существенным изменениям с дальнейшим ростом T . Выше T_N закон дисперсии становится подобен парамагнитному (ПМ) спектру при $T = 0$ К, вычисленному методом LDA в работе [19].

Дальнейший план статьи следующий. Раздел 2 посвящен описанию особенностей используемого метода, приведены гамильтониан трехзонной p - d -модели, общий вид функции Грина и уравнение на ее полюса. В разд. 3 будет показана эволюция зонной структуры, плотности состояний с ростом температуры, также будет продемонстрировано изменение диэлектрической щели с температурой. В разд. 4

будет проводиться исследование температурной зависимости изоэнергетических поверхностей для разных областей валентной зоны и зоны проводимости.

2. РАСЧЕТ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Мы рассматриваем ВТСП-купраты на примере недопированного однослойного соединения La_2CuO_4 . Электронная структура этих соединений вблизи уровня Ферми формируется d_x -орбиталями меди и $p_{x,y}$ -орбиталями кислорода в CuO_2 -плоскости. Поэтому для описания взаимодействий в этой системе мы используем трехзонную модель Эмери:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{f\sigma} \varepsilon_d d_{xf\sigma}^\dagger d_{xf\sigma} + \sum_{f\sigma} \varepsilon_p p_{f\sigma}^\dagger p_{f\sigma} + \\
 & + \sum_{fg\sigma} (-1)^{R_g} t_{pd} \left(d_{xf\sigma}^\dagger p_{g\sigma} + \text{H.c.} \right) + \\
 & + \sum_{fg\sigma} (-1)^{M_g} t_{pp} \left(p_{f\sigma}^\dagger p_{g\sigma} + \text{H.c.} \right) + \\
 & + \sum_f U_d d_{xf\uparrow}^\dagger d_{xf\uparrow} d_{xf\downarrow}^\dagger d_{xf\downarrow} + \sum_f U_p p_{f\uparrow}^\dagger p_{f\uparrow} p_{f\downarrow}^\dagger p_{f\downarrow} + \\
 & + \sum_{fg\sigma\sigma'} V_{pd} d_{xf\sigma}^\dagger d_{xf\sigma} p_{g\sigma'}^\dagger p_{g\sigma'} . \quad (1)
 \end{aligned}$$

Здесь $d_{xf\sigma}$ и $p_{g\sigma}$ — операторы уничтожения дырки с проекцией спина σ на атоме меди f и атоме кислорода g , ε_d — одноэлектронная энергия для дырки на Cu, а ε_p — на O; t_{pd} — амплитуда перескоков между d_x - и p -орбиталями внутри CuO_2 -плоскости, t_{pp} — величина перескоков между плоскостными кислородными орбиталями; U_d — кулоновское взаимодействие двух дырок на атоме меди, а U_p — на атоме кислорода, V_{pd} — междузельное кулоновское взаимодействие. Коэффициенты R_g и M_g зависят от знака перекрытия волновых функций на атомах меди и кислорода, коэффициент $R_g = 0$ для атомов $g = (g_x - a_x/2, g_y)$, $(g_x, g_y - a_y/2)$ и $R_g = 1$ для $g = (g_x + a_x/2, g_y)$, $(g_x, g_y + a_y/2)$, где a_x и a_y — постоянные решетки. Параметры гамильтониана были рассчитаны в работе [20] в рамках метода LDA+GTV.

Метод GTV включает в себя несколько этапов: точная диагонализация элементарной ячейки, построение квазичастичных возбуждений между собственными состояниями ячейки, характеризующихся операторами Хаббарда, и кластерная форма теории возмущений. Гамильтониан (1) разбивается на внутрикластерную часть, содержащую все взаимодействия внутри CuO_4 -кластера, и гамильтониан меж-

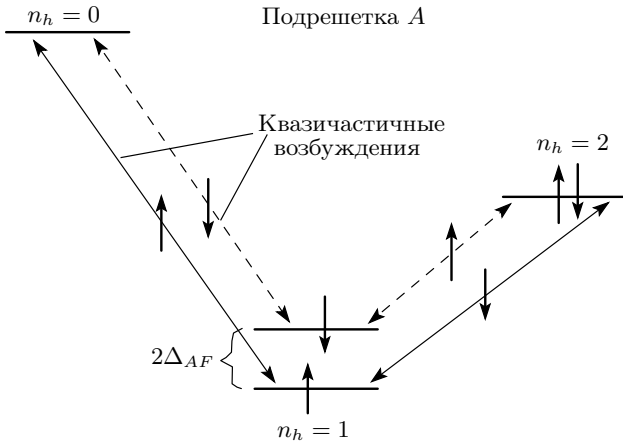


Рис. 1. Собственные состояния CuO_4 -кластера для $n_h = 0, 1, 2$ (горизонтальные линии) подрешетки A в низкоэнергетической области. Основные состояния сектора Гильбертова пространства с $n_h = 1$ в двух магнитных подрешетках A и B характеризуются противоположными проекциями спинового момента. Сплошные линии, проведенные между собственными состояниями, изображают квазичастичные возбуждения с ненулевым спектральным весом. Штриховые линии изображают квазичастичные возбуждения с нулевым спектральным весом при $T = 0$ К

