

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи

Иванцов Илья Дмитриевич

**Сильные электронные корреляции в нормальной
фазе слабодопированных ВТСП купратов**

01.04.02 – теоретическая физика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

д. ф.-м. н.

Кочетов Евгений Андреевич

Дубна – 2019

Оглавление

Введение	4
1. Актуальность темы исследования	4
2. Цели и задачи работы	5
3. Результаты работы, выносимые на защиту	6
4. Научная новизна и практическая значимость работы	7
5. Апробация работы	8
6. Личный вклад автора	9
7. Структура и объем работы	9
Глава 1. Сильные электронные корреляции в ВТСП купратах в рамках модели Кондо-Гейзенберга	11
1.1. Введение	11
1.2. Модель	13
1.3. Разрушение антиферромагнитного порядка при допировании системы	18
1.4. Реконструкция поверхности Ферми	22
1.5. Влияние эффектов конечного кластера на реконструкцию поверхности Ферми	26
1.6. Сильные электронные корреляции и антиферромагнетизм в фазе волны зарядовой плотности	30
1.7. Заключение	34
Глава 2. Фаза Нагаока при конечном допировании	36
2.1. Введение	36
2.2. Расчеты квантовым методом Монте-Карло	39
2.3. Точная диагонализация малых кластеров	42

2.4.	Существование насыщенного ферромагнетизма в случае двух дырок при различных граничных условиях	46
2.5.	Заключение	52
Глава 3. Реконструкция поверхности Ферми в фазе волны зарядовой плотности		
		53
3.1.	Введение	53
3.2.	Модель	55
3.3.	Изменение топологии поверхности Ферми и возникновение квантовых осцилляций	58
3.4.	Плотность электронных и дырочных состояний на уровне Ферми	62
3.5.	Заключение	64
Заключение		66
Приложение А. Квантовый метод Монте-Карло		68
Приложение Б. Кластерная теория возмущений		72
Список литературы		75

Введение

1. Актуальность темы исследования

Открытие высокотемпературной сверхпроводимости в купратах[1] явилось одним из наиболее значимых научных достижений конца XX века и дало толчок огромному количеству как теоретических, так и экспериментальных исследований в данной области. Перспективы практического применения ВТСП купратов поистине безграничны, и обусловлены не только явлением высокотемпературной сверхпроводимости, но и эффектом колоссального магнитосопротивления и рядом других уникальных свойств. Изучение высокотемпературной сверхпроводимости в купратах, на сегодняшний день, является одним из основных направлений физики конденсированного состояния. Но, несмотря на большие усилия, направленные на исследования в этой области, до сих пор не существует теоретического описания процессов, происходящих в ВТСП купратах.

Проблемы теоретического описания в данном случае связаны с тем, что электроны в таких соединениях являются сильно коррелированными и не поддаются описанию в рамках одноэлектронных подходов. В то же время сильные корреляции приводят к тому, что даже в нормальной фазе (в отсутствие сверхпроводимости) купраты проявляют очень необычные свойства. Одним из наиболее интересных феноменов является то, что в слабодопированных купратах присутствует так называемая псевдощелевая фаза, характеризующаяся наличием щели в энергетическом спектре выше температуры перехода в сверхпроводящее состояние[2], что указывает на неприменимость фермижидкостного описания. В то же время обнаружение квантовых осцилляций плотности электронных состояний[3] указывает на то, что в узкой области допирования в присутствии сильного магнитного поля поведение электронов вновь подчиняется описанию в рамках Ферми жидкости. Данное противоречие до сих пор не имеет достоверного научного описания и является актуальной задачей со-

временной теоретической физики конденсированного состояния. В то же время существование волн спиновой и зарядовой плотности [4] указывает на спонтанное нарушение трансляционной симметрии, что так же до сих пор не может быть объяснено в рамках существующих теоретических подходов.

Так как в общем случае сверхпроводимость проявляется как нестабильность нормального состояния, то понимание природы нормального состояния, из которого сверхпроводимость возникает, является исключительно важной задачей, которая, в перспективе, позволит перейти на качественно новый уровень в понимании физики высокотемпературной сверхпроводимости.

2. Цели и задачи работы

Основная цель работы заключалась в исследовании свойств нормальной фазы ВТСП купратов, описываемых в рамках моделей с сильными электронными корреляциями, без привлечения дополнительных феноменологических параметров. Так как в таком подходе поведение системы обусловлено исключительно сильным кулоновским отталкиванием, то такой подход позволяет установить, вызваны ли необычные свойства слабодопированных купратов сильными корреляциями.

Для достижения этой цели был поставлен ряд задач:

1. Исследование устойчивости дальнего антиферромагнитного порядка при допировании системы и зависимости такой устойчивости от величины электронных корреляций.
2. Исследование влияния Кондо-взаимодействия на спектральные свойства и характеристики спинового и зарядового упорядочения в модели Кондо-Гейзенберга.
3. Анализ поведения поверхности Ферми в слабодопированной фазе купратов в присутствии волны зарядовой плотности.

4. Анализ поведения носителей заряда на уровне Ферми в широком диапазоне допирования.
5. Изучение свойств сильно коррелированных электронов в предельном случае бесконечно сильного кулоновского отталкивания (так называемая фаза Нагаока). В данном случае модель не содержит явного антиферромагнитного взаимодействия и поведение системы определяется исключительно констрейнтом отсутствия двойного заполнения.

3. Результаты работы, выносимые на защиту

1. В рамках модели Кондо-Гейзенберга показано, что сильные электронные корреляции в купратах приводят к разрушению антиферромагнитного упорядочения уже при очень малом допировании и возникновению псевдощели в данной фазе, что полностью согласуется с экспериментом.
2. Показано, что в пределе бесконечно сильных корреляций (фаза Нагаока) непрерывный фазовый переход в полностью поляризованную ферромагнитную фазу не может быть реализован ни при каком конечном допировании. Показано, что магнитный порядок основного состояния напрямую зависит от типа граничных условий и характера решетки, что указывает на нетривиальность термодинамического предела.
3. Разработан подход, позволяющий качественно описать реконструкцию поверхности Ферми в слабодопированных купратах. Данный метод позволяет воспроизвести как поверхность Ферми в фазе псевдощели, так и изменение ее топологии в фазе волны зарядовой плотности, что объясняет экспериментально наблюдаемое изменение знака коэффициентов Холла и Зеебека при низких температурах в сильном магнитном поле.
4. Предложен механизм, объясняющий возникновение экспериментально на-

блюдаемых низкочастотных квантовых осцилляций плотности электронных состояний в купратах в фазе волны зарядовой плотности с помощью эффективного замыкания квазичастичных орбит вследствие Брэгговского отражения на границах редуцированной зоны Бриллюэна. Этот механизм объясняет ряд наблюдаемых в эксперименте особенностей электронной/дырочной проводимости в слабодопированных купратах.

4. Научная новизна и практическая значимость работы

Впервые реконструкция поверхности Ферми была воспроизведена в рамках микроскопической модели, явным образом учитывающей сильные электронные корреляции и существование волны зарядовой плотности, не требующей введения дополнительных феноменологических параметров. Данное поведение поверхности Ферми позволяет объяснить эксперименты, демонстрирующие изменение знака коэффициентов Холла[5] и Зеебека[6] в диапазоне допирования $0.08 < \delta < 0.16$, воспроизводит возникновение полностью электронной проводимости при допировании $\delta \approx 0.10$ [7], а так же объясняет экспериментальные данные измерения теплоемкости слабодопированных купратов[8].

Предложен механизм, объясняющий возникновение квантовых осцилляций плотности электронных состояний в присутствии сильного магнитного поля[3] в фазе волны зарядовой плотности. Данным механизмом позволяет объяснить, каким образом арочные поверхности Ферми могут образовывать эффективно замкнутую орбиту, что является необходимым условием для возникновения квантовых осцилляций плотности электронных состояний в магнитном поле.

Приведенные в диссертации расчеты указывают на то, что используемый подход позволяет описать поверхности Ферми как в псевдощелевой фазе[2], так и в фазе волны зарядовой плотности, чего до сих пор не было достигнуто в рамках феноменологических моделей.

Впервые была показана зависимость от граничных условий устойчивости

ферромагнетизма в фазе Нагаока. Данный результат указывает на то, что система сильно коррелированных фермионов даже в отсутствие взаимодействия проявляет нетривиальные физические свойства, такие как неустойчивость термодинамического предела.

5. Апробация работы

Результаты диссертации опубликованы в следующих 4 статьях, входящих в список ВАК:

1. I. Ivantsov, A. Ferraz, E. Kochetov / Quantum Monte Carlo study of the itinerant-localized model of strongly correlated electrons: Spin-spin correlation functions // Phys. Rev. B - 2016. - Vol. 94. - pp. 235118
2. I. Ivantsov, A. Ferraz, E. Kochetov / Breakdown of the Nagaoka phase at finite doping // Phys. Rev. B - 2017. - Vol. 95. - pp. 155115
3. I. Ivantsov, A. Ferraz, E. Kochetov / Itinerant-localized model of strongly correlated electrons: Fermi surface reconstruction // Phys. Rev. B - 2017. - Vol. 96. - pp. 195161
4. I. Ivantsov, A. Ferraz, E. Kochetov / Fermi surface reconstruction in underdoped cuprates: Origin of electron pockets // Phys. Rev. B - 2018. - Vol. 98. - pp. 214511

Результаты работы представлены на международных и всероссийских конференциях:

1. 2017 Winter workshop/school on localization, interactions and superconductivity, Landau Institute for Theoretical Physics, Черноголовка, Россия
2. The XXI International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (AYSS-2017), JINR, OMUS, Dubna, Russia

3. 48th meeting of the PAC for Condensed Matter Physics, JINR, Dubna, Russia
4. Emergent phenomena in strongly correlated quantum matter, International Institute of Physics, Натал, Бразилия
5. Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка - XXXVII», ИФМ УрО РАН, Екатеринбург, Россия
6. 49th meeting of the PAC for Condensed Matter Physics, JINR, Dubna, Россия

6. Личный вклад автора

Автор принимал непосредственное участие в постановке задач, разработке численных алгоритмов и компьютерных программ, проведению расчетов а так же анализу полученных результатов и публикации статей. Личный вклад автора в результаты и основные положения, выносимые на защиту, является определяющим.

