

ВЛИЯНИЕ МЕЖСЛОЙНОГО ТУННЕЛИРОВАНИЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ ДВУХСЛОЙНЫХ КУПРАТОВ И КВАНТОВЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПО КОНЦЕНТРАЦИИ НОСИТЕЛЕЙ И СИЛЬНОМУ МАГНИТНОМУ ПОЛЮ

С. Г. Овчинников^{a,b,*}, И. А. Макаров^a, Е. И. Шнейдер^{a,b}

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

^b Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М. Ф. Решетнева
660014, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 12 мая 2010 г.

Работа является теоретическим исследованием электронной структуры двухслойных ВТСП-купратов и ее эволюции с допированием и под действием сильного магнитного поля. Исследование проводится на основе $t-t'-t''-J^*$ -модели в рамках обобщенного приближения Хартри–Фока. Возможность туннелирования между CuO_2 -слоями учтена в виде ненулевого интеграла перескока между орбиталями соседних плоскостей и включена в схему кластерной формы теории возмущений. Основным эффектом связи между двумя CuO_2 -слоями в элементарной ячейке является двухслойное расщепление, заключающееся в наличии антисвязывающей и связывающей зон, образованных комбинацией идентичных зон самих слоев. Изменение уровня допирования вызывает перестройку зонной структуры и поверхности Ферми, в связи с чем наблюдается ряд квантовых фазовых переходов. Сильное внешнее магнитное поле приводит к принципиально иному виду электронной структуры. В поле квантовые фазовые переходы наблюдаются не только с допированием, но и с варьированием величины поля. Вследствие межслойного туннелирования квантовые фазовые переходы также расщепляются, в результате появляется более сложная последовательность переходов Лифшица, чем в однослойных купратах.

1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно, все соединения, принадлежащие купратному классу ВТСП, имеют в своем составе один или несколько слоев CuO_2 . На сегодняшний день принято считать, что сверхпроводимость и электронная структура в окрестности уровня Ферми образуются медь-кислородными плоскостями, а остальные атомы служат поставщиками зарядов в эти плоскости. Однако с появлением двух идентичных CuO_2 -слоев в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ и других купратах физические свойства меняются и говорит об этом прежде всего зависимость T_c от количества слоев. Температура перехода в сверхпроводящее состояние растет с увеличением количества CuO_2 -слоев n вплоть до числа $n = 3$, а затем убывает [1, 2]. Уменьшение T_c после $n = 3$ принято объяснять нехваткой носителей, приходящихся на каждую плоскость.

Рост же T_c до сих пор не получил адекватного объяснения. Кроме того, есть и другие явления, характерные только для многослойных ВТСП, например, неравномерное распределение допированных носителей по плоскостям [1–10], сосуществование антиферромагнитной и сверхпроводящей фаз в одной элементарной ячейке, но в разных плоскостях [11]. Поэтому естественно появляется интерес в выяснении эффекта, который производит включение связи между слоями CuO_2 .

Очевидно, что наиболее ярко эффекты многослойности проявляются в сверхпроводящей фазе. Однако сначала необходимо понять, что происходит с электронной структурой с увеличением числа слоев в нормальной фазе. Многослойные купраты, как и однослойные, являются системами с сильными электронными корреляциями, поэтому для их описания требуется специальный подход, учитывающий сильное отталкивание носителей на одном узле.

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

Таким подходом является обобщенный метод сильной связи, предлагавшийся в работах [12–15] и позже развитый для купратов [16], манганитов [17] и кобальтитов [18]. В этом подходе используется алгебра операторов Хаббарда и поэтому расчет выполняется на языке квазичастиц, осуществляющих переходы между многоэлектронными начальным и конечным состояниями. Именно такой подход является адекватным для сильнокоррелированных систем. Аналогичные подходы к описанию нормальной и сверхпроводящей фаз в рамках модели Хаббарда, t - J -модели, спин-фермионной модели в работах [19–30] в режиме сильных корреляций дают согласующуюся картину антиферромагнитного недопированного диэлектрика со щелью, обусловленной процессами переноса заряда. С допированием дальний магнитный порядок сменяется ближним, а электронная структура при малом допировании характеризуется малыми дырочными карманами в окрестности точек $(\pi/2, \pi/2)$ в зоне Бриллюэна. Учет процессов рассеяния дырок на спиновых флуктуациях [21–34] приводит к подавлению спектрального веса части кармана, обусловленной теневой зоной, и формированию дуги, наблюдаемой в ARPES [35]. Недавние ARPES-измерения с улучшенным энергетическим разрешением действительно обнаружили карман с резко различающимися спектральными весами в разных точках зоны Бриллюэна [36].

Большинство теоретических работ сделано для CuO_2 -плоскости, что непосредственно позволяет описывать однослойные купраты типа $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ и $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. Однако большая часть ARPES-экспериментов и измерений квантовых осцилляций выполнена для двухслойных купратов. В связи с этим представляет интерес исследовать влияние межслойного туннелирования на электронную структуру. Простейший эффект туннелирования между слоями давно известен и связан с формированием связывающей и антисвязывающей зон, что приводит к расщеплению поверхности Ферми, наибольшему в окрестности антинодальных точек $(\pi, 0)$ [37]. В настоящей работе основное внимание уделено влиянию туннелирования на эволюцию поверхности Ферми с ростом концентрации допирования и величины сильного магнитного поля. Для однослойных купратов выявлена серия квантовых фазовых переходов Лифшица по концентрации [38] и магнитному полю [39]. Мы покажем расщепление переходов Лифшица за счет межслойного туннелирования.

План работы следующий. Вид интеграла перескока между CuO_2 -слоями будет рассмотрен в

разд. 2. Там же будут получены основной эффект двухслойного расщепления и его проявление в зонной структуре и поверхности Ферми. Также мы охарактеризуем концентрационную эволюцию квазичастичного спектра и поверхности Ферми двухслойных купратов и покажем, что качественно она незначительно отличается от эволюции для однослойных структур. В разд. 3 будет проведено сравнение нашего теоретического расчета с результатами экспериментов ARPES по поверхности Ферми и показано, что зонные структуры для соединений YBCO и Bi2212 , имеющих разный вид интеграла перескока, очень близки. В разд. 4 будет рассмотрена плотность состояний для различных концентраций допированных носителей, а также зависимость химического потенциала от концентрации. Раздел 5 посвящен вопросу влияния сильного внешнего магнитного поля на электронную структуру, который возникает в последнее время все чаще при сравнении результатов экспериментов по квантовым осцилляциям с ARPES-данными.

2. ДВУХСЛОЙНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ

Элементарная ячейка $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ состоит из двух CuO_5 -пирамид, образованных плоским CuO_4 -кластером и атомом апического кислорода, CuO -цепочек, атомов Y между CuO_2 -плоскостями и атомов Ba (рис. 1). В нашей модельной ячейке оставляем только двухслойный блок из двух CuO_5 -пирамид. Двухслойные блоки в соседних элементарных ячейках реального соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ располагаются строго друг над другом, в отличие, например, от соединения Bi2212 (рис. 2), где элементарные ячейки сдвинуты на половину своей величины по направлению диагонали в плос-

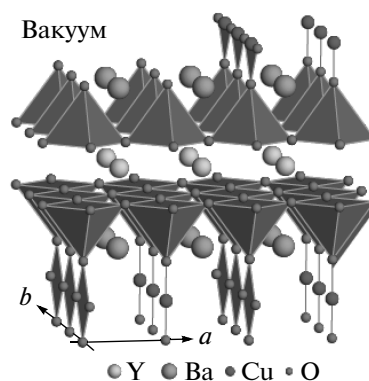


Рис. 1. Элементарная ячейка двухслойного купрата $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ [32]

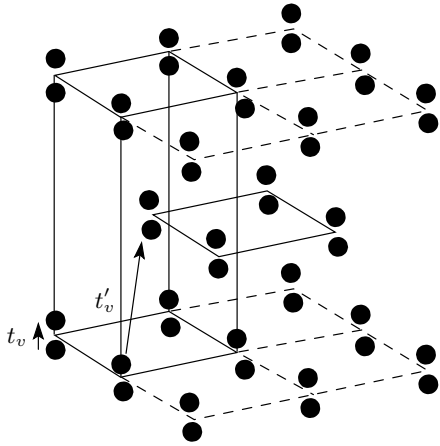


Рис. 2. Схематическое изображение ячейки Bi2212 : t_v обозначает перескоки внутри двухслойного блока, t'_v — перескок через одну ячейку [34]

кости. Расположение этих блоков по отношению друг к другу определяет вид дисперсии интеграла перескока вдоль оси z .

На рис. 1 видно, что элементарная ячейка двухслойного купрата симметрична относительно отражения в плоскости, проходящей через атом иттрия параллельно плоскости CuO_2 -слоя. Волновые функции для верхней и нижней CuO_5 -пирамид идентичны, и поэтому можно рассматривать уже отдельную пирамиду как элементарный кластер. Данное утверждение было бы абсолютно верным, если бы у нас не было связи между CuO_2 -плоскостями, наличие же перескоков между медно-оксидными слоями обязывает к формированию общих волновых функций для двух слоев. Однако величина межслоевых перескоков настолько мала, что они могут рассматриваться как возмущение. Это позволяет органично вписать связь между CuO_2 -слоями в схему кластерной формы теории возмущений.

