

ТЕМПЕРАТУРНАЯ И КОНЦЕНТРАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ОКСИДОВ МЕДИ В ОБОБЩЕННОМ МЕТОДЕ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

А. А. Борисов, В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников*

*Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 5 декабря 2002 г.

Электронная структура дырочно допированных ВТСП-купратов рассчитывается с явным учетом сильных электронных корреляций. Прослежена плавная эволюция электронной структуры от недопированного антиферромагнетика к оптимально и сильно допированным парамагнитным составам. При малом допировании получены внутрищелевые состояния примесного типа, на которых пиннингуются уровень Ферми в области слабого допирования. Эти состояния отделены псевдощелью от валентной зоны. В парамагнитной фазе рассчитанные поверхности Ферми для разной концентрации дырок хорошо согласуются с данными ARPES-экспериментов и показывают постепенную смену типа поверхности Ферми от дырочного к электронному.

PACS: 74.25.Jb, 71.20.Ps

1. ВВЕДЕНИЕ

Для детального понимания свойств высокотемпературных сверхпроводников — слоистых купратов — важно знание низкоэнергетической электронной структуры, т. е. ферми-поверхности, дисперсии зон как в сверхпроводящем, так и в нормальном состоянии. Все это необходимо для понимания механизма сверхпроводимости и интерпретации термодинамических и транспортных свойств. К тому же эта информация может напрямую наблюдаться с помощью фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) для соединений $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+y}$ ($\text{Bi}2212$) [1–9], $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_{6+y}$ ($\text{Bi}2201$) [10, 11], $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ (YBCO) [12]. К настоящему времени наиболее полные ARPES-исследования проведены на $\text{La}_{2-x}\text{S}_x\text{CO}_4$ (LSCO) и $\text{Bi}2212$ в ВТСП. В слабодопированных LSCO наблюдаются внутрищелевые состояния и отсутствие сдвига (пиннинг) уровня Ферми. С повышением уровня допирования выше оптимального поверхность Ферми меняет свой характер с дырочного на электронный [13]. К сожалению, имеется мало данных о слабодопированных

$\text{Bi}2212$, из-за того что отсутствуют стабильные материалы. Однако все другие особенности $\text{Bi}2212$ аналогичны наблюдаемым в LSCO , в частности, d -симметрия и концентрационная зависимость псевдощели, а также эволюция поверхности Ферми (ПФ) от дырочного типа к электронному в области сильного допирования [13]. Так как электронные свойства высокотемпературных купратов сильно зависят от уровня допирования, для понимания ключевых особенностей, относящихся к высокотемпературной сверхпроводимости, необходимо проследить за эволюцией зонной структуры ARPES-спектров при допировании.

Обычная зонная теория хорошо воспроизводит форму поверхности Ферми оптимально допированных составов [14], например, в $\text{Bi}2212$. Однако существуют проблемы в ВТСП-системах, которые не находят своего решения в рамках зонной теории. Действительно, согласно наблюдаемой фазовой диаграмме, La_2CuO_4 является антиферромагнитным (АФМ) диэлектриком. Диэлектрическая природа основного состояния обуславливается сильным кулоновским электрон-электронным взаимодействием на одном узле. Однако в согласии с критерием Вильсона зонная теория демонстрирует, что La_2CuO_4 —

*E-mail: alex@sme.krk.ru

парамагнитный (ПМ) металл, а в области слабо допированных составов отсутствуют какие-либо «внутрищелевые» состояния соответствующего пиннига уровня Ферми. Таким образом, можно сделать вывод, что успехи зонной теории в приближении локального функционала плотности ограничены оптимально и сильно допированными ВТСП-составами. Для слабо допированных и недопированных составов необходимо рассчитывать электронную структуру с учетом сильных электронных корреляций. Нами ранее был предложен обобщенный метод сильной связи (ОМСС) [15], сочетающий точную диагонализацию многоэлектронного гамильтониана внутри ячейки с теорией возмущений для межъядерных перескоков. Для недопированного CuO_2 -слоя расчеты в рамках ОМСС правильно воспроизвели не только величину диэлектрической щели, но и дисперсию на потолке валентной зоны для $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ [16].

В настоящей работе мы исследовали спектральную плотность состояний на потолке валентной зоны, сечения ПФ допированных купратов при различных концентрациях дырок. Мы приводим результаты численного расчета, их анализ и сравнение с экспериментом.

В разд. 2 приведено краткое описание ОМСС и основные формулы для дисперсии и спектральной плотности. В разд. 3 мы приводим численные расчеты плотности состояний и зависимости положения химического потенциала при различных концентрациях допирующей компоненты, как для ПМ-фазы, так и для АФМ-фазы. При этом мы используем лишь параметры, найденные из расчета диэлектрического состояния [16]. В разд. 4 приведены сечения поверхности Ферми и их зависимость от допирования и проведено сравнение с экспериментальными данными. В разд. 5 мы показываем, что нетривиальная температурная зависимость спектральной плотности в купратах также воспроизводится в расчете. Сравнение приведено с ARPES-данными для оксидов $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ и $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$.

2. КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ ОБОБЩЕННОГО МЕТОДА СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

Исходный гамильтониан многозонной p - d -модели может быть записан в виде [17]

$$H = H_d + H_p + H_{pd} + H_{pp}, \quad H_d = \sum_r H_d(r), \quad (1)$$

$$H_d(r) = \sum_{\lambda\sigma} \left[(\varepsilon_\lambda - \mu) d_{\lambda r\sigma}^+ d_{\lambda r\sigma} + \frac{1}{2} U_\lambda n_{\lambda r}^\sigma n_{\lambda r}^{-\sigma} + \sum_{\lambda'\sigma'} \left(-J_d d_{\lambda r\sigma}^+ d_{\lambda' r\sigma'}^+ d_{\lambda' r\sigma'} d_{\lambda r\sigma} + \sum_{r'} V_{\lambda\lambda'} n_{\lambda r}^\sigma n_{\lambda' r'}^{\sigma'} \right) \right],$$

$$H_p = \sum_i H_p(i),$$

$$H_p(i) = \sum_{\alpha\sigma} \left[(\varepsilon_\alpha - \mu) p_{\alpha i\sigma}^+ p_{\alpha i\sigma} + \frac{1}{2} U_\alpha n_{\alpha i}^\sigma n_{\alpha i}^{-\sigma} + \sum_{\alpha'\sigma'} \left(-J_p p_{\alpha i\sigma}^+ p_{\alpha' i\sigma'}^+ p_{\alpha' i\sigma'} p_{\alpha i\sigma} + \sum_{i'} V_{\alpha\alpha'} n_{\alpha i}^\sigma n_{\alpha' i'}^{\sigma'} \right) \right],$$

$$H_{pd} = \sum_{\langle i,j \rangle} H_{pd}(i, r),$$

$$H_{pd}(i, r) = \sum_{\alpha\lambda\sigma\sigma'} \left(t_{\lambda\alpha} p_{\alpha i\sigma}^+ d_{r\lambda\sigma} + V_{\alpha\lambda} n_{\alpha i}^\sigma n_{\lambda r}^{\sigma'} \right),$$

$$H_{pp} = \sum_{\langle i,r \rangle} \sum_{\alpha\beta\sigma} \left(t_{\alpha\beta} p_{\alpha i\sigma}^+ p_{\beta j\sigma} + \text{H.c.} \right),$$

где $n_{\lambda i}^\sigma = d_{\lambda i\sigma}^+ d_{\lambda i\sigma}$; $n_{\alpha i}^\sigma = p_{\alpha i\sigma}^+ p_{\alpha i\sigma}$. Индексы « r » и « i » пробегают по позициям медных $d_{x^2-y^2} \equiv d_x$, $d_{3z^2-r^2} \equiv d_z$ - и кислородных p_x, p_y, p_z -наборов локализованных атомных орбиталей. Аналогично $\varepsilon_\lambda = \varepsilon_{d_x}$ ($\lambda = d_x$), $\varepsilon_\lambda = \varepsilon_{d_z}$ ($\lambda = d_z$) и $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_p$ ($\alpha = p_x, p_y$) $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_{p_z}$ ($\alpha = p_z$) — энергии соответствующих атомных орбиталей; $t_{\lambda\alpha} = t_{pd}$ ($\lambda = d_x$; $\alpha = p_x, p_y$), $t_{\lambda\alpha} = t_{pd}/\sqrt{3}$ ($\lambda = d_z$, $\alpha = p_x, p_y$) — матричные элементы перескока медь–кислород; $t_{\alpha\beta} = t_{pp}$ — матричные элементы перескока между ближайшими ионами кислорода; $U_\lambda = U_d$ ($\lambda = d_x, d_z$) и $U_\alpha = U_p$ ($\alpha = p_x, p_y, p_z$) — внутриатомные кулоновские взаимодействия на меди и кислороде; $V_{dd}(V_{pp})$ и $J_{dd}(J_{pp})$ — энергии внутриатомного кулоновского и обменного взаимодействий электронов меди (кислорода) на разных орбиталях; $V_{\alpha\lambda} = V_{pd}$ ($\alpha = p_x, p_y$; $\lambda = d_x, d_z$); $V_{\alpha\lambda} = V'_{pd}$ ($\alpha = p_z$; $\lambda = d_x, d_z$) — энергии кулоновского отталкивания между медью и кислородом. Все матричные элементы кулоновского и обменного взаимодействий предполагаются не зависящими от вида d - или p -плоскостных орбиталей. Штрих относится к взаимодействию с апическим кислородом в CuO_6 -кластере.

Все вычисления проделаны в варианте ОМСС [16] для CuO_2 -плоскости, разбитой на элементарные CuO_6 -ячейки. В этом варианте симметрия ячейки совпадает с симметрией кристалла, но возникает проблема общего кислорода, принадлежащего одновременно двум ячейкам.

Проблема неортогональности молекулярных орбиталей соседних кластеров решалась явным образом — построением соответствующих функций Ванье на $d_{x^2-y^2}$, $d_{3z^2-r^2}$, p_x , p_y , p_z -пятиорбитальном исходном базисе атомных состояний. В новом симметричном базисе одноячеечная часть гамильтониана факторизуется, позволяя классифицировать по симметрии все возможные одночастичные возбуждения в CuO_2 -плоскости. Последующая точная диагонализация гамильтониана элементарной ячейки и переход к представлению операторов Хаббарда ячейки позволяют выполнить учет перескоковой межъячеечной части гамильтониана по теории возмущений. В результате точной диагонализации внутриячеечный гамильтониан H_c для антиферромагнитной фазы приобретает вид

$$H_c = \sum_{pfg\sigma} (\varepsilon_{1pG} - \mu) X_{fg\sigma}^{pp} + \sum_{qfg\sigma} (\varepsilon_{2qG} - 2\mu) X_{fg\sigma}^{qq}, \quad (2)$$

