

МОДЕЛИ ЗОН И ПОВЕРХНОСТЕЙ ФЕРМИ ЭЛЕКТРОННО-ДОПИРОВАННЫХ КУПРАТОВ

*М. Я. Овчинникова**

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

Поступила в редакцию 16 ноября 2007 г.

Обсуждаются свойства поверхности Ферми и зон в электронно-допированных купратах. В частности, обсуждается вопрос о происхождении дырочного кармана в узельном направлении и псевдощели в «горячих точках»: могут ли они быть следствием наличия страйп-фаз или объясняются двумя зонами антиферромагнитно-коррелированной ферми-жидкости? В рамках метода среднего поля для $t-t'-t''-U$ -модели показано, что решения как с однородной антиферромагнитной спиновой структурой, так и с диагональной страйп-структурой могут воспроизвести фрагментарный характер поверхности Ферми. Появление дырочных карманов в разных структурах относится при этом либо к состояниям нижней хаббардовской зоны, либо к состояниям, локализованным на доменных стенках. Обсуждаются поведение щели ведущего края энергетического распределения фотоэлектронов и влияние на него удаления кислорода в ходе отбеливания.

PACS: 71.10.Fd, 74.20.Rp, 74.20.-z

Свойства поверхностей Ферми, псевдощели, сверхпроводящей щели — важнейшие характеристики ВТСП-купратов. Многие из них удается понять в терминах антиферромагнитно (AF)-коррелированной ферми-жидкости. Для недопированных соединений с дальним AF-порядком профили краев нижней и верхней хаббардовских зон (ЛНВ, УНВ) вблизи хаббардовской щели достаточно полно изучены по разрешенным по углу фотоэмиссионным спектрам (ARPES) [1]. Часто они хорошо описываются $t-t'-U$ -моделями Хаббарда. Уже из формы этих профилей следовало предсказание [2–4] малых поверхностей Ферми в недопированных соединениях. Для дырочно (h)- или электронно (e)-допированных купратов малые поверхности Ферми представляют собой соответственно либо границы дырочных карманов в диагональных (узельных) областях квазиимпульса вокруг точек $(k_x, k_y) = (\pi/2, \pi/2)$, либо границы электронных карманов в антиузельных областях вокруг точек $(\pi, 0)$ и эквивалентных им.

В двуслойных h -допированных купратах (BSCO, YBCO) наблюдались [5, 6] малые замкнутые по-

верхности Ферми. (В YBCO обнаружены даже отвечающие им квантовые осцилляции магнитосопротивления [7].) Однако для однослойного $\text{La}_{2-y}\text{Sr}_y\text{CuO}_4$ (LSCO) при $y \geq 0.06$ элементы большой поверхности Ферми — полной ферми-дуги вокруг $Y(\pi, \pi)$ — прослеживаются почти сразу при переходе от диэлектрических к сверхпроводящим образцам LSCO [8]. Четко выраженную границу Ферми на сечении $M(\pi, 0) - Y(\pi, \pi)$ и фрагментацию полной поверхности Ферми удалось объяснить неоднородными страйп-структурами с доменными стенками, параллельными Cu–Cu-связям [9, 10]. При этом наблюдаемая дихотомия свойств квазичастиц на узельных либо антиузельных сегментах поверхности Ферми связывалась с происхождением их либо от квазиодномерных зон состояний, локализованных на доменных стенках, либо от квазидвумерных уровней нижней хаббардовской зоны (ЛНВ) [9, 10]. В h -допированных $t-t'-U$ -моделях квазистатические страйп-структуры разных периодов определяют промежуточные этапы разрушения дальнего AF-порядка. Оно сопровождается как уменьшением среднего спина на ионах Cu и хаббардовской щели, так и появлением внутри щели квазиодномерных зон состояний.

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

Фрагментарный характер поверхности Ферми вдоль полной ферми-дуги наблюдался и для e -допированных соединений $R_{2-x}Ce_xCuO_4$ или $R_{1-x}LaCe_xCuO_4$, $R = Pr, Nd, Sm$ [11–17]. При допировании $x \geq 0.13$ – 0.15 к малым границам Ферми вокруг электронных карманов вблизи $M(0, \pi)$, $(\pi, 0)$ добавляются сегменты поверхности Ферми в узельных направлениях. В работах [18–20] их появление объяснялось в рамках однородного АФ-состояния с двумя Хаббардовскими зонами, а именно: начиная с допирования $x \geq 0.13$ – 0.15 , зонная энергия ЛНВ в точке $(\pi/2, \pi/2)$ превышает химический потенциал μ .

Для количественного описания ARPES-данных, а также обнаруженной немонотонной зависимости сверхпроводящей (SC) щели [16, 17] авторам работ [18–20] потребовалось введение высших гармоник в дисперсию нулевой зоны и сильной зависимости от допирования x эффективного одноцентрового отталкивания $U = U_{eff}(x)$. Последняя объяснялась экранированием взаимодействия электронов [18]. Для $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ (NCCO) величина U_{eff} менялась в пределах $6 > U/t > 3$ при $0 < x < 0.2$. Одним из оснований модели служила наблюдаемая большая область дальнего АФ-порядка в e -допированных купратах в отличие от h -допированных. Решения среднего поля для e -допированных t - t' - U -моделей также подтверждают устойчивость однородного АФ-состояния в отличие от h -моделей, где более устойчивыми являются страйп-структуры [9]. Тем не менее представляется интересным дополнительно изучить вопрос, может ли фрагментарный характер поверхности Ферми в e -допированных купратах быть связан со страйп-структурами и можно ли отличить такую альтернативу от коллапса ЛНВ и УНВ однородного АФ-состояния.

