

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Квазичастицы в сильно коррелированной электронной системе оксидов меди

С.Г. Овчинников

Приводится обзор новых экспериментальных и теоретических результатов по электронной структуре и спектральным свойствам квазичастиц в оксидах меди. Прослеживается изменение электронной структуры при допировании от антиферромагнитных диэлектриков до высокотемпературных сверхпроводников с оптимальным уровнем допирования. Из экспериментальных методов анализируются в первую очередь данные фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES), нейтронного рассеяния и ЯМР. Рассматриваются два разных класса модельных расчетов электронной структуры для интерпретации экспериментов: численные точные методы для конечных кластеров (точная диагонализация и квантовый метод Монте-Карло) и приближенные методы для бесконечной решетки. В итоге возникает достаточно согласующаяся с результатами разных подходов картина эволюции свойств магнитного полярона — носителя в антиферромагнитной решетке при малом допировании в систему фермиевских квазичастиц, одетых короткодействующими спиновыми флуктуациями антиферромагнитного типа. В области слабодопированных металлических составов наблюдаются нефермионидостные свойства: нарушается теорема Латтинжера, в спектрах фотоэмиссии возникают теневые зоны, спиновая псевдощель проявляется во многих спектральных и термодинамических измерениях. Отмечается, что наименее ясна ситуация в окрестности концентрационного перехода диэлектрик — металл.

PACS numbers: 71.27.+a, 74.25.Jb

Содержание

1. Введение (1043).
2. Новые экспериментальные данные по электронной структуре (1044).
 - 2.1. Структура потолка валентной зоны в $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$.
 - 2.2. Теневые зоны и ближний антиферромагнитный порядок в $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$.
 - 2.3. Изменение зонной структуры с допированием.
 - 2.4. Зонная структура Sr_2RuO_4 .
3. Основные многоэлектронные модели и определение фермиевских квазичастиц в системах с сильными электронными корреляциями (1048).
 - 3.1. Однозонная модель Хаббарда с отталкиванием.
 - 3.2. Трехзонная p-d-модель.
 - 3.3. t-J-модель.
 - 3.4. Многозонная p-d-модель.
 - 3.5. Квазичастицы в сильно коррелированных системах.
4. Численно точные результаты (1052).
 - 4.1. Спектральная плотность одномерной модели Хаббарда.
 - 4.2. Двумерная модель Хаббарда и t-J-модель.
 - 4.3. Точные результаты для p-d-модели.
5. Фермиевские квазичастицы в бесконечной решетке (1057).

С.Г. Овчинников. Институт физики им. Л.В. Киренского
Сибирского отделения РАН
660036 Красноярск, Академгородок, Россия
Тел. (391) 243-29-06. Факс (391) 243-89-23
E-mail: sgo@iph.krasnoyarsk.su

Статья поступила 24 марта 1997 г.,
после доработки 22 апреля 1997 г.

- 5.1. Магнитный полярон в квантовом антиферромагнетике.
 - 5.2. Многозонные модели.
 - 5.3. Электронная структура допированных систем.
 - 5.4. Концентрационная зависимость поверхности Ферми. Нарушение теоремы Латтинжера.
 6. Электронные свойства нормальной фазы (1063).
 - 6.1. Спиновая псевдощель.
 - 6.2. Квазиодномерное зарядовое упорядочение.
 7. Влияние электронной системы на концентрационные зависимости T_N и T_c слабодопированных оксидов меди (1064).
 8. Заключение (1066).
- Список литературы (1067).

1. Введение

Системы с сильными электронными корреляциями (СЭК) известны довольно давно, фактически с объяснения несоответствия диэлектрического состояния окислов 3d-металлов, таких как Fe_3O_4 и NiO , с одноэлектронным критерием металлического состояния для частично заполненных зон [1]. Открытие высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) [2] породило новую волну интереса к проблеме СЭК, так как быстро выяснилось, что традиционные методы зонной теории с использованием функционала плотности в локальном приближении дают металлическое состояние для недопированных диэлектриков типа La_2CuO_4 , Nd_2CuO_4 , $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$, $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ и т.д. Широко распространилась точка зрения, согласно которой для понимания природы ВТСП необходимо знание трансформации электронной струк-

туры оксидов меди при допировании, что невозможно без адекватного описания недопированных и слабодопированных систем, в которых СЭК определяют электронный спектр и многие физические свойства. То, что сверхпроводимость может существовать в системах близких к переходу в диэлектрическую фазу, давно известно [3]. Поэтому в последние 10 лет появилось громадное число работ по проблемам СЭК.

В литературе существует немало обзоров по электронной структуре и механизмам сверхпроводимости оксидов меди [4–13]. Тем не менее за последние несколько лет появился ряд работ, содержащих важные результаты по теме настоящего обзора. Это данные фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES), позволившие определить вид поверхности Ферми для различных сверхпроводящих оксидов меди [10], а также закон дисперсии дырок на потолке валентной зоны в диэлектрике $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ [14], имеющем недопированные плоскости CuO_2 . Более того, методом ARPES получены первые результаты, позволяющие проследить эволюцию электронного спектра в Bi-2212 при изменении концентрации дырок [15]. Есть также ряд важных теоретических результатов как по модели Хаббарда, так и по более сложным многозонным моделям. Все это обуславливает появление настоящего обзора.

Даже в диэлектрических недопированных системах, где эффекты СЭК проявляются наиболее явно и где одноэлектронное описание неприменимо, существуют некие одночастичные возбуждения фермиевского типа — квазичастицы. В настоящем обзоре будут рассмотрены две группы подходов к описанию квазичастиц: численно точные методы (точная диагонализация и квантовый метод Монте-Карло) для конечных кластеров и различные приближенные методы описания квазичастиц в бесконечной решетке. Обзор механизмов сверхпроводимости выходит за рамки настоящей работы, к тому же такому обзору посвящены работы [6, 12], мы ограничимся исследованием свойств квазичастиц и их проявлений в электронных свойствах диэлектрической и нормальной металлической фаз.

Автор не является сторонником крайней точки зрения, согласно которой только модели с СЭК могут привлекаться для описания ВТСП в оксидах меди. Нельзя не отметить успехи традиционной зонной теории в описании поверхности Ферми различных сверхпроводников [5, 10], а также в описании оптических спектров [16, 17]. В то же время эффекты СЭК выявлены и в рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS) и в спектрах рентгеновского поглощения (XAS) даже в металлической области составов [18]. Возможное объяснение причины, по которой эффекты СЭК не проявляются на поверхности Ферми, дано в [19].

2. Новые экспериментальные данные по электронной структуре

Самым информативным методом исследования электронной структуры в настоящее время является метод ARPES. Обычно считается, что фотоэлектронный спектр пропорционален одноэлектронной спектральной плотности:

$$A_+(p, \omega) = \sum_n |\langle \Phi_n^{N+1} | c_{p\sigma}^+ | \Phi_0^N \rangle|^2 \delta(\omega - E_n^{N+1} + E_0^N), \quad \omega > \mu,$$

$$A_-(p, \omega) = \sum_n |\langle \Phi_n^{N-1} | c_{p\sigma}^+ | \Phi_0^N \rangle|^2 \delta(\omega - E_n^{N-1} + E_0^N), \quad \omega < \mu, \quad (1)$$

причем функция A_- определяет спектр фотоэмиссии (PES), а функция A_+ — спектр обратной фотоэмиссии (IPES). Тем самым предполагается, что матричный элемент дипольного оптического перехода есть просто константа. То, что это предположение не всегда справедливо, показывает сравнение ARPES-спектров $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$, снятых в неполяризованном и поляризованном свете (см. раздел 2.1). Более полный анализ требует привлечения двухчастичных корреляционных функций, описывающих рождение и уничтожение электронно-дырочных пар при взаимодействии со светом. Вероятность поглощения света с переходом валентного электрона $c_{p\sigma}^+$ в состояние фотоэлектрона $a_{p\sigma}^+$ с энергией ε_p равна

$$I(p, \omega) = \sum_\sigma |M(p, q, \alpha)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} \times \\ \times \exp(i\omega t) \langle c_{p-q}^+(t) a_{p\sigma}(t) a_{p\sigma}^+ c_{p-q\sigma} \rangle, \quad (2)$$

где переход обусловлен поглощением фотона с частотой ω , волновым вектором $q \approx 0$ и поляризацией α , $M(p, q, \alpha)$ — матричный элемент дипольного перехода. Если пре-небречь вершинной частью, описывающей взаимодействие фотоэлектронов с валентными электронами, то

$$I(p, \omega) = \sum_\sigma |M(p, q, \alpha)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} \times \\ \times \exp[i(\omega - \varepsilon_p - w_A)t] \langle c_{p-q,\sigma}^+(t) c_{p-q,\sigma} \rangle = \\ = \sum_\sigma |M(p, q, \alpha)|^2 \sum_n |\langle \Phi_n^{N-1} | c_{p\sigma} | \Phi_0^N \rangle|^2 \times \\ \times \delta(\omega - \varepsilon_p - w_A - E_n^{N-1} + E_0^N). \quad (3)$$

Здесь w_A — работа выхода. Матричный элемент зависит от волнового вектора, от поляризации и учитывает правила отбора. Двумерный волновой вектор p_{II} для фотоэлектрона, регистрируемого методом ARPES, равен

$$p_{II} = [2m(\omega - w_A - E_{n,p}^{N-1} + E_0^N)]^{1/2} \sin \theta,$$

где θ — полярный угол эмиссии.

2.1. Структура потолка валентной зоны в $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$

Оксихлорид $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ имеет структуру типа K_2NiF_4 со слоями CuO_2 , разделенными двойными слоями SrCl_2 , и является аналогом тетрагональной структуры La_2CuO_4 . Электрические и магнитные свойства $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ и La_2CuO_4 также аналогичны: оба диэлектрики, согласно зонной картине, должны быть металлами с наполовину заполненной зоной, оба антиферромагнетики. Для монокристаллов $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ $T_N = 256$ К [20]. Орторомбической фазы при понижении температуры в $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ не обнаружено вплоть до $T = 10$ К. Другое важное отличие $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ от La_2CuO_4 — невозможность его допирования [21], считается, что в $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ плоскости CuO_2 не содержат носителей заряда. В то же время изоструктурный аналог — $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{F}_{2+y}$ — при достаточно больших y становится сверхпроводником с $T_c = 46$ К [22]. Экспериментальное исследование закона дисперсии дырок на

потолке валентной зоны методом ARPES проведено на монокристаллах $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ [14]. При температуре измерения спектров, $T = 350$ К, образцы находятся выше точки Нееля, в области ближнего антиферромагнитного порядка с корреляционной длиной $\zeta_{\text{AFM}} \approx 250$ Å [23]. Для быстрых и локальных измерений фотоэлектронных спектров это означает, что спектры чувствительны к эффектам антиферромагнитного порядка. Обменное взаимодействие между ближайшими соседями по данным двухмагнонного рамановского рассеяния [24] равно $J = 125 \pm 6$ мэВ. Спектры ARPES получены с помощью синхротронного источника с разрешением по энергии 75 мэВ и по волновым векторам k_x, k_y ($1/20\pi$). Параметр решетки считается равным единице. Характерные точки зоны Брилюэна для квадратной решетки обозначаются $X = \pi(1, 0)$, $Y = \pi(0, 1)$, $M = \pi(1, 1)$,

$\bar{M} = \pi(1/2, 1/2)$. На рисунке 1 показаны данные ARPES для направления ΓM в недопированном диэлектрике $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ и в сверхпроводнике $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCuO}_{2+y}$. Из рисунка 1а видно, что потолок зоны достигается в точке \bar{M} , энергия, отсчитанная от уровня Ферми, равна $E(\bar{M}) = -0,8$ эВ. Следует также отметить немонотонное поведение пика интенсивности — максимальная величина в окрестности точки \bar{M} и спад до нуля в окрестности точек Γ и M . Общая ширина зоны $W = 280 \pm 60$ мэВ.

Сравнение спектров $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ с данными для металлического состава $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCuO}_{2+y}$ [25] (рис. 1б) показывает, что пики в спектре последнего более узкие и исчезают после пересечения уровня Ферми вблизи точки $(0,45; 0,45)$. Ниже уровня Ферми закон дисперсии очень схож с соответствующим участком для диэлектрика. Так, в области \mathbf{k} от $(0,27; 0,27)$ до $(0,45; 0,45)$

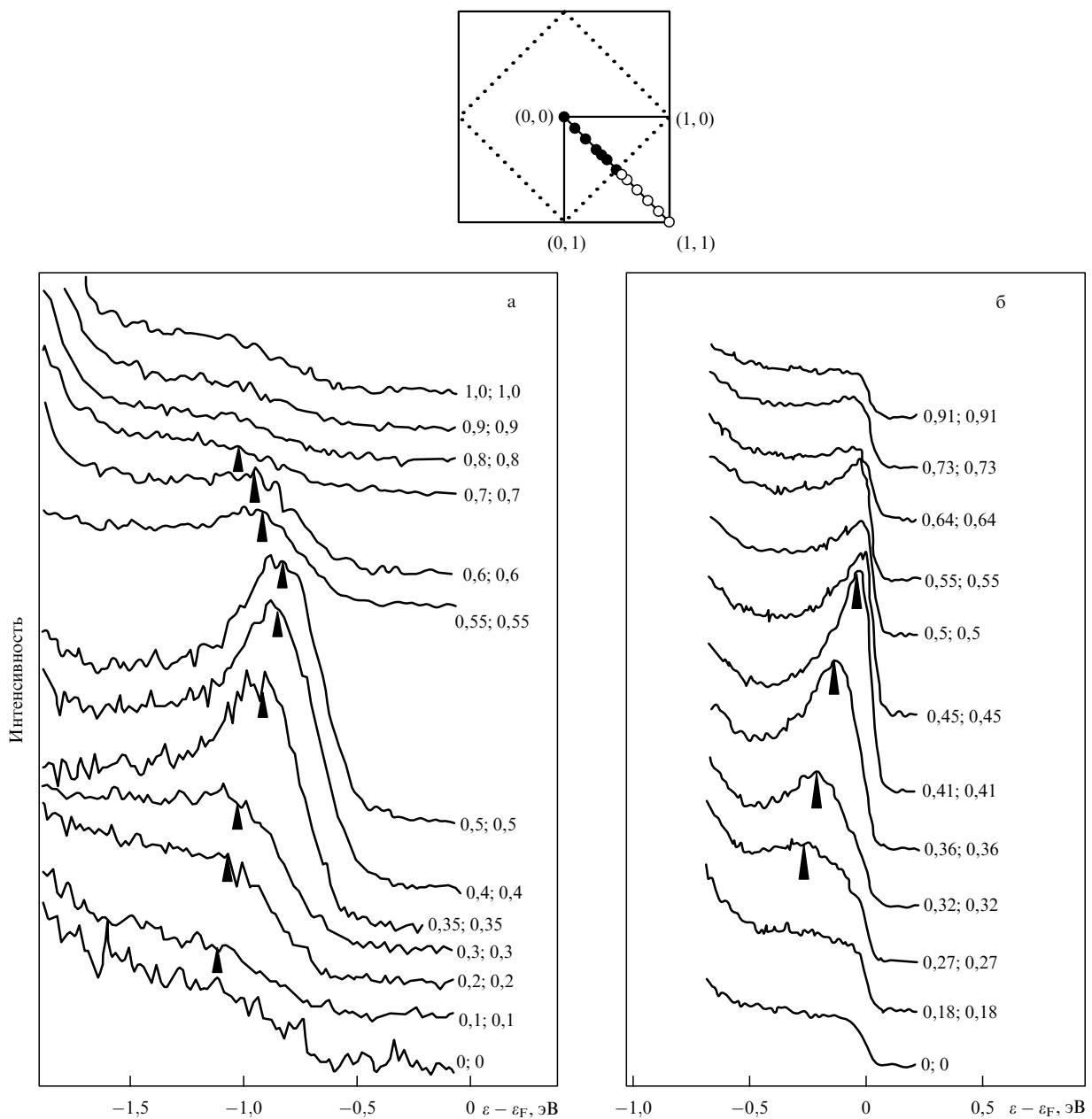


Рис. 1. Данные ARPES для $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ (а) и $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCuO}_{8+y}$ (б) из работы [14]. У кривых значения k_x, k_y в единицах π . Вверху изображена двумерная зона Брилюэна, темные точки соответствуют занятым состояниям, размер точки показывает разрешение по волновому вектору.

дисперсия в Bi-2212 составила 270 ± 30 мэВ, а в $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ — 240 ± 30 мэВ. Такое совпадение наводит на мысль о применимости модели жесткой зоны: допи-рование просто сдвигает уровень Ферми внутрь валентной зоны. Такое простое поведение дисперсии имеет место только для направления ΓM . Отсутствие пиков в направлении ΓX противоречит картине жесткой зоны, ибо для допированных металлических составов известна плоская зона с ϵ_F в окрестности точки $(\pi, 0)$ [25, 26]. Расчеты в рамках $t-J$ -модели [7, 27] дают $W = 2,2 J$ в широкой области параметров t/J . Из приведенных выше значений ширины зоны W и обменного взаимодействия J получаем $W/J = 2,5 \pm 0,5$, что находится в хорошем согласии с $t-J$ -моделью. В то же время для других направлений в зоне Бриллюэна нет согласия с $t-J$ -моделью. Подробнее этот вопрос будет обсуждаться в разделе 5.2.

В более поздней работе [28] спектры ARPES для монокристаллов $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ измерялись при разных поляризациях фотонов. Для направления $[1, 1]$ получен такой же, как в [14], закон дисперсии электронов. Для направления $[1, 0]$ обнаружена зависимость спектров ARPES от поляризации света, так что нечетные относительно отражений в плоскости, определяемой нормалью и направлением $[1, 0]$, электронные состояния не обнаруживаются пика в спектральной плотности. В то же время четные состояния показывают четко выраженный квазичастичный пик с дисперсией 0,2 эВ. Различие спектров неполяризованных [14] и поляризованных [28] фотонов говорит о важности роли матричных элементов.

2.2. Теневые зоны и ближний антиферромагнитный порядок в $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$

Существование сильных антиферромагнитных флюктуаций не только при слабом допи-ровании, но и в области сверхпроводящих составов хорошо известно по данным рассеяния нейтронов для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [29] и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ [30]. Влияние флюктуаций на электронную структуру активно обсуждается в настоящее время. Методом ARPES были получены важные данные об электронной структуре $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ [31], непосредственно обнаружающие влияние магнитных флюктуаций на поверхность Ферми. В отличие от стандартной схемы эксперимента ARPES, когда задается направление вектора $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ и измеряются спектры вдоль небольшого числа, как правило, высокосимметричных направлений в зоне Бриллюэна, авторы работы [31] ограничили диапазон энергий $\Delta E = 10$ мэВ в окрестности уровня Ферми и построили карту интенсивностей вылетевших фотоэлектронов для всей зоны Бриллюэна, используя 6000 дискретных значений вектора \mathbf{k} с угловым разрешением лучше $0,1^\circ$. В результате получено сечение поверхности Ферми плоскостью $k_x k_y$, показанное на рис. 2. Четко видно наличие двух типов линий — высокointенсивных, центрированных вокруг точек X и Y , и низкоинтенсивных, вокруг центра зоны и угловых точек типа M . На рисунке 2 видно, что низкоинтенсивные линии получаются из высокointенсивных сдвигами на волновые векторы ΓX или ΓY , это указывает на новую периодическую структуру 2×2 . Так как перестройка атомной структуры на поверхности монокристалла методом низкоэнергетической электронной дифракции не обнаружена, удвоение периода ассоциируется с магнитными корреляциями. Возбуждение фотоэлектрона

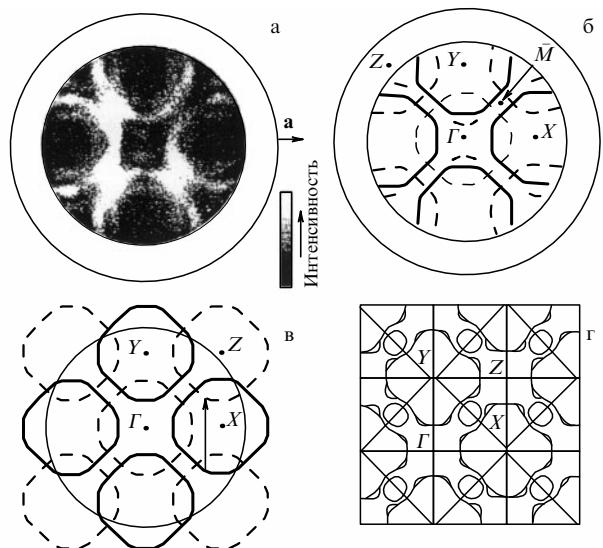


Рис. 2. Карта интенсивностей фотоэлектронов, возбужденных из $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ в энергетическом диапазоне 10 мэВ около энергии Ферми. Логарифмическая шкала интенсивностей усиливает слабые особенности. Внешняя окружность соответствует углу излучения 90° (а). Упрощенная схема рис. а с указанием точек зоны Бриллюэна и выделением интенсивных (сплошные линии) и слабоинтенсивных линий (штрихи) (б). Схема расширенных зон Бриллюэна, показывающая, что система интенсивных линий при сдвиге на вектор ΓX или ΓY образует систему слабых линий (в). Поверхность Ферми $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$, вычисленная линеаризованным методом присоединенных плоских волн (FLAPW) [32] (г). (Данные работы [31].)

является локальным и быстрым процессом, характерные пространственные и временные масштабы могут быть малыми по сравнению с длиной и временем корреляции спиновых флюктуаций, тогда сверхструктура 2×2 ведет себя как квазистатическая и слабые линии вполне могут быть связаны с уменьшением зоны Бриллюэна.

Подобные состояния были предсказаны ранее теоретически [33] и названы "теневыми" состояниями (shadow states). Рассматривая влияние спиновых флюктуаций на электронную структуру, авторы [33] задали из феноменологических соображений вид спиновой восприимчивости и показали, что для достаточно сильных антиферромагнитных корреляций процессы переброса (связь векторов \mathbf{k} и \mathbf{k}' с $|\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{Q}| < 1/\zeta$, где $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ и ζ — длина корреляций) приводят к появлению теневых зон. Однако из их вычислений можно сделать вывод, что для наблюдения соответствующих сателлитов в спектрах ARPES корреляционная длина ζ должна быть достаточно большой, $\zeta \approx 20a$, где a — расстояние Cu–Cu. Поскольку из данных по рассеянию нейтронов следует, что в области сверхпроводящих составов Bi-2212 величина ζ составляет всего лишь несколько a , в [34] такая интерпретация данных работы [31] была поставлена под сомнение. Однако последующие теоретические расчеты в рамках микроскопических моделей [35, 36] показали возможность проявления теневых зон при малой длине $\zeta = 2,5a$, соответствующей данным нейтронного рассеяния. Подробнее эти работы будут рассмотрены в разделе 5.3.

Авторы работы [31] отмечают также, что при сравнении их данных по поверхности Ферми с результатами зонных расчетов [32] ряд деталей поверхности Ферми хорошо согласуется с теорией, например k_F в направ-

лениях точек $(1, 0)$ и $(0, 1)$ и кривизна поверхности в окрестности k_F в этих направлениях. В то же время эксперимент не выявил малых карманов, центрированных около точек типа $M = (\pi/2, \pi/2)$. И наоборот, теневые зоны отсутствуют в зонных расчетах.

