

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
«Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр
Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН)
Обособленное подразделение «ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМ. Л.В.
КИРЕНСКОГО СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ
АКАДЕМИИ НАУК» (ИФ СО РАН)

На правах рукописи



Кузьмин Валерий Ипполитович

Влияние ближнего порядка на электронные и магнитные свойства сильно
коррелированных систем

Специальность 01.04.07. Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
д.ф.-м.н., проф. С. Г. Овчинников

Красноярск – 2020

Оглавление

Введение	4
1. Актуальность темы исследования.....	4
2. Цели и задачи исследования.....	6
3. Положения, выносимые на защиту.....	6
4. Научная новизна и значимость работы.....	7
5. Апробация результатов.....	8
6. Личный вклад соискателя.....	9
7. Структура работы.....	9
Глава 1. Обзорная глава	10
1.1. Электронная структура ВТСП купратов и модели ВТСП.....	10
1.2. Явление спинового кроссовера и эффективный спиновый гамильтониан для модели Канамори.....	23
1.3. Обзор теоретических методов исследования сильно коррелированных систем с учетом ближнего порядка.....	31
1.4. Кластерная теория возмущений.....	36
1.5. Цели и задачи работы.....	39
Глава 2. Сравнение электронной структуры модели Хаббарда и t-J моделей	41
Глава 3. Эволюция псевдощели и спиновых корреляций с допированием и температурой в модели Хаббарда	48
3.1. Концентрационная зависимость электронной структуры купратов с дырочным допированием в модели Хаббарда.....	51
3.2. Температурная зависимость электронной структуры купратов с дырочным допированием в модели Хаббарда.....	57

3.3. Сравнение эволюции спектральных свойств с допированием и температурой с переходами Лифшица с перестройкой топологии поверхности Ферми.....	64
Глава 4. Эффекты за пределами модели Гейзенберга и ближний магнитный порядок в системах со спиновыми кроссоверами.....	68
4.1. Негейзенберговские эффекты и ближний магнитный порядок в рамках эффективного спинового гамильтониана для двухзонной модели Канамори в рамках кластерной теории среднего поля с кластером 2×2	70
4.2. Эффекты конечного размера кластера.....	76
Заключение.....	81
Перечень сокращений.....	84
Список литературы.....	86

Введение

1. Актуальность темы исследования

Оксиды переходных металлов проявляют широкое разнообразие электронных и магнитных свойств, таких как высокотемпературная сверхпроводимость (ВТСП), колоссальное магнетосопротивление, магнитные переходы под внешним воздействием. Это не только делает их перспективными материалами в электронике, но и представляет фундаментальный интерес.

Теоретическое понимание свойств различных материалов является одним из главных вызовов к современной теории конденсированного состояния. В этой области огромный прогресс достигнут благодаря теории функционала плотности (DFT) [1,2], развитие которой привело к возможности количественного описания основного состояния и зонной структуры различных соединений [3]. Однако при описании свойств оксидов переходных металлов, свойства которых определяются в значительной степени сильными электронными корреляциями, методы на базе DFT испытывают значительные трудности. Наиболее известный пример – это некорректное описание электронной структуры купрата La_2CuO_4 [4] в приближении локальной плотности (LDA - local density approximation), в рамках которого было получено металлическое состояние данного соединения вместо имеющего место в природе диэлектрического. Проблемы в описании электронной структуры в рамках одноэлектронной зонной теории возникли даже с более простыми соединениями типа NiO и MnO [5].

Таким образом, из-за влияния сильных корреляций и существенной локализации d -электронов естественно подходить к описанию оксидов переходных металлов, стартуя не с зонного, а с атомного предела. Для изучения сильно коррелированных систем активно применяются упрощенные

микроскопические модели [6], в которых имеются только самые базовые физические ингредиенты. Наиболее фундаментальный пример – модель Хаббарда [7], которая оказывается эффективной моделью для реалистичной $p - d$ модели купратных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) [8]. В данной диссертации в рамках простейших моделей сильных корреляций рассмотрены два класса систем, значительная часть представителей которых является оксидами переходных металлов: купратные ВТСП и системы со спиновыми кроссоверами. В то время как низкоэнергетические свойства CuO_2 слоев описываются моделью Хаббарда (однозонной), для описания спинового кроссовера требуется как минимум две орбитали для реализации высокоспинового и низкоспинового состояний. Тем не менее, два данных класса систем объединяет то, что модели хаббардовского типа применимы для описания основных физических процессов в этих системах.

Понимание физических свойств сильно коррелированных систем и исследование микроскопических моделей сильных корреляций является актуальной задачей. Настоящая работа посвящена исследованию электронных и магнитных свойств ВТСП купратов, а также магнитных свойств систем со спиновыми кроссоверами в рамках простейших микроскопических моделей. Особенное внимание уделяется псевдощелевому состоянию ВТСП купратов в нормальной фазе, из которой возникает сверхпроводимость, и понимание которой до сих пор далеко не является полным. В частности, несмотря на огромное количество теоретических работ, посвященных псевдощелевому состоянию, температурной зависимости псевдощели до сих пор недостает систематического исследования. Представленные в работе результаты получены с помощью кластерных методов на основе метода точной диагонализации, который позволяет осуществлять точный учет корреляций внутри кластера конечного размера.

2. Цели и задачи исследования

Основной целью работы является исследование электронных и магнитных свойств ВТСП купратов и систем со спиновыми кроссоверами в рамках микроскопических моделей сильно коррелированных электронов.

Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие задачи:

1. Исследовать вопрос о соответствии электронной структуры двумерной модели Хаббарда и ее эффективной низкоэнергетической $t - J$ модели.
2. Исследовать эволюцию электронной структуры в двумерной модели Хаббарда с дырочным допированием и изучить, каким образом на нее влияет ближний магнитный порядок в системе. Исследовать эволюцию электронной структуры в двумерной модели Хаббарда с ростом температуры и изучить, каким образом на нее влияет ближний магнитный порядок в системе. Сопоставить изменения спектральных свойств с допированием и с температурой.
3. Исследовать поведение локальных и ближних спиновых корреляционных функций в окрестности спинового кроссовера по давлению в рамках эффективного низкоэнергетического гамильтониана для модели Канамори в зависимости от температуры и давления.

3. Положения, выносимые на защиту

1. Кластерная теория возмущений может использоваться для выяснения критериев применимости упрощенных вариантов $t - J$ модели вместо модели Хаббарда вблизи половинного заполнения.

2. Изменение критериев применимости упрощенных вариантов $t - J$ модели вместо модели Хаббарда при малом допировании может быть получено в рамках кластерной теории возмущений.

3. Для расчета концентрационной зависимости электронной структуры с ростом допирования при нулевой температуре достаточно точно учитывать ближний антиферромагнитный порядок до девятой координационной сферы.

4. Для расчета температурной зависимости электронной структуры при фиксированном допировании достаточно точно учитывать ближний антиферромагнитный порядок до восьмой координационной сферы.

5. Зависимость ближнего магнитного порядка и магнитной восприимчивости от температуры и давления вблизи спинового кроссовера может быть получена в рамках кластерной теории среднего поля.

6. Фазовая диаграмма (Mg, Fe)O и оценка диапазонов давления и температуры, при которых возможно наблюдать возвратное поведение корреляционных функций в эксперименте.

4. Научная новизна и значимость работы

В рамках метода кластерной теории возмущений с точным учетом локальных внутриатомных взаимодействий и взаимодействий между ближайшими соседями внутри кластера произведено детальное сопоставление дисперсии электронов и спектрального веса для модели Хаббарда, которая является фундаментальной моделью сильных электронных корреляций, и ее низкоэнергетических эффективных $t - J$ и $t - J^*$ моделей. Полученные результаты говорят о важности учета трехцентровых коррелированных перескоков при рассмотрении высокоэнергетических особенностей электронной структуры в купратах.

Проведено детальное исследование температурной эволюции электронной структуры в модели Хаббарда и впервые показано, что изменения электронной структуры и ближнего антиферромагнитного порядка с допированием и температурой в значительной степени схожи и происходят в три стадии: сильной псевдощели, слабой псевдощели и ферми жидкости, что коррелирует с данными фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением для ВТСП купратов.

Получены негейзенберговские эффекты вблизи перехода от высокоспиновому к низкоспиновому состоянию в рамках микроскопического гамильтониана и предсказан диапазон давлений и температур, в котором можно наблюдать возвратные переходы в соединении ферропериклаза (Mg,Fe)O.

5. Апробация результатов исследования

Результаты исследования опубликованы в следующих трех статьях в рецензируемых журналах, входящих в список ВАК:

1. V. I. Kuz'min, S. V. Nikolaev, S. G. Ovchinnikov Comparison of the electronic structure of the Hubbard and t - J models within the cluster perturbation theory // Phys. Rev. B 2014, Vol. 90, P. 245104.
2. V. I. Kuz'min, Yu. S. Orlov, A. E. Zarubin, T. M. Ovchinnikova, S. G. Ovchinnikov Magnetism in spin crossover systems: Short-range order and effects beyond the Heisenberg model // Phys. Rev. B 2019, Vol. 100, P. 144429.
3. V. I. Kuz'min, M. A. Visotin, S. V. Nikolaev, S. G. Ovchinnikov Doping and temperature evolution of pseudogap and spin-spin correlations in the two-dimensional Hubbard model // Phys. Rev. B 2020, Vol. 101, P. 115141.

Результаты работы представлены на международных и всероссийских конференциях и школах:

1. Международная зимняя школа физиков-теоретиков «КОУРОВКА-XXXV», ИФМ УРО СО РАН, Екатеринбург, Россия, 2014.
2. School and workshop on strongly correlated electronic systems – novel materials and novel theories, ICTP, Trieste, Italy, 2015.
3. V международная конференция «Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости», ФИАН, Москва, Россия, 2015.

4. XX Юбилейная Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС–20), Екатеринбург, Россия, 2019.

6. Личный вклад соискателя

Личный вклад соискателя состоит в написании вычислительных программ, проведении вычислений, обработке результатов, а также анализе полученных данных и написании статей совместно с научным руководителем.

7. Структура работы

Структура данной диссертации следующая. Глава 1 является обзорной. В ней кратко обсуждаются особенности электронной структуры купратных ВТСП в нормальной фазе, псевдощель, системы со спиновыми кроссоверами, микроскопические модели рассматриваемых в работе систем с сильными электронными корреляциями, подходы к исследованию этих моделей. В главе 2 рассматривается вопрос о соответствии между моделью Хаббарда, которая является фундаментальной моделью сильных электронных корреляций (СЭК), и ее эффективной низкоэнергетической $t - J$ моделью. В главе 3 исследуется эволюция электронной структуры в двумерной модели Хаббарда с допированием и температурой, а также проводится сравнение этих двух случаев. Глава 4 посвящена исследованию эффектов за пределами модели Гейзенберга и поведению ближнего магнитного порядка в системах со спиновыми кроссоверами. В заключении приводятся основные результаты работы. Далее приводится список сокращений. Заканчивается изложение диссертации списком литературы.

Глава 1. Обзорная глава

1.1. Электронная структура ВТСП купратов и модели ВТСП

Высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) на основе меди привлекают к себе высокий интерес на протяжении более чем трех десятилетий. В отличие от обычных сверхпроводников, которые являются металлами, электронная структура которых адекватно описывается в рамках стандартных приближений теории функционала плотности, ВТСП купраты представляют собой слоистые квазидвумерные допированные соединения с СЭК, которые в отсутствие допирования являются антиферромагнитными диэлектриками. Для понимания свойств данных материалов необходимо описывать теоретически их основное диэлектрическое антиферромагнитное состояние и его эволюцию с допированием и температурой. Поэтому большое число теоретических работ посвящено развитию новых методов и исследованию свойств допированных сильно коррелированных систем.

Результаты расчетов зонной структуры в рамках функционала теории плотности в приближении локальной плотности приводят к выводу о металлическом основном состоянии La_2CuO_4 [4], что противоречит экспериментальным данным и говорит о необходимости учета эффектов СЭК в области фазовой диаграммы, близкой к диэлектрическому состоянию [9]. Недавно разработанная наиболее продвинутая схема *ab initio* расчетов позволила корректно рассчитать антиферромагнитное (АФМ) диэлектрическое состояние La_2CuO_4 [10], а также нормальное металлическое состояние с большой поверхностью Ферми для передопированного $\text{La}_{1.75}\text{Sr}_{0.25}\text{CuO}_4$ [11]. Тем не менее, не существует *ab initio* схемы, которая бы позволила вычисление электронных свойств купратов при произвольном допировании и/или температуре. Поэтому

неизбежно применение микроскопического модельного подхода при решении задач, вовлекающих сильные электронные корреляции.

ВТСП купраты имеют весьма сложную атомную структуру, однако их объединяют общие структурные свойства. Все купратные ВТСП соединения получают путем допирования исходных соединений со структурой перовскита. Исходные соединения представляют собой антиферромагнитные диэлектрики, магнитные моменты которых образованы $3d^9$ -электронами меди. Антиферромагнитное состояние является следствием сверхобменного взаимодействия [12]. Всем ВТСП купратам присуща квазидвумерная слоистая структура CuO_2 -слоев, разделенных внеплоскостными ионами редкоземельных металлов. В рамках CuO_2 -слоя каждый атом меди находится в окружении четырех атомов кислорода. Считается, что макроскопические свойства купратов формируются в-основном в CuO_2 -плоскостях, которые вносят основной вклад в низкоэнергетическую электронную структуру [4]. Внеплоскостные слои рассматриваются, как правило, в роли резервуара заряда. Основные методы допирования ВТСП купратов - замещение внеплоскостных ионов (например, La^{3+} на Sr^{2+} в La_2CuO_4 , или Nd^{3+} на Ce^{4+} в Nd_2CuO_4) и замещение кислорода. Дырочное и электронное допирование микроскопически отличаются, поскольку дополнительные электроны приводят к появлению замкнутых $3d$ -оболочек меди.

Схема фазовой диаграммы ВТСП купратов в простейшем приближении, охватывающем только самые основные ее области, представлена на Рисунке 1.1 для дырочно допированного соединения типа $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ и электронно допированного типа $\text{Ne}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$. Стехиометрические соединения являются антиферромагнитными диэлектриками. При ненулевом допировании химический потенциал оказывается в валентной зоне электронов (при дырочном допировании) или дырок (при электронном допировании). В правой части графика АФМ область распространяется на значительно меньшую область допирования, чем в левой.

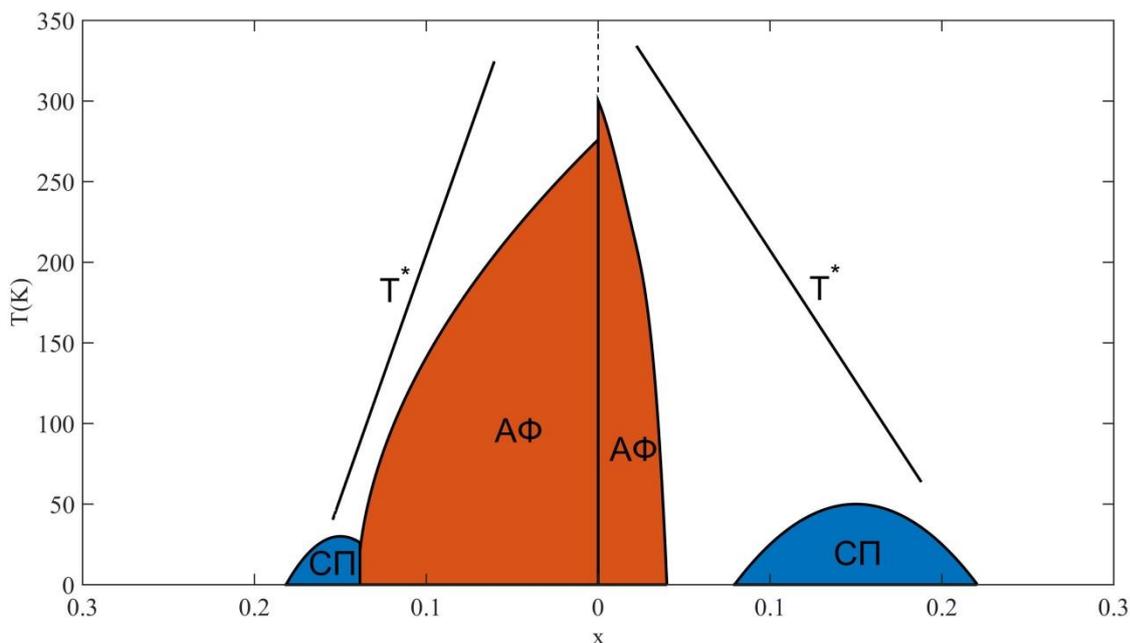


Рисунок 1.1. Упрощенная схематическая фазовая диаграмма ВТСП купратов с дырочным (правая часть графика) и электронным (левая часть графика) допированием x . АФ - обозначение АФМ область, СП - сверхпроводящей фазы.

Привнесение дополнительных электронов в систему увеличивает концентрацию заполненных d -оболочек атомов меди, играя роль диамагнитного разбавления. Дополнительные дырки, напротив, вносят фрустрации в систему спинов меди, связанных антиферромагнитным кинетическим сверхобменным взаимодействием [9]. В результате этого даже малая дырочная концентрация значительно подавляет магнитный порядок.

Несмотря на то, что при концентрации дырок $p \gtrsim 0.03$ дальний магнитный порядок исчезает, ближние магнитные корреляции имеют корреляционную длину порядка нескольких межатомных расстояний даже при дырочном допировании $p \sim 0.1 - 0.15$, согласно экспериментам по неупругому рассеянию нейтронов [13, 14] и, следовательно, способны существенно влиять на электронный спектр. Для электронно допированных образцов длина спиновых корреляций на порядок выше для схожих значений концентрации допирования [15]. Таким образом, учет

ближних магнитных корреляций - это важный ингредиент в методах расчета электронной структуры в рамках моделей ВТСП купратов.

Сверхпроводящая фаза находится выше по допированию относительно антиферромагнитной. В дырочных купратах эти фазы разделены по допированию фазой спинового стекла [14], в электронных - соседствуют [15]. Характерная особенность сверхпроводящей фазы в купратах - это щель d -симметрии [16, 17]. В качестве основных претендентов на роль механизма сверхпроводящего спаривания предложены сильное электрон-фононное вкуче с электрон-электронным взаимодействием [18, 19] и спиновые флуктуации [20-22].

Рассмотрение электронной структуры в сверхпроводящей фазе выходит за пределы данной работы. Наибольшая ее часть посвящена псевдощелевой фазе, которая находится ниже и левее линии T^* на Рисунке 1. Чаще всего термин «псевдощель» употребляется при рассмотрении электронной структуры купратов p -типа. Под псевдощелью понимается подавление низкоэнергетических возбуждений, наблюдавшееся в различных экспериментах [23]. Выше линии T^* и правее ее находится фаза «нормального» металла. В рамках квантового Монте-Карло (QMC - quantum Monte Carlo) для модели Хаббарда показано, что даже при высоких значениях дырочного допирования ($p \sim 0.3$) в модели Хаббарда спиновые корреляции присутствуют, при этом значения спиновых корреляционных функций заметно отклоняются от значений для слабо взаимодействующей системы [24]. Поэтому и в этой фазе физика ВТСП купратов отклоняется от поведения слабо взаимодействующих электронов. В нормальной области фазовой диаграммы выделяют также область «странного» металла, в которой спектральный пик на поверхности Ферми значительно шире металлического и его ширина слабо зависит от температуры, что говорит о сильном взаимодействии электронов [25].

Рассмотрим основные черты псевдощелевого поведения, наблюдаемые в экспериментах по фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES - angle-resolved photoemission spectroscopy) [26]. ARPES представляет

собой мощный экспериментальный инструмент для исследования электронной структуры. В ARPES образец исследуемого материала облучают фотонами с различной энергией, а перемещением анализатора или вращением образца можно получать распределение фотоэлектронов по импульсам, что позволяет измерить электронную спектральную функцию $A(\mathbf{k}, \omega)$, где \mathbf{k} обозначает двумерный квазиимпульс в плоскости образца, ω - энергию.

Схематически типичное распределение спектрального веса на уровне Ферми $A(\mathbf{k}, \mu)$, где μ - химпотенциал, для дырочного купрата, как его видят в ARPES, изображено на Рисунке 1.2 (а). При высоких значениях допирования поверхность Ферми представляет собой дырочный карман вокруг точки (π, π) [пунктирная линия на Рисунке 1.2 (а)]. В таком случае говорят о фазе «нормального» металла. При уменьшении допирования спектральный вес в антинодальном направлении [$\varphi = 0$ на Рисунке 1.2 (а)] уменьшается. При допировании, стремящемся к нулю, спектральный вес на поверхности Ферми сконцентрирован в нодальном направлении ($\varphi = 45^\circ$). Таким образом, поверхность Ферми в псевдощелевой фазе представляет собой Ферми-арку [жирная линия, Рисунок 1. (а)]. Повышение допирования приводит к росту Ферми-арки [26-29].

В работах по ARPES при исследовании перехода из псевдощелевого состояния в фазу «нормального» металла рассматривают симметризованную спектральную функцию [30]

$$A_{symm}(\mathbf{k}_F, \omega) = A(\mathbf{k}_F, \omega)f(\omega) + A(\mathbf{k}_F, -\omega)f(-\omega), \quad (1.1)$$

где $f(\omega)$ - функция Ферми-Дирака, а за начало отсчета по энергии принимается химпотенциал; \mathbf{k}_F - квазиимпульс точки на поверхности Ферми. Поведение этой функции для \mathbf{k}_F в антинодальном направлении проиллюстрировано на Рисунке 1.2 (б). В псевдощелевой фазе наблюдается провал спектрального веса, который переходит в пик при повышении температуры или допирования.

Касательно природы псевдощели на данный момент нет полного согласия в литературе. Существует несколько предположений: влияние сверхпроводящих

пар без фазовой когерентности [31, 32], влияние различных вариантов волны плотности [33-40], эффект сильных корреляций [41, 42] - близость к переходу Мотта-Хаббарда.

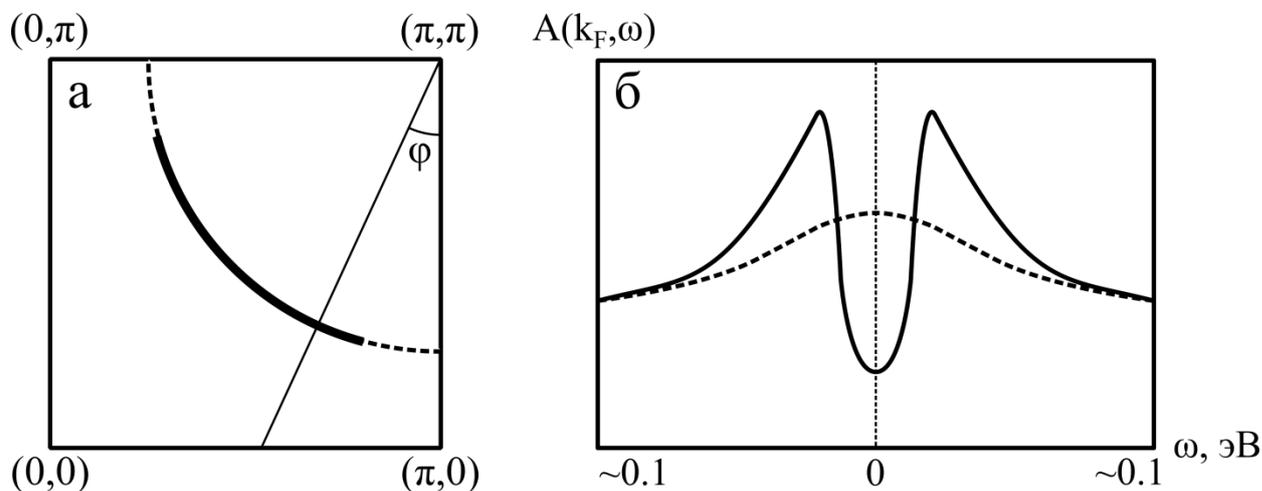


Рисунок. 1.2 (а) - Схема поверхности Ферми, наблюдаемой в ARPES в фазе «нормального» металла (пунктирная линия) и в псевдощелевой фазе (жирная линия). (б) - Качественное поведение симметризованной функции $A_{symm}(\mathbf{k}_F, \omega)$, определяемой формулой (1.1), для \mathbf{k}_F в антинодальном направлении в псевдощелевом состоянии (сплошная линия) и в «нормальном» металлическом состоянии (пунктир).

Применительно к купратам n -типа термин «псевдощель» также зачастую применяется [43-46]. В данных соединениях при допировании, близком к нулю, спектральный вес на поверхности Ферми сосредоточен, наоборот, вблизи точек $(0, \pi)$ и $(\pi, 0)$. С ростом допирования растет и поверхность Ферми, превращаясь при допировании $n \sim 0.2$ в дырочный карман вокруг точки (π, π) , как и во многих дырочных соединениях. Однако при промежуточных значениях допирования наблюдается значительный провал спектрального веса в так называемых «горячих» точках, которые находятся на границе антиферромагнитной зоны Бриллюэна. Данное явление гипотетически может реализовываться и в результате неравномерного распределения спектрального веса по «большой» поверхности

Ферми, так и в результате одновременного существования двух карманов в точках $(0, \pi)$ и $(\pi, 0)$ и одного в нодальном направлении. Данные экспериментов по измерению постоянной Холла в нормальном состоянии различных купратов n -типа показывают смену ее знака при увеличении допирования [47, 48], что говорит о присутствии носителей различного типа на поверхности Ферми. Для описания эволюции поверхности Ферми купратов n -типа привлекается в основном рассмотрение влияния дальнего магнитного порядка [49] и ближних корреляций [41, 50]. Заметим, что вычисления в рамках теорий, учитывающих ближние, но не дальние корреляции, не воспроизводят часть Ферми поверхности, находящуюся в нодальном направлении [41, 50], а при учете только локальных и дальних корреляций электронные карманы присутствуют и при допировании $n \sim 0.2$ [49].

Помимо ARPES ценную информацию о поверхности Ферми купратов представляют эксперименты по квантовым осцилляциям намагниченности и сопротивления в сильных магнитных полях, проявляющиеся в силу эффектов де Гааза - ван Альфена и Шубникова - де Гааза. В купратах первое несомненное наблюдение квантовых осцилляций состоялось только в 2007 году благодаря созданию качественных монокристаллов иттриевых купратов [51]. Впоследствии сообщалось о наблюдении квантовых осцилляций в дырочно-передопированном $Tl_2Ba_2CuO_{6+\delta}$ [52], электронно-допированном $Ne_{2-x}Ce_xCuO_4$ [53], а также дырочно-недодопированном $HgBa_2CuO_{4+\delta}$ [54]. Заметим, что электронная структура и поверхность Ферми двумерных (2D) сильно коррелированных электронных систем чувствительны к наличию дальнего порядка в системе. Исследования ВТСП купратов в рамках экспериментов по квантовым осцилляциям приковали особенно пристальное внимание к этой проблеме.

Квантовые осцилляции наблюдаются при наличии замкнутой поверхности Ферми, для оценки площади S которой обычно применяется соотношение Онзагера $F = \frac{\Phi_0}{2\pi^2} S$, где F - частота квантовых осцилляций, Φ_0 - квант магнитного потока. Результаты экспериментов по квантовым осцилляциям показывают, что

частоты осцилляций в передопированных соединениях превышают частоты в недопированных соединениях на порядок. Схожий результат был получен в рамках теории возмущений в пределе сильной связи [55]. Изменение частоты осцилляций согласуется с данными из ARPES, если предположить, что Ферми-арки при малом допировании являются результатом неравномерного распределения спектрального веса по дырочному карману, находящемуся в нодальном направлении. Такой карман был получен в различных вычислениях в рамках моделей сильных электронных корреляций [41, 56-59]. Однако чуть позже было показано, что коэффициенты Холла и Зеебека становятся отрицательными в сильных магнитных полях, что говорит о присутствии электронных карманов. Данные экспериментов по квантовым осцилляциям [60] на соединении $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ при допировании $p = 0.108$ согласуются с Ферми-поверхностью, полученной в рамках феноменологической модели с волной зарядовой плотности [39], состоящей из нодального электронного кармана (впервые предложен в работе [38]) и двух дырочных карманов. О существовании волн зарядовой плотности в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ вблизи допирования $p = 1/8$ сообщалось в результате экспериментов по ядерному магнитному резонансу [61]. В целом, исследования электронной структуры купратов в магнитных полях привлекли значительный интерес к проблеме влияния волн зарядовой плотности на псевдощель и их возможную роль в ее природе.

Эволюция электронной структуры и, в частности, псевдощели, с температурой также представляет значительный интерес. С ростом температуры Ферми-арка недопированного образца растет [30, 62, 63], схожим образом с тем, как это происходит с допированием. Особенно примечательно то, что в последнее время анализ данных ARPES приводит к выводу о существовании как минимум одной критической температуры выше T_c в псевдощелевой фазе [64, 65]. Заметим, что, несмотря на огромное количество теоретических работ, посвященных псевдощелевому состоянию, температурной зависимости псевдощели до сих пор недостает систематического теоретического исследования.