Структура орбитальных перекрытий в рассматриваемом соединении такова, что электронные волновые функции в основном образованы состояниями внутри CuO_2 -плоскостей, вероятность перехода частицы из одного слоя в другой очень мала. Малость вероятности таких переходов обусловлена формой плоскостных $d_{x^2-y^2}$ -, p_x -, p_y -орбиталей и большим межплоскостным расстоянием. Данные орбитали, благодаря тому что обладают значительной плотностью вероятности только в плоскости, играют определяющую роль в формировании электронной структуры в отдельном CuO_2 -слое. В перпендикулярном же слою направлении их плотность вероятности очень мала. Гораздо обширнее пере-

крытие p_z -орбиталей кислорода, основная электронная плотность которых располагается вдоль оси z [40]. И наиболее сильное межслоевое перекрытие присутствует у s -орбиталей меди и s -орбиталей с p -орбиталями атомов кислорода в соседней плоскости. Однако из-за того, что они не участвуют в формировании динамики носителей внутри слоя, ролью s -орбиталей обычно пренебрегают. Тем не менее влияние s - s -перекрытия на электронную структуру происходит и осуществляется опосредованно через плоскостные орбитали кислорода и, как следствие, через d -орбитали меди. Это делает возможным эффективное перекрытие d_x -орбиталей между CuO_2 -плоскостями. Данный результат был продемонстрирован в работе [40] с использованием однозонной модели. Симметрия перекрытия s - и d -орбиталей учитывается в записи интеграла перескока между слоями, который для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ принимает вид

$$t_{\perp} = t_{dd} (\cos k_x a - \cos k_y b)^2. \quad (1)$$

В дальнейшем при записи различных точек \mathbf{k} -пространства будем предполагать, что для постоянных решетки справедливо равенство $a = b = 1$. Значение интеграла перескока t_{dd} заимствуется нами из работы [40] и считается равным 0.25 эВ, т. е. на порядок меньше, чем наибольший внутриплоскостной интеграл перескока t_{pd} между d_x -орбиталями меди и p -орбиталями кислорода. После домножения на коэффициенты Клебша–Гордана и генеалогические коэффициенты, которые проявляются при переходе от описания обычных фермионов к хаббардовским фермионам, величина эффективного перескока между слоями становится равной 0.1 эВ.

Добавление второго атома апического кислорода к CuO_5 -пирамиде симметрично первому превращает ее в CuO_6 -октаэдр, который выбирается в качестве элементарного кластера при описании однослойного купрата $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Однослойное соединение $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ было очень подробно описано методом ГТВ в работах [16, 41]. В работе [41] из расчетов *ab initio* получены параметры многозонной p - d -модели в схеме LDA+ГТВ (LDA-расчеты + обобщенный метод сильной связи [16]) и показано, что эффективной низкоэнергетической моделью является t - t' - t'' - J^* -модель. В наших расчетах для CuO_2 -слоя используются параметры t - t' - t'' - J^* -модели, вычисленные в рамках LDA+ГТВ-метода [42].

Поскольку купратные ВТСП являются системой с сильными электронными корреляциями, многозонную p - d -модель с реалистичными параметрами, по-

лученными в схеме LDA+GTV, в области низкоэнергетических возбуждений мы сводим к t - J^* -модели в пределе $U \gg t$ [43–46]. В данном случае U равно энергии щели с переносом заряда $E_{ct} \approx 2$ эВ. Эта модель записывается для дырочных возбуждений, образующих зоны квазичастиц, описываемых операторами Хаббарда

$$X_f^{\sigma S} = |\sigma\rangle\langle S| \quad \text{и} \quad X_f^{\bar{\sigma} S} = |\bar{\sigma}\rangle\langle S|,$$

здесь $|\sigma\rangle$ — локальное состояние одной дырки с проекцией спина σ , а $|S\rangle$ — двухдырочный синглет Жанга–Райса. Будем учитывать перескоки на другие ячейки до третьего ближайшего соседа включительно, поэтому t - J^* -модель переходит в t - t' - t'' - J^* -модель; J^* означает, что учитываются не только обменные слагаемые, но и трехцентровые коррелированные перескоки.

Как известно, обобщенный метод сильной связи включает в себя три этапа: точную диагонализацию внутриячеечной части гамильтониана с полным учетом всех взаимодействий внутри ячейки, построение операторов Хаббарда на основе многочастичных базисных состояний и учет перескоков между ячейками по теории возмущений. В результате применения идеологии GTV t - t' - t'' - J^* -модель представляется через операторы Хаббарда в виде внутриячеечной и межъячеечной частей. Поскольку в элементарной ячейке имеются два одинаковых CuO_2 -слоя, волновые функции для которых идентичны, связь между ними относится к межъячеечной части гамильтониана и рассматривается по теории возмущений. Таким образом, с этого момента элементарным кластером считается одна CuO_5 -пирамида.

Определение чисел заполнения одночастичных состояний можно провести с помощью совместного решения уравнений для полного числа дырок

$$1 + x = \sum_{\sigma} p_{\sigma} + 2\langle X^{SS} \rangle,$$

где x — степень допирования дырками на один CuO_2 -слой, и условия полноты базиса

$$\sum_{\sigma} X^{\sigma\sigma} + X^{SS} = 1.$$

Общее число состояний для одночастичного сектора гильбертова пространства

$$\sum_{\sigma} p_{\sigma} = 1 - x.$$

Если учесть, что рассматривается парамагнитная фаза, то вероятность заполнения одночастичных состояний со спином вверх $p_{\sigma} = \langle X_f^{\sigma\sigma} \rangle$ и спином вниз $p_{\bar{\sigma}} = \langle X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \rangle$ одинакова,

$$p_{\sigma} = p_{\bar{\sigma}} = \frac{1 - x}{2}.$$

Гамильтониан t - t' - t'' - J^* -модели в случае двухслойного купрата имеет вид

$$\begin{aligned} H_{t-t'-t''-J^*} = & \sum_{f\alpha\sigma} (\varepsilon_1 - \mu) X_{f\alpha}^{\sigma\sigma} + \sum_{f\alpha} (\varepsilon_2 - 2\mu) X_{f\alpha}^{SS} + \\ & + \sum_{fg\alpha\sigma} t_{fg} X_{f\alpha}^{S\sigma} X_{g\alpha}^{\sigma S} + \sum_{fg\alpha\sigma} J_{fg} (X_{f\alpha}^{\sigma\bar{\sigma}} X_{g\alpha}^{\bar{\sigma}\sigma} - X_{f\alpha}^{\sigma\sigma} X_{g\alpha}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) - \\ & - \sum_{m \ln \alpha\sigma} \frac{\tilde{t}_{ml} \tilde{t}_{ln}}{E_{ct}} (X_{m\alpha}^{S\sigma} X_{l\alpha}^{\sigma\bar{\sigma}} X_{n\alpha}^{\bar{\sigma}S} - X_{m\alpha}^{S\sigma} X_{l\alpha}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_{n\alpha}^{\sigma S}) + \\ & + H_{bil}, \quad (2) \end{aligned}$$

в котором слагаемое, ответственное за связь между слоями, представлено как

$$H_{bil} = \sum_{ufd\sigma} t_{\perp} (X_{fu}^{S\sigma} X_{fd}^{\sigma S} + X_{fd}^{S\sigma} X_{fu}^{\sigma S}).$$

Здесь индекс « α » указывает на верхнюю (u) или нижнюю (d) CuO_2 -плоскость, $J_{fg} = 2\tilde{t}_{fg}^2/E_{ct}$ — параметр эффективного обменного взаимодействия за счет перескоков в нижнюю хаббардовскую зону и обратно, t_{fg} — межъячеечные внутризонные перескоки между ячейками, \tilde{t}_k — межъячеечные межзонные перескоки, E_{ct} — диэлектрическая щель с переносом заряда, ε_1 и ε_2 — энергии локальных состояний с одной и двумя дырками. Значения этих параметров, заимствованные из работы [42], представлены ниже (в эВ):

$$\varepsilon_2 - \varepsilon_1 = -0.091, \quad E_{ct} = 2,$$

$$t \equiv t_{01} = 0.93, \quad t' \equiv t_{11} = -0.12, \quad t'' \equiv t_{02} = 0.15,$$

$$J \equiv J_{01} = 0.295, \quad J' \equiv J_{11} = 0.003,$$

$$J'' \equiv J_{02} = 0.007, \quad \tilde{t} \equiv \tilde{t}_{01} = 0.77,$$

$$\tilde{t}' \equiv \tilde{t}_{11} = -0.08, \quad \tilde{t}'' \equiv \tilde{t}_{02} = 0.12, \quad t_{\perp} = 0.1.$$

Перечисленные значения параметров гамильтониана t - J -модели являются характерными параметрами для выбранного нами приближения. В действительности необходимо говорить о некотором интервале возможных параметров при редукции реалистичных моделей (например, многозонной p - d -модели) на t - J -модель. Изменение параметров внутри такого интервала связано в основном с выбором количества энергетических уровней, которые будут учитываться в исходном, еще нередуцированном, гамильтониане. Очень подробно вопрос вычисления таких областей параметров обсуждался в работах [27, 48].

Для нахождения спектра квазичастичных возбуждений используется метод уравнений движения для построенной на операторах Хаббарда функции Грина $\langle\langle X_f^\alpha | X_g^{+\beta} \rangle\rangle$. Приведенная функция Грина является элементом матричной функции Грина, связанной с электронной двухвременной запаздывающей функцией Грина $G(\mathbf{r}, E)$ на одноэлектронных операторах выражением

$$G_{\lambda\sigma}(\mathbf{r}, E) = \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\lambda\sigma}(\alpha) \gamma_{\lambda\sigma}^*(\beta) D^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, E), \quad (3)$$

в котором коэффициенты $\gamma(\alpha)$ определяются непосредственно матричными элементами перехода от одноэлектронных операторов $a_{f\lambda\sigma}$ к операторам Хаббарда $X_f^{pq} \equiv X_f^\alpha$:

$$a_{f\lambda\sigma} = \sum_{pq} \langle p | a_{f\lambda\sigma} | q \rangle X_f^{pq}.$$

Эти матричные элементы вычисляются в многоэлектронном базисе состояний $|p\rangle$ элементарной ячейки.