2.3. Изменение зонной структуры с допированием

Исследование зонной структуры при изменении концентрации дырок методом ARPES было выполнено на двух группах образцов системы Bi-2212 [15]. Первая — монокристаллы $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$, в которых концентрация носителей менялась с помощью отжига в воздухе при $T = 600^\circ\text{C}$ для получения сильно додопированных (overdoped) образцов с $T_c = 85\text{ K}$ и в атмосфере аргона при $T = 550^\circ\text{C}$ для получения слабододопированных (underdoped) образцов с $T_c = 67\text{ K}$. Здесь сильное додирование и слабое додирование имеется в виду по сравнению с оптимальной концентрацией дырок, дающей максимальное значение T_c . Вторая группа образована монокристаллическими пленками состава $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_x\text{Dy}_x\text{Cu}_2\text{O}_{8+x}$, полученными методом молекуларно-лучевой эпитаксии [37]. Образцы с $x = 1\%, 10\%$ и $17,5\%$ Dy имели $T_c = 85\text{ K}, 65\text{ K}$ и 25 K соответственно. Для $x = 50\%$ Dy пленки были диэлектрическими. Спектры снимались в вакууме при температуре $T = 110\text{ K}$.

Законы дисперсии электронов, полученные методом ARPES, приведены на рис. 3. Для всех образцов, оставшихся сверхпроводящими, закон дисперсии в направлении $[1, 1]$ и величины k_F мало изменяются. При переходе в диэлектрическую область форма закона дисперсии в направлении от $(0, 0)$ к $(\pi/2, \pi/2)$ остается похожей на соответствующий участок закона дисперсии металлических образцов, хотя ширина зоны уменьшается. Совершенно по-другому ведут себя законы дисперсии в окрестностях точки X . Переход от оптимально додированных образцов к слабододированным образцам приводит к исчезновению сечения поверхности Ферми на линии XM (рис. 4). У образцов с оптимальным додированием ($T_c = 85\text{ K}$) наблюдались большие сечения поверхности Ферми, согласующиеся с теоремой Латтин-

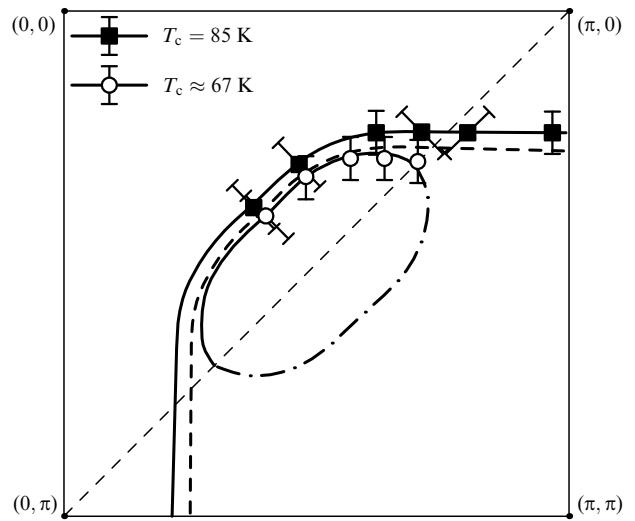


Рис. 4. Сечения поверхности Ферми для сверхпроводников системы Bi-2212 с разными концентрациями дырок (из работы [15]). Видно открытие щели на линии $(\pi, 0) - (\pi, \pi)$ при уменьшении концентрации дырок.

жера [10]. Если бы была справедлива модель жесткой зоны, то уменьшение концентрации дырок приводило бы лишь к уменьшению площади сечения при сохранении его формы (как показано на рис. 4 штриховой линией). При этом должны были бы сохраняться пересечения поверхности Ферми линией XM , что противоречит эксперименту, показывающему открытие энергетической щели на поверхности Ферми вдоль линии XM . Авторы [15] предполагают три возможных интерпретации своих результатов. Первая заключается в возможности спаривания квазичастиц без парной когерентности выше T_c . Спаривание могло бы открыть щель без существования когерентного сверхпроводящего состояния. Спаривание квазичастиц выше T_c обсуждалось в терминах обобщенной теории Гинзбурга — Ландау для сверхпроводимости d-типа [38–40]. Спаривание спинонов d-типа [41, 42] в рамках теории резонансных валентных связей (RVB) [43] также обсуждалось для температур выше T_c . Для обоих классов спаривания сдвиг энергии фотоэлектронов в окрестности точки X объясняется как возникновение щели с симметрией $d_{x^2-y^2}$, которая максимальна для точки X и равна нулю вдоль линии GM . Амплитуда щели может быть оценена по величине сдвига энергии связи для точки X , равной 20–30 мэВ.

Другая интерпретация связана с образованием сверхструктур либо за счет антиферромагнитного порядка, либо в результате перестройки атомного упорядочения. В этом случае точки G и M становятся эквивалентными в новой зоне Бриллюэна, появляются теневые зоны со стороны точки M . Смешивание теневых и исходных зон открывает щель в окрестности точки X точно так же, как в теории волн спиновой плотности [44]. Сечение поверхности Ферми теневой зоной в этом случае показано на рис. 4 штрихпунктиром. Третья интерпретация основана также на d-спаривании спинонов, но с сохранением SU(2)-симметрии при додировании [45]. Сравнивая результаты работ [15, 31] и теоретических расчетов [7–9, 33, 35, 36], мы приходим к выводу о частичной перестройке зонной структуры с изменением плотности состояний на поверхности Ферми за счет спиновых

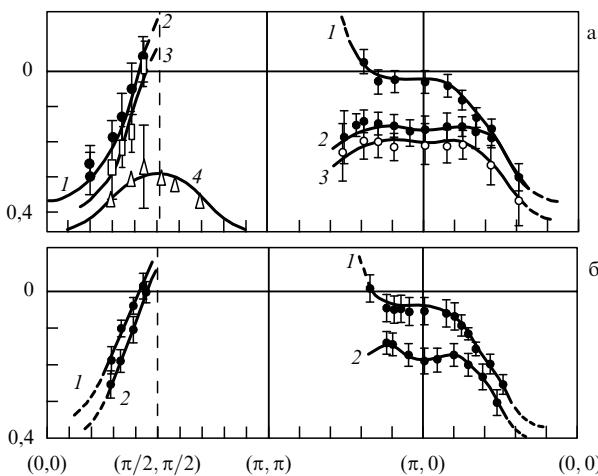


Рис. 3. Законы дисперсии для образцов с изменяющейся концентрацией дырок. (а) Пленки $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{1-x}\text{Dy}_x\text{Cu}_2\text{O}_{8+x}$: 1 — 1% Dy, $T_c = 85\text{ K}$; 2 — 10% Dy, $T_c = 65\text{ K}$; 3 — 17,5% Dy, $T_c = 25\text{ K}$; 4 — 50% Dy, диэлектрик. (б) Кристаллы $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+y}$: 1 — отожженный на воздухе, $T_c = 85\text{ K}$; 2 — отожженный в аргоне, $T_c = 67\text{ K}$. (Данные работы [15].)

флуктуаций. В этом случае реконструкция поверхности Ферми при уменьшении концентрации дырок связана с изменением ее топологии. Сопоставление законов дисперсии на рис. 1 и 3 позволяет сделать следующий вывод о трансформации электронной структуры: в недопированном образце потолок валентной зоны достигается в точке $\bar{M} = (\pi/2, \pi/2)$. При допировании появляются внутрищелевые состояния с глубокими примесными уровнями (in-gap states) [46–50]. Детали изменения электронной структуры в окрестностях перехода диэлектрик–металл при допировании в настоящее время неясны. В металлической слабодопированной фазе появляются новые состояния в окрестности точки X , формирующие плоскую зону. Можно предположить, что эти состояния возникли из внутрищелевых состояний диэлектрической фазы, что естественно объясняет их бездисперсионный характер. С увеличением концентрации дырок до оптимальной эти состояния образуют зону, имеющую седловую особенность в окрестности точки X и максимум в точке M .

2.4. Зонная структура Sr₂RuO₄

Вопрос о роли слоев CuO₂ остается центральным для понимания механизма сверхпроводимости. Могут ли другие слоистые перовскиты, не содержащие медь, быть сверхпроводящими? Недавнее обнаружение сверхпроводящих соединений Sr₂RuO₄ с $T_c = 0,93$ К [51] позволяет сделать любопытное сравнение с оксидами меди. Кристаллы Sr₂RuO₄ имеют объемно-центрированную тетрагональную решетку типа K₂NiF₄ с параметрами $a = b = 3,8694$ Å, $c = 12,764$ Å при комнатной температуре [52]. Отличия Sr₂RuO₄ от слоистых купратов в следующем: а) сверхпроводимость есть уже в недопированных образцах; б) ион Ru⁴⁺(4d⁴) в низкоспиновом состоянии имеет спин $S = 1$; в) в Sr₂RuO₄ в p-d-гибридизации участвуют орбитали t_{2g}(d_{xy}, d_{xz} и d_{yz}). Спектры ARPES для Sr₂RuO₄ были измерены при 10 К в вакууме с энергетическим разрешением 22 мэВ и угловым разрешением 1°, что соответствует $\Delta k = 0,06$ Å⁻¹ [53]. Как и для купратов, в окрестности точки $(\pi, 0)$ в законе дисперсии (рис. 5) обнаружена седловая точка, приводящая к особенности Ван Хова. Сопоставляя эти результаты с результатами расчетов в приближении локального функционала плотности (LDA) [54], авторы работы [53] отмечают, что хорошего согласия с теорией удается добиться лишь после сдвига на 77 мэВ в зонных расчетах. Согласно [54], три наблюдаемые зоны на поверхности Ферми имеют преимущественно d_{xz}-, d_{yz}- и d_{xy}-характер. Две поверхности Ферми, центрированные вокруг точки (π, π) , имеют дырочный характер, а поверхность вокруг точки $(0, 0)$ — электронный. Особенность Ван Хова лежит на 17 мэВ ниже ε_F .

Предыдущие ARPES-эксперименты выявили седловые точки при $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ и особенности Ван Хова для многих купратов (таблица). Из таблицы видно, что система n-типа NCCO выделяется как типом зависимости $\rho(T) \propto T^2$ [58], так и удаленностью особенности Ван Хова от ε_F . Для Sr₂RuO₄ особенность Ван Хова столь же близка к энергии Ферми, как для купратов. Во многих теориях близость ε_F к особенности Ван Хова рассматривалась как причина высоких значений T_c в купратах (см. [59, 60], а также обзоры [3, 6, 12]). Низкие значения T_c в Bi-2201 и в Sr₂RuO₄ заставляют сомневаться в подобном сценарии.

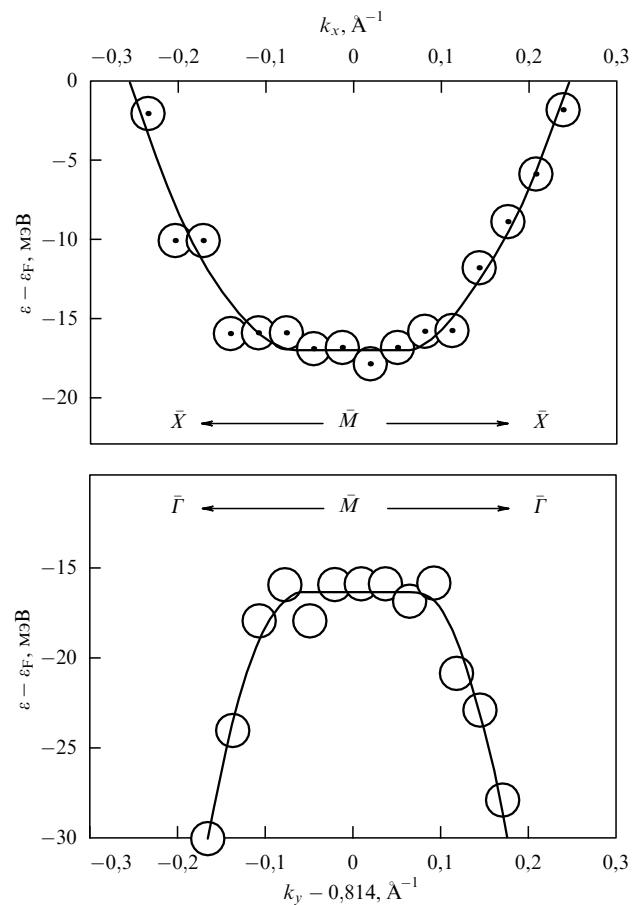


Рис. 5. Плоские зоны в окрестности точки $(\pi, 0)$ для Sr₂RuO₄ по данным ARPES (из работы [53]). Обозначения точек зоны Бриллюэна в [53] инвертированы по сравнению с нашими: здесь $\bar{X} = (\pi, \pi)$, $\bar{M} = (\pi, 0)$.

Таблица. Температура сверхпроводящего перехода, температурная зависимость электрического сопротивления в нормальной фазе и положение особенности Ван Хова, отсчитанное от энергии Ферми (из работы [53])

Соединения	T_c , К	$\rho_{ab}(T)$	E_{VH} , мэВ	Работа
YBa ₂ Cu ₃ O _{7-y}	92	линейная	< 10	[55]
YBa ₂ Cu ₄ O ₈	82	линейная	19	[55]
Bi ₂ (Sr _{0,93} Pr _{0,03}) ₂ CuO ₆	10	линейная	< 30	[56]
Bi ₂ Sr ₂ CaCu ₂ O _{8+y}	83	линейная	< 30	[25]
Nd _{1,85} Ce _{0,15} CuO ₄	25	квадратичная	350	[57]
Sr ₂ RuO ₄	0,93	линейная [58]	17	[53]

3. Основные многоэлектронные модели и определение фермиевских квазичастиц в системах с сильными электронными корреляциями

Можно отметить ряд попыток адаптации зонных расчетов к сильно коррелированным системам: коррекция потенциала в области двухчастичных состояний [61], учет поправок к потенциальному за счет самодействия [62]. В принципе, поскольку теорема Конга и Шэма является точной, по-видимому, и квазичастицы в сильно коррелированных системах можно описывать в формализме функционала плотности, но, очевидно, это должен быть

нелокальный функционал. Применение метода функционала плотности к системам с СЭК требует отдельного обсуждения, в настоящем обзоре мы ограничимся модельными теориями. Первая часть настоящего раздела, содержащая описание модели Хаббарда, трехзонной $p-d$ -модели и $t-J$ -модели, неминуемо перекрывается со многими предыдущими обзорами [4–13], поэтому изложение будет достаточно кратким. Особое внимание будет уделено применимости тех или иных моделей к описанию CuO_2 -плоскости.

3.1. Однозонная модель Хаббарда с отталкиванием

В этой модели рассматриваются электроны с гамильтонианом [63]

$$H = \sum_{i,\sigma} \left((\varepsilon - \mu) n_{i\sigma} + \frac{U}{2} n_{i,\sigma} n_{i,-\sigma} \right) + \sum_{i,j,\sigma} (t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}^- + \text{H. c.}) , \quad (4)$$

где $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$, $a_{i\sigma}$ — оператор уничтожения электрона на узле i с проекцией спина $\sigma = \pm 1/2$, ε — одноэлектронная энергия в кристаллическом поле, μ — химический потенциал, U — величина хаббардовского отталкивания, t_{ij} — интеграл перескока между узлами i, j . Рассмотрим локальный базис модели

$$|0\rangle, \quad |\sigma\rangle = a_{i\sigma}^+ |0\rangle, \quad |2\rangle = a_{i+}^+ a_{i-}^+ |0\rangle \quad (5)$$

с энергиями $\varepsilon_0 = 0$, $\varepsilon_\sigma = \varepsilon - \mu \equiv \varepsilon_1$, $\varepsilon_2 = 2\varepsilon_1 + U$. В случае CuO_2 -плоскости в дырочном описании $|0\rangle$ соответствует конфигурации $\text{Cu}^+(d^{10})$, $|\sigma\rangle$ соответствует конфигурации $\text{Cu}^{2+}(d^9)$ и $|2\rangle$ соответствует конфигурации $\text{Cu}^{3+}(d^8)$. В недопированном La_2CuO_4 медь находится в состоянии Cu^{2+} , т.е. основное состояние соответствует заполнению однодырочных термов. При допировании дырками их концентрация на ячейку увеличивается, $n_h = 1 + x$, что должно приводить к частичному заполнению конфигураций Cu^{3+} . Между тем эксперименты по рентгеновской спектроскопии не обнаружили присутствия Cu^{3+} в достаточном количестве [64]. Дырка, добавляемая в систему при допировании, заполняет, в основном, орбитали кислорода, которые не учитываются в модели Хаббарда. Это не означает, что модель Хаббарда совсем неприменима для описания оксидов. Дело в том, что более реалистичные модели в определенных областях своих параметров сводятся к модели Хаббарда. Кроме того, исследование свойств квазичастиц в модели Хаббарда представляет методический интерес.

3.2. Трехзоная $p-d$ -модель

Эта модель является обобщением модели Хаббарда для CuO_2 -слоя [65, 66]:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{f,\sigma} \left((\varepsilon_d - \mu) n_{f\sigma} + \frac{U_d}{2} n_{f\sigma} n_{f,-\sigma} \right) + \\ & + \sum_{i,\sigma} \left((\varepsilon_p - \mu) n_{i\sigma} + \frac{U_p}{2} n_{i\sigma} n_{i,-\sigma} \right) + \\ & + \sum_{\langle i,f \rangle \sigma} t_{pd} (p_{i\sigma}^+ d_{f\sigma} + \text{H. c.}) + \\ & + \sum_{\langle i,f \rangle \sigma} t_{pp} (p_{i\sigma}^+ p_{f\sigma} + \text{H. c.}) + V_{pd} \sum_{\langle i,f \rangle \sigma} n_{i\sigma} n_{f\sigma} . \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь узлы f, i — это узлы меди и кислорода соответственно, ε_d и ε_p — энергии $d_{x^2-y^2}$ -дырки на меди и p_x -, p_y -на кислороде, U_d , U_p — кулоновские параметры, t_{pd} — интеграл перескока между ближайшими соседями медь — кислород, t_{pp} — интеграл перескока кислород — кислород и V_{pd} — межатомное кулоновское взаимодействие медь — кислород. Важным параметром является энергия возбуждения с переносом заряда $\Delta = \varepsilon_p - \varepsilon_d$. Несомненным достоинством $p-d$ -модели является учет химического состава оксидов меди. В рамках модели (6) описано большое количество спектральных методов с высокими энергиями возбуждений, таких как рентгеновская и рентгеноэлектронная спектроскопия. Вместе с тем многие низкоэнергетические свойства моделей (4) и (6) совпадают. Причина этого была указана в работе [67], авторы которой для CuO_4 -клスター показали, что комплекс "дырка на меди + дырка на кислороде" имеет $S = 0$, аналогичное триплетное состояние лежит выше по энергии на величину 2–4 эВ. Добавляемые при допировании дырки попадают в состояние синглета Жанга — Райса. В результате локальный базис модели (6), относящийся к одной элементарной ячейке, совпадает с базисом модели Хаббарда, если под вакуумным состоянием понимать $d^{10}p^6$ -конфигурации меди и кислорода, однодырочные состояния $|\sigma\rangle$ сопоставлять с молекулярными орбиталами (смесь $d^{10}p^5$ - и d^9p^6 -конфигураций) и двухдырочным состояниям $|2\rangle$ сопоставлять синглет Жанга — Райса. Довольно много работ посвящено проблеме последовательного сведения трехзонаной $p-d$ -модели к однозонной модели Хаббарда и далее к $t-J$ -модели (см. [68–73] и ссылки в обзорах [7–9]).

3.3. $t-J$ -модель

Первоначально $t-J$ -модель была получена из модели Хаббарда в пределе $t/U \ll 1$. С помощью канонического преобразования, исключающего двухчастичные конфигурации, получается следующий гамильтониан [74, 75]:

$$\begin{aligned} H_{t-J^*} = & -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma}) + \\ & + \frac{t^2}{U} \sum_{j,\delta,\delta'} (c_{j+\delta\uparrow}^+ c_{j\downarrow}^+ c_{j\downarrow} c_{j+\delta'\uparrow} + c_{j\uparrow}^+ c_{j+\delta\downarrow}^+ c_{j+\delta'\downarrow} c_{j'\uparrow} + \\ & + c_{j+\delta\uparrow}^+ c_{j\downarrow}^+ c_{j+\delta'\downarrow} c_{j\uparrow} + c_{j\uparrow}^+ c_{j+\delta\downarrow}^+ c_{j\downarrow} c_{j+\delta'\uparrow}) , \end{aligned} \quad (7)$$

где $j + \delta$ и $j + \delta'$ — ближайшие соседи к узлу j . В частном случае $\delta = \delta'$, пренебрегая трехцентровыми слагаемыми в (7), получаем гамильтониан $t-J$ -модели с $J = 4t^2/U$:

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \text{H. c.}) + \sum_{\langle i,j \rangle} J \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right) . \quad (8)$$

Здесь операторы действуют в ограниченном гильбертовом пространстве с исключенными двухчастичными состояниями, т.е. $c_{i\sigma} \rightarrow c_{i\sigma}(1 - n_{i,-\sigma})$. Трехцентровые слагаемые вносят вклад только при наличии дырок. Их можно переписать в виде

$$H_J^{(3)} = -\frac{t^2}{U} \sum_{j,\sigma} \sum_{\delta \neq \delta'} (c_{j+\delta,\sigma}^+ n_{j,-\sigma} c_{j+\delta',\sigma} - c_{j+\delta,\sigma}^+ c_{j,-\sigma}^+ c_{j,\sigma} c_{j+\delta',-\sigma}) . \quad (9)$$

Первое слагаемое в (9) относится к внутриподрешеточному перескоку, не влияющему на антиферромагнитный

порядок, второе слагаемое описывает перескок между вторыми соседями, сопровождаемый переворотом спина. Учет таких перескоков приводит к $t-t'-J$ -модели [72]. Сопоставление энергий основного состояния без дырок для моделей Хаббарда и $t-J$ -модели, а также для одной дырки в моделях $t-J$, $t-J^*$ и Хаббарда было сделано методом точной диагонализации одномерной цепочки из 10 атомов и двумерной решетки из 10 атомов [76]. Оказалось, что при $U/t = 20$ все модели дают близкие результаты с различием около 1 %. Но при $U = 8t$ различие достигает 20 % в двумерном случае, что говорит о необходимости учета более высоких поправок по t/U в эффективном гамильтониане. Таким образом, строго говоря, $t-J$ -модель выводится из модели Хаббарда при $J \ll t$. Однако ввиду нетривиальных свойств $t-J$ -модели ее нередко рассматривают при произвольном соотношении параметров t и J . В качестве обоснования можно привести работу [77], в которой показано, что включение в модель дополнительного кулоновского матричного элемента V_{ij} позволяет потом перейти к $t-J$ -модели, для которой не обязательно выполнение неравенства $t \ll J$. Дело в том, что достаточно большое значение V_{ij} может привести к неустойчивости относительно образования волны зарядовой плотности. Система вблизи такой неустойчивости может оказаться физической реализацией $t-J$ -модели с $J \sim t$ [77].