кластерных взаимодействий. Диагонализация внутрискластерного гамильтониана в базисах с числом дырок $n_h = 0, 1, 2$ позволяет точно получить локальные многочастичные состояния и их энергии. Поскольку при $x = 0$ и $T = 0$ К дырка распространяется в CuO_2 -плоскости на фоне дальнего антиферромагнитного порядка, локальные состояния дырки с противоположными проекциями спина $|1\downarrow, i\rangle$ и $|1\uparrow, i\rangle$ в кластере с $n_h = 1$ будут расщеплены (рис. 1). Щель $2\Delta_{AF}$ между этими состояниями будет определяться величиной молекулярного поля Вейсса антиферромагнитного типа $\Delta_{AF} = ZJ\langle S^z \rangle$, где Z — число ближайших соседей ($Z = 4$ для CuO_2 -слоя), J — величина суперобменного взаимодействия. Суперобменное взаимодействие появляется в рамках того же исходного гамильтониана p - d -модели во втором порядке теории возмущений по t_{pd}/U [21] так же, как и в модели Хаббарда [22]. Влияние температуры на среднее значение проекции спинового момента на ось z $\langle S^z \rangle$ самосогласованно вычисляется в приближении среднего поля в рамках модели Гейзенберга с помощью уравнения

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \text{th} \frac{ZJ \langle S^z \rangle}{2k_B T}. \quad (2)$$

Заметим, что дальний антиферромагнитный порядок в ВТСП-купратах обусловлен квазидвумерностью их магнитной системы с обменным интегралом J внутри плоскости и межплоскостным обменным интегралом $J_\perp \ll J$. В спин-волновой теории введение J_\perp позволяет получить выражение для $T_N \sim J/\ln(J/J_\perp)$, которое стремится к нулю при $J_\perp \rightarrow 0$. Вблизи основного состояния существует двухподрешеточная магнитная структура. Именно наличие этой структуры и формирует закон дисперсии дырки в недопированном купрате. В этом смысле наша формула (2) задает способ моделирования двухподрешеточной структуры. Можно добавить J_\perp в эту формулу, но это не приведет к существенному изменению в теории, полученная из формулы (2) величина температуры Нееля $T_N \sim (4J + 2J_\perp)$ неверна. В настоящей работе мы не ставим задачу самосогласованного описания магнитного порядка и электронной структуры. Вместо этого мы подбираем величину J таким образом, чтобы температура Нееля в теории среднего поля согласовывалась с экспериментальным значением ($T_N = 325$ К для La_2CuO_4). Такой подход позволяет нам качественно описать изменение электронной структуры при изменении магнитного порядка, но не позволяет получить количественные температурные зависимости параметров электронной структуры.

Заполнение дырочных состояний с противоположными проекциями спина будет зависеть от температуры:

$$\begin{aligned} n_{G\sigma} &= 1/2 + \eta_G(\sigma) \langle S^z \rangle, \\ \eta_A(\sigma) &= \begin{cases} 1, & \sigma = 1/2, \\ -1, & \sigma = -1/2, \end{cases} \\ \eta_B(\sigma) &= \begin{cases} 1, & \sigma = -1/2, \\ -1, & \sigma = 1/2, \end{cases} \end{aligned} \quad (3)$$

где G — индекс подрешетки (принимает значения A или B), σ — проекция спина в однодырочном состоянии.

Переходы между собственными состояниями CuO_4 -кластера $|p\rangle$ и $|q\rangle$ с $\Delta n_h = 1$ являются квазичастичными возбуждениями ферми-типа, которые характеризуются операторами Хаббарда X_f^{pq} . Квазичастичные переходы между состояниями с $n_h = 0$ и $n_h = 1$ формируют верхнюю хаббардовскую зону электронов (УНВ), являющуюся зоной проводимости, а нижняя хаббардовская зона электронов (ЛНВ), валентная зона, образуется при переходах

между состояниями с $n_h = 1$ и $n_h = 2$. Локальные квазичастичные возбуждения далее используются в качестве невозмущенных состояний при реализации кластерной формы теории возмущений, результатом которой является запись межкластерного гамильтониана на языке операторов Хаббарда. Полный гамильтониан в представлении операторов Хаббарда запишется в виде

$$H = \sum_f \left[\sum_{q\sigma} \varepsilon_{1q\sigma} X_f^{q\sigma} + \sum_p \varepsilon_{2p} X_f^{pp} - \sum_{g \neq f} \sum_{pqmn} 2t_{pd} \mu_{fg} \gamma_{d_x}^*(pq) \gamma_b(mn) X_f^{\dagger pq} X_g^{mn} - \sum_{g \neq f} \sum_{pqmn} 2t_{pp} \nu_{fg} \gamma_b^*(pq) \gamma_b(mn) X_f^{\dagger pq} X_g^{mn} \right], \quad (4)$$

где $\varepsilon_{1q\sigma}$ — энергия однодырочного состояния $|q\rangle$ с проекцией спина σ и ε_{2p} — энергия двухдырочного состояния $|p\rangle$, $\gamma_\lambda(pq) = \langle p | \lambda | q \rangle$, λ обозначает либо медную d_x -орбиталь, либо молекулярную кислородную орбиталь b_{1g} -симметрии. Значения структурных факторов μ_{fg} и ν_{fg} даны в работе [11].

