

Спиновые структуры и природа псевдощели в купратах

М. Я. Овчинникова¹⁾

Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, 117334 Москва, Россия

Поступила в редакцию 1 июля 2010 г.

В приближении среднего поля изучены свойства спиновых и зарядовых структур, формирующихся в модели Хаббарда для конечного двумерного кластера. Итерационная процедура самосогласования приводит начальное некоррелированное распределение спинов к стабильным структурам с характерными спектральными свойствами. Показано, что при любом допировании плотность состояний системы имеет резкий минимум – псевдощель – на уровне Ферми. Это значит, что привязанность щели к уровню Ферми не является свойством только сверхпроводящего состояния, но типична также и для нормального состояния спиновых стекол.

Выяснение природы псевдощели (PG) недопированных (UD) купратов остается актуальной проблемой. В последние годы получено много новых деталей, касающихся электронных свойств PG состояния. Так, фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением (ARPES) указывает на фрагментарный характер поверхности Ферми (ПФ), состоящей из несвязанных сегментов – ферми-дуг в диагональных (узельных) направлениях квазиимпульса. Причем длина этих дуг увеличивается с допированием [1, 2]. В то же время, недавнее обнаружение магнитных квантовых осцилляций в итриевых купратах (YBCO) [3, 4] свидетельствует о наличии замкнутых участков ПФ, огибающих электронные карманы вместо ожидаемых дырочных. Наряду с ARPES, сканирующая туннельная микроскопия (STM) [5, 6] подтверждает наличие щели в антиузельных областях квазиимпульса даже при температурах $T > T_c$ выше температуры сверхпроводящего (SC) перехода. В частности, STM выявляет наличие двух щелей в плотности состояний. Одна из них возникает при $T < T_c$ и ассоциируется с конденсацией SC пар. Другая – псевдощель – сохраняется во всей области $T_c < T < T^*$ (T^* – граница PG области) и объясняется в [5, 6] образованием связанных пар – предвестников куперовских SC пар, но без фазовой когерентности.

В альтернативной интерпретации [7] PG связывается со спиновыми флуктуациями антиферромагнитного (AF) типа. Полуфеноменологический подход [8, 9] качественно описывает частичную диэлектризацию электронного спектра в результате рассеяния квазичастиц на флуктуациях, усреднение по которым подразумевает пространственную однородность системы. Между тем ряд данных указывает на воз-

можность расслоения фаз на микроуровне, на размерах порядка нескольких постоянных решетчатых.

Примером микронеоднородности являются страйп-фазы – периодические спиновые и зарядовые структуры, обнаруживаемые по несоизмеримым пикам в нейтронном рассеянии [10]. Моделирование таких структур введением внешнего периодического потенциала [11] или самосогласованными решениями метода среднего поля (MF) [12] показали принципиальную возможность карманов, как дырочного, так и электронного типа даже для дырочно допированных соединений. Ряд других явлений в UD купратах однозначно объясним формированием страйп-структур, например, в соединениях, в которых наблюдаются статические страйпы [10]. Остается вопрос, могут ли структуры обеспечить формирование измеряемой в STM щели в плотности состояний для Bi-содержащих купратов во всем интервале допирования, вплоть до оптимального, и каковы свойства этих структур. Наблюдаемая привязанность PG к уровню Ферми при любом допировании в UD области, казалось бы, однозначно указывает на образование куперовских пар в системе при температуре выше T_c . Но возможно и другое объяснение этого свойства PG.

В настоящей работе на основе MF расчетов конечного кластера показано, что самоорганизующиеся спиновые структуры – состояния типа спинового стекла, но с характерными спектральными свойствами, – также приводят к тому, что положение щели в плотности состояний оказывается привязанным к уровню Ферми. Поиск структур без требования их идеальной периодичности возможен лишь для кластера конечных размеров.