7. Структура и объем работы

В первой главе диссертации для описания купратов вводится модель Кондо-Гейзенберга. В рамках квантового метода Монте-Карло вычислены спиновые корреляционные функции и проводится анализ их поведения. В рамках кластерной теории возмущений рассчитаны поверхности Ферми при различных уровнях допирования. Исследуется вопрос влияния эффектов конечного размера кластера на результаты и проводится анализ зависимости такого поведения от величин антиферромагнитного и Кондо взаимодействия.

Во второй главе диссертации рассматривается вопрос о возможности существования насыщенного ферромагнитного основного состояния в случае конечного допирования в фазе Нагаока. В рамках квантового метода Монте-Карло вычисляются спиновые корреляционные функции при конечной температуре и

на их основе производится анализ поведения системы. В рамках точной диагонализации малых кластеров вычисляются корреляционные функции и значение спина в основном состоянии кластеров. В рамках точной диагонализации высокоспинового сектора Гильбертова пространства Гамильтониана рассматривается вопрос о устойчивости Нагаоковской фазы в случае больших решеток при различных граничных условиях.

Во третьей главе детально разбирается влияние волн зарядовой плотности на реконструкцию поверхности Ферми. Объясняется причина возникновения квантовых осцилляций плотности электронных состояний малой частоты, наблюдаемых в слабодопированных купратах. В рамках $t - J$ модели рассчитывается поведение носителей заряда на поверхности Ферми.

В Приложении А изложен алгоритм квантового метода Монте-Карло, использующегося в данной работе для вычисления спиновых корреляционных функций в Главе 1 и Главе 2.

В Приложении Б изложен метод кластерной теории возмущений, использующегося в данной работе для вычисления спектральных функций и поверхностей Ферми в Главе 1 и Главе 3.

Глава 1

Сильные электронные корреляции в ВТСП купратах в рамках модели Кондо-Гейзенберга

1.1. Введение

Вся совокупность необычных свойств ВТСП купратов вызвана наличием сильного кулоновского отталкивания, а все вызванные этим отталкиванием эффекты, такие как антиферромагнетизм, псевдощель и высокотемпературная сверхпроводимость, являются прямым следствием такого взаимодействия. Основной задачей, исследуемой в данной главе, является исследование механизма, лежащего в основе необычного поведения электронов в слабодопированной фазе ВТСП купратов.

Изображенная на Рис.1.1(а) фазовая диаграмма отображает экспериментально известные данные о свойствах купратов при дырочном допировании. При слабом допировании купраты демонстрируют антиферромагнитное упорядочение, образующее (квази)дальний порядок. При температурах $T < T^*$ в ВТСП купратах реализуется псевдощелевая фаза, характеризующаяся частичной щелью на уровне Ферми и, как следствие, арочной поверхностью Ферми, наблюдаемой в экспериментах по фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES). Стоит отметить тот факт, что температура, соответствующая переходу в фазу псевдощели значительно выше критической температуры сверхпроводимости, как и различные диапазоны допирования, характерные для этих фаз. Данный факт, как и ряд экспериментальных наблюдений, свидетельствует в пользу того, что псевдощель не является прямым следствием формирования куперовских пар, а поведение системы в данной фазе подчиняется описанию в рамках сильно коррелированных электронов.

Кроме того, недавно обнаруженная фаза волны зарядовой плотности с

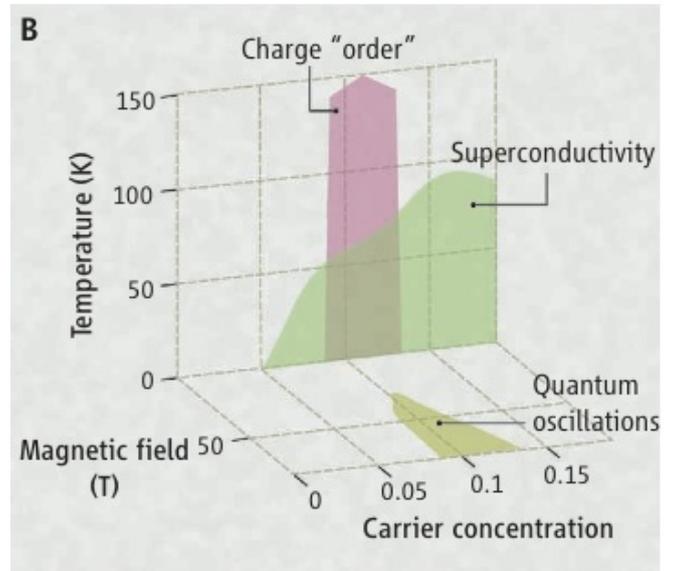
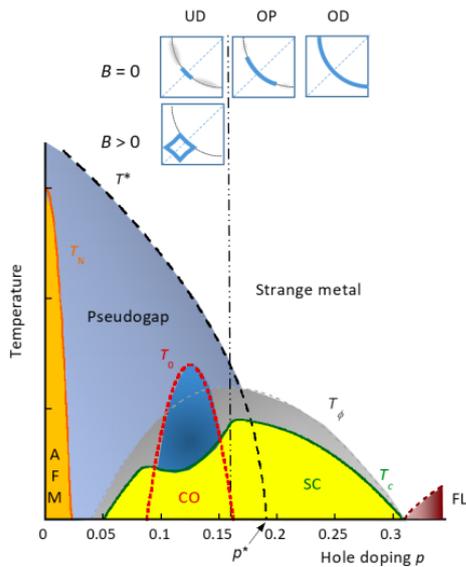


Рис. 1.1. (а): Фазовая диаграмма ВТСП купратов из статьи [9]. (b): Фазовая диаграмма ВТСП купратов в присутствии магнитного поля из статьи [10].

длинной волны $\sim 3-4$ постоянных решетки, и находящаяся "внутри" псевдощелевой фазы, указывает на нарушение трансляционной симметрии, что приводит к реконструкцией поверхности Ферми и возникновению электронных карманов малой площади.

На Рис.1.1(b) изображена фазовая диаграмма с учетом магнитного поля. Наиболее непредсказуемым открытием явилось обнаружение квантовых осцилляций в присутствии сильного магнитного поля. Данный феномен, в совокупности с изменением знаков коэффициентов Холла и Зеебека, указывает на изменение топологии поверхности Ферми. Малая частота таких осцилляций подразумевает, что поверхность Ферми состоит из малых карманов, что противоречит данным ARPES измерений в фазе псевдощели.

Для описания ВТСП купратов в нормальной фазе широко используются модели сильно коррелированных электронов, такие как модель Хаббарда[11] и $t-J$ модель[12]. Так как определяющие физику купратов процессы происходят в CuO_2 плоскостях, то физика купратов является квазидвумерной, и большая часть физических явлений, наблюдаемых в эксперименте, может быть смоделирована в рамках двумерных моделей с сильными электронными корреляциями.

В данной главе используется модель Кондо-Гейзенберга сильно коррелированных электронов, являющаяся расширением $t - J$ модели. В рамках такой модели становится возможным отделить друг от друга антиферромагнитную составляющую сильного кулоновского отталкивания и слагаемое, отвечающее за констрейнт двойного заполнения узла электронами, что недоступно в случае $t - J$ модели, где двойное заполнение заранее запрещено, и в случае модели Хаббарда, где обоим эффектам соответствует единственный параметр U .

В рамках такого подхода появляется возможность оценить влияние как антиферромагнитных корреляций, так и констрейнта отсутствия двойного заполнения по отдельности при различных уровнях допирования, что позволяет определить причину, вызывающую столь необычное поведение ВТСП купратов.

1.2. Модель

Стандартная $t - J$ модель сильно коррелированных электронов имеет вид:

$$H_{t-J} = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} \tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + J \sum_{ij} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{1}{4} \tilde{n}_i \tilde{n}_j), \quad (1.1)$$

где $\tilde{c}_{i\sigma} = c_{i\sigma}(1 - n_{i,-\sigma})$ являются спроектированными на редуцированное Гильбертово пространство фермионными операторами уничтожения электрона на узле i с проекцией спина σ , а $\vec{S}_i = \sum_{\sigma,\sigma'} \tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \vec{\tau}_{\sigma\sigma'} \tilde{c}_{i\sigma'}$, является оператором спина электрона, $\tilde{n}_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 2n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$, $\vec{\tau}$ обозначает вектор, состоящий из матриц Паули, $\vec{\tau}^2 = 3/4$. В слабодопированных купратах одной из ключевых особенностей является наличие как локализованных, так и делокализованных решеточных электронов. Для равноценного учета как одного, так и другого типа электронов в рамках феноменологического описания была предложена slave-boson модель [13, 14]. При таком подходе стандартная решетка $t - J$ модели расслаивается на решетку, изображенную на Рис.1.2:

1) решетку Гейзенберговских спинов, описывающих локализованные электроны и которым соответствуют операторы $\vec{S} \in SU(2)$.

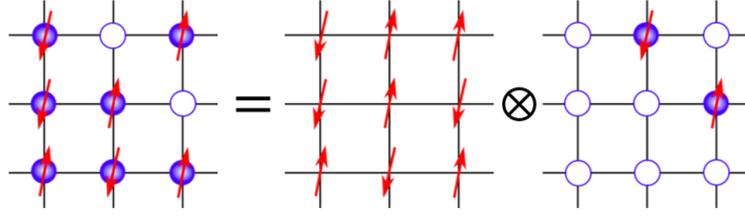


Рис. 1.2. Расслоение двумерной решетки $t - J$ модели на решетку Гейзенберговских спинов и допонов.

2) решетку квазичастиц допирования (допонов), описывающих делокализованные электроны и описываемых спроектированными фермиевскими операторами в редуцированном Гильбертовом пространстве $\tilde{d}_{i\sigma} = d_{i\sigma}(1 - n_{i-\sigma}^d)$.

Изначальные электронные операторы в таком подходе определяются как:

$$\tilde{c}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2} - 2\vec{S}_i \cdot \vec{\tau} \right) \tilde{d}_i. \quad (1.2)$$

В таком представлении Гамильтониан имеет вид:

$$H_{t-J} = 2 \sum_{ij\sigma} t_{ij} \tilde{d}_{i\sigma}^\dagger \tilde{d}_{j\sigma} + J \sum_{\langle ij \rangle} ((\vec{S}_i + \vec{s}_i) \cdot (\vec{S}_j + \vec{s}_j)) - \frac{1}{4} (1 - \tilde{n}_i^d)(1 - \tilde{n}_j^d), \quad (1.3)$$

где $\tilde{d}_{i\sigma}^\dagger$ - оператор рождения допона на узле i с проекцией спина σ , $\vec{s}_i = \sum_{\sigma', \sigma} \tilde{d}_{i\sigma'}^\dagger \vec{\tau}_{\sigma'\sigma} \tilde{d}_{i\sigma}$ соответствует спину допона, а \vec{S}_i является решеточным спином и описывает локализованные электроны, а $\tilde{n}_i^d = \sum_{\sigma} \tilde{d}_{i\sigma}^\dagger \tilde{d}_{i\sigma}$.