Точное уравнение движения для оператора $X_f^{\sigma S}$ имеет вид

$$i\dot{X}_f^{\sigma S} = [X_f^{\sigma S}, H] = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) X_f^{\sigma S} + L_f^{\sigma S}, \quad (4)$$

в часть $L_f^{\sigma S}$ которого входят слагаемые, образующие функции Грина более высокого порядка. Для их проектирования на базис одночастичных операторов используем метод неприводимых операторов или, иначе, проекционный метод Мори–Цванцига, ранее использовавшийся в работах [42, 47–49]. В соответствии с этим методом из оператора $L_f^{\sigma S}$ выделяется одночастичный вклад, пропорциональный X^β :

$$L_f^{\sigma S} = \sum_{s\beta} T_f^{(\sigma S)\beta} X_s^\beta + L_f^{\sigma S(irr)}, \quad (5)$$

$$T_f^{(\sigma S)\beta} = \langle\langle L_f^{\sigma S}, X_s^{+\beta} \rangle\rangle / \langle\langle X_s^\beta, X_s^{+\beta} \rangle\rangle.$$

Здесь $L^{(irr)}$ — неприводимый оператор, пренебрежение которым соответствует обобщенному приближению Хартри–Фока. Выход за рамки приближения среднего поля обсуждался в подобном подходе для однослойных купратов в работе [29], где неприводимые слагаемые $L^{(irr)}$ приводят к динамическим вкладом в массовый оператор $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$, описывающий рассеяние хаббардовских фермионов на спиновых флуктуациях. Мнимая часть Σ как раз и обеспечивает подавление спектрального веса на части дырочного кармана. В нашем рассмотрении мы пренебрежем неприводимым вкладом и ограничимся обобщенным приближением Хартри–Фока, в котором можно учесть статические пространственные корреляции и описать зависимость зонной структуры от

концентрации и сильного магнитного поля. Однако, строго говоря, как было показано в работах [25, 50], учет перераспределения спектрального веса с помощью расширения набора базисных операторов приводит не только к изменению спектральной функции дырок, но и к изменению в концентрационной зависимости электронной структуры и поверхности Ферми. Поэтому полученные нами значения критических концентраций могут несколько измениться в более аккуратной теории, и они имеют скорее качественный характер.

Выделившиеся в процессе усреднения кинетические $\langle X_f^{S\sigma} X_g^{\sigma S} \rangle$ и спиновые $\langle X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle$ корреляторы являются важными характеристиками системы, значительно влияющими на электронную структуру [42, 47, 49]. Мы используем спиновые корреляционные функции, которые были самосогласованно вычислены в работах [42, 49] для однослойного купрата также методом неприводимых операторов. Спиновые корреляторы задают ближний антиферромагнитный порядок в данном соединении. Кинетические корреляторы вычисляются самосогласованно с химическим потенциалом с помощью спектрального представления функции Грина:

$$\langle\langle X_{\mathbf{k}}^{\sigma S} | X_{\mathbf{k}}^{S\sigma} \rangle\rangle = \frac{p_\sigma + x}{2} \left(\frac{1}{E - E_+(\mathbf{k})} + \frac{1}{E - E_-(\mathbf{k})} \right), \quad (6)$$

полюсы которой $E_+(\mathbf{k})$ и $E_-(\mathbf{k})$ определяют дисперсионные зависимости антисвязывающей и связывающей зон, образующихся при расщеплении зоны квазичастиц (для примера со спином $\bar{\sigma}$), относящейся к одиночной CuO_2 -плоскости, вследствие межслойного туннелирования. Значения полюсов определяются выражениями

$$E_\pm(\mathbf{k}) = \varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \mu + (p_\sigma + x)t_{\mathbf{k}} + p_{\bar{\sigma}}J_0 + p_{\bar{\sigma}}(p_\sigma + x)\frac{\tilde{t}_{\mathbf{k}}^2}{E_{cl}} + \Sigma(\mathbf{k}) \pm \varepsilon_\perp, \quad (7)$$

где $\Sigma(\mathbf{k})$ является массовым оператором, а выражение

$$\varepsilon_\perp(\mathbf{k}) = (p_\sigma + x)t_\perp(\mathbf{k}) + \frac{3}{2} \frac{t_\perp(\mathbf{k})C_{\perp\mathbf{k}}}{p_\sigma + x} \quad (8)$$

характеризует энергию обусловленного межслойным туннелированием расщепления зоны. Расщепление зон равно $2\varepsilon_\perp$, которое в англоязычной литературе получило название bilayer splitting, подтверждено многими экспериментальными данными [35, 41–56], и, по-видимому, данное свойство является основным эффектом двухслойности в

нормальной фазе. Массовый оператор определяется выражением

$$\Sigma(\mathbf{k}) = \frac{1}{p_\sigma + x} \frac{1}{N} \times \\ \times \sum_{\mathbf{q}} [Y_1(\mathbf{k}, \mathbf{q})K_{\mathbf{q}} + Y_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})C_{\mathbf{q}} + t_{\perp}(\mathbf{q})K_{\perp\mathbf{q}}], \quad (9)$$

в котором число N — количество векторов в обратном пространстве, а коэффициенты $Y_1(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ и $Y_2(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ определены следующими выражениями:

$$Y_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = t_{\mathbf{q}-p_\sigma} J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - x \frac{\tilde{t}_{\mathbf{q}}^2}{E_{ct}} - (p_\sigma + x) \frac{2\tilde{t}_{\mathbf{q}}\tilde{t}_{\mathbf{k}}}{E_{ct}}, \\ Y_2(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = t_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-p_\sigma} J_{\mathbf{q}} + p_\sigma \frac{\tilde{t}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^2}{E_{ct}} - (p_\sigma + x) \frac{2\tilde{t}_{\mathbf{k}}\tilde{t}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}{E_{ct}}.$$

В выражениях для энергии зон K_{\perp} и C_{\perp} являются межслоевыми кинематическим и спиновым корреляторами. Эти слагаемые, ответственные за дополнительную связь между плоскостями, появляются при расщеплении уравнений движения для двухслойных купратов. Межслоевые кинематические корреляторы самосогласованно рассчитываются с остальными внутрислоевыми кинематическими корреляторами и химическим потенциалом. Что касается спиновых корреляторов, то их можно оценить из простого соображения: спиновые корреляции пропорциональны эффективному обменному интегралу $J_{\perp} \sim 2t_{\perp}^2/E_{ct}$. Знак спинового коррелятора, который определяет характер корреляций между спинами соседних слоев, выяснялся в результате точной диагонализации двухслойного кластера. Рассматривалась ячейка двухслойного купрата, состоящая из двух CuO_5 -пирамид, в которой точно учитывались все взаимодействия. После этого в полученном базисе двухчастичных состояний выделялось низшее по энергии состояние. Поскольку оно оказалось синглетным, основное состояние для того случая, когда в каждом слое присутствует по одной дырке, соответствует антиферромагнитному состоянию двух слоев. Экспериментально антиферромагнитное упорядочение спинов подтверждено нейтронной дифракцией в работе [57]. При допировании антиферромагнитный порядок вдоль оси c быстро разрушается, но это не относится к антиферромагнитно коррелированной паре CuO_2 -слоев, формирующей элементарную ячейку двухслойных купратов. Разрушаются корреляции между ячейками. В то время как спиновая корреляционная функция для ближайших соседей внутри CuO_2 -слоя равна $C_{01} \approx -0.2$ [42], наш расчет C_{\perp} из точной диагонализации $(\text{CuO}_5)_2$ -бипирамиды дал $C_{\perp} \approx -0.1$.

Обратим внимание, что используется предположение о том, что допированные носители равномерно распределяются по плоскостям, таким образом, у нас имеется равное количество носителей x в двух плоскостях. В большинстве экспериментальных работ также приводится именно то значение x , которое приходится на одну CuO_2 -плоскость.

Из формулы (1) и рис. 3 следует, что двухслойное расщепление зависит значительно от волнового вектора. По nodальному направлению оно отсутствует вовсе и достигает максимума в антинодальном направлении.

Допирование влияет на электронную структуру купратов гораздо сложнее, чем это было бы, например, в металлах, где справедлива модель жесткой зоны. В рассматриваемых соединениях с добавлением носителей не только увеличивается число заполненных состояний в \mathbf{k} -пространстве, но также меняется сама дисперсионная зависимость. Происходит это из-за того, что энергия квазичастиц зависит от фактора заполнения $F = (1 + x)/2$, т.е. от числа состояний для данной зоны, которое, в свою очередь, зависит от степени допирования x . Поэтому наблюдается эволюция зонной структуры с допированием. В области слабодопированных составов поверхность Ферми представляет собой четыре элемента, каждый из которых является двумя вложенными один в другой дырочными карманами (рис. 3а). Первый квантовый фазовый переход происходит при $x_{c1} = 0.14$ (рис. 3б). В этой точке происходит смыкание более широких карманов, которое порождает внешний дырочный и вложенный внутренний электронный карманы. Одновременно с новообразованными все еще остаются четыре разрастающихся кармана, смыкание которых происходит при $x_{c2} = 0.18$. В результате остаются два дырочных и два электронных кармана, каждый из которых показывает межслоевое расщепление в антинодальных точках (рис. 3г). Далее с ростом допирования внутренние электронные карманы уменьшаются, становясь все менее различимыми друг от друга (рис. 3д). В окрестности $x_{c3} = 0.26$ электронные карманы исчезают при очередном квантовом фазовом переходе, оставляя два больших дырочных кармана (рис. 3е). Естественно, должно быть две критические точки, однако электронные карманы расщеплены настолько слабо, что различить эти точки не представляется возможным. С увеличением x заметно ослабление антиферромагнитных корреляций, что выражается в поднятии энергии в точке (π, π) , показывающем возвращение к парамагнитному состоянию. Следует отметить, что в целом картина топологических