3.4. Многозонная p-d-модель

Реальная орбитальная структура меди важна не только для анализа спектров валентной зоны вдали от поверхности Ферми, но и для анализа симметрии состояний вблизи поверхности Ферми. Ненулевая заселенность d_{z^2} -орбиталей была выявлена в экспериментах [78, 79] по поляризационной зависимости CuL₃-спектров рентгеновского поглощения, причем была обнаружена корреляция между T_c и заселенностью d_{z^2} -орбитали. Что касается t_{2g} -орбиталей, то они лежат глубоко внутри валентной зоны (около 4 эВ от потолка [5]). Итак, минимальная реалистичная модель CuO₂-слоя должна включать две d-орбитали — $d_{x^2-y^2}$ и d_{z^2} , — а также p_x - и p_y -орбитали на каждом ионе кислорода. При расчетах с участием апического кислорода добавляется также p_z -орбиталь на кислороде. Подобная модель была предложена для оксидов меди в работе [80] с гамильтонианом

$$H = H_d + H_p + H_{pd} + H_{pp}, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} H_d &= \sum_r H_d(r), \\ H_d(r) &= \sum_{\lambda\sigma} \left[(\epsilon_{d\lambda} - \mu) d_{r\lambda\sigma}^+ d_{r\lambda\sigma} + \frac{1}{2} U_d n_{r\lambda}^\sigma n_{r\lambda}^{-\sigma} \right] + \\ &+ \sum_{\sigma\sigma'} (V_d n_{r1}^\sigma n_{r2}^{\sigma'} - J_d d_{r1\sigma}^+ d_{r1\sigma'} d_{r2\sigma'}^+ d_{r2\sigma}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_p &= \sum_i H_p(i), \quad H_p(i) = \sum_{\alpha\sigma} \left[(\epsilon_{p\alpha} - \mu) p_{i\alpha\sigma}^+ p_{i\alpha\sigma} + \frac{1}{2} U_p n_{i\alpha}^\sigma n_{i\alpha}^{-\sigma} \right] + \\ &+ (V_p n_{i1}^\sigma n_{i2}^{\sigma'} - J_p d_{i1\sigma}^+ d_{i1\sigma'} p_{i2\sigma'}^+ p_{i2\sigma}), \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} H_{pd}(i, r) &= \sum_{\alpha\lambda\sigma\sigma'} (T_{\lambda\alpha} p_{i\alpha\sigma}^+ + d_{r\lambda\sigma} + \text{H. с.} + V_{\lambda\alpha} n_{r\lambda}^\sigma n_{r\lambda}^{\sigma'} - \\ &- J_{\lambda\alpha} d_{r\lambda\sigma}^+ d_{r\lambda\sigma'} p_{i\alpha\sigma'}^+ p_{i\alpha\sigma}), \\ H_{pp} &= \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha\beta\sigma} (t_{\alpha\beta} p_{i\alpha\sigma}^+ p_{j\beta\sigma} + \text{H. с.}). \end{aligned}$$

В рамках многозонной p-d-модели можно сделать анализ применимости трехзонной p-d-модели. Очевидно, что в пределе $\Delta_d = \epsilon(d_{z^2}) - \epsilon(d_{x^2-y^2}) \rightarrow \infty$ многозонная модель переходит в трехзонную. В то же время оксидам меди соответствует $\Delta_d \sim 1$ эВ. Поэтому изучение перехода от больших Δ_d к $\Delta_d \sim 1$ эВ позволяет проследить за эффектами орбитальной структуры меди. Простейший расчет такого типа был сделан методом точной диагонализации для CuO₄-кластера [81].

Собственные состояния кластера нумеруются числом дырок в нем, $n = 0, 1, 2, \dots$. Для $n = 0$ имеем вакуумное состояние $d^{10}p^6$. Для $n = 1$ собственными состояниями являются обычные однодырочные молекулярные орбитали b_{1g} и a_{1g} -симметрии, причем $d_{x^2-y^2}$ гибридизируется с p-орбиталами b_{1g} , а d_{z^2} — с a_{1g} -симметрией. Для $n = 2$ имеются смешивающиеся конфигурации $p^5d^{10}p^5$, $p^6d^9p^5$, $p^6d^8p^6$, $p^4d^{10}p^6$, так что возникает набор спиновых синглетов и триплетов в различных орбитальных состояниях. Разница энергий двух нижних термов — синглета ${}^1A_{1g}$ и триплета ${}^3B_{1g}$ — показана на рис. 6 для трех различных наборов параметров модели. Видно, что при больших Δ_d ($\Delta_d \geq 10$ эВ) триплет лежит выше синглета на величину $\Delta_E \approx 2$ эВ (что соответствует работе [67]), это позволяет не учитывать его при низкоэнергетическом описании. Однако при уменьшении параметра Δ_d синглет-триплетное расщепление также уменьшается, и в области $\Delta_d \sim 1$ эВ для типичных значений параметров модели $\Delta_E \approx 0,5$ эВ. Аналогичный вывод был получен при рассмотрении кластера CuO₆ методом самосогласованного поля с учетом конфигурационного взаимодействия

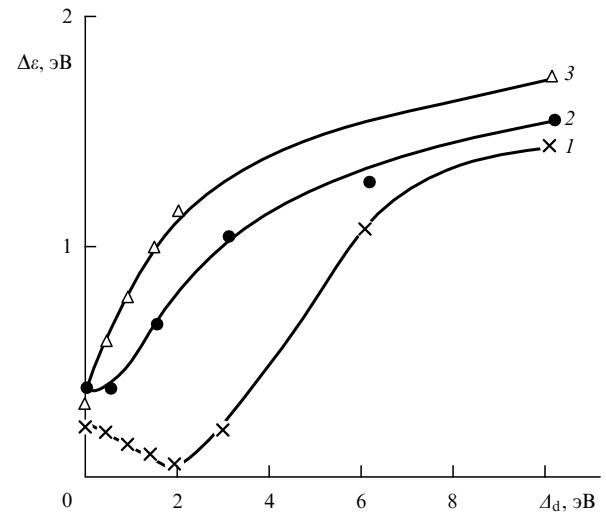


Рис. 6. Разница энергий двух дырок — синглета и триплета — как функция параметра кристаллического поля $\Delta_d = \epsilon(d_{z^2}) - \epsilon(d_{x^2-y^2})$ для трех различных наборов параметров (в эВ) модели: 1 — $U_d = 12$, $U_p = 8$, $\Delta = 3$, $t_{pd} = 1,5$, остальные равны нулю; 2 — $U_d = 4,5$, остальные те же самые, что в 1; 3 — $U_d = 12$, $U_p = 8$, $\Delta = 2$, $t_{pd} = 1,5$, $t_{pp} = 0,2$, $V_d = 4,5$, $V_p = 3$, $V_{pd} = 0,6$, $J_d = J_p = 0,5$, $J_{pd} = 0,2$. (Данные работы [81].)

ствия [82] и по теории возмущений [83], причем в обеих этих работах наблюдается кроссовер синглета ${}^1\text{A}_{1g}$ и триплета ${}^3\text{B}_{1g}$ при изменении параметров c/a . Влияние двухдырочных B_1 -состояний на вид эффективного однозонного гамильтониана $t - t' - J$ -модели рассмотрено в работе [84], где показано, что основной эффект сводится к перенормировке параметра t' , описывающего перескоки между вторыми соседями. Перенормировка может быть немалой и даже изменять знак t' . Изменения величины t' от соединения к соединению коррелируют с величиной T_c^{\max} , соответствующей оптимальному допированию. Когда происходит кроссовер синглета Жанга–Райса и B_1 -терма, однозонная модель становится неприменимой.

Таким образом, область применимости трехзонной $p-d$ -модели, однозонной модели Хаббарда и $t-J$ -модели ограничена по энергии рассматриваемых процессов условием $E \ll \Delta\varepsilon_S$, при $\Delta\varepsilon_S \leq 0,5$ эВ эта область весьма мала.

3.5. Квазичастицы в сильно коррелированных системах

Непосредственное использование понятия об электроне как о квазичастице, развитое в теории ферми-жидкости Ландау [85], вряд ли годится в теории СЭК, ибо сильные корреляции перестраивают основное состояние системы в случае модели Хаббарда с половинным заполнением и сама поверхность Ферми исчезает. Тем не менее комбинация идей Ландау и Хаббарда позволяет ввести понятие фермиевской квазичастицы и для систем с СЭК. Начнем с рассмотрения локальных состояний, когда перескоки между элементарными ячейками отсутствуют. На рисунке 7 изображены локальные базисы модели Хаббарда (а) и многозонной $p-d$ -модели (б), причем на рис. 7б показана лишь часть возбужденных состояний с $n = 1$ и $n = 2$. Как в теории Ландау, будем определять энергию квазичастицы как изменение энергии N -электронной системы при добавлении к ней одного электрона, т.е.

$$\Omega_{pq} = E_q(N+1) - E_p(N), \quad (11)$$

где $E_p(N)$ — терм с номером p для N -электронной системы. В отличие от теории ферми-жидкости мы примем определение (11) не для всего кристалла, а для той конкретной ячейки, где рождается квазичастица. Вопрос о ее перескоке и законе дисперсии будет рассматриваться отдельно. Для модели Хаббарда можно ввести всего две такие квазичастицы:

$$\Omega_- = \varepsilon_1 - \varepsilon_0 = \varepsilon_1, \quad \Omega_+ = \varepsilon_2 - \varepsilon_1 = \varepsilon_1 + U, \quad (12)$$

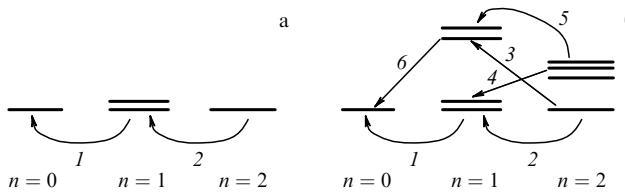


Рис. 7. Локальные базисы однозонной модели Хаббарда (а) и многозонной $p-d$ -модели (б). Для простоты показана лишь часть возбужденных термов в однодырочном и двухдырочном секторах гильбертова пространства в случае многозонной модели. Стрелками показаны процессы уничтожения квазичастиц.

соответствующие нижней и верхней хаббардовским зонам. В многозонном случае число различных процессов перехода между уровнями с изменением числа электронов на один увеличивается. Естественным математическим языком, описывающим введенные таким образом локализованные квазичастицы, является представление операторов Хаббарда

$$X^{pq} = |p\rangle\langle q|, \quad (13)$$

построенных на полном наборе локальных многоэлектронных состояний. Заметим, что традиционное определение X -операторов включает состояния одного узла, а мы используем состояния ячейки, т.е. многоэлектронные молекулярные орбитали вместо атомных орбиталей. В силу проекционных свойств X -операторов любой локальный оператор может быть выражен через линейную комбинацию X -операторов, в том числе одноэлектронный оператор уничтожения в ячейке i с зонным индексом λ :

$$a_{i\lambda\sigma} = \sum_{pq} |p\rangle\langle p| a_{i\lambda\sigma} |q\rangle\langle q| = \sum_{pq} \gamma_{i\lambda\sigma}(p, q) X_i^{pq}. \quad (14)$$

Соотношение (14) показывает разницу в описании фермиевских квазичастиц на одноэлектронном языке и на многоэлектронном. Одноэлектронный оператор уменьшает число электронов на единицу сразу для всех секторов гильбертова пространства, в то время как оператор X^{pq} описывает процесс "парциального" уничтожения электрона в начальном состоянии q с $N+1$ электроном и конечным состоянием p с N электронами, а матричный элемент $\gamma_{i\lambda\sigma}(p, q)$ дает амплитуду вероятности такого перехода. Если задача точной диагонализации гамильтониана решена, то амплитуды вычисляются непосредственно. Поскольку СЭК накладывает ограничения на области гильбертова пространства, соответствующие состояниям с большой корреляционной энергией, ясно, что использование языка X -операторов более естественно, ибо эти ограничения просто убирают соответствующие процессы в правой части (14), в то время как одноэлектронный оператор $a_{i\lambda\sigma}$ для этого не приспособлен. Итак, расщепление процесса уничтожения электрона на парциальные составляющие для каждой пары возможных начальных и конечных состояний является первым важным моментом в определении квазичастиц. Второй важный момент — вопрос о спектральном весе данной квазичастицы. Действительно, можно выбрать процесс перехода $|q\rangle \rightarrow |p\rangle$ с изменением числа электронов на единицу, с энергией вида (11), с ненулевым матричным элементом $\gamma(p, q)$ в формуле (14), но имеющим нулевой спектральный вес, если это будет переход из пустого (незаполненного) в пустое состояние. Для вычисления спектрального веса нужно вычислить соответствующую функцию Грина. Это удобно сделать в обозначениях, принятых в [86], где каждой паре "начальное и конечное состояния" (p, q) сопоставляется вектор $\mathbf{a} = \mathbf{a}(p, q)$. Функция Грина внутри ячейки вычисляется точно и равна

$$D_{i,j(0)}^{\alpha,\beta}(\omega) = \langle \langle X_i^\alpha | X_j^\beta \rangle \rangle_\omega^{(0)} = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \frac{F(\mathbf{a})}{\omega - \Omega_\mathbf{a} + i\delta}, \quad (15)$$

здесь $F(\mathbf{a})$ — фактор заполнения, $F(\mathbf{a}) = \langle X^{p,p} \rangle + \langle X^{q,q} \rangle$ для фермиевских квазичастиц, $\Omega_\mathbf{a} = \Omega_{pq} = E_q - E_p$. Одно-

электронная функция Грина имеет вид

$$G_{ij,\sigma}(\omega) = \langle \langle a_{i\lambda_1\sigma} | a_{j\lambda_2\sigma}^+ \rangle \rangle_\omega = \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\lambda_1\sigma}(\alpha) \gamma_{\lambda_2\sigma}^*(\beta) D_{ij}^{\alpha\beta}(\omega). \quad (16)$$

Соответственно, локальная одноэлектронная функция Грина равна

$$G_{ij,\sigma}^{(0)\lambda_1\lambda_2}(\omega) = \delta_{ij} \sum_{\alpha} \gamma_{\lambda_1\sigma}(\alpha) \gamma_{\lambda_2\sigma}^*(\alpha) \frac{F(\alpha)}{\omega - \Omega_{\alpha} + i\delta}, \quad (17)$$

откуда видно, что спектральный вес определяется произведением вероятности перехода $|\gamma_{\lambda}(\alpha)|^2$ и фактора заполнения $F(\alpha)$. Нуевые значения амплитуды перехода и чисел заполнения выбирают из большого числа переходов, удовлетворяющих формуле (11), значительно меньшее число квазичастиц, обладающих ненулевым спектральным весом. Числа заполнения термов определяются уравнением самосогласования для химического потенциала:

$$\sum_{n,p} n \langle X^{p,p} \rangle = n_h, \quad (18)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$ — число дырок, а p нумерует все состояния в соответствующем секторе гильбертова пространства, n_h — концентрация дырок на ячейку. Поэтому фактор заполнения зависит от концентрации, и при допировании появляются квазичастицы со спектральным весом, пропорциональным степени допирования. Часть из них попадает в щель, образуя внутрищелевые состояния (in-gap) с глубокими примесными уровнями [87]. Для однозонной модели Хаббарда в недопированном случае для обеих квазичастиц в парамагнитной фазе при $T = 0$ получаем $F(\Omega_+) = F(\Omega_-) = 1/2$, так что число состояний в каждой хаббардовской зоне с учетом спина равняется 1, а не 2, как для зоны свободных электронов. Об этом изменении часто говорят как об изменении статистики: за счет сильных корреляций электроны приобретают статистику бесспиновых фермионов. Как видно из нашего определения, статистика действительно изменяется, но двукратное вырождение по спину в парамагнитной фазе сохраняется, и во внешнем магнитном поле хаббардовские зоны расщепляются. Число состояний в той или иной хаббардовской зоне меняется от нуля до единицы в зависимости от фактора заполнения. Учет межъядерных взаимодействий и перескоков для бесконечной решетки в X -представлении возможен по теории возмущений. Наиболее часто используются те или иные схемы расщеплений высших функций Грина или диаграммная техника для X -операторов [86, 88, 89]. Из-за сложности коммутационных соотношений для X -операторов эта техника более сложна, чем для фермионов и бозонов, и не получила широкого распространения. В последние годы широко применяются методы слэйв-бозонов и слэйв-фермионов, в которых точные коммутационные соотношения можно учесть, налагая дополнительные условия — "констрайны", — ограничивающие допустимое гильбертово пространство. Однако на практике точные локальные ограничения учитываются, как правило, в среднем, что также ведет к неконтролируемым ошибкам. Существует довольно много методов приближенного описания модели Хаббарда, однако их рассмотрение выходит за рамки данного обзора (см. [7–9, 13, 89]).

4. Численно точные результаты

Так как точного решения в двумерном случае для моделей типа Хаббарда нет, то все точные результаты получаются численно для конечных кластеров либо методом точной диагонализации модельного гамильтонiana, либо квантовым методом Монте-Карло (КМК). Изложению таких результатов был посвящен обзор [7], поэтому здесь в основном будут приведены самые последние результаты 1994–1996 гг. Однако начать нам представляется целесообразным с обсуждения решаемой точно одномерной модели Хаббарда.

4.1. Спектральная плотность одномерной модели Хаббарда

Благодаря наличию точного решения в виде анзата Бете [90], низкоэнергетические свойства достаточно изучены. Установлено, что эффекты СЭК приводят к появлению свойств жидкости Латтинжера [91–93]. Для одномерной жидкости Латтинжера характерно отсутствие скачка на уровне Ферми для функции распределения $n_k = \langle a_k^+ a_k \rangle$ электронов, а именно, $n_k - n_{k_F} \sim \text{sign}(k - k_F)|k - k_F|^\alpha$, где α — неуниверсальная, зависящая от взаимодействия, постоянная. В пределе $U = +\infty$ для модели Хаббарда $\alpha = 1/8$ [94]. Спектральная плотность в окрестности энергии Ферми для жидкости Латтинжера имеет вид $A(\omega) \propto |\omega - \varepsilon_F|^\alpha$ вместо дельта-функции для квазичастиц в теории ферми-жидкости. Именно обращение в нуль спектральной плотности на уровне Ферми, полученное в одномерной модели Хаббарда, привело к отказу от описания электрона или дырки в системах с СЭК в виде квазичастиц с зарядом e и спином $1/2$ [95]. В то же время методом КМК получен пик в $A(k, \omega)$, характерный для квазичастиц [96] жидкости Ферми. В недавней работе [97] спектральная плотность вычислена в пределе $U = \infty$ для произвольного заполнения с использованием точной многочастичной волновой функции [98], полученной для $U = \infty$ с помощью анзата Бете. Авторы [97] отмечают усиление роли многочастичных эффектов в $A(k, \omega)$ при сдвиге по волновым векторам от $k = 0$ и $k = \pi$. Это проявляется в уменьшении веса сингулярностей Ван Хова и возникновении степенной особенностей вида $A_-(\omega) \propto |\omega - \varepsilon_F|^{-3/8}$ (для заполнения $n < 1$), а также в неквазичастичных хвостах. На рисунке 8 показана спектральная плотность одночастичных состояний для нижней хаббардовской зоны. На краях зоны видны размытые особенности Ван Хова, а в центре (для заполнения $n = 1/2$) — степенная особенность. Учет трехчастичных электронно-дырочных возбуждений наряду с одночастичными дает более 99,99 % общего спектрального веса. В этой же работе [97] анализируется область применимости представлений о жидкости Латтинжера. Значение $\alpha = 1/8$ имеет место при $|\omega - \varepsilon_F| < t^2/U$, вне этого интервала $\alpha = -3/8$. При $U \rightarrow \infty$ область латтинжеровской жидкости стремится к нулю; при больших, но конечных U должен быть пик в $A(\omega)$ при $\omega \sim t^2/U$ как результат расходимости с $\alpha = -3/8$; именно такой пик и был получен методом КМК [96].

4.2. Двумерная модель Хаббарда и $t-J$ -модель

Для недопированного мотт-хаббардовского диэлектрика метод КМК наиболее удобен, так как благодаря электронно-дырочной симметрии известная проблема отрицательного знака не проявляется [99]. Серия расче-

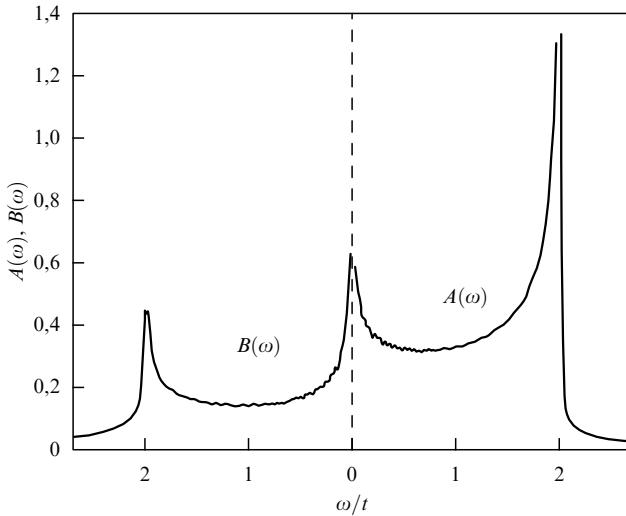


Рис. 8. Плотность состояний для нижней хаббардовской зоны, полученная на основе точного решения одномерной модели Хаббарда с $U = \infty$ [97] для зоны, заполненной на $1/4$.

тов методом КМК для разных кластеров 4×4 , 8×8 , 12×12 [100–102], а также методом точной диагонализации (см. обзор [7]) показали, что основное состояние имеет антиферромагнитный порядок в согласии с теорией возмущений по t/U . Это не такой тривиальный факт, как кажется. Достаточно вспомнить большое количество альтернативных сценариев, например, RVB или флакс-фазы (флакс-фаза — фаза с ненулевыми потоками вектора-потенциала через элементарный контур). Эти фазы не становятся стабильными также ни в $t-J$ -модели [103, 104], ни при включении следующих за ближайшими соседями спин-спиновых взаимодействий [105]. Динамика дырки на фоне антиферромагнитного порядка изучалась методами точной диагонализации модели Хаббарда [106, 107] и $t-J$ -модели [108]. Основной результат заключается в корреляционном сужении зоны: вместо ширины зоны $W = 8t$ появляется узкая зона квазичастиц шириной $W \sim J \sim t^2/U$. Закон дисперсии для одной дырки, движущейся на фоне флукутирующего антиферромагнитного состояния, был получен путем точной диагонализации $t-J$ -модели для кластеров из 16 и 18 атомов [76] (рис. 9). Здесь сплошная линия описывается формулой

$$\omega(\mathbf{k}) = J[0,5(\cos k_x + \cos k_y)^2 - 1], \quad (19)$$

отражающей основной вклад от внутриподрешеточных перескоков. Потолок валентной зоны (дно дырочной зоны) находится в точке $(\pi/2, \pi/2)$; этот результат согласуется с данными ARPES по $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$. Однако другой вывод из кластерных расчетов [7, 76] о близости к вырождению энергий электронов в точках $(\pi/2, \pi/2)$ и $(0, \pi)$, $(\pi, 0)$ не согласуется с данными ARPES. Другой важный результат — это заполнение диэлектрической щели при допировании с одновременным уменьшением спектрального веса на краях щели [108–112]. Изменение электронной структуры при переходе от недопированного диэлектрика к дырочному металлу в рамках модели Хаббарда методом КМК прослежено в работе [113], в которой спектральная плотность $A(k, \omega)$ получена методом "максимальной энтропии" [114]. Спектральная плот-

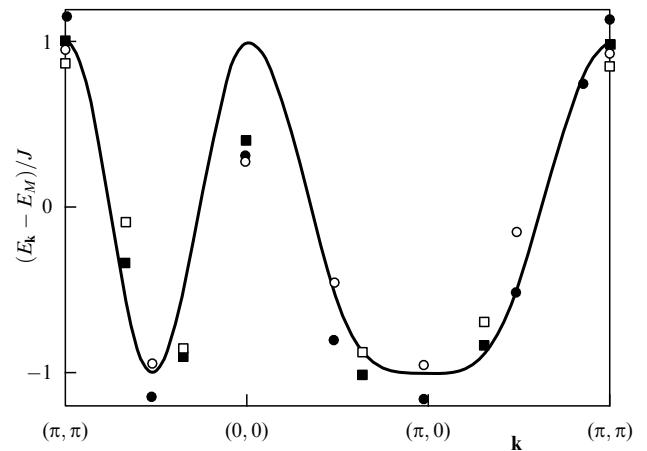


Рис. 9. Закон дисперсии одной дырки на фоне квантового антиферромагнитного состояния, полученный точной диагонализацией гамильтониана $t-J$ -модели для кластера из 16 атомов (светлые и темные кружки) и 18 атомов (светлые и темные квадраты соответственно соответствуют $J/t = 0,2$ и $0,4$). (Данные работы [76].)