Следует отметить, что в стандартной $t - J$ модели Гильбертово пространство одноузельных состояний является трехмерным, и состоит из незаполненного состояния $|0\rangle$, состояния с электроном со спинов вверх $|\uparrow\rangle$ и вниз $|\downarrow\rangle$. В случае представления Кондо-Гейзенберга Гильбертово пространство становится шестимерным и является прямым произведением двумерного пространства решетки Гейзенберга на трехмерное пространство решетки спроектированных электронов. Таким образом, одноузельное состояние записывается в виде $|\sigma a\rangle$, где $\sigma = \uparrow, \downarrow$ соответствует решеточным спином (локализованным электронам), а индекс $a = 0, \uparrow, \downarrow$ соответствует допонам (делокализованным электронам). Базис Гильбертова пространства в таком случае является расширенным и со-

держит состояния:

$$\mathcal{H}^{enlarged} = \{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow 0\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow 0\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\} \quad (1.4)$$

Как видно, структура одноузельных состояний допускает двойное заполнение узла локализованным и делокализованным электроном, что является физически некорректным. По аналогии с условием отсутствия двойного заполнения в $t - J$ модели, при переходе к представлению Кондо-Гейзенберга ограничение на одноузельные состояния принимает следующую форму:

$$\vec{S}_i \cdot \vec{s}_i + \frac{3}{4}(\tilde{d}_{i\uparrow}^\dagger \tilde{d}_{i\uparrow} + \tilde{d}_{i\downarrow}^\dagger \tilde{d}_{i\downarrow}) = 0, \quad (1.5)$$

Таким образом, к Гамильтониану необходимо добавить множитель Лагранжа, учитывающий условие отсутствия двойного заполнения

$$H_\lambda = \lambda \sum_i (\vec{S}_i \cdot \vec{s}_i + \frac{3}{4}n_i^d), \quad (1.6)$$

Слагаемое H_λ является одноузельным и имеет вид

$$\begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\mu & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\lambda}{2} & \frac{\lambda}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\lambda}{2} & \frac{\lambda}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow 0\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow 0\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

В таком виде одноузельная часть является недиагональной, что приводит к неудобствам в использовании численных методов, в частности метода квантового Монте-Карло. При переходе к базису, диагонализующему одноузельные

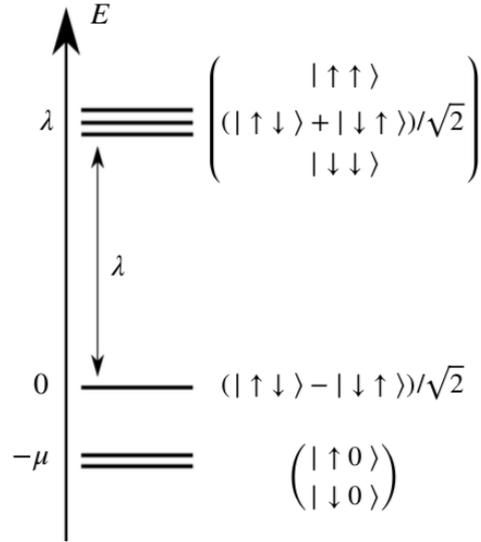


Рис. 1.3. Структура одноузельного Гильбертова пространства модели Кондо-Гейзенберга. Синглетное состояние с энергией $E = 0$ соответствует дырке, дублетное состояние с $E = -\mu$ соответствует физическим электронам, триплетное состояние с энергией λ соответствует состояниям с двойным заполнением узла.

слагаемые, соответствующий член Гамильтониана принимает вид

$$\begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\mu & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow 0\rangle \\ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ |\downarrow 0\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

что приводит к новому базису, схематически изображенному на Рис.1.3(a). В таком представлении в системе присутствует синглет $\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$, соответствующий вакансии и имеющий собственную энергию $E = 0$, дублет $(|\uparrow 0\rangle, |\downarrow 0\rangle)$, описывающий электроны со спином вверх/вниз с энергией $E = -\mu$, и триплет $(|\uparrow\uparrow\rangle, \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, |\downarrow\downarrow\rangle)$, характеризующий отсутствующие в стандартной $t - J$ модели нефизические состояния с энергией $E = \lambda$.

Отображение между пространствами изначальной $t - J$ модели и модели

Кондо-Гейзенберга задается в виде:

$$\begin{aligned}
 |\uparrow\rangle_{tJ} &= |\uparrow 0\rangle \\
 |\downarrow\rangle_{tJ} &= |\downarrow 0\rangle \\
 |0\rangle_{tJ} &= \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}
 \end{aligned} \tag{1.9}$$

Оставшиеся состояния $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\downarrow\downarrow\rangle$ и $\frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$ не присутствуют в $t - J$ модели и являются нефизическими, реализуют возможность двойного заполнения узла, и отделены от остальных состояний щелью $\sim \lambda$. Данные состояния могут быть исключены из модели путем выбора параметра $\lambda = +\infty$.

Таким образом, Гамильтониан принимает вид:

$$H_{t-J} = \sum_{ij\sigma} 2t_{ij} d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + J \sum_{ij} \vec{S}_i (1 - n_i^d) \cdot \vec{S}_j (1 - n_j^d) + \lambda \sum_i (\vec{S}_i \cdot \vec{s}_i + \frac{3}{4} n_i^d), \tag{1.10}$$

Первое слагаемое, в таком случае, характеризует движение делокализованных электронов. Второе слагаемое соответствует Гейзенберговскому взаимодействию решеточных спинов. Третье слагаемое имеет вид Кондо взаимодействия и описывает корреляции между локализованными и делокализованными электронами. Более того, редуцированные операторы $\tilde{d}_{i\sigma}^\dagger$ могут быть заменены на стандартные фермиевские $d_{i\sigma}^\dagger$, так как ограничение на двойное заполнение узла реализуется за счет Кондо-слагаемого. В случае бесконечно большого значения λ Кондо-взаимодействие приводит к запрету на двойное заполнение узла, и модель редуцируется до стандартной $t - J$ модели. В случае конечного значения λ ограничение отсутствия двойного заполнения ослабляется, что приводит к возможности появления нехарактерных для $t - J$ модели состояний. В случае $\lambda = 0$ в системе отсутствуют корреляции, решеточные спины перестают взаимодействовать с допонами и поведение системы описывается в рамках модели Гейзенберга для локализованных электронов и стандартной tight-binding модели для делокализованных.

Вблизи половинного заполнения (слабодопированный случай $\langle n_i^d \rangle \ll 1$) спиновое взаимодействие допонов становится малым, таким образом мы можем заменить $J \rightarrow \tilde{J} = J(1 - \delta)^2$. В таком случае Гамильтониан принимает форму:

$$H_{t-J} = \sum_{ij\sigma} t_{ij}^{\text{eff}} d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \tilde{J} \sum_{ij} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{1}{4}) + \lambda \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{s}_i, \quad (1.11)$$

где $t_{ij}^{\text{eff}} = 2t_{ij} + (3\lambda/4 - \mu)\delta_{ij}$ и $\lambda \gg t, J$.

1.3. Разрушение антиферромагнитного порядка при допировании системы

Как известно, при малых уровнях допирования купраты представляют из себя антиферромагнитный изолятор. В случае половинного заполнения $t-J$ модель, широко применяемая для описания ВТСП купратов, редуцируется в двумерную модель Гейзенберга. Однако данная антиферромагнитная фаза быстро разрушается с ростом допирования, и в реальных образцах антиферромагнитный порядок существует до уровня допирования порядка $\delta \approx 0.08$.

Модель Кондо-Гейзенберга предоставляет возможность оценить влияние антиферромагнитного обменного взаимодействия J отдельно от величины корреляций λ .

В спин-допированном представлении основной вклад в магнитный порядок дает взаимодействие решеточных спинов, включенных в Гамильтониан в виде гейзенберговского слагаемого. В случае половинного заполнения модель, аналогично с $t-J$ моделью, сводится к двумерной модели Гейзенберга, у которой имеется квантовая критическая точка при $T = 0$, соответствующая установлению дальнего антиферромагнитного порядка. При повышении температуры, в силу теоремы Мермина-Вагнера, существование дальнего порядка невозможно, однако при $T \ll t$ должен присутствовать квазидальний антиферромагнитный порядок.

При малом отклонении от половинного заполнения, даже в отсутствие прямого взаимодействия между спинами носителей заряда (в случае малых плотностей допонов таким взаимодействием можно пренебречь) взаимодействие между спинами решетки и допонами, описываемое Кондо-слагаемым, приводит к разрушению антиферромагнитного порядка.

В рамках квантового метода Монте-Карло (Приложение А) были рассчитаны спиновые корреляционные функции, позволяющие оценить величину антиферромагнитного порядка. Корреляционные функции $g(r)$:

$$g(r) = 4\Delta^{-1}(r) \sum_{ij} \langle (S_i^z + s_i^z)(S_j^z + s_j^z) \rangle e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \bar{\delta}(r - |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|), \quad (1.12)$$

рассчитывались для физических электронов, соответствующих электронам из начальной $t - J$ модели, $\mathbf{K} = (\pi, \pi)$ является волновым вектором антиферромагнитного упорядочения, \mathbf{R}_i радиус-вектор узла i , нормировочная функция определяется как $\Delta(r) = \sum_{ij} \bar{\delta}(r - |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|)$, и

$$\bar{\delta}(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } |x| \leq 0.5a, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (1.13)$$

где a является постоянной решетки, а $\langle \dots \rangle$ обозначает усреднение по всем спиновым конфигурациям, используемым в расчетах в методе квантового Монте-Карло.

На всех графика корреляционная функций $g(r)$ изображена в логарифмическом масштабе. Следовательно, для дальнего, квазидальнего и ближнего порядка $g(r)$ должна иметь асимптотическое поведение в виде константы, логарифмической функции и прямой линии, соответственно.