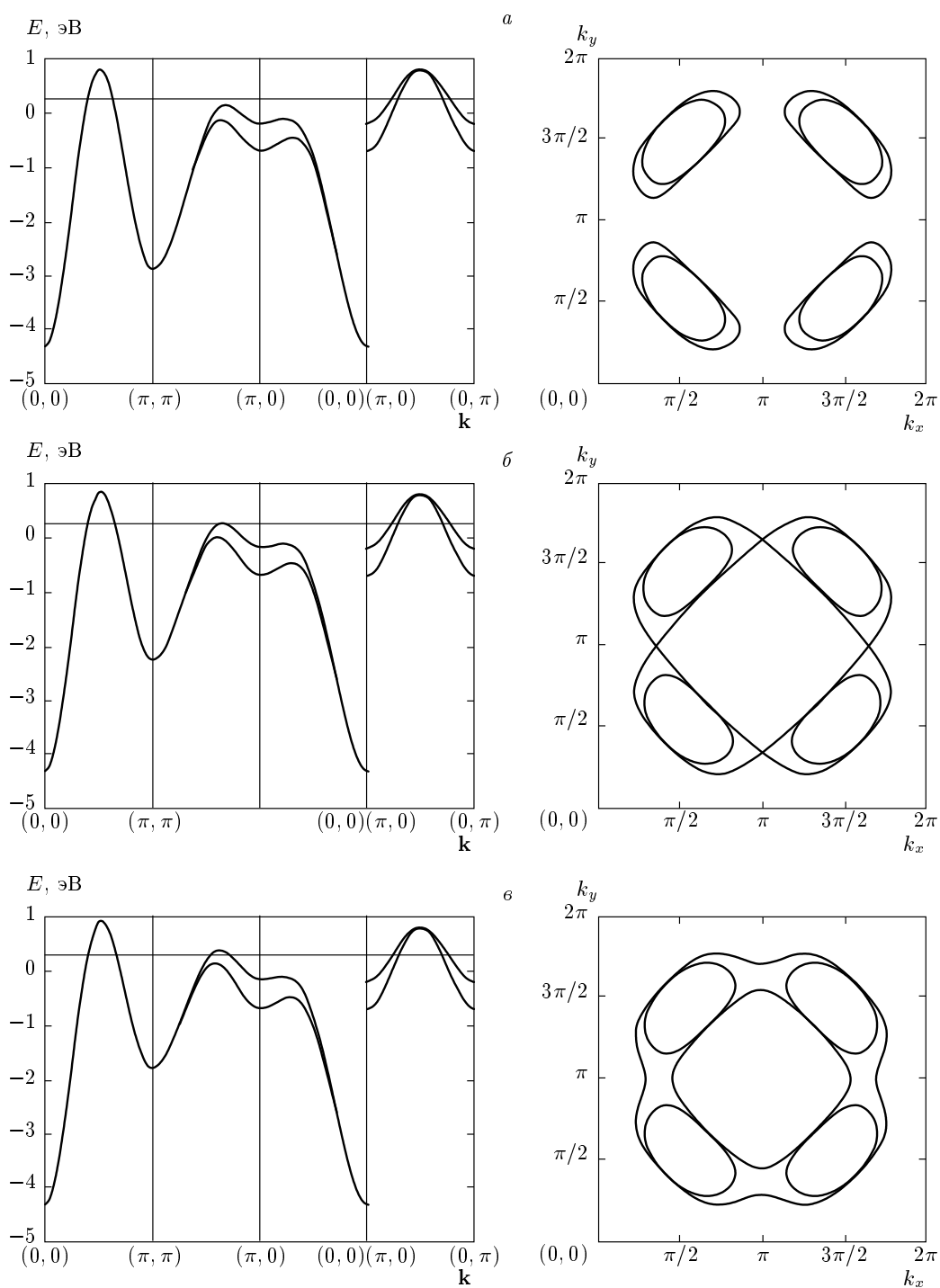


Рис. 3. Эволюция электронной структуры двухслойных купратов с допированием: *a* — $x = 0.11$, *б* — $x = 0.14$, *в* — $x = 0.16$, *г* — $x = 0.18$, *д* — $x = 0.22$, *е* — $x = 0.28$. Горизонтальная линия на изображениях зонной структуры показывает уровень химического потенциала

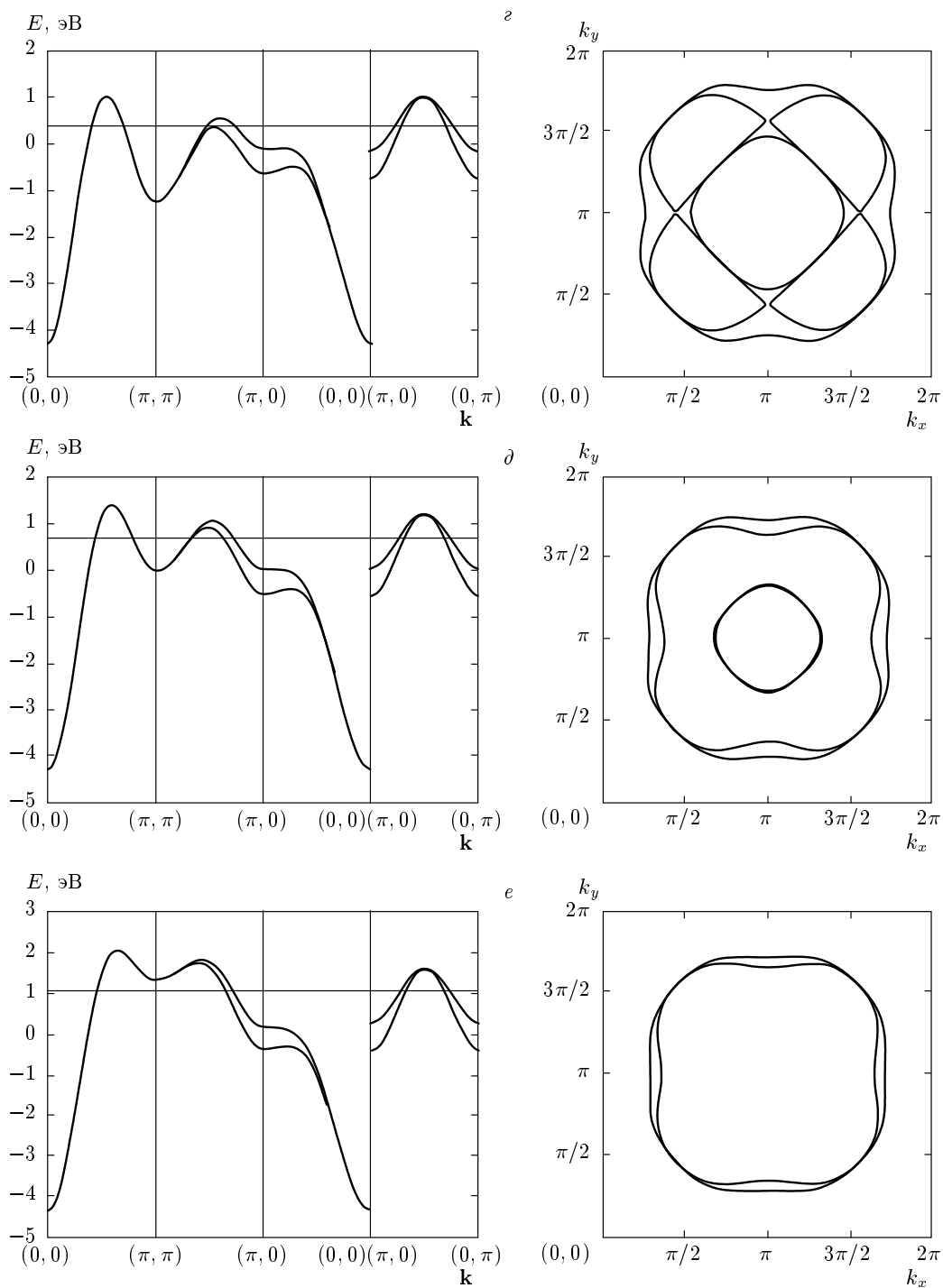


Рис. 3. Продолжение

изменений поверхности Ферми двухслойного купрата почти не отличается от однослойного. Основное различие связано с расщеплением перехода Лифшица вблизи оптимального допирования на два при x_{c1} и x_{c2} .

Значительная ширина зоны квазичастиц (4.5 эВ) связана с использованием в нашей работе t - J -модели, которая является эффективной низкоэнергетической моделью для купратов. В более реалистичных моделях, таких как спин-фермионная [25] и мно-

гозонная p - d -модель [16], ширина зоны квазичастиц, хорошо наблюдаемой в ARPES, имеет типичное значение 0.7 эВ. Разница в этих моделях состоит в том, что зона, которую пересекает уровень Ферми в реалистичных моделях, относится к определенному виду квазичастиц, со своим начальным и конечным состояниями, тогда как в t - J -модели из-за учета наличия второй зоны в виде эффективных перескоков в эту зону и обратно, появляется добавочная энергия, которая дополняет единственную зону и уширяет ее. Потолок зоны, которая получается в реалистичных моделях, повторяется потолком широкой зоны в t - J -модели, и поскольку, в основном, мы интересуемся состояниями вблизи уровня Ферми, а состояния в глубине зоны нам важны в меньшей степени, такой подход имеет право на существование.

3. СОПОСТАВЛЕНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ С РЕЗУЛЬТАТАМИ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Корректность нашего расчета проверяется путем сравнения полученных поверхностей Ферми с результатами ARPES-экспериментов. Метод ARPES несомненно является мощным инструментом для

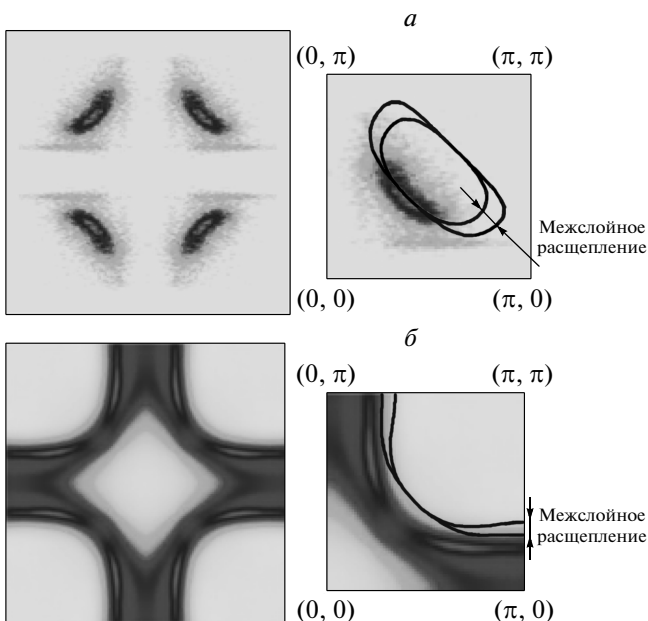


Рис. 4. Сравнение ARPES-данных [35] для поверхности Ферми и теоретических расчетов (линии черного цвета) для двухслойного купрата $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$: a — $x = 0.11$, b — $x = 0.28$

исследования электронной структуры материалов, однако он, как и любой другой, требует правильной интерпретации. Для двухслойного купрата $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ в области слабодопированных составов ($x = 0.11$) ARPES предсказывает поверхность Ферми в виде арок (рис. 4а). Соотношение между карманами и дугами обсуждалось во Введении, поэтому сравниваем рассчитанные нами карманы с ARPES-дугами, которые являются частью кармана с большой спектральной интенсивностью. Как хорошо видно, наибольшая интенсивность дуги совпадает с внутренней частью дырочного кармана, полученного в нашем расчете. Для сильнодопированных составов площадь дырочного кармана, полученного в теоретическом расчете, немного меньше площади аналогичной части поверхности Ферми из ARPES (рис. 4б), однако их формы вполне согласуются. Вероятно, такое несоответствие площадей может быть связано с тем, что концентрация допированных носителей $x = 0.28$ относится к области, в которой предел сильных электронных корреляций неприменим.