Для того чтобы получить дисперсию квазичастичных возбуждений, мы применяем метод уравнения движения для функции Грина $D_{fg}^{GG'}(pq; mn) = \langle \langle X_{fS}^{pq} | X_{gS'}^{mn} \rangle \rangle$, где f и g обозначают ячейки магнитных подрешеток G и G' . Полная функция Грина в матричной форме имеет вид

$$\hat{D}_{fg} = \begin{pmatrix} D_{fg}^{AA} & D_{fg}^{AB} \\ D_{fg}^{BA} & D_{fg}^{BB} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Расщепление уравнения движения для функции Грина (5) проводится в приближении Хаббард I, в результате чего получаем уравнение Дайсона

$$\hat{D}(\mathbf{k}) = \left(\hat{D}_0^{-1} - \hat{t}(\mathbf{k}) \right)^{-1}, \quad (6)$$

где $D_0^{pq} = F(pq) / (E - \Omega(pq))$ — локальная функция Грина CuO_4 -кластера с энергией квазичастичного возбуждения $\Omega(pq)$ и диагональными элементами матрицы факторов заполнения (или концевых множителей в диаграммной технике [7]) $F_f(pq) = \langle X_f^{pp} \rangle + \langle X_f^{qq} \rangle$, а $\hat{t}(\mathbf{k})$ — матрица интегралов перескоков $t_{pq, mn}(\mathbf{k}) = \sum_{\lambda\lambda'} \gamma_\lambda^*(pq) t_{\lambda\lambda'}(\mathbf{k}) \gamma_{\lambda'}(mn)$, определяемая суммой матричных элементов p - d - и p - p -перескоков. Полюса функции Грина (6) определяются из уравнения

$$\det \left\| \delta_{pq; mn} \frac{(E - \hat{\Omega})}{\hat{F}} - \hat{t}(\mathbf{k}) \right\| = 0. \quad (7)$$

3. ЗОННАЯ СТРУКТУРА La_2CuO_4 ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Зонная структура при $T = 0$ К изображена на рис. 2а. Каждая из хаббардовских зон формируется дисперсией одного квазичастичного возбуждения, которые показаны на рис. 1 сплошными линиями. Валентная зона электронов (зона проводимости дырок) при $T = 0$ К характеризуется наличием максимума (минимума) в точке $k = (\pi/2, \pi/2)$, что находится в соответствии с результатами ранних теоретических работ [23–26], в которых исследовалась электронная структура купратов. Поскольку заполнение возбужденных одночастичных состояний, в частности, ближайшего состояния с противоположной проекцией спина, близко к нулю, то и квазичастичные возбуждения с участием этих состояний являются бездисперсными и имеют нулевую спектральную интенсивность. Спектральная интенсивность одноэлектронных возбуждений определяется спектральной функцией квазичастиц

$$A(k, E) = \sum_{\sigma} A_{\sigma}(k, E),$$

$$A_{\sigma}(k, E) = \sum_{\lambda mn} \gamma_{\lambda\sigma}^*(m) \gamma_{\lambda\sigma}(n) \times \quad (8)$$

$$\times \text{Im } D^{mn}(k, E + i\delta).$$

Каждая из спектральных функций A_{σ} дает интенсивность для частиц с определенным спином. Дисперсии частиц с противоположными проекциями спина идентичны, однако распределение спектрального веса по зоне Бриллюэна для них значительно отличается. При $T = 0$ К $A_{\uparrow}(k, E)$ и $A_{\downarrow}(k, E)$ антисимметричны относительно границы антиферромагнитной зоны Бриллюэна. Следует отметить, что, в отличие от стандартной теории возмущений, спектральный вес хаббардовских фермионов (квазичастиц) зависит от волнового вектора и температуры и может принимать дробные значения.

Возрастание температуры приводит к двум эффектам. Во-первых, уменьшаются намагниченность подрешеток и расщепление состояний с противоположными проекциями спина в каждой из подрешеток. Во-вторых, с ростом температуры начинают заполняться возбужденные состояния, причем в однодырочном секторе первым возбужденным состоянием является состояние с проекцией спина, противоположной ее направлению в основном состоянии. Квазичастичные переходы с участием заполненных состояний приобретают ненулевую интенсивность, дисперсию, и становится возможным межзонное взаимодействие с проявившимися зонами.