В настоящей работе исследуются свойства поверхности Ферми и электронных зон страйп-структур в e -допированных моделях в сравнении с однородными АФ-решениями. Для страйп-фаз периодические решения t - t' - U -модели Хаббарда находим методом среднего поля. Соответствующие им карты спектральной плотности визуализуют поверхность Ферми и зоны состояний. В e - (в отличие от h -) допированных купратах в рассеянии нейтронов не наблюдается пиков с определенной несоизмеримостью, связываемой с периодом страйп-структур. Тем не менее наблюдаемый диффузный пик при $Q = 2\pi/a(1/2, 1/2)$ [21] указывает на модуляцию спиновой плотности (spin density wave, SDW) или на неупорядоченную систе-

му АФ-доменов. Ниже мы исследуем простейшую модель с дефектами в виде доменных стенок — периодическую страйп-структуру. Будет показано, что диагональные страйп-структуры могут приводить к фрагментации поверхности Ферми и возникновению дырочных карманов в узельной области в дополнение к электронным карманам в антиузельной, равно как и к псевдощели в «горячих точках» (точках пересечения большой дуги Ферми и границы магнитной зоны Бриллюэна). Количественные разногласия результатов страйп-модели с ARPES-данными возникают при описании дисперсии зон. Свои разногласия, касающиеся ширины электронного кармана в антиузельной области, имеются и у двухзонной модели однородного АФ-состояния [19].

Интерес к вопросу связан и с недавними нейтронными исследованиями структуры электронно-допированных купратов [21–24]. Они показали сосуществование при $x \approx 0.1$ – 0.2 дальнего трехмерного АФ-порядка, несоизмеримого SDW двумерного порядка и сверхпроводимости. В работах [22–24] выяснена суть процесса отбеливания — удаление малых количеств кислорода при отжиге. В отличие от h -купратов, для e -купратов такой процесс является необходимым этапом превращения исходно выращенных (as grown, AG) несверхпроводящих материалов в сверхпроводящие. Выяснены различия AG- и SC-образцов в химическом составе и магнитных свойствах. В спектрах ARPES [24] в AG-образцах обнаружена анизотропия щели между химическим потенциалом и ведущим краем кривой распределения фотоэлектронов по энергии (leading edge gap, LEG) и определен средний сдвиг LEG в сравнении с нулевой изотропной LEG в SC-образцах для $Pr_{0.88}Ce_{0.12}CuO_4$ [24]. Показано [22–24], что при отбеливании кислородные вакансии возникают преимущественно в CuO_2 -плоскости, что приводит к разрушению дальнего АФ-порядка. Одновременно появляются слои примесной фазы $(RCe)_2O_3$, которые обратимо исчезают в повторно окисленных образцах.

Реальный состав AG-образцов $R_{2-x}Ce_xCu_{1-y}O_{4+\delta}$ характеризуется некоторым дефицитом Cu ($y \sim 0.026$). При таком составе ожидаемое число допированных в CuO_2 -плоскость электронов равно $n_e = x - 2y - 2\delta$ на одну ячейку идеальной решетки. Изменение состава влечет за собой изменение $\Delta n_e = n_e^{SC} - n_e^{AG} = 2(\delta^{AG} - \delta^{SC}) > 0$ фактического числа допированных электронов на 1 узел CuO_2 в ходе отбеливания. Это отвечает изменению химического потенциала $\Delta\mu = \mu^{SC} - \mu^{AG} > 0$. Между тем ARPES-данные и зависимость LEG(φ)

обсуждаются в работе [24] в предположении сохранения μ . Необъясненными остаются масштаб анизотропии LEG(φ) и сглаживание ее в SC-образцах. Обсуждение ниже связывает происхождение анизотропии LEG с AF-порядком в AG-образцах и разрушением его в SC-образцах.

Для нахождения самосогласованных однородных AF-решений модели Хаббарда использовались стандартные уравнения для чередующейся спиновой плотности [18]. Нахождение периодических страйп-структур с доменными стенками t - t' - U -модели повторяет описанные в работе [25]. Параметрами порядка в нормальном состоянии являются средние значения операторов зарядовой и спиновой плотностей $r_j = \langle \hat{r}_j \rangle$, $S_j = \langle \hat{S}_{zj} \rangle$ на узлах j элементарной ячейки структуры ($(j = 1, \dots, n_c)$, n_c — число таких узлов). Линеаризованный гамильтониан равен

$$H_{lin} = \hat{T} + \sum_{jL} 2U \{ r_j \hat{r}_{jL} - S_j \hat{S}_{zjL} \} = \sum_{\tilde{k} \in \tilde{G}} \hat{h}_{\tilde{k}}, \quad (1)$$

где L нумерует элементарные ячейки. В импульсном представлении одноэлектронные функции разлагаются по набору $2n_c$ ферми-операторов

$$\chi_{k\nu}^\dagger = \sum_{m,\sigma} c_{\tilde{k}+Bm,\sigma}^\dagger W_{m\sigma,\nu}(\tilde{k}). \quad (2)$$

