

# ВЛИЯНИЕ СКОШЕННОГО АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО ПОРЯДКА НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ В $t$ - $J^*$ -МОДЕЛИ В РАМКАХ КЛАСТЕРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

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

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

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

Поступила в редакцию 4 апреля 2016 г.

Электронная структура рассчитывалась в двумерной  $t$ - $J^*$ -модели со скошенным во внешнем магнитном поле антиферромагнитным упорядочением спиновых моментов в рамках кластерной теории возмущений. В случае нулевого внешнего поля получена эволюция поверхности Ферми с допированием  $n$ -типа, находящаяся в хорошем согласии с экспериментальными данными по купратным сверхпроводникам. Показано, что учет ближних корреляций может приводить к немонотонной зависимости распределения спектрального веса на уровне Ферми от внешнего магнитного поля. В случае дырочного допирования такие изменения можно ожидать при экспериментально достижимых полях, в отличие от случая электронного допирования.

DOI: 10.7868/S0044451016090169

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Сильнокоррелированным электронным системам свойственна взаимозависимость электронной и магнитной (а также зарядовой) структур, проявляющаяся особенно заметным образом при переходах системы между состояниями с различным спиновым или зарядовым упорядочением. В связи с этим особый интерес представляет связь между поверхностями Ферми, восстановленными из результатов экспериментов по фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) [1–5] и экспериментов по квантовым осцилляциям [6–14], выполненных на высокотемпературных сверхпроводниках. Данные ARPES касательно поверхностей Ферми купратов, как правило, согласуются с результатами расчетов в моделях сильных электронных корреляций. Частоты квантовых осцилляций, полученные при дырочном допировании  $p \approx 0.11$ , оказываются на порядок меньше, чем при  $p \approx 0.31$ . Схожий результат был получен в рамках теории возмущений в пределе сильной связи для

модели Хаббарда [15]. Однако, в отличие от ARPES, эксперименты по квантовым осцилляциям проводятся в присутствии сильных магнитных полей, достигающих значения более 60 Тл. Это означает, что электронная структура, наблюдаемая в этих двух группах экспериментов, может относиться к различным режимам. Например, сообщалось, что в магнитном поле имеет место возникновение дальнего зарядового порядка в соединениях  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$  и  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$  при величине дырочного допирования  $p \approx 1/8$  [16]. Данные по квантовым осцилляциям [17] для  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$  при допировании  $p \approx 0.11$  для поверхности Ферми с электронным карманом в нодальном направлении и двумя дырочными карманами вблизи него согласуются с расчетами в рамках фазы с волной зарядовой плотности [18].

Таким образом, представляет интерес исследование изменения электронной структуры сильнокоррелированных электронных систем во внешнем магнитном поле при фиксированном допировании, что и является предметом данной статьи. Если иметь в виду купраты, то ситуация при допировании  $p \gtrsim 0.05$  весьма сложна из-за присутствия несоизмеримого магнитного и зарядового порядков [19]. Мы сосредоточим внимание на случае дырочного до-

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

пирования  $p \lesssim 0.03$  и электронного допирования  $n \lesssim 0.15$ . В этих случаях имеется дальний АФМ-порядок или ближний, но со значительной корреляционной длиной [20, 21]. При таких обстоятельствах ожидается, что внешнее поле может воздействовать на электронную структуру посредством магнитной подсистемы, которая будет представлять собой скошенный во внешнем поле антиферромагнетик. Известно, что в  $t$ - $J$ -модели [22, 23] температура Нееля уменьшается при увеличении концентрации допирования и становится равной нулю. В частности, показано, что в случае дырочного допирования переход соответствует значениям для купратов [24]. В нашем подходе магнитный порядок является заранее заданным, и мы работаем при нулевой температуре, поэтому далее будем исследовать эволюцию электронной структуры с магнитным полем при тех фиксированных значениях допирования  $p$ - и  $n$ -типа, при которых типично наличие дальнего магнитного порядка в купратах.

В целом данная статья представляет собой продолжение работы [25], в которой исследовалась эволюция электронной структуры  $t$ - $J$ -модели при дырочном допировании во внешнем магнитном поле в рамках упомянутого магнитного механизма и было показано, что изменение магнитного поля на значения около  $0.01J$  (примерно 10 Тл) не приводит, как правило, к существенной модификации электронной структуры — заметная же эволюция происходит при изменениях примерно в интервале  $0.1$ – $1J$ . Однако вблизи некоторого значения поля  $h_c$ , которое зависит от параметров модели и может иметь значение около  $0.01J$ , может происходить резкое изменение распределения спектрального веса на поверхности Ферми. Исходя из этого, поверхности Ферми, соответствующие режимам ARPES и экспериментам по квантовым осцилляциям, могут различаться заметным образом. В настоящей работе подробно обсуждается причина такого явления, а именно, кроссовер в многоэлектронных состояниях, формирующих зонную структуру квазичастиц. Мы исследуем влияние магнитного порядка на электронную структуру купратов  $n$ - и  $p$ -типов в рамках полной эффективной низкоэнергетической модели для модели Хаббарда во втором порядке теории возмущений по параметру  $t/U$ , т. е.  $t$ - $J$ -модели с трехцентровыми взаимодействиями [23] (для которой мы используем обозначение  $t$ - $J^*$ ). В парамагнитной фазе влияние трехцентровых слагаемых отражается в основном на высокоэнергетической части спектра [26]. Однако в присутствии антиферромагнитного фона вероятность перескоков для ближайших соседей умень-

шается, так как такие перескоки требуют переворота спина. Ближайшие трехцентровые коррелированные перескоки, наоборот, не возмущают антиферромагнитное окружение, поскольку они происходят в АФМ-подрешетке. Тогда в АФМ-случае не исключено существенное влияние трехцентровых взаимодействий на энергетическую структуру и в области малых энергий.

Статья построена следующим образом. В разд. 2 дано краткое описание метода кластерной теории возмущений в представлении  $X$ -операторов для  $t$ - $J^*$ -модели и приближения, используемого нами для рассмотрения магнитной фазы. В разд. 3 обсуждаются кроссоверы в многоэлектронных состояниях, способные вызывать быстрые изменения распределения спектрального веса. Разделы 4 и 5 содержат результаты касательно влияния внешнего магнитного поля на электронную структуру  $t$ - $J^*$ -модели соответственно для  $p$ - и  $n$ -типов допирования. В случае с допированием электронного типа мы также обсудим эволюцию электронной структуры с допированием при нулевом поле. В заключение обсуждаются основные выводы настоящей работы.