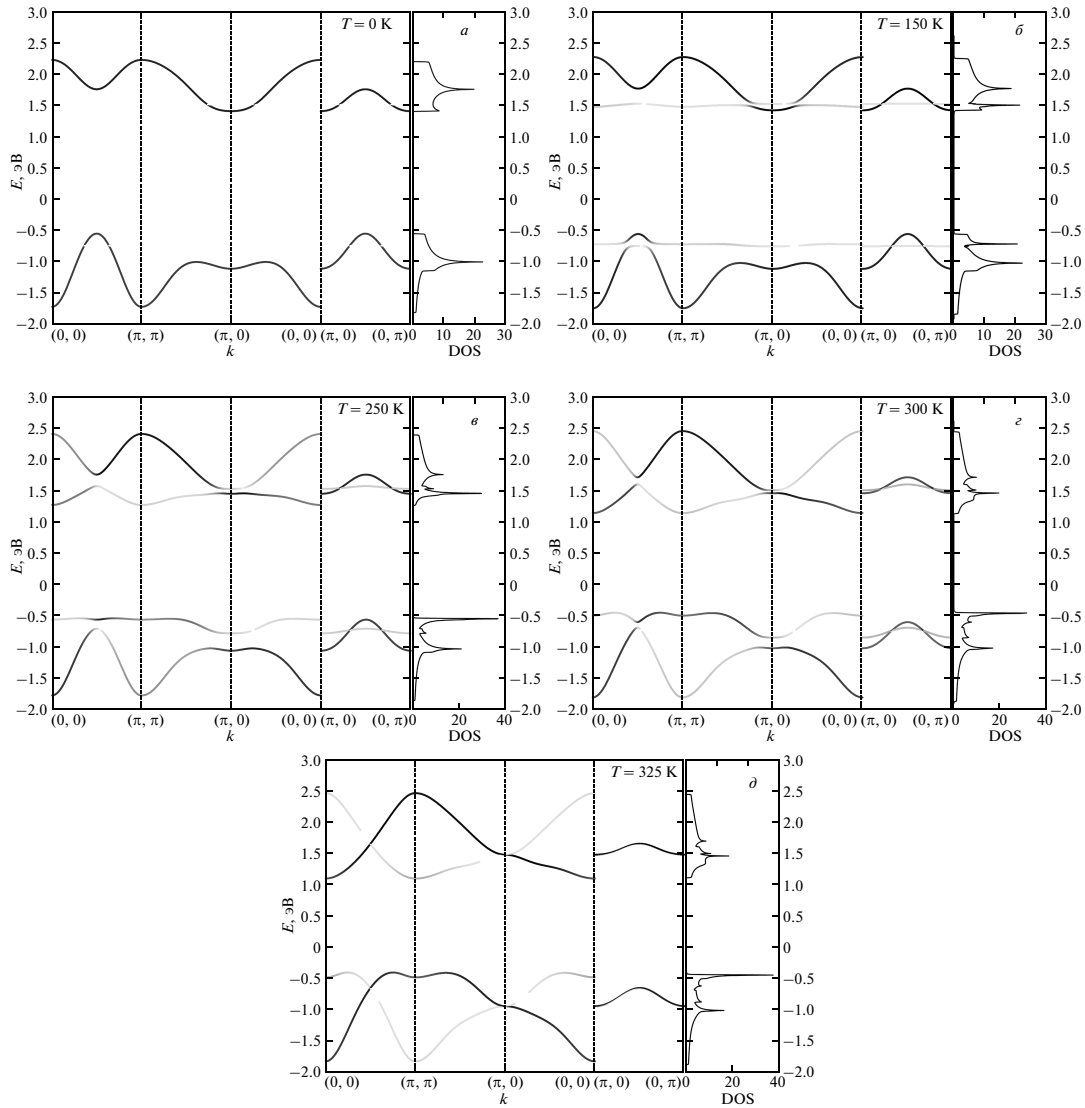


Рис. 2. Зонная структура и плотность состояний электронов при различной температуре: *а* — $T = 0$ К, *б* — $T = 150$ К, *в* — $T = 250$ К, *г* — $T = 300$ К, *д* — $T = 325$ К. Спектральный вес состояний с разными k пропорционален интенсивности линии

Эти эффекты приводят к существенной перестройке зонной структуры при увеличении T . Бездисперсные уровни с нулевым спектральным весом при $T = 0$ К, находящиеся внутри ЛНВ и УНВ, приобретают спектральный вес и слабую k -зависимость. Из-за межзонных взаимодействий в исходных ЛНВ и УНВ возникает расщепление (рис. 2б), которое отделяет потолок валентной зоны и дно зоны проводимости от основных широких хаббардовских зон. В плотности состояний расщепление проявляется в виде возникновения дополнительных пиков. Отметим, что при любой температуре вплоть до магнитного фазового перехода имеются две точки на гра-

нице антиферромагнитной зоны Бриллюэна, в которых дисперсионные поверхности расщепленных зон соприкасаются.

С дальнейшим ростом температуры расщепления увеличиваются, а ширина подзон потолка валентной зоны и дна зоны проводимости уменьшается. Для потолка валентной зоны наибольший спектральный вес имеют состояния плоской зоны в области $(\pi/2, \pi/2) - (\pi, \pi)$, а для дна зоны проводимости — в областях $(0, 0) - (\pi/2, \pi/2)$ и $(\pi, 0) - (0, 0)$. В области температур $T = 238$ К узкая зона «выворачивается» (рис. 2в) таким образом, что локальный максимум валентной зоны в $k = (\pi/2, \pi/2)$ превра-