$$f_G = \begin{cases} f_A, & f \in A, \\ f_B, & f \in B. \end{cases}$$

Здесь p и q нумеруют однодырочные и двухдырочные термы ячейки, $X_f^{pq} = |p\rangle\langle q|$ — операторы Хаббарда, построенные на точных состояниях ячейки. Уровни подрешеток расщеплены молекулярным полем антиферромагнитного состояния: $\varepsilon_{1pA} = \varepsilon_{1p} - \sigma h$, $\varepsilon_{1pB} = \varepsilon_{1p} + \sigma h$. Величина $h \propto J\langle S_z \rangle$, где J — эффективное обменное взаимодействие ближайших соседей. С увеличением степени допирования величина h уменьшается, обращаясь в нуль в парамагнитной фазе. В настоящей работе мы ограничиваемся несамосогласованным расчетом, в котором магнитное состояние считается заданным (антиферромагнитное или парамагнитное).

Гамильтониан межъячеечных перескоков можно записать в матричном виде:

$$H_{cc} = \begin{pmatrix} H_{AA} & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} \end{pmatrix} = \sum_{\lambda\lambda'\sigma} \sum_{kmn} \gamma_{\lambda\sigma}^*(m) \gamma_{\lambda'\sigma}(n) \times$$

$$\times \begin{pmatrix} T_{\lambda\lambda'}^{AA}(k) X_{k\sigma}^{+m} X_{k\sigma}^n & T_{\lambda\lambda'}^{AB}(k) X_{k\sigma}^{+m} Y_{k\sigma}^n \\ T_{\lambda\lambda'}^{BA}(k) Y_{k\sigma}^{+m} X_{k\sigma}^n & T_{\lambda\lambda'}^{BB}(k) Y_{k\sigma}^{+m} Y_{k\sigma}^n \end{pmatrix} + \text{H.c.},$$

где

$$T_{\lambda\lambda'}^{AA}(k) = T_{\lambda\lambda'}^{BB}(k) = \frac{2}{N} \sum_{R_1} T_{\lambda\lambda'}^{AA}(\mathbf{R}_1) e^{ikR_1},$$

$$T_{\lambda\lambda'}^{AB}(k) = T_{\lambda\lambda'}^{BA}(k) = \frac{2}{N} \sum_{R_2} T_{\lambda\lambda'}^{AB}(\mathbf{R}_2) e^{ikR_2}$$

($X_{k\sigma}^m, Y_{k\sigma}^n$ — фурье-образы операторов Хаббарда соответственно по A - и B -подрешеткам. Здесь индекс « m » нумерует зону квазичастиц и определяется парой индексов (p, q) конечного и начального многоэлектронных состояний $|p\rangle$ и $|q\rangle$ в операторе Хаббарда X^{pq} (в терминах работы [18] m нумерует корневой вектор $\alpha_m = \alpha(p, q)$).

Соответствующие дисперсионные соотношения для зонной структуры квазичастиц были получены с помощью уравнений движения для двухвременных температурных функций Грина, построенных на операторах Хаббарда:

$$G_{k\sigma}^{\lambda\lambda'} = \langle \langle c_{k\lambda\sigma} | c_{k\lambda'\sigma}^+ \rangle \rangle_E = \sum_{mn} \gamma_{\lambda\sigma}(m) \gamma_{\lambda'\sigma}^+(n) D_{k\sigma}^{mn}, \quad (3)$$

где

$$\hat{D}_{k\sigma} = \begin{pmatrix} \hat{D}_{k\sigma}(AA) & \hat{D}_{k\sigma}(AB) \\ \hat{D}_{k\sigma}(BA) & \hat{D}_{k\sigma}(BB) \end{pmatrix},$$

$$D_{k\sigma}^{mn}(AB) = \langle \langle X_{k\sigma}^m | Y_{k\sigma}^n \rangle \rangle_E.$$

В конечном счете, в приближении Хаббард I дисперсионные зависимости определяются уравнением

$$\left\| \frac{(E - \Omega_m^G) \delta_{mn}}{F_{\sigma}^G(m)} - 2 \sum_{\lambda\lambda'} \gamma_{\lambda\sigma}^*(m) T_{\lambda\lambda'}^{PG}(\mathbf{k}) \gamma_{\lambda'\sigma}(n) \right\| = 0. \quad (4)$$

Уравнение (4) является аналогом обычного одноэлектронного уравнения метода сильной связи, отличаясь от него двумя моментами. Во-первых, локальные уровни энергии Ω_m определены как резонансы между многоэлектронными состояниями и тем самым явно учитывают сильные корреляции за счет точной диагонализации гамильтониана CuO_6 -кластера. Во-вторых, факторы заполнения $F_{\sigma}^G(m) = \langle X_{fg\sigma}^{pp} \rangle + \langle X_{fg\sigma}^{qq} \rangle$, которые вычисляются самосогласованно, приводят к концентрационной зависимости как дисперсионных соотношений, так и амплитуды квазичастичного пика в спектральной плотности. С математической точки зрения мы имеем дело с обобщенной задачей на собственные значения, где вместо привычной «матрицы неортогональности» фигурирует обратная матрица соответствующих факторов заполнения. Каждый корневой вектор α_m определяет фермиевскую квазичастицу с зарядом e и спином $1/2$, но с дробным спектральным весом порядка $F(m)$, их локальные энергии равны $\Omega_m^G = \varepsilon_{2qG} - \varepsilon_{1pG}$.