Естественная начальная точка в описании ВТСП купратов – это модель Эмери [66] CuO_2 плоскости, которая явным образом учитывает наиболее важные для низкоэнергетических свойств $d_{x^2-y^2}$, p_x , и p_y орбитали:

$$\begin{aligned}
H_{pd} = & \sum_{i,\sigma} \varepsilon_d n_{i\sigma}^d + \sum_{j,\sigma} \varepsilon_p n_{j\sigma}^p + U_d \sum_i n_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d + U_p \sum_j n_{j\uparrow}^p n_{j\downarrow}^p \\
& + V_{pd} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j + t_{pd} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (-1)^{P_{ij}} (d_{i\sigma}^+ p_{j\sigma} + \text{H. c.}) \\
& + t_{pp} \sum_{\langle\langle j,j' \rangle\rangle, \sigma} (-1)^{P'_{jj'}} (p_{j\sigma}^+ p_{j'\sigma} + \text{H. c.}),
\end{aligned} \tag{1.1}$$

где индекс i обозначает узлы меди, j – кислорода, $n_{i(j)\sigma}$ – оператор числа дырок на узле $i(j)$ со спином σ , $n_{i(j)} = n_{i(j)\uparrow} + n_{i(j)\downarrow}$, P_{ij} и $P'_{jj'}$ – фазовые факторы (см. Рисунок 1.3), оператор $d_{i\sigma}(p_{j\sigma})$ уничтожает дырку со спином σ на $d_{x^2-y^2}$ ($p_{x(y)}$) орбитали и узле $i(j)$.

От выражения (1.1) можно перейти к представлению ортогонализированных центрированных на меди ячеек, как это схематически изображено на Рисунке 1.3. В этом представлении каждая ячейка будет содержать состояния $d_{x^2-y^2}$ -орбитали и ортогонализированные a и b орбитали кислорода, выраженные с помощью представления канонических фермионов Шастри [67]. В результате выражение (1.1) примет следующий вид:

$$\begin{aligned}
H_{pd} = & \sum_{f,\sigma} \left[\sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} n_{f\sigma}^{\alpha} - 2t_{pd}\mu_{00} (d_{f\sigma}^+ b_{f\sigma} + \text{H. c.}) \right] + \sum_{f\alpha} U_{\alpha} n_{f\uparrow}^{\alpha} n_{f\downarrow}^{\alpha} \\
& + \sum_{f,\alpha<\beta} V_{\alpha\beta} n_{f\uparrow}^{\alpha} n_{f\downarrow}^{\beta} \\
& + \sum_{f \neq g, \sigma} \left[-2t_{pd}\mu_{fg} (d_{f\sigma}^+ b_{g\sigma} + \text{H. c.}) + 2t_{pp}\nu_{fg} a_{f\sigma}^+ a_{g\sigma} \right. \\
& \left. - 2t_{pp}\nu_{fg} b_{f\sigma}^+ b_{g\sigma} - 2t_{pp}\chi_{fg} (a_{f\sigma}^+ b_{g\sigma} + \text{H. c.}) \right] + H_{int}^{cc},
\end{aligned} \tag{1.2}$$

где f – индекс ячейки, ε_{α} – одноэлектронная энергия, соответствующая орбитальному индексу α , принимающему значения $\{a, b, d\}$, где d – $d_{x^2-y^2}$ медная

орбиталь, a и b – определенные на ячейке орбитали кислорода: $\varepsilon_a = \varepsilon_p + 2t_{pp}v_{00}$, $\varepsilon_b = \varepsilon_p - 2t_{pp}v_{00}$. Коэффициенты Ванье μ , ν и χ могут быть найдены в статьях [68, 69], также как и соотношение между эффективными кулоновскими взаимодействиями U_α , $V_{\alpha\beta}$ и исходными. Оператор $d_{f\sigma}$ уничтожает дырку со спином σ на медной орбитали, оператор $a_{f\sigma}(b_{f\sigma})$ – на $a(b)$ орбитали, $n_{f\sigma}^\alpha$ – оператор числа частиц, $n_f^\alpha = n_{f\uparrow}^\alpha + n_{f\downarrow}^\alpha$. Слагаемое H_{int}^{cc} включает в себя все нелокальные взаимодействия.

Данное представление позволяет сделать важный вывод о низкоэнергетической структуре модели Эмери. Схема нижних энергетических уровней базиса ячейки в модели (1.2) изображена на Рисунке 1.4. Для типичных для купратов параметров модели нижнее возбужденное состояние, являющееся триплетом, в двухдырочном секторе лежит намного выше по энергии, чем основное синглетное состояние, т.е. ΔE_{ST} на Рисунке 1.4 порядка нескольких электрон-вольт. Возбужденные состояния в однодырочном секторе также достаточно удалены от основного. Таким образом, низкоэнергетическую физику модели Эмери можно описывать в рамках эффективной модели Хаббарда, которая как раз обладает аналогичным одноузельным базисом.

Можно показать [8], что такая эффективная модель Хаббарда имеет, в простейшем приближении, в общем случае асимметричный по амплитудам перескоков вид:

$$H_{assym} = \sum_f \left[\varepsilon_1 \sum_\sigma X_f^{\sigma\sigma} + \varepsilon_2 X_f^{SS} \right] + \sum_{f \neq g, \sigma} \left[t_{fg}^{00} X_f^{\sigma 0} X_g^{0\sigma} + t_{fg}^{SS} X_f^{S\bar{\sigma}} X_g^{\bar{\sigma} S} + 2\sigma t_{fg}^{0S} (X_f^{\sigma 0} X_g^{\bar{\sigma} S} + \text{H. c.}) \right], \quad (1.3)$$

где ε_1 и ε_2 – энергии одноузельных одно- и двухчастичных состояний, операторы Хаббарда $X^{pq} = |p\rangle\langle q|$ построены на базисе одноузельных собственных состояний $\{|0, |\sigma\rangle, |2\rangle\}$, t_{fg}^{00} , t_{fg}^{SS} и t_{fg}^{0S} – соответствующие интегралы перескока, которые значительным образом зависят от параметров модели Эмери.

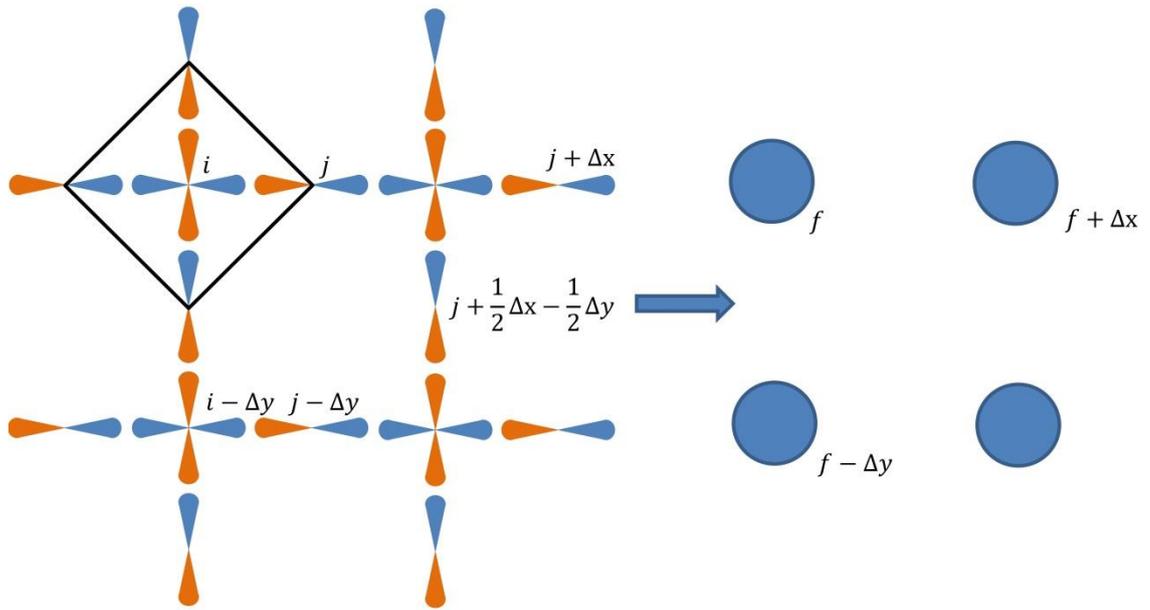


Рисунок 1.3. Иллюстрация перехода от исходного представления модели Эмери к представлению ортогонализированных ячеек. Красный и синий цвета иллюстрируют возможный выбор фазовых множителей – перекрытие электронной плотности, соответствующих одинаковым цветам дает положительный знак фазового множителя и разным – наоборот. Черным цветом обозначена CuO_4 ячейка на узле i , которой соответствует узел f в новом представлении.

Однако, как правило, в литературе рассматривается модель Хаббарда в симметричном виде:

$$H = U \sum_f n_{\uparrow} n_{\downarrow} - \sum_{f \neq g, \sigma} t_{fg} a_{f\sigma}^+ a_{g\sigma}, \quad (1.4)$$

где U – параметр кулоновского отталкивания, n_{σ} - оператор числа электронов, $a_{f\sigma}$ – оператор уничтожения электрона.

Следует заметить, что учет взаимодействия с апическим кислородом в рамках пятиорбитальной модели может существенно уменьшить разницу по энергии между синглетным и триплетным состояниями [68, 69] – таким образом, модель Хаббарда уже становится неприменима, и необходимо явным образом

учитывать нижний триплет в двухдырочном секторе. Примером является описание дисперсии одноизкупратных соединений в рамках пятизонной $p - d$ модели в работе [70], в которой учет данного триплетного состояния позволил описать экспериментально наблюдаемую трехпиковую структуру на потолке валентной зоны из данных ARPES.

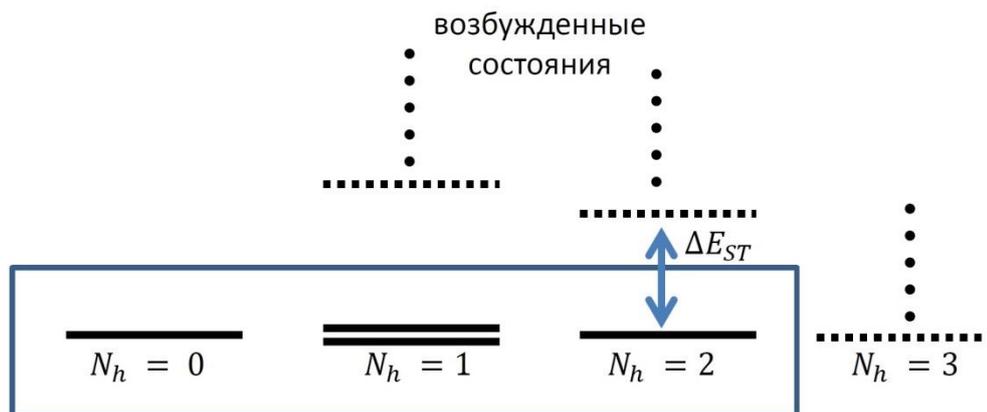


Рисунок 1.4. Схема энергетической структуры ячейки для гамильтониана (1.2).

Рамкой выделены низкоэнергетические состояния, соответствующие базису модели Хаббарда.

Симметричная модель Хаббарда, описываемая гамильтонианом (1.4) широко используется в литературе и ее принято считать фундаментальной моделью электронных корреляций. Важнейшее свойство в модели Хаббарда - это переход Мотта от металла к диэлектрику [5]. При достаточно высоком значении кулоновского отталкивания спектр представлен двумя зонами – верхней и нижней хаббардовскими зонами. Для (1.4) также можно построить эффективный низкоэнергетический гамильтониан, описывающий только нижнюю хаббардовскую зону, используя операторную форму теории возмущений во втором порядке по параметру $\frac{t}{U}$ в пределе $U \gg t$ [71] и прийти, таким образом, к гамильтониану $t - J^*$ модели:

$$H_{t-J^*} = H_{t-J} + H_{3c}, \quad (1.5)$$

$$H_{t-J} = - \sum_{f \neq g, \sigma} t_{fg} c_{f\sigma}^+ c_{g\sigma} + \frac{J}{2} \sum_{\langle f,g \rangle, \sigma} \left(\mathbf{S}_f \mathbf{S}_g - \frac{\tilde{n}_f \tilde{n}_g}{4} \right), \quad (1.6)$$

$$H_{3c} = - \frac{t^2}{U} \sum_{f, \sigma} \sum_{\delta \neq \delta'} (c_{f+\delta, \sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}} c_{f+\delta', \sigma} - c_{f+\delta, \sigma}^+ c_{f\bar{\sigma}}^+ c_{f\sigma} c_{f+\delta', \bar{\sigma}}), \quad (1.7)$$

где $J = \frac{4t^2}{U}$ - эффективный обменный интеграл, \mathbf{S}_f - оператор спина, $\tilde{n}_f = \sum_{\sigma} c_{f\sigma}^+ c_{f\sigma}$, а операторы $c_{f\sigma}$ и $c_{f\sigma}^+$ удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям [72]:

$$\{c_{f\sigma}, c_{g\sigma'}^+\} = \delta_{fg} [\delta_{\sigma\sigma'} (1 - \tilde{n}_{f\bar{\sigma}}) + (1 - \delta_{\sigma\sigma'}) S_f^{-\sigma}], \quad (1.8)$$

$$\{c_{f\sigma}^+, c_{g\sigma'}^+\} = \{c_{f\sigma}, c_{g\sigma'}\} = 0. \quad (1.9)$$

Как правило, в литературе слагаемым (1.7) пренебрегают и работают с гамильтонианом $t-J$ модели (1.6). Это не является строго обоснованным приближением, поскольку множитель перед H_{3c} имеет тот же порядок, что и интеграл обменного взаимодействия. В частности, было показано [73, 74], что учет трехцентровых взаимодействий важен для корректного учета сверхпроводящей фазы. Ниже будет показана также важность учета трехцентровых слагаемых для корректного описания электронной структуры в нормальной фазе.

В заключение данного раздела следует заметить, что учет только электронных взаимодействий, вероятно, не в состоянии объяснить все особенности сильно коррелированных систем, и, в частности, электронной структуры ВТСП купратов, некоторые черты которой могут быть объяснены взаимодействием с решеточными степенями свободы [75]. В связи с этим также исследуют [76-78] модели Хаббарда-Холстейна и $t-J$ -Холстейна, в которых включено локальное взаимодействие электронов с оптическим фононом. Помимо этого в последние годы происходит развитие поляронной версии метода обобщенной сильной связи (ГТВ - generalized tight binding) [79] с целью учесть в рамках реалистичной микроскопической модели взаимодействие электронов с колебательными модами CuO_2 плоскости.

1.2. Явление спинового кроссовера и эффективный спиновый гамильтониан для модели Канамори

Явление спинового кроссовера (SCO) заключается в смене спинового состояния иона переходного металла в составе какого-либо соединения под воздействием внешнего взаимодействия, такого как температура, давление или излучение. SCO наблюдается в соединениях переходных металлов [80, 81] и металлоорганических комплексах [82] с $d^4 - d^7$ конфигурацией.

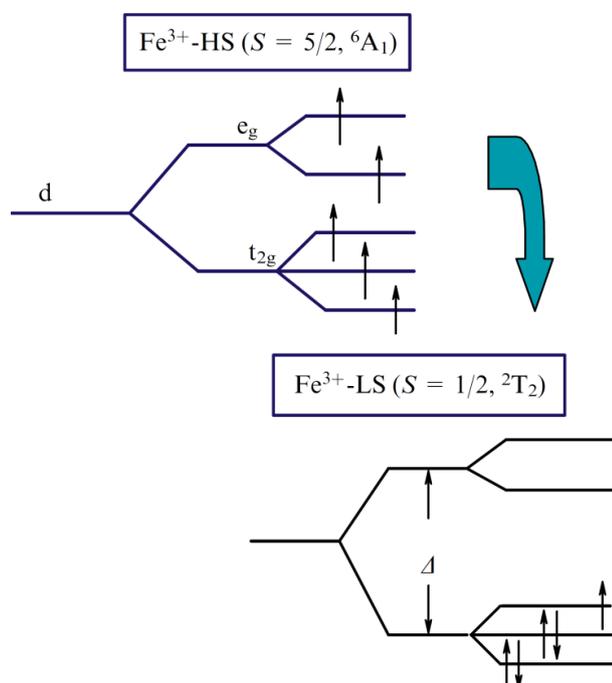


Рисунок 1.5. Схема заселенности термов иона Fe^{3+} в октаэдрическом окружении в высокоспиновом и низкоспиновом состояниях из работы [81]. Стрелки обозначают знак проекции спина.

Основная причина SCO – конкуренция внутриатомных электронных корреляций и кристаллического поля, действующего на d -ион. Для примера рассмотрим ион Fe^{3+} в октаэдрическом окружении. Под действием кристаллического поля d -оболочка расщепляется на e_g - и t_{2g} -термы. На Рисунке

1.5 проиллюстрированы высокоспиновая и низкоспиновая конфигурации иона, которые могут реализовываться путем различного заселения e_g - и t_{2g} -термов.

При низких значениях кристаллического поля, как показывает диаграмма Танабе-Сугано (Рисунок 1.6), основным состоянием является высокоспиновый терм со спином $S = 5/2$, однако увеличение кристаллического поля должно привести к стабилизации терма со спином $S = 1/2$ в качестве основного состояния.

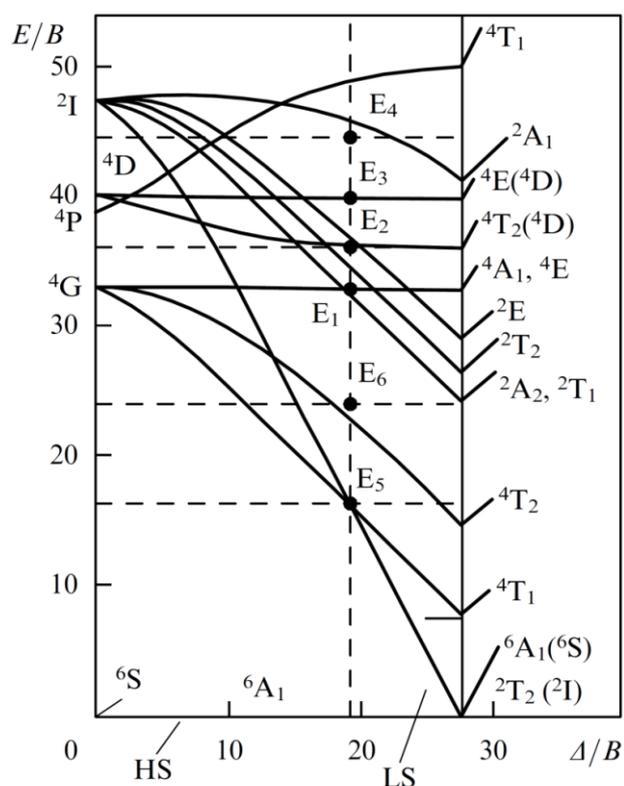


Рисунок 1.6. Диаграмма Танабе-Сугано для d^5 - ионов, взятая из работы [81].

Символ B обозначает параметр Рака, Δ – величину кристаллического поля.

Несмотря на то, что задача об одном ионе в кристаллическом поле дает базовое представление о природе SCO, она не отражает полностью связь между спиновым переходом и сопутствующими изменениями свойств, происходящих в реальных соединениях. Таким образом, встает вопрос об учете кооперативных

эффектов в системах с SCO. В соединениях переходных металлов, проявляющих SCO, кооперативность проявляется вследствие влияния межатомного обменного взаимодействия. Существует большое количество работ, в которых влияние кооперативных эффектов было рассмотрено феноменологически в рамках модели Изинга или Гейзенберга с эмпирически заданными константами обменного взаимодействия (например, см. [83-86]). В металлоорганических комплексах кооперативные эффекты обусловлены искажением структуры молекул вследствие их упругого взаимодействия друг с другом. Кооперативные эффекты вследствие упругого взаимодействия были исследованы в рамках теории функционала плотности, а также метода молекулярной динамики и метода Монте-Карло [87-89].

Таким образом, исследование SCO в рамках микроскопического подхода является актуальной задачей. В рамках метода GTB такой тип подхода был применен для изучения SCO под давлением в оксидах переходных металлов с применением многозонной $p - d$ модели в работе [90]. Альтернативой подходу, стартующему с многозонной $p - d$ модели, для изучения самых простых эффектов связанных с SCO, является двухорбитальная модель Канамори, являющаяся минимальной многоэлектронной моделью для описания SCO. Гамильтониан этой модели записывается следующим образом:

$$H_K = H_t + H_{Coulomb}, \quad (1.10)$$

$$H_t = \varepsilon_1 \sum_{i,\sigma} a_{i1\sigma}^+ a_{i1\sigma} + \varepsilon_2 \sum_{i,\sigma} a_{i2\sigma}^+ a_{i2\sigma} + t_1 \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} a_{i1\sigma}^+ a_{j1\sigma} + t_2 \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} a_{i2\sigma}^+ a_{j2\sigma} + t_{12} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{i2\sigma}^+ a_{j1\sigma} + a_{i1\sigma}^+ a_{j2\sigma}), \quad (1.11)$$

$$\begin{aligned}
H_{Coulomb} = & U \sum_{i,\lambda} a_{i\lambda\uparrow}^+ a_{i\lambda\downarrow}^+ a_{i\lambda\uparrow} a_{i\lambda\downarrow} + V \sum_{i,\lambda \neq \lambda'} a_{i\lambda\uparrow}^+ a_{i\lambda'\downarrow}^+ a_{i\lambda\uparrow} a_{i\lambda'\downarrow} \\
& + V \sum_{i,\lambda > \lambda', \sigma} a_{i\lambda\sigma}^+ a_{i\lambda'\sigma}^+ a_{i\lambda\sigma} a_{i\lambda'\sigma} + J \sum_{i,\lambda > \lambda', \sigma} a_{i\lambda\sigma}^+ a_{i\lambda'\sigma}^+ a_{i\lambda'\sigma} a_{i\lambda\sigma} \\
& + J \sum_{i,\lambda \neq \lambda'} a_{i\lambda\uparrow}^+ a_{i\lambda'\downarrow}^+ a_{i\lambda'\uparrow} a_{i\lambda\downarrow} + J' \sum_{i,\lambda \neq \lambda'} a_{i\lambda\uparrow}^+ a_{i\lambda\downarrow}^+ a_{i\lambda'\uparrow} a_{i\lambda'\downarrow}.
\end{aligned} \quad (1.12)$$

Слагаемое (1.11) описывает внутризонные перескоки с амплитудами t_1 , t_2 и межзонные с амплитудой t_{12} между соседними узлами с одноэлектронными энергиями ε_1 и $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + \Delta$, где Δ – величина кристаллического поля. Кулоновское слагаемое (1.12) в подходе Канамори [91] содержит внутриорбитальный и межорбитальный матричные элементы U и V , а также хундовский обмен J и парные перескоки J' . Схожие модели использовались при обсуждении фазы экситонного диэлектрика [92].

Концентрируясь на исследовании спинового кроссовера, рассмотрим случай с двумя электронами на узел, $n_e = 2$. В случае половинного заполнения и в нулевом приближении по межузельным перескокам имеется возможность формирования различных локализованных двухчастичных состояний, которые характеризуются значениями спина $S = 0, 1$ (Рисунок 1.7) и кроссовера между ними с ростом кристаллического поля.

Таким образом, при $n_e = 2$ гамильтониан (1.12) имеет шесть собственных состояния. В области $\Delta < \Delta_c$ основным является триплетное ($S = 1$) высокоспиновое (HS - high spin) - состояние σ (Рисунок 1.7, красная штриховая линия), трехкратно вырожденное по проекции спина:

$$|\sigma\rangle = \begin{cases} a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow}^+ |0\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{1\uparrow}^+ a_{2\downarrow}^+ |0\rangle + a_{1\downarrow}^+ a_{2\uparrow}^+ |0\rangle), \\ a_{1\downarrow}^+ a_{2\downarrow}^+ |0\rangle \end{cases} \quad (1.13)$$

а при $\Delta > \Delta_c$ основным является синглетное ($S = 0$) низкоспиновое (LS - low spin) - состояние $|S\rangle = C_1(\Delta) a_{1\uparrow}^+ a_{1\downarrow}^+ |0\rangle - \sqrt{1 - C_1^2(\Delta)} a_{2\uparrow}^+ a_{2\downarrow}^+ |0\rangle$ (Рисунок 1.7, зеленая пунктирная линия). В точке кроссовера $\Delta = \Delta_c$ происходит пересечение

уровней энергии этих состояний. Оставшиеся два состояния – это возбужденные синглетные состояния $|S_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{1\uparrow}^+ a_{2\downarrow}^+ |0\rangle - a_{1\downarrow}^+ a_{2\uparrow}^+ |0\rangle)$ и $|S_2\rangle = \sqrt{1 - C_1^2(\Delta)} a_{1\uparrow}^+ a_{1\downarrow}^+ |0\rangle + C_1(\Delta) a_{2\uparrow}^+ a_{2\downarrow}^+ |0\rangle$, где C_1 – нормировочный коэффициент, зависящий от Δ (на Рисунке 1.7 эти состояния показаны сплошными черными линиями).

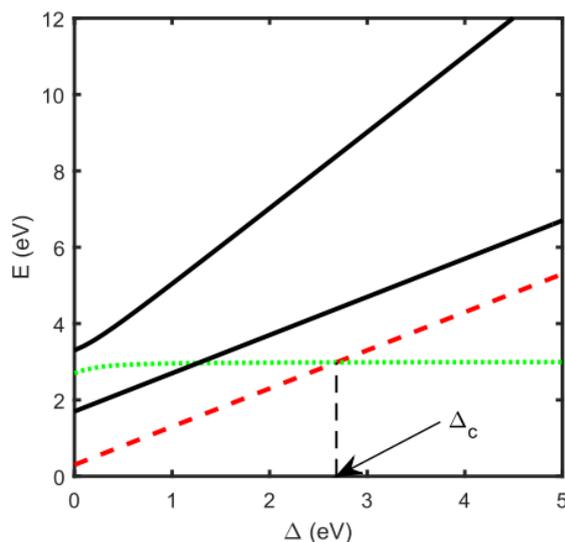


Рисунок 1.7. Зависимость энергии термов от величины кристаллического поля Δ . Красной штриховой линией показано положение HS-состояния ($S = 1$), а зеленой пунктирной – положение LS-состояния ($S = 0$). Сплошные черные линии – возбужденные синглетные состояния, Δ_c – точка кроссовера. Расчеты выполнены для следующего набора параметров: $U = 3, V = 1, J = 0.7, J' = 0.3$ eV.

Для вывода эффективного гамильтониана удобно использовать X -операторы Хаббарда $X^{pq} = |p\rangle\langle q|$, построенные на собственных состояниях гамильтониана (1.12) с различным числом электронов $n_e = 1, 2, 3$. Поскольку операторы Хаббарда образуют линейно независимый базис, то любой локальный оператор может быть выражен через линейную комбинацию X -операторов, в том числе одноэлектронный оператор уничтожения (рождения) на узле i с орбитальным индексом λ : $a_{i\lambda\sigma} = \sum_{pq} |p\rangle\langle p| a_{i\lambda\sigma} |p\rangle\langle q| = \sum_{pq} \gamma_{\lambda\sigma}(pq) X_i^{pq}$. Или,

поскольку число различных корневых векторов (pq) конечно, можно их пронумеровать и каждому вектору поставить в соответствие его номер m , тогда в представлении X -операторов Хаббарда гамильтониан (1.10) имеет вид:

$$H = \sum_{i,p} E_p X_i^{pp} + \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{mn} t^{mn} X_i^{m+} X_j^n, \quad (1.14)$$

где E_p – энергия термов, $t^{mn} = \sum_{\sigma,\lambda,\lambda'} t_{\lambda\lambda'} \gamma_{\lambda\sigma}^*(m) \gamma_{\lambda'\sigma}(n)$ – перенормированный интеграл перескока.

В случае половинного заполнения гамильтониан (1.14) описывает диэлектрик с щелью E_g . При значениях кристаллического поля ниже критического Δ_c основным состоянием является высокоспиновое с энергией $\varepsilon_{HS} = 2\varepsilon_1 + \Delta + V - J$, а при $\Delta > \Delta_c$ – низкоспиновое, которому отвечает энергия $\varepsilon_{LS} = 2\varepsilon_1 + \Delta + U - \sqrt{\Delta^2 - J^2}$. Используя гамильтониан (1.14) как исходный, можно получить эффективный гамильтониан, исключив из него межзонные перескоки через диэлектрическую щель, используя метод, разработанный для модели Хаббарда [71] и обобщенный на случай произвольного набора локальных собственных состояний [93]. Эффективный гамильтониан определяется выражением:

$$H_{eff} = H_s + H_{ex}, \quad (1.15)$$

он действует в гильбертовом пространстве, заданном четырьмя одноузельными двухэлектронными состояниями: триплетными состояниями $\{|-1\rangle, |0\rangle, |1\rangle\}$ спина $S = 1$ и синглетным состоянием $|s\rangle$ спина $S = 0$. Спиновая часть задается выражением

$$H_s = \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) - \varepsilon_s \sum_i X_i^{ss}, \quad (1.16)$$

где параметр обменного взаимодействия определяется как

$$J = 4(t_{11}^2 + 2t_{12}^2 + t_{22}^2)/E_g, \quad (1.17)$$

\mathbf{S}_i – оператор спина $S = 1$, n_i – оператор числа электронов, ε_s – параметр разницы энергий для высокоспинового $S = 1$ - и низкоспинового $S = 0$ -состояний, который

в дальнейшем будет именоваться “спиновой щелью”: $\varepsilon_s = E_{HS} - E_{LS}$. Экситонная часть эффективного гамильтониана задается выражением

$$H_{ex} = \frac{J_{ex}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} [X_i^{\sigma s} X_j^{s\sigma} + X_i^{s\sigma} S_j^{\sigma s} - (-1)^{|\sigma|} (X_i^{\sigma s} X_j^{\bar{\sigma} s} + X_i^{s\sigma} X_j^{s\bar{\sigma}})], \quad (1.18)$$

где параметр экситонных перескоков равен

$$J_{ex} = \frac{4(t_{12}^2 - t_{11}t_{22})}{E_g}. \quad (1.19)$$

Таким образом, гамильтониан (1.15) проявляет два вида отклонений от модели Гейзенберга. Во-первых, наличие низкоспинового слагаемого в (1.16). Как видно в рамках теории среднего поля, значения намагниченности, описываемые с помощью (1.16), будут отклоняться от функции Бриллюэна. Во-вторых, экситонное слагаемое (1.18), описывающее процессы перехода между состояниями с различной мультиплетностью. Для выделения чисто магнитного вклада в отклонения поведения от модели Гейзенберга можно рассмотреть симметричный по перескокам случай $t_{11} = t_{22} = t_{12}$, когда $J_{ex} = 0$. Поэтому в качестве стартовой точки для изучения задачи, описываемой выражением (1.15), в дальнейшем ограничимся спиновой частью (1.16).