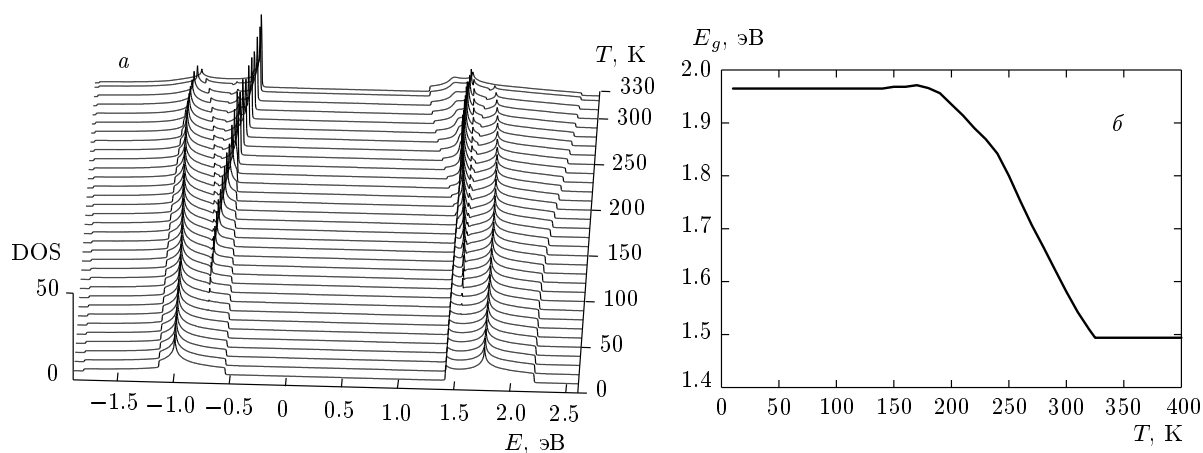


Рис. 3. Температурная зависимость плотности состояний (а), диэлектрической щели E_g (б)

щается в локальный минимум, а в зоне проводимости, наоборот, минимум $k = (\pi, 0)$ трансформируется в максимум (рис. 2г). Такие изменения являются следствием тенденции к вырождению дисперсии в точках k -пространства, принадлежащих границе антиферромагнитной зоны Бриллюэна, в точке перехода в парамагнитную фазу. При $T = T_N$ однодырочные состояния с обеими проекциями спина становятся равновероятными и зонная структура принимает форму, характерную для парамагнитной фазы с максимумами в окрестности $k = (\pi, \pi)$ (рис. 2д). На рис. 2а–д хорошо видно перераспределение спектрального веса с температурой от исходной антиферромагнитной зоны к парамагнитной зоне с образованием теневой зоны со слабой интенсивностью.

Трансформация потолка валентной зоны и дна зоны проводимости с ростом температуры естественно сопровождается изменением плотности состояний. Выше $T = 90$ К начинает формироваться новый пик как в валентной зоне, так и в зоне проводимости (рис. 3а). Интенсивность этих пиков растет с температурой. Кроме того, меняются ширина обеих зон и величина диэлектрической щели E_g . В интервале от нуля до $T = 170$ К происходит незначительное увеличение щели, связанное со сближением однодырочных уровней с разными спинами. При $T > 170$ К в зоне проводимости происходят понижение энергии квазичастиц с волновыми векторами, близкими к $k = (0, 0)$, и перенос на них спектрального веса. Энергия потолка валентной зоны, наоборот, увеличивается. Все это приводит к уменьшению диэлектрической щели (рис. 3а, б). Минимальная величина E_g достигается в парамагнитной фазе. Тем не менее, диэлектрическая щель остается открытой на

всем интервале температур от нуля до T_N и немного выше, поскольку ее величина определяется энергией переноса заряда $\Delta = \varepsilon_p - \varepsilon_d$ и межатомным кулоновским взаимодействием V_{pd} . Таким образом, состояние диэлектрика с переносом заряда сохраняется в АФМ- и в ПМ-фазах, в отличие от зонных подходов с образованием щели за счет формирования волны спиновой плотности (ВСП) или LDA+U, где диэлектрическая щель также формируется за счет спинового расщепления. В сценариях ВСП и LDA+U выше T_N должно наблюдаться металлическое состояние, что противоречит экспериментам по La_2CuO_4 .

Ранее в экспериментах по измерению коэффициента отражения и ε_2 спектров в недопированном соединении La_2CuO_4 был замечен красный сдвиг пика, соответствующего возбуждению с переносом заряда между синглетом Жанга–Райса и УНВ, с ростом температуры [27–29]. В работе [27] при изменении температуры от $T = 122$ К до $T = 447$ К положение пика в ε_2 сдвигается на 0.22 эВ в область меньших энергий. В наших расчетах для такого же температурного изменения уменьшение диэлектрической щели ΔE_g происходит на 0.47 эВ, что по порядку величины соответствует экспериментальным данным. Небольшое расхождение, очевидно, говорит о влиянии температуры на электронную структуру посредством других механизмов. Среди таких механизмов можно выделить влияние температурного расширения на параметры взаимодействий в системе [29], температурную зависимость электрон-фононного взаимодействия, поляронные эффекты. Однако нет сомнений, что перестройка электронной структуры вследствие уменьшения намагниченности подрешеток с ростом T в

значительной степени обуславливает эффект уменьшения энергии межзонных возбуждений.

