

# Перестройка поверхности Ферми ВТСП купратов в сильном магнитном поле

И. А. Макаров<sup>+1)</sup>, С. Г. Овчинников<sup>+\*</sup>, Е. И. Шнейдер<sup>+∇</sup>

<sup>+</sup> Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отд. РАН, 660036 Красноярск, Россия

<sup>\*</sup> Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, Россия

<sup>∇</sup> Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М.Ф. Решетнева, 660014 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 18 мая 2009 г.

Рассматривается влияние сильного магнитного поля на электронную структуру ВТСП купратов. Исследование проводится в рамках  $t - t' - t'' - J^*$  модели, при этом эффект действия сильного магнитного поля учтен не только в виде зеемановского расщепления одноэлектронных уровней, но также в числах заполнения состояний с разными проекциями спина и в формировании спиновых корреляционных функций. Поле считается настолько сильным, что все спины выстраиваются по полю. В результате получена перестройка поверхности Ферми от четырех дырочных карманов вокруг нодальной точки  $(\pi/2, \pi/2)$  в парамагнитной фазе к большому дырочному карману вокруг  $(\pi, \pi)$  в ферромагнитной фазе. По мере уменьшения величины магнитного поля был обнаружен ряд квантовых фазовых переходов, проявляющихся в изменении топологии поверхности Ферми. Перестройка поверхности Ферми с уменьшением поля и при росте допирования в отсутствие поля качественно одинакова.

PACS: 71.18.+y, 73.43.Nq, 74.25.Jb, 74.72.-h

1. Несмотря на то, что электронная структура ВТСП купратов является важнейшей их характеристикой в нормальной фазе, для нее до сих пор не существует единого представления. Различные теоретические и экспериментальные работы предлагают свои картины зонной структуры и поверхности Ферми. В частности, в экспериментах по ARPES [1] в слабодопированном режиме для LSCO поверхность Ферми представляет собой четыре дуги, тогда как в работе [2] для соединения  $\text{Na}_{2-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_2\text{O}_2\text{Cl}_2$  эти дуги настолько растянуты, что могут рассматриваться как дырочные карманы. Последнее утверждение поддерживается исследованиями квантовых осцилляций [3], в которых измерялась площадь двумерной поверхности Ферми, а значит, и количество носителей в системе. Причем факт того, что число дырок, предлагаемое экспериментом, не соответствует реальной степени допирования соединения, привел к заключению о наличии частей поверхности Ферми, относящихся к электронам, и которые невидимы в ARPES. К тому же выводу пришли при исследовании эффекта Холла на однослойных и двухслойных купратах [4], в котором константа Холла при уменьшении температуры меняла свой знак, тем самым обозначая смену основного типа носителей. Однако в связи с этими работами хочется обратить внимание не столь-

ко на различия в картинах электронной структуры, сколько на различия в условиях эксперимента. Поскольку ARPES производится в отсутствие магнитного поля, а квантовые осцилляции и эффект Холла – только при наличии сильного поля, естественно возникает вопрос, можно ли сравнивать эти результаты и вообще, каков эффект влияния магнитного поля на электронную структуру. В настоящей работе мы изучили этот эффект и обнаружили изменение топологии поверхности Ферми под действием сильного магнитного поля на примере однослойного купрата  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . Для исследования используется  $t - t' - t'' - J^*$ -модель, параметры которой выводятся из микроскопической многозонной  $p-d$ -модели. Помимо зеемановского расщепления вырожденных по энергии одночастичных состояний с разной проекцией спина, имеет место влияние поля на числа заполнения соответствующих состояний и спиновые корреляционные функции, причем последний эффект будет преобладающим. Используется предположение о достаточно сильном магнитном поле, которое упорядочивает спины на узлах в одном направлении (будем считать, что это спин вверх), тогда как переворот в состояние с противоположной проекцией спина возможен за счет конечной температуры. Показано, что при переходе от парамагнитной фазы к ферромагнитной поверхность Ферми меняет ориентацию от центрированной вокруг точки  $(\pi/2, \pi/2)$  к центрирован-

<sup>1)</sup>e-mail: macplay@mail.ru

ной вокруг  $(\pi, \pi)$  для зоны квазичастиц со спином вниз (против поля). Также в самой ферромагнитной фазе при варьировании величины магнитного поля имеет место ряд квантовых фазовых переходов, выраженных в изменении топологии поверхности Ферми для зоны квазичастиц со спином вверх.