Формула (4) удобна для расчета дисперсионных зависимостей в том смысле, что позволяет получить

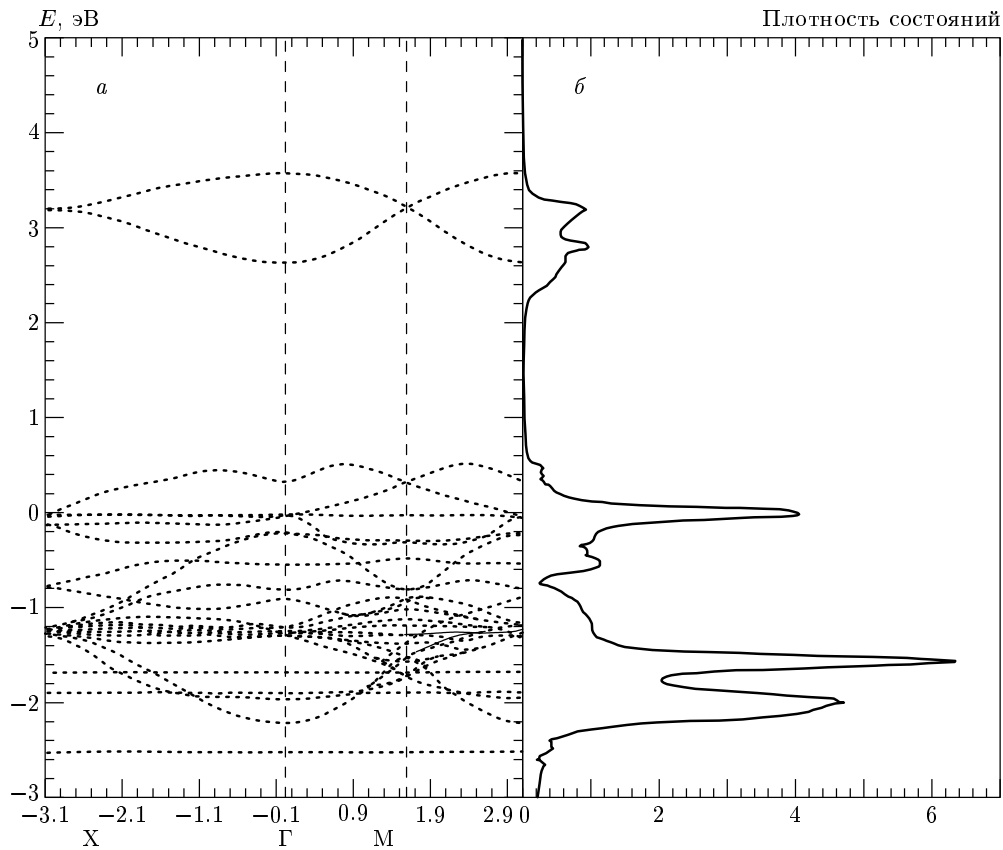


Рис. 1. Закон дисперсии и плотность состояний недопированного CuO_2 -слоя в парамагнитной фазе из работы [19]

все возможные квазичастичные состояния. Однако не все из них могут наблюдаться в эксперименте. Как известно, в ARPES-экспериментах спектр пропорционален спектральной плотности квазичастиц, которая может быть вычислена в ОМСС в виде

$$\begin{aligned}
 A_\sigma(\mathbf{k}, E) &= -\frac{1}{\pi} \sum_\lambda \text{Im}(G_{k\sigma}^{\lambda\lambda}) = \\
 &= -\frac{1}{\pi} \sum_{\lambda mn} \gamma_{\lambda\sigma}(m) \gamma_{\lambda\sigma}^+(n) \times \\
 &\quad \times \text{Im}(D_{k\sigma}^{mn}(AA) + D_{k\sigma}^{mn}(BB)). \quad (5)
 \end{aligned}$$

Благодаря соответствующим факторам заполнения для некоторых типов квазичастиц спектральная плотность просто может оказаться пренебрежимо малой или даже нулевой. Следовательно, в эксперименте соответствующий квазичастичный пик отсутствует. Численный расчет спектральной плотности по формуле (5) проводился вдоль основных симметричных направлений зоны Бриллюэна при $T = 0$. Для ПМ-фазы закон дисперсии и спектраль-

ная плотность получаются с помощью одноподрешеточных аналогов формул (4) и (5). Зонная структура недопированного CuO_2 -слоя в ПМ-фазе была рассчитана в работе [19] и показана на рис. 1. При этом уровень Ферми лежит внутри запрещенной зоны, а величина диэлектрической щели $E_g \sim 0.2$ эВ близка к экспериментально наблюдаемой. Отметим, что диэлектрическое основное состояние обусловлено сильными электронными корреляциями, а величина щели определяется в основном процессами переноса заряда. Сложная структура валентной зоны обусловлена большим числом квазичастиц с участием двухдырочных состояний ячейки, ширина валентной зоны составляет около 3 эВ в согласии с экспериментами для La_2CuO_4 .

После работы [19] появились многочисленные экспериментальные исследования зонной структуры купратов методами ARPES-спектроскопии, что позволило нам в работе [16] уточнить параметры модели и добиться количественного согласия для закона дисперсии потолка валентной зоны в $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$. При этом получены следующие параметры модели,

в единицах t_{pd} ($\varepsilon_{d_x} = 0$):

$$\begin{aligned} \varepsilon_{d_z} &= 2, & \varepsilon_p &= 1.6, & \varepsilon_{p_z} &= 0.5, \\ t_{pp} &= 0.46, & t'_{pp} &= 0.42, & U_d &= 9, \\ U_p &= 4, & U_{pd} &= 1.5, & J_d &= 1. \end{aligned} \quad (6)$$

В настоящей работе мы описываем концентрационную зависимость электронной структуры, не вводя дополнительных подгоночных параметров.

3. ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ

На рис. 2 приведены законы дисперсии дна зоны проводимости и потолка валентной зоны недопированного CuO_2 -слоя, рассчитанные в АФМ-фазе при $T = 0$, с параметрами (6). Уровень Ферми лежит в щели. Бездисперсные уровни на дне зоны проводимости и на потолке валентной зоны показывают полученные в работе [16] виртуальные состояния с нулевым спектральным весом. После допирования именно они формируют внутрищелевые состояния со спектральным весом, пропорциональным уровню допирования.

На рис. 3 показана часть плотности состояний вблизи потолка валентной зоны CuO_2 -слоя, допированного дырками в АФМ-фазе. Вклад в $N(E)$ от потолка валентной зоны обозначим $N_1(E)$, он характеризуется узким пиком, обусловленным особенностями Ван Хова. С допированием виртуальный уровень

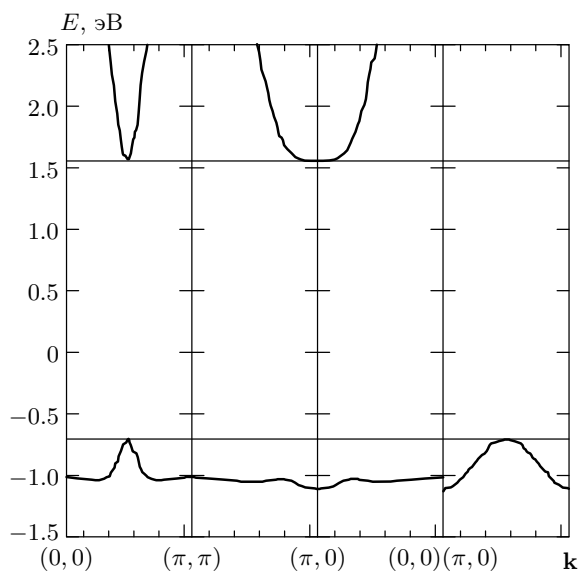


Рис. 2. Закон дисперсии потолка валентной зоны и дна зоны проводимости недопированного CuO_2 -слоя в АФМ-фазе

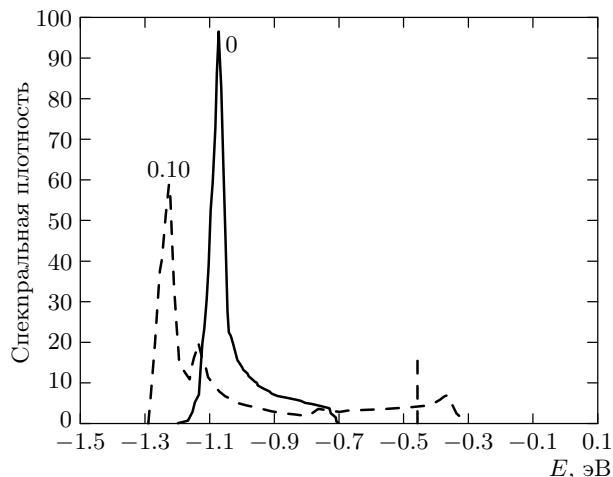


Рис. 3. Плотность состояний CuO_2 -слоя, допированного дырками с концентрацией x в АФМ-фазе

приобретает дисперсию, плотность внутрищелевых состояний $N_2(E)$ мала в меру малости концентрации дырок. За счет внутрищелевых состояний наблюдается красный сдвиг потолка валентной зоны, однако из-за малости спектральной плотности его трудно наблюдать в эксперименте. Основной спектральный вес пика $N_1(E)$ испытывает «голубой» сдвиг, равный примерно 0.1 эВ. Причем на «плече» основного пика появляется еще один, соответствующий особенности Ван Хова, в точке $\mathbf{k} = (\pi, 0)$. Разумеется, на фоне плотности состояний от всей валентной зоны (рис. 1) имеет место лишь незначительный «голубой» сдвиг, так как величина $N_1(E)$ много меньше суммарной плотности состояний. Таким образом, край поглощения при малых уровнях допирования в АФМ-фазе формируется с участием состояний, само присутствие которых на потолке валентной зоны обязано сильным электронным корреляциям. Спектральная плотность такого отдельно взятого состояния может изменяться в пределах правила сумм, обусловленного наличием «констрейнта» (недоступности части многоэлектронных состояний за счет сильных электронных корреляций)

$$\int A_1(\mathbf{k}, E) dk = N_1(E),$$

$$\int A_2(\mathbf{k}, E) dk = N_2(E),$$

$$\int N_1(E) dE + \int N_2(E) dE = 1,$$

использованного нами при вычислении положения уровня Ферми. Таким образом, положение уровня Ферми определяется из уравнения

