

**ПОВЕРХНОСТЬ ФЕРМИ ЭЛЕКТРОННОГО ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО
СВЕРХПРОВОДНИКА В РАМКАХ КЛАСТЕРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ С
КОНТРОЛИРУЕМЫМ СПЕКТРАЛЬНЫМ ВЕСОМ**

Кузьмин В.И.

научный руководитель д-р.физ.-мат. наук проф. Овчинников С. Г.

научный соруководитель канд. физ.-мат. наук Николаев С. В.

Сибирский федеральный университет

Как известно, природа носителей заряда в купратных сверхпроводниках p- и n-типа носит различный характер, что приводит к асимметрии фазовой диаграммы для двух данных типов соединений. Сверхобменное взаимодействие d-ионов в n-купратах слабо подавляется с допированием вследствие механизма диамагнитного разбавления. Как результат, в сверхпроводниках n-типа антиферромагнитные корреляции вблизи оптимального допирования имеют большую длину (порядка 400 единиц постоянных решетки). В отличие от дырочных купратных сверхпроводников, в которых псевдощель открывается в области точки $(\pi, 0)$, для соединений n-типа характерно подавление спектрального веса в «горячих» точках, лежащих на пересечении поверхности Ферми с границей антиферромагнитной зоны Бриллюэна. Данный эффект был воспроизведен в результате теоретических исследований электронных сверхпроводящих купратов из первых принципов [1,2].

Ключевую роль при описании электронной структуры ВТСП купратов играет учет антиферромагнитных корреляций на фоне сильных локальных электронных корреляций. Два режима антиферромагнитных корреляций – спиновая жидкость и антиферромагнитный металл, были рассмотрены в работе [1], где была рассчитана эволюция закона дисперсии и поверхности Ферми с допированием для электронного сверхпроводника SCCO. В первом случае применялась самосогласованная процедура учета ближнего порядка, во втором использовалось приближение Хаббард-Ив в рамках LDA+GTB подхода для учета дальнего порядка. Лучшее описание было получено во втором случае: полученные данные оказались в качественном согласии с данными ARPES-экспериментов, однако данный подход не позволил воспроизвести распределение спектрального веса на поверхности Ферми.

Приближение Хаббард-I не позволяет учесть ближние магнитные корреляции. В силу этого мы применяем кластерную теорию для включения ближнего порядка в рассмотрение. В настоящей работе поведение, характерное для электронных купратных сверхпроводников, исследуется в рамках кластерной теории возмущений с контролируемым спектральным весом NC-CPT [3] в $t-t'-t''-J$ - модели. NC-CPT, как и CPT, предполагает пертурбативное рассмотрение дальних взаимодействий и точный учет ближних путем точной диагонализации кластера. Применение техники X-операторов позволяет контролировать полный спектральный вес квазичастиц на всех этапах вычислений. Наш подход позволил наблюдать в $t-t'-t''-J$ - модели линии нулей функции Грина. Впервые линии нулей наблюдались в модели Хаббарда методом CDMFT [4,5]. Используемая нами модель является слишком грубой, чтобы претендовать на хорошее согласие с экспериментальными данными, но подходящей, чтобы описать характерные эффекты, наблюдаемые для ВТСП-купратов n-типа. В частности, мы показываем, как линии нулей функции Грина могут влиять на распределение спектрального веса и вызывать эффект появления «горячих» точек.

Гамильтониан $t-t'-t''-J$ - модели в дырочном представлении имеет вид:

$$H = \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma}) + J \sum_{i \neq j} \left(\overline{S_i S_j} - \frac{n_i n_j}{4} \right). \quad (1)$$

Квазифермиевские операторы $c_{i\sigma}^+$ и $c_{i\sigma}$ здесь действуют в ограниченном гильбертовом пространстве с исключенными двухчастичными состояниями, $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$ - оператор числа дырок на узле, σ - проекция спина, $\overline{\sigma} = -\sigma$, J - обменный интеграл, t_{ij} - интеграл перескока с узла i на узел j . Учитываются перескоки t между ближайшими соседями, t' - между вторыми и t'' - между третьими.