При изучении физики, описываемой выражением (1.16), можно качественным образом привязаться к результатам экспериментов под давлением в алмазных наковальнях [94, 95]. Лучше всего для этой цели подходят результаты на соединении ферроперриклаза $(Mg_{1-x}, Fe_x)O$, минерала, которым изобилует нижняя мантия Земли, - в нем наблюдается переход между HS-состоянием $t_{2g}^4 e_g^2$ со спином $S = 2$ и LS состоянием $t_{2g}^6 e_g^0$ со спином $S = 0$. На Рисунке 1.8. приведены данные, которые были получены в методе синхротронной Мёссбауэровской спектроскопии при сверхвысоких давлениях в работе [94]. При давлении $P = 38 \text{ GPa}$ и низких температурах в спектре присутствуют высокочастотные биения, происходящие из сверхтонкого Зеемановского расщепления ядерных энергетических уровней, говорящие о том, что образец находится в магнитной фазе. При повышении температуры эти биения исчезают,

но остаются низкочастотные биения, связанные с квадрупольным расщеплением ядерных уровней вследствие взаимодействия со значительным градиентом электрического поля, присутствующего в HS конфигурации из-за расщепления t_{2g} -терма, но отсутствующего в LS состоянии [81]. При давлении $P = 55 \text{ GPa}$ и низких температурах исчезают и низкочастотные биения, что говорит о переходе в низкоспиновую фазу. Таким образом, данные говорят в пользу квантовой критической точки при $T = 0$, в которой происходит перестройка электронной структуры. При повышении температуры вблизи критического давления HS- и LS-фазы сосуществуют вследствие температурного заселения возбужденных энергетических уровней системы.

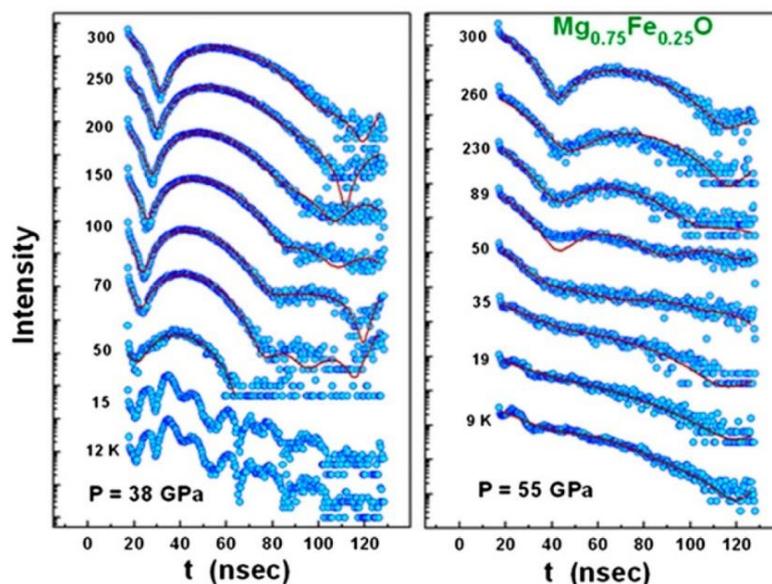


Рисунок 1.8. Спектры, полученные в методе синхротронной Мёссбауэровской спектроскопии, взятые из статьи [94].

В работах [94, 95] экспериментальные данные по соотношению вкладов от HS и LS состояний сравнивались с расчетами в рамках теории среднего поля, примененной к модели бинарного сплава. В данном случае теория описывает основные экспериментальные тренды - рост температуры Нееля с давлением и ее резкий спад вблизи критического давления (Рисунок 1.9). Представляет интерес сравнение результатов, которые могут быть получены из (1.16) с полученными в

техника, которая активно применяется для исследования моделей ВТСП [97]. Идеологически родственный подход - это теория возмущений в локальном пределе с использованием техники операторов Хаббарда и метода расщепления уравнений на функции Грина [22, 58, 74, 98]. Достоинство данной группы подходов в том, что они аналитические, а также в принципе способны учитывать корреляционные эффекты на любых масштабах. Недостаток состоит в том, что для получения приемлемых для осуществления вычислений аналитических выражений зачастую приходится делать неконтролируемые приближения, оценку адекватности которых приходится производить в-основном по конечному результату. Например, применение того или иного расщепления, или учет определенного класса диаграмм.

Подход с другой стороны - это получение точного или приближенного решения для малого кластера. Наиболее прямолинейный подход в данном направлении - метод точной диагонализации гамильтониана. С использованием полной диагонализации можно точным образом получить свойства основного и всех возбужденных состояний для системы из $N \lesssim 10$ узлов в модели Хаббарда. С помощью метода Ланцоша [99], который позволяет осуществлять последовательное вариационное итерационное вычисление собственных состояний, оказываются доступными свойства основного и малого количества возбужденных состояний для $N \lesssim 20$ узлов. Поскольку для исследования свойств системы при конечных температурах требуется как правило значительное число количество возбужденных состояний, были предложены модификации метода Ланцоша для оптимизации вычисления характеристик системы при конечных температурах [100-103]. Также, недавно были разработаны методы на основе чисто квантовых температурных состояний [103-105], которые точны в термодинамическом пределе, но проявляют очень быстрое схождение с ростом размера системы, что делает их перспективной альтернативой методам Ланцоша.

Еще один численно точный подход - теория ренормгруппы для матрицы плотности [106], в рамках которой происходит итерационное увеличение системы

и отбрасывание высоколежащих состояний с сохранением актуальной части базиса. Данный метод эффективен в одномерном случае, но его использование существенно затрудняется в двумерии из-за проявления квантовой запутанности. Тем не менее, в 2D данный метод также развивается, о чем, например свидетельствует вычисление электронной функции Грина для кластера 6×6 в $t - J$ модели [107], который недоступен для метода точной диагонализации.

Группа стохастических численных подходов, которые позволяют исследовать наибольшие размеры систем - методы Монте-Карло. Их идея состоит в выборке по важности состояний системы с вероятностью, пропорциональной отношению весов различных конфигураций системы. Вариационные методы Монте-Карло [108] работают при нулевой температуре, квантовые тепловые - при конечных, но существуют модификации для нулевой температуры. Первые минимизируют вариационную функцию, и их результат зависит от ее выбора. Вторые являются численно точными и основаны на разложении Сузуки-Троттера [109, 110] или в ряд теории возмущений [111- 113] для статсуммы, отражая таким образом квантовую систему на классическую систему повышенной размерности. В рамках QMC могут быть получены решения для кластеров порядка $N \sim 100 - 1000$ узлов. Однако получение решений при низких температурах и большом значении взаимодействия в большинстве случаев оказывается невозможным из-за проблемы знака, которая приводит к экспоненциальному росту статистической погрешности с увеличением размера системы и понижением температуры [113]. Также затрудняет использование QMC необходимость аналитического продолжения динамических величин на область вещественных частот, поскольку метод работает во мнимом времени. Это является плохо поставленной задачей из-за наличия статистической погрешности и требует применения статистических методов [114].

Другая большая группа подходов заключается в использовании идеологии динамической теории среднего поля (DMFT) [115]. DMFT представляет собой теорию, отражающую решеточную задачу на самосогласованную задачу по

решению примесной модели Андерсона. DMFT является точной в пределе бесконечной размерности и успешно описывает, в силу учета локальных корреляций, многочисленные явления в 3D системах. Однако в рамках DMFT не учитываются нелокальные корреляции, поэтому данная теория не позволяет полностью корректно описывать свойства низкоразмерных систем. С момента появления DMFT и по сегодняшний день активно разрабатываются подходы, позволяющие обобщить метод для учета нелокальных корреляций. Один из подходов к такому обобщению - диаграммные методы, которым посвящен обзор [116]. В этой группе методов состоит подход, в котором к собственной энергии из DMFT добавляются нелокальные поправки к собственной энергии, вычисленные в рамках других подходов [117, 118]. Другой путь к учету нелокальных корреляций - динамические вершинные приближения: ДГА (dynamic vertex approximation), где самосогласованно вычисляется (как правило двухчастичная) локальная вершина в примесной модели Андерсона [119], и метод дуальных фермионов, позволяющий пертурбативно учесть взаимодействие между примесными задачами [120]. В силу того, что в вершинных приближениях учитываются флуктуации дальнего порядка, данные методы позволили существенно продвинуть понимание перехода металл-диэлектрик и АФМ-парамагнетик в модели Хаббарда. В частности, получить корректное значение критической экспоненты в 3D модели Хаббарда и показать, что переход металл-диэлектрик в 2D при половинном заполнении происходит при $U \rightarrow 0$.

Способ обобщения, который применяется не только к DMFT, и который позволил значительно продвинуть понимание псевдощелевой фазы купратов - использование кластерных методов [121]. Идея данной группы методов состоит в том, чтобы учесть ближние корреляции в системе явным образом в рамках конечного кластера, а дальние на среднем уровне - в рамках DMFT или с помощью теории возмущений.

Наиболее простой метод в данной группе - это кластерная теория возмущений (CPT - cluster perturbation theory) [122, 123], которая является

основным методом данной диссертации. Как следует из названия, корреляции в рамках конечного кластера в этом методе учитываются точно, а за его пределами - с помощью теории возмущений. Метод представляет собой частный случай SCPT, а также кластерным обобщением приближения Хаббард-I. Для случая парамагнитной несверхпроводящей фазы СРТ представляет собой адекватный метод и пролила свет на некоторые свойства псевдощелевого состояния в купратах вследствие учета ближних корреляций [42]. Главным недостатком СРТ является отсутствие процедуры самосогласования, что не дает возможности применить ее для исследования упорядоченных фаз.

Несамосогласованность СРТ была преодолена в методе вариационного кластерного приближения (VCA - variational cluster approximation) [124], который основан на теории собственно-энергетического функционала [125], метода построения приближений для собственной энергии системы, в котором были обобщены СРТ, VCA и кластерный DMFT (о котором будет сказано далее). В VCA присутствует самосогласованная процедура на одночастичном уровне, поэтому метод подходит для изучения антиферромагнитной и сверхпроводящей фаз в модели Хаббарда [126, 127].

Кластерными обобщениями DMFT являются кластерный DMFT и динамическое кластерное приближение DCA (dynamical cluster approximation), которым в своей основе посвящен обзор [121]. В данных методах самосогласованно решается задача о кластере, в котором узлы взаимодействуют друг с другом и с динамическим средним полем. В кластерном DMFT кластер выбирается в реальном пространстве, а в DCA - в импульсном. Кластерные обобщения DMFT способствовали значительному продвижению в понимании электронной структуры псевдощелевой фазы [41, 56, 128, 129].

Другой подход к построению кластерной теории – это обобщенный метод сильной связи GTB, в котором выделяется внутриячеечная часть гамильтониана, отражающего реальную структуру соединения, диагонализуется, и далее строится кластерная теория возмущений по межъячеечным взаимодействиям [68, 130].

Также существуют гибридные методы LDA+GTB [131] и LDA+DMFT [132], включающие в себя *ab initio* расчет параметров модельного гамильтониана.

1.4. Кластерная теория возмущений

Поскольку в рамках настоящей диссертации основным расчетным методом является СРТ, приведем более полное ее описание в той форме, в которой она была реализована для решения поставленных здесь задач. В данной работе для реализации СРТ применяются результаты X -операторной формы теории возмущений [59, 133]. В первую очередь решетка покрывается трансляциями кластера, например, как в разделе 3, Рисунок 3.1. Гамильтониан исходной модели можно переписать как

$$H = H_c + H_{cc}, \quad (1.20)$$

где в H_c входят внутрикластерные взаимодействия, а в H_{cc} - межкластерные:

$$H_{cc} = \sum_{\mathbf{f}, \mathbf{r}, i, j} T_{i, j}^{\mathbf{r}} a_{\mathbf{f}, i}^{\dagger} a_{\mathbf{f} + \mathbf{r}, j}, \quad (1.21)$$

где \mathbf{f} - радиус-вектор кластера, $\mathbf{f} + \mathbf{r}$ - соседнего кластера, i, j - индексы узлов внутри кластера. Поскольку рассматривается парамагнитная фаза, спиновый индекс здесь и далее опущен. Рассмотрим Фурье-образ запаздывающей двухвременной функции Грина

$$D_{\alpha, \beta}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = \langle\langle X^{\alpha} | X^{\beta \dagger} \rangle\rangle_{\tilde{\mathbf{k}}, \omega}, \quad (1.22)$$

где волновой вектор $\tilde{\mathbf{k}}$ определен в редуцированной зоне Бриллюэна, а операторы Хаббарда фермионного типа,

$$X^{\alpha} = X^{p, q} = |p\rangle\langle q|, \quad (1.23)$$

построены на базисе собственных состояний кластера $|p\rangle$ (состояние с $n - 1$ электронами) и q (состояние с n электронами). Используя выражение для оператора уничтожения через операторы Хаббарда,

$$a_{\mathbf{f},i} = \sum_{\alpha} \gamma_i(\alpha) X_{\mathbf{f}}^{\alpha}, \quad (1.24)$$

где $\gamma_i(\alpha)$ - матричные элементы, выражение (1.20) для модели Хаббарда можно записать в виде

$$H = \sum_{\mathbf{f},m} E_m X_{\mathbf{f}}^{m,m} + \sum_{\mathbf{f},\mathbf{r}} \sum_{\alpha,\beta} V_{\alpha,\beta}^{\mathbf{r}} X_{\mathbf{f}}^{\alpha+} X_{\mathbf{f}+\mathbf{r}}, \quad (1.25)$$

где m пробегает по всем кластерным собственным состояниям, а коэффициенты межкластерного взаимодействия имеют вид

$$V_{\alpha,\beta}^{\mathbf{r}} = \sum_{i,j} \gamma_i^*(\alpha) \gamma_j(\beta) T_{i,j}^{\mathbf{r}}. \quad (1.26)$$

В случае $t - J^*$ модели в межкластерном вкладе также можно учесть среднеполевые нормировки трехцентровых перескоков, как это осуществляется в главе 2. Уравнение Дайсона в представлении X -операторов имеет вид [134]:

$$\widehat{D}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = [\widehat{D}^0(\omega)^{-1} - \widehat{P}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) \widehat{V}(\tilde{\mathbf{k}}) + \widehat{\Sigma}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)]^{-1} \widehat{P}(\hat{\mathbf{k}}, \omega), \quad (1.27)$$

где матрицы записаны в зонных индексах α и β ,

$$V_{\alpha,\beta}(\tilde{\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{r}} V_{\alpha,\beta}^{\mathbf{r}} e^{i\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{r}} \quad (1.28)$$

является элементом матрицы перескоков,

$$D_{\alpha,\beta}^0(\omega) = \frac{\delta_{\alpha,\beta}}{\omega - E_{\alpha} + \mu} \quad (1.29)$$

представляет собой точную локальную (кластерную) функцию Грина, $E_{\alpha} = E_q - E_p$, μ - химпотенциал. В уравнении (1.27) $\widehat{\Sigma}(\mathbf{q}, \omega)$ - межкластерная собственная энергия, $\widehat{P}(\hat{\mathbf{k}}, \omega)$ - силовой оператор. В приближении Хаббард-I для межкластерных перескоков межкластерная собственная энергия равна нулю, а силовой оператор имеет вид $P_{\alpha,\beta}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = \delta_{\alpha,\beta} F_{\alpha}$, где

$$F_{\alpha} = \langle X^{p,p} \rangle + \langle X^{q,q} \rangle = n_p + n_q. \quad (1.29)$$

В выражении (1.29) диагональные средние $\langle X^{p,p} \rangle$ и $\langle X^{q,q} \rangle$ представляют собой числа заполнения n_p и n_q . В результате электронная структура определяется уравнением

$$\widehat{D}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)^{-1} = [\widehat{F}\widehat{D}^0(\omega)]^{-1} - \widehat{V}(\tilde{\mathbf{k}}), \quad (1.30)$$

В рамках настоящей диссертации используется следующее приближение для диагональной матрицы \widehat{F} с целью задания фиксированного допирования в системе. Следуя работам [59, 133], количество электронов n_e в кластере задается, предполагая ненулевые заполнения только двух секторов гильбертова пространства: $1 - x$ для сектора с n электронами и x для сектора с $n - 1$ электронами:

$$n_e = (1 - x)n + x(n - 1). \quad (1.31)$$

Далее вычисляются числа заполнения уровней для данных секторов в рамках канонического ансамбля для каждого из них:

$$\begin{aligned} n_p &= \frac{x}{Z_{n-1}} \exp(-\beta E_p), \\ n_q &= \frac{1 - x}{Z_n} \exp(-\beta E_q) \end{aligned} \quad (1.32)$$

где Z_n - статсумма канонического ансамбля для кластера с n электронами. При относительно больших размерах кластера $N_c = 12, 16$ решение уравнения (1.30) становится трудно достижимым из-за большого количества квазичастичных переходов. Поэтому в настоящей работе делается переход к матрицам в представлении узлов внутри кластера - в результате имеем уравнение, аналогичное работе [123]:

$$\widehat{G}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)^{-1} = \widehat{G}^c{}^{-1} - T(\tilde{\mathbf{k}}), \quad (1.33)$$

где

$$G_{i,j}^c(\omega) = \sum_{\alpha, \beta} \gamma_i(\alpha) \gamma_j^*(\beta) F_\alpha D_{\alpha, \beta}^0(\omega) \quad (1.34)$$

и $\widehat{T}(\tilde{\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{r}} \widehat{T}^{\mathbf{r}} e^{i\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{r}}$.

Последним шагом является восстановление функции Грина, зависящей от волнового вектора \mathbf{k} исходной решетки суммированием по внутрикластерным узлам по формуле [123]

$$G_{CPT}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{N_c} \sum_{i,j} G_{i,j}(\mathbf{k}, \omega) \exp[-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)]. \quad (1.35)$$

После чего из (1.35) вычисляется спектральная функция $A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{CPT}(\mathbf{k}, \omega)]$. В главе 2 $A(\mathbf{k}, \omega)$ представлена с уширением лоренцианом $\delta = 0.01t$, в главе 3 $\delta = 0.16t$.

Наиболее ресурсоемкая операция в СРТ - вычисление кластерной функции Грина. Существует несколько техник вычисления ее при конечной температуре - модификации метода Ланцоша [100-103] и недавно разработанные методы TPQS (thermal pure quantum states) [103-105]. В рамках настоящей диссертации при конечно-температурных вычислениях для расчета матричных элементов учитывалось точным образом некоторое количество возбужденных состояний (как правило, 6400 состояний для каждого подсектора с фиксированным значением проекции спина и количества электронов), а вышележащие отбрасывались. Такой подход оказался достаточным в настоящей работе при условии взятия в учет достаточного количества возбужденных состояний и не содержит статистических или систематических ошибок, помимо контролируемого отбрасывания высокоэнергетических возбуждений с малым весом. В случае нулевой температуры использовалась стандартная техника итераций Ланцоша для функции Грина [123].

1.5. Цели и задачи работы

Исходя из представленных обзорных сведений, представляется актуальной следующая цель: исследование электронных и магнитных свойств ВТСП купратов и систем со спиновыми кроссоверами в рамках микроскопических моделей сильно коррелированных электронов.

Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие задачи:

1. Исследовать вопрос о соответствии электронной структуры двумерной модели Хаббарда и ее эффективной низкоэнергетической t - J модели.
2. Исследовать эволюцию электронной структуры в двумерной модели Хаббарда с дырочным допированием и изучить, каким образом на нее влияет ближний магнитный порядок в системе. Исследовать эволюцию электронной структуры в двумерной модели Хаббарда с температурой и изучить, каким образом на нее влияет ближний магнитный порядок в системе. Сопоставить изменения спектральных свойств с допированием и с температурой.
3. Исследовать поведение локальных и ближних спиновых корреляционных функций в окрестности спинового кроссовера по давлению в рамках эффективного низкоэнергетического гамильтониана для модели Канамори в зависимости от температуры и давления (величины параметра спиновой щели).

Первые две задачи исследуются в рамках СРТ, поскольку проводится рассмотрение нормальной фазы, где дальний порядок отсутствует и применение СРТ корректно. Преимущество данного метода в данном случае заключается в том, что при использовании точной диагонализации для решения кластерной задачи СРТ позволяет учесть большее количество ближних корреляций, чем более сложные кластерные методы. В свою очередь, метод точной диагонализации имеет преимущество перед QMC в том, что не приходится решать задачу об аналитическом продолжении функции Грина при наличии статистической погрешности в исходных данных. Третья задача решается с помощью кластерной теории среднего поля, которая позволяет качественно учитывать ближние корреляции и присутствие дальнего порядка. В силу простоты данного метода он будет кратко описан в главе 4.

Глава 2. Сравнение электронной структуры модели Хаббарда и t - J моделей

Одна из наиболее широко используемых моделей СЭК, $t - J$ модель (1.6), является упрощением, с точки зрения вычислительной сложности, модели Хаббарда (1.4). Ее гамильтониан получается во втором порядке теории возмущений в пределе $U \gg t$ посредством пренебрежения межзонными перескоками [71]. Строго говоря, унитарное преобразование гамильтониана модели Хаббарда, возникающее в операторной форме теории возмущений, приводит к гамильтониану $t - J^*$ модели (1.5), которая включает в себя трехцентровые коррелированные перескоки помимо слагаемых $t - J$ модели. Как правило, трехцентровыми перескоками пренебрегают. Объясняется это тем, что на среднеполевом уровне трехцентровые вклады приводят к ренормировке перескока порядка t^2/U . Тем не менее, было обнаружено значительное влияние данных слагаемых на формирование сверхпроводящей фазы d -симметрии [73, 74].

В электронной структуре модели Хаббарда можно выделить три энергетических масштаба: высокоэнергетический $\omega \sim U$, промежуточный $\omega \sim t$ и низкоэнергетический $\omega \sim J$. Первый определяет значение мотт-хаббардовской щели и прямого соответствия в купратах не имеет, поскольку те представляют собой диэлектрики с переносом заряда [135]. Остальные два масштаба присутствуют и в $t - J$ модели. Поверхность Ферми и возбуждения вблизи нее находятся на масштабе энергий $\omega \sim J$. Энергия $\omega \sim t$ имеет отношение к высокоэнергетическим особенностям, которые наблюдают в купратах в ARPES – «водопадам» и высокоэнергетическим кинкам [136, 137].

Поскольку пренебрежение трехцентровыми слагаемыми не является строго обоснованным и имеет тот же порядок, что и обменный интеграл в $t - J$ модели, было проведено детальное сравнение электронной структуры на масштабах $\omega \sim J$ и

$\omega \sim t$ в рамках всех трех моделей, в рамках метода, способного уловить основные особенности спектра СЭК. В данной главе представлены результаты, полученные в рамках СРТ с использованием кластера 2×2 . Схожие результаты были позднее получены другими авторами в рамках СРТ с учетом большего количества ближних корреляций [138].

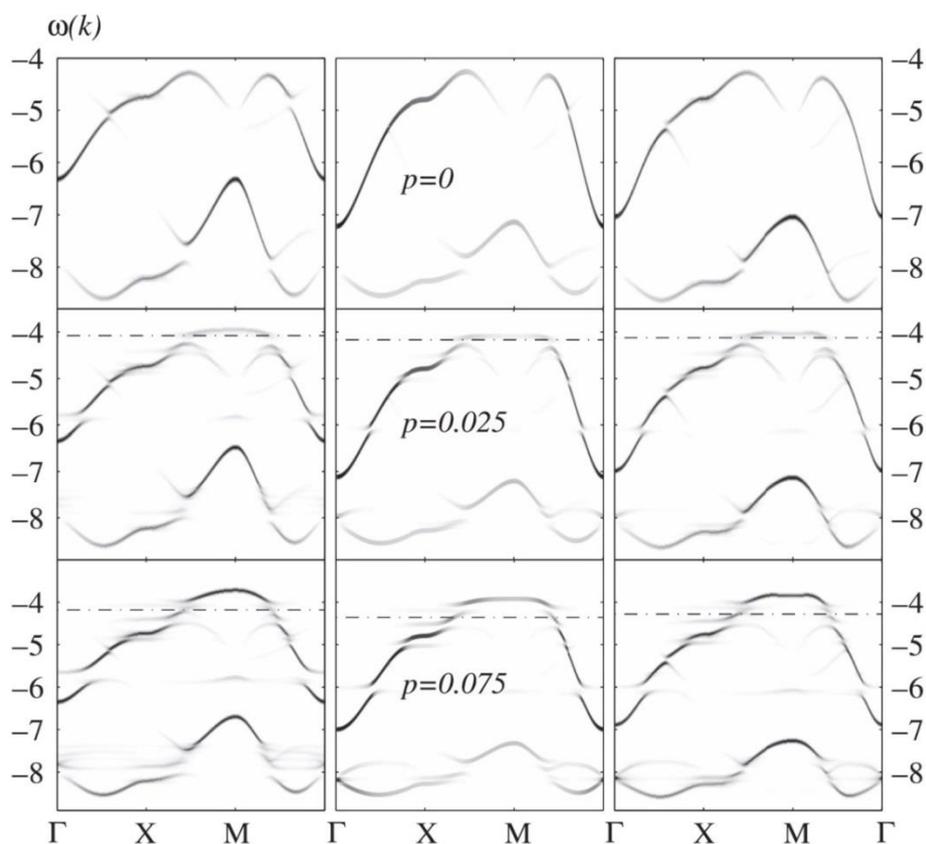


Рисунок 2.1. Электронная структура в нижней Хаббардовской зоне, рассчитанная в $t - J$ модели (левый ряд), в модели Хаббарда (средний ряд), в $t - J^*$ модели (правый ряд) при $U = 12t$ для трех значений допирования дырками p . Здесь и далее энергия в единицах t .

На Рисунке 2.1 представлены результаты расчета электронной спектральной функции при $U = 12t$ и учете только ближайших перескоков. На Рисунке 2.1 для модели Хаббарда прослеживаются основные черты нижней Хаббардовской зоны: практически отсутствующий спектральный вес вблизи точки (π, π) при низких

энергиях, появление внутрищелевых состояний с допированием, седловая точка в $(\pi, 0)$, а также присутствие высокоэнергетических подзон, существование которых было показано ранее в рамках QMC [139]. В то время как верхняя и нижняя зоны Хаббарда проистекают из расщепления одноэлектронной зоны вследствие эффектов сильных корреляций уже в простейшем приближении Хаббард-I, нижняя зона Хаббарда имеет дополнительное расщепление из-за присутствия ближнего магнитного порядка.

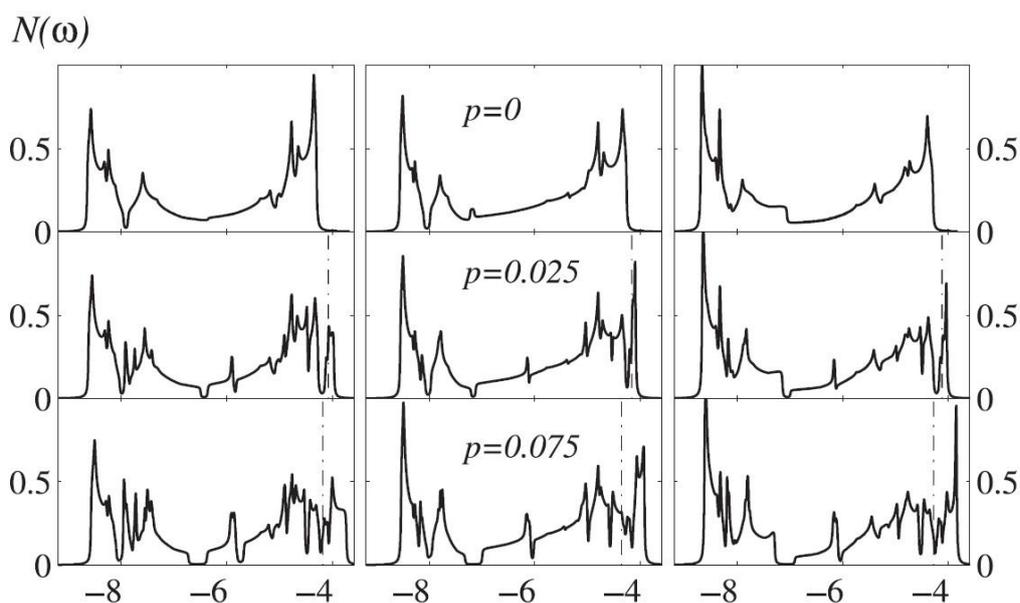


Рисунок 2.2. Плотность состояний в нижней Хаббардовской зоне, рассчитанная в $t - J$ модели (левый ряд), в модели Хаббарда (средний ряд), в $t - J^*$ модели (правый ряд) при $U = 12t$ для трех значений допирования дырками p .