Нами изучены свойства спиновых и зарядовых структур кластера из 900 узлов двумерной модели Хаббарда. Проблема поиска произвольного вида MF структур кластера усложняется большим чис-

¹⁾ e-mail: movchin@chph.ras.ru

лом параметров порядка (ПП). Ими являются $\rho_{i\sigma} = \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$ – плотности частиц на узлах i с проекцией спина $S_z = \pm 1/2$ (индексы $\sigma = 1, 2$) и $\rho_{ij\sigma} = \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle$ – порядки связей $\langle ij \rangle$. Итерационная процедура самосогласования приводит начальное некоррелированное распределение спинов к стабильным спиновым структурам с зависящими от допирования распределениями фурье-компонент спинов и зарядов. Принимаем еще одно упрощение: ограничиваемся структурами со средними спинами, направленными вдоль одной оси. Это ограничение можно оправдать в свете представлений о том, что в реальных UD купратах существует медленно меняющаяся (в пространстве / времени) локальная ориентация спинов коррелированной системы.

Ищем MF решения для кластера из 30×30 узлов квадратной решетки с гамильтонианом Хаббарда $\mathbf{H} = \mathbf{T} + U \sum_i \hat{\rho}_{i1} \hat{\rho}_{i2}$. Здесь U – одноцентровое отталкивание, \mathbf{T} – кинетическая энергия со стандартными параметрами перескока t, t', t'' , для которых брались значения $U/t = 4, t'/t = -0.3, t''/t = 0.15$. Здесь $\hat{\rho}_{i\sigma}$ – оператор числа частиц на узле, отвечающий среднему $\rho_{i\sigma}$. Большая часть расчетов выполнена для модели с периодическими граничными условиями. В MF приближении матрица плотности нормального состояния кластера с коллинеарными спинами определяется заселением одноэлектронных состояний, являющихся собственными состояниями линеаризованного гамильтониана

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{Lin} &= \mathbf{T} + U \sum_i (\hat{\rho}_{i1} \hat{\rho}_{i2} + \rho_{i1} \hat{\rho}_{i2} + \rho_{i1} \rho_{i2}) = \\ &= \sum_{ij\sigma} h_{ij}(\sigma) \mathbf{c}_{i\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{j\sigma} + \text{const} \end{aligned} \quad (1)$$

при определенном среднем числе частиц, зависящем от допирования.

Нахождение самосогласованного решения включает: I) выбор начальных значений $\rho_{i\sigma}$, подстановка их в (1) и диагонализация линеаризованного гамильтониана, собственные векторы и энергии которого имеют вид

$$\chi_{\lambda\sigma}^\dagger = c_{i,\sigma}^\dagger W_{i,\lambda}(\sigma), \quad h_{i,j}(\sigma) W_{j,\lambda} = W_{i,\lambda} E_{\lambda\sigma}; \quad (2)$$

II) вычисление новых ПП и величины Δ – меры расогласования новых и старых ПП. Далее повторение таких же итераций ν раз с использованием новых ПП в качестве начальных до тех пор, пока $\Delta(\nu)$ не станет достаточно малой величиной. Начальные значения заселенностей узлов для старта итерационной процедуры характеризуем случайным некоррелированным разбросом спинов на узлах при постоянной плотности заряда: $S_{zi} = (\rho_{i1} - \rho_{i2})/2 \sim (1-p)x_i$, где

x_i – набор случайных чисел в интервале $(-0.5, 0.5)$ и p – допирование. Наблюдения за счетом показывают, что при малых температурах $kT < 0.02|t|$ итерационная процедура расходится. Но при $kT > 0.02|t|$ имеет место ограниченная сходимость. Величина $\Delta(\nu)$ уменьшается за 100 итераций на три порядка, но дальше при $\nu > 100$ варьируется вокруг одних и тех же значений, не уменьшаясь. В то же время спиновая структура и основные характеристики остаются неизменными, начиная с $\nu \sim 50$. Стабильность результирующей спиновой структуры, малая величина $\Delta(\nu)$, независимость от ν многих физических величин при больших ν позволяют считать, что при $\nu = 50 \div 100$ результат является приближенно самосогласованным и полученное состояние отражает свойства одной из метастабильных структур кластера. Усреднение любой физической величины по структурам состоит в суммировании результатов для каждой из структур с соответствующим весовым множителем $\exp(-\langle H \rangle / kT)$.