Здесь $\nu = 1, \dots, 2n_c$; $Bm = B_1 m_1 + B_2 m_2$ с векторами трансляции обратной решетки $B_{1(2)}$, и приведенный импульс \tilde{k} меняется в пределах зоны Бриллюэна \tilde{G} структуры. Набор целых $m = (m_1, m_2)$ нумерует независимые векторы переброса, а векторы $\tilde{k} + Bm$ охватывают все фазовое пространство G при $\tilde{k} \in \tilde{G}$. Матрица векторов $W_{m\sigma,\nu}(\tilde{k})$ и собственные значения $E_{\tilde{k}\nu}$ определяются диагонализацией линеаризованного гамильтониана (1):

$$(h_{\tilde{k}})_{m\sigma,m'\sigma'} W_{m'\sigma',\nu} = W_{m\sigma,\nu} E_{\tilde{k},\nu}, \quad (3)$$

$$(h_{\tilde{k}})_{m\sigma,m'\sigma'} = \delta_{mm'} \delta_{\sigma\sigma'} \epsilon_{\tilde{k}+Bm} + U \sum_j \varphi(j, m' - m) [r_j \delta_{\sigma\sigma'} - S_j (\sigma_z)_{\sigma\sigma'}]. \quad (4)$$

Здесь ϵ_k — энергии нулевой зоны при $U = 0$; $\varphi(j, m) = \exp[iBmj]$ и $j = (j_x, j_y)$ перебирает все центры элементарной ячейки. Сами же параметры порядка вычисляются через матрицу собственных значений W и фермиевские функции f согласно

$$\{r_j, S_{\alpha j}\} = \frac{1}{2N} \sum_{\tilde{k} \in \tilde{G}} \sum_{ms, m' s'} \{ \sigma_0, \sigma_\alpha \}_{ss'} \varphi(j, m' - m) \times W_{ms,\nu}^*(\tilde{k}) W_{m' s', \nu}(\tilde{k}) f(E_{\tilde{k}\nu} - \mu). \quad (5)$$

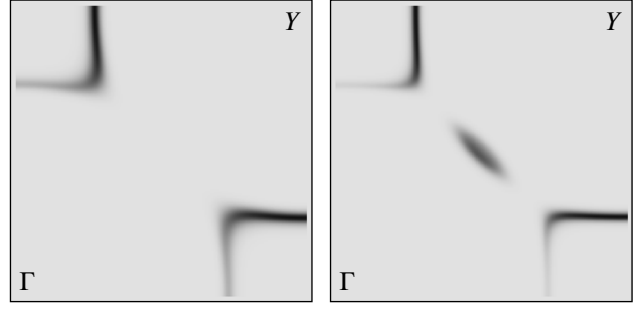


Рис. 1. Карты сглаженной интенсивности фотоэмиссии $\tilde{I}(\omega)$ для однородного AF-состояния для модели (7) (слева) и модели (8) (справа) [18] в I квадранте фазовой плоскости (k_x, k_y) , $0 \leq k_{x(y)} \leq \pi$ при допировании $x = 0.15$. Параметр уширения $\Delta\omega = 0.08t$

Здесь σ_0, σ_α — соответствующие матрицы Паули. Уравнения (3)–(5) определяют самосогласованные решения среднего поля (MF-решения) периодической структуры.

В одноэлектронном приближении спектральная плотность $A(k, \omega)$ и связанная с ней интенсивность фотоэмиссии $I(k, \omega) = A(k, \omega) f(\omega)$ определяются следующим образом:

$$A(k, \omega) = \frac{1}{N} \times \sum_{\tilde{k} \in \tilde{G}} \sum_{m,\sigma,\nu} |W_{m\sigma,\nu}(\tilde{k})|^2 \bar{\delta}(E_{\tilde{k}\nu} - \mu - \omega) \delta_{\tilde{k}, \tilde{k}+Bm}. \quad (6)$$

При вычислении (6) и $I(k, \omega)$ проводилась стандартная замена δ -функции по энергии на функцию с конечной шириной $\Omega \sim 0.04t - 0.08t$.

Разные страйп-структуры с расстоянием $l = (10-20)a/\sqrt{2}$ рассчитывались для модели со стандартными для h -купратов параметрами:

$$U/t = 4, \quad t'/t = 0.25-0.3, \quad n_e - 1 = 0.1-0.15. \quad (7)$$

На рис. 1 приведена поверхность Ферми однородного AF-состояния с $n_e = 1.15$ стандартной модели (1) и модели, полученной в работе [18] для описания NCCO и применявшейся также в работе [20] для PCCO. Модель [18] включала высшие гармоники, пропорциональные t, t', t'' в $\epsilon(k)$, и зависящее от допирования эффективное взаимодействие, которое аппроксимируется параметрами