2. В своем исследовании ВТСП купратов мы отталкиваемся от однослойного соединения  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . Поскольку это соединение является системой с сильными электронными корреляциями, исходную многозонную  $p$ - $d$ -модель Хаббарда с реалистичными параметрами, полученными в схеме LDA+GTB [5] (первопринципные LDA расчеты + обобщенный метод сильной связи [6]), в области низкоэнергетических возбуждений мы сводим к  $t - J^*$ -модели, получающейся из модели Хаббарда в пределе  $U \gg t$  [7–10]. Эта модель записывается для дырочных возбуждений, образующих зоны квазичастиц, описываемых операторами Хаббарда  $X_f^{\sigma S} = |\sigma\rangle\langle S|$  и  $X_f^{\bar{\sigma} S} = |\bar{\sigma}\rangle\langle S|$ , здесь  $|\sigma\rangle$  – локальное состояние одной дырки с проекцией спина  $\sigma$ , а  $|S\rangle$  – двухдырочный синглет Жанга–Райса. Из микроскопической теории [5] следует необходимость учитывать перескоки на другие ячейки до третьего ближайшего соседа включительно, поэтому  $t - J^*$ -модель переходит в  $t - t' - t'' - J^*$  модель,  $J^*$  означает, что учитываются не только обменные слагаемые, но и трехцентровые коррелированные перескоки. Под действием поля двукратно вырожденное по энергии в парамагнитной фазе одночастичное состояние расщепляется на состояния с энергиями  $\epsilon_1 - \mu_B H$  и  $\epsilon_1 + \mu_B H$ . Поправка  $\mu_B H$ , связанная с взаимодействием спина с магнитным полем, даже при величине поля 300 Тл является незначительной (порядка 0.01 эВ). Определение чисел заполнения одночастичных состояний можно произвести с помощью совместного решения уравнений на химпотенциал

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

где  $x$  – степень допирования дырками, и условия полноты базиса

$$\sum_{\sigma} X^{\sigma\sigma} + X^{SS} = 1. \quad (2)$$

Общее число состояний для одночастичного сектора гильбертова пространства  $\sum_{\sigma} p_{\sigma} = 1 - x$ . Если считать, что спин с проекцией  $\sigma$  направлен по полю, то для состояния с этой проекцией число заполнения

$$p_{\sigma} = \langle X_f^{\sigma\sigma} \rangle = (1 - n_0) (1 - x), \quad (3)$$

а со спином вниз

$$p_{\bar{\sigma}} = \langle X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \rangle = n_0 (1 - x), \quad (4)$$

где  $n_0$  – концентрация перевернутых против поля спинов при определенной температуре:

$$n_0 = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{2\mu_B H}{kT}\right)}. \quad (5)$$

Итак, гамильтониан  $t - t' - t'' - J^*$ -модели имеет вид

$$H = \sum_{f\sigma} (\epsilon_1 - 2\sigma\mu_B H - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_f (\epsilon_2 - 2\mu) X_f^{SS} + \sum_{fg\sigma} t_{fg} X_f^{\sigma\sigma} X_g^{\sigma\sigma} + \sum_{fg\sigma} J_{fg} (X_f^{\sigma\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma}\sigma} - X_f^{\sigma\sigma} X_g^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}) - \sum_{m \ln \sigma} \frac{\tilde{t}_m \tilde{t}_{ln}}{E_{ct}} (X_m^{S\sigma} X_l^{\sigma\bar{\sigma}} X_n^{\bar{\sigma}S} - X_m^{S\sigma} X_l^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_n^{\sigma S}), \quad (6)$$

где  $J_{fg} = 2\tilde{t}_{fg}^2/E_{ct}$  – константа эффективного обменного взаимодействия за счет перескоков в нижнюю хаббардовскую зону и обратно,  $t_k$  – внутризонные перескоки между ячейками,  $\tilde{t}_k$  – межзонные перескоки между ячейками,  $E_{ct}$  – диэлектрическая щель с переносом заряда.