На Рис.1.4 изображены спиновые корреляционные функции при различных уровнях допирования. Критическая концентрация, свидетельствующая о разрушении даже квазидальнего порядка и характеризующаяся экспоненциальным спадом корреляционной функции с ростом расстояния (на графике в логарифмическом масштабе имеет вид прямой) достигается при $\delta_c = 0.05$ для

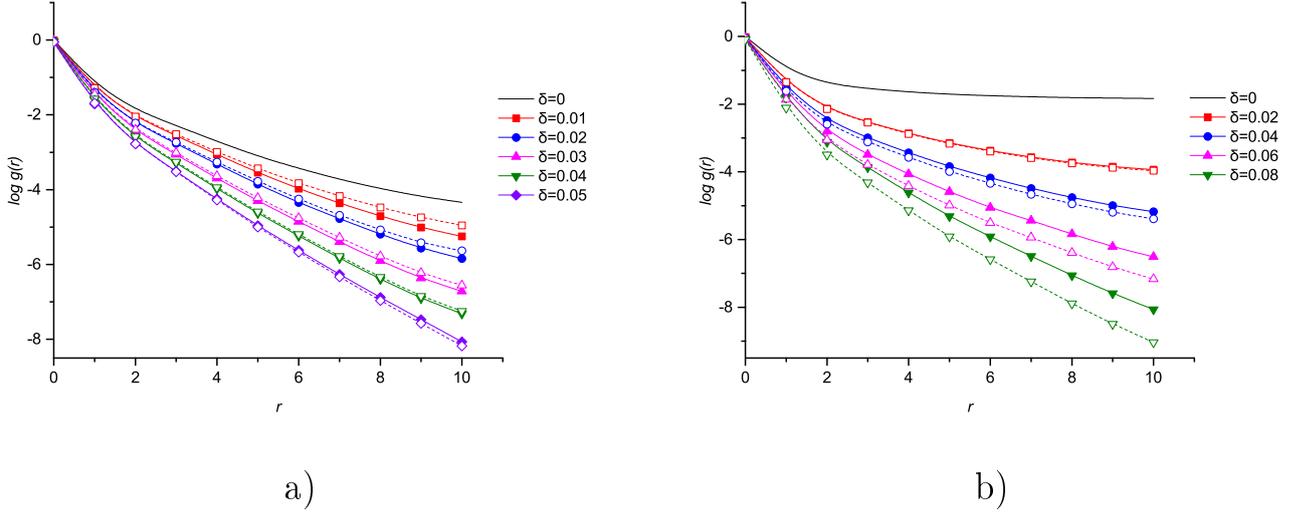


Рис. 1.4. Спиновые корреляционные функции $g(r)$ при $J = 0.2t$ (a) и $J = 0.4t$ (b). Сплошные и пунктирные линии соответствуют $t' = t'' = 0$ и $(t' = -0.27t, t'' = 0.2t)$ соответственно. Температура $T = 0.1t$.

$J = 0.2t$ и $\delta_c = 0.08$ при $J = 0.4t$. Подавление квазидальнего порядка в случае конечной температуры позволяет соответствовать подавлению истинного дальнего порядка, существующего при нулевой температуре. Несмотря на то, что полученные величины критического допирования не обязаны соответствовать случаю нулевой температуры, их значения, по крайней мере, должны быть достаточно близки.

На Рис.1.5 изображен статический антиферромагнитный спиновый структурный фактор при различных уровнях допирования.

$$S(\pi, \pi) = \frac{1}{N} \sum_i \langle (S_0^z + s_0^z)(S_i^z + s_i^z) \rangle e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_i}, \quad (1.14)$$

где $\mathbf{K} = (\pi, \pi)$. Результаты показывают, что при отступлении от случая половинного заполнения квазидальний порядок разрушается чрезвычайно быстро.

На Рис.1.6 спиновые корреляционные функции $g(r)$ изображены при критической концентрации допонов ($\delta = 0.05$ при $J = 0.2$ и $\delta = 0.08$ при $J = 0.4$) при различных значениях корреляционного параметра λ .

В случае $\lambda = 0$ корреляции между локализованными и делокализованными электронами пропадают и модель расщепляется на tight-binding модель для допонов и гейзенберговскую модель для решеточных спинов, в которой при

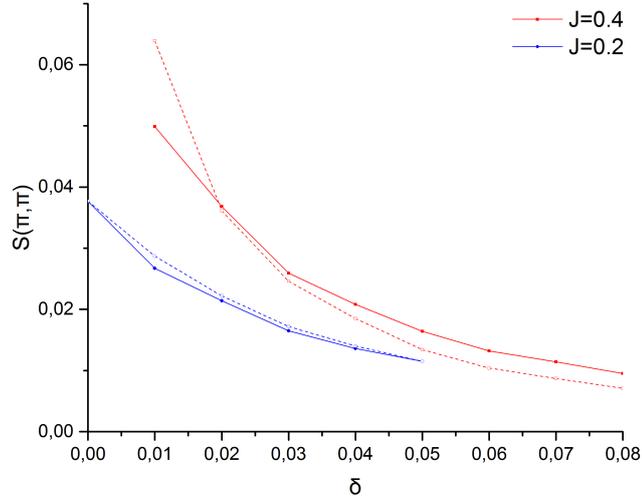


Рис. 1.5. Антиферромагнитный спиновый структурный фактор $S(\pi, \pi)$ при различных уровнях допирования δ и различным значениях параметра J . Сплошные и пунктирные линии соответствуют $t' = t'' = 0$ и $(t' = -0.27t, t'' = 0.2t)$ соответственно. Температура $T = 0.1t$, $t' = t'' = 0$.

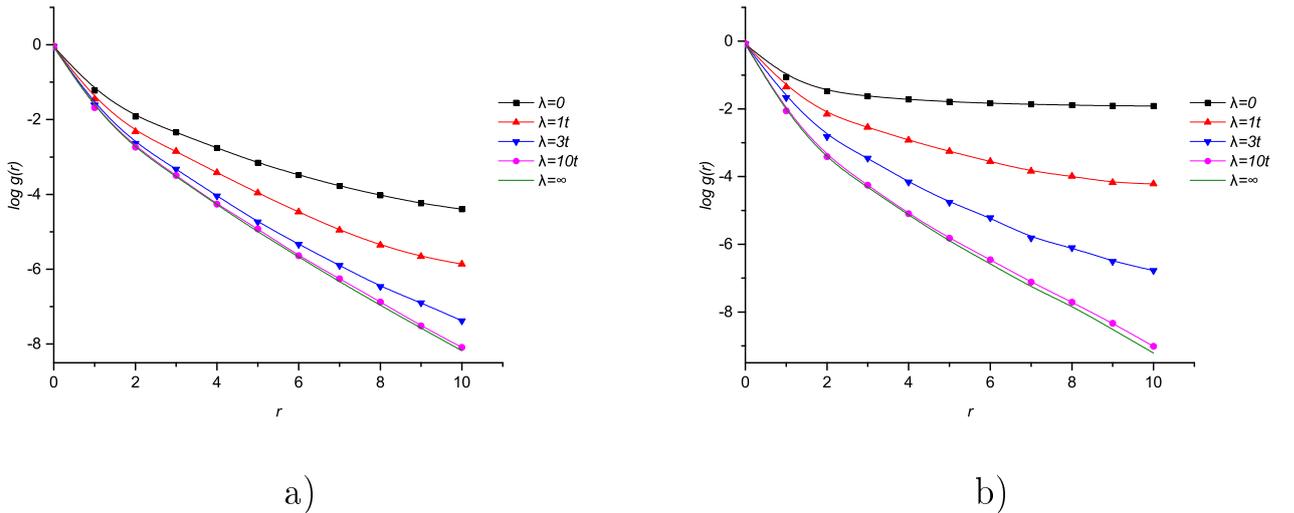


Рис. 1.6. Спиновые корреляционные функции $g(r)$ при **(a)**: $J = 0.2t$, $\delta = 0.05$ **(b)**: $J = 0.4t$, $\delta = 0.08$ при различных значениях параметра λ . Температура $T = 0.1t$, $t' = t'' = 0$.

любом допировании будет присутствовать квазидальний антиферромагнитный порядок. Единственная связь между решеточными спинами и допонами, в таком случае, осуществляется через перенормировку константы обменного взаимодействия $\tilde{J} = J(1 - \delta)^2$. В слабодопированном случае данная перенормировка не вносит существенного вклада в качественное поведение системы, однако, как и следовало ожидать, приводит к постепенному ослаблению антиферромагнитного порядка с ростом допирования вплоть до его полного исчезновения в полностью допированном случае.

Локальный констрейнт отсутствия двойного заполнения играет ключевую роль в разрушении антиферромагнитного упорядочения, и при $\lambda > 10t$ значения спиновых корреляционных функций становится практически идентичным, что указывает на насыщение по λ . В случае промежуточных значений λ противостояние антиферромагнитного и Кондо-взаимодействия слабеет, что приводит к повышению верхней границы антиферромагнитной фазы[15]. В данном случае высоко и низкоэнергетические делокализованные электроны не могут быть разделены, что является еще одним проявлением дуальной природы таких решеточных электронов.

1.4. Реконструкция поверхности Ферми

В ряде экспериментальных работ, связанных с исследованием ВТСП купратов, была обнаружена значительная реконструкция поверхности Ферми в маленькие карманы в слабодопированном режиме, указывающая на неприменимости стандартного фермижидкостного описания в псевдощелевой фазе. Ряд феноменологических подходов был предложен для описания этого явления, однако данные модели не являются микроскопическими и, зачастую, не соответствуют экспериментальным данным.

До сих пор остается не ясным, вызвана ли такая реконструкция влиянием антиферромагнитного упорядочения, либо она связана с какими-либо другими

проявлениями сильных электронных корреляций.

Наиболее физически корректным является подход, предполагающий реконструкцию поверхности Ферми в маленькие электронные карманы из-за наличия в купратах фазы волны зарядовой плотности, расположенной внутри псевдощелевой фазы при допированиях $\delta_{c1} \leq \delta \leq \delta_{c2}$. Изображение фазы волны зарядовой плотности на фазовой диаграмме $\delta-T$ образует "колокол" в указанных диапазонах допирования и имеющий максимум с $T_{CDW} \sim 160K$ при $\delta \sim 0.12$ [3]. Именно в таком диапазоне допирования экспериментальные наблюдения обнаруживают квантовые осцилляции в купратах, и именно при $\delta \sim 0.12$ амплитуда таких осцилляций является максимальной, что указывает на прямую связь двух этих явлений.