Сравнивая представленные на Рисунке 2.1 дисперсии для модели Хаббарда и $t - J$ модели, можно заметить сильные количественные различия между ними (энергия представлена в единицах t). В нижней зоне Хаббарда можно выделить две основные подзоны с зависящим от импульса спектральным весом, как было ранее показано в рамках QMC [139]. В $t - J$ модели эти подзоны имеют примерно одинаковую ширину в отличие от модели Хаббарда, где верхняя подзона значительно шире нижней. В результате характерная щель в плотности состояний

наблюдается при $\omega \approx -7t$ в модели Хаббарда и при $\omega \approx -6.5t$ в $t - J$ модели (см. Рисунок 2.2). Из Рисунка 2.2 видно, что характерный максимум дисперсии в точке $M(\pi, \pi)$ для $t - J$ модели находится значительно ниже по энергии (примерно на $1.5t$), чем для модели Хаббарда. Кривая внутрищелевых состояний при конечном допировании имеет практически плоскую форму в модели Хаббарда, и ярко выраженный максимум в $t - J$ модели. Также, в силу того, что в модели Хаббарда спектральный вес перераспределяется между верхней и нижней зонами, интенсивность упомянутого максимума дисперсии в точке (π, π) в модели Хаббарда заметно ниже, чем в $t - J$ модели.

При учете трехцентровых процессов (1.7) дисперсия $t - J^*$ модели практически идентична модели Хаббарда, как это видно из сравнения дисперсий на Рисунке 2.1. В частности, для $t - J^*$ модели (в отличие от $t - J$ модели) и модели Хаббарда совпадают положения максимума дисперсии в точке (π, π) , форма кривой внутрищелевых состояний практически плоская в $t - J^*$ модели, весьма схожи и более тонкие черты. Имеется количественное согласие между положениями щели в плотности состояний на Рисунке 2.2. Однако аналогично случаю $t - J$ модели спектральный вес в точке (π, π) превышает аналогичный в модели Хаббарда в силу отсутствия перераспределения между верхней и нижней зонами в $t - J^*$ модели.

Заметим, что, несмотря на различия в высокоэнергетической части спектра, дисперсия при малых энергиях под уровнем Ферми обладает сходством для всех трех моделей. Графики представлены с использованием уширения лоренцианом $\delta = 0.01t$, что значительно ниже разрешения ARPES, и позволяет исследовать тонкие черты спектра. Нетривиальный вывод, который из этого можно заключить, состоит в том, что все три модели подходят для качественного описания низкоэнергетических свойств дырочно-допированных ВТСП купратов. Противоположный вывод можно сделать для высокоэнергетической части спектра, для исследования которой $t - J$ модель использовать, как видно из представленных результатов, не следует.

Обратимся к сравнению электронной структуры данных моделей при более низком значении кулоновского отталкивания $U = 6t$, представленного на Рисунках 2.3. и 2.4. В этом случае в дисперсии $t - J$ модели при ненулевом допировании прослеживается наличие разрывов, отсутствующих в модели Хаббарда. При этом учет трехцентровых перескоков в значительной степени их устраняет. Стоит заметить, что в данном случае электронная структура $t - J$ модели значительно отличается от наблюдаемой в модели Хаббарда и $t - J^*$ модели даже при малых энергиях. Таким образом, даже при достаточно малом значении кулоновского отталкивания спектр $t - J^*$ модели находится в хорошем согласии со спектром модели Хаббарда, чего нельзя сказать о $t - J$ модели.

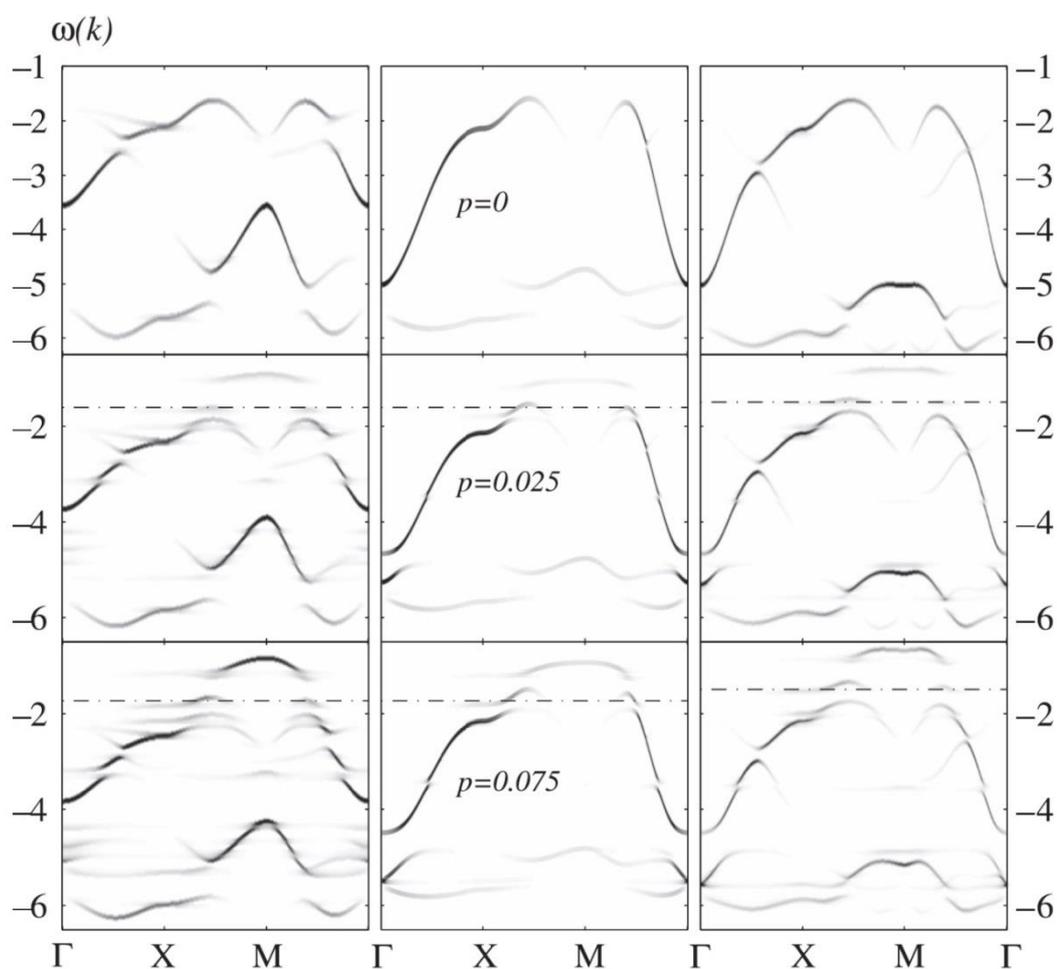


Рисунок 2.3. То же, что и на Рисунке 2.1 для $U = 6t$.

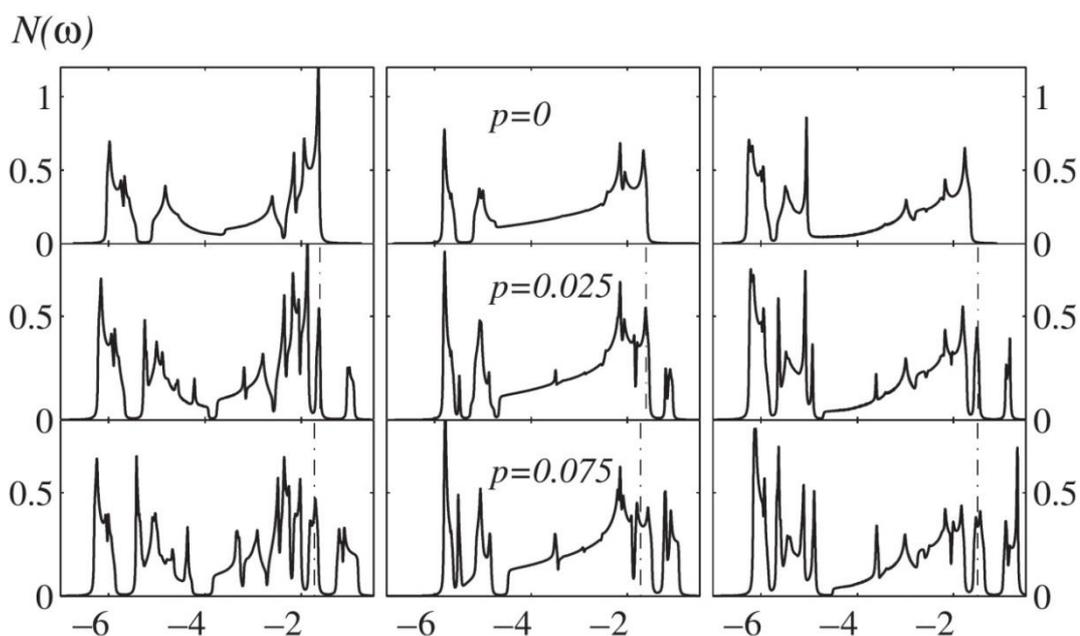


Рисунок 2.4. То же, что и на Рисунке 2.2 для $U = 6t$.

В настоящей главе показано, что в то время как на низкоэнергетическом масштабе и вблизи половинного заполнения $\omega \sim J$ все три модели способны качественным образом описывать электронную структуру ВТСП купратов, на высокоэнергетическом $\omega \sim t$ и при увеличении допирования в $t - J$ модели обнаруживаются значительные отличия по отношению к модели Хаббарда. Исследование высокоэнергетической электронной структуры также является важным для понимания физики ВТСП купратов. На этом масштабе в ARPES наблюдаются высокоэнергетические кинки и «водопады» в широкой области допирования, как электронного, так и дырочного. В качестве примера можно привести то, что в результатах работы [140] в рамках модели Хаббарда и работы [141] в рамках $t - J$ модели имеется качественное различие, выражающееся в отсутствии высокоэнергетического кинка в электронно допированном случае $t - J$ модели, которое может проистекать из пренебрежения трехцентровыми слагаемыми в $t - J$ модели.

Ранее в литературе указывалось на важность трехцентровых слагаемых, в том числе, на формирование сверхпроводящего состояния [73, 74]. В данной главе описано детальное сравнение электронной структуры в трех моделях. Основные

выводы находятся в общем согласии с результатом сравнения трех моделей, выполненным в рамках точного решения двухузельной задачи [142]. Также результаты согласуются с опубликованной позже статьей [138], где аналогичное сравнение проведено при половинном заполнении и с учетом ближних корреляций в кластере 4×4 в СРТ.

Глава 3. Эволюция псевдощели и спиновых корреляций с допированием и температурой в модели Хаббарда

Псевдощель, представляющая собой провал низкоэнергетического спектрального веса, который приводит к значительному отличию системы от слабо коррелированного металла, является характерной особенностью ВТСП купратов в широкой области допирования и температур. Модель Хаббарда является наиболее используемой в литературе моделью для изучения физики ВТСП купратов. Исследования псевдощелевого состояния в 2D модели Хаббарда и ее эффективной низкоэнергетической $t - J$ модели проводились в рамках значительного числа работ и методов. Стоит заметить, что исследованию зависимости псевдощели с допированием уделено значительно больше внимания, чем ее температурной эволюции, которой до сих пор недостает систематического исследования.

Из исследований 2D модели Хаббарда и $t - J$ модели известно, что ближние АФМ корреляции имеют значительное влияние на псевдощель. Представляется актуальным качественным образом сравнить температурную эволюцию электронной спектральной функции в модели Хаббарда с основными закономерностями, прослеживаемыми в ARPES, для того, чтобы прояснить роль электронных корреляций в явлении псевдощели. Из ARPES известно, что при низких температурах и допировании поверхность Ферми представляет собой арку вследствие значительного изменения электронной собственно-энергетической части от нодального к антинодальному направлению [143]. А также, что с ростом температуры происходит рост дуги Ферми-арки [30, 62, 63], схожим образом с тем, как это происходит с допированием. Относительно недавно полученные результаты ARPES приводят к заключению, что существует, по крайней мере, одна критическая температура выше T_c внутри псевдощелевой фазы [64, 65].

Представляется актуальным проверить, может ли физика электронных корреляций в модели Хаббарда приводить к немонотонному поведению такого вида.

Ниже приводятся результаты исследования эволюции электронной структуры в модели Хаббарда с допированием и температурой в рамках СРТ. В расчетах использован кластер 4×4 для случая допирования и кластер из 12 узлов для случая с температурой, как показано на Рисунке 3.1.

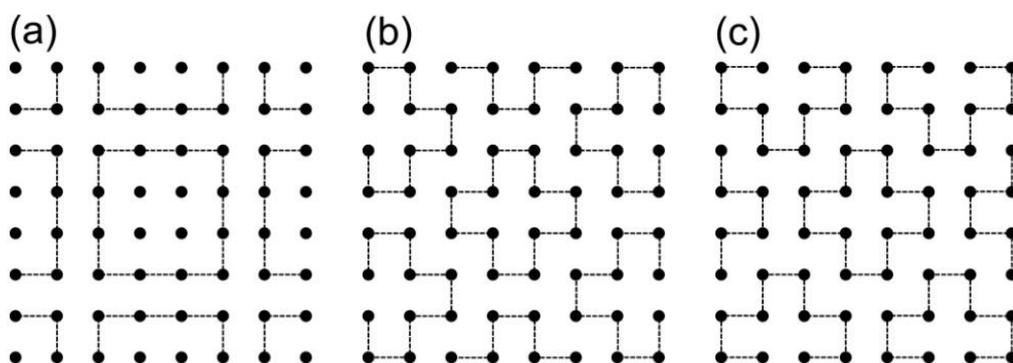


Рисунок 3.1. Кластерное покрытие решетки для (a) кластера 4×4 , (b) и (c) 12-узельного кластера. Во втором случае матрица перескоков усреднялась по двум покрытиям схожим образом с работой [59].

Следует отметить, что в настоящее время размер кластера 4×4 является максимальным для СРТ расчетов при $T = 0$, согласно литературным данным. Такой кластер позволяет точно учитывать корреляции вплоть до девятых соседей. Расчеты при конечных температурах в СРТ в литературе практически отсутствуют, по-видимому, из-за резкого роста числа возбужденных состояний. В представлении X -операторов нам частично удалось уменьшить число возбужденных состояний, но все-таки максимальный доступный размер кластера при конечных температурах - двенадцать узлов, что позволяет точно учитывать корреляции вплоть до восьмых соседей. Поэтому мы надеемся, что эти два типа расчетов можно сравнивать друг с другом. Вместе с электронной спектральной функцией также исследуются внутрикластерные спиновые корреляционные

функции, которые имеют значительное влияние на спектр и таким образом предоставляют информацию о взаимоотношении ближнего магнитного порядка и электронного спектра. Будет показано, что, в согласии с некоторыми применявшимися ранее методами, эволюция низкоэнергетического электронного спектра от низкого к высокому допированию при нулевой (или низкой) температуре проходит через три стадии. В рамках псевдощелевого состояния можно выделить сильно псевдощелевое состояние (SPG - strong pseudogap) при малом допировании и слабо псевдощелевое состояние (WPG - weak pseudogap) при более высоком допировании. Заметим, что данные термины уже использовались в литературе ранее [144] в несколько отличном контексте, однако являются подходящими в настоящей работе. При более высоком допировании псевдощель закрывается, и наблюдается состояние, схожее с нормальной Ферми-жидкостью (NFL - Normal Fermi Liquid). Далее показано, что температурная эволюция электронной структуры схожа с эволюцией, протекающей с допированием. При ослаблении спиновых корреляций за счет повышения температуры или допирования развивается дисперсия типа Хаббард-I в согласии с результатами QMC [139], что приводит к превращению Ферми-арки в большую Ферми-поверхность. В случае с температурой изменения электронной структуры тоже проходят через три подобных стадии.

Заметим, что СРТ ранее применялась преимущественно для случая нулевой температуры, в отличие от представленных здесь результатов, где впервые предпринимается детальное исследование температурной зависимости псевдощели в рамках данного метода. Также будет показано наличие качественного сходства результатов с данными ARPES, что говорит о важной роли ближнего магнитного порядка в физике псевдощелевого состояния. Поскольку в данном исследовании не учитывается электрон-фононное взаимодействие, результаты не позволяют обсуждать волны зарядовой плотности, которые также считаются важной частью физики ВТСП купратов [37].

3.1 Концентрационная зависимость электронной структуры купратов с дырочным допированием в модели Хаббарда

Рассмотрим эволюцию с допированием при нулевой температуре электронной структуры системы, описываемой гамильтонианом модели Хаббарда (1.4) в рамках СРТ с использованием кластера 4×4 . За основной набор параметров примем следующие значения кулоновского отталкивания и перескоков между вторыми и третьими соседями: $U = 8t, t' = -0.2t, t'' = 0.15t$, где t - амплитуда ближайших перескоков.

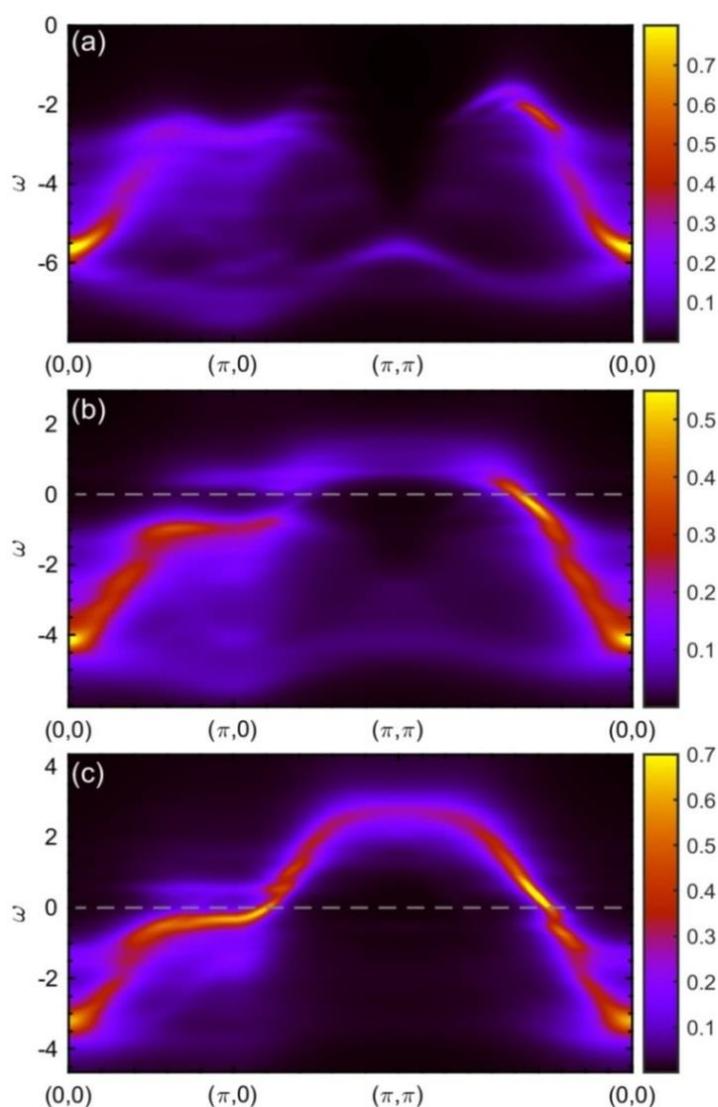


Рисунок 3.2. Карта распределения спектрального веса в нижней зоне Хаббарда при $T = 0$ и дырочном допировании (a) $p = 0$, (b) $p = 0.0625$, (c) $p = 0.25$.

На Рисунке 3.2 представлена карта спектрального веса в нижней хаббардовской зоне электронов. Наиболее заметная черта заключается в том, что дисперсия типа Хаббард-I проявляется с увеличением допирования. В первую очередь это видно по тому, каким образом спектральный вес вблизи точки (π, π) исчезает под уровнем Ферми, и в тоже время дисперсия электронов выше уровня Ферми становится более когерентной (схожим образом с работой [145]). Как следствие, Ферми-поверхность постепенно трансформируется из Ферми-арки на Рисунке 3.3 (a) в большую поверхность на Рисунке 3.3 (d). Псевдощель четко прослеживается в провале спектрального веса вблизи уровня Ферми в направлении $(\pi, 0) - (\pi, \pi)$ на Рисунке 3.2 (b), однако отсутствует при большом допировании на Рисунке 3.2 (c). Также следует заметить, что в данных результатах присутствуют другие провалы спектрального веса, которые не связаны с псевдощелевым поведением. Примером служит Рисунок 3.3 (d), где видно несколько таких провалов на поверхности Ферми. Они являются следствием формирования искусственной волны плотности из-за введения в методе кластерной сверхрешетки и присущи кластерным методам (см. детальное рассмотрение в работе [146]).

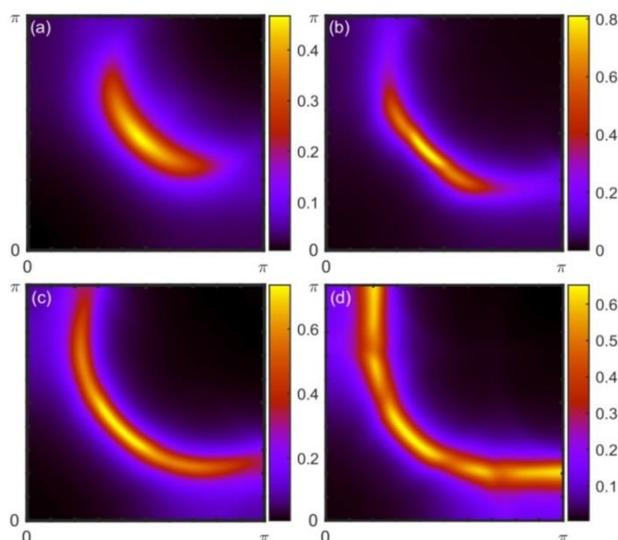


Рисунок 3.3. Карта распределения спектрального веса на поверхности Ферми при $T = 0$ при дырочном допировании (a) $p = 0.0625$, (b) $p = 0.125$, (c) $p = 0.1875$, (d) $p = 0.25$.

На Рисунке 3.4 представлена зависимость от допирования внутрикластерных спин-спиновых корреляторов,

$$C_i = \langle (n_{\uparrow a} - n_{\downarrow a})(n_{\uparrow b} - n_{\downarrow b}) \rangle_{|\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b| \in i}, \quad (3.1)$$

где $\langle \dots \rangle_{|\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b| \in i}$ обозначает то обстоятельство, что корреляционные функции дополнительно усреднены по узлам a и b , разность радиус-векторов которых принадлежат координационной сфере i . Корреляторы (3.1) вычисляются без использования СРТ в рамках точной диагонализации кластера с открытыми граничными условиями, и их влияние содержится в спектрах, рассчитанных в СРТ.

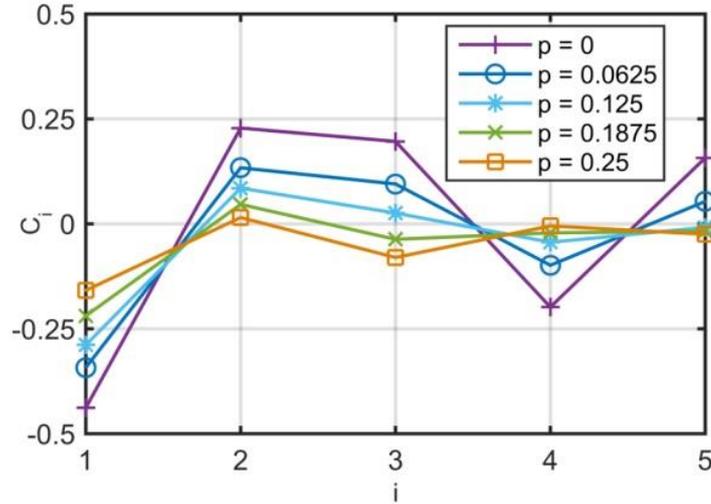


Рисунок 3.4. Спинные корреляторы, определенные выражением (3.1) в зависимости от допирования при $T = 0$.

Рассмотрим эволюцию ближнего магнитного порядка на Рисунке 3.4 вместе с электронной структурой на Рисунках 3.2 и 3.3. При значениях допирования $p = 0, p = 0.0625$ и $p = 0.125$ в системе присутствует ближний АФМ, $C_1 < 0, C_2 > 0, C_3 > 0, C_4 < 0$ и $C_5 > 0$, поскольку дальний порядок не реализуется из-за конечности системы. При малом и нулевом допировании влияние АФМ четко прослеживается на Рисунке 3.2 (a), (b). Рассмотрим величину, представляющую собой отношение спектрального веса в антинодальном/нодальном направлении на уровне Ферми: $R = A_{AN}(\mathbf{k}_F, \omega = 0)/A_N(\mathbf{k}_F, \omega = 0)$. При допировании $p \leq 0.125$

значение R мало и меняется очень слабо, как видно из Рисунков 3.3 и 3.5 (a). Такое поведение мы в дальнейшем будем называть SPG. При анализе данных по псевдощели из ARPES зачастую вводится симметризованная спектральная функция

$$A_s(\omega, \mathbf{k}_F) = f(\omega, \beta)A(\omega, \mathbf{k}_F) + f(-\omega, \beta)A(-\omega, \mathbf{k}_F), \quad (3.2)$$

где \mathbf{k}_F определяется как точка соответствующая максимальному спектральному весу в антинодальном направлении, и $f(\omega, \beta)$ - распределение Ферми-Дирака. Антинодальные спектры на Рисунке 3.5 (b) проявляют выраженное псевдощелевое поведение при низком допировании, т.е. SPG.

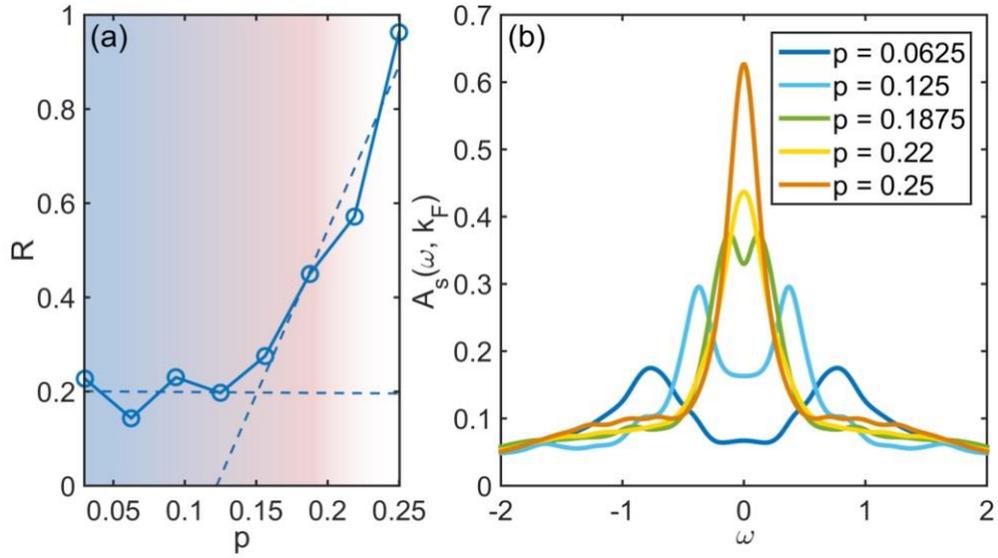


Рисунок 3.5. (a) Величина R , определенная выше в тексте, в зависимости от допирования; пунктирные линии получены линейной аппроксимацией; переходы между тремя фоновыми цветами отражают переходы SPG-WPG-NFL. (b) Симметризованный антинодальный спектр (3.2) (для получения гладких кривых использована функция Ферми-Дирака с конечной температурой $\beta = 12/t$).

При большем допировании $p = 0.1875$ прослеживается качественное изменение ближнего порядка: $C_1 < 0$, $C_2 > 0$, и $C_3 < 0$, остальные практически нулевые. Таким образом, произошла смена знака третьих корреляторов, что

может быть проявлением ферромагнетизма Нагаоки [147]. Данные знаки корреляций показывают уменьшение корреляционного радиуса ближнего АФМ порядка. В то же время наблюдается заметный рост величины R , начиная с $p = 0.125$ на Рисунке 3.5 (а). Однако, как видно из Рисунка 3.5 (b), по-прежнему реализуется псевдощелевое состояние в виде провала при $p = 0.1875$. Заметно, что при данном допировании Ферми-поверхность выглядит уже схожей с таковой для нормального металла - затухание в антинодальном направлении выражено не столь сильно, как при SPG. Таким образом, распределение спектрального веса и ближний магнитный порядок качественно отличаются от случая SPG. Поэтому для данного региона по допированию будем использовать термин «слабая псевдощель» WPG. В представленных результатах вычислений кроссовер между SPG и WPG является гладким переходом в диапазоне $0.125 \lesssim p \lesssim 0.1875$. По пересечению пунктирных линий на Рисунке 3.5(a) точку кроссовера можно определить как $p_{c1} \approx 0.15$. При $p \gtrsim p_{c2} \approx 0.2$ псевдощель закрыта [см. Рисунок 3.5 (b)], при $p = 0.25$ признаки АФМ заметны только для первой координационной сферы на Рисунке 3.4 - соответственно, наблюдается большая Ферми-поверхность на Рисунке 3.3 (d). Данную область допирования будем упоминать в дальнейшем как нормальную ферми жидкость NFL. Представленная эволюция Ферми-поверхности была ранее получена в рамках кластерного DMFT [41, 56, 57], в подходе композитных операторов [148], и находится в согласии с расчетами в рамках DCA [128]; увеличение Ферми-арки с допированием и переход ее в большую поверхность хорошо известно из ARPES [26-29, 149-151].