Идеология кластерной теории возмущений предусматривает три основных шага:

- 1) Исходная решетка разбивается на кластеры.
- 2) Вычисляется функция Грина кластера.
- 3) Восстанавливается функция Грина на решетке в результате рассмотрения межкластерного взаимодействия как возмущения.

Процедура разбиения решетки на кластеры и анализ возможных покрытий для модели Хаббарда подробно описаны в работе [3]. Мы действуем аналогичным образом для $t-t'-t''-J$ - модели, покрывая решетку трансляциями кластера 2×2 .

Слагаемые в гамильтониане (1) перегруппируем так, чтобы отделить внутрикластерные взаимодействия от межкластерных. В результате получим:

$$H = \sum_f h^c(f) + \sum_{f, \Delta i} h^{cc}(f, f + \Delta i) \quad (2)$$

где f , $f + \Delta i$ и $f + \Delta j$ - кластерные индексы.

Проведем процедуру точной диагонализации гамильтониана $h^c(f)$ и на базисе его собственных состояний построим X-операторы Хаббарда $|p\rangle\langle q|$. Функция Грина, определенная на исходной решетке и связанная с функцией Грина на X-операторах $D_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = \langle\langle X_{\tilde{\mathbf{k}}}^\alpha | X_{\tilde{\mathbf{k}}}^{-\beta} \rangle\rangle_\omega$ соотношением (вектор $\tilde{\mathbf{k}}$ принадлежит редуцированной зоне Бриллюэна)

$$G_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{N_c} \sum_{\alpha\beta} \sum_{i,j=1}^{N_c} \gamma_{\sigma i}(\alpha) \gamma_{\sigma j}(\beta) e^{-ik(r_i - r_j)} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega), \quad (3)$$

рассчитывается нами в рамках теории возмущений в приближении Хаббард-Ив терминах X-операторов. В (3) вектор \mathbf{k} принадлежит исходной зоне Бриллюэна, N_c - количество узлов в кластере, равное четырем в нашем случае, $\gamma_{\sigma i}(\alpha)$ - матричные элементы оператора $c_{i\sigma}$ в представлении кластерных операторов Хаббарда, α и β - корневые вектора.

Аналогично работе [3] введем f -фактор для контроля полного спектрального веса фермиевских квазичастиц:

$$f \equiv \frac{\sum_{\alpha} |\gamma_{i\sigma}(\alpha)|^2 F(\alpha)}{(1+n)/2}, \quad (4)$$

где n – степень электронного допирования, $F(\alpha) \equiv F(p, q) = \langle X^{pp} \rangle + \langle X^{qq} \rangle$ - фактор заполнения.

Спектральная функция

$$A_{\sigma}(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow +0} (\text{Im } G_{\sigma}(k, \omega + i\eta + \mu)) \quad (5)$$

удовлетворяет соотношению

$$\int d\omega A_{\sigma}(k, \omega) = \langle [c_{k\sigma}, c_{k\sigma}^+]_{+} \rangle = f(1+n)/2, \quad (6)$$

где n – степень электронного допирования. При учете всех корневых векторов α в (4) $f = 1$. В наших вычислениях не учитывается часть переходов таким образом, что учет оставшихся приводит к выполнению условия $f \geq 0.995$, что позволяет существенно сократить время вычислений без значительного влияния на конечный результат.

Допирование электронами осуществляется по схеме, аналогичной приведенной в работе [3]. Для кластера с четырьмя узлами схема выглядит следующим образом. Гильбертово пространство состояний кластера разбивается на сектора с определенным числом дырок в кластере N . В случае половинного заполнения $N = 4$. Далее определяются нижние энергетические термы в секторах гильбертова пространства с $N = 4$ и $N = 3$, и устанавливается вероятность их заселения в зависимости от величины электронного допирования на узел n , как $1-x$ и x , соответственно. В данном случае четырехузельного кластера $x = 4n$ и в дальнейших расчетах мы ограничиваемся максимальной величиной допирования $n = 0.25$. Для увеличения степени допирования необходимо учесть следующие сектора гильбертова пространства.