В данной главе эволюция поверхности Ферми разобрана в рамках модели Кондо-Гейзенберга, позволяющей оценить степень влияния антиферромагнитного взаимодействия и сильных корреляций на поведение ВТСП купратов. В качестве численного метода использована кластерная теория возмущений (Приложение Б), позволяющая получать спектральные функции системы при нулевой температуре. Данный метод основан на первичной точной диагонализации малых кластеров с Гамильтонианом модели Кондо-Гейзенберга и последующем расчете спектральных функции межкластерного взаимодействия в базисе собственных состояний малых кластеров. Оперируя кластерами 3×3 на масштабах размера кластера можно в достаточной степени учесть особенности сильных корреляций, проявляемых во внутрикластерном взаимодействии. Данный подход позволяет получить поверхности Ферми при различных уровнях допирования и качественно описать эволюцию системы с ростом концентрации носителей заряда.

В результате расчетов показано, что при росте допирования (начиная от $\delta = 0.08$, что соответствует разрушению квазидальнего антиферромагнитного порядка) эволюцию поверхности Ферми, отображенную на Рис.1.7, можно описать в четыре этапа:

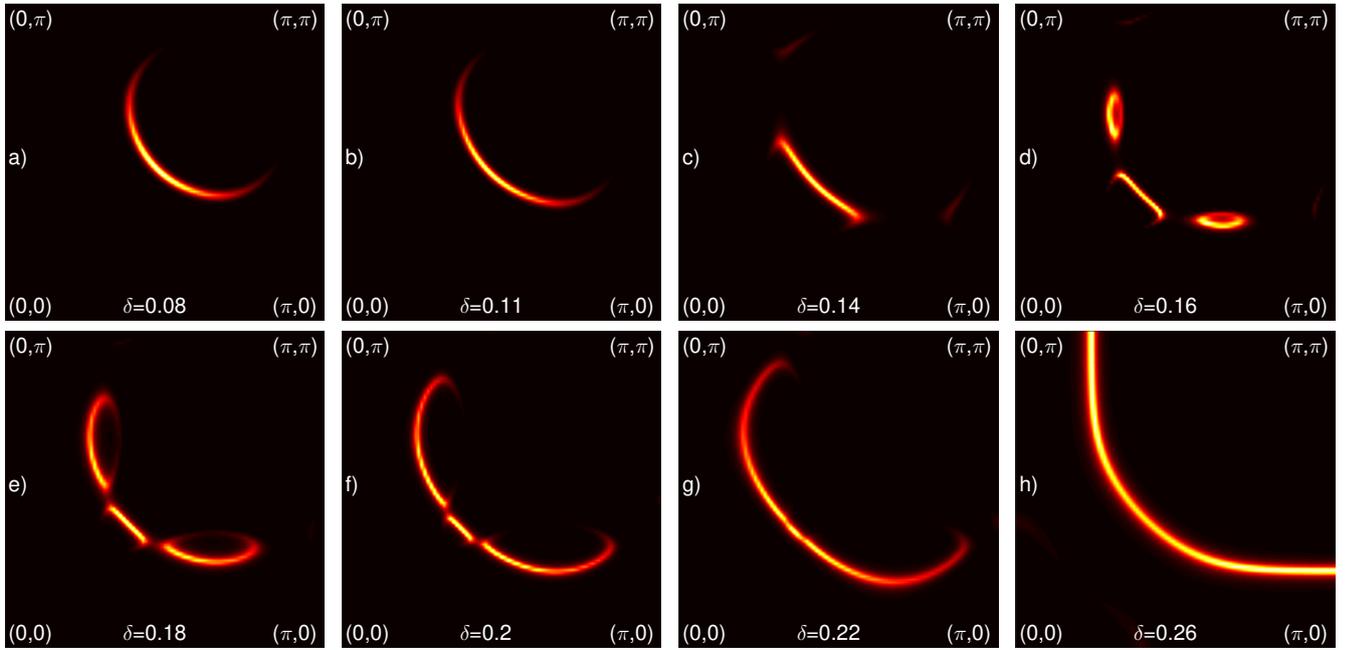


Рис. 1.7. Спектральная функция на уровне Ферми в первом квадранте зоны Бриллюэна при различных уровнях допирования δ , рассчитанная в рамках кластерной теории возмущений для кластера 3×3 . Параметры модели $J = 0.4t$, $\lambda = 10^3t$, $T = 10^{-3}t$, $t' = -0.27t$ и $t'' = 0.2t$. Уширение Лоренциана в методе кластерной теории возмущений задается величиной $\eta = 0.02$.

1) В области допирования $0.08 \leq \delta \leq 0.14$ поверхность Ферми представляет из себя арки, расположенные в нодальной области зоны Бриллюэна (Рис.1.7(a-b)). Данный тип поверхностей Ферми характерен для фазы псевдощели [16] однако природа такого явления до сих пор не ясна. Данный феномен может возникать как проявление нарушения некоторого до сих пор неизвестного упорядочения, присутствующего в слабодопированной фазе и нарушающего трансляционную симметрию. В то время как в нулевом магнитном поле данный порядок подавляется сверхпроводимостью, наличие только коротковолновых корреляций приводит к перераспределению спектрального веса на поверхности Ферми, результатом чего являются Ферми-арки, не приводящие к квантовым осцилляциям плотности электронных состояний в сильном магнитном поле.

2) Наиболее интересной является область допирования $0.14 \leq \delta \leq 0.2$, изображенная на Рис.1.7(c-f) и отображающая реконструкцию поверхности Ферми вследствие присутствия волны зарядовой плотности. Наиболее четко такая реконструкция видна на Рис.1.7(d). Поверхность Ферми представляет из себя

комбинацию из нодалного электронного карма, дополненного двумя маленькими дырочными карманами вблизи антинодалной области. В таком случае реконструкция является характерной чертой взаимодействия зарядового порядка (волны зарядовой плотности) со сверхпроводящим порядком [17]. Наиболее сильно такое поведение выражено при допировании $\delta = 0.14 - 0.16$. При меньших уровнях допирования поверхность Ферми содержит только электронный карман. При больших допированиях электронный карман уменьшается, в то время как дырочные карманы растут, постепенно переходя в фазу (3) и образуя единую дырочную арку при $\delta \approx 0.2$.

Следует отметить, что электронные и дырочные карманы в данной фазе имеют ненулевой спектральный вес только на одной из собственных сторон, в то время как существование квантовых осцилляций плотности электронных состояний подразумевает наличие замкнутых поверхностей Ферми. Одним из возможных объяснений такого является тот факт, что в нулевом магнитном поле сверхпроводящий порядок подавляет зарядовое упорядочение, имея гораздо большую корреляционную длину. Квантовые осцилляции экспериментально наблюдаются только в присутствии сильного магнитного поля, подавляющего сверхпроводящий порядок [18]. Таким образом, видимые в ARPES экспериментах арочные структуры должны замыкаться в присутствии сильного магнитного поля, образуя полноценные карманы с малой площадью.

Другое возможное объяснение сосуществования разомкнутых поверхностей Ферми и квантовых осцилляций связано с возможностью Брэгговского отражения на волнах зарядовой плотности и приведено в Главе 3.

3) В области допирования $0.2 \leq \delta \leq 0.25$ (Рис.1.7(g)) волна зарядовой плотности не реконструирует поверхность Ферми и в системе вновь реализуется псевдоцелое поведение с дырочной аркой в нодалной области без каких либо следов электронных карманов.

4) В области допирования $0.25 \leq \delta$ (Рис.1.7(h)) поверхность Ферми представляет из себя большой дырочный цилиндр с центром в точке (π, π) , характер-

ный для стандартного фермижидкостного поведения системы. Значение критического уровня допирования псевдощелевой фазы, полученное в рамках кластерной теории возмущений $\delta_c^{PG} = 0.25.$, в достаточной степени соответствует экспериментальным измерениям.

Несмотря на то, что конкретные значения критических уровней допирования сдвинуты в большую сторону относительно известных экспериментальных значений, качественное соответствие экспериментально наблюдаемой реконструкции присутствует. Переоценка значений критических концентраций носителей заряда, по всей видимости, является артефактом малого размера кластера, лежащего в основе произведенных в данной главе вычислений. На данный момент проблема малых кластеров является неразрешимой в силу того, что диагонализация больших кластеров является недоступной с точки зрения вычислительных ресурсов, и приводит к необходимости использования только некоторого количества низколежащих собственных состояний даже в случае кластера 4×4 , что приводит к неконтролируемой неточности вычислений.

1.5. Влияние эффектов конечного кластера на реконструкцию поверхности Ферми

Вычисляемые в рамках кластерной теории возмущений спектральные функции и соответствующие им поверхности Ферми базируются на собственных состояниях кластеров, линейные размеры которых являются достаточно малыми, и граничные эффекты могут влиять на результат неконтролируемым образом. В связи с этим вопрос о том, является ли такая эволюция поверхностей Ферми внутренним свойством модели, либо она обусловлена влиянием граничных эффектов, требует дополнительных исследований.

Прежде всего стоит обратить внимание на тот факт, что используемые в точной диагонализации кластеры выбираются с открытыми граничными условиями, что приводит к неоднородному распределению заряда внутри самого

кластера. Физически более корректным является случай периодических граничных условий, так как он в большей степени моделирует свойства бесконечной решетки, однако использование кластеров с подобными граничными условиями в рамках кластерной теории возмущений является некорректным само по себе. Для того, чтобы приблизиться к физически более корректному случаю периодических граничных условий, но все же оставаться в рамках кластерной теории возмущений, внутрикластерный Гамильтониан может быть модернизирован путем добавления дополнительного слагаемого

$$\delta H = \sum_i \mu_i n_i, \quad (1.15)$$

описывающего неравномерное распределение химического потенциала внутри кластера. Подбор параметров μ_i осуществляется таким образом, чтобы в основном состоянии пространственное распределение заряда было равномерным, аналогично случаю периодических граничных условий.

Поверхность Ферми, вычисленная для случая равномерного распределения заряда при допировании $\delta = 0.16$, представлена на Рис.1.8(a). Таким образом, снижение влияния эффекта открытых граничных условия не приводит к качественным изменениям, сохраняя структуру поверхности Ферми в виде электронного и двух дырочных карманов. Данный результат позволяет заключить, что предполагаемый вид поверхности Ферми, изображенный на Рис.1.8(b), является внутренним свойством модели, не определяется эффектами границы и не является артефактом метода.