ность и зонная структура квазичастиц для двумерной модели Хаббарда в недопированном случае показаны на рис. 10. Расчеты проведены на кластере 8×8 при значениях $U = 8t$ и $U = 12t$ и двух значениях температуры, $\beta t = 3$ ($T = 0,33t$) и $\beta t = 10$ ($T = 0,1t$). При $T = 0,1t$

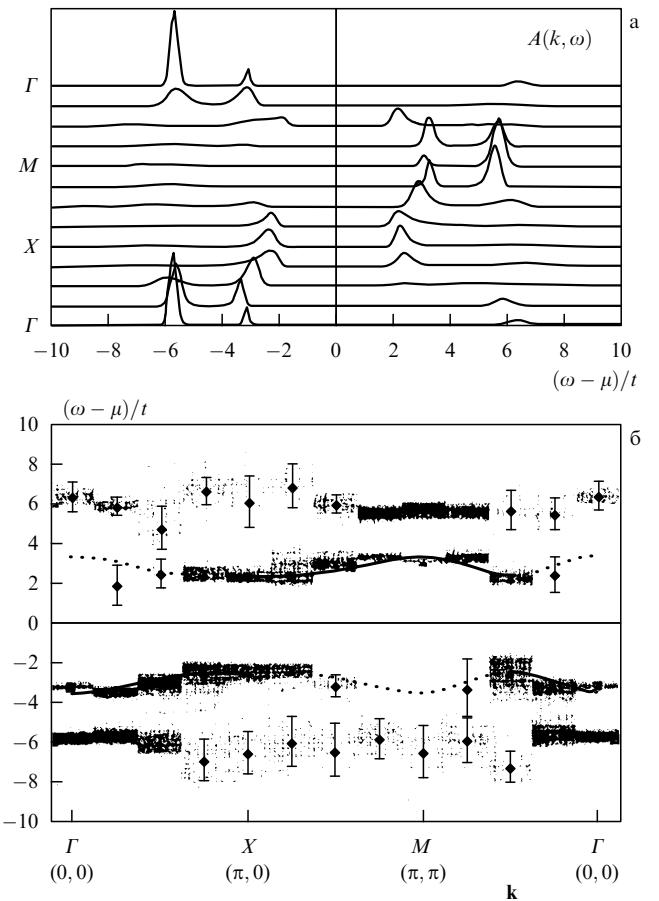


Рис. 10. Спектральная плотность (а) и законы дисперсии (б) квазичастиц в двумерной модели Хаббарда с $U = 8t$, $\beta t = 10$ для недопированного случая $n = 1$. (Данные работы [113].)

магнитная корреляционная длина ζ больше размера кластера, так что эти вычисления можно сопоставить с результатами для $T = 0$. Для $T = 0,33t$ величина ζ меньше размера решетки и проявляются эффекты ближнего порядка.

В антиферромагнитной фазе моттовского диэлектрика, как видно из рис. 10, имеются две узкие зоны ниже ε_F и две — выше. Дисперсия для потолка валентной зоны такая же, как и в предыдущих работах — максимум в точке $(\pi/2, \pi/2)$ и близкое к вырождению состояние с $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ в точке X . Нетривиальным является поведение спектральной плотности, максимумы которой для разных волновых векторов находятся то выше, то ниже ε_F . Не очень ясно разделение авторами [113] зон на когерентные с $|\omega - \mu| \approx 3t$ и некогерентные с $|\omega - \mu| \approx 6t$, поскольку ширины пиков — величины одного порядка для обеих зон. Аналогичный расчет спектральной плотности [115], выполненный для решетки 8×8 при значениях параметров $U/t = 10$, $T = t/4$ для недопированного случая, также показал наличие четырех пиков: двух ниже ε_F и двух выше ε_F . Но в отличие от результатов [113] в [115] получено, что перераспределение интенсивности пиков для разных k сохраняет сами пики за исключением $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ (рис. 11). Возможно, расхождение результатов связано с отличием процедуры аналитического продолжения, используемой для расчета спектральной плотности по полученной методом Монте-Карло функции Грина. Высокоэнергетические сателлиты для PES-спектров, вычисленные в работе [115] для модели Хаббарда методом КМК, согласуются не только качественно, но и количественно с результатами расчетов PES-спектров для двумерной $t-J$ -модели методом точной диагонализации для кластеров с 16 и 18 атомами.

Вычисления для допированного случая показывают неприменимость картины жесткой зоны. Качественно результаты [113] очень похожи на результаты ARPES: уровень Ферми находится вблизи точки $\mathbf{k} = (\pi/2, \pi/2)$ в направлении ΓM и имеется плоская зона в окрестности точки X . Видны также сателлиты, соответствующие теневым зонам, в окрестности точки $\Gamma(\omega - \mu \approx 5t)$ и

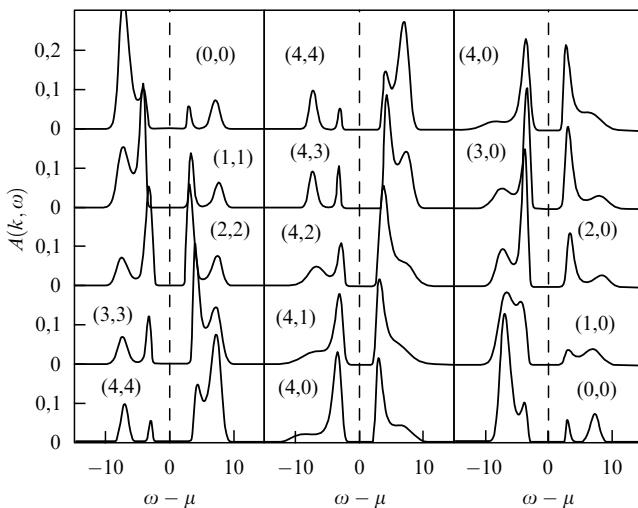


Рис. 11. Спектральный вес $A(k, \omega)$ двумерной модели Хаббарда, полученный методом КМК для решетки 8×8 , $U/t = 10$, $T = t/4$ для недопированного случая. Волновой вектор измеряется в единицах $\pi/4$. (Данные работы [115].)

точки $M(\omega - \mu \approx 7t)$. Сходство законов дисперсии и ширины зоны в металлической и диэлектрической фазах позволяет авторам [115] сделать вывод о том, что низкоэнергетические зоны в металлическом состоянии подвержены тем же корреляционным многочастичным эффектам, что и зоны в диэлектрике, а именно, магнитные корреляции определяют ширину зоны. В диэлектрике эти корреляции обусловлены дальним антиферромагнитным порядком, в металле — ближним.

Изменение закона дисперсии дырок при их немалой (более 10 %) концентрации исследовано методом точной диагонализации $t-J$ -модели для кластера из 18 атомов [108]. Потолок зоны сдвигается в точку (π, π) , импульс Ферми находится в окрестности $(\pi/2, \pi/2)$ в направлении $[1, 1]$ и $(\pi, 0)$ в направлении $[1, 0]$ (рис. 12). Сплошной линией показан закон дисперсии обычного метода сильной связи

$$\omega(k) = -2t_{\text{eff}}(\cos k_x + \cos k_y) \quad (20)$$

с $t_{\text{eff}} = 0,24$ при $J/t = 0,4$ и $t_{\text{eff}} = 0,15$ при $J/t = 0,2$. Отметим изменение характера закона дисперсии: когда дырок много, антиферромагнитные корреляции ослаблены, и система имеет металлические свойства, основным механизмом, формирующим дисперсию (20), является перескок между ближайшими соседями. Анало-

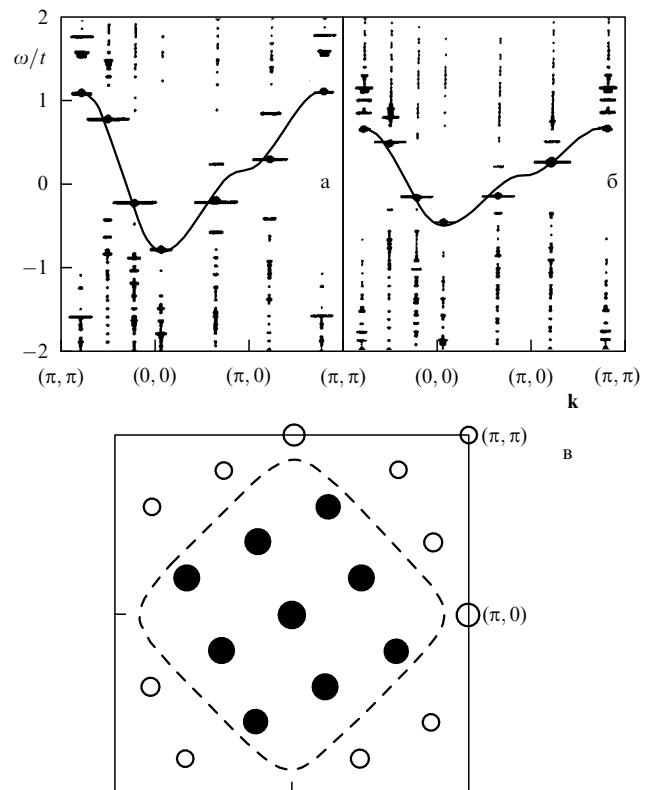


Рис. 12. Законы дисперсии дырки в $t-J$ -модели при концентрации допирования $> 10\%$, полученные точной диагонализацией кластера из 18 атомов для $J/t = 0,4$ (а) и $J/t = 0,2$ (б). Размер штрихов по горизонтали показывает интенсивность спектральной функции при данной энергии. Поверхность Ферми в $t-J$ -модели для $J/t = 0,4$ (в). Темные кружки соответствуют занятым, светлые — пустым состояниям. Штриховая линия показывает поверхность Ферми невзаимодействующих электронов при таком же уровне допирования (из работы [108]).

гичный вывод был получен в работе [116], хотя ширина зоны по-прежнему порядка J , а не $8t$. Поверхность Ферми показана на рис. 12в. К занятым состояниям относились те, для которых $n(k) > 1/2$, к пустым, — для которых $n(k) < 1/2$. Для $J < t$ вид поверхности Ферми оказался не зависящим от J , так же как и для модели Хаббарда с $U \gg t$ [108]. Другой нетривиальный результат, относящийся к поверхности Ферми, — это совпадение поверхностей Ферми для сильно коррелированных дырок и для свободных электронов. Это объясняет факт согласия рассчитанных в зонной теории поверхностей Ферми для допированных металлических оксидов меди с экспериментальными данными [117]. Вопрос, почему поверхности Ферми сильно коррелированных и свободных электронов совпадают, требует отдельного обсуждения, так же как и вопрос, можно ли считать доказанной применимость концепции ферми-жидкости (или маргинальной ферми-жидкости [95, 118]) для систем с СЭК. Как пишут авторы работы [108], ответ на второй вопрос: "по-видимому, да", хотя для полного ответа необходимо показать, что ширина пика в спектральной плотности исчезает как ω^2 при $\omega \rightarrow 0$ (или как $\omega \ln \omega$ для маргинальной ферми-жидкости), что невозможно сделать для конечного кластера. Ответ на первый вопрос отчасти содержится в работе [19], где проводится общий анализ квазичастиц в системах с СЭК. Для вычисления спектральной плотности

$$\rho_k(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G^R(\varepsilon, k) \quad (21)$$

введем массовый оператор $\Sigma(\varepsilon, k)$: $G^{-1}(\varepsilon, k) = \zeta_k - \varepsilon - \Sigma(\varepsilon, k)$. По определению, $\Sigma(0, k) = 0$. Предполагая, что $\Sigma(\varepsilon, k)$ не является "слишком сингулярной функцией" [19], сделаем разложение вблизи малых ε :

$$\Sigma(\varepsilon, k) = \lambda_k \varepsilon + i\gamma_k(\varepsilon). \quad (22)$$

В области применимости этого разложения $\gamma_k(\varepsilon) \ll \varepsilon$ получаем

$$\rho_k(\varepsilon) = \frac{\gamma_k(\varepsilon)/\pi}{[\zeta_k - (1 + \lambda_k)\varepsilon]^2 + \gamma_k^2(\varepsilon)} = Z_k \delta(\varepsilon - \tilde{\zeta}_k), \quad (23)$$

где $Z_k = (1 + \lambda_k)^{-1}$, $\tilde{\zeta}_k = \tilde{v}_k(k - k_F)$, $\tilde{v}_k = Z_k v$. Если интересоваться только областью малых энергий, что является предметом теории Ландау [119], то можно полностью исключить Z -фактор соответствующей перенормировкой. Интегрируя уравнение (23), находим

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_k(\varepsilon) d\varepsilon = Z_k < 1, \quad (24)$$

что противоречит условию сохранения полного числа состояний

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_k(\varepsilon) d\varepsilon = 1. \quad (25)$$

Противоречие показывает, что часть состояний не описывается формулой (23), а именно, те состояния, которые лежат далеко от поверхности Ферми и относятся к некогерентным состояниям. Существование неквазичастиц некогерентных состояний хорошо видно из результатов точной диагонализации для всех моделей,

рассмотренных выше. Можно утверждать, что СЭК удаляют часть состояний (разницу между (24) и (25), т.е. $1 - Z_k$) от уровня Ферми в глубь зоны. Поверхность Ферми, как видно из (23), определяется тем же вектором k_F , что и для свободных электронов, но с уменьшенной скоростью \tilde{v}_F , а значит, и шириной зон. Именно это и отмечается при сравнении данных ARPES с результатами зонных расчетов [10].

4.3. Точные результаты для p-d-модели

Переход от однозонной модели Хаббарда к более реалистичной трехзонной p-d-модели позволяет получить следующие эффекты [120]: 1) появляется косвенное обменное взаимодействие (суперобмен) J ; 2) рождаются новые квазичастицы; 3) возникает внутриподрешеточный интеграл пересека между вторыми соседями t' , важный для определения деталей закона дисперсии; 4) наблюдается асимметрия между электронным и дырочным допированием. Возможные варианты диэлектрического состояния системы с СЭК приведены на рис. 13. Поскольку для оксидов меди типичные значения $U_d \sim 10$ эВ, $\Delta \sim 2-3$ эВ, то по классификации [121] они относятся к диэлектрикам с переносом заряда. В недопированном состоянии на одну CuO_2 -ячейку приходится одна дырка, $n_h = 1$. Если пренебречь p-d-гибридизацией, то эта дырка находится на меди, т.е. конфигурация ячейки $\text{Cu}(\text{d}^9)\text{O}(\text{p}^6)$. Ионы Cu^{2+} со спином $S = 1/2$ образуют антиферромагнитную решетку. За счет гибридизации смешиваются состояния d^9p^6 и d^{10}p^5 , в результате чего уменьшается эффективный магнитный момент на меди. Наряду с нулевыми квантовыми флуктуациями спина ковалентный вклад вполне заметен [123], вместе они обеспечивают наблюдаемое значение $\mu_{\text{eff}} = 0,6\mu_B$. В рамках p-d-модели удалось описать величины диэлектрической щели E_g и интеграла косвенного обменного взаимодействия J для большого ряда диэлектрических оксидов меди, таких как T'-фаза R_2CuO_4 ($\text{R} = \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Eu}$ и Cd), T-фаза La_2CuO_4 , T*-фазы $(\text{La}-\text{Ca}-\text{Sr})_2\text{CuO}_4$ и $(\text{La}-\text{Tb}-\text{Sr})_2\text{CuO}_4$, $(\text{Ca}-\text{Sr})\text{CuO}_2$, $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{YCu}_2\text{O}_8$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ [124]. Можно получить хорошее согласие с

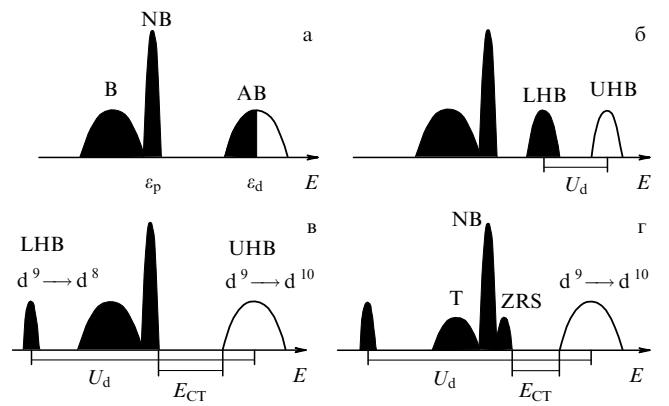


Рис. 13. Возможные варианты зонной структуры в трехзонной p-d-модели: (а) металл, (б) диэлектрик Мотта–Хаббарда, $U_d < \Delta$, (в) диэлектрик с переносом заряда, $U_d > \Delta$, (г) диэлектрик с переносом заряда с расщеплением состояний синглета Жанга–Райса и триплета. Обозначения: В — связующая, AB — антисвязующая, NB — несвязующая зоны, UHB и LHB — верхняя и нижняя хаббардовские зоны, ZRS — синглет Жанга–Райса, T — триплет, E_{CT} — щель с переносом заряда. (Из работы [122].)

экспериментальными значениями E_g и J , если зафиксировать все параметры модели, кроме энергии переноса заряда. Были выбраны $U_d = 8,5$ эВ, $U_p = 4,1$ эВ. Для Sm_2CuO_4 авторы работы [124] взяли $t_{pd} = 0,873$ эВ и $t_{pp} = 0,366$ эВ, при переходе к другим веществам t_{pd} и t_{pp} менялись по закону $1/r^4$ и $1/r^3$ соответственно. Основной вклад в изменение энергии переноса заряда вносит изменение потенциала Маделунга, что отражает различие трехмерных пространственных решеток указанных выше оксидов.

Точная диагонализация гамильтониана трехзонной $p-d$ -модели выполнялась для кластеров с максимальным размером — Cu_4O_{13} [107, 109, 110, 112, 125–130]. Многозонная $p-d$ -модель была рассмотрена методом точной диагонализации для кластеров Cu_2O_7 и Cu_2O_8 [120, 131]. Спектральная плотность при конечных температурах для трехзонной $p-d$ -модели получалась КМК-методом из вычислений одночастичной функции Грина для мнимого времени [132–134]. Общий вывод из этих работ следующий: электронные структуры в рамках $p-d$ -модели и модели Хаббарда похожи, если отождествлять зону Жанга–Райса с нижней хаббардовской зоной. При допировании происходит перераспределение спектрального веса: на краях щели он уменьшается, а внутри щели с переносом заряда появляются новые состояния, заполняющие щель по мере роста концентрации носителей. В отличие от модели Хаббарда, имеется асимметрия этого эффекта при электронном и дырочном допировании, которая зависит от параметров модели [135]. Аналогичные результаты были получены и в многозонной $p-d$ -модели (10) при точной диагонализации CuO_4 -кластера [136]. На рисунке 14 показаны плотности заполненных (PES) и незаполненных (BIS) состояний CuO_2 -плоскости при двух кон-

центрациях дырок [112]. Видно заполнение щели при допировании, причем внутрищелевые состояния связаны с появлением дырки на лиганде. Закон дисперсии для зоны Жанга–Райса [133] находится в качественном согласии с экспериментом (рис. 15).

Недавно появился новый траекторный алгоритм

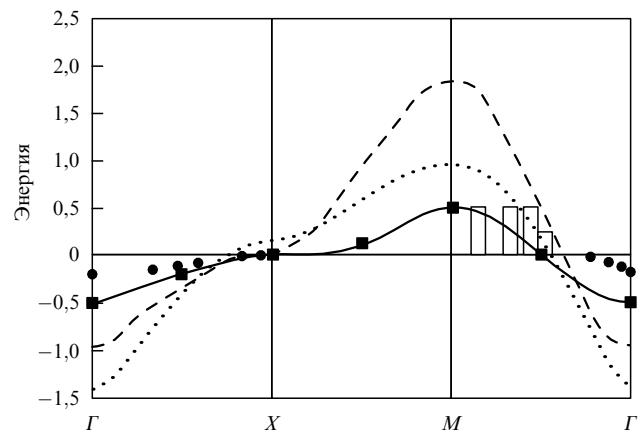


Рис. 15. Закон дисперсии зоны Жанга–Райса, полученный методом КМК для CuO_2 -решетки 4×4 (темные квадраты), методом локального функционала плотности (штриховая линия), в приближении Хартри–Фока (пунктир) для параметров $U_d = 6$, $U_p = 0$, $t_{pp} = 0$, $\Delta = 4$, $t_{pd} = 1$, $\beta = 1/T = 10$, концентрация дырок $\delta = 0,25$. Экспериментальные точки для $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ показаны темными точками (ARPES) и светлыми прямоугольниками (ARIPES). (Из работы [134].)

метода КМК, позволяющий рассчитать кластер с числом атомов до $N_a = 108$ [137]. Энергия и число заполнения перестают зависеть от размера кластера начиная с $N_a = 24$, амплитуда антиферромагнитных корреляций — начиная с $N_a = 54$ (для температуры $T = 0,25t$). При допировании резко уменьшается спиновая корреляционная функция $S(\pi, \pi)$ (рис. 16), при больших размерах кластера появляется асимметрия между дырочным и электронным допированием: дырки подавляют антиферромагнетизм сильнее, чем электроны. Этот факт известен экспериментально и проявляется в большем угле наклона dT_N/dx для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ по сравнению с $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ [138]. Плотность одночастичных состояний для недопированного случая была рассчитана с помощью того же траекторного алгоритма метода КМК для кластера $\text{Cu}_{36}\text{O}_{72}$ с $N_a = 108$ [139]. Результаты расчета подтверждают качественную картину, изображенную на рис. 13 для диэлектрика с переносом заряда. Главное отличие от рис. 13г состоит в том, что связывающая (В) зона слилась с нижней хаббардовской зоной (LHB) и резко увеличился вес коррелированных состояний за счет несвязывающей зоны (NB).

Физический механизм появления внутрищелевых (in-gap) состояний в многозонных моделях с СЭК легко понять, рассматривая точные многоэлектронные базисы типа изображенного на рис. 7б [87]. Без допирования заполнен только нижний терм с $n = 1$, соответствующий связывающей $d_{x^2-y^2}$ — p_σ молекулярной орбитали дырок b_{1g} . Возможные квазичастицы фермиевского типа показаны на рис. 7б, где квазичастица с номером I формирует пустую зону проводимости (на электронном языке), номер 2 и 4, а также не показанные для простоты

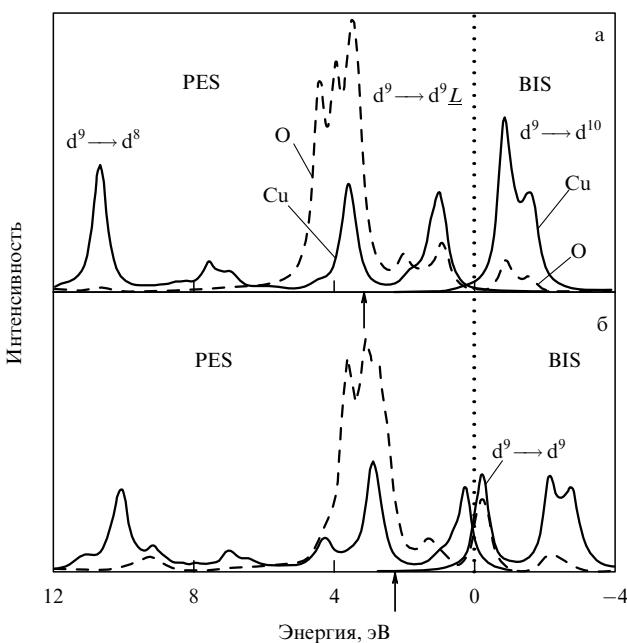


Рис. 14. Плотность заполненных (PES) и незаполненных (BIS) состояний $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, полученная точной диагонализацией трехзонной $p-d$ -модели для Cu_4O_{13} -кластера при $x = 0$ (а) и $x = 0,25$ (б). Параметры модели следующие: $U_d = 8,79 t_{pd}$, $U_p = 4,24 t_{pd}$, $t_{pp} = 0,41 t_{pd}$, $\Delta = 3,37 t_{pd}$ и $t_{pd} = 0,966$ эВ. Энергия Ферми показана пунктирной линией. (Данные работы [112].)