$$x = \int_{\mu}^{\infty} N_1(E) dE + \int_{\mu}^{\infty} N_2(E) dE,$$

где спектральная плотность и плотность состояний зависят от концентрации допирующей компоненты. Иначе говоря, имеет место ситуация, противоположная модели жесткой зоны. Как видно на рис. 3, в плотности состояний зоны примесного типа $N_2(E)$ имеются провалы в окрестности $E \approx -0.8$ эВ, соответствующие псевдощели между валентной зоной и виртуальным уровнем. Наибольший вклад в формирование псевдощели дают состояния в окрестности точки $(\pi, 0)$ зоны Бриллюэна. Для $x \sim 0.01$, где сохраняется АФМ-фаза при допировании, спектральный вес внутрищелевого состояния мал в меру малости x . Поэтому для наглядности мы показываем на рис. 3 плотность состояний для больших x из области слабо допированных составов. Для $x = 0.10$ уже нет дальнего АФМ-порядка, но в этой области имеется ближний порядок АФМ-типа с корреляционной длиной ξ_{AFM} большей, чем длина формирования электронной структуры ℓ (аналог длины свободного пробега), $\ell = 2-3$ параметра решетки. Поэтому в качестве разумной интерполяции между АФМ-упорядочением с дальним порядком ($x < 0.03$) и парамагнитной сильно допированной областью ($x > 0.18$) мы пренебрегаем различием между ближним и дальним АФМ-порядком в слабо и оптимально допированных образцах и рассчитываем зонную структуру в АФМ-фазе, а при $x > x_{opt}$ — в ПМ-фазе. Вертикальной линией на рис. 3. показано положение уровня Ферми. Эволюция положения уровня Ферми с допированием (рис. 4) свидетельствует о возможности пиннинга уровня Ферми вследствие одновременного роста концентрации носителей и спектральной плотности на виртуальном уровне. Именно такое поведение уровня Ферми наблюдалось в [20] для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. В ПМ-фазе примесная зона сливается с валентной и уровень Ферми при $x > 0.15$ смещается в глубь валентной зоны.

4. ПОВЕРХНОСТЬ ФЕРМИ

На рис. 5 представлена динамика сечения поверхности Ферми при изменении уровня допирования для ПФ. Для более низких степеней допирования мы не получили согласия с экспериментальными данными [21]. Объясняется это необходимостью более тщательного описания спиновой системы при меньших степенях допирования. Поверхность Фер-

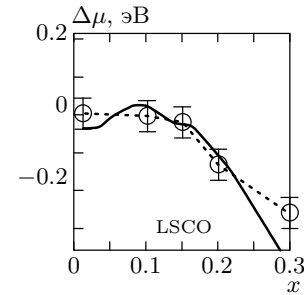


Рис. 4. Сдвиг химического потенциала как функция степени допирования. Сплошная линия — результат OMSS-расчетов (для АФМ $x < 0.15$ и ПФ $x > 0.15$). Экспериментальные данные для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ взяты из работы [20]

ми более подвержена влиянию различных параметров системы, а не только химического потенциала, который является интегральной характеристикой. В наших расчетах оптимальная степень допирования, при которой уровень Ферми достигает особенности Ван Хова, в ПМ-фазе имеет место при $x_{opt}^T \approx 0.55$, в то время как экспериментальное значение равно $x_{opt}^{exp} = 0.18$. Считая, что мы ошиблись только в масштабе концентраций допирования, а эволюция поверхности Ферми соответствует эксперименту, приводим наши результаты в единицах относительных степеней допирования $x^T = x^* x_{opt}^T / x_{opt}^{exp}$. Действительно, как видно на рис. 5, мы получили хорошее количественное совпадение результатов расчета с экспериментом. Таким образом, качественно воспроизведена эволюция ПФ в LSCO в диапазоне концентраций $x > 0.15$. Количественные расхождения касаются абсолютного значения для x_{opt} . Выход за рамки приближения Хаббард I, в котором получено уравнение (4), и учет спиновых корреляций ближнего порядка, по-видимому, приведут к сужению зоны и к правильному определению значений концентраций. Аналогичное заключение было сделано для t - J -модели в работах [22, 23].

5. ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ARPES-СПЕКТРОВ

Авторами работы [24] были получены результаты необычного изменения ARPES-спектров $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ от температуры. При увеличении температуры пики спектральной плотности уменьшались и сдвигались в сторону уменьшения энер-

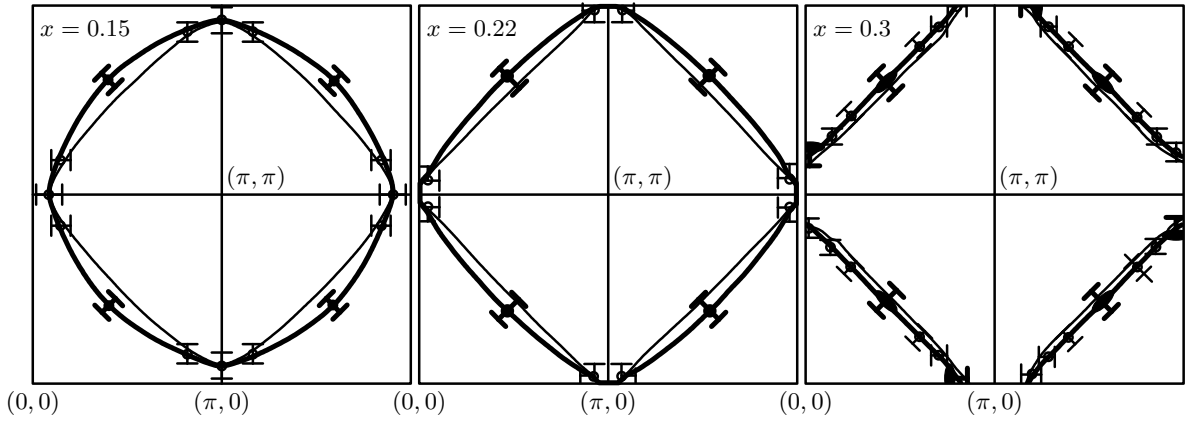


Рис. 5. Эволюция поверхности Ферми с ростом концентрации дырок в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Тонкие линии — результат расчета в рамках ОМСС, жирные линии — данные ARPES-спектроскопии из работы [21]