## 2. МОДЕЛЬ И МЕТОД

Поскольку в данной работе влияние магнитного поля на электронную структуру учитывается исключительно посредством магнитного порядка, мы учитываем зеемановское слагаемое и пренебрегаем орбитальным вкладом. С учетом этого обстоятельства запишем гамильтониан  $t$ - $J^*$ -модели во внешнем магнитном поле

$$H_{t-J^*} = H_{t-J} + H_3 + H_Z, \quad (1)$$

$$H_{t-J} = - \sum_{i,j,\sigma} \left( t_{i,j} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \text{э.с.} \right) + \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right), \quad (2)$$

$$H_3 = - \frac{J}{4} \sum_{i,\sigma} \sum_{\delta \neq \delta'} \left( c_{i+\delta,\sigma}^\dagger n_{i,\bar{\sigma}} c_{i+\delta',\sigma} - c_{i+\delta,\sigma}^\dagger c_{i,\bar{\sigma}}^\dagger c_{i,\sigma} c_{i+\delta',\bar{\sigma}} \right), \quad (3)$$

где  $c_{i,\sigma}^\dagger$  и  $c_{i,\sigma}$  — квазифермиевские операторы рождения и уничтожения частицы со спином  $\sigma$  на узле  $i$ ,  $\bar{\sigma} = -\sigma$ ,  $t_{i,j}$  — интеграл перескока,  $J$  — косвенный обменный интеграл, связанный с параметром кулоновского отталкивания в модели Хаббарда как  $J = 4t^2/U$ ,  $\mathbf{S}_i$  — оператор спина,

$$H_Z = -h \sum_i S_i^z,$$

где  $h$  — энергия магнитного поля.

Для расчета спектрального веса в  $t$ - $J^*$ -модели применим кластерную теорию возмущений (СРТ) на основе метода точной диагонализации [27, 28]. Идея СРТ заключается в учете ближних взаимодействий в рамках конечного кластера, а дальних — по теории возмущений. В рамках СРТ исходная решетка покрывается трансляциями кластера выбранных размера и формы. Затем проводится точная диагонализация кластера и вычисляется кластерная функция Грина. Далее межкластерные взаимодействия учитываются по теории возмущений в приближении Хаббард-I, после чего осуществляется переход к парамагнитной зоне Бриллюэна с помощью фурье-преобразования, причем на этом шаге используется длинноволновое приближение для получения функции Грина решетки  $G(\mathbf{k}, \omega)$  [28]. Мы используем версию СРТ на основе техники  $X$ -операторов — так называемую кластерную теорию возмущений с контролируемым спектральным весом (NC-СРТ) [29, 30]. Отличительная черта NC-СРТ заключается в том, что в ее рамках учитывается полное гильбертово пространство кластера, что позволяет контролировать полный спектральный вес квазичастиц на всех этапах вычислений. Для того чтобы качественным образом учесть наличие скошенного антиферромагнетизма, мы задаем соответствующую симметрию кластерных состояний с помощью процедуры введения среднего поля, аналогично тому, как это было сделано в работах [31, 32] для модели Гейзенберга.

Мы покрываем решетку трансляциями квадратного кластера  $2 \times 2$  параллельно векторам трансляций исходной квадратной решетки. Кластер из четырех узлов позволяет учесть основные качественные особенности распределения спектрального веса. При этом показано, что в парамагнитном случае пятиузельный кластер позволяет достичь почти количественного согласия для распределения спектрального веса в модели Хаббарда с результатами в рамках квантового метода Монте-Карло [33]. Естественно ожидать, что используемое приближение Хаббард-I в АФМ-случае более эффективно, чем в парамагнитной фазе из-за большего вклада эффектов дальнего действия.

Для антиферромагнетика, находящегося во внешнем магнитном поле, направленном вдоль оси  $z$  перпендикулярно плоскости, имеются две компоненты намагниченности — АФМ-компонента в плоскости и постоянная составляющая вдоль поля.

Для удобства ось  $x$  направлена вдоль АФМ-компоненты ( $\langle S_i^y \rangle = 0$ ). Сначала перегруппируем слагаемые в гамильтониане (1):

$$H = \sum_f h_c(f) + \sum_{f,g} h_{cc}^1(f,g) + \sum_{f,g} h_{cc}^2(f,g) + \sum_{f,g,h} h_{ccc}(f,g,h), \quad (4)$$

где  $f$  и  $g$  — кластерные индексы,  $h_{cc}^2$  — гейзенберговская часть межкластерного взаимодействия,  $h_{ccc}$  включает трехцентровые перескоки, связывающие три кластера, в  $h_{cc}^1$  включены все остальные слагаемые гамильтониана. Для введения средних полей, действующих на кластер, преобразуем тождественно слагаемое  $h_{cc}^2$ :

$$\begin{aligned} & \frac{J}{2} \sum_{\substack{f \neq g \\ \langle ij \rangle}} (S_{f,i}^x S_{g,j}^x + S_{f,i}^y S_{g,j}^y + S_{f,i}^z S_{g,j}^z) \equiv \\ & \equiv \sum_{\substack{f \neq g \\ \langle ij \rangle}} \Delta h_{cc}^2(f,g) + \sum_f (\Delta_x(f) + \Delta_z(f)), \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{f \neq g \\ \langle ij \rangle}} \Delta h_{cc}^2(f,g) = & \frac{J}{2} \left[ (S_{f,i}^x - \langle S_{f,i}^x \rangle) (S_{g,j}^x - \langle S_{g,j}^x \rangle) + \right. \\ & \left. + S_{f,i}^y S_{g,j}^y + (S_{f,i}^z - \langle S_{f,i}^z \rangle) (S_{g,j}^z - \langle S_{g,j}^z \rangle) \right], \end{aligned} \quad (6)$$

$$\Delta_x(f) = \frac{J}{2} \left( 4\sigma_x^2 + 2\sigma_x \sum_{i=1}^4 (-1)^i S_{f,i}^x \right), \quad (7)$$

$$\Delta_z(f) = \frac{J}{2} \left( -4\sigma_z^2 + 2\sigma_z \sum_{i=1}^4 S_{f,i}^z \right).$$

В формулах (5)–(7) и далее индексы  $i$  и  $j$  пробегают по узлам в кластере, в формуле (7) определены параметры порядка  $\sigma_x = \langle S_i^x \rangle$  и  $\sigma_z = \langle S_i^z \rangle$ . Далее переопределим слагаемые в уравнении (4), для того чтобы включить среднее поле в локальную часть  $h_c$ :

$$\begin{aligned} h_c(f) & \rightarrow h_c(f; \sigma_x, \sigma_z) = h_c(f) + \Delta_x(f) + \Delta_z(f), \\ h_{cc}^2(f,g) & \rightarrow \Delta h_{cc}^2(f,g; \sigma_x, \sigma_z). \end{aligned} \quad (8)$$

Аналогично работам [31, 32] определим параметры  $\sigma_x$  и  $\sigma_z$  из системы

$$\begin{aligned} \sigma_x & = \langle S_1^x \rangle_0, \\ \sigma_z & = \langle S_1^z \rangle_0, \end{aligned} \quad (9)$$

где использована пространственная симметрия кластера. Под «нулевым» средним в формуле (9) понимается усреднение по гамильтониану  $h_c$ .