Для нахождения спектра квазичастичных возбуждений мы пользуемся методом уравнений движения для построенной на операторах Хаббарда функции Грина  $\langle\langle X_f^{\alpha} | X_g^{\beta} \rangle\rangle$ . Приведенная функция Грина является элементом матричной функции Грина, связанной с привычной двухвременной запаздывающей функцией Грина  $G(\mathbf{r}, E) = \langle\langle c_{f+r} | c_f \rangle\rangle_E$  выражением

$$G(\mathbf{r}, E) = \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\sigma}(\alpha) \gamma_{\sigma}^*(\beta) D^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, E), \quad (7)$$

в котором коэффициенты  $\gamma(\alpha)$  определяются непосредственно из произведений волновых функций ячейки, участвующих в переходе с корневым вектором  $\alpha$ . Точное уравнение движения для оператора  $X_f^{\sigma S}$  имеет вид

$$i\dot{X}_f^{\sigma S} = [X_f^{\sigma S}, H] = (\epsilon_2 - \epsilon_1 - \mu + 2\mu_B H) X_f^{\sigma S} + L_f^{\sigma S}, \quad (8)$$

в часть  $L_f^{\sigma S}$  которого входят слагаемые, образующие функции Грина более высокого порядка. Для их проектирования на базис одночастичных операторов нами используется метод неприводимых операторов,

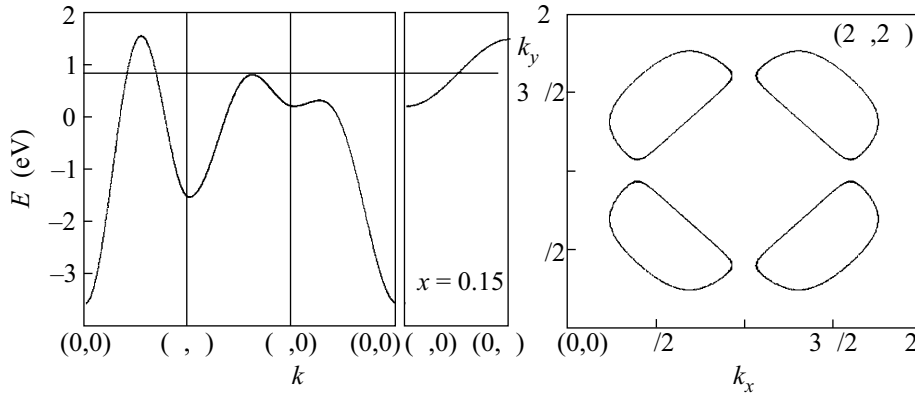


Рис.1. Зонная структура и поверхность Ферми для парамагнитной фазы ( $x = 0.15$ )

ранее использовавшийся в работах [11–13]. В соответствии с этим методом оператор  $L_f^{\sigma S}$  преобразуется следующим образом:

$$L_f^{\sigma S} = \sum_{s\beta} T_f^{(\sigma S)\beta} X_s^\beta + L_f^{\sigma S(irr)}, \quad (9)$$

где

$$T_f^{(\sigma S)\beta} = \left\langle \left\langle L_f^{\sigma S}, X_s^\beta \right\rangle \right\rangle / \left\langle \left\langle X_s^\beta, X_s^\beta \right\rangle \right\rangle. \quad (10)$$

Выделившиеся в процессе усреднения кинетические  $\langle X_f^{\sigma S} X_g^{\sigma S} \rangle$  и спиновые  $\langle X_f^{\sigma \bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma} \sigma} \rangle$  корреляторы являются важными характеристиками системы, значительно влияющими на электронную структуру [11–13]. Поскольку мы считаем, что поле, приложенное к нашему соединению, достаточно велико, чтобы упорядочить все спины в одном направлении, то получаем, что спиновые корреляторы имеют ферромагнитный тип и не зависят от расстояния:

$$\langle X_f^{\sigma \bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma} \sigma} \rangle = 0, \quad \langle X_f^{\sigma \sigma} X_g^{\sigma \sigma} \rangle = p_\sigma^2.$$

Кинетические корреляторы вычисляются самосогласованно посредством спектральной теоремы с функцией Грина:

$$\langle \langle X_k^{\sigma S} | X_k^{S\sigma} \rangle \rangle = \frac{p_\sigma + x}{E - E_{k\sigma}}, \quad (11)$$

причем

$$E_{k\sigma} = \varepsilon_2 - \varepsilon_1 - \mu + 2\mu_B H + (p_\sigma + x) t_k + p_{\bar{\sigma}} J_0 + p_{\bar{\sigma}} (p_\sigma + x) \frac{\tilde{t}_k^2}{E_{ct}} + \Sigma_\sigma(k), \quad (12)$$

а массовый оператор

$$\Sigma_\sigma(k) = \frac{1}{p_\sigma + x} \frac{1}{N} \times$$

$$\times \sum_q \left[ t_q - J_{k-q} - x \frac{\tilde{t}_q^2}{E_{ct}} - (p_\sigma + x) \frac{2\tilde{t}_q \tilde{t}_k}{E_{ct}} \right] K_q,$$

где  $K_q$  – фурье-образ кинетического коррелятора.