$$U_{eff} = \frac{U_0}{1 + P(x)U_0}, \quad U_0 = 6.75t, \quad (8)$$

$$P = 0.0185 + 1.2545x - 1.434x^2, \quad x = n_e - 1,$$

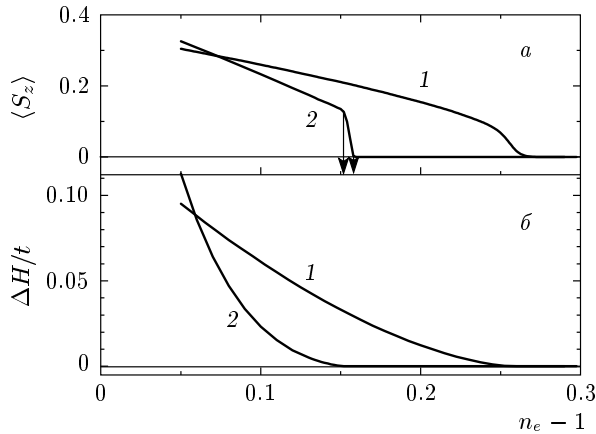


Рис. 2. а) Зависимость величины среднего чередующегося спина $\langle S_z \rangle$ от допирования. Кривые 1 и 2 соответствуют моделям (7), (8). б) Кривые 1 и 2 — разности энергий $\Delta H = H_{PM} - H_{AF}$ (в расчете на один узел решетки) однородных РМ- и АФ-решений как функция допирования для моделей (7) и (8). Стрелки указывают значение x , при котором ЛНВ касается E_F , и точку перехода АФ-решения в РМ-решение среднего поля

и t, t', t'' — те же, что в работе [18]. Для модели (7) при $x \leq 0.2$ из двух зон однородного АФ-состояния лишь УНВ пересекает уровень Ферми $E_F = \mu$ и поверхность Ферми состоит только из границ e -карманов вокруг точек $M(\pm\pi, 0), (0, \pm\pi)$. С ростом допирования происходит переход от АФ- в парамагнитное (РМ) состояние с коллапсом хаббардовской щели и слиянием электронных карманов с образованием большой дуги поверхности Ферми. Для модели с эффективным взаимодействием (8) при $x \sim 0.151$ ЛНВ касается уровня Ферми в точке $(\pi/2, \pi/2)$. Далее в узком интервале допирования, $1.51 < x < 1.60$, ЛНВ пересекает E_F в узельной области и к поверхности Ферми добавляются границы дырочных карманов в узельной области. В этом узком интервале x величина среднего чередующегося спина резко обращается в нуль и АФ-решение переходит в РМ-решение среднего поля. Коллапс хаббардовской щели сопровождается образованием истинной границы Ферми вдоль всей большой дуги Ферми. На рис. 2 приведены зависимости от допирования разности средних энергий MF-состояний и величины среднего спина на узле для модели (7) с постоянным U и модели (8) с зависящим от допирования эффективным взаимодействием.

В одноэлектронном приближении щель между ведущим краем кривой распределения фотоэлектронов по энергии и химическим потенциа-

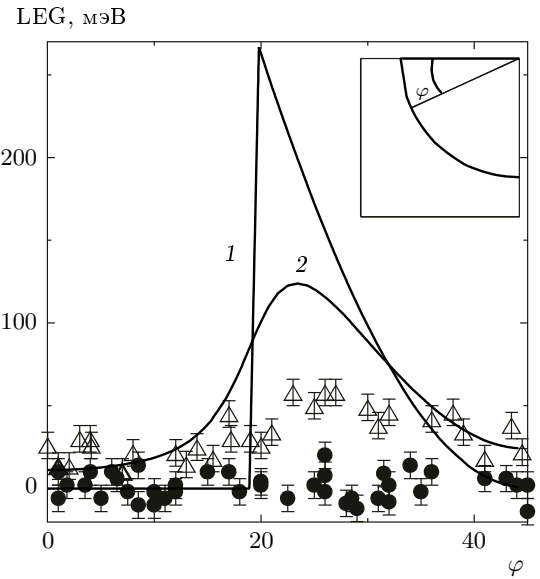


Рис. 3. Щель $LEG(\varphi)$ ведущего края кривых распределения фотоэлектронов по энергии вдоль большой дуги Ферми как функция угла φ (см. вставку) для модели (8) [18] для $x = 0.15$ (кривая 1). Кривая 2 — та же величина $\overline{LEG}(\varphi)$, сглаженная с лоренцевской функцией с $\Gamma = 4^\circ$. Точки отвечают $LEG(\varphi)$, измеренной в работе [24] для АГ- и SC-образцов $Pr_{1.85}Ce_{0.15}CuO_4$ (соответственно Δ и \bullet)

лом $LEG(\varphi)$ анизотропна. Она зависит от угла φ на большой ферми-дуге (рис. 3). Зависимость $LEG(\varphi)$ состоит из разных участков. Она равна нулю $LEG(\varphi) = 0$ для углов $\varphi < \varphi^*$, для которых точки $k_{MBZ}(\varphi)$ границы магнитной зоны Бриллюэна (MBZ) находятся внутри электронного кармана ($E_2(k_{MBZ}(\varphi) - \mu < 0$). При $\varphi > \varphi^*$ щель $LEG(\varphi)$ определяется профилем нижней хаббардовской зоны $LEG(\varphi) = \max(0, \mu - E_1(k_{MBZ}(\varphi)))$ для углов, при которых верхняя зона не заселена. Кривая 2 на рис. 3 дает $\overline{LEG}(\varphi)$, усредненную с лоренцевским распределением $F(\varphi - \varphi')$ с полушириной $\Gamma(\varphi) = 4^\circ$, оцененной из наблюдаемой ширины МДС — кривой распределения фотоэлектронов по импульсам [24]. На том же рисунке приведены наблюдаемые зависимости $LEG(\varphi)$ для АГ- и SC-образцов РССО при $x = 0.15$. Явно выраженная анизотропия $LEG_{AG}(\varphi)$ для АГ-образцов качественно согласуется с рассчитанной $\overline{LEG}(\varphi)$, хотя амплитуда анизотропии (или разности псевдощели в «горячих точках» $k \sim (\pi/4, 3\pi/4)$ и в антиузельной области) различаются по величине примерно в 3 раза. Это различие может быть связано с недооценкой параметра уширения $\Gamma(\varphi)$.