Наиболее наглядно эволюция состояния системы и самоорганизация спиновых структур в ходе итераций демонстрируются на рис.1. Точками на нем от-

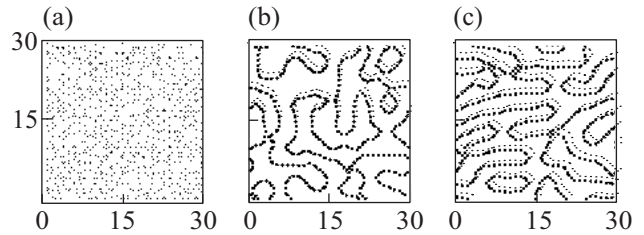


Рис.1. Представление распределения спинов кластера из 30×30 узлов (а) для начального шага ($\nu = 0$) итерационной процедуры и (б) после $\nu = 50$ шагов для одной из структур с периодическими граничными условиями при допировании $p = 0.125$. Точки отмечают координаты “F-связей” (форма доменов после 100-го шага совпадает с тем же при $\nu = 50$). (с) Одна из структур доменов при орторомбическом искажении ($t_x - t_y = 0.1t$) и том же допировании

мечены “ферромагнитные” связи (F-связи), то есть те связи соседних узлов, средние спины которых одинаково направлены: $S_{zi} S_{zj} > 0$. Если в начальном распределении спины некоррелированы, то при числе итераций $\nu \sim 50$ F-связи объединены в линии, представляющие собой доменные стенки, разделяющие AF домены. При искажении тетрагональной симметрии, например, при различии параметров перескока по x - и y -связям, домены вытягиваются вдоль оси с большим $|t|$.

При кажущейся неупорядоченности возникающих структур они обладают характерными спектральными

ми свойствами. В этом можно убедиться при расчете структурных факторов системы $Z(q), R(q)$, описывающих распределения средних квадратов фурье-компонент спина и заряда. Для MF решений с периодическими граничными условиями эти величины разлагаются в ряды по конечному числу гармоник $q_m = 2\pi(m_x, m_y)/30$. На рис.2 представлены карты

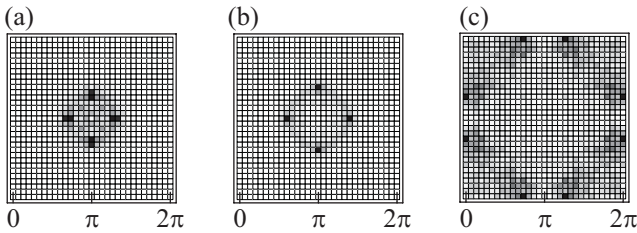


Рис.2. Карты плотности симметризованных и усредненных квадратов фурье-компонент спина $Z(q)$ (а) при допировании $p = 0.125$ и (б) при $p = 0.2$; (с) – то же для фурье-компонент заряда, $R(q)$ при $p=0.2$

плотности квадратов фурье-гармоник с четко выраженными пиками при несоизмеримых (IC) квазимульсах q_{IC} в окрестности точки $Q = (\pi, \pi)$ для спинов либо вокруг точек, эквивалентных $q = (0, 0)$, для зарядов. Зависимость параметра несоизмеримости $\Delta q(p) = |q_{IC} - Q|$ от допирования качественно повторяет наблюдаемую зависимость [10]. Таким образом, даже в отсутствие строго периодических страйпов фурье-компоненты заряда и спина имеют пики в областях q , характерных для периодических страйп-структур.