Для исследования влияния граничных эффектов на результаты расчетов в рамках кластерной теории возмущений следует также рассмотреть кластеры других размеров. Следует отметить тот факт, что моделирование кластеров 2×2 не приводит к подобному поведению, однако позволяет получить типичную для псевдощели арочную поверхность Ферми[19]. Данный факт объясняется слишком маленьким размером кластера, позволяющим точно учесть сильные корреляции лишь для соседних узлов. В случае кластера 4×4 линейный размер

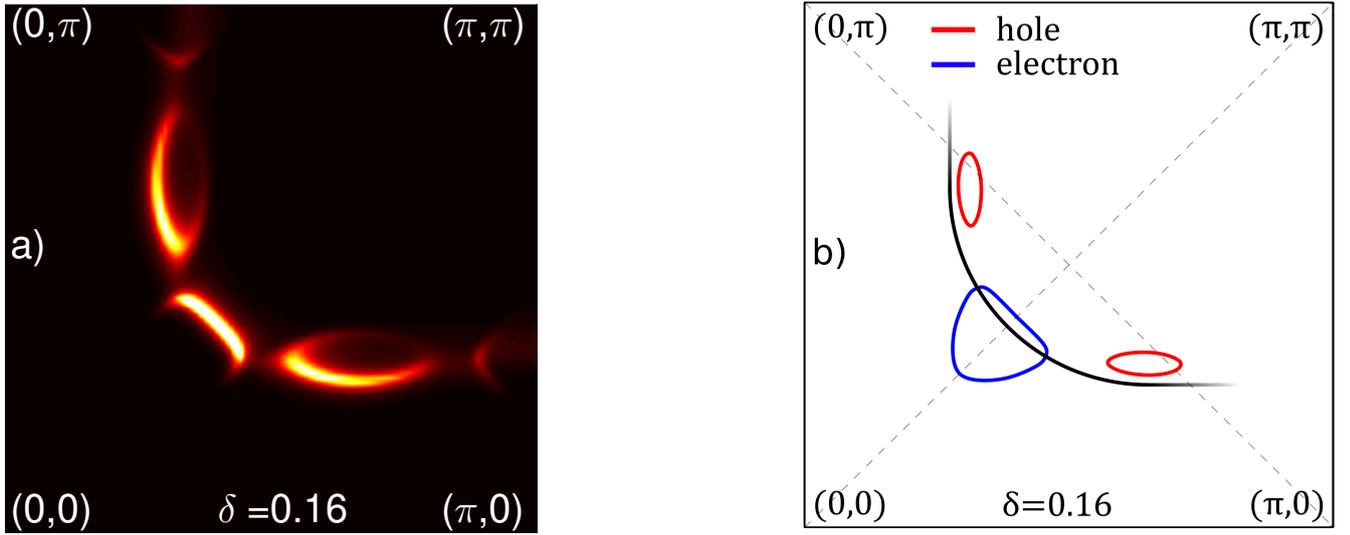


Рис. 1.8. (а): Поверхность Ферми при допировании $\delta = 0.16$ (параметры модели такие же, как и для Рис.1.7). Гамильтониан модели модифицирован за счет добавления слагаемого 1.15. (а): Схематическое изображение поверхности Ферми при $\delta = 0.16$ в присутствии дальнего порядка волны зарядовой плотности. Черная кривая соответствует Ферми арке, наблюдаемой в отсутствие волны зарядовой плотности. Красные и синяя кривая соответствуют полюсам функции Грина, связанным с дырочными и электронным карманами соответственно.

является достаточным для учета внутрикластерных корреляций в достаточной степени, однако из-за большого размера кластера прямые вычисления в рамках кластерной теории возмущений в данном случае невозможны, так как точная диагонализация и последующий расчет спектральных функций требует слишком больших вычислительных ресурсов. Данный тип кластеров рассматривался только в пределе $\lambda \rightarrow \infty$, что позволило редуцировать Гильбертово пространство до стандартной $t - J$ модели. Кроме того, в случае кластера 4×4 , в отличие от 3×3 , точная диагонализация возможно только в рамках алгоритма Ланцоша[20], позволяющего вычислить относительно небольшое число нижних энергетических уровней, вследствие чего в вычислении спектральной плотности не принимают участия высокоэнергетические состояния. В силу указанных выше обстоятельств результаты таких вычислений являются приближенными даже относительно кластерной теории возмущений и могут лишь качественно отражать структуру поверхности Ферми.

Результаты вычислений представлены на Рис.1.9. Значение критических

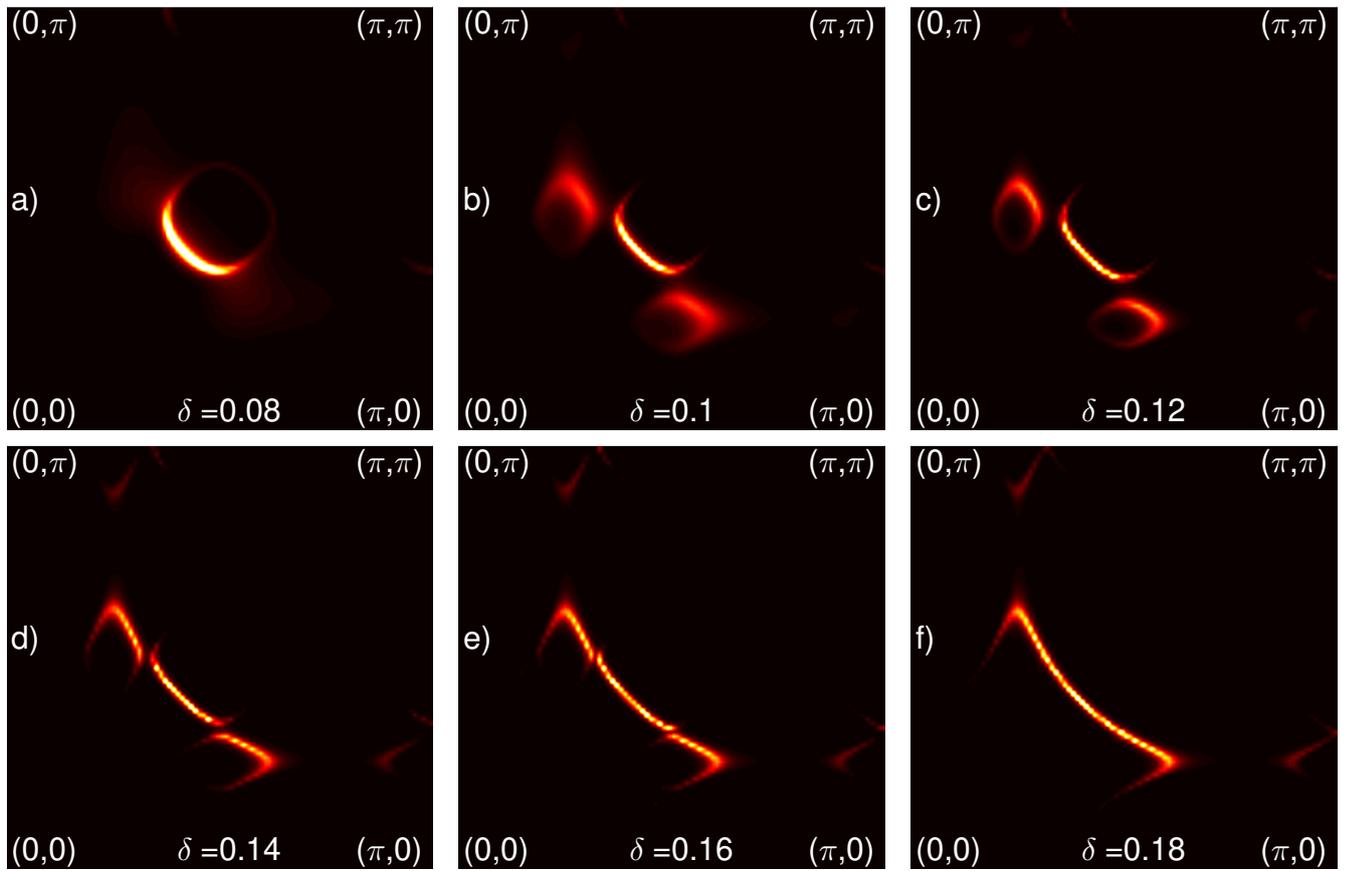


Рис. 1.9. Поверхности Ферми при различных уровнях допирования в случае кластера 4×4 . Параметры модели такие же, как и для Рис.1.7

уровней допирования, полученное в этом случае ($\delta = 0.1 - 0.16$) существенно ниже случая кластера 3×3 и больше соответствует данным экспериментальных измерений, указывающих на существование электронных карманов в диапазоне допирования $\delta = 0.08 - 0.16$. Стоит отметить, что наблюдается некоторое отличие во взаимном расположении электронных и дырочных карманов. Данный эффект может быть связан как с упомянутыми выше недостатками численного моделирования больших кластеров, так и с эффектом четного/нечетного размера кластера. Тем не менее, основным является тот факт, что сценарий эволюции поверхности Ферми остается качественно таким же, как и в случае меньшего размера кластера, что указывает на то, что подобное поведение является не артефактом численного метода, а имеет физические причины, связанные с сильными электронными корреляциями.