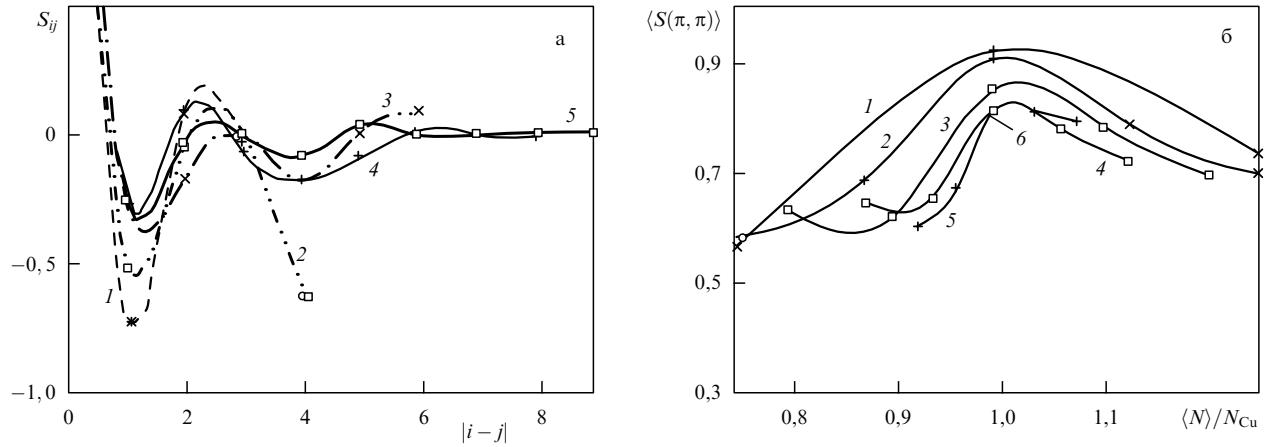


Рис. 16. Спиновая корреляционная функция на медной подрешетке, полученная в трехзонной $p-d$ -модели квантовым методом Монте-Карло с параметрами $A = \varepsilon_p - \varepsilon_d = 1$, $U_d = 6$, $\beta = 1/T = 4$, $t = 1$. Зависимость от номера координационной сферы по меди при половинном заполнении (а): 1 — $N_a = 24$; 2 — $N_a = 30$; 3 — $N_a = 54$; 4 — $N_a = 78$; 5 — $N_a = 108$. Влияние допиривания на фурье-компоненту при $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ (б): 1 — $N_a = 12$; 2 — $N_a = 24$; 3 — $N_a = 30$; 4 — $N_a = 48$; 5 — $N_a = 78$; 6 — $N_a = 108$. (Из работы [137].)

вышележащие двухдырочные термы формируют сложную валентную зону. При дырочном допировании с вероятностью x заполнен основной терм $n = 2$ и с вероятностью $1 - x$ — одночастичный терм. В результате квазичастица, изображенная на рис. 7б стрелкой с номером 3, приобретает спектральный вес, пропорциональный x , а ее энергия попадает внутрь диэлектрической щели. Аналогично при электронном допировании с вероятностью x заполняется терм $n = 0$ и квазичастица, показанная стрелкой с номером 6 на рис. 7б, формирует внутрищелевое состояние.

К точным результатам следует также отнести симметрийный анализ электронных волновых функций в антиферромагнитной фазе оксидов меди [140, 141]. В частности, важным результатом этого анализа является то, что орбитали d_{z^2} и $d_{x^2-y^2}$ не смешиваются в точке $(\pi/2, \pi/2)$.

5. Фермиевские квазичастицы в бесконечной решетке

Основные проблемы, которые мы рассмотрим в этом разделе, следующие: свойства квазичастиц в недопированных CuO_2 -слоях, роль многозонных эффектов, сравнение с данными ARPES для различных диэлектрических и сверхпроводящих оксидов меди, изменение поверхности Ферми с допированием.

5.1. Магнитный полярон в квантовом антиферромагнетике

Для случая отсутствия допирования все модели сводятся к двумерной модели Гейзенберга с $S = 1/2$ [7–9], причем это относится как к моделям с СЭК типа $p-d$, Хаббарда или $t-J$, так и к моделям, основанным на металлическом состоянии, неустойчивом к образованию волн спиновой плотности (ВСП) [142]. Решение уравнений теории ВСП в режиме сильной связи $U \gg t$ дает скорость спиновых волн, совпадающую со скоростью в модели Гейзенберга [143]. Описание движения дырки формально отличается в этих двух подходах тем, что в первом из них исходным приближением является локализованная квазичастица, которая приобретает дисперсию за счет перескоков

между соседями, а во втором исходным приближением является хартри-фоковская зона с поверхностью Ферми, обладающей свойством "нестинга":

$$\varepsilon(k + Q) = -\varepsilon(k). \quad (26)$$

Кулоновское взаимодействие учитывается в приближении хаотических фаз (RPA) и приводит к переходу в состояние ВСП (антиферромагнитное, если $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$). Спин-поляризационные хартри-фоковские расчеты *ab initio* [144] для антиферромагнетиков La_2CuO_4 , La_2NiO_4 , K_2NiF_4 и K_2CuF_4 описывают диэлектрик с величинами щели E_g и суперобменного интеграла J , неплохо соглашающимися с экспериментом. В то же время закон дисперсии на потолке валентной зоны не согласуется с данными ARPES и точных численных расчетов; потолок валентной зоны оказался в точке $(\pi, 0)$, а не в $(\pi/2, \pi/2)$. Учет конфигурационного взаимодействия в девятизонной модели привел к сдвигу зонных энергий и к потолку в точке $(\pi/2, \pi/2)$ [144]. Тем не менее во всех подходах дырки имеют похожий физический смысл: это квазичастицы, одетые локальными спиновыми флуктуациями. Мы остановимся на основных представлениях и рассмотрим новые работы, не вошедшие в предыдущие обзоры.

Струнная картина восходит к работе [74], где соответствующая квазичастица была названа квазиосциллятором. Она "характеризуется тем, что носитель заряда осциллирует около положения равновесия, которое медленно движется по кристаллу. Когда электрон отходит от положения равновесия, вдоль его траектории возникает цепочка перевернутых спинов, что соответствует антифазному антиферромагнитному упорядочению вдоль этой траектории. Когда электрон возвращается к положению равновесия вдоль той же траектории, он стирает антифазное упорядочение и восстанавливается нормальное антиферромагнитное упорядочение" (цитата из работы [145]). В отличие от свободных электронов, квазичастица описывается суперпозицией различных многочастичных состояний. Вариационные расчеты [146–148] и близкие к ним расчеты методом проекционных операторов [149–151] используют конечный набор базисных операторов, включающий кроме исходных одноэлектронных операторов,

различные варианты перескока между соседями с переворотом спина вдоль струны. Очень наглядно различие между свободной частицей и квазичастицей продемонстрировано в работе [152], где в рамках $t-J$ -модели методом точной диагонализации вычислена спектральная плотность $A(k, \omega)$. Оператор уничтожения полярона задан в следующем виде:

$$c_{k,\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \sum_{\lambda=0}^3 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) \alpha_\lambda(k) A_{j,\lambda}, \quad (27)$$

$$A_{j,0} = c_{j,\uparrow}, \quad A_{j,l} = \sum_{h \in N(j)} S_j^- c_{h,\downarrow}, \quad (28)$$

$$A_{j,2} = \sum_{h \in N(j)} \sum_{l \in N(h)} S_j^- S_h^+ c_{l,\uparrow}, \quad (29)$$

$$A_{j,3} = \sum_{h \in N(j)} \sum_{l \in N(h)} \sum_{m \in N(l)} S_j^- S_h^+ S_l^- c_{m,\downarrow}. \quad (30)$$

Здесь $N(j)$ означает совокупность ближайших соседей к узлу R_j , $\alpha_\lambda(k)$ — вариационные параметры. Для свободного электрона спектральная плотность (рис. 17) характеризуется широким спектром практически для всех \mathbf{k} . Большой некогерентный вклад в $A(k, \omega)$ говорит о том, что описание на языке свободных электронов неудачно. Напротив, для квазичастицы характерны узкие пики в спектральной плотности с гораздо меньшей дисперсией. Малый вклад некогерентных неквазичастических состояний в этом случае говорит об удачном выборе языка описания магнитного полярона в виде (27).

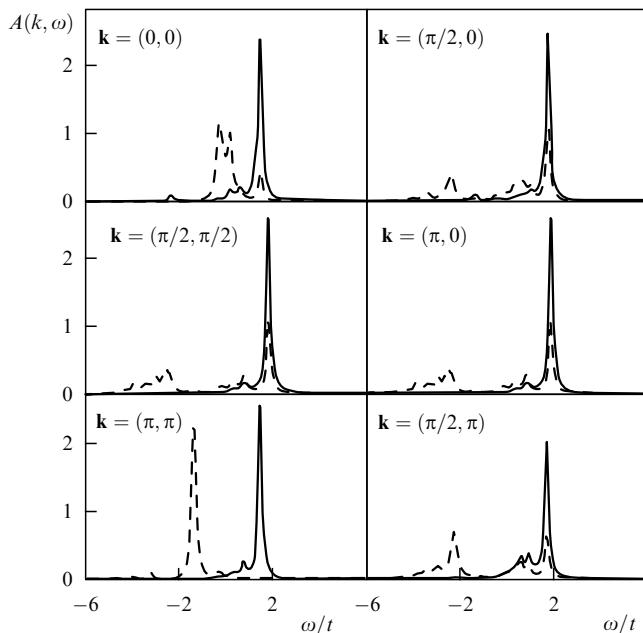


Рис. 17. Спектральные функции для магнитного полярона (сплошные линии) и свободного электрона (штриховые) без допиривания в рамках $t-J$ -модели, полученные методом точной диагонализации 4×4 -кластера. (Из работы [152].)

5.2. Многозонные модели

Многозонные модели используются как для вывода эффективных однозонных моделей [73, 84, 153], так и для прямого расчета зонной структуры квазичастиц

[154–157]. Нужно иметь в виду следующее: кроме сильных внутриатомных кулоновских корреляций в оксидах меди большую роль играют ковалентные эффекты, т.е. межатомная $p-d$ -гибридизация. Если первые проще учитывать в рамках локальных подходов, то вторые, наоборот, легко учитываются при переходе в k -пространство. В поисках подхода, сочетающего учет эффектов ковалентности и эффектов СЭК, был предложен метод локальных унитарных преобразований, редуцирующий гамильтониан модели в пространство слабо коррелированных p -орбиталей [158].

Другой подход, обобщающий известный в зонной теории метод сильной связи, был предложен в работе [159]. Разобъем решетку на непересекающиеся кластеры (элементарные ячейки) и перепишем исходный гамильтониан в виде суммы по ячейкам и межъячеенным перескокам и взаимодействиям:

$$H = H_0 + H_1, \quad H_0 = \sum_i H_i, \quad H_1 = \sum_{i,j} H_{i,j}, \quad (31)$$

где индекс i нумерует не узел, а ячейку. Решив задачу о точной диагонализации H_i , можно построить операторы Хаббарда на базисе многоэлектронных молекулярных орбиталей. С помощью соотношений (14) и аналогичных формул для спиновых операторов межъячеенный гамильтониан также может быть записан в X -представлении. В результате исходный гамильтониан точно записывается в виде

$$H_0 = \sum_{i\gamma} (E_{i\gamma} - n\mu) X_i^{\gamma\gamma}, \quad H_1 = \sum_{ij} \sum_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4} A_{\gamma_1\gamma_2}^{\gamma_3\gamma_4} X_i^{\gamma_1\gamma_2} X_j^{\gamma_3\gamma_4}. \quad (32)$$

Формально такой же вид имеет и гамильтониан однозонной модели Хаббарда в X -представлении, все отличие заключается в структуре локального базиса $E_{i\gamma}$. Для модели Хаббарда — это четыре состояния (5). В модели (10) для ячейки в виде CuO_2 -кластера число состояний в локальном базисе ~ 100 . Таким образом, отличие гамильтониана (32) от такового в однозонной модели Хаббарда в X -представлении не качественное, а количественное. Поэтому методы, развитые для описания модели Хаббарда, могут применяться и здесь. При этом теория возмущений по межъячеенным перескокам и взаимодействиям строится на фоне нулевого приближения, в котором точно учтены и СЭК, и эффекты ковалентности внутри ячейки. Отметим зависимость матричных элементов от размера кластера. Если N — число атомов в ячейке, то каждое собственное состояние содержит множитель $1/\sqrt{N}$. Матричный элемент $\langle \gamma_1 | a_{i\lambda\sigma} | \gamma_2 \rangle$ содержит множитель $1/N$. Оператор перескока $c_i^+ c_j$ приобретает множитель $1/N^2$, а четырехфермионный оператор кулоновского взаимодействия — $1/N^4$. Перенормировка эффективного перескока между ячейками $\tilde{T} = T_{pd}/N^2$ может, вообще говоря, скомпенсироваться увеличением числа каналов рассеяния, поэтому с точки зрения точного решения, а также в окрестности перехода Мотта–Хаббарда, когда ширина зоны W порядка диэлектрической щели E_g , выигрыша от представления (32) нет. Однако оксиды меди далеки от перехода Мотта–Хаббарда [160], для них характерна ситуация $W \ll E_g$, и для каждой отдельной квазичастицы получается эффект сужения зоны.

Различные варианты теории возмущений по межъячеичным перескокам возможны для расчета зонной структуры квазичастиц. В простейшем из них — приближении типа Хаббард 1 — дисперсионное уравнение для спектра имеет вид [156]

$$\det\{\delta_{mn}\delta_{fg}(\omega - \Omega(\mathbf{a}_m)) - F(\mathbf{a}_m)[A_{fg}^{mn}(k) + B_{fg}^{mn}(k)]\} = 0, \quad (33)$$

где f, g соответствует двум антиферромагнитным подрешеткам, m, n — номера квазичастиц, A и B — матрицы перескоков р—d и р—р между ячейками. Кластерный метод применялся разными авторами для трехзонной р—d-модели [161–163] и пятизонной р—d-модели [73, 84]. В качестве ячейки выбирался CuO₄-кластер. Проблема неортогональности молекулярных орбиталей, связанная с наличием общего иона кислорода у двух соседних CuO₄-кластеров, решалась построением функций Ванье, центрированных на узлах меди, и определением операторов Хаббарда в базисе функций Ванье. Несмотря на различие в выборе элементарной ячейки, в работах [81, 84] получен один вывод о влиянии d_{z²}-орбиталей: стабилизация триплета B₁ за счет хундовской конфигурации |d_{x²-y²} d_{z²}⟩ приводит к ограничениям применимости однозонного описания CuO₂-слоя. Эффекты, возникающие из-за близости двухдырочных синглета и триплета, рассмотрены в работе [81], где рассчитан закон дисперсии дырки в антиферромагнитной фазе без допирования (рис. 18). На рисунке 18 показаны также данные ARPES для Sr₂CuO₂Cl₂ [14] и результаты расчета закона дисперсии в самосогласованном борновском приближении (30) для t—J-модели. Расчет [27] дает количественное согласие только в направлении ГM, нет согласия в направлениях ГX и ГY. Попытка улучшить согласие за счет введения второго перескока t' [164] улучшила ситуацию для линии XY, несколько ухудшила согласие на линии ГM и не улучшила его для линии ГX. Не подтверждается экспериментом вывод t—J-модели о близости к вырождению энергий в точках ($\pi/2, \pi/2$) и ($\pi, 0$). Все эти расхождения связаны, по нашему мнению, с ограниченностью применимости самой t—J-модели, обсуждавшейся выше. Действительно, для всех точек зоны Бриллюэна имеется согласие в узкой области

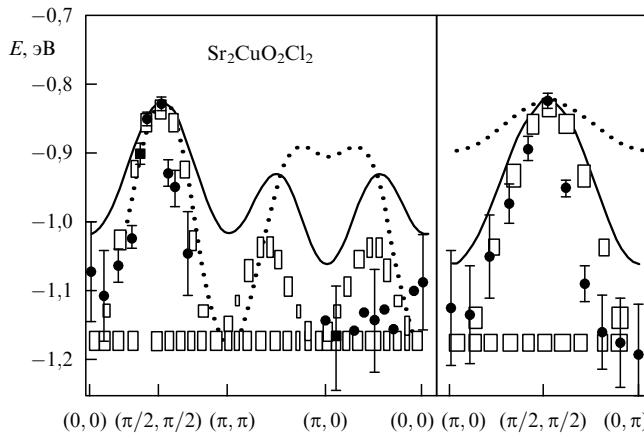


Рис. 18. Закон дисперсии электронов вблизи потолка валентной зоны недопированного антиферромагнитного CuO₂-слоя и его сравнение с данными ARPES [14]. Светлые прямоугольники — теория, кружки с вертикальными линиями — данные [14]. Сплошная и пунктирная линии показывают результаты расчета в рамках t—t'—J-модели [164] и t—J-модели [27]. (Из работы [81].)

$\Delta E \sim 0,1$ эВ около потолка валентной зоны, а чем дальше в глубь валентной зоны, тем больше расхождения. В то же время расчет [81] с учетом d_{z²}-орбиталей показывает явно лучшее согласие для всей зоны Бриллюэна. По-видимому, хорошее согласие t—J-модели именно в точке ($\pi/2, \pi/2$) с экспериментом связано с симметрийным запретом на смешивание d_{x²-y²} и d_{z²}. В нижней части рисунка 18 виден также бездисперсионный уровень, соответствующий возбуждению дырки в двухчастичное триплетное состояние. Отсутствие дисперсии и некогерентный характер возбуждений были получены также и для обобщенной t—J-модели с триплетными дырками [165].

За счет введения дополнительных матричных элементов перескока на вторую (t') и третью (t'') координационные сферы в рамках t—t'—t''—J-модели авторам работы [166] удалось ликвидировать главное противоречие экспериментального спектра и расчета в t—J-модели, связанное с близостью к вырождению энергий квазичастиц $E(\pi/2, \pi/2)$ и $E(\pi, 0)$. Учет перескоков внутри подрешетки (t' и t'') сдвигает уровень $E(\pi, 0)$ в глубь валентной зоны в соответствии с данными ARPES. Сравнение спектральной плотности $A(k, \omega)$, полученной в [166] для недопированного и дopedированных с $x \approx 10\%$ кластеров из 16, 18 и 20 атомов методом точной диагонализации, показывает, что главное изменение с допированием связано со сдвигом $A(k, \omega)$ на величину $\approx 0,5t$ для волновых векторов $(k, 0)$, $\pi/2 \leq k \leq \pi$, что и приводит к образованию плоской зоны в окрестности $(\pi, 0)$. Напомним, что величины интегралов перескока t' и t'' определяются деталями многозонных моделей при их низкоэнергетической редукции к t—J-модели [72, 73].

Другой вариант теории возмущений для кластеров использует диаграммную технику для X-операторов [86]. Этим методом была рассмотрена сверхпроводимость в р—d-модели [167, 168] и объяснена электронно-дырочная асимметрия фазовой диаграммы оксидов меди n- и p-типов [169].

5.3. Электронная структура допированных систем

При конечной концентрации дырок возникает проблема искажения антиферромагнитного порядка другими дырками, которая рассматривалась и в приближении сильной связи [170], и в пределе слабой связи (модель "спинового мешка" [143]). Допированная дырка в ВСП-состоянии приводит к локальному понижению подрешеточной намагниченности на расстояниях порядка длины когерентности

$$\zeta_{SDW} = \frac{v_F}{\pi \Delta_{SDW}}, \quad (34)$$

где v_F — скорость на поверхности Ферми, а Δ_{SDW} — параметр порядка состояния ВСП.

Добавка всего лишь 2 % дырок за счет Sr в La_{1,98}Sr_{0,02}CuO₄ или 14 % электронов за счет Ce в Nd_{1,86}Ce_{0,14}CuO₄ подавляет трехмерный антиферромагнитный порядок. Ближний порядок сохраняется с корреляционной длиной [171] $\zeta \sim d_{Cu-Cu}/\sqrt{x}$, где $d_{Cu-Cu} = 3,8 \text{ \AA}$ — расстояние между ионами меди в CuO₂-плоскости. Этот результат показывает, что именно дырки ограничивают размер ближнего порядка в CuO₂-плоскости. Несоизмеримые спиновые флуктуации в La_{2-x}Sr_xCuO₄ с расщеплением пика в $\chi''(q, \omega)$ около $\mathbf{q} = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ на четыре со сдвигом $\pm \delta$ по осям x и y были обнаружены для $x = 0,075$ и $x = 0,14$ [172]. Самые последние результаты по нейтронному рассеянию для семейства монокри-

сталлов $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ с $x = 0,04 - 0,18$ показали, что расщепление пика в $\chi''(q, \omega)$ меняется с концентрацией дырок (рис. 19), причем мера несоизмеримости δ зависит от концентрации так же, как и T_c . Порог x_c , выше которого значение δ отлично от нуля, совпадает с порогом возникновения сверхпроводимости. Вопрос о существовании несоизмеримых спиновых флуктуаций в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ в настоящее время неясен [30]. Возможно, что это связано со спецификой распределения дырок между CuO_2 -слоями и CuO -цепочками [174, 175]. Как показано в [176], дырки при допировании заполняют состояния цепочек вплоть до $x = x_c$ и при $x > x_c$ очень быстро происходит их перетекание в плоскость с подавлением антиферромагнетизма при $x > x_0$, причем $x_c \approx x_0 \approx 0,4$.