Далее мы следуем стандартной схеме метода NC-CPT [29, 30]. Определим  $X$ -операторы  $X^\alpha \equiv X^{pq} = |p\rangle \langle q|$  на полном базисе кластерных состояний. Таким образом, электрон представлен как линейная комбинация хаббардовских фермионов, каждый из которых описывает локальное возбуждение из начального состояния  $|q\rangle$  с  $n$  электронами в конечном состоянии  $|p\rangle$  с  $n - 1$  электронами. Работая в этом представлении, мы можем существенно снизить количество учитываемых собственных состояний в локальном гильбертовом пространстве. Для контроля этой процедуры мы используем правило сумм, отражающее полный спектральный вес электрона. Обозначим величину, определяющую спектральное правило сумм, как  $W_\sigma$ :

$$W_\sigma = \left\langle \left[ c_{\mathbf{k},\sigma}, c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \right]_+ \right\rangle = n^0 + n^\sigma = \frac{1 \pm 2\sigma_z + n^0}{2}, \quad (10)$$

где знак «+» в числителе соответствует проекции спина по полю и «-» — против поля,  $n^0$  — концентрация незаполненных узлов и  $n^\sigma$  — концентрация частиц со спином  $\sigma$ . Введем величину  $f_{i,\sigma}$ , для того чтобы сохранить только те хаббардовские фермионы, которые имеют значительный спектральный вес, и таким образом уменьшить вычислительное время значительным образом:

$$f_{i,\sigma} = \sum_\alpha |\gamma_{i,\sigma}(\alpha)|^2 F(\alpha), \quad (11)$$

где в суммировании участвуют только те переходы, которые мы сохраняем,  $\gamma_{i,\sigma}$  — матричные элементы операторов  $c_{i\sigma}$  в представлении  $X$ -операторов и  $F(\alpha)$  — фактор заполнения:

$$F(\alpha) \equiv F(p, q) = \langle X^{pp} \rangle + \langle X^{qq} \rangle. \quad (12)$$

При учете всех переходов в (11)  $f_{i,\sigma} = W_\sigma$ . В данной работе  $f_{i,\sigma} \geq W_\sigma - 0.001$ .

Как обычно в CPT, межкластерные взаимодействия рассматриваются в приближении Хаббард-I. Функция Грина

$$D_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = \langle \langle X_{\tilde{\mathbf{k}}}^\alpha | X_{\tilde{\mathbf{k}}}^{-\beta} \rangle \rangle_\omega,$$

определенная в редуцированной зоне Бриллюэна, вычисляется из матричного уравнения вида

$$D^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = [D^0(\omega)]^{-1} - T(\tilde{\mathbf{k}}) - T^*(\tilde{\mathbf{k}}) - V, \quad (13)$$

где  $D^0(\omega)$  — кластерная функция Грина, матрицы  $T(\tilde{\mathbf{k}})$  и  $T^*(\tilde{\mathbf{k}})$  — результат расщепления функций Грина, возникающих при вычислении коммутаторов с кинетическим слагаемым и членом, ответственным за трехцентровые перескоки между двумя кластерами, матрица  $V$  возникает аналогичным

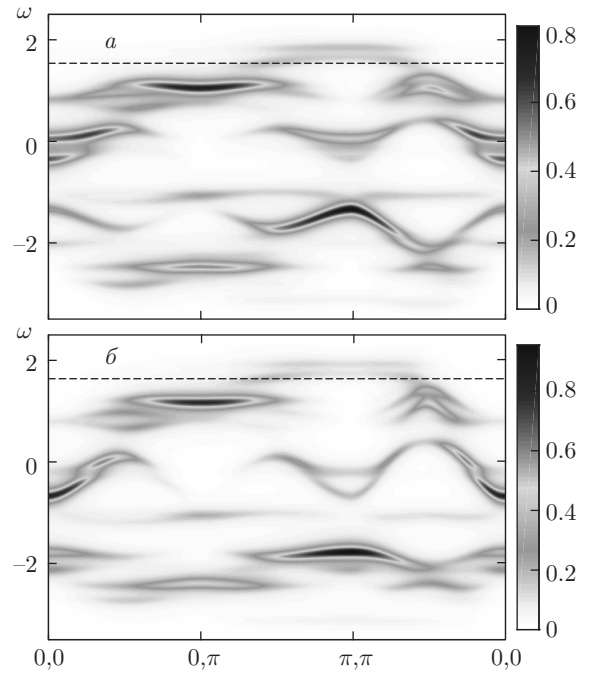


Рис. 1. Электронная спектральная функция вдоль симметричных направлений первой зоны Бриллюэна в моделях  $t$ - $J$  (а) и  $t$ - $J^*$  (б) при  $t' = t'' = 0$ ,  $J = 0.25t$ . Значения параметров порядка:  $\sigma_x \approx 0.41$ ,  $\sigma_z = 0$ . Здесь и ниже на подобных графиках штриховой линией обозначено положение уровня Ферми, а также использовано уширение в форме лоренциана с полушириной  $\delta = 0.1t$

образом из обменного вклада и трехцентровых перескоков, связывающих три кластера. Электронная функция Грина в парамагнитной зоне Бриллюэна восстанавливается по формуле [28]

$$G_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{N_c} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i,j=1}^{N_c} \gamma_{\sigma i}(\alpha) \gamma_{\sigma j}^*(\beta) \times e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega), \quad (14)$$

где  $N_c$  — количество узлов в кластере.