4. ЭВОЛЮЦИЯ ИЗОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ КОНТУРОВ С РОСТОМ ТЕМПЕРАТУРЫ

Расчет зависимости поверхности Ферми в допированном купрате от температуры представляет собой отдельную задачу и в данной работе не делается. Тем не менее качественное представление о такой эволюции можно получить в приближении модели жесткой зоны, как это было сделано при $T = 0$ К в работе [30]. На рис. 4а показаны сечения дисперсионной поверхности на энергии $E = -0.8$ эВ. Видно, что при температурах вплоть до $T = 260$ К сечения имеют вид дырочных карманов с центром в $k = (\pi/2, \pi/2)$. Сценарий поверхности Ферми в виде дырочных карманов реализуется для слабодопированных соединений p -типа, что подтверждается ARPES-экспериментами [31] и экспериментами по квантовым осцилляциям [32–34]. Размер карманов уменьшается с ростом T . При $T > 260$ К появляются электронные карманы со слабой интенсивностью вокруг точки $k = (\pi, 0)$ и $k = (0, \pi)$. Одновременно с этим дырочные карманы перестают сокращаться в размере и начинают вытягиваться к электронным карманам. Спектральный вес дырочных и электронных карманов переходит с одной их стороны на другую, так что при смыкании дырочных и электронных карманов в точке магнитного фазового перехода $T = T_N$ остается большой дырочный контур вокруг $k = (\pi, \pi)$. Кроме того, присутствует также теневой дырочный контур с центром в точке $k = (0, 0)$, однако он имеет слабую интенсивность и поэтому почти не виден. Поверхность Ферми при электронном допировании будет определяться изоэнергетическими контурами, полученными сечением дисперсионной поверхности в зоне проводимости. В случае $E = 1.6$ эВ изоэнергетический контур при $T = 0$ К имеет вид двух электронных карманов вокруг $k = (\pi, 0)$ и $k = (0, \pi)$, что согласуется с поверхностью Ферми в ARPES для слабодопированного соединения n -типа $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ [35]. С ростом температуры эти карманы вытягиваются в направлении точки $k = (\pi/2, \pi/2)$. В окрестности T_N появляется дырочный карман с центром в $k = (\pi/2, \pi/2)$. Полученное сечение качественно повторяет поверхность Ферми оптимально допированных купратов в экспериментах ARPES на $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ [35] и $\text{Sm}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ [36] и в расчетах спектров ARPES [37]. В точке фазового перехода

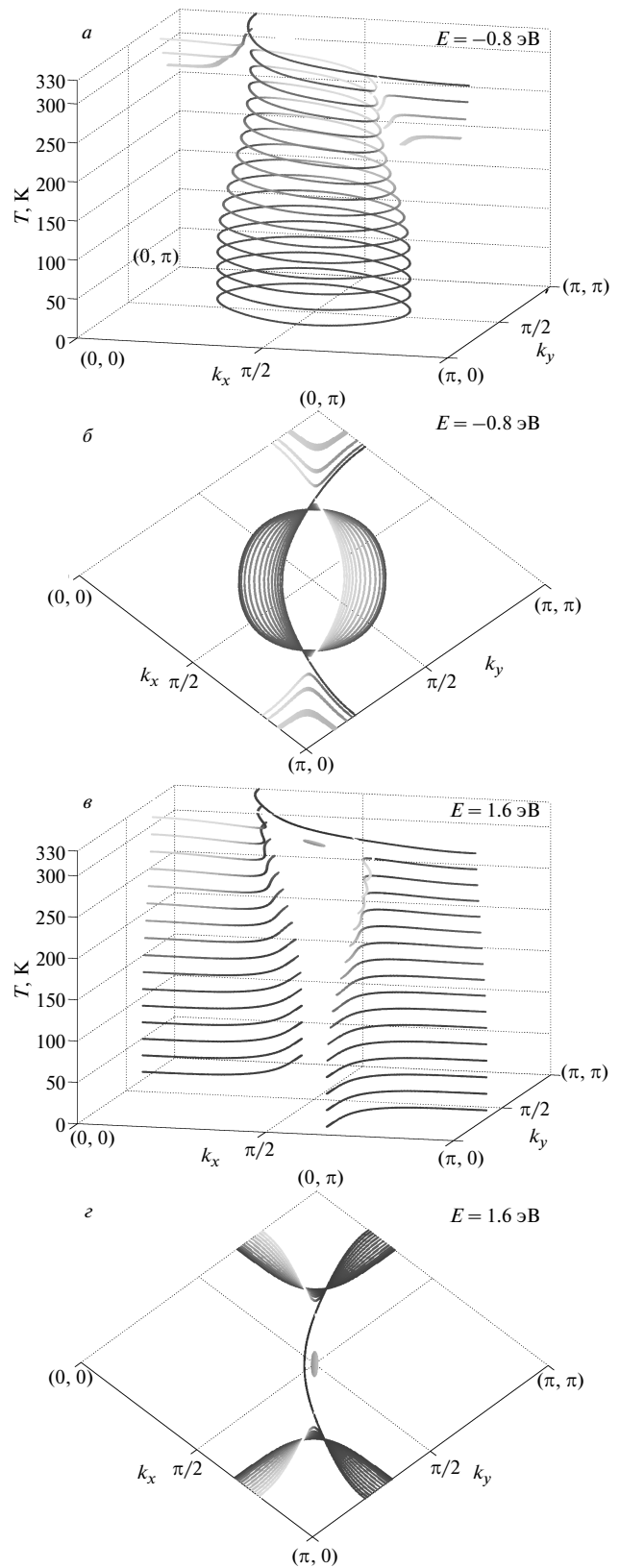


Рис. 4. Трансформация изоэнергетического контура в интервале (10–325) К для валентной зоны а, б и зоны проводимости в, г; б, г — вид сверху

два электронных и один дырочный карман превращаются в один большой электронный контур вокруг $k = (\pi, \pi)$. Схожая эволюция поверхности Ферми с допированием и температурой объясняется тем, что оба этих фактора меняют величину спиновой щели и заполнение основного и возбужденного уровней. В случае с допированием дополнительные носители разрушают спиновые корреляции и приводят к перераспределению спектрального веса по зонам, образованным возбужденными состояниями.