Движение электрона даже в области оптимально допированных составов происходит на фоне сильных спиновых флуктуаций антиферромагнитного типа. Для

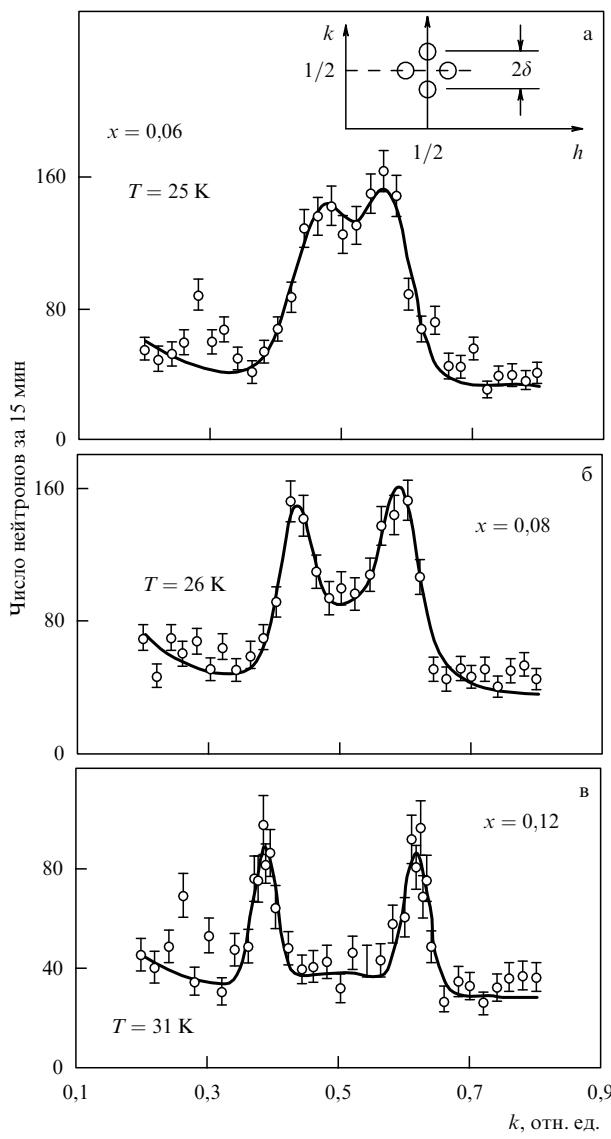


Рис. 19. Данные неупругого рассеяния нейтронов ($E = 14,7$ мэВ) в монокристаллах $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, показывающие несоизмеримые спиновые флуктуации с волновыми векторами $\pi/2(1 \pm \delta, 1)$ для разных концентраций дырок. Энергетическое разрешение $\delta E = 2$ мэВ. (Из работы [173].)

описания квазичастиц в рамках $t-J$ -модели, модели Хаббарда и р-d-модели в области конечной концентрации дырок широко используются методы слэйв-бозонов и слэйв-фермионов (см. [7–9]). Подобный подход позволяет получить эффективную зонную модель, удовлетворительно описывающую как спектроскопические, так и кинетические свойства нормальной фазы [177]. На рисунке 20 показана дисперсия зоны Жанга–Райса для двух направлений зоны Брилюэна в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$ [179], полученная в рамках трехзонной р-d-модели. Видно хорошее количественное согласие с данными ARPES [178]. Расщепление двух зон на рис. 20 связано с туннелированием дырок между соседними плоскостями CuO_2 .

Если бы флуктуаций не было и был бы дальний магнитный порядок, то в спектре носителей появилась бы щель состояния ВСП. Поскольку реально порядок не дальний, а ближний, ВСП-щель замывается. Так появляется понятие спиновой псевдощели. Для его описания в работе [33] было предложено в стандартном выражении для массового оператора

$$\Sigma(k, i\omega_n) = U^2 T \sum_{q, \omega_n} \chi(q, i\omega_n) G_0(k - q, i\omega_n - i\omega_n), \quad (35)$$

где $\chi(q, i\omega_n)$ — спиновая восприимчивость, использовать феноменологическое выражение для χ с размытым максимумом в окрестности антиферромагнитного волнового вектора $\mathbf{Q} = (\pm\pi, \pm\pi)$. Вычисленная таким образом плотность состояний квазичастиц показывает пони-

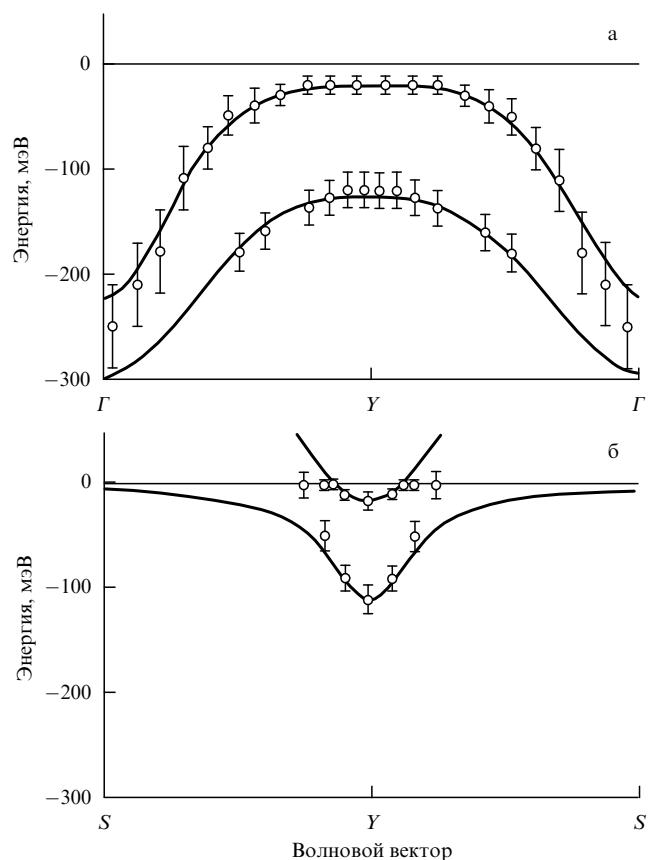


Рис. 20. Законы дисперсии электронов ниже уровня Ферми и их сравнение с данными ARPES для $\text{Y}-\text{Ba}-\text{Cu}-\text{O}$ [178]. (Из работы [179].)

жение плотности состояний в окрестности уровня Ферми, что свидетельствует о частичной перестройке зонной структуры или возникновении псевдощели. С другой стороны, состояния, вытолкнутые из окрестности уровня Ферми, приводят к пикам плотности состояний на краях псевдощели, что проявляется в фотоэлектронных спектрах в виде сателлитов или теневых зон.

Фактически из-за движения электрона во флуктуирующих антиферромагнитных областях причина появления теневых зон связана с локальными процессами переброса, так как в уменьшенной антиферромагнитной зоне Бриллюэна состояния \mathbf{k} и $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$ эквивалентны. Подтверждение правильности такой интерпретации пришло из микроскопических расчетов, т.е. не использующих феноменологических выражений для восприимчивости, в рамках модели Хаббарда в результате вычислений спектральной плотности $A(k, \omega)$ методом КМК [35] и по теории возмущений [36]. Для диагонали $k_x = k_y = k$ процесс переброса в антиферромагнитной фазе приводит к одинаковой энергии квазичастиц с вектором $\mathbf{k}_1 = (k, k)$ и $\mathbf{k}_2 = (\pi - k, \pi - k)$. На рисунке 11 для зависимости $A(k, \omega)$, рассчитанной в модели Хаббарда с половинным заполнением, это видно для $\mathbf{k}_1 = 0,25\pi(1, 1)$ и $\mathbf{k}_2 = 0,25\pi(3, 3)$. В то же время интенсивности, которые для $S = 1/2$ гейзенберговского антиферромагнетика должны быть одинаковы, в модели Хаббарда при конечном U/t перераспределяются. Интеграл по заполненной части спектра от $A(k, \omega)$, который определяет интенсивность фотоэлектронного спектра, для $\mathbf{k}_2 = 0,25\pi(3, 3)$ составляет 23 % от общего спектрального веса (при $U/t = 8$). При допировании вес заполненных состояний для $\mathbf{k} = \mathbf{k}_2$ уменьшается, составляя $\sim 10\%$ для $\langle n \rangle = 0,87$ и 4 % для $\langle n \rangle = 0,70$ [35]. Спиновая корреляционная длина, полученная в этих же расчетах, равна $\zeta \approx 1,5a$ для $\langle n \rangle = 0,88$ и $\zeta < a$ для $\langle n \rangle = 0,77$. Авторы работы [35] приходят к выводу, что в оптимально допированных образцах интенсивность сателлитов, соответствующих теневым зонам, слегка превышает уровень шума и возможна для наблюдения, в то время как для сильнодопированных образцов этот сателлит слишком слабый.

Очень интересные результаты по спектрам квазичастиц в двумерной модели Хаббарда получены с помощью самосогласованных расчетов массового оператора [36] в рамках приближения FLEX (fluctuation exchange). Это приближение [180, 181] восходит к давним идеям [182] о самосогласованной теории возмущений, удовлетворяющей тождеству Уорда и тем самым законам сохранения числа частиц, импульса и энергии. Обычно результирующие уравнения для Σ и G решают численно на мнимой оси, что потом приводит к сложной проблеме аналитического продолжения на ось действительных значений частот. Авторы работы [36] разработали новый численный метод расчета $\Sigma(k, \omega + i\gamma)$ для действующих значений ω с малой комплексной добавкой $\gamma < \pi T$, что позволяет легко делать аналитическое продолжение при $\gamma \rightarrow 0$. Полученные результаты для разных концентраций $x = 1 - \langle n \rangle$ показаны на рис. 21. Из графика для плотности состояний видно появление псевдощели при $x = 0,12$, как предшественницы щели антиферромагнитного ВСП-состояния. Одновременный расчет спиновой корреляционной длины дал $\zeta = 2,5a$, что хорошо согласуется с нейтронными данными. Таким образом, и метод КМК, и FLEX-приближение подтверждают возможность наблюдения сателлитов с $\zeta \approx 2a$.

Закон дисперсии квазичастиц в приближении FLEX, построенный по положению максимумов спектральной

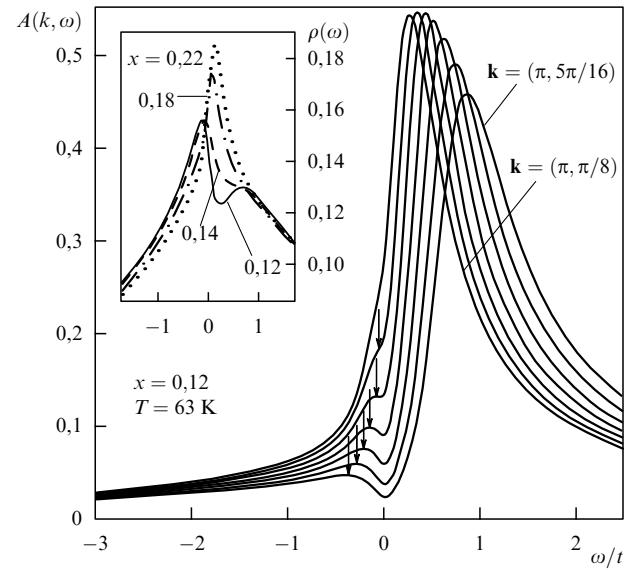


Рис. 21. Спектральная плотность для модели Хаббарда и плотность состояний (на вставке) для разных концентраций дырок. Волновой вектор \mathbf{k} взят на линии $(\pi, 0) - (\pi, \pi)$. Сателлиты, соответствующие теневым зонам, указаны стрелками. (Из работы [36].)

плотности в окрестности точки $X = (\pi, 0)$, изображен на рис. 22. При $x = 0,22$ видна только одна зона с седловой особенностью в точке X , дающей сингулярность Ван Хова. Для концентрации $x = 0,12$, что меньше оптимальной, в основной зоне (с большим спектральным весом) почти повторяется закон дисперсии зоны с $x = 0,22$ и проявляется более плоский участок для энергий $\omega = 25$ мэВ выше уровня Ферми. Правее точки X для этой зоны видно резкое увеличение дисперсии, приводящее к провалу в плотности состояний. Светлые квадраты для $x = 0,12$ показывают теневые зоны. Интересно, что теневые зоны в расчете [36] в противоположность работе [33] не соответствуют полюсам функции Грина, а обус-

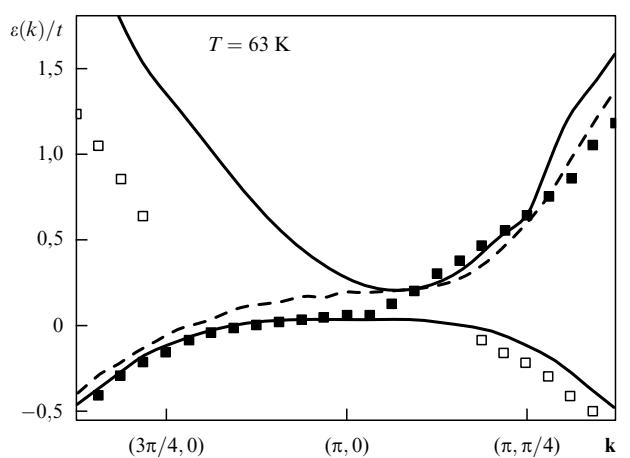


Рис. 22. Закон дисперсии электронов в окрестности точки $(\pi, 0)$ для разных концентраций дырок x в рамках FLEX-приближения в однозонной модели Хаббарда. Штриховая линия соответствует $x = 0,22$; квадраты — $x = 0,12$, причем темные квадраты относятся к главной зоне, а светлые — к теневой. Сплошная линия — расчет для антиферромагнитной фазы с дальним порядком при $x = 0,12$ и намагниченности на узел $m_S = 0,21$. (Из работы [36].)

ловлены перетеканием интенсивности за счет процессов затухания квазичастиц. Если бы имел место дальний порядок, то связь состояний \mathbf{k} и $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$ обеспечивалась бы действительно процессами переброса. В условиях ближнего порядка эта связь имеет динамический характер и определяется процессом распада состояния с вектором \mathbf{k} за счет затухания в конечное состояние $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$. Спиновые флуктуации — это не единственные флуктуации, ренормирующие харти-фоковский спектр квазичастиц. Еще в работе [183] было показано, что точный массовый оператор модели Хаббарда состоит из трех слагаемых, описывающих вклады от флуктуаций спиновой плотности, плотности электронов и двухчастичных возбуждений. Аналогичное выражение использовалось для расчета закона дисперсии в трехзонной модели в приближении FLEX [184]. Результат расчета практически совпадает с данными КМК-метода, причем основной вклад в массовый оператор дают именно спиновые флуктуации. Следствием плоских зон в окрестности точки x является сингулярность Ван Хова в плотности состояний $N(E)$. Аналогичная сингулярность известна и для одноэлектронной зонной теории, но ее происхождение там обвязано зонным эффектам, а в моделях с СЭК плоская зона является результатом сильных корреляций. Зонные эффекты легко поддаются примесям, тогда как корреляционное сужение и малая дисперсия устойчивы к примесям.

Максимум мнимой части спиновой восприимчивости $\text{Im } \chi(q, \omega)$, в работе [184] соответствует несоизмеримому волновому вектору и энергии ω_s спиновых флуктуаций. Для допирования $x < 0,25$ величина $\omega_s \approx 0,01 - 0,03t$ и линейно зависит от x . Для мнимой части электронного массового оператора авторы работы [184] получили нетривиальный результат: $\text{Im } \Sigma = \omega$ при $\omega > \omega_s$ и $\text{Im } \Sigma = \omega^2$ для $\omega < \omega_s$. Таким образом, только для самых малых энергий имеют место фермижидкостные свойства. Аналогичный результат был получен ранее для систем с переменной валентностью в рамках периодической модели Андерсона с помощью диаграммной техники для X -операторов [185].

5.4. Концентрационная зависимость поверхности Ферми. Нарушение теоремы Латтинжера

Наивная картина в духе модели жестких зон для поверхности Ферми при малой концентрации дырок заключается в дырочных карманах, центрированных вокруг точки \bar{M} , с объемом пропорциональным концентрации дырок x . Прямых экспериментальных доказательств малых дырочных карманов нет, хотя кинетические и в частности, холловские данные свидетельствуют о том, что концентрация носителей (дырок) $n_h \propto x$ [4–10]. Теоретические расчеты в рамках $t-J$ -модели [186] и двумерной модели Хаббарда [187] подтверждают эту картину, но для не слишком малых концентраций $x \geq 0,10$. Ситуация для $x \approx 0,05$, когда происходит переход диэлектрик–металл и зарождается сверхпроводимость, малоизучена. Очень трудно изготовить качественные образцы с достаточной степенью однородности распределения доноров. Возможно, причина этого кроется в фазовом расслоении, при котором носители с конечной концентрацией в антиферромагнитном полупроводнике собираются в проводящие капли [188, 189]. Тем не менее и достаточно далеко от перехода диэлектрик–металл концентрационная зависимость поверхности Ферми нетривиальна и характеризуется нефермижидкостными эффектами. Этот вопрос изучен авторами

работы [187] в рамках FLEX-приближения в модели Хаббарда. Вместо фермижидкостного поведения скорости релаксации $\Gamma_k = -\text{Im } \Sigma_k(\omega = 0)$, $\Gamma_k \propto T^2$, которое получается для сильнодопированных систем при $x \geq 0,20$, для слабодопированных систем ($x = 0,11$) видно увеличение Γ_k с понижением температуры для теневой зоны. Для основной зоны предел Γ_k при $T \rightarrow 0$ неясен, поскольку FLEX-расчеты делаются численно при конечной температуре. Существует некий малый масштаб энергий ω_q^* (в расчетах [187] $\omega_q^* \approx 1-5$ мэВ), определяемый численной точностью расчета. Поэтому авторы работы [187] могут только говорить об аномальном поведении Γ_k при $T > \omega_q^*$, которое приводит к нарушению теоремы Латтинжера [190]. Объем поверхности Ферми определяется формулой

$$n_{\text{Lutt}}(T) = \frac{2}{N} \sum_k \theta(\mu - \varepsilon_k - \text{Re } \Sigma_k(\omega = 0)), \quad (36)$$

а концентрация частиц —

$$n(T) = \frac{2}{N} \sum_k n_k = -\frac{2}{N} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} f(\omega) \text{Im } G_k(\omega + i0^+), \quad (37)$$

где $f(\omega)$ — функция распределения Ферми. Теорема Латтинжера гласит, что при $T = 0$

$$n(T) = n_{\text{Lutt}}(T). \quad (38)$$

Обобщение вывода теоремы Латтинжера без предположения $\Gamma_k = 0$ дает [187]

$$n \approx n_{\text{Lutt}} + \frac{2}{\pi N} \sum_k \arctan\left(\frac{\Gamma_k}{\varepsilon_k + \text{Re } \Sigma_k(0) - \mu}\right). \quad (39)$$

Формула (39) является точной в пределе $T \rightarrow 0$. На рисунке 23 показаны отклонения от теоремы Латтинжера, полученные из непосредственных решений FLEX-уравнений (сплошная линия) и с помощью формулы (39) (штриховая линия). Возможны нарушения равенства (38) за счет температурного размытия фермиевской функции распределения, из-за которых в формуле (39) стоит символ приближенного равенства. Эти эффекты малы, как показано на вставке рис. 23, по крайней мере на порядок меньше обсуждаемых эффектов нарушения теоремы Латтинжера.

Причиной нарушения является ненулевое значение Γ_k . Причем, если $\Gamma_k \neq 0$ симметрично для состояний под и над поверхностью Ферми, то суммирование по k в правой части (39) приведет к компенсации соответствующих слагаемых и получим $n = n_{\text{Lutt}}$. Однако, если есть асимметрия Γ_k , что действительно имеет место в рамках FLEX-приближения, ибо максимальное значение Γ_k связано с теневыми зонами за пределами основной поверхности Ферми, то тогда возникает отклонение n от n_{Lutt} . Как показывает сравнение сплошной и штриховой линий, согласие между ними хорошее, так что причиной нарушений теоремы Латтинжера являются аномальные свойства Γ_k , связанные в свою очередь с существованием теневых зон. Действительно, само понятие теневых зон связано с перераспределением части спектральной плотности из-под поверхности Ферми за поверхность Ферми. Поэтому число частиц под поверхностью Ферми уменьшается и неудивительно, что теорема Латтинжера нарушается. При концентрациях $x > 0,20$, превышающих оптимальное допирание, согласно [187], затухание $\Gamma_k \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$. Поэтому теорема Латтинжера выпол-

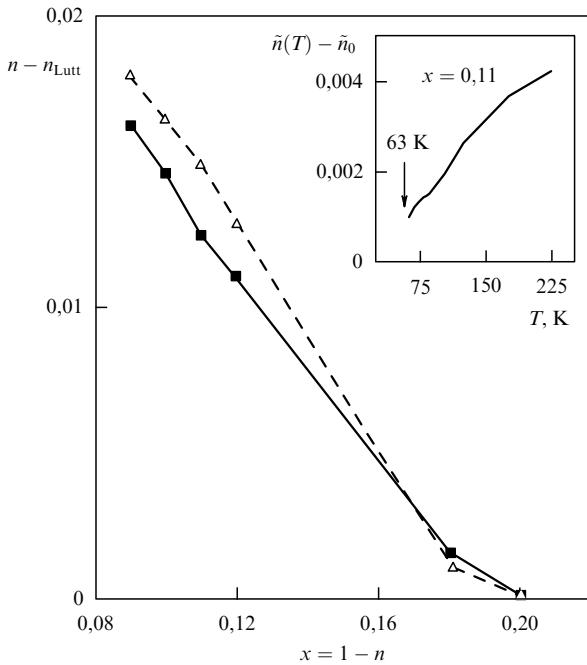


Рис. 23. Отклонения от теоремы Латтинжера для слабодопированных систем, полученные непосредственным решением FLEX-уравнений (сплошная линия) и по формуле (39) (штриховая); n — число частиц, n_{Lutt} — объем поверхности Ферми. Расчет выполнен в модели Хаббарда с $U = 4t$, $t = 0,25$ эВ, $T = 63$ К. На вставке показаны температурные добавки к концентрации частиц \tilde{n} , обусловленные размытием фермиевской функции распределения при конечных температурах. Видно, что эти добавки на порядок меньше нарушают теорему Латтинжера. (Данные работы [187].)

няется. Для этой ферми-жидкостной области и теоретические расчеты, и экспериментальные ARPES-данные указывают на наличие нестинга поверхности Ферми в направлении (π, π) [10]. Наиболее отчетливо нестинг проявляется для Bi-2212, хотя также виден и в Bi-2201, а также, возможно, в YBaCuO и $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Это свойство, как известно, приводит к неустойчивости нормального металлического состояния относительно образования фаз ВСП и волны зарядовой плотности (ВЗП), т.е. к частичной перестройке зонной структуры. Сверхпроводимость в подобных системах с электронно-дырочным спариванием подробно рассматривалась в работе [142], а применительно к оксидам меди — в работах [191, 192]. Зонная теория фазового расслоения также основана на наличии нестинга [193].

6. Электронные свойства нормальной фазы

Чтобы не повторять обзоры [4–12], мы не будем обсуждать необычные температурные зависимости многих свойств нормальной фазы и появившиеся для их объяснения идеи маргинальной ферми-жидкости и другие подходы. В этом разделе мы ограничимся лишь двумя активно обсуждаемыми в настоящее время проблемами: спиновой псевдощелью и зарядовым упорядочением с образованием одномерных доменов (стрейпов).