3. Исследование парамагнитной фазы повторяет результаты работы [13], в которой было показано, что в системе присутствуют антиферромагнитные корреляции ближнего порядка, проявляющиеся при учете спиновых корреляторов. Эти корреляции преобразуют зонную структуру к виду, характерному для антиферромагнитной фазы с максимумом в точке  $(\pi/2, \pi/2)$  (рис.1) для слабодопированных составов. Приложенное поле выделяет одночастичное состояние с спином  $\sigma$  и, следовательно, соответствующее квазичастичное возбуждение со спином  $\bar{\sigma}$ , которое на рис.2 образует широкую зону с максимумом в  $(\pi, \pi)$ . Значительная ширина этой зоны (приблизительно 8 эВ) обусловлена слагаемым  $(p_\sigma + x) t_k$  в (12). Вторая узкая зона описывает квазичастицу со спином  $\sigma$ , характеризующую переход из менее вероятного состояния  $\bar{\sigma}$  в синглетное состояние. Видно, что поверхность Ферми претерпела качественные изменения при включении поля: из четырех дырочных карманов вокруг  $(\pi/2, \pi/2)$  она превратилась в один большой дырочный карман вокруг  $(\pi, \pi)$ .

Представленная зонная структура для ферромагнитной фазы получена с учетом кинетических корреляторов, вычисленных самосогласованно. Зависимость от допирования кинетических корреляторов показана на рис.3. Величина коррелятора между ближайшими соседями  $K_{01}$  самая большая и растет почти линейно с увеличением количества дырочных носителей. Корреляции между вторыми ближайшими соседями  $K_{11}$  возрастают в положительной области вплоть до оптимального уровня допирования, а затем спадают и меняют знак возле  $x = 0.3$ . Причина, по которой ширина зоны со спином вниз оказа-

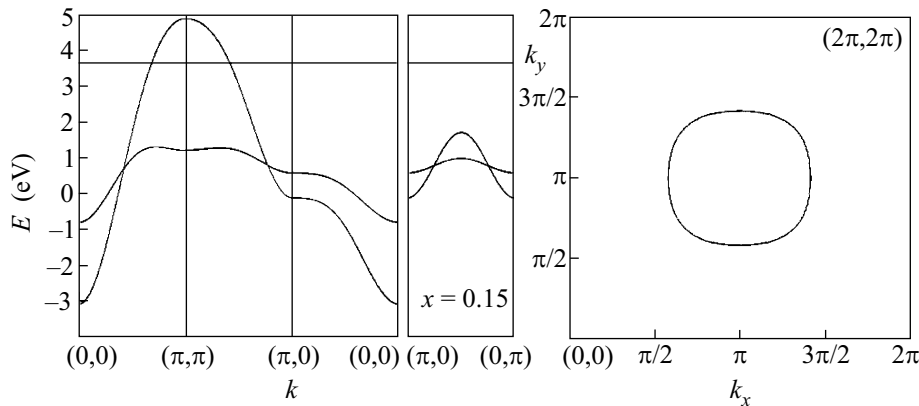


Рис.2. Зонная структура и поверхность Ферми для ферромагнитной фазы ( $T = 10$  К,  $H = 300$  Тл,  $x = 0.15$ ). Широкая и узкая зоны соответствуют квазичастицам со спином вниз и вверх