На рис. 1 приведено сравнение полученного распределения спектрального веса без учета трехцентровых коррелированных перескоков и с их учетом при нулевом магнитном поле. Здесь и в дальнейшем мы измеряем энергию квазичастиц  $\omega$  в единицах  $|t|$ , где  $t$  — интеграл перескока между ближайшими соседями, и учитываем, что  $|t| \sim 0.25$ – $0.4$  эВ [3, 5]. Также мы учитываем перескоки между вторыми  $t'$  и третьими  $t''$  соседями. Дельта-функцию в полюсах функции Грина мы моделируем лоренцианом с конечной полушириной  $\delta$  для представления распределений спектрального веса в виде, схожем с изображением результатов ARPES. В целом электронную

структуру в нижней (или верхней) хаббардовской зоне можно представить как расщепленную на две подзоны, в согласии с результатами квантового метода Монте-Карло [34]. Низкоэнергетическая часть электронной структуры, представленной на рис. 1, рассчитанная как в  $t$ - $J$ -, так и  $t$ - $J^*$ -модели, имеет характерные признаки дисперсии при наличии спиновых флуктуаций [35–41]. Как и в парамагнитной фазе, главные различия между результатами с учетом трехцентровых взаимодействий и без их учета проявляются на высокоэнергетическом масштабе, и мы не видим кардинальных изменений в низкоэнергетической структуре и в присутствии антиферромагнетизма. Однако стоит отметить, что различия в распределении веса могут сказываться значительным образом на положении уровня Ферми и, следовательно, на виде ферми-поверхности. Описанное различие проявляется в данной работе, тем не менее основные выводы статьи [25] сохраняются, как будет показано далее.

### 3. КРОССОВЕРЫ В МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЯХ

Электронная структура в наших расчетах зависит от параметров порядка, которые определяются самосогласованным образом для отдельного кластера и влияют на кластерные волновые функции, которые, в свою очередь, определяют электронную структуру. Рассмотрим разложение волновой функции вида

$$|n\rangle = \sum_{s,m,q} \tilde{c}_{sm}^q |s,m\rangle_q = \sum_{s,m} c_{sm} |s,m\rangle, \quad (15)$$

где  $|n\rangle$  — какая-либо собственная функция гамильтониана кластера,  $s$  и  $m$  — значения полного спина кластера и проекции на ось  $z$ ,  $|s,m\rangle_q$  — собственные волновые функции кластерных операторов  $\mathbf{S}^2$  и  $S^z$  (под «кластерным» оператором мы подразумеваем соотношение  $\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{S}_i$ , где суммирование идет по узлам в кластере), индекс  $q$  связан с вырождением по  $s$  и  $m$  вследствие геометрии кластера.

Зависимость электронной структуры кластера в подпространстве с тремя частицами имеет отличительную особенность — пересечение нижних уровней при величине магнитного поля  $h \approx 1J$  в случае учета только ближайших перескоков (см. рис. 2). Как видно из рис. 3, при этом происходит переход из низкоспинового состояния с доминирующей компонентой  $|0.5, 0.5\rangle$  в высокоспиновое, когда основной вклад вносит компонента  $|1.5, 1.5\rangle$ . При значениях

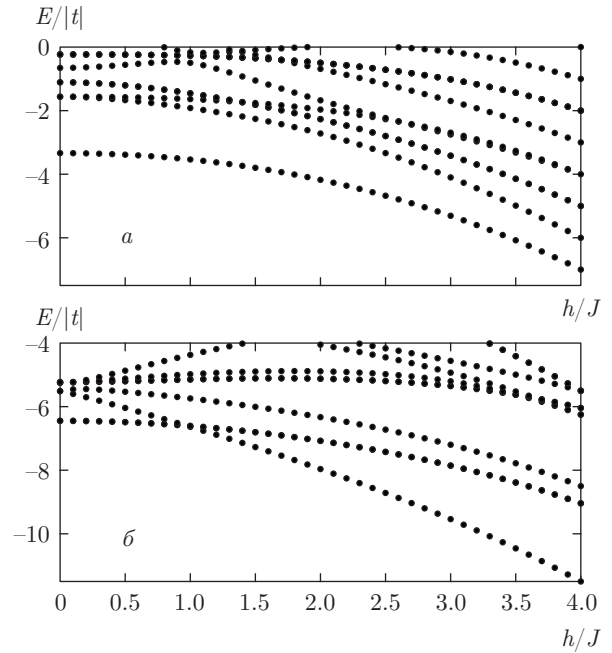


Рис. 2. Зависимость низкоэнергетической части электронной структуры кластера от магнитного поля в секторах гильбертова пространства с четырьмя (а) и тремя (б) частицами,  $J = 0.333t$ ,  $t' = t'' = 0$ ,  $p = 0$

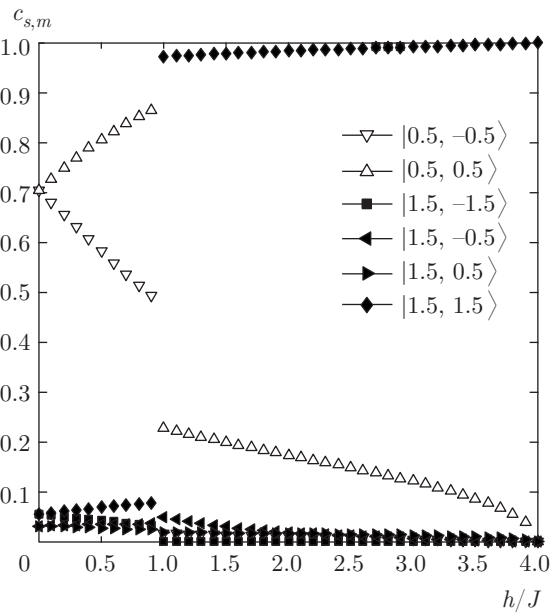


Рис. 3. Коэффициенты  $c_{sm}$ , определенные в (15), для волновой функции основного состояния в подпространстве с тремя электронами на кластер,  $J = 0.333t$ ,  $t' = t'' = 0$ ,  $p = 0$

поля  $h < h_c$  основное состояние в данном секторе вырождено двукратно, а при  $h > h_c$  не вырождено. Данный эффект может вызвать немонотонное изменение электронной структуры квазичастиц. В нашем случае он связан с учетом ближних корреляций в присутствии среднего поля, действующего на кластер. В кластере  $2 \times 2$  возможен учет ближайших и следующих за ближайшими соседей. Поэтому на значение  $h_c$  влияют параметры  $t'$  и  $J$ : при увеличении амплитуды вторых перескоков и фиксированном значении обменного интеграла  $h_c$  уменьшается в случае  $p$ -типа и увеличивается для  $n$ -типа. Выбирая наборы параметров модели, характерных для купратов  $p$ -типа, мы можем получить значения поля  $h_c \sim 0.01J \sim 10$  Тл и, соответственно, ожидать значительных изменений поверхности Ферми в этой области полей. Для параметров, являющихся адекватными для  $n$ -типа, поле кроссовера оказывается чрезмерно высоким ( $h_c \sim 1J \sim 1000$  Тл), если иметь в виду значения, соответствующие экспериментально достижимым полям.