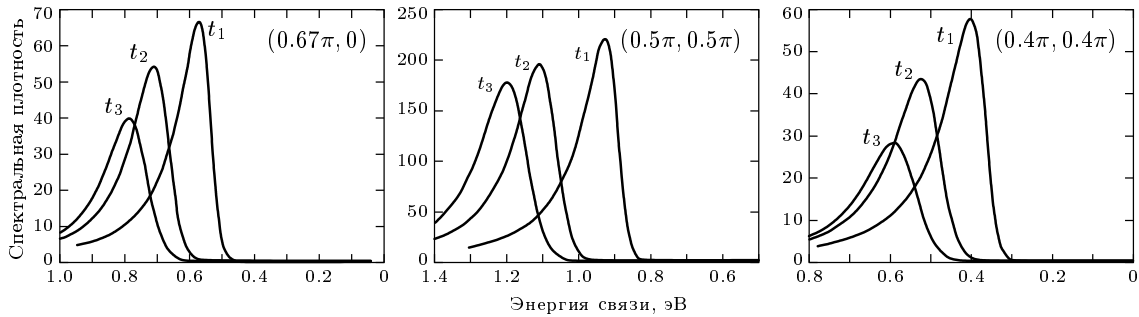


Рис. 6. Температурная зависимость спектральной плотности для точек $(2\pi/3; 0)$, $(\pi/2; \pi/2)$ и $(0.4\pi; 0.4\pi)$

гии. При конечных температурах интенсивность ARPES-спектра имеет вид

$$I(\mathbf{k}, \omega) \propto f_F(\omega)A(\mathbf{k}, \omega),$$

где $A(\mathbf{k}, \omega)$ вычисляется по формуле (5) с помощью температурных двухвременных функций Грина. Обычно температурная зависимость фотоэлектронных спектров вблизи уровня Ферми определяется размытием фермиевской функции распределения. Однако в системах с сильными корреляциями появляются дополнительные, более сильные, механизмы температурной зависимости, связанные с самой спектральной плотностью. В нашем случае для недопированного CuO_2 -слоя факторы заполнения зависят от температуры из-за температурной зависимости заселенности верхнего спинового уровня $\varepsilon_{1,A}^{-\sigma}$. Если бы не было спиновых флуктуаций, то выполнялись бы равенства $\langle S_A^Z \rangle = 1/2$ и $n_1^{-\sigma} = 0$. Однако в АФМ-фазе уже при $T = 0$ имеются нулевые спиновые колебания, $\langle S_A^Z \rangle = 1/2 - n_1^{-\sigma}(0)$ и

$n_1^{-\sigma} = n(T)$. С ростом температуры число заполнения верхнего спинового уровня $n(T)$ растет. Расчет $n(T)$ может быть достаточно просто выполнен в спин-волновом приближении (что дает $n_1^{-\sigma} \approx 2$ для $T = 0$), однако эксперименты [24] выполнены для весьма высоких температур $T \leq T_N$, где расчет концентрации магнонов представляет собой сложную задачу, выходящую за рамки настоящей статьи. Поэтому вместо расчета $n(T)$ мы рассчитываем спектральную плотность в трех точках, отвечающих температурам $T_1 < T_2 < T_3$ таким, что $n(T_1) = 0.3$, $n(T_2) = 0.4$ и $n(T_3) = 0.5$, причем точка T_3 лежит выше T_N . Как видно на рис. 6, для всех трех точек зоны Бриллюэна, в которых измерялась температурная зависимость ARPES-спектров, получено качественное согласие с экспериментом, причем для $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ амплитуда пика спектральной плотности в точке $\mathbf{k} = (0.67\pi; 0)$ понижается с ростом температуры быстрее, чем в точке $\mathbf{k} = (0.5\pi; 0.5\pi)$ в соответствии с экспериментом.

6. ВЫВОДЫ

Систематическое изучение эволюции электронной структуры с допированием в LSCO в рамках ОМСС показывает три отчетливые особенности.

Во-первых, в области слабо допированных дырочных ВТСП-составов уровень Ферми пиннигуется состояниями виртуального уровня в области диэлектрической щели и его сдвиг отсутствует. Действительно, из-за присутствия на потолке валентной зоны недопированного виртуального CuO_2 -уровня, который приобретает в результате допирования конечную спектральную плотность и дисперсию, уровень Ферми пиннигуется этими состояниями, а не самой валентной зоной.

Во-вторых, в ПМ-фазе с ростом концентрации допирующей компоненты имеет место переход от дырочной ПФ с центром в $k = (\pi, \pi)$ к ПФ электронного типа с центром в $k = (0, 0)$ [21]. Этот сценарий воспроизводится в расчете. Однако возникающие при этом расхождения касаются значения x_{opt} . Так как последние имеют меньшее значение в расчете для АФМ-фазы, $x_{opt} \approx 0.28-0.3$, мы думаем, что расхождения связаны с упрощенными описаниями спиновых корреляций, и надеемся, что учет ближнего спинового порядка позволит получить правильную величину x_{opt} .