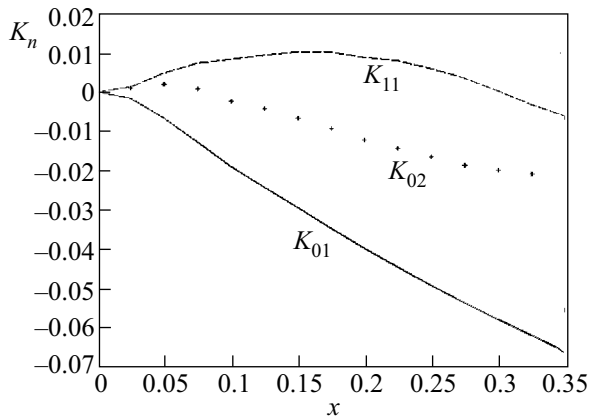


Рис.3. Зависимость кинетических корреляторов от допирования в ферромагнитной фазе

лась много больше, чем для спина вверх, достаточно проста. На каждом узле решетки при  $x = 0$  в сильном магнитном поле все спины смотрят вверх. Добавить дырку со спином вверх невозможно из-за принципа Паули, и только допирование порождает синглеты Жанга–Райса и позволяет двигаться дыркам со спином вверх. Аналогичную роль играют спиновые флуктуации при конечной температуре. Поэтому кинетическая энергия дырок со спином вверх пропорциональна  $x + p_{\bar{\sigma}} \ll 1$ . В то же время дырка со спином вниз свободно перемещается на фоне недопированного ферромагнитного диэлектрического состояния. Ситуация похожа на спиновый полярон в ферромагнитном полупроводнике [14, 15]. Поскольку при добавлении второй дырки на узел формируется синглет Жанга–Райса, то это соответствует задаче о поляроне с антиферромагнитным обменным взаимодействием носителя и спина. Обратим также внимание на то, что зонная структура на рис.2 соответствует состоянию спинового полуметалла, в котором на уровне

Ферми присутствуют только состояния с одной проекцией спина [16]. Иначе говоря, в этом состоянии имеется стопроцентная спиновая поляризация носителей тока.

4. Если рассмотреть случай, когда величина поля и температуры одного порядка, можно ясно наблюдать ряд фазовых переходов Лифшица [17, 18]. Такая картина имеет место в том случае, если температуры хватает на то, чтобы за счет увеличения заселенности одночастичного уровня со спином  $\bar{\sigma}$  увеличить в достаточной степени ширину узкой зоны. При данных условиях химпотенциал попадает в менее широкую зону и поверхность Ферми существенно изменяется. Мы будем исследовать эволюцию поверхности Ферми при постоянном уровне допирования  $x = 0.25$  и температуре  $T = 150$  К, варьируя величину поля  $H$ . До величины поля  $H = 122$  Тл картина качественно такая же, как на рис.2: имеет место большой дырочный карман со спином вниз. После  $H = 122$  Тл помимо исходного дырочного кармана начинают формироваться еще четыре кармана со спином вверх, см. рис.4а (это соответствует отношению  $H/T$  приблизительно 0.8). При дальнейшем уменьшении поля дырочные карманы разрастаются (рис.4б) и затем образуют один электронный карман и одну дырочную область сложной формы (рис.4с). Последующая эволюция представлена на рис.5. Электронный карман постепенно уменьшается (рис.5а) и при  $H/T = 0.7$  исчезает, оставляя на поверхности Ферми два больших дырочных кармана (рис.5б). Таким образом, мы видим, что в зависимости от поля возможны различные соотношения дырочных и электронных носителей в системе.

5. В данной работе рассматривалось в простейшем (по отношению к магнитным корреляциям) приближении влияние магнитного поля на зонную структу-