Рассмотрим изменение электронной структуры для другого набора параметров. Положим $t'' = 0$, поскольку третьи перескоки значительно влияют на спектр, делая более выраженным максимум дисперсии в нодальном направлении. Рассмотренный выше случай $t'' = 0.15t$ качественным образом описывает электронную структуру таких соединений, как $Tl_2Ba_2CuO_{6+\delta}$ и $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, в которых даже при высоких значениях допирования не происходит перехода от

дырочно-подобной Ферми-поверхности вокруг (π, π) к электронно-подобной вокруг $(0,0)$ [151-153], в отличие от случая нулевых третьих перескоков.

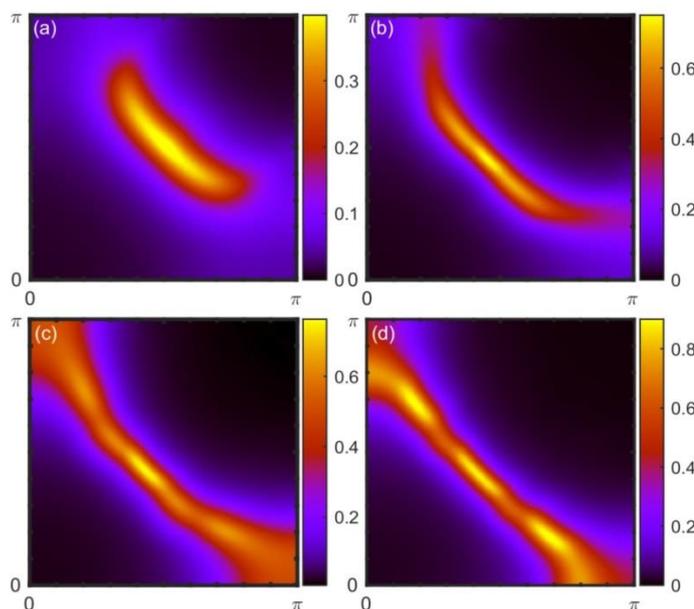


Рисунок 3.6. То же, что и на Рисунке 3.3 при $t'' = 0$.

На Рисунке 3.6 при $p = 0.0625$ и $p = 0.125$ распределение спектрального веса обладает сильным сходством с рассмотренным ранее на Рисунке 3.3, но при большем допировании различия существенны. При $p = 0.25$ распределение спектрального веса говорит о наличии кармана электронного типа, как наблюдалось в соединении $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [150, 154, 155].

Для случая нулевых третьих перескоков значения спиновых корреляций практически неотличимы от предыдущего случая вплоть до $p = 0.125$. При большем допировании ближний АФМ внутри кластера разрушается быстрее, как видно из Рисунка 3.7. Как и в предыдущем случае, возникновение быстрого роста отношения R на Рисунке 3.8 (а) происходит примерно при тех же значениях допирования, при которых разрушается ближний АФМ. Можно заключить, что при $p < 0.125$ снова наблюдается SPG. Уровень Ферми находится вблизи дна псевдощели, минимум на Рисунке 3.8 (а) соответствует ее нижней точке. Закрывается псевдощель в данном случае при гораздо меньшем допировании, как

видно из Рисунка 3.8 (b). Поэтому WPG оказывается ограниченной диапазоном $0.125 \lesssim p \lesssim 0.15$. В целом, эволюция электронной структуры согласуется с предыдущим случаем. Основное различие заключается в том, что АФМ разрушается быстрее, а также быстрее закрывается псевдощель.

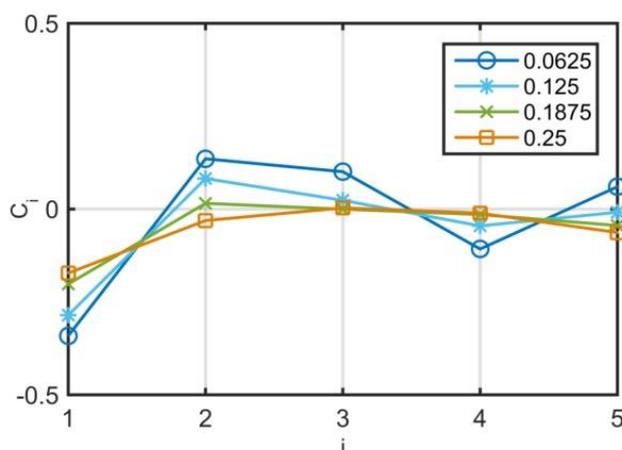


Рисунок 3.7. То же, что и на Рисунке 3.4 при $t'' = 0$.

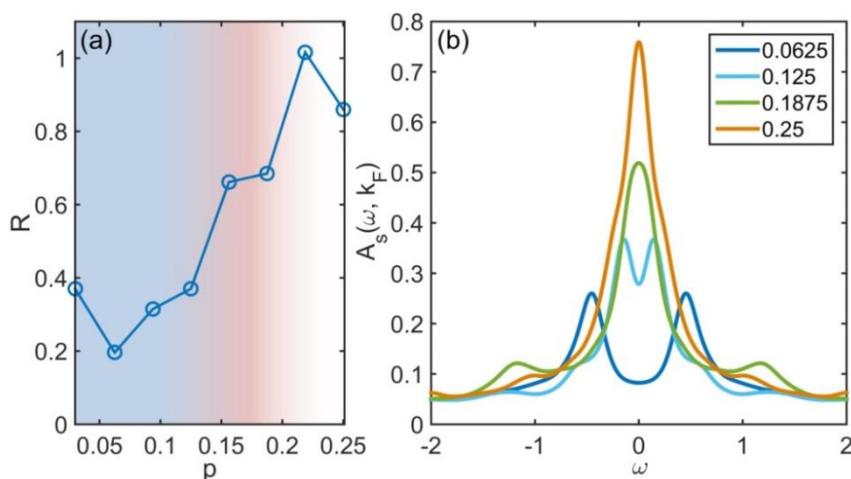


Рисунок 3.8. То же, что и на Рисунке 3.5 при $t'' = 0$.

3.2 Температурная зависимость электронной структуры купратов с дырочным допированием в модели Хаббарда

Поскольку при исследовании температурных свойств приходится ограничиваться кластером из двенадцати узлов, сперва сопоставим результаты

при $T = 0, p = 0.167$, полученные с кластерами 4×4 и 12 узлов. Значения для корреляторов при данном допировании были получены путем оценки допирования через заселение статистических весов основного и допированного секторов аналогично вычислению кластерной функции Грина (см. раздел 1.4). Из Рисунка 3.9 видно качественное согласие между дисперсиями, полученными с 12-узельным и 16-узельным кластерами. Несмотря на согласие основных черт спектра, есть различия на более мелком масштабе. Псевдощелевой провал спектрального веса заметно более выражен в случае 12-узельного кластера. Анализируя спиновые корреляторы на Рисунке 3.10, можно заметить, что ближний АФМ присутствует по крайней мере до четвертой координационной сферы для 12-узельного кластера, тогда как в рамках 16-узельного он нарушен уже на третьей координационной сфере. Значения на первых двух координационных сферах проявляют количественное согласие. Из приведенных данных можно заключить, что эффект формы и размера кластера приводит к тому, что SPG реализуется для 12-узельного кластера, а WPG для 16-узельного при данном значении допирования.

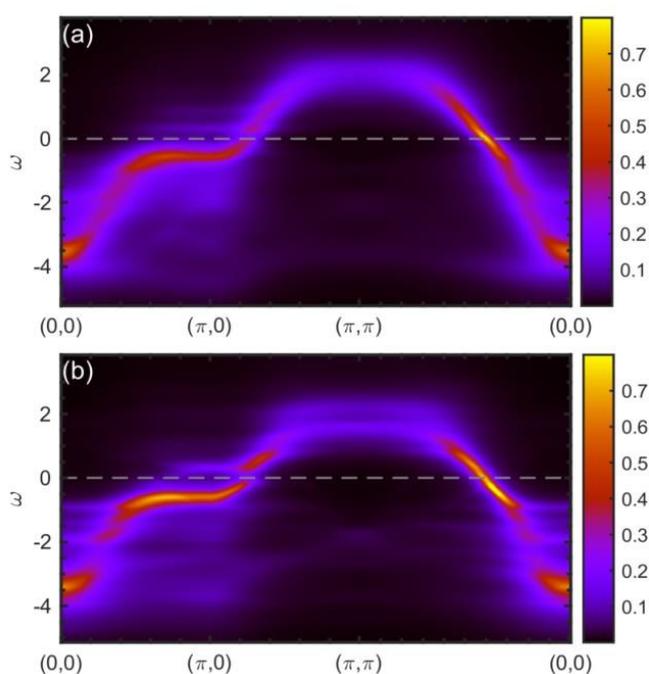


Рисунок 3.9. Карта распределения спектрального веса, полученная при $T = 0, p = 0.167$ с использованием (a) 16-узельного, (b) 12-узельного кластера.

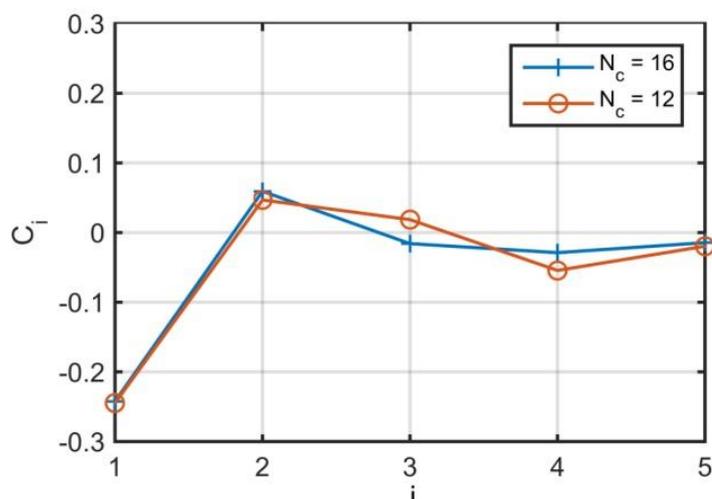


Рисунок 3.10. Значения спиновых корреляций при $T = 0, p = 0.167$.

Далее рассмотрим влияние температуры на спектр в присутствии только ближайших перескоков и при нулевом допировании, поскольку в этом случае можно сопоставить результаты с данными QMC (в котором в допированном случае имеется проблема знака) и оценить адекватность осуществляемых в работе расчетов. На Рисунке 3.11 представлен электронный спектр для двух значений обратной температуры, $\beta = 10/t$ и $\beta = 3/t$. Характерной чертой является то, что при низкой температуре в окрестности точки (π, π) основная часть спектрального веса сосредоточена при энергии $\omega \approx -6t$, а значительное количество низкоэнергетического спектрального веса ($\omega \approx -2t$) сосредоточено вблизи $(\pi/2, \pi/2)$ - спектр содержит значительное влияние АФМ корреляций. Повышение температуры приводит к перераспределению спектрального веса в окрестности (π, π) в область низких энергий. В результате при $\beta = 3/t$ отчетливо прослеживается дисперсия наподобие Хаббард-I в согласии с QMC [139]. При низкой температуре $\beta = 10/t$ ближний АФМ дает качественно схожую картину с QMC, где учитывается намного больше корреляций. При $\beta = 3/t$ согласие между методами становится еще более выраженным. Также картина при $\beta = 3/t$ согласуется с недавно полученными результатами в рамках VCA [156, 157].

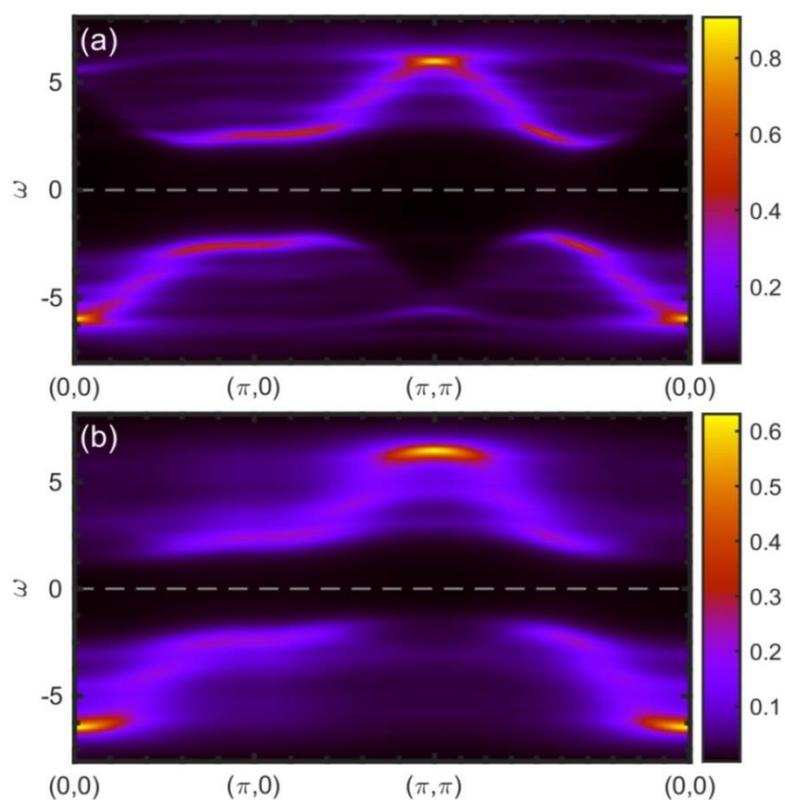


Рисунок 3.11. Карта распределения спектрального веса, полученная при нулевом допировании в случае только ближайших перескоков с использованием 12-узельного кластера при (a) $\beta = 10/t$, (b) $\beta = 3/t$.

Перейдем к исследованию температурной эволюции спектральной функции, рассчитанной с использованием кластера из двенадцати узлов при фиксированном допировании $p = 0.167$ (точнее, $p = 1/6$, т.е. 10 электронов на кластер). В этом разделе используется основной набор параметров, $t' = -0.2t, t'' = 0.15t$. Основные закономерности изменения спектральной функции с нагреванием системы прослеживаются на Рисунке 3.12. Участок дисперсии вблизи точки (π, π) становится более когерентным, и дисперсия типа Хаббард-I становится более выраженной, однако, особенность типа «водопад» прослеживается и при весьма высокой температуре $\beta = 4/t$. Как видно из антинодального среза, псевдощель постепенно закрывается. Она является ярко выраженной при $\beta = 24/t$, еще видна при $\beta = 8t$, но уже отсутствует при $\beta = 4/t$.

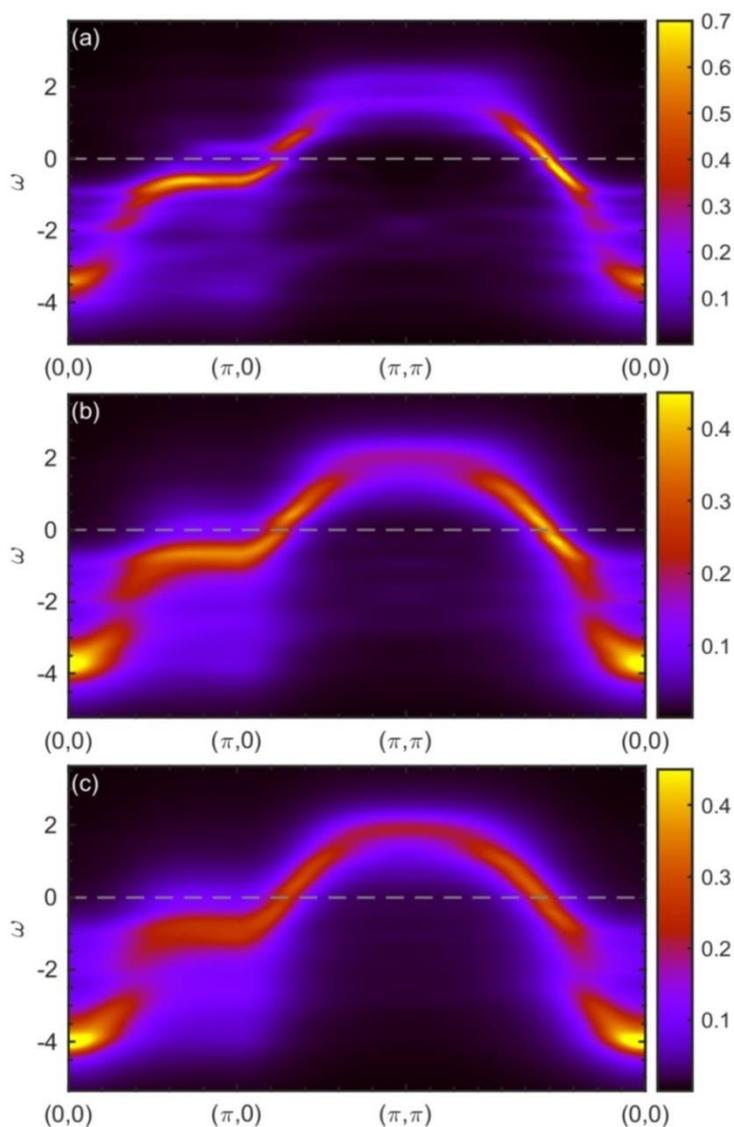


Рисунок 3.12. Карта распределения спектрального веса, полученная с кластером 12 узлов при допировании $p = 0.167$ и обратной температуре (a) $\beta = 24/t$, (b) $\beta = 8/t$, (c) $\beta = 4/t$.

Как и в случае с допированием, рассмотрим эволюцию электронной структуры с температурой на Рисунках 3.12 и 3.13 вместе с изменением спиновой корреляционной функции, значения которой показаны на Рисунке 3.14. На Рисунке 3.13 наблюдается рост Ферми-арки в качественном согласии с ARPES [30, 62, 63]. Схожий результат был получен в рамках среднеполевого подхода для $t - J$ модели как проявление ближнего зарядового порядка [158].

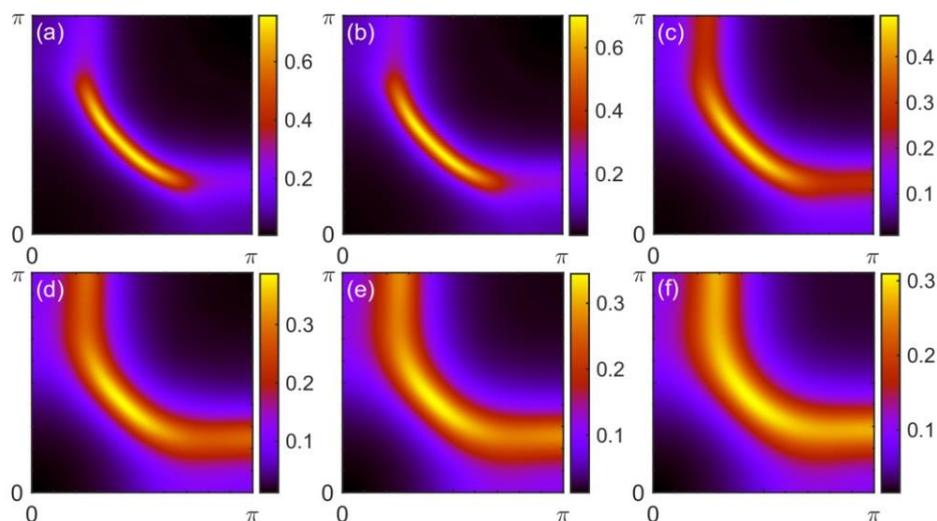


Рисунок 3.13. Карта распределения спектрального веса на уровне Ферми, полученная с 12-узельным кластером при допировании $p = 0.167$ и обратной температуре

(a) $\beta = 10000/t$, (b) $\beta = 24/t$, (c) $\beta = 12/t$, (d) $\beta = 8/t$, (e) $\beta = 6/t$, (f) $\beta = 4/t$.

При увеличении температуры спиновые корреляторы уменьшаются в той же манере, как и в случае с допированием. Для низких температур $\beta = 10000/t$ и $\beta = 24/t$ наблюдается ближний АФМ до четвертой сферы, при котором $C_1 < 0, C_2 > 0, C_3 > 0, C_4 < 0$. При $\beta = 10000/t$ и $\beta = 24/t$ величины отношения R на Рисунке 3.15 (a) практически идентичны, наблюдается SPG. При $\beta = 12/t$ АФМ корреляции присутствуют только до второй координационной сферы. На третьей они меняют знак, а далее стремятся к нулю. Можно заключить, что переход от SPG к WPG происходит приблизительно между $\beta = 24/t$ и $\beta = 12/t$. Переход к NFL происходит в окрестности $\beta = 6/t$, как видно из Рисунке 3.15 (b). Можно заметить, что, вследствие схожести в поведении спиновых корреляторов в случаях изменения допирования и температуры, формы дисперсии (которые значительно зависят от статических спиновых корреляций) при $p = 0.167$, $\beta = 4/t$ [Рисунок 3.12 (c)] и $p = 0.25$, $T = 0$ обладают значительным сходством. Однако в первом случае спектральная функция обладает значительно большим уширением, как результат различных вкладов динамических эффектов, которые приводят к конечному времени жизни возбуждений (например, см. [22, 98]).

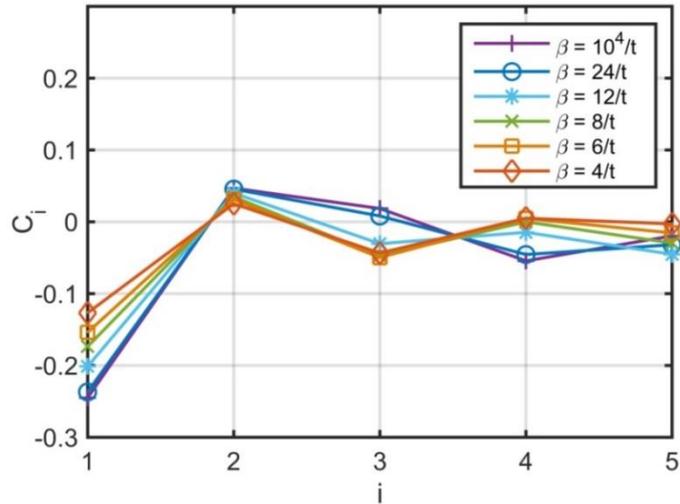


Рисунок 3.14. Спиновые корреляторы в зависимости от температуры для 12-узельного кластера при допировании $p = 0.167$.

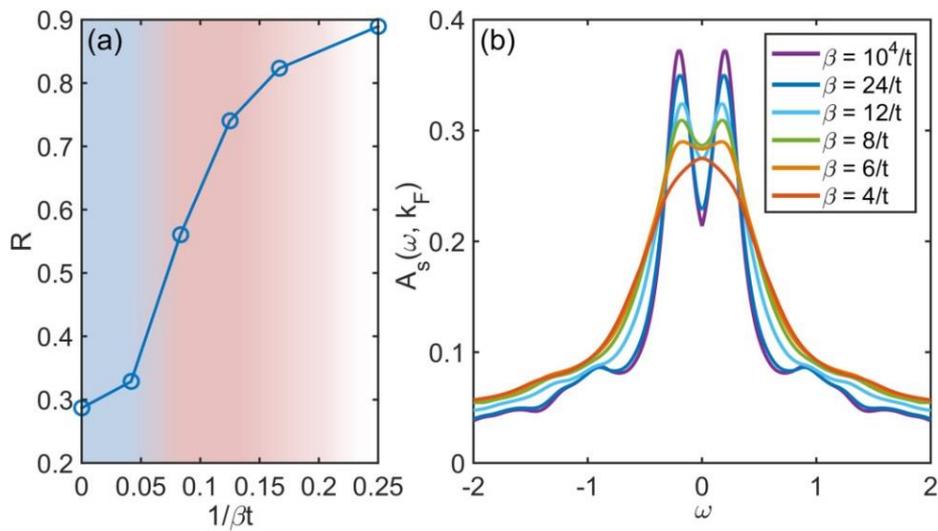


Рисунок 3.15. То же, что и на Рисунке 3.5, но приведена зависимость от температуры, использован кластер из двенадцати узлов, допирование $p = 0.167$.

Симметризованная спектральная функция в антинодальном направлении на Рисунке 3.15 (b) также свидетельствует о прохождении через три режима с температурой. При $\beta = 4/t$ наблюдается пик на уровне Ферми. Провал при $\omega = 0$ начинает проявляться при $\beta \approx 6/t$, что свидетельствует о переходе через температуру формирования псевдощели T^* [30]. При $\beta = 8/t$ и $\beta = 12/t$ псевдощелевой провал заметен, но не очень велик: значение $A_s(\omega = 0, \mathbf{k}_F)$

меньше, чем максимум для пика при $\beta = 4/t$, что снова свидетельствует о WPG. При дальнейшем понижении температуры провал ярко выражен и можно говорить о SPG, в согласии с ранее рассмотренными данными.

3.3. Сравнение эволюции спектральных свойств с допированием и температурой с переходами Лифшица с перестройкой топологии поверхности Ферми

Сравним основные черты эволюций электронной структуры с допированием и температурой, а также с результатами, полученными ранее в $t - J^*$ модели купратов при $T = 0$ в рамках обобщенного приближения среднего поля (GMFA - generalized mean field approximation) для сильно коррелированных систем [58, 159, 160]. Такое сравнение приводится на Рисунке 3.16. В рамках статического приближения отсутствует мнимая часть собственно-энергетической части в $t - J^*$ модели, в то время как ее реальная часть приводит к зависимости электронной структуры от допирования. Эволюция Ферми-поверхности с допированием в рамках GMFA схематически изображена на Рисунке 3.16 (а). В ней прослеживаются три основных режима. При низком допировании имеются четыре малых Ферми-кармана, центрированных вблизи точки $(\pi/2, \pi/2)$, которые увеличивают свой объем при росте допирования и касаются границы зоны Бриллюэна при критическом допировании p_{c1} (в работе [58] $p_{c1} = 0.16$), при котором происходит переход Лифшица со сменой топологии поверхности Ферми. При дальнейшем росте допирования имеется два Ферми-кармана вокруг точки (π, π) . Тот из них, который является внутренним, исчезает при критическом допировании p_{c2} ($p_{c2} = 0.24$ в работе [58]). При большем допировании система соответствует NFL. В данном приближении спектральный вес равномерно распределен по Ферми-контур. В схожем подходе в модели Хаббарда проявляется неравномерное распределение вдоль Ферми-контура вследствие перераспределения веса при переходах между хаббардовскими подзонами [161].

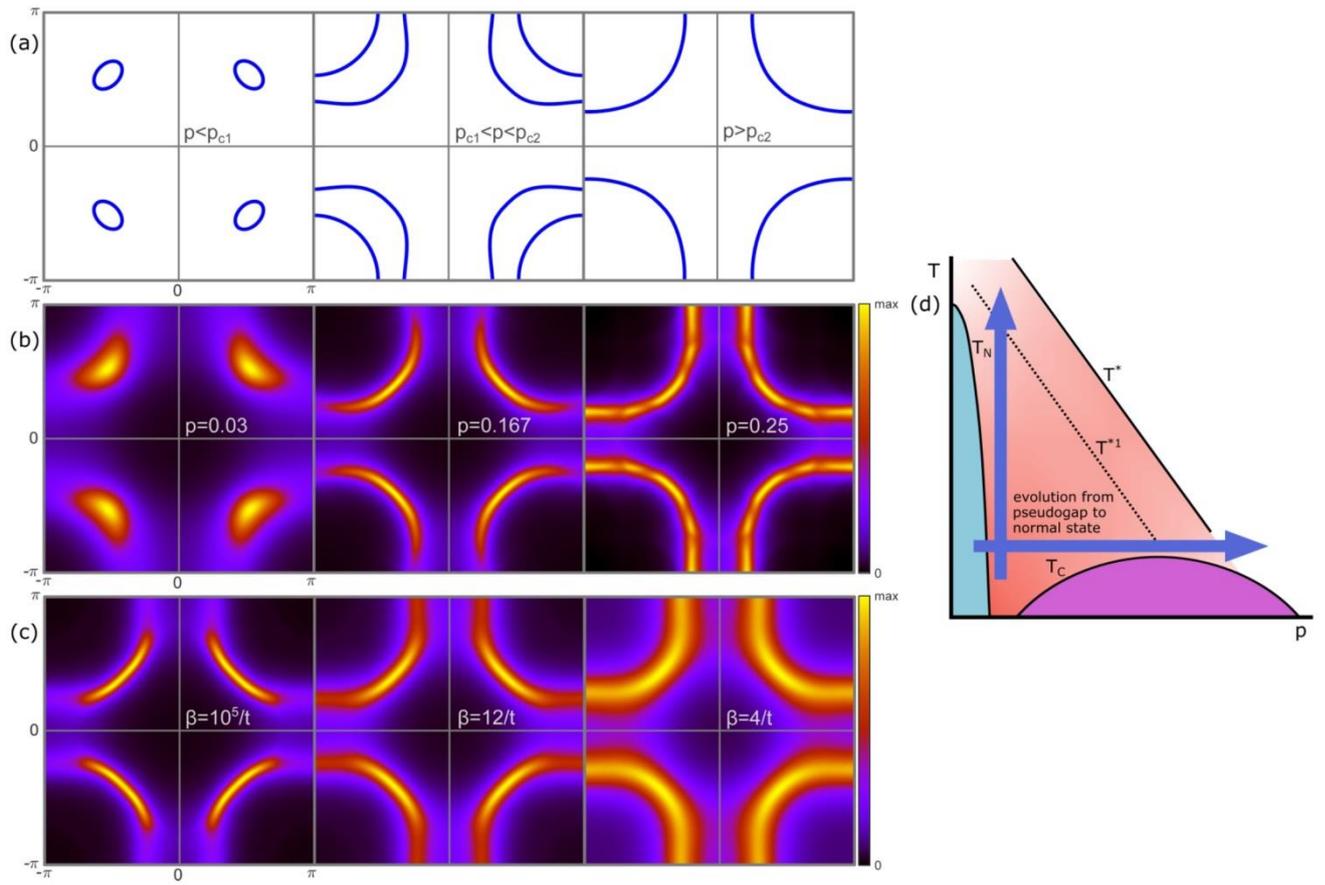


Рисунок 3.16. (а) Схематическое изображение Ферми-поверхности в GMFA для трех значений допирования, разделенных тремя переходами Лифшица, (б) результат СРТ с использованием кластера 4×4 при $T = 0$ для схожих значений допирования, (с) результат СРТ с использованием 12-узельного кластера при $p = 0.167$ для различных температур, (d) предполагаемая схема фазовой диаграммы, вытекающей из данных расчетов: стрелки обозначают два направления, изучаемые в данной работе, T_N - температура Нееля, T_c - температура сверхпроводящего перехода, T^* - температура псевдощели (переход WPG-NFL), T^{*1} - переход SPG-WPG.