Отличие от нуля LEG_{AG} в антиузельной области для AG-образцов может быть обусловлено следующими причинами. Наблюдаемые данные для LEG_{AG} и LEG_{SC} получены из спектров ARPES для AG- и SC-образцов в предположении одинакового химического потенциала для них. Между тем, как отмечалось выше, создание кислородных вакансий в CuO_2 -плоскости при отбеливании влечет за собой изменение фактического числа допированных электронов и сдвиг химического потенциала $\Delta\mu = \mu_{SC} - \mu_{AG} > 0$. Независимое измерение $\Delta\mu$ для AG- и SC-образцов NCCO с $x = 0.15$ дало величину сдвига $\Delta\mu \sim 20$ мэВ [26], сопоставимую со сдвигом LEG в антиузельной области при отбеливании PCCO [24]. С учетом сказанного наблюдаемые точки для LEG_{AG} должны быть сдвинуты на $\Delta\mu$, что даст ожидаемое нулевое значение LEG_{AG} в антиузельной области ($\varphi = 0$).

Контрастное отсутствие анизотропии в LEG_{SC} в SC-образцах могло бы означать частичный или полный переход в PM-состояние. MF-расчеты модели (8) [18] показывают, что в методе среднего поля переход от AF- к PM-состоянию происходит при допировании $x = 0.160$. Тот факт, что в SC-образцах фактическое число электронов $n_e - 1 > x$, казалось бы тоже указывает на переход $AF \rightarrow PM$. Однако в SC- (как и в AG-) образцах по-прежнему наблюдаются [15] сильное подавление интенсивности ARPES-сигнала в «горячих точках» и ярко выраженная псевдощель порядка 120 мэВ, что не описывается PM-решениями среднего поля. Более правдоподобно разрушение в SC-образцах дальнего AF-порядка при сохранении ближнего. Возможны разные сценарии разрушения в SC-образцах дальнего AF-порядка. Во-первых, в силу неоднородности потенциала и плотности электронов можно предположить сосуществование областей с AF- и PM-порядком и изменение относительной доли их с допированием. Тогда сохранение ближнего AF-порядка связано с долей AF-областей. Другая возможность — изменение фазы AF-порядка на границах AF-доменов. Тогда конечная плотность состояний вдоль всей большой границы Ферми отвечает состояниям, рассеянным на дефектах магнитной структуры или локализованным на них и на неоднородностях потенциала, вносимых допантами. В пользу такой гипотезы говорит и то, что возникающие при отбеливании вакансии кислорода в CuO_2 -плоскости разрушают AF-порядок. Они действуют так же, как немагнитные примеси Zn в h -купратах [24], при этом сохраняются достаточно большие длины ξ_{AF} спиновых AF-корреляций

$200 \text{ \AA} < \xi < 50 \text{ \AA}$ при $0.13 \leq x \leq 0.16$ [15].

Важно отметить наблюдаемые в работе [15] особенности эволюции кривых энергетического распределения фотоэлектронов SC-образцов в ходе допирования. Для NCCO было обнаружено, что эти кривые в горячих точках описываются двумя лоренцианами: первый пик — при E_F и второй — с максимумом, удаленным на величину псевдощели $PG = 100\text{--}200$ мэВ. Вес первого вклада растет с допированием одновременно с падением длины ξ_{AF} двумерных спиновых корреляций и с ростом коэффициента Холла. Величина псевдощели оказалась больше, чем наблюдаемая амплитуда (порядка 40 мэВ) анизотропии $LEG(\varphi)$ в AG-образцах, но она сопоставима с расчетной анизотропией LEG для однородных AF-решений модели (8). Гипотеза о формировании в ходе допирования плотности состояний на границе Ферми в горячих точках за счет состояний, локализованных на дефектах или рассеянных на них, требует дополнительного исследования. Ниже исследуется простейший тип неоднородностей в виде доменных стенок в периодических страйп-структурах. Будет показано, что наличие доменных стенок сильно влияет на поверхность Ферми даже для модели (7), для которой в однородном AF-состоянии дырочный карман в узельной области не формируется.