6.1. Спиновая псевдощель

Первоначально термин спиновая щель возник из наблюдения особенности температурной зависимости обратного времени релаксации $(T_1 T)^{-1}$ в ЯМР-экспериментах,

где наблюдался максимум при $T = 130–150$ К, что много выше T_c в образцах $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ в области слабого допирования [194, 195]. Позже эта щель была обнаружена методом неупругого рассеяния нейтронов [196] как щель для спиновых возбуждений с $\mathbf{q} = \mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$. Реально наблюдается уменьшение спектрального веса $\chi''(Q, \omega)$ в области низких частот и увеличение в области высоких, поэтому появился термин "псевдощель". Псевдощель проявляется также в ЯМР-экспериментах в виде максимума температурной зависимости скорости спин-спиновой релаксации T_2^{-1} . Обзор данных ЯМР, указывающих на возникновение псевдощели при $T = T^*$ в различных сверхпроводящих оксидах меди содержится в работе [197]. Величина T^* понижается с ростом концентрации дырок, и для оптимально допированных составов $T^* = T_c$ (рис. 24). Псевдощель в спектре квазичастиц проявляется также в инфракрасных оптических спектрах, в рамановской спектроскопии, в кинетических свойствах (см. обзор [198]). Наконец, в приведенных на рис. 3, 4 результатах ARPES для Bi-2212 оксидов с изменяющейся концентрацией дырок [15] непосредственно видно открытие щели на поверхности Ферми вдоль линии $(\pi, 0) – (\pi, \pi)$ при уменьшении концентрации дырок. Микроскопическая природа псевдощели активно обсуждается. По нашему мнению, образование локальных антиферромагнитных доменов, приводящее к теневым зонам и обсуждавшееся в разделах 5.3 и 5.4, вполне объясняет возникновение псевдощели. Предлагаются также и другие механизмы, в частности, локальное спаривание квазичастиц без фазовой когерентности между парами [39], разделение зарядовых и спиновых степеней свободы [45]. Согласно [199], спиновая щель

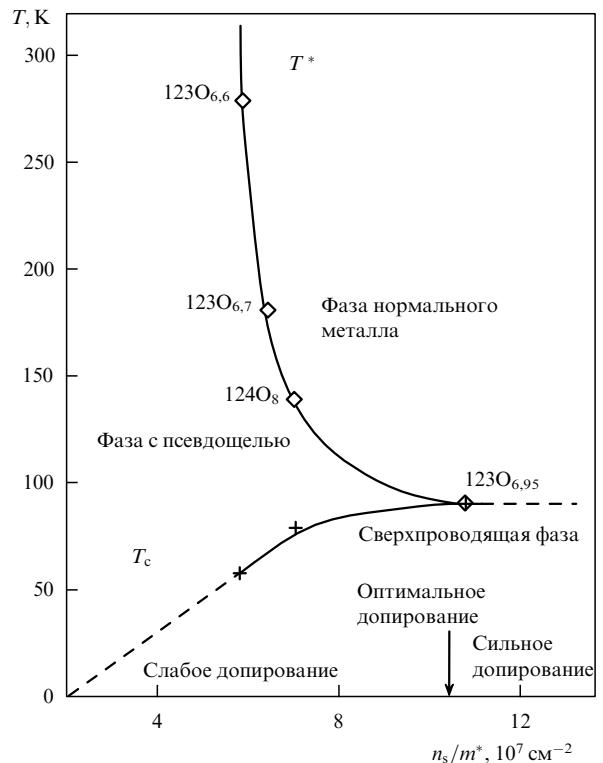


Рис. 24. Зависимости T_c и T^* от концентрации. Квадраты обозначают различные оксиды: $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,6}$ ($123\text{O}_{6,6}$), $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,7}$ ($123\text{O}_{6,7}$), $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ (124O_8) и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,95}$ ($123\text{O}_{6,95}$); n_s — плотность сверхтекущего компонента, m^* — эффективная масса носителей. (Из работы [198].)

обусловлена образованием синглетов из спинов соседних CuO_2 -слоев, взаимодействие между которыми усиливается сильными внутриплоскостными спиновыми флюктуациями.

6.2. Квазиодномерное зарядовое упорядочение

Внедренные за счет додирования антиферромагнитного диэлектрика дырки образуют медленно флюктуирующие металлические полоски с квазиодномерным движением дырок. Между полосками находятся области диэлектрика, индуцирующие спиновую псевдощель за счет магнитного аналога эффекта близости [200]. Экспериментально чередование проводящих и непроводящих полос обнаружено в $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+y}$ методами наблюдения дальней тонкой структуры рентгеновского поглощения (EXAFS) и электронной дифракции [201]. На рисунке 25 показано чередование полосок фазы LTO (низкотемпературной орторомбической) и фазы LTT (низкотемпературной тетрагональной) с ширинами $L = 2,65a$ и $W \approx 2a$, так что полный период сверхструктуры $\lambda_p = L + W = 4,65a$. Метод EXAFS показал ниже T_c чередование Cu–O-связей с апексским кислородом, для LTO-фазы длина связи Cu–O составляет $2,53 \text{ \AA}$ и для LTT-фазы — $2,37 \text{ \AA}$. Тетрагональная фаза описывается в работе [201] как одномерная волна зарядовой плотности (ВЗП) поляронов, а орторомбическая связывается с металлической проводимостью.

Для двумерного ферми-газа в сверхрешетке квантовых полос шириной L , вытянутых вдоль оси x , вектор k_y квантован за счет размерного эффекта, $k_y^{(n)} = n\pi/L$. Для $n = 2$ получаем $k_y^{(2)} = 0,38(2\pi/a)$, что очень близко к фермиевскому вектору в GM -направлении $k_F = 0,37(2\pi/a)$ [10]. Поэтому пик плотности состояний, обусловленный стоячей вдоль оси y волной с длиной $\lambda \approx L$, попадает в окрестность уровня Ферми, что согласно оценкам [201], повышает T_c в пять раз по сравнению с однородным случаем. Система со страйп-фазами является частным случаем фазового расслоения. И зарядовые, и спиновые флюктуации могут быть причи-

ной диэлектрического упорядочения. Чем больше концентрация дырок, тем, по-видимому, меньше относительный вклад спиновых флюктуаций. Для оптимально додированной системы $\text{Bi}-2212$, рассмотренной в [201], вполне возможно, что именно зарядовое упорядочение ответственно за диэлектрические свойства непроводящих полосок.

Вывод о неоднородном распределении зарядов в $\text{TmBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ был сделан на основе исследования спектров ЯКР [202, 203]. Два варианта — прямые полосы вдоль $[1, 1, 0]$ и зигзагообразные вдоль $[1, 0, 0]$ с периодом $2a$ — были предложены в [202]. Оба варианта расслоения приводят к образованию "спиновых лестниц" [204], в которых спины меди связаны сильным антиферромагнитным обменом J . Спиновые лестницы разделены проводящими полосками, в которых антиферромагнитные корреляции ослаблены за счет носителей. При обмене между лестницами $\lambda\tau$ спектр спиновых возбуждений имеет щель шириной от $0,5\tau$ при $\lambda = 0$ до нуля при $\lambda = 0,25$ [204]. Таким образом, упорядоченное в страйп-фазу электронное расслоение может привести к спиновой щели, хотя температурные и концентрационные зависимости эффектов, обусловленных спиновой щелью, в этом механизме требуют дальнейшего рассмотрения.

7. Влияние электронной системы на концентрационные зависимости T_N и T_c слабододированных оксидов меди

В этом разделе мы рассмотрим, как особенности электронной структуры влияют на подавление антиферромагнетизма при додировании носителями и замещении меди на другие магнитные ионы. Поскольку при додировании р-типа дырка, в основном, движется по кислородным орбитальным, возникает дополнительный обмен $J_{\text{Cu}-\text{O}} \gg J_{\text{Cu}-\text{Cu}}$, который приводит к флюктуациям в гейзенберговском антиферромагнетике и быстрому подавлению трехмерного дальнего порядка. Статическая модель с фрустрациями была рассмотрена в работе [205]. Описание спиновых волн в рамках $t-J$ -модели с учетом взаимодействия магнонов с дырками и электронно-дырочными парами приведено в работах [206, 207], где получено нелинейное уменьшение подрешеточной намагниченности M_i и скорости спиновых волн v с ростом концентрации дырок. Критическую концентрацию x_c можно определить не только из условия $M_i(x_c) = 0$, но и из условия обращения в нуль скорости магнонов [208]. Как показано в [207], оба способа дают практически совпадающие значения x_c , хорошо согласующиеся с результатами эксперимента для $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$. Обобщение расчетов [206, 207] для случая конечных температур дало концентрационную зависимость температуры Нееля [209].

Асимметрия магнитной фазовой диаграммы для электронного и дырочного додирования является следствием асимметрии электронной структуры [210], поскольку вместо фрустраций для систем р-типа в системах n-типа имеет место фактически диамагнитное замещение. Если пренебречь ковалентностью, т.е. считать, что без додирования все ионы меди находятся в состоянии d^9 со спином $S = 1/2$, то добавление электрона приводит к конфигурации d^{10} со спином $S = 0$, что действительно эквивалентно диамагнитному замещению, например, в системе $\text{La}_2\text{Cu}_{1-y}\text{Zn}_y\text{O}_4$. Эта эквивалентность была продемонстрирована экспериментально схожестью зависимостей $T_N(y)$ в $\text{La}_2\text{Cu}_{1-y}\text{Zn}_y\text{O}_4$ и $\text{Pr}_{2-y}\text{Ce}_y\text{CuO}_4$ [138].

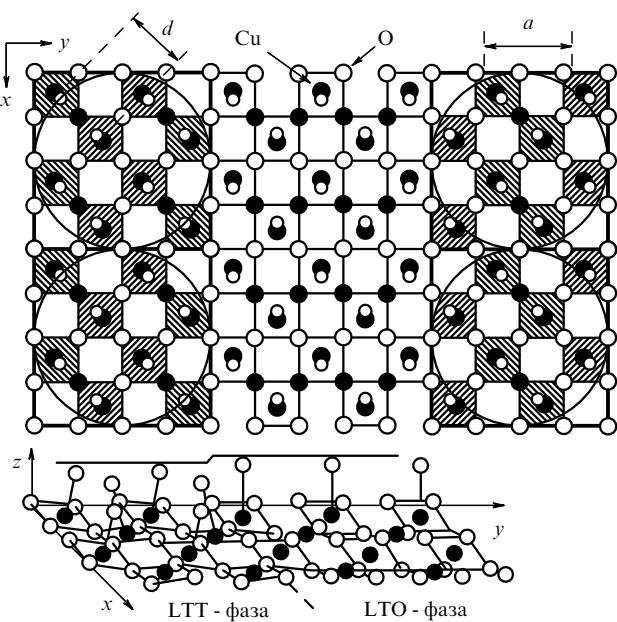


Рис. 25. Схема CuO_2 -плоскости с проводящими полосами LTO-фазы и диэлектрическими полосами LTT-фазы. (Из работы [201].)

За счет ковалентности основное состояние ячейки без додирования является суперпозицией дырки на меди и на кислороде:

$$|GS(n_h = 1)\rangle = u|d^9 p^6\rangle + v|d^{10} p^5\rangle, \quad (40)$$

причем коэффициенты u и v определяются параметрами гамильтониана $p-d$ -модели, $u^2 = (1 + \Delta/v)/2$, $\Delta = \varepsilon_p - \varepsilon_d$, $v^2 = \Delta^2 + 8t_{pd}^2$. После добавления электрона ячейка находится в состоянии $|GS(n_h = 0)\rangle = |d^{10} p^6\rangle$, так что диамагнитное замещение на ионе меди при додировании n -типа имеет место с вероятностью $u^2 < 1$, а не 1, как в отсутствие ковалентных эффектов. В результате наклоны концентрационных кривых систем n -типа и диамагнитно-замещенных систем различаются [211]. Это различие мало, так как $u^2 \approx 0,8$ для реалистичных наборов параметров, однако оно хорошо согласуется с данными [138].

Подавление антиферромагнетизма и сверхпроводимости при замещении меди различными магнитными (Fe , Co , Ni) и немагнитными (Zn , Al , Ga) ионами достаточно хорошо исследовано. В случае Y-123 трехвалентные примеси замещают, как правило, узлы $Cu1$ в $Cu-O$ -цепях, а двухвалентные Zn и Ni — узлы $Cu2$ в плоскостях [212]. Для сравнения эффектов подавления разными примесями удобнее использовать систему $La_{2-x}Sr_xCu_{1-y}M_yO_4$, $M = Fe, Co, Ni, Zn, Ga$ и Al , где все примеси располагаются в CuO_2 -плоскости. Наиболее аномально ведут себя системы с замещением Cu на Ni : тангенс угла наклона dT_N/dx в случае Ni почти в три раза меньше, чем в случае Zn . Для Zn $dT_N/dx = -17$ К (ат.%) $^{-1}$, а для Ni $dT_N/dx = -5,5$ К (ат.%) $^{-1}$ [213].

Зависимости $T_c(y)$ для $La_{1.85}Sr_{0.15}Cu_{1-y}M_yO_4$ оказались практически одинаковыми для немагнитных Zn, Al, Ga и магнитной примеси Co , самый быстрый спад T_c обнаружен для Fe и самый медленный — для Ni [214]. Предполагая низкоспиновое состояние Co^{3+} , авторы работы [214] качественно объяснили концентрационные зависимости $T_c(y)$ и магнитные свойства примесей Co, Zn, Ga, Al и Fe , но ситуация с Ni оказалась более неясной. По данным измерения статической восприимчивости магнитный момент на никеле даже меньше, чем $S = 1/2$, вместо ожидаемого для Ni^{2+} значения $S = 1$. Аналогичные малость магнитного момента и медленный спад $T_c(y)$ были обнаружены в $YBa_2Cu_{3-y}Ni_yO_7$ [215].

Не только качественное, но и количественное совпадение с зависимостями T_c и T_N от концентрации и объяснение аномалий при замещении Cu на Ni получены при многоэлектронном анализе [216]. Формально ион Ni^{2+} имеет d^8 -конфигурацию, что эквивалентно (по числу дырок на ячейку CuO_2) дырочному додированию. Поэтому основное состояние системы нужно рассматривать в двухдырочном секторе гильбертова пространства. Из-за эффектов СЭК вклад конфигурации $p^6d^8p^6$ подавлен, и основное состояние (синглет Жанг–Райса) описывается смесью конфигураций:

$$|GS(n_h = 2)\rangle = u_0|p^5 d^{10} p^5\rangle + v_0|p^5 d^9 p^6\rangle, \quad (41)$$

где $u_0^2 = (1 - \Delta_0/v)/2$, $\Delta_0 = \Delta - V_{pd}$, $v_0^2 = \Delta_0^2 + 8t_{pd}^2$. Эта формула получена в пределе $U_d = \infty$, когда вклад d^8 равен нулю. При $U_d \approx 10$ эВ вклад d^8 -конфигурации в основное состояние составляет $\sim 1\%$. За счет кулоновского взаимодействия между Cu и O энергия переноса заряда перенормируется, $\Delta_0 < \Delta$, что приводит к увеличению роли ковалентности в двухдырочном секторе по

сравнению с однодырочным. В результате из (41) видно, что Ni^{2+} в решетке CuO_2 не находится в состоянии $S = 1$, а с вероятностью u_0^2 имеет $S = 0$ в конфигурации d^{10} и с вероятностью v_0^2 имеет $S = 1/2$ в конфигурации d^9 . Для параметров $\Delta = 2$ эВ, $t_{pd} = 1$ эВ, $V_{pd} = 0,6$ эВ веса равны $u_0^2 = 0,28$ и $v_0^2 = 0,72$. Эффективный спин на никеле

$$S_{Ni} = v_0^2 \cdot 0,5, \quad (42)$$

согласно данным [215], равен 0,36.

Концентрационная зависимость T_N при диамагнитном замещении вычислялась двумя способами. Двумерная модель Гейзенберга с малой анизотропией рассчитана методом КМК, при отношении анизотропии к обмену $K/J \sim 10^{-3}$ величина dT_N/dx близка к экспериментальному значению. В модели Хаббарда диамагнитное замещение моделировалось рассеянием спиновых волн на статической немагнитной примеси, массивный оператор магнонов вычислялся в приближении хаотических фаз [217]. В результате для $T_N(x)$ получена следующая зависимость:

$$T_N(x) = T_N(0) \left(1 - \alpha x \ln \frac{1}{r} \right), \quad (43)$$

где $\alpha \sim 1$, $r = J_{||}/J_{\perp} \approx 6 \times 10^{-3}$ для La_2CuO_4 . Поскольку $T_N(0) = J \ln(1/r)$, то

$$\frac{dT_N}{dx} = -\alpha \frac{T_N^2(0)}{J}.$$

Учет анизотропии дает щель Δ_a в спектре спиновых волн и перенормировку $r \rightarrow [r^2 + (\Delta_a/2J_{\perp})^2]^{1/2}$. Величина Δ_a/J такого же порядка ($\sim 10^{-3}$), что и r . Получаемый в результате наклон dT_N/dx также близок к экспериментальному значению для замещения Cu на Zn . Что касается наклона dT_N/dx для замещения никелем, то, как видно из (41), с вероятностью u_0^2 спин $S = 1/2$ примеси совпадает со спином решетки, т.е. магнитного беспорядка практически нет (поскольку решетка не меняется, можно считать при $x \ll 1$ и параметры гамильтониана теми же самыми, так что величины обменов J_{Cu-Ni} и J_{Cu-Cu} в этом состоянии d^9 близки). С вероятностью u_0^2 замещение Cu на Ni совпадает с диамагнитным замещением, т.е. в соединении $La_{2-x}Sr_xCu_{1-y}M_yO_4$ доля диамагнитных центров, равная u для $M = Zn$, в случае Ni равна $u_0^2 u$. Отсюда ясно, что

$$\frac{dT_N}{dy}(Ni) = u_0^2 \frac{dT_N}{dy}(Zn) = -4,76 \text{ К (ат.%)}^{-1}, \quad (44)$$

что очень близко к экспериментальному значению для Ni $-5,5$ К (ат.%) $^{-1}$ [213]. Таким образом, механизм подавления антиферромагнетизма для замещений как Zn , так и Ni , согласно [216], одинаков, а количественная разница связана с различным изменением электронной структуры при замещениях.

Ключ к пониманию концентрационных зависимостей T_c при замещении меди на Zn, Ga, Al и Co дают измерения статической восприимчивости [213, 214], выявившие на примеси эффективный магнитный момент, близкий к магнитному моменту Cu^{2+} . Достаточно очевидно, что антиферромагнитная решетка с одним пустым узлом ведет себя как один парамагнитный центр вследствие нескомпенсированности подрешеток. Аналогичный вывод об индуцированном Zn магнитном моменте сделан по данным ЯМР [215]. Это означает, что подавление T_c при замещении формально немагнитными примесями на самом деле происходит из-за рассеяния

куперовских пар на индуцированных примесью в локальном антиферромагнитном окружении магнитных моментах, т.е. имеет место обычный в теории БКШ эффект магнитного подавления T_c . В рамках этой идеи, учитывая количественную разницу в концентрации дамагнитных центров при замещениях на Zn и Ni, находим объяснение и аномально слабого подавления T_c в случае замещения Cu на Ni. Для наклона $T_c(y)$ получаем [216] формулу, аналогичную (44):

$$\frac{dT_c}{dy}(\text{Ni}) = u_0^2 \frac{dT_c}{dy}(\text{Zn}). \quad (45)$$

Отношение тангенсов углов наклона $T_c(y)$ для Ni и Zn равно 0,38 в $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{Cu}_{1-y}\text{M}_y\text{O}_4$ [213] и 0,25 в $\text{YBa}_2(\text{Cu}_{1-y}\text{M}_y)_3\text{O}_{7-x}$ [215], теоретическое же значение u_0^2 составляет 0,28. Таким образом, представление о том, что замещение Cu на Ni приводит к заполнению синглета Жанга–Райса, который из-за малого радиуса примесного состояния остается локализованным, позволяет с единой точки зрения объяснить концентрационные зависимости и T_N , и T_c .

Следует отметить также разные концентрационные зависимости при замещении меди переходными металлами для слабодопированных и сильнодопированных систем, которые обнаружены как для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_{1-y}\text{M}_x\text{O}_4$ ($M = \text{Zn}, \text{Ni}$) [218], так и для $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x(\text{Cu}_{1-y}\text{M}_y)_2\text{O}_{8+z}$ ($M = \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Zn}$) и $\text{Bi}_2\text{Sr}_{1.6}\text{La}_{0.4}\text{Cu}_{1-y}\text{M}_y\text{O}_{6+z}$ ($M = \text{Co}, \text{Zn}$) [219]. В сильнодопированных системах зависимость T_c от концентраций дырок p и примесей y может быть представлена в виде [218]

$$T_c(p, y) = T_c(p, 0) g(y) \quad (46)$$

с не зависящей от концентрации дырок функцией $g(y)$ для всех исследованных замещений Cu на Fe, Co, Ni и Zn для систем B-2212, Y-123 и La-214. Качественное согласие с теорией Абрикосова – Горькова [220] может быть достигнуто при предположении о росте плотности состояний $N(0)$ на уровне Ферми с ростом концентрации дырок и о сильном рассеянии квазичастиц на примесях, описываемом в унитарном пределе.

Для слабодопированных оксидов имеет место более сильное подавление T_c , чем описывается формулой (46). Согласно [218], в этой области составов эффекты локализации более существенны.

В системах п-типа различие в подавлении T_c при замещении Cu на Zn, Fe, Co, Ni вполне согласуется с теорией [220]. Так, для немагнитной примеси Zn подавление T_c очень слабое, а магнитные примеси Ni и Co, согласно данным [221, 222], полученным на керамических образцах, подавляют сверхпроводимость полностью уже при концентрации $\sim 1\%$. Недавние исследования на монокристаллах $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{Cu}_{1-y}\text{M}_y\text{O}_{4+z}$ с $M = \text{Ni}, \text{Co}$ подтвердили данные для керамики и показали, что $dT_c/dy = -20 \text{ K (ат. \%)}^{-1}$ как для Ni, так и для Co [223]. Эта скорость подавления T_c при замещении меди переходными металлами наибольшая для всех исследованных оксидов меди.

8. Заключение

В результате интенсивной экспериментальной и теоретической работы последних лет можно констатировать заметный прогресс в понимании энергетической структуры сильнокоррелированной электронной системы оксидов меди. Описание дырок при слабом допирова-

нии как спиновых поляронов в антиферромагнитной решетке, полученное согласующимися друг с другом численно точными кластерными расчетами и различными вариантами теории возмущений для решетки CuO_2 , подтверждается экспериментальными исследованиями, в первую очередь ARPES. В металлической фазе выделяются две области: слабодопированные (относительно оптимального додирования) и сильнодопированные системы. В сильнодопированных системах выполняется теорема Латтинжера, имеется большая поверхность Ферми, согласующаяся с зонными расчетами. Тем не менее эффекты СЭК проявляются в формировании плоского участка закона дисперсии электронов в окрестности точки $X = (\pi, 0)$ и в уменьшении ширины зоны в окрестности ϵ_F по сравнению с зонными расчетами. Это металлическое состояние в литературе иногда называют странным металлом, так как температурные зависимости кинетических коэффициентов и ряд других экспериментов свидетельствуют о нефермижидкостном поведении. Концепция маргинальной ферми-жидкости качественно описывает эти странные.

Дважды странной можно назвать область слабодопированных металлических составов, в которой кроме T_c имеется еще одна характерная температура T^* образования спиновой псевдощели. Совокупность описанных выше результатов говорит о том, что электронная структура в этой области составов формируется в условиях сильных локальных антиферромагнитных флуктуаций, которые определяют псевдощель, теневые зоны, приводят к нефермижидкостному поведению массового оператора в окрестности энергии Ферми и к нарушению теоремы Латтинжера. На феноменологическом уровне систему можно было бы назвать почти антиферромагнитной ферми-жидкостью, представление о которой успешно использовалось для описания отклонений от закона Коринги для скорости спин-решеточной релаксации в спектрах ЯМР [224]. Наиболее неясной остается область концентраций дырок в окрестности перехода диэлектрик – металл. Картина сосуществования диэлектрических и металлических фаз с переключением характером перехода диэлектрик – металл качественно соответствует наблюдавшемуся в ряде оксидов фазовому расслоению. Однако неясно, когда это расслоение неупорядочено, а когда возникают упорядоченные страйп-фазы. Поскольку в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ фазовое расслоение не обнаружено, встает вопрос, как и когда переход диэлектрик – металл происходит в пространственно-однородной системе.