С недавнего времени стало возможным наблюдение квантовых осцилляций в купратных ВТСП [58]. В последних работах по изучению соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ [59] было обнаружено существование четырех различных осцилляций вместо одной частоты из более ранних работ. Авторы интерпретируют полученный результат как следствие существования нескольких сегментов поверхности Ферми (или иначе, нескольких зон), два из которых обусловлены двухслойным расщеплением, а еще два — перескоками между ячейками вдоль оси z . Каждой из поверхностей Ферми соответствует своя частота осцилляций, пропорциональная площади поверхности Ферми. Зная отношение частот осцилляций, обусловленных расщеплением, мы знаем и отношение площадей двумерных поверхностей Ферми, образованных связывающей и антисвязывающей зонами. Путем варьирования параметра интеграла перескока между CuO_2 -слоями можно добиться нужного отношения площадей. Найденный таким образом параметр и будет искомой величиной связи между слоями в двухслойном купрате. Прделав вышеприведенные операции со своими расчетами и используя отношение частот из работы [59], мы выяснили, что величина интеграла перескока, необходимая для удовлетворения отношению, должна быть равна $t_{\perp} = 80$ мэВ, что близко к используемому нами значению $t_{\perp} = 100$ мэВ. Авторы работы [59] сделали свой расчет параметра t_{\perp} , и он оказался равным 8 мэВ. Такое различие

между величинами интеграла перескока, вычисленными нами и авторами экспериментальной работы, вполне объяснимо, если учесть, что последние пользовались теорией свободных электронов для интерпретации результатов своего эксперимента. В зонной теории спектральная плотность каждой точки дисперсионной поверхности (рассматривается случай без затухания) задается дельта-функцией с коэффициентом равным единице. Частицы в зонной теории не взаимодействуют друг с другом, что отражается на равной вероятности заполнения частицей пустого состояния и добавления частицы к состоянию, уже занятому одной. Системы с сильными электронными корреляциями описываются на языке квазичастиц, которые имеют различный спектральный вес в зависимости от конкретных начального и конечного состояний, переход между которыми характеризуют. Физические особенности таких сильнокоррелированных систем хорошо описываются с помощью алгебры операторов Хаббарда и, в частности, посредством модели Хаббарда. В рамках использования операторов Хаббарда выделяются факторы заполнения, зависящие от чисел заполнения начального и конечного состояний. Фактор заполнения, который для определенной зоны квазичастиц всегда меньше единицы, служит коэффициентом в выражении для спектральной плотности квазичастиц. Таким образом, для того чтобы набрать заданное полное число частиц, требуется гораздо большее количество состояний в k -пространстве, чем для обычных частиц, ведущих себя по законам ферми-жидкости. Отсюда и большая по площади поверхность Ферми. Лучшее согласие величины интеграла перескока, необходимой для удовлетворения отношения частот осцилляций, с величиной, используемой нами, нежели с интегралом перескока в зонном подходе, говорит о том, что ВТСП-купраты в слабодопированном случае корректнее описывать как системы с сильными электронными корреляциями.

Электронная структура, полученная для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, в своих общих чертах справедлива для большинства двухслойных соединений. Рассмотрим, например, соединение $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ ($\text{Bi}2212$), вид интеграла перескока для которого был получен в работе [37]. В этом соединении двухслойные блоки в соседних ячейках по оси z сдвинуты на половину диагонали элементарной ячейки в плоскости ab , поэтому можно ожидать определенную дисперсию по оси z . Из подгонки под LDA-расчеты *ab initio* авторы работы [37] получили выражение для интеграла перескока

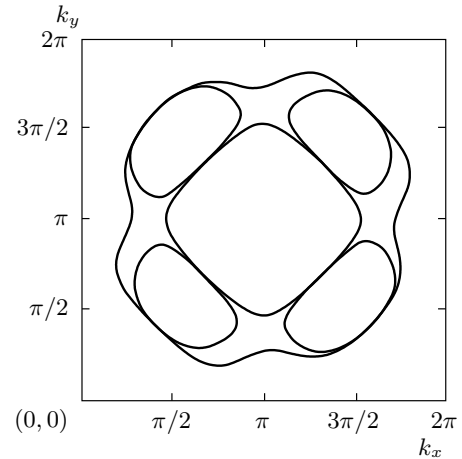


Рис. 5. Поверхность Ферми двухслойного соединения $\text{Bi}2212$ для значения дисперсии $k_z = 0$ при концентрации допированных дырок $x = 0.16$

$$E_z = T_z(k_{\parallel}, k_z) \left[(\cos k_x a - \cos k_y b)^2 \right]; \quad (10)$$

$$T_z = \sqrt{t_{dd}^2 + A_z^2 + 2t_{dd}A_z \cos \frac{k_z c}{2}},$$

$$A_z = 4t_z \cos \left(\frac{k_x a}{2} \right) \cos \left(\frac{k_y b}{2} \right).$$

Абсолютную величину k_z -дисперсии задает параметр t_z , но поскольку этот параметр характеризует перескок между ячейками вдоль оси z , ясно, что он будет чрезвычайно мал, а дисперсия — малозаметна. Типичные значения параметров $\text{Bi}2212$ равны $t_{dd} = 0.1$ эВ, $t_z = 0.03$ эВ [37].

При учете дисперсии по оси k_z в выражении для интеграла перескока картина зонной структуры кардинально не меняется, заметно только незначительное колебание максимума в направлении $(\pi, 0) - (0, 0)$ при варьировании k_z от 0 до 2π . Амплитуда этого колебания зависит от величины интеграла межъячеечного перескока в направлении оси z , и поскольку значение t_z намного меньше даже t_{dd} , не стоит ожидать какого-либо значительного изменения в энергиях квазичастиц. Трехмерная поверхность Ферми при включении дисперсии по k_z становится «скрученной». При $k_z = 0$ (рис. 5) контур Ферми вытянут в направлении $(\pi, 0) - (0, \pi)$, при $k_z = 2\pi$ — в направлении $(0, 0) - (\pi, \pi)$ (рис. 5в). Других изменений на двумерной поверхности Ферми не будет, поскольку химический потенциал не достигает указанного колеблющегося пика во всем интервале концентраций допированных носителей, где применим обобщенный метод сильной связи.

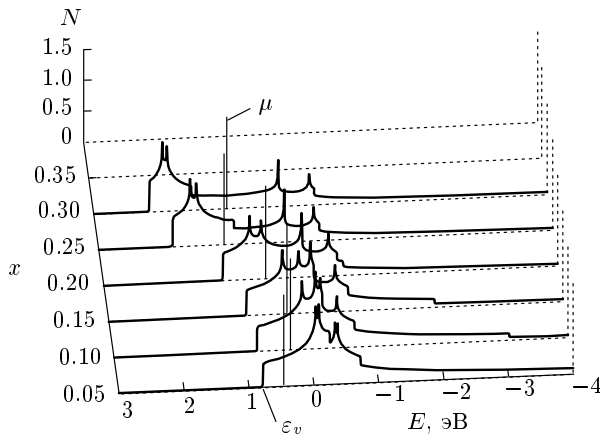


Рис. 6. Плотность состояний двухслойного купрата. Вертикальные линии показывают положение уровня Ферми, а потолок валентной зоны показан стрелкой с энергией ε_v

4. ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ

Критические точки допирования x_{c1} , x_{c2} и x_{c3} характеризуются резким изменением топологии поверхности Ферми, соответствующей данному допированию. Если в модели жесткой зоны по изображению дисперсионной поверхности для определенного допирования можно предсказать все особенности, которые будут определяться химическим потенциалом для любого количества носителей, то в сильно-коррелированных системах допирование изменяет еще и саму дисперсионную зависимость. Из-за этого изменение допирования сдвигает и химический потенциал, и саму зону. Данный факт должен находить отражение в виде особенности плотности состояний от допирования. Появление новых элементов поверхности или, по-другому, заполнение полостей вызывает скачок в плотности состояний. Поскольку заполнение зон осуществляют дырки, плотность состояний относится к дыркам. Выражение для плотности состояний имеет вид

$$\begin{aligned}
 N(E) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}, E) = \\
 &= -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}mn} \gamma_{\lambda}(m) \gamma_{\lambda}^*(n) \text{Im} D^{m,n}(\mathbf{k}, E + i\delta). \quad (11)
 \end{aligned}$$

Плотности состояний для разных концентраций дырок показаны на рис. 6. Заполнение дырочных состояний начинается с потолка валентной зоны для электронов. Мы видим, что с понижением энергии плотность состояний меняется скачком от нуля до некоторой величины, а затем по мере роста энергии