Перейдем к результатам MF-расчетов страйп-структур. Для модели (8) [18] с переменным $U_{eff}(x)$ поиск самосогласованных MF-решений с заданной системой параллельных доменных стенок приводил к однородному PM-решению. Для модели с параметрами (7) были найдены решения со страйп-структурой. Для страйпов, ориентированных вдоль Cu–Cu-связей, сохраняется картина электронных карманов в антиузельных областях, близкая к случаю однородного AF-состояния модели. В отличие от них, для диагональных страйпов карты интенсивности фотоэмиссии $I(\mathbf{k}, \omega = 0)$ воспроизводят фрагментарный характер поверхности Ферми и дырочную заплату в районе $k \sim (\pi/2, \pi/2)$. На рис. 4 представлены карты $I(\mathbf{k}, \omega = 0)$ и интенсивностей $\bar{I}(\mathbf{k}, \omega = 0)$, усредненных по интервалу частот $\Delta\omega \sim 0.08t$, для диагональной структуры с центрированными на связях доменными стенками, с векторами трансляции $\mathbf{E}_1 = a(l, l)$, $\mathbf{E}_2 = (-a, a)$ и с числом центров $n_c = 2l = 20$ в элементарной ячейке (a — постоянная решетки). В исследованном случае с $l = 10$ (в отличие от однородного AF-решения) главный дырочный карман несколько сдвинут в область второй магнитной зоны Бриллюэна. Он образуется лишь в узельном направлении,

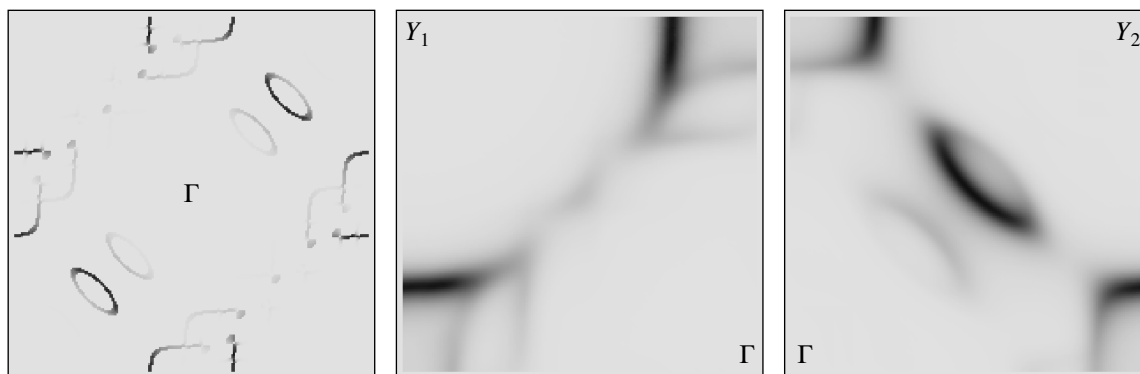


Рис. 4. Слева — карта интенсивностей $I(k, \omega = 0)$ для диагональной страйп-структуры с $l = 10$ на полной фазовой плоскости $|k_{x(y)}| \leq \pi$ при $\Delta\omega = 0.02t$; в центре и справа — карты интенсивности $\bar{I}(k, \omega = 0)$, усредненной в частотном окне $\Delta\omega = 0.08t$, в двух квадрантах фазовой плоскости. Здесь $\Gamma = (0, 0)$, $Y_1 = (-\pi, \pi)$, $Y_2 = (\pi, \pi)$ и направление $\Gamma-Y_1$ совпадает с направлением страйпов

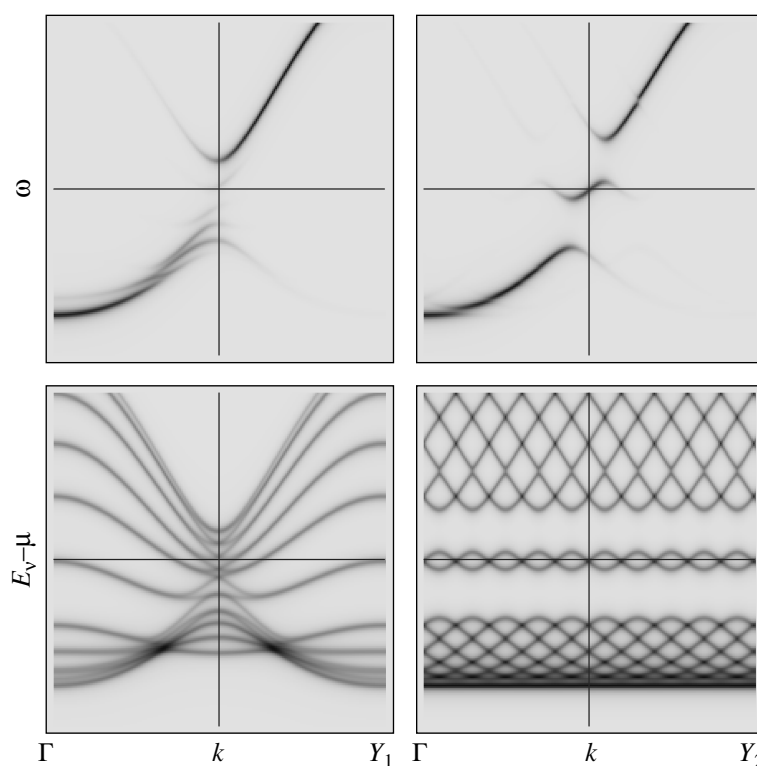


Рис. 5. Вверху — дисперсии зон страйп-структуры, выявляемые на картах спектральной плотности $A(k, \omega)$ для k , меняющегося на диагоналях $\Gamma(0, 0)-Y_1(-\pi, \pi)$ и $\Gamma-Y_2(\pi, \pi)$, параллельной и перпендикулярной страйпам. Внизу — собственные значения $E_\nu(k) - \mu$ на тех же сечениях, полученные из карты $\bar{A}(r, \omega)$, уравнение (9). Энергия меняется в интервале $-4 < \omega/t < 4$, уширение $\Delta\omega = 0.04t$. Горизонтальная черта фиксирует уровень Ферми, вертикальная — пересечение с границей магнитной зоны Бриллюэна

нормальном к направлению страйпов.