#### 4. ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ, $p$ -ТИП

Рассмотрим эволюцию электронной структуры в нашем подходе при допировании  $p$ -типа. Для определенности мы используем в этом разделе типичное для  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  значение интеграла перескока вторых соседей  $t' = -0.15t$  [3, 42]. Если выбрать значение обменного интеграла  $J = 0.25t$ , то поле кроссовера приобретает значение  $h_c \approx 0.02J$ , что представляет интересный с точки зрения доступности в эксперименте случай. Значение дырочного допирования в этом разделе будем сохранять равным  $p = 0.02$ .

В целях полноты изложения сперва упомянем основные закономерности изменения распределения спектрального веса в зависимости от перестройки магнитной структуры под действием внешнего поля, рассчитанные в  $t$ - $J^*$ -модели (см. рис. 4). Качественным образом они полностью совпадают с тем, что мы наблюдали без учета трехцентровых перескоков [25]. При значении поля  $4J$ , когда ферромагнитное насыщение достигнуто [43], для проекции со спином вверх наблюдается присущий пространственно-однородной фазе закон дисперсии с шириной зоны  $8t$  и равномерным распределением спектрального веса по всей зоне; для проекции со спином вниз имеется узкая зона с малым спектральным весом на уровне Ферми (см. рис. 4). При меньшем поле, на-

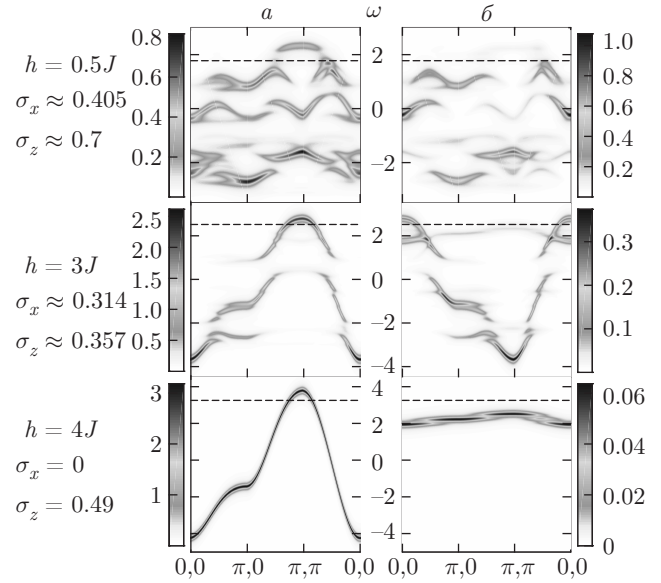
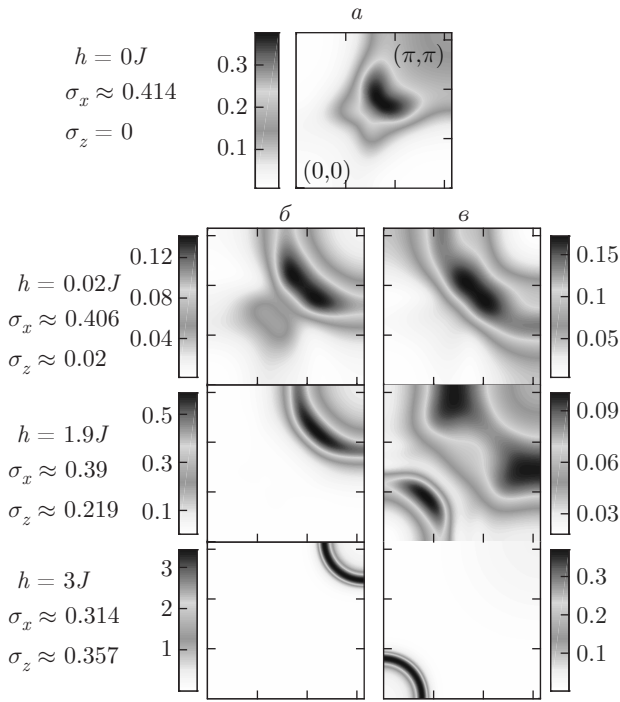


Рис. 4. Электронная спектральная функция вдоль симметричных направлений первой зоны Бриллюэна при различных значениях магнитного поля для проекции спина вверх (а) и вниз (б). Использованы параметры  $t' = -0.15t$ ,  $t'' = 0.1t$ ,  $J = 0.25t$ ,  $p = 0.02$

пример  $h = 3J$ , электронная дисперсия подвергается модификации за счет подмешивания различных спиновых состояний. При этом для спина вниз она имеет вид, схожий с теневой подзоной двухподрешеточной системы. Распределение спектрального веса и дисперсия при  $h = 0.5J$  и нулевом поле имеют качественное сходство.

Модификация спектрального веса на уровне Ферми в магнитном поле приведена на рис. 5. При нулевом поле имеется распределение с выраженным максимумом в нодальном направлении ( $(0, \pi) \rightarrow (\pi, \pi)$ ). Можно условно охарактеризовать распределение такого типа как «карман», в силу того, что оно напоминает распределение спектрального веса для ферми-кармана, рассчитанное со значительным уширением спектральных линий [30]. Следует отметить, что как и в ARPES, полученные нами ферми-поверхности являются результатом усреднения по энергетическому интервалу вблизи уровня Ферми и не являются простым следствием единственной изоэнергетической поверхности на уровне Ферми (см. описание к рис. 5). С другой стороны, при поле  $h \sim 3J$  мы фактически имеем карманы вокруг точки  $(\pi, \pi)$  для спина вверх и  $(0, 0)$  для спина вниз. Спектральный вес распределен равномерно вдоль границ карманов и различается на порядок для двух проекций. Увеличение маг-



**Рис. 5.** Распределение спектрального веса на уровне Ферми в первом квадранте зоны Бриллюэна при нулевом внешнем поле для одной проекции спина (а), при различных значениях поля для проекции спина вверх (б) и вниз (в) при  $t' = -0.15t, t'' = 0.1t, J = 0.25t$ . Здесь и далее на подобных графиках использовано уширение в форме лоренциана с полушириной  $\delta = 0.04t$ , спектральный вес усреднен по окну энергии шириной  $[-1.5\delta, 1.5\delta]$