дырки увеличивается. Нужно заметить, что здесь заполняются дырочные карманы. При маленькой концентрации $x = 0.05$ и $x = 0.1$ на рис. 6, а также для $x = 0.11$ на рис. 3а видно, что межслойное расщепление находится в заполненной части зоны глубоко под уровнем Ферми. В точке $x_{c1} = 0.14$ на границе зоны Бриллюэна носители начинают заполнять перешеек между карманами, что на поверхности Ферми выглядит как образование перемычки между соседними областями. Сначала перемычка образуется у антисвязывающей зоны, из двух расщепившихся при межслоевом туннелировании. Эта антисвязывающая зона представляет собой лист открытой поверхности Ферми. Вскоре при $x_{c2} = 0.18$ перемычка образуется для связывающей зоны. Общим этим резким возрастаниям дырочной плотности соответствуют две особенности ван Хофа на рис. 6. Изменение связности поверхности Ферми приводит к логарифмической особенности в плотности состояний. При дальнейшем увеличении степени допирования следовало бы благодаря зонной структуре ожидать, что последуют два скачка и два логарифмических пика. Однако вместо этого происходит быстрое повышение энергии в окрестности точки (π, π) . Причиной этого является увеличение количества носителей и, как следствие, увеличение кинетической энергии, за счет чего уменьшаются спиновые корреляции и их вклад в энергию зоны. Таким образом, ближний антиферромагнитный порядок постепенно исчезает. В результате, в пределах такого количества носителей, когда еще действуют сильные корреляции, не наблюдается попадание уровня Ферми на пики, формирующиеся за счет состояний в окрестности антинодальной точки $(\pi, 0)$. В сильно-допированной области межслоевое туннелирование, как видно на рис. 3д,е, слабо проявляется в виде поверхности Ферми. Так же как и в однослойных купратах [42], попадание уровня Ферми на седловую точку в окрестности $(\pi, 0)$ и изменение знака поверхности Ферми с дырочной на электронную происходят при слишком больших значениях допирования $x \approx 0.5$. В этой области уже само описание купратов в рамках t - J -модели сомнительно.

Из картины плотности состояний следует, что химический потенциал меняется нелинейно с увеличением концентрации допированных носителей. На рис. 7 более подробно показана эта зависимость. Химический потенциал сначала уменьшается и достигает своего минимума вблизи $x = 0.15$, а затем возрастает при увеличении допирования. Возрастание продолжается до уровня $x = 0.26$, а после опять наблюдается уменьшение. Такая зависимость говорит

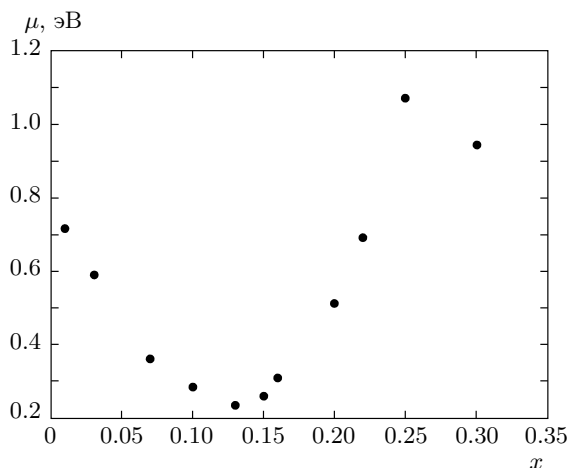


Рис. 7. Зависимость химического потенциала электронов от уровня допирования дырок

о том, что некоторые области концентрации являются более энергетически выгодными и, значит, вероятность их реализации в веществе выше. Это подразумевает возможность разделения фаз в кристалле, что часто наблюдается в реальности. Например, всем известен пример существования страйпов в купратных ВТСП.

Нашу плотность состояний при $x = 0.25$ можно сравнить с результатами работы [60], в которой изучался дырочный спектр двух CuO_2 -плоскостей в рамках двухзонной модели для магнитного поля. В работе [60] для $x = 0.24$ получено двухслойное расщепление плотности состояний в соответствии с наличием связывающей и антисвязывающей зон, качественно идентичное тому, что вычислено в нашей работе.

5. КВАНТОВЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Уже довольно долго делятся попытки согласования вида поверхности Ферми купратов, предсказываемых различными экспериментами ARPES. Если для сильнодопированных составов практически все сходится к картине большой поверхности Ферми вокруг (π, π) предположительно дырочного типа, то для области слабодопированных составов точки зрения различаются. Тут основная дискуссия состоялась между сторонниками арок с максимумом интенсивности в подальнем направлении и малых карманов. С появлением работ по квантовым осцилляциям стало возможным сравнивать и сопоставлять

ARPES-данные с площадью поверхности Ферми, вычисленной с помощью частоты квантовых осцилляций [58]. Несовпадение реального уровня допирования с выведенным из расчетов площади поверхности Ферми показало, что в ней возможно существование частей электронного типа. К тому же выводу пришли в работе [61], в которой было показано изменение знака постоянной Холла при уменьшении температуры, что означает, таким образом, смену основного типа носителей. Однако сравнивать непосредственно ARPES-данные с результатами квантовых осцилляций и эффектом Холла нельзя, поскольку последние возникают во внешнем магнитном поле. Наличие чисел заполнения и спиновых корреляторов в законах дисперсии сильнокоррелированных электронов приводит к новому и сильному механизму изменения электронной структуры при приложении внешнего магнитного поля. Поэтому заранее неочевидно, что поверхность Ферми в сильном поле (квантовые осцилляции) совпадает с поверхностью Ферми без поля (ARPES). Следовательно, необходимо выяснить влияние внешнего поля на электронную структуру. В духе работы [39], в которой такое влияние выяснялось для однослойных купратов, мы исследуем случай, когда в магнитном поле находится двухслойный купрат.

Будем работать в приближении настолько сильного внешнего поля, что оно упорядочивает все спины на узлах в одном направлении, тогда как переворот в состояние с противоположной проекцией спина возможен за счет конечной температуры. Ориентация спинов в соседних плоскостях, естественно, будет уже не антиферромагнитная, а ферромагнитная. Под действием поля двухкратно вырожденное по энергии в парамагнитной фазе одночастичное состояние расщепляется на состояния $|\sigma\rangle$ и $|\bar{\sigma}\rangle$ с энергиями $\varepsilon_1 - \mu_B H$ и $\varepsilon_1 + \mu_B H$. Поправка $\mu_B H$, связанная со взаимодействием спина с магнитным полем, даже при величине поля 300 Тл является незначительной (порядка 0.01 эВ). Поэтому главный эффект присутствия магнитного поля будет проявляться в характерном заполнении одночастичных состояний и в виде спиновых корреляционных функций.

Если считать, что спин с проекцией σ направлен по полю, то для состояния с этой проекцией число заполнения $p_\sigma = \langle X_f^{\sigma\sigma} \rangle = (1 - n_0)(1 - x)$, а со спином вниз $p_{\bar{\sigma}} = \langle X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \rangle = n_0(1 - x)$, где n_0 — концентрация перевернутых против поля спинов при определенной температуре:

$$n_0 = \frac{1}{1 + \exp(2\mu_B H/kT)}. \quad (12)$$

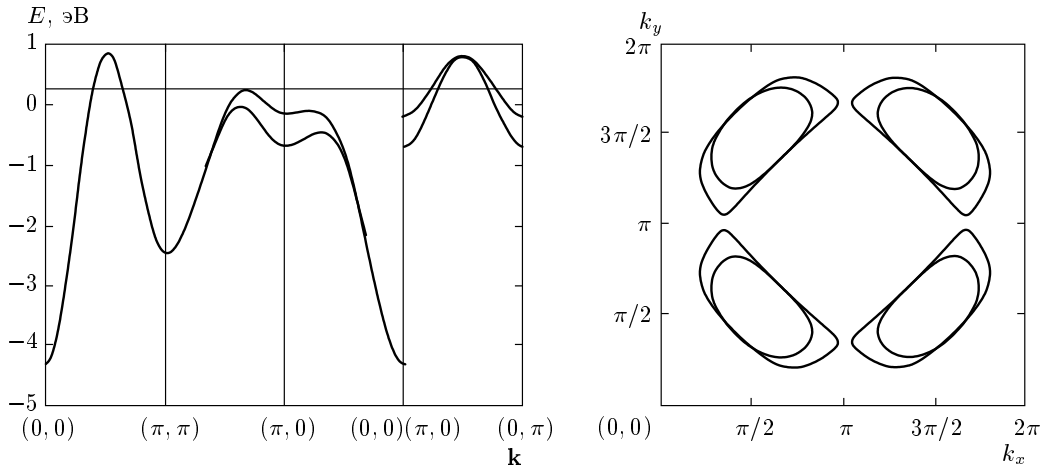


Рис. 8. Зонная структура (для дырок) для парамагнитной фазы ($x = 0.13$)

Поскольку мы считаем, что поле, приложенное к нашему соединению, достаточно велико, чтобы упорядочить все спины в одном направлении, предполагаем, что спиновые корреляторы имеют ферромагнитный тип и не зависят от расстояния:

$$\langle X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle = 0,$$

$$\langle X_f^{\sigma\sigma} X_g^{\sigma\sigma} \rangle = p_\sigma^2.$$

Кинетические корреляторы вычисляются самоогласованно посредством спектральной теоремы для функции Грина:

$$\langle\langle X_{\mathbf{k}}^{\sigma S} | X_{\mathbf{k}}^{S\sigma} \rangle\rangle = \frac{p_\sigma + x}{2} \times \left(\frac{1}{E - E_{\bar{\sigma}+}(\mathbf{k})} + \frac{1}{E - E_{\bar{\sigma}-}(\mathbf{k})} \right), \quad (13)$$

где выражение

$$E_{\bar{\sigma}+}(\mathbf{k}) = \varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \mu_B H - \mu + (p_\sigma + x)t_{\mathbf{k}} + p_{\bar{\sigma}} J_0 + p_{\bar{\sigma}}(p_\sigma + x) \frac{\tilde{t}_{\mathbf{k}}^0 S^2}{E_{ct}} + \Sigma_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\perp}(\mathbf{k}) \quad (14)$$

характеризует дисперсию квазичастиц со спином $\bar{\sigma}$ (переход из одночастичного состояния со спином σ в синглетное состояние) для антисвязывающей зоны, а выражение

$$E_{\bar{\sigma}-}(\mathbf{k}) = \varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \mu_B H - \mu + (p_\sigma + x)t_{\mathbf{k}} + p_{\bar{\sigma}} J_0 + p_{\bar{\sigma}}(p_\sigma + x) \frac{\tilde{t}_{\mathbf{k}}^0 S^2}{E_{ct}} + \Sigma_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\perp}(\mathbf{k}) \quad (15)$$

характеризует дисперсию для связывающей зоны, причем

$$\Sigma(\mathbf{k}) = \frac{1}{p_\sigma + x} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left[\left(t_{\mathbf{q}} - p_\sigma J_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - x \frac{\tilde{t}_{\mathbf{q}}^2}{E_{ct}} - (p_\sigma + x) \frac{2\tilde{t}_{\mathbf{q}}\tilde{t}_{\mathbf{k}}}{E_{ct}} \right) K_{\mathbf{q}} + t_{\perp}(\mathbf{q}) K_{\perp\mathbf{q}} \right],$$

где $K_{\mathbf{q}}$ — фурье-образ кинетического коррелятора, а ε_{\perp} отличается от такого же выражения для случая без поля отсутствием межслоевых спиновых корреляторов.