Тем не менее, в GMFA реализуются только замкнутые Ферми-карманы, что находится в противоречии с данными ARPES, где наблюдаются Ферми-арки в псевдощелевой фазе, с длиной, зависящей от допирования и температуры. Такое поведение реализуется, только если за счет электронной собственной энергии

будет подавлен спектральный вес на части Ферми-контура, как это было показано в рамках кластерного DMFT и СРТ [56, 59] в терминах полюсов и нулей функции Грина. В представленных здесь вычислениях такое поведение реализуется.

В эволюции с допированием на Рисунке 3.16 (b) можно выделить три режима, SPG, WPG и NFL, переходы между которыми примерно соответствуют критическим концентрациям переходов Лифшица. Также заключение о переходах SPG-WPG и WPG-NFL качественным образом согласуется с исследованиями электронной структуры в рамках DCA при схожем значении электронного взаимодействия [128]. Переход SPG-WPG примерно соответствует переходу между “momentum space differentiated” областью и “sector selective” фазой - в определениях статьи [128]. Переход WPG-NFL соответствует переходу, при котором система входит в NFL режим. Эволюция того же типа для Ферми-поверхности показана на Рисунке 3.16 (c).

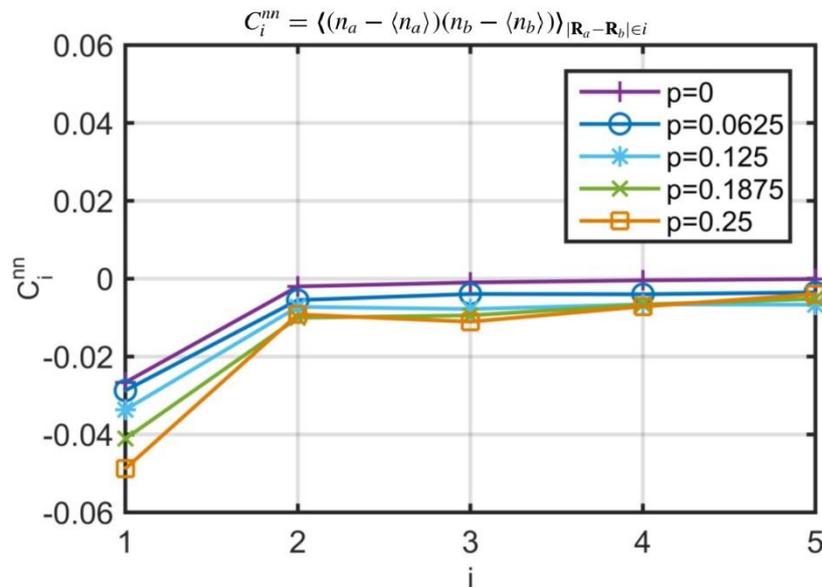


Рисунок 3.17. Зарядовая корреляционная функция в зависимости от допирования при $T = 0$, рассчитанная с кластером 4×4 при $U = 8t, t' = -0.2t, t'' = 0$.

Возможно, переходы от SPG к WPG при T^{*1} и от WPG к NFL при T^* , схематически изображенные на Рисунке 3.16 (d), являются кроссоверами, а не резкими переходами, в силу динамических вкладов в собственно-энергетическую часть на уровне Ферми. Следует заметить, что доминирующее влияние на электронный спектр оказывают спиновые корреляции, которые и обсуждались в тексте данной главы: зарядовые внутрикластерные корреляции в данной работе, где электрон-фононное взаимодействие не рассматривается, оказываются достаточно слабыми и демонстрируют монотонное поведение (см. Рисунок 3.17).

Глава 4. Негейзенберговские эффекты и ближний магнитный порядок в системах со спиновыми кроссоверами

Данная глава посвящена исследованию явления спинового кроссовера. В частности, можно ожидать отклонений от физики гейзенберговского АФМ и нетривиального поведения ближнего магнитного порядка вблизи спинового перехода по давлению. Для этого рассмотрим эффективный спиновый гамильтониан (1.14) для двухзонной модели Канамори с двумя электронами на узел, с АФМ знаком обменной константы J . В выражении (1.14) отсутствуют экситонные процессы, которыми здесь пренебрегается. Иначе говоря, рассматривается симметричный по перескокам случай двухзонной модели, как следует из выражения (1.17).

Рассмотрим в простейшем приближении поведение намагниченности с температурой в рассматриваемой модели. В рамках приближения среднего поля MF (mean field) гамильтониан записывается как

$$H_{MF} = \sum_{m=-1}^{m=1} E_m \sigma X^{mm} - \varepsilon_s X^{ss}, \quad (4.1)$$

где m - проекция спина, E_m соответствующая энергия, σ - средняя намагниченность подрешетки, X -операторы построены на базисе одноузельных состояний $\{|m = -1\rangle, |m = 0\rangle, |m = 1\rangle, |s\rangle\}$. Намагниченность в данном приближении определяется из самосогласованного уравнения

$$\sigma = \frac{\exp(\beta J z \sigma) - \exp(-\beta J z \sigma)}{\sum_{m=-1}^{m=1} \exp(-\beta J z m) + \exp(\beta \varepsilon_s)}, \quad (4.2)$$

где z - число ближайших соседей, β - обратная температура. Отсюда видно, что при значении параметра спиновой щели $\varepsilon_s \rightarrow -\infty$ уравнение (4.2) представляет собой функцию Бриллюэна, и намагниченность ведет себя как в модели Гейзенберга. При увеличении ε_s намагниченность уменьшается относительно значения в модели Гейзенберга.

Из-за присутствия низкоспинового вклада $-\varepsilon_s \sum_i X_i^{ss}$, к выражению (1.14) нельзя напрямую применить метод Тябликова [162, 163], в дальнейшем упоминаемый как RPA (random phase approximation), который неплохо описывает спектр спиновых волн в модели Гейзенберга в присутствии дальнего порядка, но требует обобщения для данного случая, а также более продвинутые подходы, основанные на формализме функций Грина [164-166]. Простейший подход состоит в использовании приближения MF. Однако гейзенберговское слагаемое содержит спиновые флуктуации, которые MF не учитывает. Далее в этой главе будет применяться кластерное обобщение, CMF (cluster MF), применявшееся ранее к различным моделям в теории магнетизма [167-174]. Применение CMF позволяет, в отличие от MF, учесть все возможные конфигурации низкоспиновых состояний внутри кластера и рассматривать высоко- и низкоспиновые конфигурации на равных условиях, а также учесть ближние корреляции. При температурах, близких к фазовому переходу второго рода, данный метод можно рассматривать только как качественный, поскольку он не учитывает флуктуации на дальних расстояниях. При малой температуре, как будет показано ниже для случая нулевой температуры, метод позволяет достичь согласия с более точными подходами.

В CMF решетка покрывается трансляциями кластера. Внутрикластерные корреляции учитываются в рамках точной диагонализации, а межкластерные взаимодействия в рамках MF:

$$\mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f'} \approx S_f^z \langle S_{f'}^z \rangle + \langle S_f^z \rangle S_{f'}^z - \langle S_f^z \rangle \langle S_{f'}^z \rangle, \quad (4.3)$$

где узел f принадлежит выбранному кластеру, f' - соседнему. С учетом эквивалентности кластеров, задача сводится к единственному кластеру в среднем поле, определяемом намагниченностью самого кластера, т.е., набором параметров $\sigma_i = \langle S_i^z \rangle$, где i нумерует узел внутри кластера. В вычислениях, осуществленных в данной работе, предполагается АФМ упорядочение в силу отсутствия конкурирующих обменных параметров, при этом существует конкуренция между обменной энергией и спиновой щелью, которая связана с давлением,

прилагаемым к системе. В представленных ниже результатах вычислений обменный интеграл J взят за единицу энергии. В качестве внешних параметров принимаются температура T и параметр ε_s . Для каждой пары параметров итерационно решается система уравнений на намагниченность, которая вычисляется с использованием точной диагонализации, а также сопоставляются свободные энергии системы в АФМ и парамагнитной фазах для определения реализующейся фазы. Основная часть результатов, которая представлена в разделе 4.1, получена с использованием кластера 2×2 , в разделе 4.2 исследуется влияние граничных эффектов на результаты.

4.1 Негейзенберговские эффекты и ближний магнитный порядок в рамках эффективного спинового гамильтониана для двухзонной модели Канамори в рамках кластерной теории среднего поля с кластером 2×2

В настоящем разделе рассмотрим поведение системы, описываемой гамильтонианом (1.14) вблизи SCO. Как известно, SCO соединения являются трехмерными магнетиками. В предпринимаемых здесь вычислениях рациональней рассматривать 2D случай, поскольку это является вычислительно более целесообразным. В 2D можно использовать кластер 2×2 для получения основных результатов, а также рассматривать зависимость от размера кластера. В 3D же доступен только кластер $2 \times 2 \times 2$, поскольку размер гильбертова пространства зависит как 4^N от количества узлов N : максимально достижимое в расчете количество узлов $N \sim 10$ при использовании метода полной диагонализации, который применяется здесь при $T > 0$ и $N \sim 20$ при нахождении основного состояния для $T = 0$ по Ланцошу. В 2D теорема Мермина-Вагнера запрещает магнитно-упорядоченное состояние при $T > 0$ для сферически симметричного гамильтониана (1.14), но при использовании CMF, который ее нарушает, 2D и 3D случаи качественно идентичны.

Одной из величин, характеризующей SCO, является концентрация LS-состояний n_{LS} , которая экспериментально может быть измерена в рамках рентгеновской или Мёссбауэровской спектроскопии [81]. На Рисунке 4.1 показана LS-концентрация, вычисленная в рамках точной диагонализации без введения MF. Она находится в согласии с MF-вычислениями [95] и *ab-initio* расчетами [175]. SCO происходит при $\varepsilon_s^c = 1.5$ в отличие от среднеполевого значения $\varepsilon_s = 0$, поскольку внутрикластерное обменное взаимодействие стабилизирует высокоспиновое состояние, и требуется большее значение кристаллического поля (давления) для достижения точки кроссовера. Следующий эффект корреляций заключается в появлении кривизны изолиний величины n_{LS} при низких температурах, как это видно из Рисунка 4.1: при пренебрежении обменными корреляциями такие линии являются прямыми линиями, исходящими из критической точки SCO при $\varepsilon_s = 0$ [175, 176].

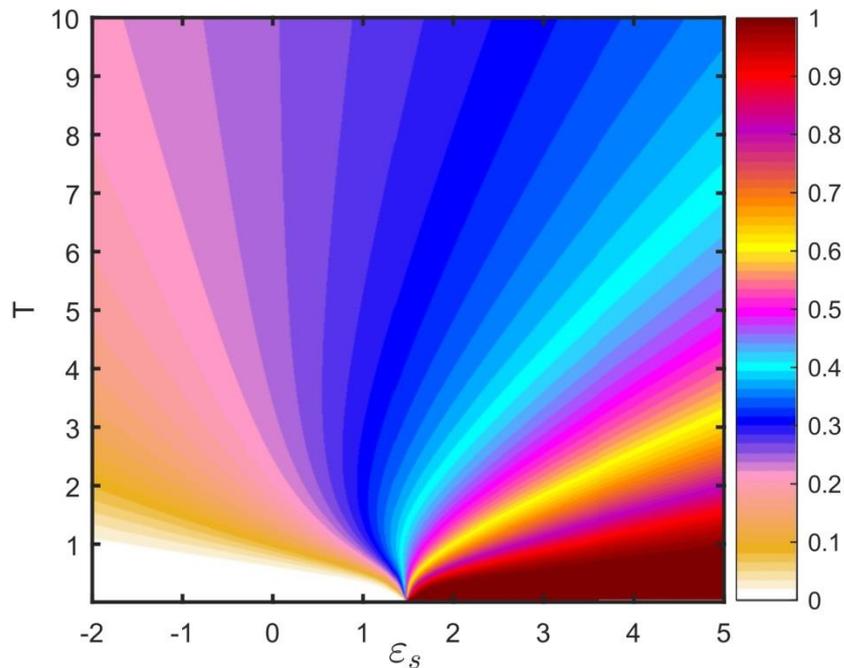


Рисунок 4.1. Концентрация низкоспиновых состояний, вычисленная с помощью точной диагонализации кластера 2×2 . Температура и спиновая щель в единицах J .

На Рисунке 4.2 (а) представлена намагниченность системы, вычисленная с использованием СМФ. При $\varepsilon_s \sim -10$ наблюдается практически гейзенберговское поведение намагниченности, поскольку система при низких температурах оказывается преимущественно в HS-состоянии. При нагревании реализуется переход второго рода из магнитного в парамагнитное состояние. Из Рисунка 4.2 (b) видно, что при $\varepsilon_s \sim -10$ LS-заселенность практически равна нулю при низких температурах, что обеспечивает стандартное гейзенберговское поведение.

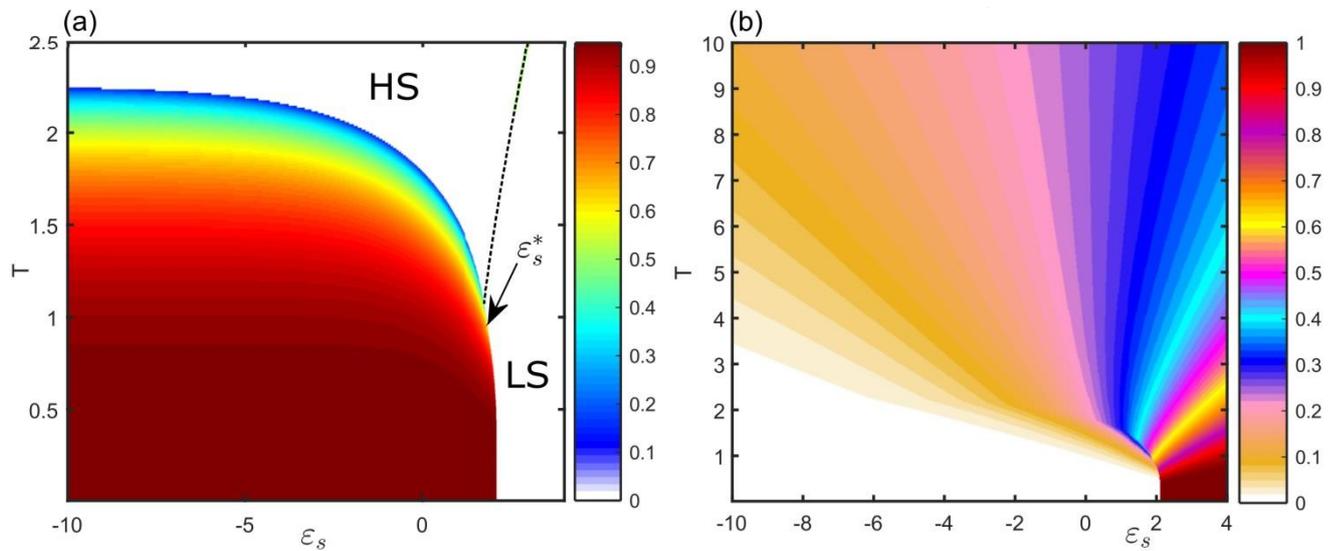


Рисунок. 4.2. (а) Намагниченность, (b) n_{LS} , вычисленные в рамках 2×2 СМФ.

Штриховая линия на рисунке слева обозначает $n_{LS} = 0.5$.

При увеличении спиновой щели температурные флуктуации увеличивают заселенность LS-состояний, и температура перехода Нееля уменьшается. При $\varepsilon_s = 0$ температурный переход все еще второго рода, но величина парамагнитного момента уменьшена примерно на 20%. При $\varepsilon_s = \varepsilon_s^* \approx 1.87$ имеется трикритическая точка. При дальнейшем увеличении ε_s переход становится первого рода и реализуется путем смены основного состояния с высокоспинового на низкоспиновое, как видно из Рисунка 4.2 (b). Максимальное значение намагниченности, которое достигается в данном случае равно $m = 0.9528$, т.е. в наличии отклонение от $m = 1$, что является проявлением квантового сокращения

спина, частично учитываемого в СМФ. Немагнитную фазу можно рассматривать качественным образом как HS слева от линии, обозначающей $n_{LS} = 0.5$ и выходящей вблизи трикритической точки, и LS справа.

Распределение n_{LS} связано с константой Кюри парамагнитной восприимчивости:

$$C = \mu^2(1 - n_{LS})S(S + 1), \quad (4.4)$$

где $\mu = \mu_B^2/3k_B$, μ_B - магнетон Бора, k_B - константа Больцмана. Температурная зависимость $C(T)$ представлена на Рисунке 4.3. Уравнение (4.4) имеет смысл для парамагнитной области выше температуры Нееля, обозначенной штриховыми прямыми на Рисунке 4.3 (а). Используя параметры, извлеченные из экспериментов на ферропериклазе в алмазных наковальнях [94, 95], можно оценить соответствующие каждому из значений параметра спиновой щели значения давления P , подразумевая линейную зависимость $\varepsilon_s - \varepsilon_s^c = \alpha_\Delta(P - P_c)$, где $\alpha_\Delta = 7.8$ мЭв/ГПа и критическое давление $P_c = 55$ ГПа, а также учитывая, что зависимость обменного интеграла от давления $J(P) = J_0 \left(1 + \frac{2\alpha_t}{t} P\right)$, где $J_0 = 18$ К и $\frac{2\alpha_t}{t} = 0.012$ /ГПа. С учетом представленных определений для каждой кривой на Рисунке 4.3 указаны соответствующие значения $\frac{\Delta P}{P_c} = \frac{(P - P_c)}{P_c}$. Значение обменного интеграла подогнано для воспроизведения температуры Нееля реального соединения, а критическое значение спиновой щели поставлено в соответствие критическому давлению для удобства сравнения с экспериментальными данными в дальнейшем. При давлении на несколько процентов ниже критического увеличение температуры приводит к простому уменьшению эффективного магнитного момента. При давлении ниже критического примерно на один процент магнитный момент оказывается практически независимым от температуры. При сильной близости к критическому давлению имеется заметная LS-составляющая при температуре Нееля, и термальные флуктуации приводят к увеличению HS-составляющей. Выше критического давления, как

проиллюстрировано на Рисунке 4.3 (b), с увеличением давления замедляется температурный рост эффективного магнитного момента.

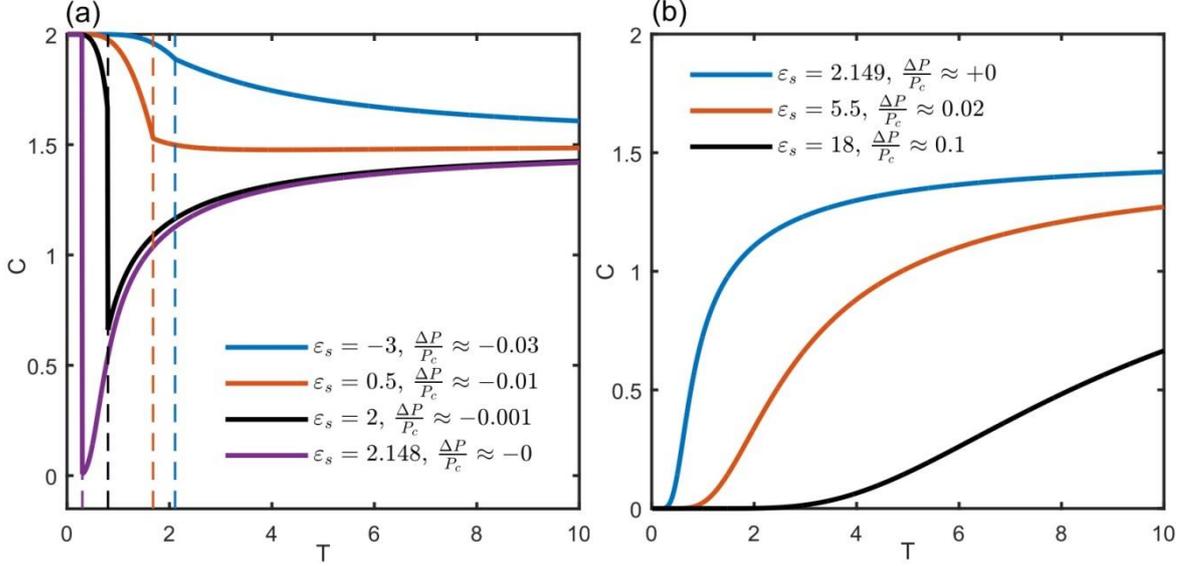


Рисунок 4.3. Температурная зависимость константы Кюри, определяемой уравнением (4.4) для различных значений параметра спиновой щели (давления)

(a) при $\epsilon_s < \epsilon_s^c$, (b) при $\epsilon_s > \epsilon_s^c$.

Несмотря на то, что даже в одноузельном приближении MF, как будет показано в следующем разделе, получается качественно верная фазовая диаграмма, такой подход не дает информации о поведении ближних корреляций в системе, в отличие от используемого здесь СМФ. На Рисунке 4.4 показаны поперечные АФМ спиновые корреляции ближайших соседей $C_{\perp} = -(S_0^+ S_1^- + S_0^- S_1^+)$ и продольные $C_{\parallel} = -S_0^z S_1^z$, где индексы 0 и 1 соответствуют двум ближайшим узлам. При $\epsilon_s < \epsilon_s^c$ продольные корреляции с повышением температуры только убывают, в то время как поперечные увеличиваются с температурой при низких значениях спиновой щели, достигают максимума при температуре Нееля, и убывают при нагревании системы в парамагнитной фазе. Яркое выраженное отклонение от гейзенберговского поведения проявляется при $\epsilon_s > \epsilon_s^c$ в том, что спиновые корреляции показывают возвратное поведение с нагреванием. При низкой температуре они близки к нулю и возрастают

вследствие температурного заселения триплетных состояний, после чего происходит их уменьшение с температурой.

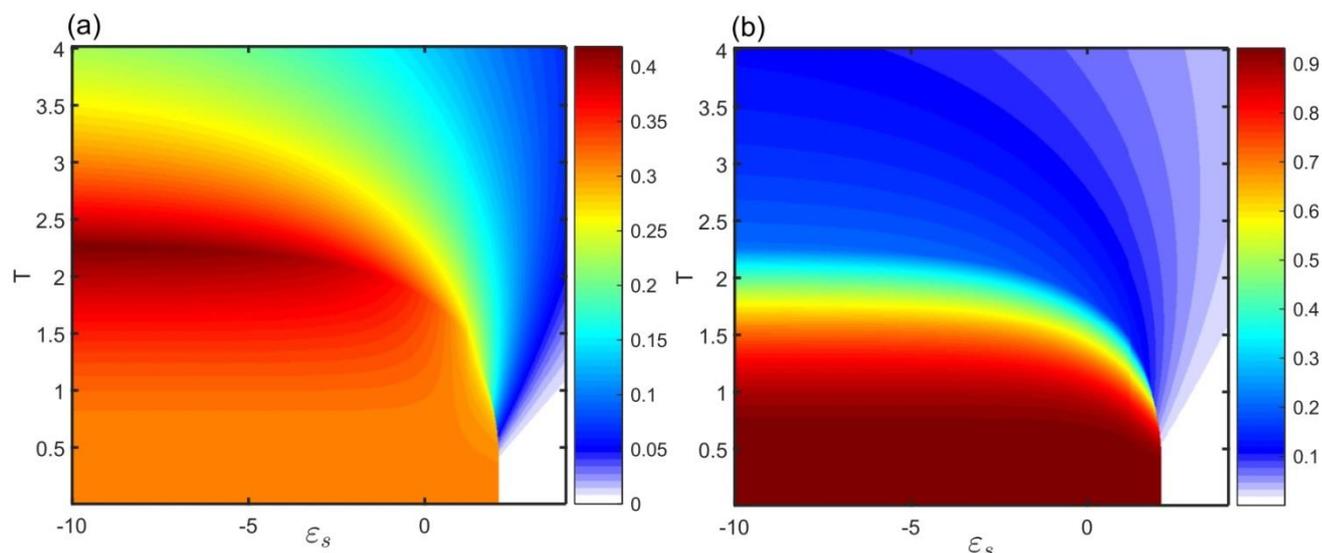


Рисунок 4.4. (а) Поперечные и (б) продольные спиновые корреляционные функции, определенные в тексте, рассчитанные в рамках 2×2 CMF.

Применим значения параметров, извлеченные из анализа экспериментов в алмазных наковальнях на ферропериклазе $(Mg, Fe)O$ [94, 95], уже использованные выше в тексте, для того, чтобы смоделировать зависимость намагниченности от допирования и температуры в данном соединении. Значение обменного параметра и линейная зависимость его от давления в области низких значений была получена подгоном к экспериментальным данным. Фазовая диаграмма намагниченности представлена на Рисунке 4.5 (а). В широком диапазоне давлений реализуется гейзенберговское поведение, при котором температура Нееля линейно растет с давлением. Далее она достигает максимума и при $P \approx P_c$ резко обращается в ноль вследствие фазового перехода первого рода. Отклонения от гейзенберговского поведения проявляются при $P \sim 51$ GPa для $T = 0$ и при $P \sim 45$ GPa вблизи комнатной температуры, как видно из Рисунка 4.5 (б). Немагнитная фаза может качественно быть рассмотрена как HS слева от линии, характеризующей на графике $n_{LS} = 0.5$, и LS справа. Полученная фазовая диаграмма находится в согласии с экспериментом [94, 95], что показывает

адекватность гамильтониана (1.14) при описании основных черт явления SCO в ферропериклазе.

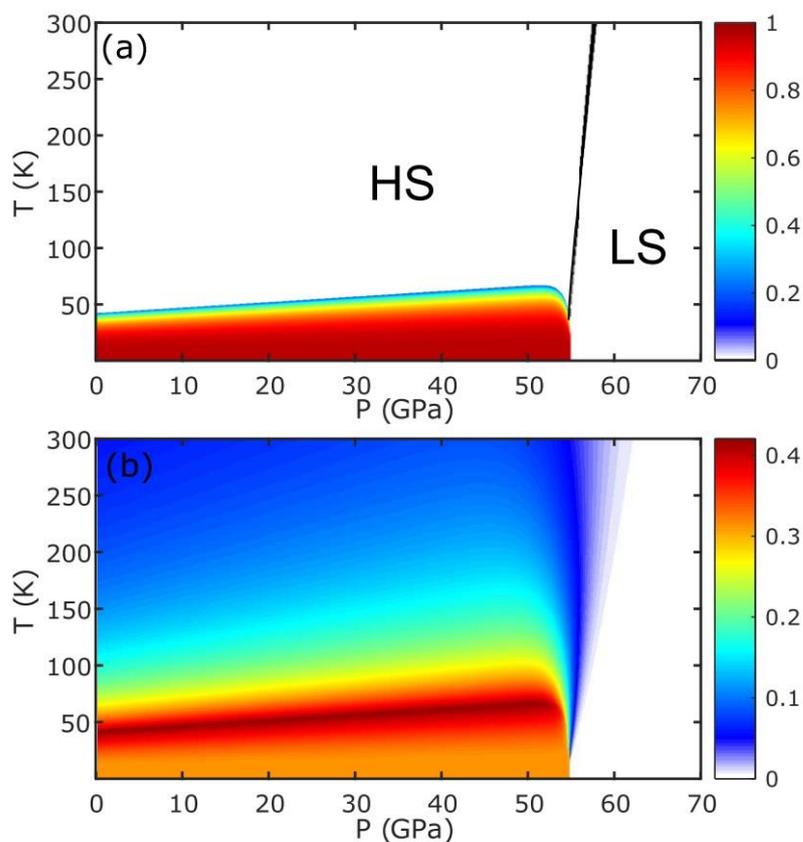


Рисунок 4.5. (а) Средняя намагниченность подрешетки и (б) поперечный спиновый коррелятор, рассчитанные для параметров ферропериклаза в 2×2 СМФ. Черная линия обозначает изолинию $n_{LS} = 0.5$.