нитного поля до значения насыщения качественно не меняет поверхность Ферми вверх, но для спина вниз вес на поверхности Ферми практически исчезает (см. рис. 4). В промежутке от  $h = 0J$  до  $h \sim 3J$  происходит постепенное сглаживание распределения спектрального веса. Отметим, что распределение для доминирующей компоненты спина различается незначительным образом для приведенных нами значений  $h = 0.02J$  и  $h = 1.9J$ . Для спина вниз существенных изменений не наблюдается в диапазоне полей от  $h = 0.02J$  до  $h \sim 0.2J$ . Тем не менее, вследствие кроссовера кластерных состояний, обсуждавшегося нами в разд. 3, при увеличении поля с  $h = 0J$  до  $h = 0.02J$  наблюдается резкое изменение распределения спектрального веса вдоль антинодального направления ( $(0, \pi) \rightarrow (\pi, \pi)$ ) для обеих компонент, которое для проекции вдоль поля качественно можно охарактеризовать как переход от распределения типа «карман» к арочному типу. Мы предполагаем, что в случае, если схожие немонотонные изменения имеют место в

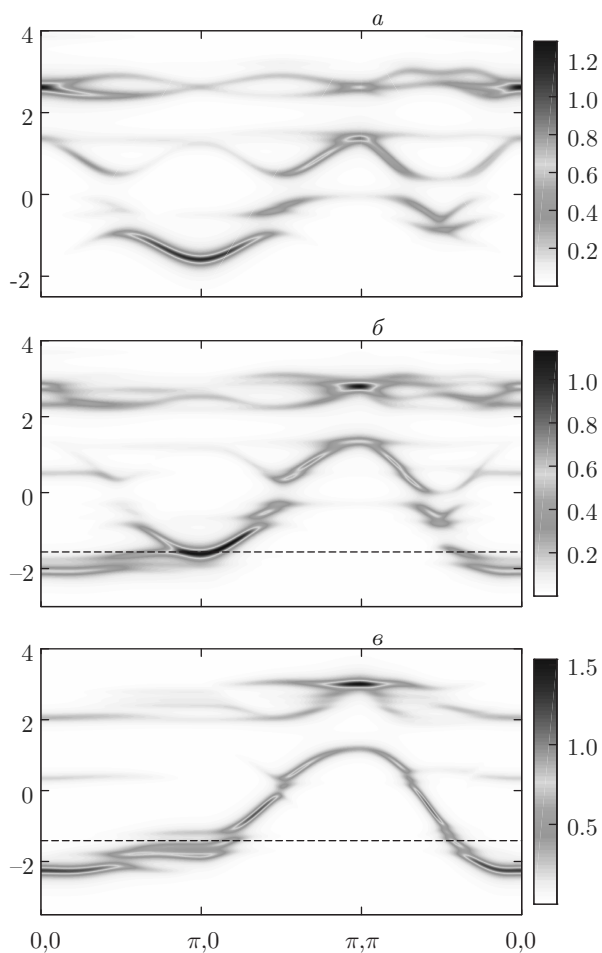
легко допированных купратах дырочного типа, может существовать возможность обнаружить их в транспортных измерениях.

### 5. ВЛИЯНИЕ ДОПИРОВАНИЯ И МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ, $n$ -ТИП

Ввиду того, что купраты  $n$ -типа имеют антиферромагнитный порядок в широкой области допирования вплоть до оптимального  $n \sim 0.15$ , рассмотрим эволюцию электронной структуры с допированием при нулевом магнитном поле. В данном разделе мы используем параметры перескока, типичные для соединения  $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ :  $t' = -0.2t, t'' = 0.1t$  [5], значение обменного интеграла выберем равным  $0.333J$ , т. е. порядка  $0.1$  эВ.

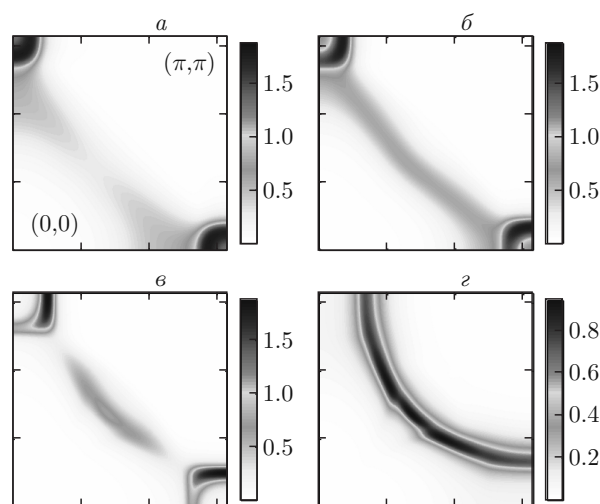
Основные черты распределения спектрального веса с допированием и без него проиллюстрированы на рис. 6. При  $n = 0$  дно зоны находится вблизи точки  $(\pi, 0)$ , имеет наибольший спектральный вес и играет основную роль в образовании ферми-поверхности при малом допировании. Несколько менее интенсивным является сегмент дисперсии вблизи  $(\pi, \pi)$ . При допировании возникает плоская квазичастичная зона под уровнем Ферми. В целом приведенное распределение веса в нижней подзоне верхней хаббардовской зоны ( $\omega \sim -2 \div 2$ ) имеет качественное сходство с распределениями веса в верхней хаббардовской зоне, полученными в рамках динамической теории среднего поля (DMFT) для многозонных моделей купратов  $n$ -типа [44, 45]. Отметим, что область вблизи энергий  $\omega \sim 0$  и вдоль направлений  $(\pi, 0) \rightarrow (\pi, \pi)$  и  $(\pi, \pi) \rightarrow (\pi/2, \pi/2)$ , где отчетливо заметно расщепление дисперсии на отдельные ветви, соответствует областям с выраженным затуханием квазичастичной дисперсии в DMFT-расчетах [44]. Из результатов расчета для допирования  $n = 0.2$  (рис. 6в), когда дальний порядок отсутствует, следует, что выпуклый книзу фрагмент дисперсии вблизи  $(\pi, 0)$  (см. рис. 6а,б) отсутствует, щель в окрестности  $(\pi/2, \pi/2)$  практически закрылась.