Дисперсия зон квазичастиц со спином σ имеет такой же вид, за исключением того, что p_σ меняется местами с $p_{\bar{\sigma}}$, а знак перед зеемановским слагаемым меняется с минуса на плюс.

В приложенном сильном внешнем магнитном поле электронная структура изменяется от вида, представленного на рис. 8, к изображенному на рис. 9. Зонная структура формируется из широких зон подвижных квазичастиц со спином, противоположным внешнему полю. Для этих частиц фактор заполнения имеет такие же значения, как для сильно передопированного случая парамагнитной фазы. Таким образом, кинетическая энергия квазичастиц с таким спином велика по сравнению с энергией взаимодействия спинов (антиферромагнитных корреляций). Узкие зоны по виду похожи на зоны парамагнитного состояния, только гораздо меньше по ширине.

Причина, по которой ширина зоны со спином вниз $\bar{\sigma}$ оказалась много больше, чем для спина вверх σ , достаточно проста. На каждом узле решетки при

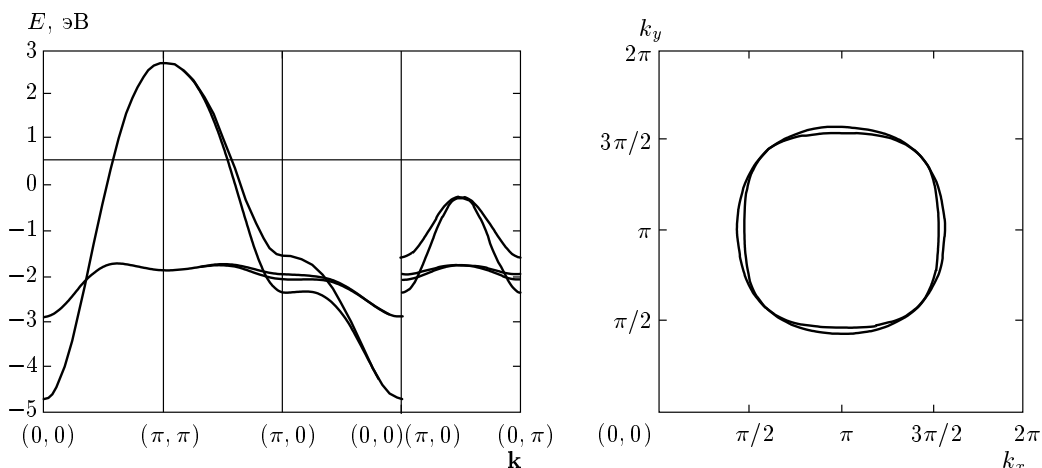


Рис. 9. Зонная структура (для дырок) для ферромагнитной фазы ($T = 10$ К, $H = 300$ Тл, $x = 0.13$). Широкая и узкая зоны соответствуют спином вниз и вверх. Горизонтальная линия на изображениях зонной структуры показывает уровень химического потенциала

$x = 0$ в сильном магнитном поле все спины направлены вверх. Добавить дырку со спином вверх невозможно из-за принципа Паули, и только допирование порождает синглеты Жанга – Райса и позволяет двигаться дыркам со спином вверх. Аналогичную роль играют спиновые флуктуации при конечной температуре. Поэтому кинетическая энергия дырок со спином вверх σ пропорциональна $x + p_{\bar{\sigma}} \ll 1$. В то же время дырка со спином вниз $\bar{\sigma}$ свободно перемещается на фоне недопированного ферромагнитного диэлектрического состояния. Ситуация похожа на спиновый полярон в ферромагнитном полупроводнике [62, 63]. Поскольку при добавлении второй дырки на узел формируется синглет Жанга – Райса, это соответствует задаче о поляроне с антиферромагнитным обменным взаимодействием носителя и спина. Обратим также внимание, что зонная структура на рис. 9 соответствует состоянию спинового полуметалла, в котором на уровне Ферми присутствуют только состояния с одной проекцией спина [64]. Иначе говоря, в этом состоянии имеется стопроцентная спиновая поляризация носителей тока.

Увеличение ширины узкой зоны возможно либо в результате увеличения количества носителей путем допирования, либо в результате увеличения температуры. Оба этих способа приводят к увеличению фактора заполнения $p_{\bar{\sigma}} + x$ для квазичастичной зоны со спином σ , пропорционально которому растет и кинетическая энергия квазичастиц. Пересечение химического потенциала этой зоной возможно при величинах температуры $T \sim H$. При этом

дальнейшее уменьшение магнитного поля H порождает ряд таких же изменений топологии двумерной поверхности Ферми, как и при изменении уровня допирования. Только если в случае допирования это происходит как из-за заполнения зоны, так и из-за перестройки зонной структуры, то с изменением температурно-полевого соотношения меняется только топология зоны, а точнее, происходит ее уширение вследствие увеличения доли заполнения соответствующего состояния. До начала существенных изменений топологии присутствуют только два вложенных один в другой больших дырочных кармана вокруг (π, π) (рис. 9). Когда величины поля и температуры становятся близкими по величине, можно ясно наблюдать ряд перестроек поверхности Ферми [65, 66]. Действительно, в рассматриваемом случае $T \neq 0$ нельзя говорить о квантовых фазовых переходах Лифшица, поскольку возможен только плавный кроссовер. В первой критической точке при $H = 150.8$ Тл ($x = 0.16$, $T = 150$ К) возникают четыре двойных вложенных дырочных кармана (рис. 10б). На самом деле происходят два перехода, поскольку появляются двойные из-за двухслойного расщепления карманы, но различие в критической величине поля H между этими переходами настолько мало, что его невозможно отследить. Центральные карманы очень быстро разрастаются (рис. 10в) и уже скоро происходит их смыкание (рис. 10г, д) в точках $H = 148.3$ Тл и $H = 147$ Тл с образованием двух внутренних электронных и двух внешних дырочных карманов. Электронная часть поверхности

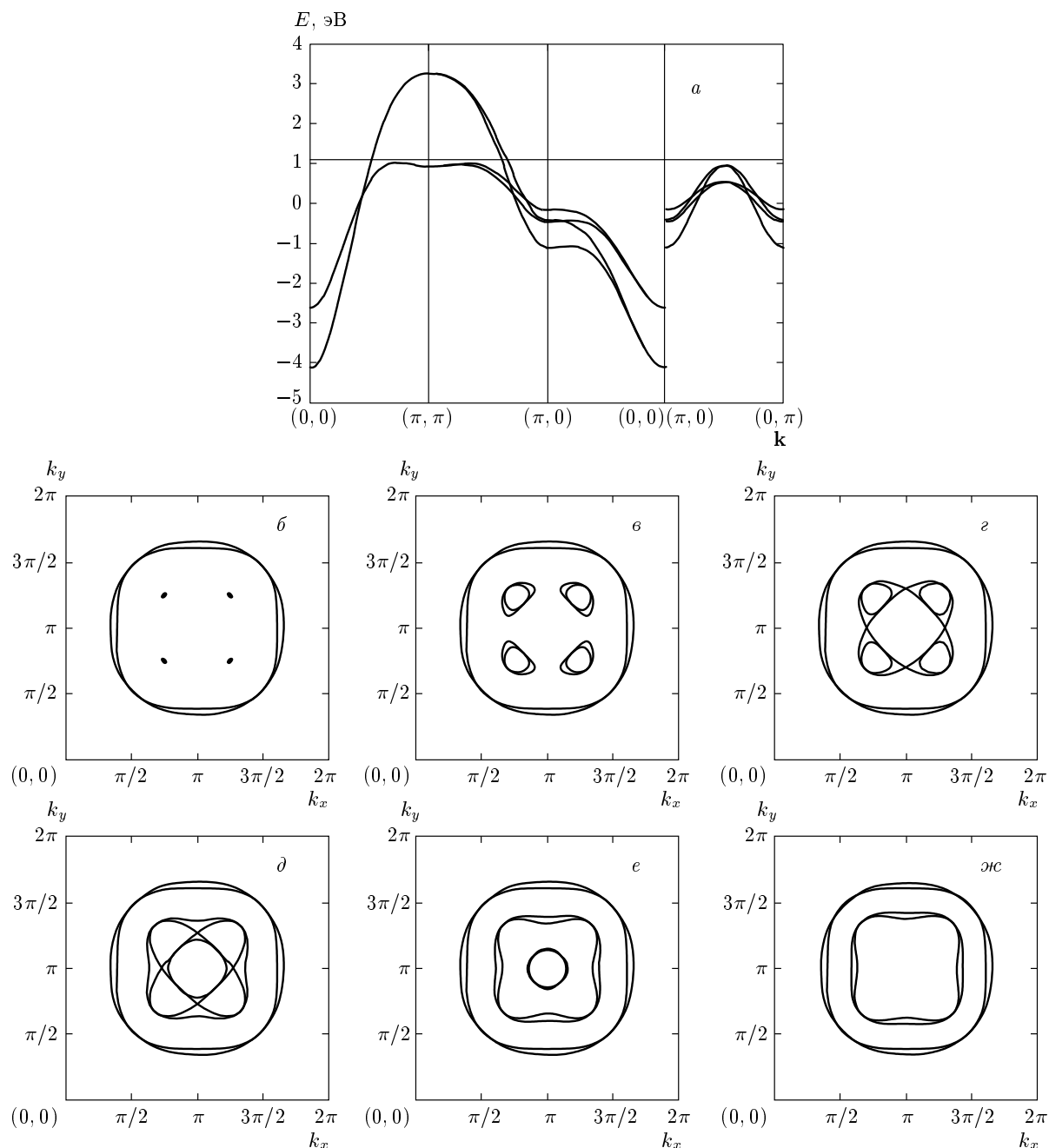


Рис. 10. а) Зонная структура ($x = 0.16$, $T = 150$ К, $H = 160$ Тл); б–ж) эволюция поверхности Ферми двухслойного купрата $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ при изменении соотношения H/T : б – $H = 150.8$ Тл, в – $H = 149$ Тл, г – $H = 148.3$ Тл, д – $H = 147$ Тл, е – $H = 145$ Тл, жс – $H = 135$ Тл

Ферми очень быстро стягивается в точку (рис. 10е) при $H = 140$ Тл в результате двух, опять-таки почти неразличимых, переходов Лифшица. В результате имеются два исходных дырочных кармана от широкой зоны и два дырочных кармана от узкой зоны (рис. 10жс).