Эволюция изоэнергетического контура будет различна для разных частей дисперсионной поверхности. На рис. 5*a,b* показано изменение изоэнергетического контура вблизи потолка валентной зоны. Контур сечения дисперсионной поверхности на энергии $E = -0.56$ эВ образован отщепившейся узкой подзоной, которая имеет дисперсию, отличную от основной зоны. Для $T < 230$ К имеется маленький дырочный карман вокруг $k = (\pi/2, \pi/2)$ (рис. 5*a,b*). Карман смыкается при $T = 230$ К и далее до $T = 240$ К сечение попадает в диэлектрическую щель. В интервале $240 \text{ К} < T < 250 \text{ К}$ происходит трансформация от двух дырочных карманов, имеющих разную интенсивность, с центрами между точками $k = (0, 0)$, $(\pi/2, \pi/2)$, (π, π) к большим дырочным карманам и двум небольшим электронным карманам вокруг $k = (0, 0)$ и $k = (\pi, \pi)$.

Сечение дисперсионной поверхности в области дна зоны проводимости на энергии $E = 1.44$ эВ также показывает совершенно иное поведение с температурой (рис. 5*в,г*). При $T < 190$ К изоэнергетические контуры представляют из себя электронные карманы вокруг антинодальных точек $k = (\pi, 0)$ и $k = (0, \pi)$. Выше 190 К к ним добавляются электронные карманы вокруг $k = (0, 0)$ и $k = (\pi, \pi)$, которые сперва просто увеличиваются в размере, затем при $T = 230$ К меняют свою форму и кривизну. При $T = 250$ К электронные карманы сливаются, формируя тем самым дырочный карман вокруг $k = (\pi/2, \pi/2)$. Дырочный карман разрастается и после $T = 280$ К превращается в два электронных контура вокруг $k = (0, 0)$ и $k = (\pi, \pi)$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Применение метода LDA+GTV позволяет описать изменение электронной структуры недопированного однослойного купрата La_2CuO_4 с температурой. Рост температуры уменьшает средний спиновый момент элементарной ячейки и величину спиновой щели между локальными

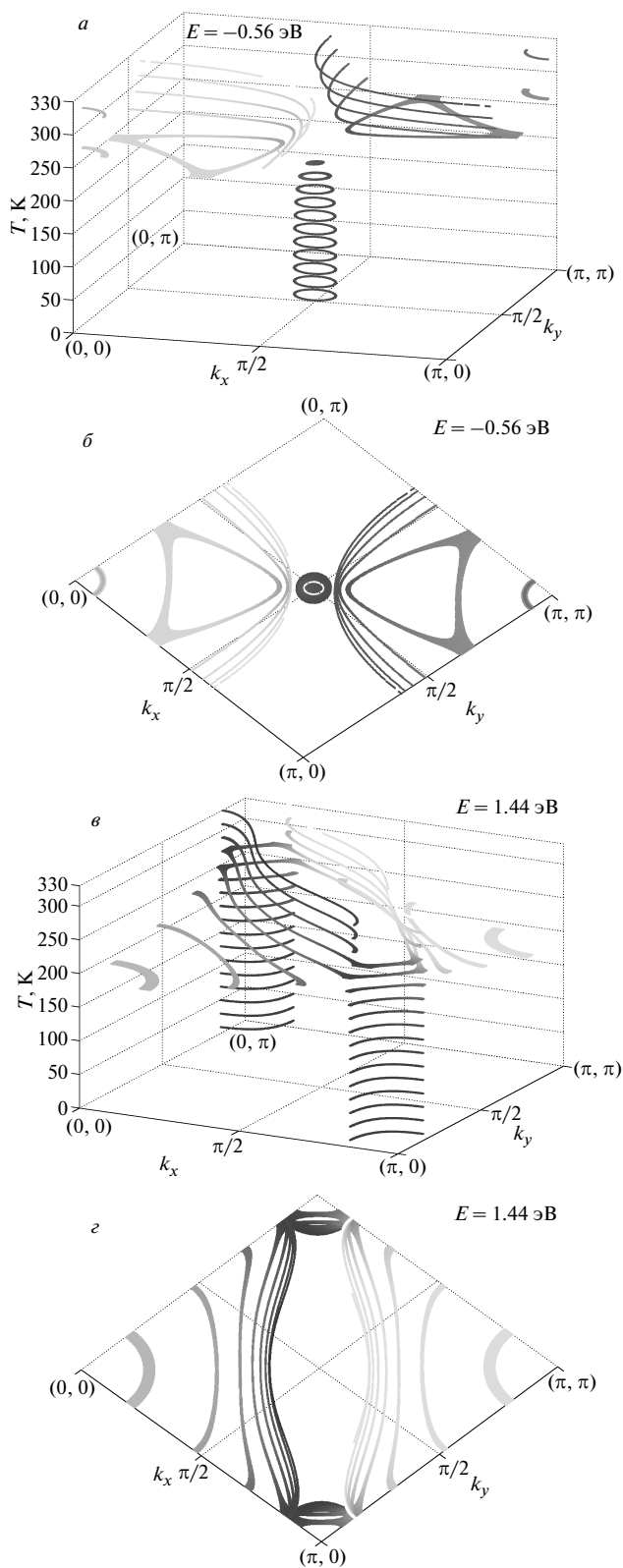


Рис. 5. Трансформация изоэнергетического контура при изменении температуры для энергии вблизи потолка валентной зоны (*a,b* — вид сверху) и дна зоны проводимости (*в,г* — вид сверху)