На рис.1, представлены результаты численных расчетов в рамках NC-CPT для параметров $t = -0.5, t' = 0.02, t'' = -0.07, J = 0.195$ вблизи оптимального допирования. Рассчитанная нами поверхность Ферми имеет качественное сходство с результатами работ [1,2], образуя карманы вблизи точки $(\pi, 0)$ и $(\pi/2, \pi/2)$. Распределение спектрального веса на поверхности Ферми имеет неравномерный характер и представляет собой результат весьма сложного взаимного расположения и аннигиляции полюсов и нулей функции Грина. Вблизи тех областей обратного пространства, где линии нулей пересекают границы антиферромагнитной зоны Бриллюэна, спектральный вес стремится к нулю, формируя появление “горячих” точек. Распределение спектрального веса в кармане вокруг точки $(\pi/2, \pi/2)$ имеет максимум в области, более близкой к точке $(0,0)$, что объясняется близким положением линии нулей к противоположной части кармана.

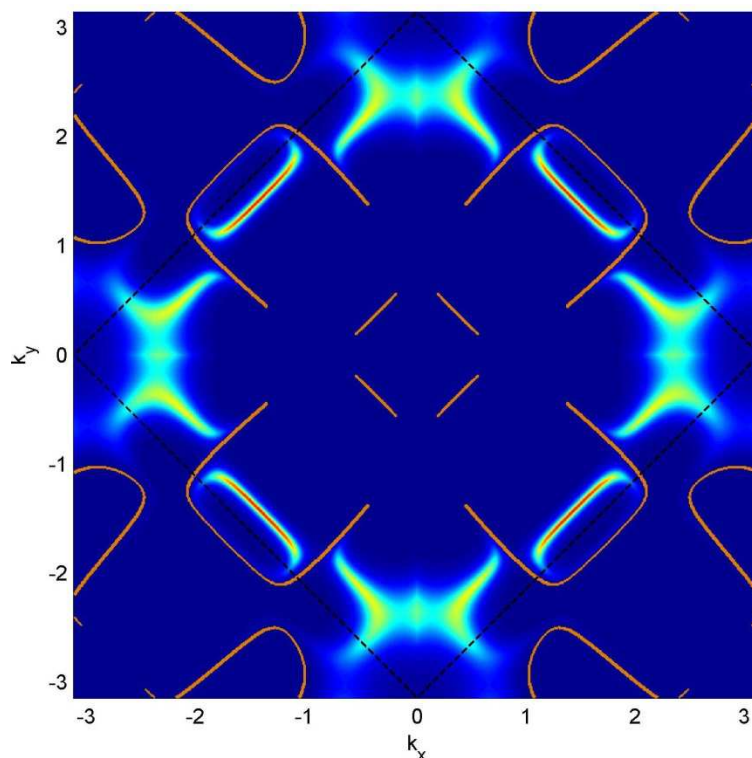


Рис.1. Распределение спектрального веса при энергии Ферми первой зоне Бриллюэна для значений параметров модели $t = -0.5$, $t' = 0.02$, $t'' = -0.07$, $J = 0.195$ при допировании $n = 0.14$. Тонкими оранжевыми кривыми изображены линии нулей, штриховыми черными прямыми – границы антиферромагнитной зоны Бриллюэна.

Таким образом, наша кластерная теория позволила нам описать распределение спектрального веса, характерное для высокотемпературных купратных сверхпроводников n-типа вблизи оптимального допирования и показать, что наблюдаемая экспериментально поверхность Ферми может рассматриваться как результат нетривиального взаимного расположения полюсов и нулей функции Грина.

Литература:

- 1) M.M. Korshunov et al., J. Phys.:Condens. Matter **22**, 015701 (2010).
- 2) C. Weber, K. Haule, G. Kotliar, Phys. Rev. B **82**, 125107 (2010).
- 3) С.В. Николаев, С.Г. Овчинников, ЖЭТФ **141**, 135 (2012).
- 4) T.D. Stanescu and G. Kotliar, Phys. Rev. B **74**, 125110 (2006).
- 5) S. Sakai, Y. Motome, and M. Imada, Phys. Rev. Lett. **102**, 056404 (2009).