Зоны и перенос спектрального веса между ними видны из карты спектральной плотности $A(k, \omega)$ на плоскости (k, ω) при изменении k вдоль опреде-

ленного контура). На рис. 5 профили зон приведены для двух диагональных сечений $\Gamma(0, 0)-Y_1(-\pi, \pi)$ и $\Gamma-Y_2(\pi, \pi)$, параллельного и перпендикулярного направлению страйпов. Там же представлены соб-

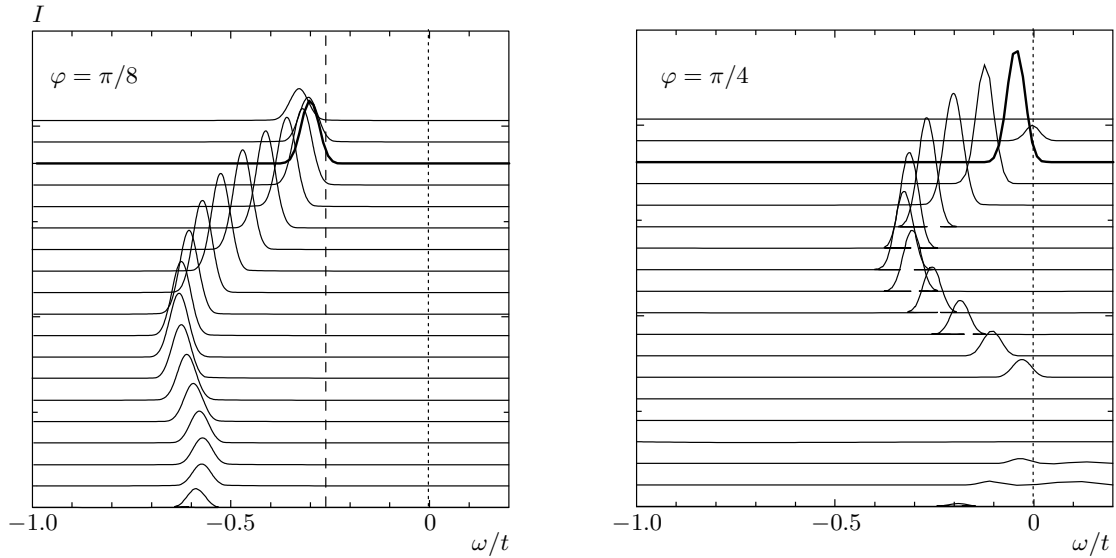


Рис. 6. Кривые распределения фотоэлектронов по энергиям, т. е. интенсивности $I(k, \omega)$ как функции ω (со сдвигами по оси I) для серии импульсов $k = k_i$. Значения k_i меняются на отрезках, пересекающих большую дугу Ферми в антиузельной области $\varphi = 0$ и в горячей точке $\sim \pi(0.29, 0.71)$ (соответственно слева и справа). Модуль $|k - (\pi, \pi)|$ менялся снизу вверх в пределах от π до 0.6π

ственные энергии $E_\nu - \mu$, полученные из карты функции

$$A^0(k, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\bar{k} \in \bar{G}} \sum_{m, \sigma, \nu} \bar{\delta}(E_{\bar{k}\nu} - \mu - \omega) \delta_{\bar{k}, \bar{k} + B_m} \quad (9)$$

вместо (6). Стандартное уширение δ -функции по энергии с $\Delta\omega \sim 0.08t$ проводилось в формулах (6), (9). Зонные энергии $E_\nu(k)$ периодичны в k -пространстве с векторами трансляции B_1, B_2 обратной решетки спиновой структуры. В то же время спектральная плотность периодична во всем импульсном пространстве исходной решетки, так что разные участки зон или поверхностей Ферми проявляются в фотоэмиссии (прямой или обратной) с разной интенсивностью. В отличие от однородного АФ-состояния для диагональных страйпов дырочный сегмент поверхности Ферми вблизи $(\pi/2, \pi/2)$ обязан своим происхождением внутрищелевым состояниям, локализованным на узлах вблизи доменных стенок. В этом убеждает расчет плотностей электронов n_j в зависимости от положения узла $j = (j_x, 0)$ в элементарной ячейке для одноэлектронных состояний $\chi_\nu(k)$ с энергией Ферми $E_\nu(k) = \mu$ в узельной и антиузельной областях: соответственно при $k = (\pi/2, \pi/2)$ и $k = (0.75\pi, \pi)$.