1.6. Сильные электронные корреляции и антиферромагнетизм в фазе волны зарядовой плотности

В рамках данной модели существует возможность установить истинный механизм реконструкции поверхности Ферми и оценить степень влияния зарядового и спинового упорядочения на поведение системы. В пределе сильных корреляций ($\lambda > 6t$) поверхность Ферми состоит из электронных и дырочных карманов, образованных вследствие нарушения трансляционной симметрии волной зарядовой плотности. При уменьшении величины корреляций ($1t < \lambda < 6t$) поверхность Ферми восстанавливает псевдощелевую структуру и является аркой. В пределе слабых корреляций ($\lambda \leq t$) $t - J$ модель редуцируется в спин-фермионную модель, что приводит к восстановлению фермижидкостного поведения и восстановлению большой замкнутой цилиндрической поверхности Ферми. Как следует из Рис.1.10 наличие антиферромагнитного обменного взаимодействия

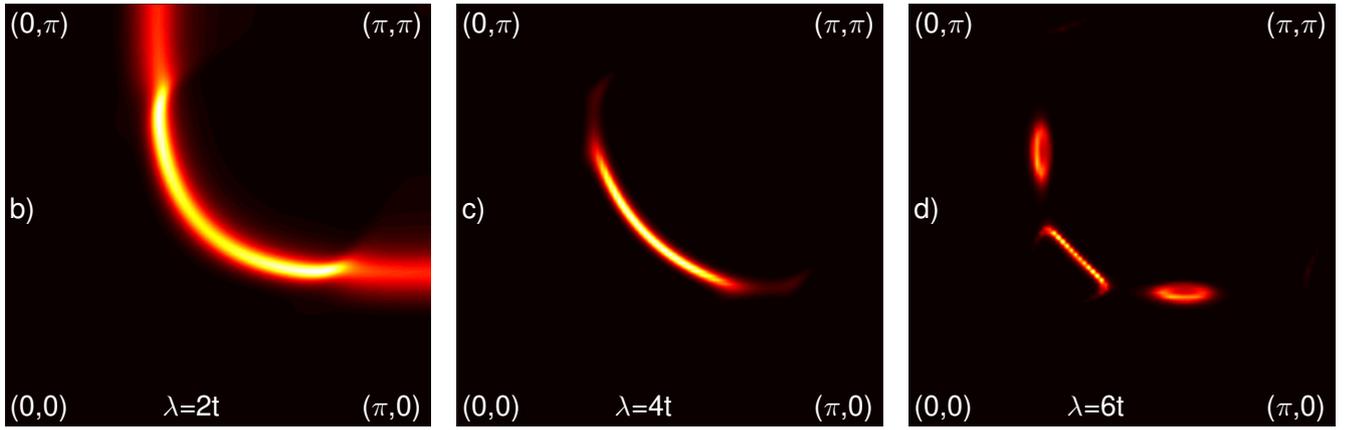


Рис. 1.10. Поверхности Ферми при фиксированном уровне допирования $\delta = 0.16$ для различных значений параметра λ . Параметры модели такие же, как и для Рис.1.7

не является достаточным условием для изменений топологии поверхности Ферми и образованию электронных карманов. В то же время отсутствие сильных корреляций в совокупности с сильным обменным взаимодействием не приводят к подобному поведению, о чем явно свидетельствуют результаты расчетов в рамках спин-фермионной модели[21]. Данный факт свидетельствует о том, что причина такого поведения скрыта именно в сильных корреляциях.

Также важным является механизм, лежащий в основе разрушение антиферромагнитного упорядочения при допировании системы. В рамках модели Кондо-Гейзенберга, представляющей решетку с сильно коррелированными электронами в виде локализованных и делокализованных квазичастиц, данный механизм является достаточно наглядным[22]. Локализованные решеточные спины становятся менее коррелированными друг с другом за счет противостояния антиферромагнитного взаимодействия, пропорционального величине $\sim J$ и Кондо экранирования ($\sim \lambda$) локализованных спинов допонами проводимости, что приводит к разрушению антиферромагнитных связей. Поскольку $1/J \gg 1/t$, динамика дырок является доминирующей и значительно более быстрой, чем спиновая динамика, и разрушенные антиферромагнитные связи восстанавливаются значительно медленнее, чем разрушаются. Как результат, при наличии достаточно сильного Кондо экранирования ($\lambda \gg t$) даже чрезвычайно малой концентрации носителей заряда ($\delta \approx 0.03 - 0.05$) достаточно для полного

разрушение (квази)дальнего антиферромагнитного порядка. Однако, в случае ослабления условия ограничения двойного заполнения антиферромагнитный порядок восстанавливается, так как Кондо взаимодействие является слабым ($\lambda < t$).

В слабодопированных купратах фаза волны зарядовой плотности максимально проявляется при допировании $\delta \approx 0.11-0.12$, при котором (квази)дальний антиферромагнитный порядок уже полностью уничтожен носителями заряда, и лишь только ближние антиферромагнитные корреляции имеют место[23]. В данном случае антиферромагнитная корреляционная длина значительно меньше длины волны зарядового упорядочения. В то же время сверхпроводящий порядок, обладающий значительно большей корреляционной длиной, подавляет как зарядовое, так и спиновое упорядочение и не дает возможности к возникновению квантовых осцилляций. В связи с этим лишь в присутствии сильного магнитного поля, критического для сверхпроводимости, зарядовое упорядочение становится основным и в ВТСП купратах наблюдаются квантовые осцилляции малой частоты. Лишь в случае достаточно сильного антиферромагнитного обменного взаимодействия, при котором спиновое упорядочение становится доминирующим, реконструкция поверхности Ферми волной зарядовой плотности не реализуется.

Для получения дополнительной информации о влиянии спинового и зарядового упорядочения в рамках кластерной теории возмущений рассчитывался антиферромагнитный спиновый структурный фактор

$$S(\pi, \pi) = \frac{4}{N} \sum_{ij} \langle S_i^z S_j^z \rangle e^{i(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \vec{K}_{\pi\pi}}, \quad (1.16)$$

где $\vec{K}_{\pi\pi} = (\pi, \pi)$. Значение структурного фактора при различных значениях J и δ изображено на Рис.1.11(а). Видно значительное уменьшение величины структурного фактора при увеличении допирования. Стоит отметить, что вычисления в рамках квантового метода Монте-Карло предсказывают значительно более быстрое падение величины спинового структурного фактора с ростом

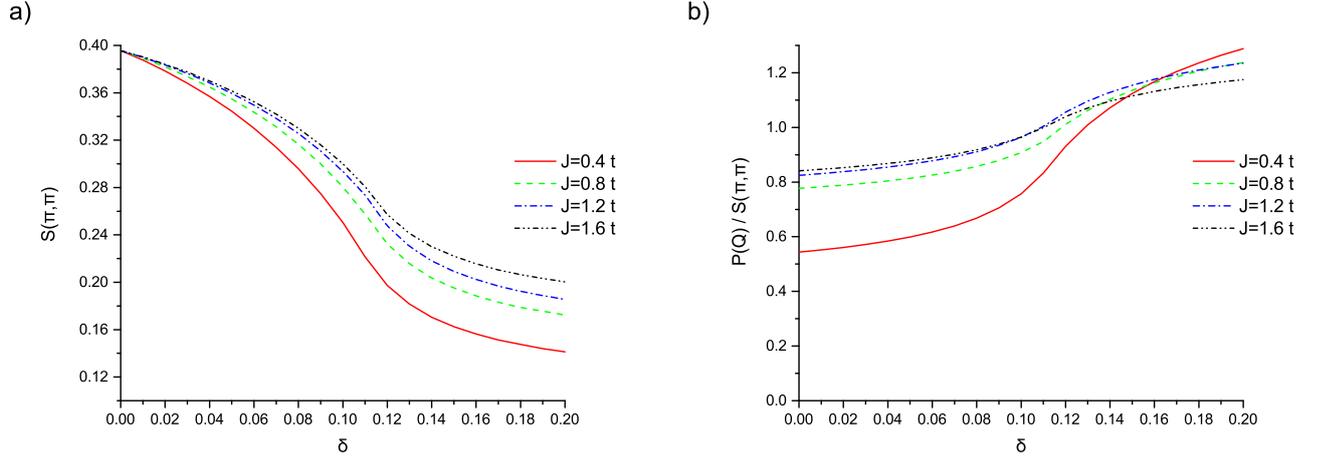


Рис. 1.11. **(а)**: Зависимость величины статического антиферромагнитного спинового структурного фактора от допирования δ при различных значениях параметра J . **(б)**: Отношение антиферромагнитного структурного фактора к структурному фактору волны зарядовой плотности.

допирования. Данное отличие объясняется тем, что решетка, используемая в методе Монте-Карло значительно больше и слабо подвержена эффектам конечного размера. В случае кластерной теории возмущений, где характерный линейный размер кластера $L \sim 3$, эффекты границы и конечного размера оказывают существенное влияние на магнитные свойства кластера. Тем не менее, даже в случае малых кластеров заметное снижение антиферромагнитного порядка, наблюдающееся при допировании $\delta \approx 0.14$.

Для оценки соотношения влияния зарядового упорядочения был вычислен структурный фактор волны зарядовой плотности

$$P(\vec{K}) = \frac{1}{N} \sum_{ij\sigma} \langle d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} \rangle e^{i(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot \vec{Q}}, \quad (1.17)$$

где \vec{Q} является модуляционным вектором волны зарядовой плотности $Q_x = 2\pi(q, 0)$ и $Q_y = 2\pi(0, q)$ при $q = \frac{1}{3}$, что соответствует экспериментальным данным о длине волны ВЗП упорядочения [4, 24, 25, 26].

Отношение $P(\vec{Q})/S(\pi, \pi)$ при различных значениях допирования δ и величины обменного взаимодействия J представлено на Рис.1.11(б). Стоит отметить, что зарядовое упорядочение начинает превосходить антиферромагнитное

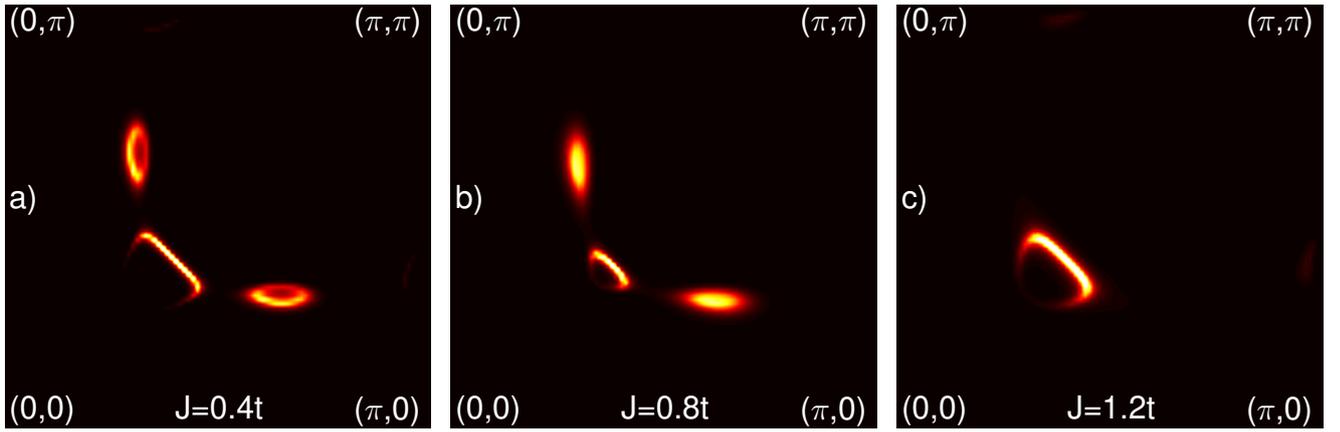


Рис. 1.12. Поверхности Ферми при фиксированном уровне допирования $\delta = 0.16$ для различных значений параметра J .