6. ВЫВОДЫ

Исследование нормальной фазы двухслойных купратов показало, что основным эффектом туннелирования между CuO_2 -плоскостями в одной элементарной ячейке является расщепление зоны,

соответствующей одному CuO_2 -слою, на две зоны. Данное расщепление проявляется не только в ARPES-экспериментах как межслойное расщепление в окрестности антинодальных точек, но и в расщеплении квантовых фазовых переходов Лифшица по концентрации дырок и по сильному магнитному полю. В нашем случае переход в окрестности оптимального допирования расщепился на два с $x_{c1} = 0.14$ и $x_{c2} = 0.18$. Третий переход с $x_{c3} = 0.26$ в нашем расчете близок к переходу в точке $x^* = 0.24$ из работы [38]. Если два перехода в точках x_{c1} и x_{c2} характеризуются логарифмической особенностью плотности состояний $N(\varepsilon_F)$ и приводят к сингулярности вида $z^2 \ln z$, где $z \sim |x - x_c|$, для коэффициента Зоммерфельда в электронной теплоемкости $\gamma = C_e/T$ [67], то переход в точках x^* и x_{c3} сопровождается скачком $N(\varepsilon_F)$ типа ступеньки Хевисайда и является переходом второго рода по параметру z . Аналогично, в случае переходов по магнитному полю можно ожидать особенности $z^2 \ln z$, где $z \sim |H - H_c|$, в электронной теплоемкости при изменении связности поверхности Ферми.

Работа выполнена при финансовой поддержке в рамках программы «Квантовая физика конденсированных сред» Президиума РАН № 5.7, интеграционного проекта СОРАН–УРОРАН № 40, РФФИ (грант № 09-02-00127), гранта Президента РФ (МК-1683.2010.2) и проекта ФЦП «Кадры» (НК-589П/46).

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Karppinen and H. Yamauchi, *Philos. Mag.* **79**, 343 (1999).
2. M. Karppinen and H. Yamauchi, *Mater. Sci. Eng. R* **26**, 51 (1999).
3. M. Mori, T. Tohyama, and S. Maekawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75**, 034708 (2006).
4. A. Trokiner, L. Le Noc, J. Schneck et al., *Phys. Rev. B* **44**, 2426 (1991).
5. B. W. Statt and L. M. Song, *Phys. Rev. B* **48**, 3536 (1993).
6. K. Magishi, Y. Kitaoka, G. Aheng et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 4561 (1995).
7. G.-Q. Zheng, Y. Kitaoka, K. Asayama et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 3184 (1995).
8. M.-H. Julien, P. Carretta, M. Horvatic et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4238 (1996).
9. Y. Tokunaga, K. Ishida, and Y. Kitaoka, *Phys. Rev. B* **61**, 9707 (2000).
10. H. Kotegawa, Y. Tokunaga, K. Ishida et al., *Phys. Rev. B* **64**, 064515 (2001).
11. M. Mori and S. Maekawa, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 137003 (2005).
12. S. G. Ovchinnikov and I. S. Sandalov, *Physica C* **161**, 607 (1989).
13. А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков, *ФТТ* **28**, 998 (1986).
14. А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков, *ФТТ* **30**, 1248 (1988).
15. А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков, Л. А. Максимов, *ФТТ* **30**, 2518 (1988).
16. В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, А. А. Борисов, Е. Г. Горячев, *ЖЭТФ* **118**, 422 (2000).
17. В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, Л. Е. Якимов, *ЖЭТФ* **129**, 1103 (2006).
18. S. G. Ovchinnikov, Yu. S. Orlov, I. Nekrasov, and Z. V. Pchelkina, arXiv:1005.1732v1.
19. B. I. Shraiman and E. D. Siggia, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 467 (1988).
20. S. A. Trugman, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 500 (1990).
21. А. Ф. Барабанов и др., *СФХТ* **3**, 8 (1990).
22. A. F. Barabanov, R. O. Kuzian, and L. A. Maksimov, *J. Phys.: Condens. Matter.* **39**, 129 (1991).
23. A. P. Kampf, *Phys. Rev.* **249**, 219 (1994).
24. G. Dorf, A. Muramatsu, and W. Hanke, *Phys. Rev. B* **41**, 9264 (1990).
25. А. Ф. Барабанов, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев и др., *ЖЭТФ* **119**, 777 (2001).
26. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, *Phys. Rev. B* **59**, 11949 (1999).
27. V. I. Belinicher, A. L. Chernyshev, and V. A. Shubin, *Phys. Rev. B* **53**, 335 (1996).
28. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисавили, *ЖЭТФ* **127**, 686 (2005).
29. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, *ЖЭТФ* **131**, 259 (2009).
30. A. Sherman and M. Schreiber, *Phys. Rev. B* **65**, 134520 (2002).

31. S. Sachdev, A. V. Chubukov, and A. Sokol, *Phys. Rev. B* **51**, 14874 (1995).
32. A. V. Chubukov and D. K. Morr, *Phys. Rep.* **288**, 355 (1997).
33. E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, and M. V. Sadovskii, *Письма в ЖЭТФ* **82**, 217 (2005).
34. E. Z. Kuchinskii and M. V. Sadovskii, *Письма в ЖЭТФ* **88**, 224 (2008).
35. M. A. Hossain, J. D. F. Mottershead, D. Fournier et al., *Nature Phys.* **4**, 527 (2008).
36. J. Meng, G. Liu, W. Zhang et al., *Nature* **462**, 08521 (2009).
37. R. S. Markiewicz, S. Sahrakorpi, M. Lindroos et al., *Phys. Rev. B* **72**, 054519 (2005).
38. С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов, Е. И. Шнейдер, *ЖЭТФ* **136**, 898 (2009).
39. И. А. Макаров, С. Г. Овчинников, Е. И. Шнейдер, *Письма в ЖЭТФ* **89**, 736 (2009).
40. O. K. Andersen, A. I. Liechtenstein, O. Jepsen et al., *J. Phys. Chem. Sol.* **56**, 1573 (1995).
41. M. Korshunov, V. Gavrichkov, S. Ovchinnikov et al., *Phys. Rev. B* **72**, 165104 (2005).
42. M. Korshunov and S. Ovchinnikov, *Eur. Phys. J. B* **57**, 271 (2007).
43. Л. Н. Булаевский, Э. Л. Нагаев, Д. И. Хомский, *ЖЭТФ* **54**, 1562 (1968).
44. K. A. Chao, J. Spalek, and A. M. Oles, *J. Phys. C* **10**, L271 (1977).
45. J. E. Hirsch, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1317 (1985).
46. V. I. Belinicher, A. L. Chernyshev, and V. A. Shubin, *Phys. Rev. B* **53**, 335 (1996).
47. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, *Phys. Rev. B* **59**, 11949 (1999).
48. R. Hayn, A. F. Barabanov, and J. Schulenburg, *Z. Phys. B* **102**, 359 (1997).
49. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, *ЖЭТФ* **127**, 686 (2005).
50. R. O. Kuzian, R. Hayn, A. F. Barabanov, and L. A. Maksimov, *Phys. Rev. B* **58**, 6194 (1998).
51. D. L. Feng, N. P. Armitage, D. H. Lu et al., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5550 (2001).
52. Y.-D. Chuang, A. D. Gromko, and A. Fedorov, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 117002 (2001).
53. A. A. Kordyuk, S. V. Borisenko, M. S. Golden et al., *Phys. Rev. B* **66**, 014502 (2002).
54. S. Sahrakorpi, M. Lindroos, R. S. Markiewicz, and A. Bansil, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 157601 (2005).
55. T. Kondo, R. Khasanov, Y. Sassa, A. Bendounan et al., *Phys. Rev. B* **80**, 100505 (2009).
56. A. Kaminski, S. Rosenkranz, H. M. Fretwell et al., *Phys. Rev. B* **73**, 174511 (2006).
57. J. M. Tranquada, D. E. Cox, W. Kunnmann et al., *Phys. Rev. Lett.* **60**, 156 (1988).
58. N. Doiron-Leyraud et al., *Nature* **447**, 565 (2007).
59. A. Audouard, C. Jaudet, D. Vignolles et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 157003 (2009).
60. A. F. Barabanov, L. A. Maksimov, and L. E. Zhukov, *Physica C* **212**, 375 (1993).
61. D. LeBoeuf, N. Doiron-Leyraud et al., *Nature* **450**, 533 (2007).
62. Э. Л. Нагаев, *ЖЭТФ* **56**, 1013 (1969).
63. Ю. А. Изюмов, М. В. Медведев, *ЖЭТФ* **59**, 553 (1970).
64. В. Ю. Ирхин, М. И. Кацнельсон, *УФН* **164**, 705 (1994).
65. И. М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **38**, 1569 (1960).
66. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, Москва (1971).
67. S. G. Ovchinnikov, E. I. Shneyder, and M. M. Korshunov, arXiv:0908.0576.