Однако ширина внутрищелевой зоны, связанной с доменной стенкой, достаточно мала $\Delta E \sim 0.6t \sim$

~ 180 мэВ и при параметрах модели (7) эта зона отделена от ЛНВ значительной щелью. Такая дискретная зона внутри хаббардовской щели, отделенная от широкой ЛНВ, наблюдается в ARPES-данных для NCCO при самом малом исследованном допировании $x = 0.04$ [15]. При $x = 0.1-0.15$ на сечении $\Gamma - Y$ и $\omega < 0$ наблюдается единая зона с дисперсией $\omega \sim 0.4$ эВ, превосходящей дисперсию внутрищелевой зоны $\omega \sim 100$ мэВ. Возможно, относительно малая ширина внутрищелевой зоны в страйп-фазе связана с регулярным характером исследованной структуры. Неясно, может ли учет нерегулярности доменной стенки или дефектов другого типа устранить расхождение в эффективной дисперсии зоны в узельном направлении. Что касается «горячих точек», то псевдощель в них составляет величину $0.27t \sim 80$ мэВ, сопоставимую с наблюдаемой величиной [15]. Оценка величины псевдощели была сделана из серии кривых распределения фотоэлектронов по энергии на сечениях, пересекающих большую дугу Ферми в антиузельной области и в «горячей точке» ($\varphi = 0$ и $\varphi = \pi/8$), изображенных на рис. 6.

Рассмотрение диагональной страйп-фазы как простейшей дефектной структуры показало возможность происхождения дырочного кармана на поверхности Ферми электронно-допированных купратов за счет состояний, локализованных на

дефектах. Это было бы альтернативой происхождения его за счет состояний нижней хабардовской зоны. Сохранение в горячих точках как псевдощели, так и конечной плотности состояний на границе Ферми $\rho(E_F)$ и увеличение последней с допированием могут свидетельствовать либо об одновременном существовании антиферромагнитных и парамагнитных областей, либо о вкладе в $\rho(E_F)$ состояний, локализованных на дефектах. Дефектами могут служить неупорядоченная система доменных стенок или точечные дефекты магнитной структуры на кислородных вакансиях в SC-образцах. Анизотропия щели ведущего края кривых распределения фотоэлектронов в AG-образцах и отсутствие ее в SC-образцах говорят о сохранении дальнего AF-порядка в первых и разрушении его в SC-образцах.

Автор благодарна В. Я. Кривнову за полезные обсуждения работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Damascelli, Z.-X. Shen, and Z. Hussain, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473 (2003); E-print archives, cond-mat/0208504.
2. A. R. Kampf and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **42**, 7967 (1990).
3. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, Е. А. Плеханов, *Письма в ЖЭТФ* **67**, 350 (1998); *ЖЭТФ* **114**, 985 (1998); **115**, 649 (1999).
4. C. Kusko and R. S. Markiewicz, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 963 (2000).
5. D. S. Marshall, D. S. Dessau, A. G. Loeser et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4841 (1996).
6. T. Timusk and B. Statt, *Rep. Progr. Phys.* **253**, 1 (1995).
7. N. Doiran-Leyrud, C. Proust, D. LeBoeuf et al., *Nature* **447**, 565 (2007); A. F. Bangura, J. D. Fletcher, A. Carington et al., E-print archives, cond-mat/0707.4461.
8. T. Yoshida, X. J. Zhou, T. Sasagawa, W. L. Yang et al., *Phys. Rev. Lett.* **91**, 027001 (2002).
9. М. Я. Овчинникова, *ЖЭТФ* **127**, 120 (2005).
10. M. Granath, *Phys. Rev. B* **74**, 245112 (2006); E-print archives, cond-mat/0603156.
11. N. P. Armitage, D. H. Lu, D. L. Feng et al., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1126 (2002).
12. N. P. Armitage, D. H. Lu, D. L. Feng et al., *Phys. Rev. Lett.* **87**, 147003 (2002).
13. N. P. Armitage, F. Ronning, D. H. Lu et al., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 257001 (2002).
14. H. Matsui, K. Terashima, T. Sato et al., *Phys. Rev. Lett.* **94**, 047005 (2005).
15. H. Matsui, T. Takahashi, T. Sato et al., *Phys. Rev. B* **75**, 224514 (2007).
16. H. Matsui, K. Terashima, T. Sato et al., *Phys. Rev. Lett.* **95**, 017003 (2005).
17. G. Blumberg, A. Koitzsch, A. Gozar et al., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 107002 (2002).
18. C. Kusko, R. S. Markiewicz, M. Lindroos, and A. Bansil, *Phys. Rev. B* **84**, 140513 (R) (2002).
19. T. Das, R. S. Markiewicz, and A. Bansil, *Phys. Rev. B* **74**, 020506 (R) (2006).
20. T. Das, R. S. Markiewicz, and A. Bansil, E-print archives, cond-mat/0704.0956.
21. P. Dai, H. J. Kang, H. A. Mook et al., *Phys. Rev. B* **71**, 100502 (2005).
22. H. J. Kang, P. Dai, B. J. Campbell et al., *Nature Mater.* **6**, 224 (2007).
23. P. Richard, M. Poirier, S. Jandl, and P. Fournier, *Phys. Rev. B* **72**, 184514 (2005).
24. P. Richard, M. Neupane, Y.-M. Xu et al., E-print archives, cond-mat/0704.0453.
25. М. Я. Овчинникова, *ЖЭТФ* **131**, 525 (2007).
26. N. Harima, A. Matsuno, A. Fujimori et al., *Phys. Rev. B* **64**, 220507 (2001).