Эволюция поверхности Ферми с допированием при нулевом внешнем магнитном поле приведена на рис. 7. При допировании  $n = 0.05$  основной вклад в спектральный вес на поверхности Ферми вносят электронные карманы вблизи точек  $(\pi, 0), (0, \pi)$ . Дальнейшее увеличение значения допирования вплоть до оптимального (см рис. 7а-в) приводит к увеличению спектрального веса от дырок



**Рис. 6.** Электронная спектральная функция вдоль симметричных направлений первой зоны Бриллюэна в случае нулевого внешнего поля при нулевом электронном допировании и соответствующем антиферромагнитном параметре порядка  $\sigma_x \approx 0.438$  (а); при  $n = 0.1$ ,  $\sigma_x \approx 0.331$  (б); при  $n = 0.2$  без учета среднего поля ( $\sigma_x = 0$ ) (в)

вблизи  $(\pi/2, \pi/2)$ . При  $n = 0.15$  имеется типичный для оптимально допированных купратов электронного типа [5] провал спектрального веса вблизи так называемых «горячих точек». Полученные поверхности Ферми находятся в хорошем согласии с данными ARPES [5, 46]. Отметим, что для воспроизведения качественно непротиворечивой в отношении данных ARPES эволюции ферми-поверхности нам потребовался учет как дальнего магнитного порядка, так и ближних АФМ-флуктуаций. На рис. 7з также приведена поверхность Ферми, рассчитанная для случая с  $n = 0.2$ , при нулевом среднем поле для случая, когда дальний магнитный порядок должен быть разрушен. В этом случае мы имеем боль-

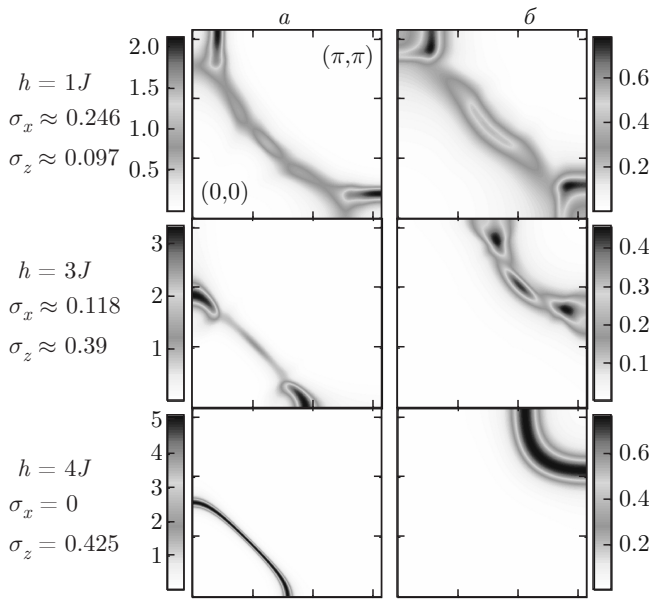


**Рис. 7.** Распределение спектрального веса на уровне Ферми в первом квадранте зоны Бриллюэна при нулевом внешнем поле. Допирование и соответствующий антиферромагнитный параметр порядка принимают значения  $n = 0.05$ ,  $\sigma_x = 0.384$  (а);  $n = 0.1$ ,  $\sigma_x = 0.331$  (б);  $n = 0.15$ ,  $\sigma_x = 0.28$  (в);  $n = 0.2$ , без учета среднего поля ( $\sigma_x = 0$ ) (г)

шую дырочную поверхность, в то время как при оптимальном допировании вклад в спектральный вес на уровне Ферми вносят носители как электронного, так и дырочного типов, причем при  $n = 0.15$  больший вклад на поверхности Ферми дают носители электронного типа. Исходя из результатов наших вычислений, мы предполагаем, что смена знака постоянной Холла в нормальном состоянии различных купратов  $n$ -типа при увеличении допирования [47–49] обусловлена изменением магнитного порядка.

Рассмотрим теперь эволюцию ферми-поверхности для  $n$ -типа с магнитным полем. Как было отмечено выше, при электронном допировании поле  $h_c$  лежит в области значений порядка  $J$ ; для данного набора параметров  $h_c \approx 1.88J$ . При этом оказывается, что скачок спектрального веса не вызывает значительного изменения поверхности Ферми. На рис. 8 проиллюстрировано изменение ферми-поверхности с магнитным полем. Отметим, что поля  $h \sim 0.1J \sim 100$  Тл практически не оказывают заметного влияния. На масштабах  $h \sim J$  поверхность постепенно трансформируется к карманам вокруг точек  $(0, 0)$  и  $(\pi, \pi)$  для проекции спина соответственно вверх и вниз. Данная закономерность проявляется во всей рассматриваемой области допирования.





**Рис. 8.** Распределение спектрального веса на уровне Ферми в первом квадранте зоны Бриллюэна при различных значениях внешнего поля  $h$  для проекции спина вверх (а) и вниз (б). Значение допирования  $n = 0.15$

### 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе было исследовано влияние магнитного поля на электронную структуру в  $t-J^*$ -модели посредством присущей сильно коррелированным системам взаимосвязи магнитной и электронной подсистем. Мы рассмотрели случаи как дырочного, так и электронного допирования. Исследованы кроссоверы в кластерных состояниях и показано, что они могут быть причиной немонотонной зависимости распределения спектрального веса на поверхности Ферми от внешнего магнитного поля. Также мы исследовали электронную структуру с допированием в случае  $n$ -типа. Сформулируем основные выводы данной работы.

При малом дырочном допировании существуют параметры модели, при которых мы получаем кроссовер в многоэлектронных состояниях и сопутствующее резкое изменение в распределении спектрального веса на уровне Ферми в магнитном поле  $h_c$ , соответствующем экспериментально достижимому. В данной работе мы рассмотрели случай с  $h_c \approx 0.02J \sim 20$  Тл. В случае электронного допирования поле  $h_c$  имеет значения порядка  $1J \sim 1000$  Тл и мы, как следствие, не видим значительных изменений поверхности Ферми в реалистичных полях. Подчеркнем в этой связи тот факт, что, в отличие от случая дырочного допирования, для допирова-

ния  $n$ -типа ферми-поверхности, восстановленные из экспериментов по квантовым осцилляциям [13] в диапазоне  $n = 0.15-0.17$ , качественным образом совпадают с поверхностями Ферми из ARPES [5,46]. Отметим, что, учет дальнего антиферромагнитного порядка наряду с ближними корреляциями позволил нам воспроизвести эволюцию ферми-поверхности купрата  $n$ -типа, находящуюся в согласии с экспериментальными данными ARPES и квантовых осцилляций [13]. Сравнение результатов расчета с учетом дальнего антиферромагнитного порядка и без него при нулевом внешнем магнитном поле позволяет сделать вывод о том, что первопричиной изменения знака постоянной Холла при переходе от оптимального допирования к передопированному состоянию [47-49] является разрушение антиферромагнетизма. Присутствие изменения знака постоянной Холла при переходе через квантовую критическую точку должно наблюдаться в рамках расчета с волной спиновой плотности (SDW) без учета ближних корреляций [50]. Заметим, что в нашем подходе данный результат не был очевиден заранее, так как полученные поверхности Ферми в магнитной фазе не являются простым следствием потенциала антиферромагнитной сверхрешетки, как в SDW-подходе, а получены исходя из свойств кластерных (многоэлектронных) состояний. Последнее обстоятельство позволяет получить нам несимметричное распределение спектрального веса относительно границы антиферромагнитной зоны Бриллюэна в согласии с ARPES.