4.2. Эффекты конечного размера кластера

Основные результаты в данной главе получены с использованием кластера 2×2 . В данном разделе для изучения эффектов малого кластера сравним намагниченность системы в пределе модели Гейзенберга, вычисляемую в рамках СМФ с различными кластерами, а также в RPA. Известно, что для модели Гейзенберга RPA приводит к результатам, находящимся в адекватном согласии с QMC [177, 178]. Из Рисунка 4.6 видно, что учет ближних корреляций приводит к

появлению нулевых колебаний и значительному понижению температуры Нееля, если сравнивать MF и 2×2 CMF. При нуле температур намагниченность m , определяемая как средний момент на узле, максимально отдаленном от границ кластера, становится ближе к значению 0.8168, получаемому в RPA; например, для 4×3 и 4×4 кластеров имеем $m = 0.886$ и $m = 0.88$. В 2D температура Нееля $T_N = +0$ в RPA, поскольку в данном методе теорема Мермина-Вагнера не нарушается, в отличие от (C)MF, где искусственно понижается симметрия гамильтониана.

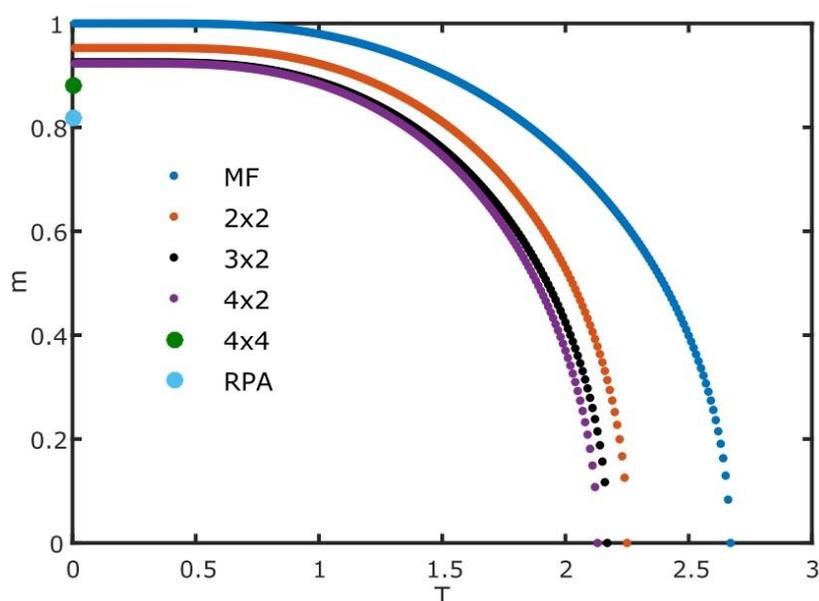


Рисунок 4.6. Температурная зависимость намагниченность в рамках (C)MF и RPA в 2D.

Аналогичное сравнение в 3D представлено на Рисунке 4.7. Температура Нееля в полтора раза превышает T_N в рамках MF по отношению к рассчитанной в RPA, в $2 \times 2 \times 2$ CMF - примерно в 1.33 раза. Таким образом, для подрешеточной намагниченности и температуры Нееля мы получаем промежуточный результат между MF и RPA (ближе к MF).

В рамках проведенных здесь CMF вычислений в 2D случае намагниченность m как функция количества узлов N_c в кластере ведет себя

пропорционально $1/\sqrt{N_c}$. Экстраполяция к термодинамическому пределу методом наименьших квадратов дает результат $m \approx 0.81$, что близко к результату RPA (см. Рисунок 4.8).

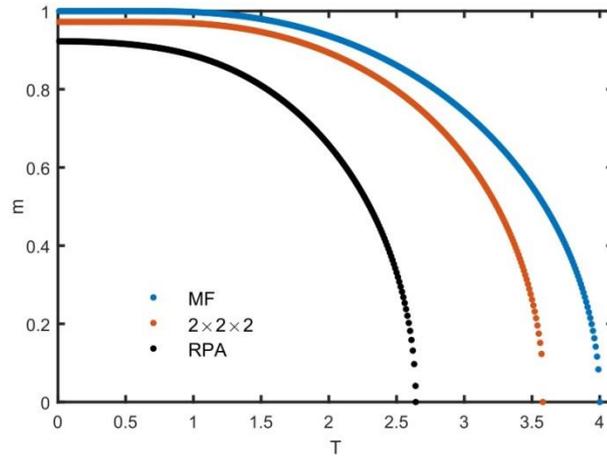


Рисунок 4.7. То же, что и на Рисунке 4.6, но в 3D.

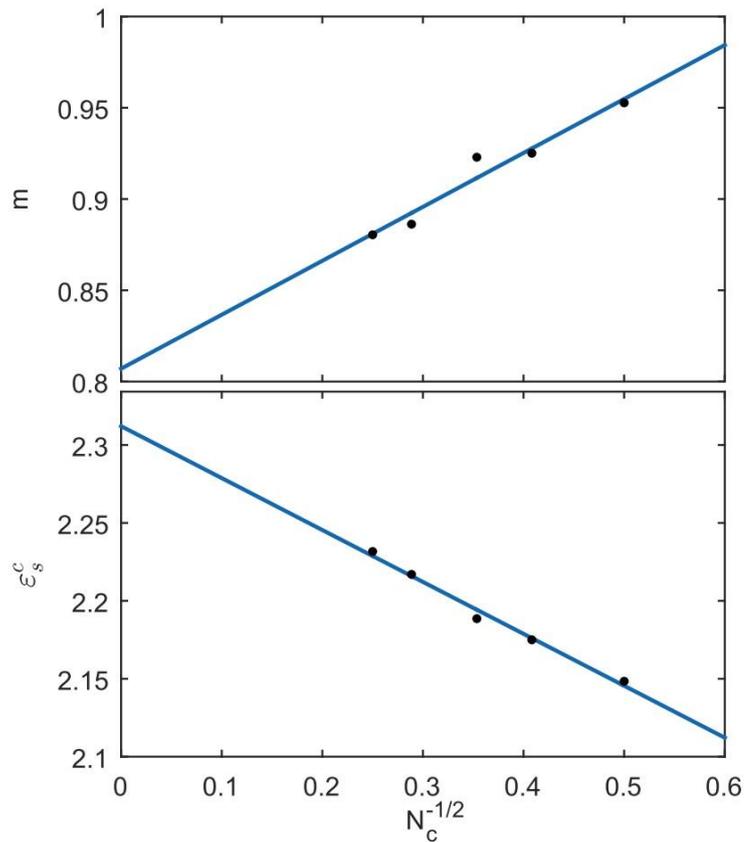


Рисунок 4.8. Намагниченность m максимально удаленного от границ кластера

узла и критическое значение спиновой щели при $T = 0$ для разных размеров кластера (точки) и результат их линейной экстраполяции (прямые линии).

Сравним намагниченность, полученную с различными кластерами и в MF для различных значений спиновой щели, как показано на Рисунке 4.9.

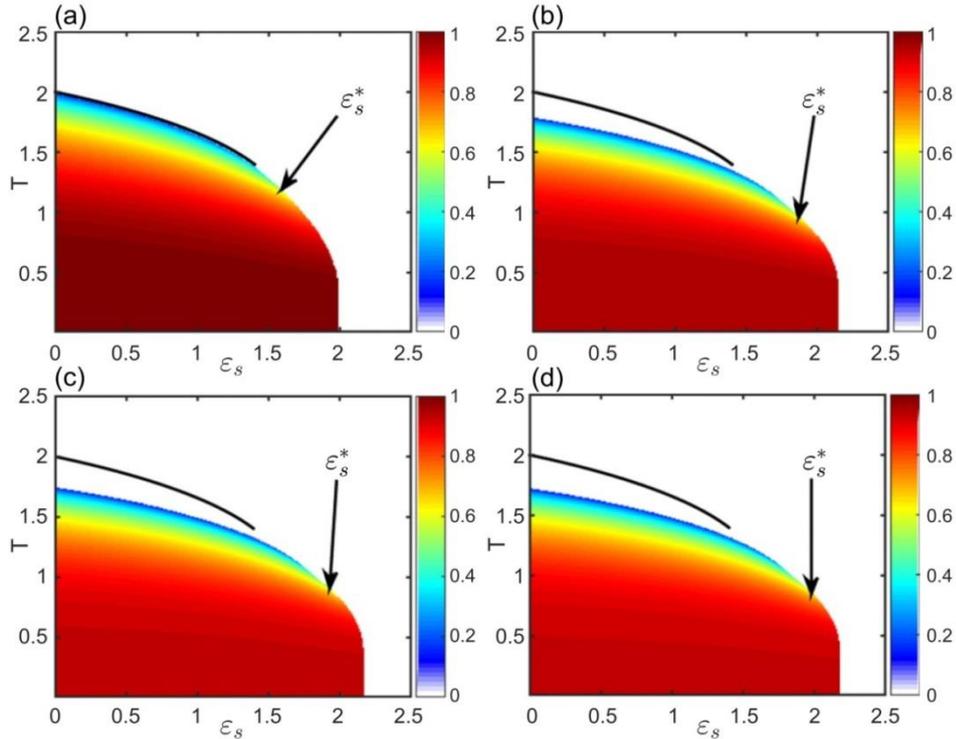


Рисунок 4.9. Фазовая диаграмма для намагниченности, рассчитанная в рамках (a) MF, (b) 2×2 , (c) 3×2 , (d) 4×2 CMF. Черная линия - температура Нееля в MF.

Фазовые диаграммы, полученные с различными кластерами, весьма похожи. Помимо уменьшения температуры Нееля заметно увеличение трикритического значения спиновой щели ε_s^* и критического ε_s^c , при котором происходит фазовый переход первого рода. Увеличение ε_s^c обуславливается понижением энергии основного состояния кластера в магнитной фазе: основная конкуренция происходит между состояниями с нулем и N_c синглетами в кластере. Как и в случае с намагниченностью, наблюдается зависимость $\varepsilon_c \sim N_c^{-1/2}$ для критического значения спиновой щели, или, что эквивалентно, энергии основного состояния E_0 , взятой с противоположным знаком, в гейзенберговском пределе

(см. Рисунок 3.8). Экстраполяция методом наименьших квадратов дает значение $E_0 \approx -2.31$, что схоже с результатом $E_0 \approx -2.33$, полученном в рамках QMC, [179] и методом ренормгруппы для матрицы плотности [180]. Наибольшее изменение в величинах ε_s^c и ε_s^* происходит при переходе от MF к CMF, при этом зависимость от размера системы весьма предсказуема. Таким образом, часть фазовой диаграммы, полученная вблизи перехода первого рода с малыми кластерами, отражена качественно с достаточной степенью достоверности в представленных расчетах.

Заключение

В рамках настоящей диссертации проведено исследование электронной структуры и магнитных свойств сильно коррелированных систем ВТСП купратов и систем со спиновыми кроссоверами в рамках простейших микроскопических моделей СЭК.

На защиту выносятся следующие основные результаты:

1. Сравнение электронных структур в модели Хаббарда, $t - J$ модели и $t - J^*$ модели в рамках кластерной теории возмущений с точным учетом корреляций между первыми и вторыми соседями показало, что вблизи половиного заполнения на низкоэнергетическом масштабе $\omega \sim J$ все три модели достаточно хорошо согласуются друг с другом. Высокоэнергетические сателлиты в глубине зоны на энергиях $(U/2, U)$ в $t - J$ модели заметно отличаются как по энергии, так и по спектральному весу от подобных сателлитов в модели Хаббарда и $t - J^*$ модели, которые дают близкие результаты.

2. В области концентраций дырок, где появляется сверхпроводящая фаза, результаты для $t - J$ модели сильно отличаются по энергии и спектральному весу от двух других моделей при достаточно малом значении кулоновского отталкивания $U \sim 6t$. Тем не менее, даже при таком значении кулоновского взаимодействия для модели Хаббарда и $t - J^*$ модели законы дисперсии как при низких, так и при высоких энергиях похожи друг на друга, но спектральные веса в $t - J^*$ модели заметно отличаются по сравнению с моделью Хаббарда как для низкоэнергетических, так и высокоэнергетических спектров. Таким образом, для исследования фазовых диаграмм купратов в широком диапазоне концентраций наиболее надежная информация может быть получена в рамках модели Хаббарда.

3. В рамках кластерной теории возмущений в модели Хаббарда исследована температурная эволюция электронного спектра при дырочном

допировании $p = \frac{1}{6}$ с учетом ближних корреляций до восьмой координационной сферы с кластером из двенадцати узлов. Сравнение с концентрационной зависимостью спектра электронов при $T = 0$ с кластером 4×4 с учетом корреляций до девятой сферы выявило похожий характер эволюции электронной структуры от режима сильной псевдощели к режиму нормальной ферми жидкости с промежуточным состоянием слабой псевдощели. Результаты расчетов зависимости спектральных функций от допирования при $T = 0$ близки к имеющимся в литературе, температурная зависимость спектров с двумя типами псевдощелей получена впервые.

4. Вместе со спектральной функцией рассмотрены зависимости от допирования и температуры спиновых корреляционных функций. Выявлена корреляция изменения спиновых корреляторов и изменения электронной структуры. При малом допировании и низких температурах наблюдается сильная псевдощель, которой сопутствует ближний антиферромагнетизм. При увеличении допирования и росте температуры происходит переход к слабой псевдощели, сопровождаемый ослаблением ближнего антиферромагнитного порядка. При высоком допировании и температуре выше T^* псевдощель закрывается, а спиновые корреляции сохраняются только для первых соседей, что характерно для парамагнитного состояния нормальной Ферми-жидкости.

5. В рамках кластерной теории среднего поля исследованы эффекты за пределами модели Гейзенберга в рамках эффективного спинового гамильтониана, содержащего высокоспиновый триплетный и низкоспиновый синглетный термы, для которых возможен спиновый кроссовер при высоких давлениях. Построены карты намагниченности, поперечных и продольных спиновых корреляционных функций на плоскости давление-температура.

6. Найдено нетривиальное возвратное поведение с температурой константы Кюри парамагнитной восприимчивости и спиновых корреляционных функций вблизи спинового кроссовера. Используя параметры из экспериментов для ферропериклаза $(\text{Mg,Fe})\text{O}$ при высоких давлениях, получена фазовая

диаграмма данного соединения и произведена оценка диапазонов давления и температуры, при которых возможно наблюдать найденное возвратное поведение в эксперименте.

Перечень сокращений

- ВТСП - высокотемпературная сверхпроводимость
- DFT (density functional theory) - теория функционала плотности
- LDA (local density approximation) - приближение локальной плотности
- СЭК - сильные электронные корреляции
- АФМ - антиферромагнетизм, антиферромагнитный
- QMC (quantum Monte Carlo) - квантовый Монте-Карло
- 2D - двумерный
- 3D - трехмерный
- GTB (generalized tight binding) - обобщенный метод сильной связи
- SCO (spin crossover) - спиновый кроссовер
- HS (high spin) - высокоспиновое состояние
- LS (low spin) - низкоспиновое состояние
- SCPT (strong coupling perturbation theory) - теория возмущений в пределе сильной связи
- DMFT (dynamical mean field theory) - динамическая теория среднего поля
- CPT (cluster perturbation theory) - кластерная теория возмущений
- VCA (variational cluster theory) - вариационная кластерная теория
- DCA (dynamical cluster approximation) - динамическое кластерное приближение
- TPQS (thermal pure quantum states) - чисто квантовые температурные состояния
- SPG (strong pseudogap) - сильная псевдощель
- WPG (weak pseudogap) - слабая псевдощель
- NFL (normal Fermi liquid) - нормальная Ферми-жидкость

- GMFA (generalized mean field approximation) - обобщенное приближение среднего поля
- MF (mean field) - теория среднего поля
- CMF (cluster mean field) - кластерная теория среднего поля
- RPA (random phase approximation) - приближение случайных фаз

Список литературы

1. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // *Phys. Rev.* 1964, Vol. 136, P. B864.
2. Kohn W., Sham L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // *Phys. Rev.* 1965, Vol. 140, P. A1133.
3. Jones R. O., Gunnarsson O. The density functional formalism, its applications and prospects // *Rev. Mod. Phys.* 1989, Vol. 61, P. 689.
4. Mattheiss L. F. Electronic band properties and superconductivity in $\text{La}_{2-y}\text{X}_y\text{CuO}_4$ // *Phys. Rev. Lett.* 1987, Vol. 58, P. 1028.
5. Imada M, Fujimori A., Tokura, Y. Metal-insulator transitions // *Rev. Mod. Phys.* // 1998, Vol. 70, P. 1039.
6. Изюмов Ю.А. Базовые модели в квантовой теории магнетизма / Изюмов Ю.А., Скрыбин Ю.Н. – Екатеринбург: УрО РАН, 2002. – 259с.
7. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands // *Proc. R. Soc. London A* 1963, Vol. 276, P. 238.
8. Feiner L. F., Jefferson J. H., Raimondi, R. Effective single-band models for the high- T_c cuprates. I. Coulomb interactions // *Phys. Rev. B* 1996, Vol. 53, P. 8751.
9. Овчинников С. Г. Квазичастицы в сильно коррелированной электронной системе оксидов меди // *УФН* 1997, Т. 167, С. 993.
10. Sun J., Ruzsinszky, A. and Perdew, J. P. Strongly Constrained and Appropriately Normed Semilocal Density Functional // *Phys. Rev. Lett.* 2015, Vol. 115, P. 036402.
11. Furness J. W, Zhang Y., Lane C., Buda I. G., Barbiellini B., Markiewicz R. S., Bansil A., Sun J. An accurate first-principles treatment of doping-dependent electronic structure of high-temperature cuprate superconductors // *Commun. Phys.* 2018, Vol. 1, P. 11.

12. Anderson P. W. New Approach to the Theory of Superexchange Interactions // Phys. Rev. 1959, Vol. 115, P. 2.
13. Kampf A. P. Magnetic correlations in high temperature superconductivity // Phys. Rep. 1994, Vol. 249, P. 219.
14. Kastner M. A., Birgeneau R. J., Shirane G., Endoh, Y. Magnetic, transport, and optical properties of monolayer copper oxides // Rev. Mod. Phys. 1998, Vol. 70, P. 897.
15. Motoyama E. M., Yu G., Vishik I. M., Vajk O. P., Mang P. K., Greven M. Spin correlations in the electron-doped high-transition-temperature superconductor $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ // Nature 2007, Vol. 445, P. 186.
16. Shen Z.-X., Dessau D. S., Wells B. O., King D. M., Spicer W. E., Arko A. J., Marshall D., Lombardo L. W., Kapitulnik A., Dickinson P., Doniach S., DiCarlo J., Loeser T., Park C. H. Anomalously large gap anisotropy in the a-b plane of a $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2$ // Phys. Rev. Lett. 1996, Vol. 70, P. 1553.
17. Ding H., Norman M. R., Campuzano J. C., Randeria M., Bellman A. F., Yokoya T., Takahashi T., Mochiku T., Kadowaki K. Angle-resolved photoemission spectroscopy study of the superconducting gap anisotropy in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ // Phys. Rev. B 1996, Vol. 54, P. R9678.
18. Максимов Е. Г. Проблема высокотемпературной сверхпроводимости. Современное состояние // УФН 2000, Т. 170, С. 1033.
19. Maksimov E. G., Kulić M. L., Dolgov O. V. Bosonic Spectral Function and the Electron-Phonon Interaction in HTSC Cuprates // Adv. Cond. Mat. Phys. 2010, Vol. 2010, P. 1.
20. Anderson P. W. The Resonating Valence Bond State in La_2CuO_4 and Superconductivity // Science 1987, Vol. 235, P. 1196.
21. Scalapino D. J. The case for $d_{x^2-y^2}$ pairing in the cuprate superconductors // Phys. Rep. 1995, Vol.250, P. 329.
22. Plakida N. M., Oudovenko V.S. On the theory of superconductivity in the extended Hubbard model // Eur. Phys. J. B 2013, Vol. 86, P. 115.

23. Norman M. R., Pines D., Kallin C. The pseudogap: friend or foe of high T_c ? // *Adv. Phys.* 2005, Vol. 54, P. 715.
24. Kung Y. F., Nowadnick E. A., Jia C. J., Johnston S., Moritz B., Scalettar R. T., Devereaux T. P. Doping evolution of spin and charge excitations in the Hubbard model // *Phys. Rev. B* 2015, Vol. 92, P. 195108.
25. Chatterjee, U., Ai D., Zhao J., Rosenkranz S., Kaminski A., Raffy H., Li Z., Kadowaki K., Randeria M., Norman M. R., Campuzano J. C. Electronic phase diagram of high-temperature copper oxide superconductors // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2011, Vol. 108, P. 9346.
26. Damascelli A., Hussain Z., Shen Z.-X. Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors // *Rev. Mod. Phys.* 2003, Vol. 75, P. 473.
27. Marshall D. S., Dessau D. S., Loeser A. G., Park C-H., Matsuura A. Y., Eckstein J. N., Bozovic I., Fournier P., Kapitulnik A., Spicer W. E., Shen Z.-X. Unconventional Electronic Structure Evolution with Hole Doping in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$: Angle-Resolved Photoemission Results // *Phys. Rev. Lett.* 1996, Vol. 76, P. 4841.
28. Ding H., Yokoya T., Campuzano J., Takahashi T., Randeria M., Norman M., Mochiku T., Kadowaki K., Giapintzakis J. Spectroscopic evidence for a pseudogap in the normal state of underdoped high- T_c superconductors // *Nature* 1996, Vol. 382, P. 51.
29. Chang J., Sassa Y., Guerrero S., Mansson M., Shi M., Pailhes S., Bendounan A., Mottl R., Claesson T., Tjernberg O., Patthey L., Ido M., Oda M., Momono N., Mudry C., Mesot J. Electronic structure near the 1/8-anomaly in La-based cuprates // *New J. Phys.* 2008, Vol. 10, P. 103016.
30. Norman M., Ding H., Randeria M., Campuzano, J. C., Yokoya T., Takeuchi T., Takahashi T., Mochiku T., Kadowaki K., Guptasarma P., Hinks D. G. Destruction of the Fermi surface in underdoped high- T_c superconductors // *Nature* 1998, Vol. 392, P. 157.
31. Kanigel A., Chatterjee U., Randeria M., Norman M. R., Koren G., Kadowaki K., Campuzano J. C., Evidence for Pairing above the Transition Temperature of Cuprate

- Superconductors from the Electronic Dispersion in the Pseudogap Phase // *Phys. Rev. Lett.* 2008, Vol. 101, P. 137002.
32. Kondo T., Khasanov R., Takeuchi T., Schmalian J., Kaminski A. Competition between the pseudogap and superconductivity in the high- T_c copper oxides. // *Nature* 2009, Vol. 457, P. 296.
 33. Chakravarty S., Laughlin R. B., Morr D. K., Nayak C. Hidden order in the cuprates // *Phys. Rev. B* 2001, Vol. 63, P. 094503.
 34. Varma C. M. Theory of the pseudogap state of the cuprates // *Phys. Rev. B* 2006, Vol. 73, P. 155113.
 35. Li J.-X., Wu C.-Q., Lee D.-H. Checkerboard charge density wave and pseudogap of high- T_c cuprate // *Phys. Rev. B* 2006, Vol. 74, P. 184515.
 36. Verret S., Charlebois M., Senechal D., Tremblay A.-M. S. Subgap structures and pseudogap in cuprate superconductors: Role of density waves // *Phys. Rev. B* 2017, Vol. 95, P. 054518.
 37. Fradkin E., Kivelson S. A., Tranquada J. M. Colloquium: Theory of intertwined orders in high temperature superconductors // *Rev. Mod. Phys.* 2015, Vol. 87, P. 457.
 38. Harrison N., Sebastian S. E. Protected Nodal Electron Pocket from Multiple-Q Ordering in Underdoped High Temperature Superconductors // *Phys. Rev. Lett.* 2011, Vol. 106, P. 226402.
 39. Allais A., Chowdhury D., Sachdev S. Connecting high-field quantum oscillations to zero-field electron spectral functions in the underdoped cuprates. // *Nat Commun* 2014 Vol. 5, P. 5771.
 40. Zhou, P., Chen, L., Liu, Y., Sochnikov I., Bollinger A. T., Han M.-G., Zhu Y., He X., Božović I., Natelson D. Electron pairing in the pseudogap state revealed by shot noise in copper oxide junctions // *Nature* 2019, Vol. 572, P. 493.
 41. Sakai S., Motome Y., Imada M. Doped high- T_c cuprate superconductors elucidated in the light of zeros and poles of the electronic Green's function // *Phys. Rev. B* 2010, Vol. 82, P. 134505.

42. Senechal D., Tremblay A.-M. S. Hot Spots and Pseudogaps for Hole- and Electron-Doped High-Temperature Superconductors // *Phys. Rev. Lett.* 2004, Vol. 92, P. 126401.
43. Armitage N. P., Lu D. H., Kim C., Damascelli A., Shen K. M., Ronning F., Feng D. L., Bogdanov P., Shen Z.-X., Onose Y., Taguchi Y., Tokura Y., Mang P. K., Kaneko N., Greven M. Anomalous Electronic Structure and Pseudogap Effects in $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$ // *Phys. Rev. Lett.* 2001, Vol. 87, P. 147003.
44. Matsui H., Terashima K., Sato T., Takahashi T., Wang S.-C., Yang H.-B., Ding H., Uefuji T., Yamada K. Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy of the Antiferromagnetic Superconductor $\text{Nd}_{1.87}\text{Ce}_{0.13}\text{CuO}_4$: Anisotropic Spin-Correlation Gap, Pseudogap, and the Induced Quasiparticle Mass Enhancement // *Phys. Rev. Lett.* 2005, Vol. 94, P. 047005.
45. Park S. R., Morinari T., Song D. J., Leem C. S., Kim C., Choi S. K., Choi K., Kim J. H., Schmitt F., and Mo S. K., Lu D. H., Shen Z.-X. Eisaki H., Tohyama T., Han, J. H., Kim C. Interaction of itinerant electrons and spin fluctuations in electron-doped cuprates // *Phys. Rev. B* 2013, Vol. 87, P. 174527.
46. Song D., Han G. Kyung W., Seo J., Cho S., Kim B. S., Arita M., Shimada K., Namatame H., Taniguchi M., Yoshida Y., Eisaki H., Park S. R., Kim, C. Electron Number-Based Phase Diagram of $\text{Pr}_{1-x}\text{LaCe}_x\text{CuO}_{4-\delta}$ and Possible Absence of Disparity between Electron- and Hole-Doped Cuprate Phase Diagrams // *Phys. Rev. Lett.* 2017, Vol. 118, P. 137001.
47. LeBoeuf D., Doiron-Leyraud N., Levallois J., Daou R., Bonnemaïson J.-B., Hussey N. E., Balicas L., Ramshaw B. J., Liang R., Bonn D. A., Hardy W. N., Adachi S., Proust C., Taillefer L., Electron pockets in the Fermi surface of hole-doped high- T_c superconductors. // *Nature* 2007, Vol. 450, P.533.
48. LeBoeuf D., Doiron-Leyraud N., Vignolle B., Sutherland M., Ramshaw B. J., Levallois J., Daou R., Laliberte F., Cyr-Choiniere O., Chang J., Jo Y. J., Balicas L., Liang R., Bonn D. A., Hardy W. N., Proust C., Taillefer L. Lifshitz critical point in the cuprate superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ from high-field Hall effect measurements // *Phys. Rev. B* 2011, Vol. 83, P. 054506.

49. Weber C., Haule K., Kotliar G. Apical oxygens and correlation strength in electron- and hole-doped copper oxides // *Phys. Rev. B* 2010, Vol. 82, P. 125107.
50. Kohno M. Spectral properties near the Mott transition in the two-dimensional Hubbard model with next-nearest-neighbor hopping // *Phys. Rev. B* 2014, Vol. 90, P. 035111.
51. Doiron-Leyraud N., Proust C., LeBoeuf D., Levallois J., Bonnemaïson J.-B., Liang R., Bonn D. A., Hardy W. N., Taillefer L. Quantum oscillations and the Fermi surface in an underdoped high- T_c superconductor // *Nature* 2007, Vol. 447, P. 565.
52. Vignolle B., Carrington A., Cooper R., French M. M. J., Mackenzie A. P., Jaudet C., Vignolles D., Proust C., Hussey N. E. Quantum oscillations in an overdoped high- T_c superconductor // *Nature* 2008, Vol. 455, P. 952.
53. Helm T., Kartsovnik M. V., Bartkowiak M., Bittner N., Lambacher M., Erb A., Wosnitza J., Gross R. Evolution of the Fermi Surface of the Electron-Doped High-Temperature Superconductor $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ Revealed by Shubnikov--de Haas Oscillations // *Phys. Rev. Lett.* 2009, Vol. 103, P. 157002.
54. Barišić N., Badoux S., Chan M., Dorow C., Tabis W., Vignolle B., Yu G., Béard, J., Zhao X., Proust C., Greven M. Universal quantum oscillations in the underdoped cuprate superconductors. // *Nat. Phys.* 2013, Vol. 9, P. 761.
55. Sherman A. Low-frequency quantum oscillations due to strong electron correlations // *Phys. Lett. A* 2015, Vol. 379, P. 1912.
56. Stanescu T. D., Kotliar G. Fermi arcs and hidden zeros of the Green function in the pseudogap state // *Phys. Rev. B* 2006, Vol. 74, P. 125110.
57. Civelli M. Doping-driven evolution of the superconducting state from a doped Mott insulator: Cluster dynamical mean-field theory // *Phys. Rev. B* 2009, Vol. 79, P. 195113.
58. Korshunov M. M., Ovchinnikov S. G., Doping-dependent evolution of low-energy excitations and quantum phase transitions within an effective model for high- T_c copper oxides. // *Eur. Phys. J. B* 2007, Vol. 57, P. 271.
59. Николаев С.В., Овчинников С.Г. Влияние дырочного допирования на электронную структуру и поверхность ферми в модели хаббарда в рамках

кластерной теории возмущений с контролируемым спектральным весом // ЖЭТФ 2012, Т. 141, С. 135.