Другая важная характеристика – плотность состояний $DOS(\omega)$. Для кластера с дискретным набором одноэлектронных уровней $E_{\lambda\sigma}$, характерных для определенной спиновой структуры, плотность состояний рассчитывалась по формуле $DOS(\omega) = \sum_{\lambda\sigma} \delta(E_{\lambda\sigma} - \omega)$, в которой в качестве уширенной δ -функции использовалась лоренцева форма с параметром $\gamma = 0.02t$. Результат усреднялся по ~ 300 структурам. На рис.3 приведены типичные зависимости

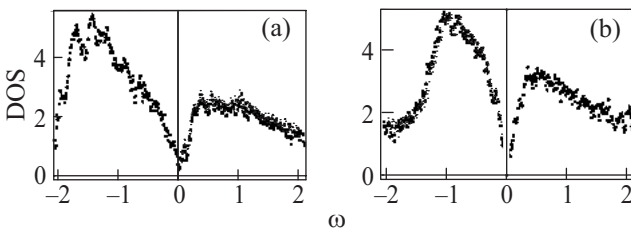


Рис.3. Плотность состояний $DOS(\omega)$ (в единицах $[100/t]$) как функция частоты $\omega = E - \mu$ (в единицах $[t]$) для допирования: (а) $p = 0.125$ и (б) $p = 0.25$

ти $DOS(\omega)$ вблизи уровня Ферми для допирования $p = 0.125$ и 0.2 . Вывод: спиновые структуры формируются

таким образом, что щель в плотности состояний возникает именно на уровне Ферми во всей области допирования $0.1 < p < 0.3$, хотя сам уровень Ферми существенно меняется с допированием. Это свойство является отличительной чертой псевдощели в Vi -содержащих купратах. Естественно ассоциировать полученную щель с псевдощелью. Важно, что при фиксированном допировании разброс $\Delta\mu$ химического потенциала среди существенных структур оказывается меньше, чем ширина псевдощели. Усреднение по структурам не замазывает псевдощели. Явление подобно образованию щели в кулоновских стеклах – полупроводниках [13, 14], где распределение зарядов по случайно расположенным донорам и акцепторам организуется так, что щель в $DOS(\omega)$ также возникает именно на уровне Ферми.

Таким образом, привязанность щели к химическому потенциалу независимо от допирования не является свойством только сверхпроводящего состояния, но может иметь место и в нормальном состоянии спиновых стекол. Несмотря на а) ограниченную применимость MF метода к коррелированным системам и б) конечность кластера, результаты подтверждают вывод о том, что PG обязана формированию спиновых структур с AF доменами или, в других терминах [7], рассеянием на спиновых флуктуациях AF типа.

1. A. Kanigel, M. R. Norman, M. Randeria et al., Nature Physics **2**, 447 (2006).
2. H. B. Yang, J. D. Rameau, P. D. Johnston et al., Nature **456**, 77 (2008).
3. D. LeBoeuf, N. Doiron-Leyraud, J. Levallois et al., Nature **450**, 533 (2007).
4. N. Doiron-Leyraud, C. Proust, D. LeBoeuf et al., Nature **447**, 565 (2007).
5. J. Lee, K. Fujita, A. R. Schmidt et al., Science **325**, 1099 (2009).
6. U. Chatterjee, M. Shi, D. Ai et al., Nature Physics **6**, 99 (2010).
7. М. В. Садовский, УФН **171**, 539 (2001).
8. J. Schmalian, D. Pines, and B. Stojkovic, Phys. Rev. B **60**, 667 (1999).
9. Э. Э. Кучинский, М. В. Садовский, ЖЭТФ **115**, 1765 (1999).
10. S. A. Kivelson, I. P. Bindlos, E. Fradkin et al., Rev. Mod. Phys. **75**, 1201 (2003).
11. A. J. Millis and M. R. Norman, Phys. Rev. B **76**, 220503 (2007).
12. М. Я. Овчинникова, Письма в ЖЭТФ **88**, 712 (2008).
13. Б. И. Шкловский, Ф. Л. Эфрос, Электронные свойства легированных полупроводников, М.: Наука, 1979.
14. S. A. Bazylo, V. A. Opischuk, and A. Rosengren, Phys. Rev. B **70**, 024201 (2004).