В-третьих, в АФМ-фазе ВТСП-составов наши расчеты воспроизводят псевдощель между «примесной» зоной и потолком валентной зоны. Псевдощель разрушается вместе с примесной зоной с ростом допирования, так как в ПМ-фазе дисперсия электронов аналогична дисперсии оптимально допированных ВТСП-составов.

Кроме того, зонная структура квазичастиц и спектральная плотность сильно зависят от температуры в антиферромагнитной фазе, природа этой зависимости обусловлена перераспределением спектрального веса между различными квазичастицами с изменением температуры. И температурная, и концентрационная зависимости зонной структуры не могут быть получены в традиционном одноэлектронном зонном подходе и являются следствием специфики зонной структуры квазичастиц в сильно коррелированных электронных системах [25].

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Интеграция» (грант № Б0017), РФФИ-ККФН «Енисей» (грант № 02-02-97705), РФФИ (грант № 03-02-16124) и ИНТАС (грант № 01-0654), а также программы «Квантовая макрофизика» РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. Z.-X. Shen and D. S. Dessau, Phys. Rep. **253**, 1 (1995).
2. D. S. Marshall, D. S. Dessau, A. G. Loeser, C.-H. Park, A. Y. Matsuura, J. N. Eckstein, I. Bozovic, P. Fournier, A. Kapitulnik, W. E. Spicer, and Z.-X. Shen, Phys. Rev. Lett. **76**, 4841 (1996).
3. H. Ding, M. R. Norman, T. Yokoya, T. Takeuchi, M. Randeria, J. C. Campuzano, T. Takahashi, T. Mochiku, and K. Kadowaki, Phys. Rev. Lett. **78**, 2628 (1997).
4. H. Ding, M. R. Norman, J. C. Campuzano, M. Randeria, A. F. Bellman, T. Yokoya, T. Takahashi, T. Mochiku, and K. Kadowaki, Phys. Rev. B **54**, R9678 (1996).
5. H. Ding, T. Yokoya, J. C. Campuzano, T. Takahashi, M. Randeria, M. R. Norman, T. Mochiku, K. Kadowaki, and J. Giapintzakis, Nature (London) **382**, 51 (1996).
6. P. J. White, Z.-X. Shen, C. Kim, J. M. Harris, A. G. Loeser, P. Fournier, and A. Kapitulnik, Phys. Rev. B **54**, R15669 (1996).
7. A. G. Loeser, Z.-X. Shen, D. S. Dessau, D. S. Marshall, C.-H. Park, P. Fournier, and A. Kapitulnik, Science **273**, 325 (1996).
8. J. M. Harris, Z.-X. Shen, P. J. White, D. S. Marshall, M. C. Schabel, J. N. Eckstein, and I. Bozovic, Phys. Rev. B **54**, 15665 (1996).
9. M. R. Norman, H. Ding, M. Randeria, J. C. Campuzano, T. Yokoya, T. Takeuchi, T. Takahashi, T. Mochiku, K. Kadowaki, P. Guptasarma, and D. G. Hinks, Nature (London) **392**, 157 (1998).
10. J. M. Harris, P. J. White, Z.-X. Shen, H. Ikeda, R. Yoshizaki, H. Eisaki, S. Uchida, W. D. Si, J. W. Xiong, Z.-X. Zhao, and D. S. Dessau, Phys. Rev. Lett. **79**, 143 (1997).
11. D. M. King, Z.-X. Shen, D. S. Dessau, D. S. Marshall, C.-H. Park, W. E. Spicer, J. L. Peng, Z. Y. Li, and R. L. Greene, Phys. Rev. Lett. **73**, 3298 (1994).
12. M. C. Schabel, C.-H. Park, A. Matsuura, Z.-X. Shen, D. A. Bonn, R. Liang, and W. N. Hardy, Phys. Rev. B **55**, 2796 (1997).
13. A. Damascelli, D. H. Zu, and Z.-X. Shen, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **117-118**, 165 (2001).
14. Е. Г. Максимов, УФН **170**, 1033 (2000).

15. S. G. Ovchinnikov and I. S. Sandalov, *Physica* **C161**, 607 (1989).
16. В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, А. А. Борисов, Е. Г. Горячев, *ЖЭТФ* **118**(2), 422 (2000).
17. Ya. B. Gaididei and V. M. Loktev, *Phys. Stat. Sol. B* **147**, 307 (1988).
18. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **70**, 1100 (1976).
19. S. G. Ovchinnikov, *Phys. Rev. B* **49**, 9891 (1994).
20. N. Narima, J. Matsuno, A. Fujimori, Y. Onose, Y. Taguchi, and Y. Tokure, *Phys. Rev. B* **64**, 220507 (2001).
21. A. Ino, C. Kim, M. Nakamura, T. Yoshida, T. Mizokawa, A. Fujimori, Z.-X. Shen, T. Kakeshita, H. Eisaki, and S. Uchida, *Phys. Rev. B* **65**, 094504 (2002).
22. N. M. Placida and V. S. Oudovenko, *Phys. Rev. B* **59**, 11949 (1999).
23. A. Sherman and M. Schreiber, *Phys. Rev. B* **65**, 134520 (2002).
24. C. Kim, F. Ronning, A. Damascelli, D. L. Feng, and Z.-X. Shen, *Phys. Rev. B* **65**, 174516 (2002).
25. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильно коррелированных системах*, Изд-во СО РАН, Новосибирск (2001).