60. Doiron-Leyraud N., Badoux S., René de Cotret S., LeBoeuf D., Laliberté F., Hassinger E., Ramshaw B. J., Bonn D. A., Hardy W. N., Liang R., Park J.-H., Vignolles D., Vignolle B., Taillefer L., Proust C. Evidence for a small hole pocket in the Fermi surface of underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$. // Nat Commun. 2015, Vol. 6, P. 6034.
61. Wu T., Mayaffre H., Krämer S., Horvatić M., Berthier C., Hardy W. N., Liang R., Bonn D. A., Julien M.-H. Magnetic-field-induced charge-stripe order in the high-temperature superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$. // Nature 2011, Vol. 477, P. 191.
62. Kanigel A., Norman M., Randeria M., Chatterjee U., Souma S., Kaminski A., Fretwell H. M., Rosenkranz S., Shi M., Sato T., Takahashi T., Li Z. Z., Raffy H., Kadowaki K., Hinks D., Ozyuzer L., Campuzano J. C., Evolution of the pseudogap from Fermi arcs to the nodal liquid // Nat. Phys. 2006, Vol. 2, P. 447.
63. Reber T., Plumb N., Sun Z., Cao Y., Wang Q., McElroy K., Iwasawa H., Arita M., Wen J. S., Xu Z. J., Gu G., Yoshida Y., Eisaki H., Aiura Y., Dessau D. S. The origin and non-quasiparticle nature of Fermi arcs in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$. // Nat. Phys 2012, Vol. 8, P. 606.
64. Kordyuk A. A. Pseudogap from ARPES experiment: Three gaps in cuprates and topological superconductivity // Low Temp. Phys. 2015, Vol. 41, P. 319.
65. Vishik I. M. Photoemission perspective on pseudogap, superconducting fluctuations, and charge order in cuprates: a review of recent progress // Rep. Prog. Phys. 2018, Vol. 81, P. 062501.
66. Emery V. J. Theory of high- T_c superconductivity in oxides // Phys. Rev. Lett. 1987, Vol. 58, P. 2794.
67. Shastry B. S. t-J model and nuclear magnetic relaxation in high- T_c materials // Phys. Rev. Lett. 1989, Vol. 63, P. 1288.
68. Gavrichkov V. A., Ovchinnikov S. G., Borisov A. A., Goryachev E. G. Evolution of the band structure of quasiparticles with doping in copper oxides on the basis of a generalized tight-binding method. // J. Exp. Theor. Phys. 2000, Vol. 91, P. 369.

69. Raimondi R., Jefferson J. H., Feiner L. F. Effective single-band models for the high- T_c cuprates. II. Role of apical oxygen // *Phys. Rev. B* 1996, Vol. 53, P. 8774.
70. Janowitz C., Seidel U., Unger R.-T., Krapf A., Manzke R, Gavrichkov V., Ovchinnikov S. Strong spin triplet contribution of the first removal state in the insulating regime of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x\text{Cu}_2\text{O}_{8+\delta}$. // *JETP Lett.* 2004, Vol. 80, P. 692.
71. Chao K. O., Spalek J., Oles A. M. Kinetic exchange interaction in a narrow S-band // *J. Phys. C: Sol. Stat. Phys.* 1977, Vol. 10, P. L271.
72. Spalek J. t-J Model Then and Now: a Personal Perspective from the Pioneering Times // *Acta Phys. Pol. B* 2007, Vol. 111, P. 409.
73. Hirsch J. E. Singlet pairs, covalent bonds, superexchange, and superconductivity // *Phys. Lett. A* 1989, Vol. 136, P.163.
74. Val'kov, V.V., Val'kova, T.A., Dzebisashvili, D.M., Ovchinnikov S. G. The strong effect of three-center interactions on the formation of superconductivity with $d_{x^2-y^2}$ symmetry in the t-J* model // *JETP Lett.* 2002, Vol. 75, P. 378.
75. Lanzara A., Bogdanov P., Zhou X., Kellar S. A., Feng D. L., Lu E. D., Yoshida T., Eisaki H., Fujimori A., Kishio K., Shimoyama J.-I., Noda T., Uchida S., Hussain Z., Shen Z.-X. Evidence for ubiquitous strong electron–phonon coupling in high-temperature superconductors // *Nature* 2001, Vol. 412, P. 510.
76. Anisimov V. I., Korotin M. A., Zaanen J., Andersen O. K. Spin bags, polarons, and impurity potentials in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ from first principles // *Phys. Rev. Lett.* 1992, Vol. 68, P. 345.
77. Bonca J., Maekawa S., Tohyama T., Prelovsek P. Spectral properties of a hole coupled to optical phonons in the generalized t-J model // *Phys. Rev. B* 2008, Vol. 77, P. 054519.
78. Huang Z. B., Hanke W., Arrigoni E., Scalapino D. J. Electron-phonon vertex in the two-dimensional one-band Hubbard model // *Phys. Rev. B* 2003, Vol. 68, P. 220507.
79. Makarov I. A., Shneyder E. I., Kozlov P. A., Ovchinnikov S. G. Polaronic approach to strongly correlated electron systems with strong electron-phonon interaction // *Phys. Rev. B* 2015, Vol. 92, P. 155143.

80. Halder G. J., Kepert C. J., Moubaraki B., Murray K. S., Cashion J. D. Guest-Dependent Spin Crossover in a Nanoporous Molecular Framework Material // *Science* 2002, Vol. 298, P. 1762.
81. Lyubutin I. S., Gavriiliuk A. G. Research on phase transformations in 3d-metal oxides at high and ultrahigh pressure: state of the art // *Phys. Usp.* 2009, Vol.52, P. 989.
82. Saha-Dasgupta T., Oppeneer P. Computational design of magnetic metal-organic complexes and coordination polymers with spin-switchable functionalities. // *MRS Bull.* 2014, Vol. 39, P. 614.
83. Bari R. A., Sivardiere, J. Low-Spin-High-Spin Transitions in Transition-Metal-Ion Compounds // *Phys. Rev. B* 1972, Vol. 4, P. 4466.
84. Timm C., Pye C. J. Reentrant magnetic ordering and percolation in a spin-crossover system // *Phys. Rev. B* 2008, Vol. 77, P. 214437.
85. Nishino M., Boukheddaden K., Miyashita S, Varret F. Arrhenius Monte Carlo study of two-step spin crossover: Equilibrium and relaxation paths // *Phys. Rev. B* 2003, Vol. 68, P. 224402.
86. Paez-Espejo M., Sy M., Varret F., Boukheddaden K. Quantitative macroscopic treatment of the spatiotemporal properties of spin crossover solids based on a reaction diffusion equation // *Phys. Rev. B* 2014, Vol. 89, P. 024306.
87. Marbeuf A., Matar S.F., Negrier P., Kabalan L., Letard J. F., Guionneau P. Molecular dynamics of spin crossover: The (P,T) phase diagram of [Fe(PM-BIA)₂(NCS)₂] // *Chem. Phys.* 2013, Vol. 420, P. 25.
88. Nishino M., Boukheddaden K., Konishi Y., Miyashita S. Simple Two-Dimensional Model for the Elastic Origin of Cooperativity among Spin States of Spin-Crossover Complexes // *Phys. Rev. Lett.* 2007, Vol. 98, P. 247203.
89. Konishi Y., Tokoro H., Nishino M., Miyashita S. Monte Carlo Simulation of Pressure-Induced Phase Transitions in Spin-Crossover Materials // *Phys. Rev. Lett.* 2008, Vol. 100, P. 067206.
90. Nesterov A. I., Orlov Yu. S., Ovchinnikov, S. G., Nikolaev, S. V. Cooperative phenomena in spin crossover systems // *Phys. Rev. B* 2017, Vol. 96, P. 134103.

91. Kanamori J. Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals // *Prog. Theor. Phys.* 1963, Vol. 30, P. 275.
92. Kunes J. Excitonic condensation in systems of strongly correlated electrons // *J. Phys.: Condens. Matter* 2015, Vol. 27, P. 333201.
93. Gavrichkov V. A., Polukeev S. I., Ovchinnikov S. G. Contribution from optically excited many-electron states to the superexchange interaction in Mott-Hubbard insulators // *Phys.Rev. B* 2017, Vol. 95, P. 144424.
94. Lyubutin I. S., Struzhkin V. V., Mironovich A. A., Gavriliuk A. G., Naumov P. G., Lin J.-F., Ovchinnikov S. G., Sinogeikin S., Chow P., Xiao Y., Hemley R. J. // Quantum critical point in mantle ferropericlyase // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2013, Vol. 110, P. 7142.
95. Lyubutin I. S., Ovchinnikov S. G. Spin crossovers in Mott-Hubbard insulators at high pressures // *J. Magn. Magn. Mater.* 2012, Vol. 324, P. 3538.
96. Pairault, S., Sénéchal, D., Tremblay, A. Strong-coupling perturbation theory of the Hubbard model. // *Eur. Phys. J. B* 2000, Vol. 16, P. 85.
97. Sherman A. Influence of spin and charge fluctuations on spectra of the two-dimensional Hubbard model // *J. Phys.: Condens. Matter* 2018, Vol. 30, P. 195601-1–195601.
98. Plakida N.M., Oudovenko V.S. Electron spectrum in high-temperature cuprate superconductors. // *J. Exp. Theor. Phys.* 2007, Vol. 104, P. 230.
99. Lanczos, C. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators // *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.* 1950, Vol. 45, P. 255.
100. Aichhorn M., Daghofer M., Evertz H. G., von der Linden W. Low-temperature Lanczos method for strongly correlated systems // *Phys. Rev. B* 2004, Vol. 67, P. 161103.
101. Jaklic J., Prelovsek P. Lanczos method for the calculation of finite-temperature quantities in correlated systems // *Phys. Rev. B* 1994, Vol. 49, P. 5065.

102. Long M. W., Prelovsek P., El Shawish S., Karadamoglou J., Zotos X. Finite-temperature dynamical correlations using the microcanonical ensemble and the Lanczos algorithm // *Phys. Rev. B* 2003, Vol. 68, P. 235106.
103. Okamoto S., Alvarez G., Dagotto E., Tohyama T. Accuracy of the microcanonical Lanczos method to compute real-frequency dynamical spectral functions of quantum models at finite temperatures // *Phys. Rev. E* 2018, Vol. 97, P. 043308.
104. Sugiura S., Shimizu A. Thermal Pure Quantum States at Finite Temperature // *Phys. Rev. Lett.* 2012, Vol. 108, P. 240401.
105. Steinigeweg R., Gemmer J., Brenig W. Spin-Current Autocorrelations from Single Pure-State Propagation // *Phys. Rev. Lett.* 2014, Vol. 112, P. 120601.
106. White S. R., Huse, D. A. Numerical renormalization-group study of low-lying eigenstates of the antiferromagnetic $S=1$ Heisenberg chain // *Phys. Rev. B* 1993, Vol. 48, P. 3844.
107. Kohno M. Spectral properties near the Mott transition in the two-dimensional t-J model // *Phys. Rev. B* 2015, Vol. 92, P. 085128.
108. Yokoyama H., Shiba H., Hubbard Model in Strong Correlation Regime – Variational Monte-Carlo Studies on Singlet Liquid and Néel State // *J. Phys. Soc. Jpn.* 1987, Vol. 56, P. 3570.
109. Suzuki M. General correction theorems on decomposition formulae of exponential operators and extrapolation methods for quantum Monte Carlo simulations // *Phys. Lett. A* 1985, Vol. 113, P. 299.
110. Hirsch J. E. Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study // *Phys. Rev. B* 1985, Vol. 31, P. 4403.
111. Prokof'ev N.V., Svistunov B.V., Tupitsyn, I.S. Exact, complete, and universal continuous-time worldline Monte Carlo approach to the statistics of discrete quantum systems // *J. Exp. Theor. Phys.* 1998, Vol. 87, P. 310.
112. Rubtsov A.N., Lichtenstein A.I. Continuous-time quantum Monte Carlo method for fermions: Beyond auxiliary field framework // *JETP Lett.* 2004. Vol. 80, P. 61.

113. Gull E., Millis A. J., Lichtenstein A. I., Rubtsov A. N., Troyer M., Werner P. Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models // *Rev. Mod. Phys.* 2011, Vol. 83, P. 349.
114. Jarrell M., Gubernatis J. E. Bayesian inference and the analytic continuation of imaginary-time quantum Monte Carlo data // *Phys. Rep.* 1996, Vol. 269, P. 133.
115. Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg, M. J. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions // *Rev. Mod. Phys.* 1996, Vol.68, P. 13.
116. Rohringer G., Hafermann H., Toschi A., Katanin A. A., Antipov A. E., Katsnelson M. I., Lichtenstein A. I., Rubtsov A. N., Held K. Diagrammatic routes to nonlocal correlations beyond dynamical mean field theory // *Rev. Mod. Phys.* 2018, Vol. 90, P. 025003.
117. Sadovskii M. V., Nekrasov I. A., Kuchinskii E. Z., Pruschke T., Anisimov V. I. Pseudogaps in strongly correlated metals: A generalized dynamical mean-field theory approach // *Phys. Rev. B* 2005, Vol. 72, P. 155105.
118. Kitatani M., Tsuji N., Aoki H. FLEX+DMFT approach to the d-wave superconducting phase diagram of the two-dimensional Hubbard model // *Phys. Rev. B* 2015, Vol. 92, P. 085104.
119. Toschi A., Katanin A. A., Held, K. Dynamical vertex approximation: A step beyond dynamical mean-field theory // *Phys. Rev. B* 2007, Vol. 75, P. 045118.
120. Rubtsov A. N., Katsnelson M. I., Lichtenstein A. I. Dual fermion approach to nonlocal correlations in the Hubbard model // *Phys. Rev. B* 2008, Vol. 77, P. 033101.
121. Maier T., Jarrell M., Pruschke T., Hettler M. H. Quantum cluster theories // *Rev. Mod. Phys.* 2005, Vol. 77, P. 1027.
122. Senechal D., Perez D., Pioro-Ladriere M Spectral Weight of the Hubbard Model through Cluster Perturbation Theory // *Phys. Rev. Lett.* 2000, Vol. 84, P. 522.
123. Senechal D., Perez D., Plouffe D. Cluster perturbation theory for Hubbard models // *Phys. Rev. B* 2002, Vol. 66, P. 075129.

124. Potthoff M., Aichhorn M., Dahnken C. Variational Cluster Approach to Correlated Electron Systems in Low Dimensions // *Phys. Rev. Lett.* 2003, Vol. 91, P. 206402.
125. Potthoff M. Self-energy-functional approach to systems of correlated electrons. // *Eur. Phys. J. B* 2003, Vol. 32, P. 429.
126. Senechal D., Lavertu P.-L., Marois M.-A., Tremblay, A.-M. S. Competition between Antiferromagnetism and Superconductivity in High- T_c Cuprates // *Phys. Rev. Lett.* 2005, Vol. 94, P. 156404.
127. Aichhorn M. Arrighoni E., Potthoff M., Hanke W. Phase separation and competition of superconductivity and magnetism in the two-dimensional Hubbard model: From strong to weak coupling // *Phys. Rev. B* 2007, Vol. 76, P. 224509.
128. Gull E., Ferrero M., Parcollet O., Georges A., Millis A. J. Momentum-space anisotropy and pseudogaps: A comparative cluster dynamical mean-field analysis of the doping-driven metal-insulator transition in the two-dimensional Hubbard model // *Phys. Rev. B* 2010, Vol. 82, P. 155101.
129. Braganca H., Sakai S., Aguiar M. C. O., Civelli M. Correlation-Driven Lifshitz Transition at the Emergence of the Pseudogap Phase in the Two-Dimensional Hubbard Model // *Phys. Rev. Lett.* 2018, Vol. 120, P. 067002.
130. Ovchinnikov S. G., Sandalov I. S. The band structure of strong-correlated electrons in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ and $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ // *Phys. C: Supercond.* 1989, Vol. 161, P. 607.
131. Korshunov M. M., Gavrichkov V. A., Ovchinnikov S. G., Nekrasov I. A., Pchelkina Z. V., Anisimov V. I. Hybrid LDA and generalized tight-binding method for electronic structure calculations of strongly correlated electron systems // *Phys. Rev. B* 2005, Vol. 72, P. 165104.
132. Anisimov V. I., Poteryaev A. I., Korotin M. A., Anokhin A. O., Kotliar G. First-principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: dynamical mean-field theory // *J. Phys.: Condens. Matter* 1997, Vol. 9, P. 7359.

133. Nikolaev S.V., Ovchinnikov S.G., Cluster perturbation theory in Hubbard model exactly taking into account the short-range magnetic order in 2×2 cluster. // J. Exp. Theor. Phys. 2010, Vol. 111, P. 635.
134. Ovchinnikov S. G. Hubbard Operators in the Theory of Strongly Correlated Electrons / Ovchinnikov S. G., Val'kov V. V. - London: Imperial College Press, 2004, 256 p.
135. Zaanen J., Sawatzky G. A., Allen J. W Band gaps and electronic structure of transition-metal compounds // Phys. Rev. Lett. 1985, Vol. 55, P. 418.
136. Valla T., Kidd T. E., Yin W.-G., Gu G. D., Johnson P. D., Pan Z.-H., Fedorov A. V. High-Energy Kink Observed in the Electron Dispersion of High-Temperature Cuprate Superconductors // Phys. Rev. Lett. 2007, Vol. 98, P. 167003.
137. Vishik I. M., and Barisic N., Chan M. K., Li Y., Xia D. D., Yu G., Zhao X., Lee W. S., Meevasana W., Devereaux T. P., Greven M., Shen Z.-X. Angle-resolved photoemission spectroscopy study of $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ // Phys. Rev. B 2014, Vol. 89, P. 195141.
138. Wang Y., Wohlfeld K., Moritz B., Jia C. J., van Veenendaal M., Wu K., Chen C.-C., Devereaux T. P. Origin of strong dispersion in Hubbard insulators // Phys. Rev. B 2015, Vol. 92, P. 075119.
139. Grober C., Eder R., Hanke W. Anomalous low-doping phase of the Hubbard model // Phys. Rev. B 2000, Vol. 62, P. 4336.
140. Moritz B., Schmitt F., Meevasana W., Johnston S., Motoyama E. M., Greven M., Lu D. H., Kim C., Scalettar R. T., Shen Z.-X., Devereaux T. P. Effect of strong correlations on the high energy anomaly in hole- and electron-doped high- T_c superconductors // New J. Phys. 2009, Vol. 11, P. 093020.
141. Zemljic M. M., Prelovsek P., Tohyama T. Temperature and Doping Dependence of the High-Energy Kink in Cuprates // Phys. Rev. Lett. 2008, Vol. 100, P. 036402.
142. Val'kov V.V., Mitskan V. A. About Effective Hamiltonians for Hubbard Model in the Regime of Strong Electron Correlation // Phys. Met. Metallogr. 2005, Vol. 100, P. 10.

143. Li H., Zhou X., Parham S., Reber T. J., Berger H., Arnold G. B., Dessau D. S. Coherent organization of electronic correlations as a mechanism to enhance and stabilize high- T_c cuprate superconductivity. // Nat. Commun. 2018, Vol. 9, P. 26. (2018).
144. Schmalian J., Pines D., Stojkovic B. Microscopic theory of weak pseudogap behavior in the underdoped cuprate superconductors: General theory and quasiparticle properties // Phys. Rev. B 1999, Vol. 60, P. 667.
145. Wang Y., Moritz B., Chen C.-C., Devereaux T. P., Wohlfiel K. Influence of magnetism and correlation on the spectral properties of doped Mott insulators // Phys. Rev. B 2018, Vol. 97, P. 115120.
146. Verret S., Roy J., Foley A., Charlebois M., Senechal D., Tremblay A.-M. S. Intrinsic cluster-shaped density waves in cellular dynamical mean-field theory // Phys. Rev. B 2019, Vol. 100, P. 224520.
147. Nagaoka Y. Ferromagnetism in a Narrow, Almost Half-Filled s Band // Phys. Rev. 1966, Vol. 147, P. 392.
148. Avella A. Composite Operator Method Analysis of the Underdoped Cuprates Puzzle // Adv. Condens. Matter Phys. 2014, Vol. 2014, P. 515698.
149. Shen K. M., Ronning F., Lu D. H., Baumberger F., Ingle N. J. C., Lee W. S., Meevasana W., Kohsaka Y., Azuma M., Takano M., Takagi H., Shen Z.-X. Nodal Quasiparticles and Antinodal Charge Ordering in $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ // Science 2005, Vol. 307, P. 901.
150. Yoshida T., Zhou X. J., Tanaka K., Yang W. L., Hussain Z., Shen Z.-X., Fujimori A., Sahrakorpi S., Lindroos M., Markiewicz R. S., Bansil A., Komiya Seiki, Ando Y., Eisaki H., Kakeshita T., Uchida S. Systematic doping evolution of the underlying Fermi surface of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ // Phys. Rev. B 2006, Vol. 74, P. 224510.
151. Plate M., Mottershead J. D. F., Elfimov I. S., Peets D. C., Liang R., Bonn D. A., Hardy W. N., Chiuzaian S., Falub M., Shi M., Patthey L., Damascelli A. Fermi Surface and Quasiparticle Excitations of Overdoped $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$ // Phys. Rev. Lett. 2005, Vol. 95, P. 077001.

152. Peets D. C., Mottershead J. D. F., Wu B., Elfimov I. S., Ruixing L., Hardy W. N., Bonn D. A., Raudsepp M., Ingle N. J. C., Damascelli A. $Tl_2Ba_2CuO_{6+\delta}$ spectroscopic probes deep into the overdoped regime of the high- T_c cuprates // *New J. Phys.* 2007, Vol. 9, P. 28.
153. Hossain M., Mottershead J., Fournier D., Hossain M. A., Mottershead J. D. F., Fournier D., Bostwick A., McChesney J. L. Rotenberg E., Liang R., Hardy W. N., Sawatzky G. A., Elfimov I. S., Bonn D. A., Damascelli A. In situ doping control of the surface of high-temperature superconductors. // *Nat. Phys.* 2008, Vol. 4, P. 527.
154. Yoshida T., Zhou X. J., Nakamura M., Kellar S. A., Bogdanov P. V., Lu E. D., Lanzara A., Hussain Z., Ino A., Mizokawa T., Fujimori A., Eisaki H., Kim C., Shen Z.-X., Kakeshita T., Uchida S. Electronlike Fermi surface and remnant $(\pi, 0)$ feature in overdoped $La_{1.78}Sr_{0.22}CuO_4$ // *Phys. Rev. B* 2001, Vol. 63, P. 220501.
155. Razzoli E., Sassa Y., Drachuck G., Mansson M., Keren A., Shay M., Berntsen M. H., Tjernberg O., Radovic M., Chang J., Pailhes S., Momono N., Oda M., Ido M., Lipscombe O. J., Hayden S. M., Patthey L., Mesot J., Shi M. The Fermi surface and band folding in $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, probed by angle-resolved photoemission // *New J. Phys.* 2010, Vol. 12, P. 125003.
156. Seki K., Shirakawa T., Yunoki S. Variational cluster approach to thermodynamic properties of interacting fermions at finite temperatures: A case study of the two-dimensional single-band Hubbard model at half filling // *Phys. Rev. B* 2018, Vol. 98, P. 205114.
157. Nishida H., Fujiuchi R., Sugimoto K., Ohta Y. Typicality-Based Variational Cluster Approach to Thermodynamic Properties of the Hubbard Model // *J. Phys. Soc. Jpn.* 2020, Vol. 89, P. 023702.
158. Bejas M., Buzon G., Greco A., Foussats A. Doping and temperature dependence of the pseudogap and Fermi arcs in cuprates from d-CDW with short-range fluctuations in the context of the t-J model // *Phys. Rev. B* 2011, Vol. 83, P. 014514.
159. Ovchinnikov S.G., Korshunov M.M., Shneyder E.I. Lifshits quantum phase transitions and rearrangement of the Fermi surface upon a change in the hole

- concentration in high-temperature superconductors. // *J. Exp. Theor. Phys.* 2009, Vol. 109, P. 775.
160. Ovchinnikov S.G., Shneyder E.I., Korshunov M.M. From underdoped to overdoped cuprates: two quantum phase transitions // *J. Phys.: Condens. Matter* 2011, Vol. 23, P. 045701.
161. Makarov I.A., Gavrichkov V.A., Shneyder E.I., Nekrasov I. A., Slobodchikov A. A., Ovchinnikov S. G., Bianconi A. Effect of CuO₂ Lattice Strain on the Electronic Structure and Properties of High-T_c Cuprate Family. // *J. Supercond. Nov. Magn.* 2019, Vol. 32, P.1927.
162. Bogolyubov N. N., Tyablikov S. V. Retarded and advanced Green functions in statistical physics // *Sov. Phys. Dokl.* 1959, Vol. 4, P. 589.
163. Val'kov V.V., Ovchinnikov S.G. Hubbard operators and spin-wave theory of Heisenberg magnets with arbitrary spin // *Theor. Math. Phys* 1982, Vol. 50, P. 306.
164. Kondo J., Yamaji K. Green's-function formalism of the one-dimensional Heisenberg spin system // *Prog. Theor. Phys.* 1972, Vol. 47, P. 807.
165. Plakida N., Dyson equation for Heisenberg ferromagnet // *Phys. Lett. A* 1973, Vol. 43, P. 481.
166. Junger I., Ihle D., Richter J., Klümper A. Green-function theory of the Heisenberg ferromagnet in a magnetic field // *Phys. Rev. B* 2004, Vol. 70, P. 104419.
167. Val'kov V.V., Mitskan V.A., Petrakovskii G.A. The magnetoelastic mechanism of singlet phase formation in a two-dimensional quantum antiferromagnet. // *J. Exp. Theor. Phys.* 2006, Vol. 102, P. 234.
168. Val'kov V.V., Mitskan V.A. Magnetic-field-induced phase transition in a two-dimensional quantum magnet with plaquette distortion. // *J. Exp. Theor. Phys.* 2007, Vol. 105, P. 90.
169. Brzezicki W., Oles A. M. Entangled spin-orbital phases in the bilayer Kugel-Khomskii model // *Phys. Rev. B* 2011, Vol. 83, P. 214408.
170. Albuquerque A. F., Schwandt D., Hetenyi B., Capponi S., Mambrini M., Lauchli A. M. Phase diagram of a frustrated quantum antiferromagnet on the honeycomb

- lattice: Magnetic order versus valence-bond crystal formation // *Phys. Rev. B* 2011, Vol. 84, P. 024406.
171. Brzezicki W., Dziarmaga J., Oles A. M. Noncollinear Magnetic Order Stabilized by Entangled Spin-Orbital Fluctuations // *Phys. Rev. Lett.* 2012, Vol. 109, P. 237201.
172. Ren Y.-Z., Tong N.-H., Xie X.-C. Cluster mean-field theory study of J1-J2 Heisenberg model on a square lattice // *J. Phys.: Condens. Matter* 2014, Vol. 26, P. 115601.
173. Gotfryd D., Rusnacko J., Wohlfeld K., Jackeli G., Chaloupka J., Oles A. M. Phase diagram and spin correlations of the Kitaev-Heisenberg model: Importance of quantum effects // *Phys. Rev. B* 2017, Vol. 95, P. 024426.
174. Morita K., Kishimoto M., Tohyama T. Ground-state phase diagram of the Kitaev-Heisenberg model on a kagome lattice // *Phys. Rev. B* 2018, Vol. 98, P. 134437.
175. Sturhahn W., Jackson J. M., Lin J.-F. The spin state of iron in minerals of Earth's lower mantle // *Geophys. Res. Lett.* 2005, Vol. 32, P. L12307.
176. Ovchinnikov S.G. Metallization and spin crossover in Magnesiowüstite ($\text{Mg}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}$) at high pressures. // *JETP Lett.* 2011, Vol. 94, P. 192.
177. Juhasz J. I., Ihle D., Richter J. Thermodynamics of layered Heisenberg magnets with arbitrary spin // *Phys. Rev. B* 2009, Vol. 80, P. 064425.
178. Yasuda C., Todo S., Hukushima K., Alet F., Keller M., Troyer M., Takayama H. Neel Temperature of Quasi-Low-Dimensional Heisenberg Antiferromagnets // *Phys. Rev. Lett.* 2005, Vol. 94, P. 217201.
179. Harada K., Kawashima N. Loop algorithm for Heisenberg models with biquadratic interaction and phase transitions in two dimensions // *J. Phys. Soc. Jpn.* 2001, Vol. 70, P. 13.
180. Ramos F. B., Xavier J. C. N-leg spin-S Heisenberg ladders: A density-matrix renormalization group study, *Phys. Rev. B* 2014, Vol.89, P. 094424.