Мы не рассматривали механизмы сверхпроводящего спаривания. Тем не менее из-за определяющей роли спиновых флуктуаций для формирования электронной структуры можно сделать вывод об их важности и для сверхпроводящего спаривания. Обычно считается, что обмен спиновыми флуктуациями приводит к спариванию d-типа [6–12]. Тем не менее можно привести пример работы, где сделан вывод о возможности s-спаривания за счет обмена антиферромагнитными флуктуациями [225].

В заключение автору приятно выразить свою благодарность Дж. Ашкенази и И. Бозовику за гостеприимство во время визитов в Майами и Сан-Хосе, И. Краусу и его коллегам из Технического университета в Праге за дружественный прием и поддержку, Ю.А. Изюмову за приглашение прочитать обзорный доклад на Зимней школе "Коуровка", который лег в основу настоящей работы. Я благодарен также Ученому совету по высокотемпературной сверхпроводимости за финансовую под-

держку в рамках Государственной программы по ВТСП (грант 95027).

Список литературы

1. Mott N F *Proc. Phys. Soc. A* **62** 416 (1949)
2. Bednorz J G, Muller K A *Z. Phys. B* **64** 189 (1986)
3. Гинзбург В Л, Киржниц Д Л *Проблема высокотемпературной сверхпроводимости* (М.: Наука, 1977)
4. Мазин И И *УФН* **158** 155 (1989)
5. Pickett W E *Rev. Mod. Phys.* **61** 433 (1989)
6. Гинзбург В Л, Максимов Е Г *СФХТ* **5** 1543 (1992)
7. Dagotto E *Rev. Mod. Phys.* **66** 763 (1994)
8. Kampf A P *Phys. Rep.* **249** 219 (1994)
9. Brenig W *Phys. Rep.* **251** 153 (1995)
10. Shen Z X, Dessau D S *Phys. Rep.* **253** 1 (1995)
11. Scalapino D J *Phys. Rep.* **250** 329 (1995)
12. Локтев В М *ФНТ* **22** 3 (1996)
13. Изюмов Ю А *УФН* **165** 403 (1995)
14. Wells B O et al. *Phys. Rev. Lett.* **74** 964 (1995)
15. Marshall D S et al. *Phys. Rev. Lett.* **76** 4841 (1996)
16. Мазин И И и др. *Письма в ЖЭТФ* **47** 94 (1988)
17. Maksimov E G et al. *Phys. Rev. Lett.* **63** 1880 (1989)
18. Fujimori A et al. *Phys. Rev. B* **35** 8814 (1987)
19. Eliashberg G M *Ann. Phys. Fr.* **19** 353 (1994)
20. Greven M et al. *Z. Phys. B* **96** 465 (1995)
21. Miller L L et al. *Phys. Rev. B* **41** 1921 (1990)
22. Al-Mamour M et al. *Nature (London)* **369** 382 (1994)
23. Greven M et al. *Phys. Rev. Lett.* **72** 1096 (1994)
24. Koshihara S et al. *Phys. Rev. B* **41** 11657 (1990)
25. Dessau D S et al. *Phys. Rev. Lett.* **71** 2781 (1998)
26. Monte G et al. *Z. Phys. B* **80** 181 (1990)
27. Lin Z, Manousakis E *Phys. Rev. B* **45** 2425 (1992)
28. Grioni M et al. *Physica D* (1997) (in press)
29. Birgenau R J et al. *Phys. Rev. B* **38** 8614 (1988)
30. Tranquada J M et al. *Phys. Rev. B* **46** 5561 (1992)
31. Aepli P et al. *Phys. Rev. Lett.* **72** 2757 (1994)
32. Massidda Y, Yu J, Freeman A J *Physica C* **158** 251 (1988)
33. Kampf A P, Schrieffler J R *Phys. Rev. B* **42** 7967 (1990)
34. Chakravarty S *Phys. Rev. Lett.* **74** 1885 (1995)
35. Haas S, Moreo A, Dagotto E *Phys. Rev. Lett.* **74** 4281 (1995)
36. Langer M et al. *Phys. Rev. Lett.* **75** 4508 (1995)
37. Eckstein J N, Bozovic I *Ann. Rev. Mater. Sci.* **25** 279 (1995)
38. Doniach S, Inui M *Phys. Rev. B* **41** 6668 (1990)
39. Kivelson S, Emery V *Nature (London)* **374** 434 (1995)
40. Trivedi N, Randeria M *Phys. Rev. Lett.* **75** 312 (1995)
41. Kotliar G, Liu J *Phys. Rev. B* **38** 5142 (1988)
42. Tonomoto T, Kohno K, Fukuyama H *J. Phys. Jpn.* **61** 1886 (1992)
43. Anderson P W *Science* **235** 1196 (1987)
44. Schrieffer J R, Wen X G, Zhang S C *Phys. Rev. B* **39** 11663 (1989)
45. Wen X G, Lee P A *Phys. Rev. Lett.* **76** 503 (1996)
46. Suzuki M *Phys. Rev. B* **39** 2312 (1989)
47. Uchida S et al. *Phys. Rev. B* **43** 7942 (1991)
48. Fujimori A, Namatame N *Physica C* **185–189** 51 (991)
49. Uchida S *Physica C* **185–189** 28 (1991)
50. Баженов А В, Горбунов А В, Тимофеев В Е *ЖЭТФ* **104** 3193 (1993)
51. Maeno Y et al. *Nature (London)* **372** 532 (1994)
52. Walz L, Lichtenberg F *Acta Crystallogr. C* **49** 1268 (1993)
53. Lu D H et al. *Phys. Rev. Lett.* **76** 4845 (1996)
54. Singh D J *Phys. Rev. B* **52** 1358 (1995)
55. Gofron K et al. *Phys. Rev. Lett.* **73** 3302 (1994)
56. King D M et al. *Phys. Rev. Lett.* **73** 3298 (1994)
57. King D M et al. *Phys. Rev. Lett.* **70** 3159 (1993)
58. Tsuei C C, Gupta A, Kozen G *Physica C* **161** 415 (1989)
59. Hirsch J E, Scalapino D J *Phys. Rev. Lett.* **56** 2732 (1986)
60. Markiewicz R S *J. Phys.: Condens. Mater.* **2** 665 (1990)
61. Anisimov V I, Korotin M A, Afanasyev I V *Physica C* **159** 412 (1989)
62. Svane A *Phys. Rev. Lett.* **68** 1900 (1992)
63. Hubbard J C *Proc. Roy. Soc. A* **276** 238 (1963)
64. Sarma D D, Rao C N R *Solid State Commun.* **65** 47 (1988)
65. Emeri V J *Phys. Rev. Lett.* **58** 2794 (1987)
66. Varma C M, Schmitt-Rink S, Abrahams E *Solid State Commun.* **62** 681 (1987)
67. Zhang F C, Rice T M *Phys. Rev. B* **37** 3759 (1988)
68. Rice T M *Phys. Rev. B* **41** 7243 (1990)
69. Reiter G *Phys. Rev. B* **41** 7247 (1990)
70. Lovtsov S V, Yushankhai Y *Phys. Status Solidi B* **166** 209 (1991)
71. Schuttler H B, Fedro A *J. Phys. Rev. B* **45** 7588 (1992)
72. Belinicher V I, Chernyshev A L, Shubin V A *Phys. Rev. B* **53** 335 (1996)
73. Feiner L F, Jefferson J H, Raimondi R *Phys. Rev. B* **53** 8751 (1996)
74. Булаевский Л П, Нагаев Э Л, Хомский Д Л *ЖЭТФ* **54** 1562 (1968)
75. Hirsch J E *Phys. Rev. Lett.* **54** 1317 (1985)
76. Von Szczepanski K J et al. *Phys. Rev. B* **41** 2017 (1990)
77. Eder R, von der Brink J, Sawatzky G A *Phys. Rev. B* **54** 732 (1996)
78. Bianconi A et al. *Physica C* **153–155** 1760 (1988)
79. Bianconi A et al. *Phys. Rev. B* **38** 7196 (1988)
80. Gaididei Yu B, Loktev V M *Phys. Status Solidi B* **147** 307 (1988)
81. Овчинников С Г *Письма в ЖЭТФ* **64** 23 (1996)
82. Kamimura H, Eto M *J. Phys. Soc. Jpn.* **59** 3053 (1990)
83. Eskes H, Tjeng L H, Sawatzky G A *Phys. Rev. B* **41** 288 (1990)
84. Raimondi R, Jefferson J H, Feiner L F *Phys. Rev. B* **53** 8774 (1996)
85. Ландау Л Д *ЖЭТФ* **11** 581 (1941)
86. Зайцев Р О *ЖЭТФ* **68** 207 (1975)
87. Овчинников С Г *ЖЭТФ* **102** 534 (1992)
88. Зайцев Р О *ЖЭТФ* **70** 1100 (1976)
89. Изюмов Ю А, Кацнельсон М И, Скрябин Ю Н *Магнетизм коллективизированных электронов* (М.: Наука, 1994), с. 368
90. Lieb E H, Wu F Y *Phys. Rev. Lett.* **20** 1445 (1968)
91. Tomonaga S *Prog. Theor. Phys.* **5** 544 (1950); Luttinger J M *J. Math. Phys.* **4** 1154 (1968); Mattis D C, Lieb E N *J. Math. Phys.* **6** 304 (1965)
92. Soloum J *Adv. Phys.* **28** 201 (1979)
93. Haldane F D M *J. Phys. C* **14** 2585 (1981)
94. Parolla A, Sorella S *Phys. Rev. Lett.* **64** 1831 (1990)
95. Anderson P W *Phys. Rev. Lett.* **64** 1839 (1990)
96. Preuss R et al. *Phys. Rev. Lett.* **73** 732 (1994)
97. Penc K, Mila F, Shiba H *Phys. Rev. Lett.* **75** 894 (1995)
98. Ogava M, Shiba H *Phys. Rev. B* **41** 2326 (1990)
99. Hirsch J E *Phys. Rev. B* **31** 4403 (1985)
100. Hirsch J E, Tang S *Phys. Rev. Lett.* **62** 591 (1989)
101. Scalapino D J *Physica C* **185–189** 104 (1991)
102. Moreo A *Phys. Rev. B* **48** 3380 (1993)
103. Bonesteel N, Wilkins J *Phys. Rev. Lett.* **66** 2684 (1991)
104. Dagotto E et al. *Phys. Rev. B* **45** 10741 (1992)
105. Dagotto E *Int. J. Mod. Phys. B* **5** 907 (1991)
106. Dagotto E, Ortolani F, Scalapino D *Phys. Rev. B* **46** 3183 (1992)
107. Ohta Y et al. *Phys. Rev. B* **46** 14022 (1992)
108. Stephan W, Horsch P *Phys. Rev. Lett.* **66** 2258 (1991)
109. Balseiro C A, Avignon M, Gadilano E R *Solid. State. Commun.* **72** 763 (1989)
110. Wagner J, Hanke W, Scalapino D J *Phys. Rev. B* **43** 10517 (1991)
111. Dagotto et al. *Phys. Rev. Lett.* **67** 1918 (1991)
112. Tohyama T, Maekawa S *Physica C* **191** 193 (1992)
113. Preuss R, Hanke W, von der Linden W *Phys. Rev. Lett.* **75** 1344 (1995)
114. Gull S F, in *Maximum Entropy and Bayesian Methods* (Ed. J Skilling) (Dordrecht: Academic Publishes, 1989)
115. Moreo A et al. *Phys. Rev. B* **51** 12045 (1995)
116. Maekawa S *Commun. Kondense Mater. Phys.* **16** 79 (1992)
117. Mazin I I et al. *Phys. Rev. B* **45** 5103 (1992)
118. Varma C M et al. *Phys. Rev. Lett.* **63** 1996 (1989)
119. Ландау Л Д *ЖЭТФ* **30** 1058 (1958)
120. Eskes H, Sawatzky G A, Feiner L F *Physica C* **160** 424 (1989)
121. Zaanen J, Sawatzky G A, Allen J W *Phys. Rev. Lett.* **55** 4128 (1985)
122. Horsch P, Stephan W, in *Electronic Properties of High-T_c Superconductors* (Kirchberg, Tyrol, 1992) (Eds H Kuzmany, M Mehring, J Fink) [Springer Series in *Solid State Science* **113** 351 (1993)]
123. Овчинников С Г, Петраковский О Г *СФХТ* **3** 2492 (1990)
124. Ohta Y, Tohyama T, Maekawa S *Phys. Rev. Lett.* **66** 1228 (1991)
125. Hirsch J E et al. *Phys. Rev. Lett.* **60** 1668 (1988)
126. Stephan W, von der Linden W *Phys. Rev. B* **39** 2924 (1989)
127. Horch P et al. *Physica C* **162–164** 783 (1989)
128. Ramsak A, Prelovsek P *Phys. Rev. B* **40** 2239 (1989)
129. Schmidt H J, Kuramoto Y *Phys. Rev. B* **42** 2562 (1990)
130. Елесин В Ф и др. *ЖЭТФ* **99** 237 (1991)
131. Eskes H, Sawatzky G A *Phys. Rev. B* **43** 119 (1991)
132. Scalettar R T et al. *Phys. Rev. B* **44** 770 (1991)
133. Dorf G, Muramatsu A, Hanke W *Phys. Rev. B* **41** 9264 (1990)
134. Dorf G et al. *Phys. Rev. Lett.* **68** 2982 (1992)
135. Eskes H, Meinders B J, Sawatzky G A *Phys. Rev. Lett.* **67** 1035 (1991)

136. Овчинников С Г *ЖЭТФ* **103** 1404 (1993)
 137. Елесин В Ф, Кошурников В А *ЖЭТФ* **106** 1773 (1994)
 138. Keimer B et al. *Phys. Rev. B* **46** 14034 (1992)
 139. Кошурников В А, Харченко Ю Г *Письма в ЖЭТФ* **63** 860 (1996)
 140. Бразовский С А, Лукьянчук И А *ЖЭТФ* **96** 2088 (1989)
 141. Бразовский С А, Лукьянчук И А *ЖЭТФ* **98** 1498 (1990)
 142. Копаев Ю В *Труды ФИАН* **86** 3 (1975)
 143. Schrieffer J R, Wen X G, Zhang S C *Phys. Rev. Lett.* **60** 944 (1988)
 144. Grant J B, McMahan A K *Phys. Rev. Lett.* **66** 488 (1991)
 145. Нагаев Э Л *ЖЭТФ* **105** 943 (1994)
 146. Барабанов А Ф и др. *СФХТ* **3** 8 (1990)
 147. Barabanov A F, Kuzian R O, Maksimov L A *J. Phys.: Condens. Mater.* **39** 129 (1991)
 148. Barabanov A F, Maksimov L A, Zhukov L E *Phys. Lett. A* **181** 325 (1993)
 149. Becker K W, Brenig W Z. *Phys. B* **79** 195 (1990)
 150. Unger P, Fulde P *Phys. Rev. B* **47** 8947 (1993)
 151. Under P, Fulde P *Phys. Rev. B* **48** 16607 (1993)
 152. Eder E, Ohta Y *Phys. Rev. B* **50** 10043 (1994)
 153. Entel P, Zielinski J *Phys. Rev. B* **42** 307 (1990)
 154. Grilli M, Castellani C, Di Castro C *Phys. Rev. B* **42** 6233 (1990)
 155. Di Castro C, Feiner L F, Grilli M *Physica C* **185–189** 1417 (1991)
 156. Ovchinnikov S G, Petrakovsky O G *J. Supercond.* **4** 437 (1991)
 157. Овчинников С Г *ЖЭТФ* **102** 127 (1992)
 158. Ovchinnikov A A, Ovchinnikova M Ya *Phys. Lett. A* **187** 83 (1994)
 159. Ovchinnikov S G, Sandalov I S *Physica C* **161** 607 (1989)
 160. Ashkenazi J, Kuper C G *Physica C* **162–164** 767 (1989)
 161. Lovtsov S V, Yushankhai V Yu *Physica C* **179** 159 (1991)
 162. Hayn R, Yushankhai V Yu, Lovtsov S V *Phys. Rev. B* **47** 5253 (1993)
 163. Belinicher V I, Chernyshev A L *Phys. Rev. B* **49** 9746 (1994)
 164. Nazarenko A et al. *Phys. Rev. B* **51** 8676 (1995)
 165. Zaanen J, Oles A M, Horsch P *Phys. Rev. B* **46** 5798 (1992)
 166. Eder R, Ohta Y, Sawatzky G A *Phys. Rev. Lett.* (1997) (in press)
 167. Ivanov V A, Zaitsev R O *Int. J. Mod. Phys. B* **1** 689 (1988)
 168. Зайцев Р О, Иванов В А, Михайлова Ю М *ФТТ* **30** 3507 (1988)
 169. Зайцев Р О *Известия РАН. Сер. физ.* **56** 132 (1992)
 170. Frenkel D M et al. *Phys. Rev. B* **41** 350 (1994)
 171. Thurston T R et al. *Phys. Rev. Lett.* **65** 263 (1990)
 172. Cheong S W et al. *Phys. Rev. Lett.* **67** 1791 (1991)
 173. Yamada K et al. *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997) (in press)
 174. Сериков В В и др. *Письма в ЖЭТФ* **47** 451 (1988)
 175. Алексашкин Б А и др. *Письма в ЖЭТФ* **48** 263 (1988)
 176. Гоголин А О, Иоселевич А С *Письма в ЖЭТФ* **53** 358 (1991)
 177. Ashkenazi J *J. Supercond.* **7** 719 (1994)
 178. Abrikosov A A, Comprusano J C, Gofron K *Physica C* **214** 73 (1993)
 179. Еремин Н В и др. *Письма в ЖЭТФ* **60** 118 (1994)
 180. Bickers N E, Scalapino D J *Ann. Phys. N.Y.* **193** 206 (1989)
 181. Bickers N E, Scalapino D J, White S R *Phys. Rev. Lett.* **62** 961 (1989)
 182. Baym G, Kadanoff L P *Phys. Rev.* **124** 287 (1961)
 183. Кузьмин Е В, Овчинников С Г *ТМФ* **31** 379 (1977)
184. Putz R et al. *Phys. Rev. B* **53** 5133 (1996)
 185. Ovchinnikov S G, Sandalov I S *Solid State Comm.* **47** 367 (1993)
 186. Dagotto E, Nazarenko A, Boninsegni M *Phys. Rev. Lett.* **73** 728 (1994)
 187. Schmalian J et al. *Phys. Rev. B* **54** 4336 (1996)
 188. Нагаев Э Л *Письма в ЖЭТФ* **6** 484 (1967)
 189. Нагаев Э Л *УФН* **165** 529 (1995)
 190. Luttinger J M, Ward J C *Phys. Rev.* **118** 1417 (1969)
 191. Littlewood P B et al. *Phys. Rev. B* **39** 12371 (1989)
 192. Горбацевич А А, Копаев Ю В *Письма в ЖЭТФ* **51** 327 (1990)
 193. Горбацевич А А, Копаев Ю В, Токатлы И В *ЖЭТФ* **101** 971 (1992)
 194. Warren W W et al. *Phys. Rev. Lett.* **62** 1193 (1989)
 195. Horvatic M et al. *Phys. Rev. B* **39** 7322 (1989)
 196. Rossat-Mignod et al. *Physica C* **185–189** 86 (1991)
 197. Berthier C et al. *J. de Phys.* **I 72** 197 (1996)
 198. Puchkov A V, Basov D N, Timusk T *J. Phys.: Condens. Matter* **8** 10049 (1996)
 199. Иоффе Л Б и др. *Письма в ЖЭТФ* **59** 65 (1994)
 200. Emery V J., Kivelson S A, Zakhar O, Preprint of Brookhaven National Laboratory NBNL-G 3578 (1996)
 201. Bianconi A, Missori M *J. de Phys.* **I 4** 361 (1994)
 202. Бахарев О Н, Еремин Н В, Теплов М А *Письма в ЖЭТФ* **61** 499 (1995)
 203. Теплов М А и др. *Письма в ЖЭТФ* **63** 214 (1996)
 204. Gopalan S, Rice T V, Sigrist M *Phys. Rev. B* **49** 8901 (1994)
 205. Aharony A et al. *Phys. Rev. Lett.* **60** 1330 (1988)
 206. Igashari J, Fulde P *Phys. Rev. B* **45** 12357 (1992)
 207. Khaliullin G, Horsch P *Phys. Rev. B* **47** 463 (1993)
 208. Халиуллин Г Г *Письма в ЖЭТФ* **52** 999 (1990)
 209. Richard J L, Yushankhai V Yu *Phys. Rev. B* **50** 12927 (1994)
 210. Zhang W, Bennemann K N *Phys. Rev. B* **45** 12487 (1992)
 211. Ovchinnikov S G *Physica C* **228** 81 (1994)
 212. Markert T, Dalichaouch V, Marle M B *Physical Properties of High-Temperature Superconductors* Vol. 1 (Ed. by D N Ginsberg) (Singapore: World Scientific, 1989) p. 265
 213. Ting S T et al. *Phys. Rev. B* **46** 11772 (1992)
 214. Xiao G et al. *Phys. Rev. B* **42** 8752 (1990)
 215. Alloul H et al., in *Proc. Workshop on High-Temperature Superconductivity Miami USA* (1995) p. 7
 216. Овчинников С Г *ФТТ* **37** 3645 (1995)
 217. Sen P, Singh A *Phys. Rev. B* **53** 328 (1996)
 218. Kluge T et al. *Phys. Rev. B* **52** 727 (1995)
 219. Kluge T et al. *Czech. J. Phys.* **46** (Suppl. S3) 1444 (1996)
 220. Абрикосов А А, Горьков Л П *ЖЭТФ* **39** 1781 (1960)
 221. Tarascon J M et al. *Phys. Rev. B* **42** 218 (1990)
 222. Jayaram B, Chen H, Callaway J *Phys. Rev. B* **52** 3742 (1995)
 223. Brinkmann M, Bach H, Westerholz K *Phys. Rev. B* **54** 6680 (1996)
 224. Millis A J, Monien H, Pines D *Phys. Rev. B* **42** 167 (1990)
 225. Бабиченко В С, Каган Ю Письма в ЖЭТФ **56** 305 (1992)

Quasiparticles in strongly correlated electronic systems in cuprate oxides

S.G. Ovchinnikov

Kirenskii Institute of Physics, Siberian Division, Russian Academy of Sciences

Akademgorodok, 660036 Krasnoyarsk, Russia

Tel. (7-391) 243-29 06. Fax (7-391) 243-89 23

E-mail: sgo@iph.krasnoyarsk.su

New experimental and theoretical results on the electronic structure and spectral properties of quasiparticles in cuprate oxides are reviewed. It is shown that the electronic structure transforms from antiferromagnetic insulators to optimally doped high-temperature superconductors as the doping level is varied. The experimental methods considered are primarily angular resolved photoelectron spectroscopy (ARPES), neutron scattering, and NMR. Two types of electronic structure calculations for data interpretation purposes are considered, namely, exact numerical methods for finite clusters (exact diagonalisation and the quantum Monte Carlo method) and approximate schemes for the infinite lattice. As a result, a coherent unified picture emerges, in which the magnetic polaron of a weakly doped antiferromagnetic lattice transforms into a system of Fermi particles dressed by short-range antiferromagnetic type spin fluctuations. In the region of weakly doped metal compositions, deviations from Fermi-liquid properties are seen, such as the failure of Luttinger's theorem, shadowy photoemission bands, and the spin pseudogap effect in spectral and thermodynamic measurements. The situation in the neighbourhood of the insulator-metal concentration transition is described as least understood.

PACS numbers: 71.27.+a, 74.25.Jb

Bibliography — 225 references

Received 24 March 1997, revised 22 April 1997