одночастичными состояниями с противоположными проекциями спина, а также увеличивает заселенность возбужденных состояний. Поэтому с ростом температуры меняется не только спиновое упорядочение, но также зонная структура. Перестройка электронной структуры включает в себя формирование новых зон на потолке валентной зоны и дне зоны проводимости, перераспределение спектрального веса, изменение ширины зон и величины диэлектрической щели. Магнитный фазовый переход из антиферромагнитного состояния в парамагнитное сопровождается трансформацией ЛНВ и УНВ с максимумами в точке $k = (\pi/2, \pi/2)$ к парам высокоинтенсивной и теневой зон, имеющим максимумы в окрестностях точек $k = (\pi, \pi)$ и $k = (0, 0)$. Несмотря на уменьшение диэлектрической щели, она остается открытой на всем интервале температур от нуля до T_N и выше. Таким образом, при изменении магнитного состояния соединение La_2CuO_4 остается диэлектриком.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 14-12-00061).

ЛИТЕРАТУРА

1. М. В. Садовский, УФН **171**, 540 (2001).
2. J. Chang, E. Blackburn, A. T. Holmes et al., Nat. Phys. **8**, 871 (2012).
3. G. Ghiringhelli, M. Le Tacon, M. Minola et al., Science **337**, 821 (2012).
4. E. Blackburn, J. Chang, A. H. Said et al., Phys. Rev. B **88**, 054506 (2013).
5. R. Comin, A. Frano, M. M. Yee et al., Science **343**, 390 (2014).
6. С. М. Варма, Phys. Rev. B **55**, 14554 (1997); Nature **468**, 184 (2010).
7. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
8. А. Ф. Барабанов, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев и др., ЖЭТФ **119**, 777 (2001).
9. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, ЖЭТФ **127**, 686 (2005).
10. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, ЖЭТФ **131**, 259 (2007).
11. В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, А. А. Борисов и др., ЖЭТФ **118**, 422 (2000).
12. М. М. Korshunov, V. A. Gavrichkov, S. G. Ovchinnikov et al., ЖЭТФ **126**, 642 (2004).
13. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **38**, 1569 (1960).
14. М. М. Korshunov and S. G. Ovchinnikov, Eur. Phys. J. B **57**, 271 (2007).
15. С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов, Е. И. Шнейдер, ЖЭТФ **136**, 898 (2009).
16. S. G. Ovchinnikov, E. I. Shneyder, and M. M. Korshunov, J. Phys.: Condens. Matter **23**, 045701 (2011).
17. Е. И. Шнейдер, С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов и др., Письма в ЖЭТФ **96**, 381 (2012).
18. T. Yoshida, M. Hashimoto, and S. Ideta, Phys. Rev. Lett. **103**, 037004 (2009).
19. V. A. Gavrichkov, A. A. Borisov, and S. G. Ovchinnikov, Phys. Rev. B **64**, 235124 (2001).
20. М. М. Korshunov, V. A. Gavrichkov, S. G. Ovchinnikov et al., Phys. Rev. B **72**, 165104 (2005).
21. В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, ФТТ **50**, 1037 (2008).
22. Л. Н. Булаевский, Э. Л. Нагаев, Д. И. Хомский, ЖЭТФ **5**, 1562 (1968).
23. K. J. von Szczepanski, P. Horsch, W. Stephan et al., Phys. Rev. B **41**, 2017 (1990).
24. D. Poilblanc and E. Dagotto, Phys. Rev. B **42**, 4861 (1990).
25. A. F. Barabanov, R. O. Kuzian, and L. A. Maksimov, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 9129 (1991).
26. R. O. Kuzian, R. Hayn, A. F. Barabanov et al., Phys. Rev. B **58**, 6194 (1998).
27. J. P. Falck, A. Levy, M. A. Kastner et al., Phys. Rev. Lett. **69**, 1109 (1992).
28. M. A. Kastner, R. J. Birgeneau, G. Shirane et al., Rev. Mod. Phys. **70**, 897 (1998).
29. H. S. Choi, Y. S. Lee, T. W. Noh et al., Phys. Rev. B **60**, 4646 (1999).
30. L. Hozoi, M. S. Laad, and P. Fulde, Phys. Rev. B **78**, 165107 (2008).
31. J. Meng, G. Liu, W. Zhang et al., Nature **462**, 335 (2009).
32. N. Doiron-Leyraud, C. Proust, D. LeBoeuf et al., Nature **447**, 565 (2007).
33. E. A. Yelland, J. Singleton, C. H. Mielke et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 047003 (2008).
34. A. F. Bangura, J. D. Fletcher, A. Carrington et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 047004 (2008).
35. N. P. Armitage, F. Ronning, D. H. Lu et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 257001 (2002).
36. S. R. Park, Y. S. Roh, Y. K. Yoon et al., Phys. Rev. B **75**, 060501(R) (2007).
37. B. Valenzuela and E. Bascones, Phys. Rev. B **78**, 174522 (2008).