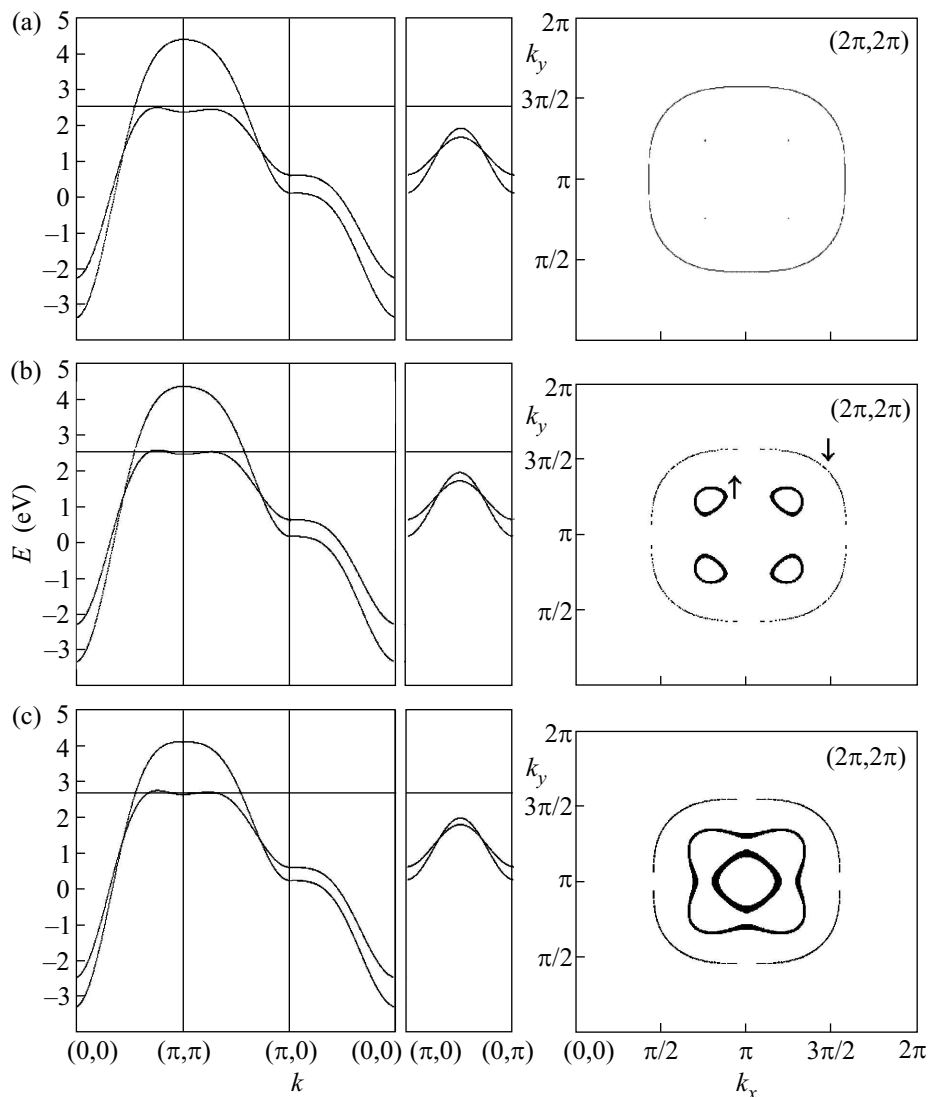


Рис.4. Зонная структура и поверхность Ферми LSCO для разных проекций спина при  $T = 150$  К,  $x = 0.25$  и поле  $H = 122$  Тл (а); 121 Тл (b); 117 Тл (с)

ру и поверхность Ферми. Оказалось, что в сильном поле зонная структура и поверхность Ферми для соединения  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  существенно отличается от ситуации в парамагнитной фазе, и это вызвано подавлением антиферромагнитных корреляций. При уменьшении величины магнитного поля в области температур, сравнимых по энергии с энергией поля, наблюдается ряд трансформаций поверхности Ферми, которые являются квантовыми фазовыми переходами [17, 18]. Картина трансформаций очень похожа на эволюцию поверхности Ферми в парамагнитной фазе с ростом допирования [11–13]. Рассматриваемые изменения обусловлены достаточной шириной зоны квазичастиц со спином вверх для пересечения с уровнем химпотенциала. Следует отметить, что для

реальных полей 50–60 Тл, в которых выполнены измерения квантовых осцилляций в настоящее время, вряд ли антиферромагнитные корреляции полностью подавлены. Спин-ориентационный переход, согласно измерениям на монокристаллах  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  [19], происходит при  $H \approx 5$  Тл, так что при  $H > 5$  Тл уже имеется ферромагнитная составляющая. Тем не менее, поля  $H \sim 50$  Тл являются промежуточными в том смысле, что присутствуют одновременно и ферромагнитная, и антиферромагнитная составляющие спиновых корреляций. Поэтому для исследования электронной структуры при таких полях требуется дополнительный расчет спиновых корреляторов во внешнем поле, что планируется в последующей работе.