Авторы благодарят В. В. Валькова за полезные обсуждения. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-12-00061).

### ЛИТЕРАТУРА

1. A. Damacelli, Z. Hussein, and Z. X. Shen, Rev. Mod. Phys. **75**, 473 (2003).
2. M. Plate, J. D. F. Mottershead, I. S. Elfimov et al., Phys. Rev. Lett. **95**, 077001 (2005).
3. T. Yoshida, X. J. Zhou, K. Tanaka et al., Phys. Rev. B **74**, 224510 (2006).
4. T. Yoshida, M. Hashimoto, S. Ideta et al., Phys. Rev. Lett. **103**, 037004 (2009).
5. M. Ikeda, T. Yoshida, A. Fujimori et al., Phys. Rev. B **80**, 014510 (2009).
6. N. Doiron-Leyraud, C. Proust, D. LeBoeuf et al., Nature **447**, 565 (2007).

7. D. LeBoeuf, N. Doiron-Leyraud, J. Levallois et al., *Nature* **450**, 533 (2007).
8. C. Jaudet, D. Vignolles, A. Audouard et al., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 187005 (2008).
9. S. E. Sebastian, N. Harrison, E. Palm et al., *Nature* **454**, 200 (2008).
10. B. Vignolle, A. Carrington, R. A. Cooper et al., *Nature* **455**, 952 (2008).
11. C. Jaudet, D. Vignolles, A. Audouard et al., *Phys. Rev. B* **82**, 140501(R) (2010).
12. P. M. C. Rourke, A. F. Bangura, T. M. Benseman et al., *New J. Phys.* **12**, 105009 (2010).
13. T. Helm, M. V. Kartsovnik, M. Bartkowiak et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 157002 (2009).
14. N. Barišič, S. Badoux, M. K. Chan et al., *Nat. Phys.* **9**, 761 (2013).
15. A. Sherman, arXiv:cond-mat/1503.04934.
16. T. Wu, H. Mayaffre, S. Krämer et al., *Nature* **477**, 191 (2011).
17. N. Doiron-Leyraud, S. Badoux, S. René de Cotret et al., *Nat. Comm.* **6**, 6034 (2015).
18. A. Allais, D. Chowdhury, and S. Sachdev, *Nat. Comm.* **5**, 5771 (2014).
19. J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe et al., *Nature* **375**, 561 (1995).
20. B. Keimer, N. Belk, R. J. Birgeneau et al., *Phys. Rev. B* **46**, 14034 (1992).
21. E. M. Motoyama, G. Yu, I. M. Vishik et al., *Nat. Lett.* **445**, 187 (2007).
22. L. N. Bulaevskii, E. L. Nagaev, and D. L. Khomskii, *ЖЭТФ* **27**, 836 (1968).
23. K. A. Chao, J. Spalek, and A. M. Oles, *J. Phys. C: Condens. Matter* **10**, L271 (1977).
24. J. L. Richard and V. Yu. Yushankhai, *Phys. Rev. B* **50**, 12927 (1994).
25. V. I. Kuz'min, S. V. Nikolaev, and S. G. Ovchinnikov, *Письма в ЖЭТФ* **103**, 132 (2016).
26. V. I. Kuz'min, S. V. Nikolaev, and S. G. Ovchinnikov, *Phys. Rev. B* **90**, 245104 (2014).
27. D. Senechal, D. Perez, and M. Pioro-Ladriere, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 522 (2000).
28. D. Senechal, D. Perez, and D. Plouffe, *Phys. Rev. B* **66**, 075129 (2002).
29. С. В. Николаев, С. Г. Овчинников, *ЖЭТФ* **138**, 717 (2010).
30. С. В. Николаев, С. Г. Овчинников, *ЖЭТФ* **141**, 135 (2012).
31. В. В. Вальков, В. А. Мицкан, Г. А. Петраковский, *ЖЭТФ* **129**, 268 (2006).
32. В. В. Вальков, В. А. Мицкан, *ЖЭТФ* **132**, 103 (2007).
33. A. S. Krinitsyn, S. V. Nikolaev, and S. G. Ovchinnikov, *J. Supercond. Nov. Magn.* **27**, 955 (2014).
34. C. Gröber, R. Eder, and W. Hanke, *Phys. Rev. B* **62**, 4336 (2000).
35. С. Г. Овчинников, *УФН* **167**, 1016 (1997).
36. А. Ф. Барабанов, Р. Хайн, А. А. Ковалев и др., *ЖЭТФ* **119**, 777 (2001).
37. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, *ЖЭТФ* **127**, 686 (2005).
38. M. Aichhorn, E. Arrigoni, M. Potthoff, and W. Hanke, *Phys. Rev. B* **74**, 024508 (2006).
39. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, *ЖЭТФ* **131**, 259 (2007).
40. A. Avella and F. Mancini, *Phys. Rev. B* **75**, 134518 (2007).
41. A. Avella, *Adv. Cond. Mat. Phys.* **2014**, 515698 (2014).
42. E. Pavarini, I. Dasgupta, T. Saha-Dasgupta et al., *Phys. Rev. Lett.* **46**, 047003 (2001).
43. A. Lüscher and A. M. Läuchli, *Phys. Rev. B* **79**, 195102 (2009).
44. C. Weber, K. Haule, and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **82**, 125107 (2010).
45. Э. З. Кучинский, И. А. Некрасов, Н. С. Павлов, *ЖЭТФ* **144**, 379 (2013).
46. N. P. Armitage, F. Ronning, D. H. Lu et al., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 257001 (2002).
47. Т. В. Charikova, N. G. Shelushinina, G. I. Harus et al., *Physica C* **483**, 113 (2012).
48. Y. Dagan and R. L. Greene, *Phys. Rev. B* **76**, 024506 (2007).
49. K. Jin, B. Y. Zhu, B. X. Wu et al., *Phys. Rev. B* **78**, 174521 (2008).
50. J. Lin and A. J. Millis, *Phys. Rev. B* **72**, 214506 (2005).