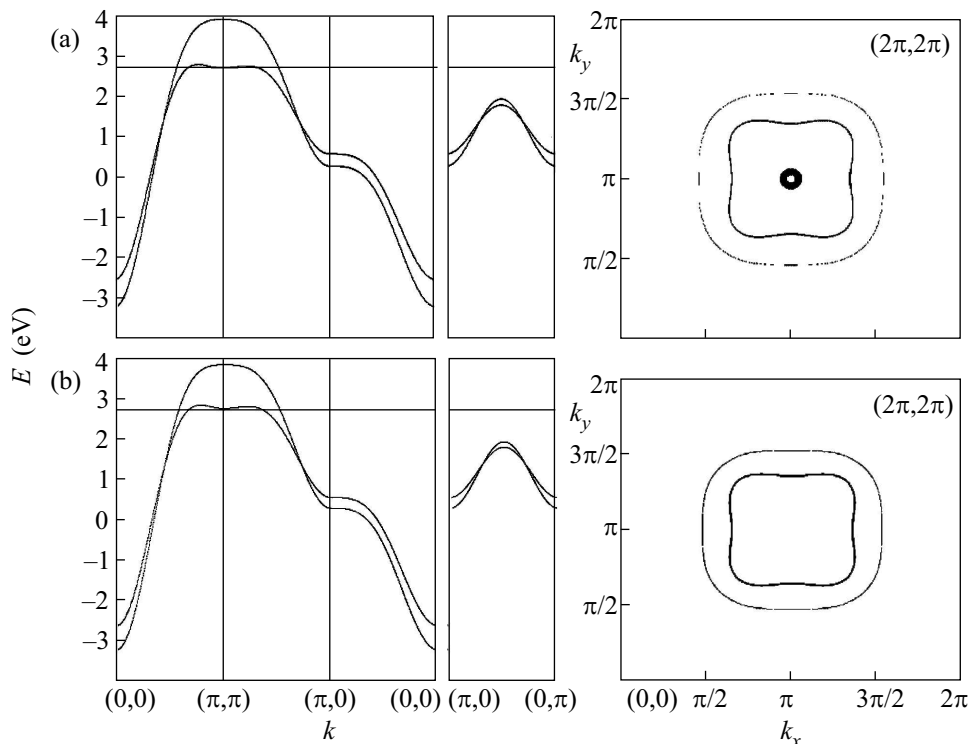


Рис.5. Зонная структура и поверхность Ферми LSCO для разных проекций спина при  $T = 150$  К,  $x = 0.25$  и поле  $H = 109$  Тл (а); 105 Тл (б)

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 09-02-00127, Интеграционного проекта СО РАН – УРО РАН № 40 и программы Президиума РАН №5.7

1. T. Yoshida, X. J. Shou et al., Phys. Rev. B **74**, 224510 (2006).
2. K. Shen et al., Science **307**, 901-904 (2005).
3. N. Doiron-Leyraud et al., Nature **447**, 565 (2007).
4. D. LeBoeuf, N. Doiron-Leyraud et al., Nature **450**, 533 (2007).
5. M. Korshunov, V. Gavrichkov, S. Ovchinnikov et al., Phys. Rev. B **72**, 165104 (2005).
6. S. G. Ovchinnikov and I. S. Sandalov, Physica C **161**, 607 (1989).
7. Л. Н. Булаевский, Э. Л. Нагаев, Д. И. Хомский, ЖЭТФ **54**, 1562 (1968).
8. K. A. Chao, J. Spalek, and A. M. Oles, J. Phys. C **10**, L271 (1977).
9. J. E. Hirsch, Phys. Rev. Lett. **54**, 1317 (1985).
10. V. I. Belinicher, A. L. Chernyshev, and V. A. Shubin, Phys. Rev. B **53**, 335 (1996).
11. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, Phys. Rev. B **59**, 11949 (1999).
12. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, ЖЭТФ **127**, 686 (2005).
13. M. Korshunov and S. Ovchinnikov, Eur. Phys. J. B **57**, 271 (2007).
14. Э. Л. Нагаев, ЖЭТФ **56**, 1013 (1969).
15. Ю. А. Изюмов, М. В. Медведев, ЖЭТФ **59**, 553 (1970).
16. В. Ю. Ирхин, М. И. Кацнельсон, УФН **164**, 705 (1994).
17. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **38**, 1569 (1960).
18. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов*, М.: Наука, 1971.
19. А. Д. Балаев, А. Б. Быков, Л. Н. Демьянец и др., ЖЭТФ **100**, 1365 (1991).