при допировании $\delta \approx 0.14$, что соответствует началу реконструкции поверхности Ферми из арочной поверхности в карманы.

При значительном увеличении величины обменного взаимодействия, как следует из Рис.1.11(a) и результатов вычислений в рамках квантового метода Монте-Карло, антиферромагнитный порядок спадает с ростом δ значительно слабее, что приводит к качественным изменениям в поверхности Ферми (Рис.1.12). Если в случае $J = 0.4t$ арочная поверхность Ферми с ростом допирования реконструируется в комбинацию электронного и двух дырочных карманов, то при существенно больших величинах $J > 1t$ дырочные карманы не возникают.

1.7. Заключение

В заключении следует отметить, что в рамках модели Кондо-Гейзенбера было показано, что в случае сильных корреляций квазидальний антиферромагнитный порядок быстро разрушается с ростом допирования и полностью пропадает при допированиях порядка $\delta \approx 0.08$, что полностью соответствует экспериментальным данным. С ослаблением величины Кондо-взаимодействия, ответственной за электронные корреляции, разрушение антиферромагнитного упорядочения происходит медленнее и приводит к восстановлению (квази)дальнего

порядка в случае $\lambda = 0$.

В отсутствие антиферромагнитного порядка, при допированиях, соответствующих псевдощелевой фазе, именно сильные корреляции приводят как к возникновению псевдощелевых арочных поверхностей Ферми, так и реконструкции данных поверхностей в электронные карманы, допускающие существование квантовых осцилляций плотности электронных состояний в сильных магнитных полях, в фазе волны зарядовой плотности. При ослаблении величины Кондо-взаимодействия $\lambda < 6t$, данная реконструкция не наблюдается, что указывает на то, что сильные корреляции играют ключевую роль в описании поведения фазы волны зарядовой плотности. При дальнейшем ослаблении величины корреляций пропадают следы псевдощелевой фазы и поверхность Ферми восстанавливает фермижидкостную форму.

Полученные в расчетах поверхности Ферми позволяют оценить диапазоны существования псевдощелевой фазы $\delta < 0.25$ и фазы волны зарядовой плотности $0.14 < \delta < 0.2$, что находится в хорошем согласии с экспериментальными данными. Кроме того, анализ влияния граничных условий указывает на то, что такое поведение является в большей степени свойством модели с незначительным влиянием артефактов численных вычислений. Данный результат позволяет сделать вывод о том, что именно сильные корреляции ответственны за нетривиальную физику слабодопированной фазы ВТСП купратов.

Глава 2

Фаза Нагаока при конечном допировании

2.1. Введение

Сильные электронные корреляции в полной мере проявляют себя в так называемом Нагаоковском пределе ($U = \infty$) модели Хаббарда[27]. В этом случае бесконечное кулоновское отталкивание приводит к тому, что электроны с разными проекциями спина не могут занимать один и тот же узел, и Гамильтониан модели Хаббарда редуцируется к следующей форме:

$$H_{U=\infty} = - \sum_{ij,\sigma} t_{ij} \tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma}, \quad \tilde{c}_{i\sigma}^\dagger = c_{i\sigma}^\dagger (1 - n_{i-\sigma}), \quad (2.1)$$

где t_{ij} является матрицей интегралов перескока и имеет элементы $t > 0$ для ближайших соседей и нулевые элементы в остальных случаях. Несмотря на простую форму записи, данный Гамильтониан не может быть диагонализирован точно в силу того, что операторы $\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger$ являются спроектированными операторами и не подчиняются фермионному антикоммутиационному соотношению $\{\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger, \tilde{c}_{j\sigma}\} \neq \delta_{ij}$, что является прямым проявлением сильных корреляций.

Несмотря на простую форму Гамильтониана, физика, скрытая в этой модели, является не тривиальной и обусловлена исключительно сильными электронными корреляциями. Действительно, в пределе бесконечного кулоновского отталкивания на одном узле ($U \rightarrow \infty$ в модели Хаббарда) в случае половинного заполнения модель редуцируется в модель Гейзенберга с величиной обменного взаимодействия $J = 4t^2/U$. Таким образом, при половинном заполнении основное состояние является антиферромагнитным и описывается двумерной моделью Гейзенберга. В случае добавления в систему одной дырки ее движение приводит к разрушению антиферромагнитного порядка и, более того, к ферромагнитному основному состоянию. Этот результат известен как *теорема Нагаока*. Данный феномен является интересным примером квантовой системы,

где ферромагнетизм возникает исключительно как кинетический эффект, связанный с движением сильно коррелированных электронов.

Несмотря на большое количество усилий, направленных на исследования этой модели, физика, скрытая в ней, до сих пор не совсем ясна. Одним из ключевых вопросов остается термодинамическая устойчивость фазы Нагаока. Иными словами, является ли ферромагнитное состояние основным при конечном допировании в термодинамическом пределе?

В настоящее время существуют аргументы как за [28, 29, 30, 31, 32, 33], так и против [34, 35, 36, 37, 38] термодинамической устойчивости фазы Нагаока, в том числе было проведено и тщательное сравнение результатов разнообразных подходов [39]). Однако основной проблемой в получении однозначного описания физики при бесконечном кулоновском отталкивании является учет локального констрейнта отсутствия двойного заполнения (ОДЗ), правильный учет которого является нетривиальной задачей.

Аналитические методы исследования фазы Нагаока основаны, в основном, на приближении среднего поля, в котором учет ОДЗ происходит не локально, а глобально. В частности, стандартный *slave fermion* подход учитывает ОДЗ только в виде усредненного слагаемого, что приводит к результату, указывающему на стабильность ферромагнитной фазы вплоть до нефизически больших значений допирования, что указывает на неприменимость данного подхода к описанию Нагаоковского ферромагнетизма [40]. Стоит так же отметить, что в случае бесконечного числа измерений, где приближение среднего поля является точным, насыщенный ферромагнетизм никогда не является устойчивым к допированию [41].

Использующиеся вариационные методы [28, 42, 43, 44, 45, 32] показывают, что выбор более реалистичной пробной волновой функции приводит к значительно меньшим значениям критического допирования. Например, последние расчеты вариационным методом Монте-Карло указывают на верхнюю границу критического уровня допирования $\delta_c = 0.2$. [46] Таким образом, можно по-

лагать что корректный учет ОДЗ является ключевым в корректном описании Нагаоковского ферромагнетизма и позволяет сдвинуть критическое значение в сторону существенно меньших значений.

В данной главе мы используем стандартную модель Хаббарда с бесконечным кулоновским отталкиванием U в спин-допнном представлении, что позволяет явно учесть некоторые эффекты, вызванные сильными электронными корреляциями при слабом допировании. Основным преимуществом данного подхода является возможность значительно увеличить сходимость метода квантового Монте-Карло по сравнению с каноническим представлением.

В рамках такого подхода констрейнт отсутствия двойного заполнения имеет вид Кондо взаимодействия [47, 48]:

$$\vec{S}_i \cdot \vec{s}_i + \frac{3}{4}(\tilde{d}_{i\uparrow}^\dagger \tilde{d}_{i\uparrow} + \tilde{d}_{i\downarrow}^\dagger \tilde{d}_{i\downarrow}) = 0, \quad (2.2)$$

где $\vec{s}_i = \sum_{\alpha,\beta} \tilde{d}_{i\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \tilde{d}_{i\beta}$ является оператором спина допона.

Одноузельный оператор

$$\hat{\mathcal{P}} = 1 - \vec{S}_i \cdot \vec{s}_i + \frac{3}{4}(\tilde{d}_{i\uparrow}^\dagger \tilde{d}_{i\uparrow} + \tilde{d}_{i\downarrow}^\dagger \tilde{d}_{i\downarrow}), \quad \hat{\mathcal{P}}^2 = \hat{\mathcal{P}}$$

является проекционным оператором, равным единице для физических состояний и нулю в остальных случаях. В терминах таких операторов оператор рождения электрона может быть выражен через допнные операторы:

$$\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger = \sqrt{2} \text{sign}(\sigma) \hat{\mathcal{P}}_i \tilde{d}_{i-\sigma} \hat{\mathcal{P}}_i, \quad (2.3)$$

где $\text{sign}(\sigma = \uparrow, \downarrow) = \pm$. В таком случае, Гамильтониан принимает вид:

$$H_{U=\infty} = \hat{\mathcal{P}} \sum_{ij,\sigma} 2t_{ij} \tilde{d}_{i\sigma}^\dagger \tilde{d}_{j\sigma} \hat{\mathcal{P}}, \quad \hat{\mathcal{P}} = \prod_i \hat{\mathcal{P}}_i. \quad (2.4)$$

Подставив явный вид проекционного оператора, Гамильтониан может быть представлен в виде Кондо модели с большим параметром взаимодействия $\lambda \gg t$ [49, 50]:

$$H_{U=\infty} = \sum_{ij\sigma} 2t_{ij} d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \lambda \sum_i (\vec{S}_i \cdot \vec{s}_i + \frac{3}{4} n_i^d), \quad (2.5)$$

где спроектированные фермионные операторы $\tilde{d}_{i\sigma}^\dagger$ могут быть заменены на стандартные фермиевские операторы $d_{i\sigma}^\dagger$ без потери общности в силу того, что условие отсутствия двойного заполнения реализуется в виде Кондо слагаемого. Таким образом состояния с двойным заполнением отделены от физических состояний щелью с величиной энергии $\sim \lambda$. В пределе $\lambda \rightarrow +\infty$, либо в случае, когда λ значительно больше всех остальных энергетических постоянных модели, такие состояния автоматически исключаются из Гильбертова пространства. При значении $\lambda = +\infty$ предложенная модель (2.5) является эквивалентной модели Хаббарда с бесконечным кулоновским отталкиванием ($U = \infty$)[51], в то время как вдали от этой точки Гамильтониан соответствует модели Кондо с величиной взаимодействия λ .

2.2. Расчеты квантовым методом Монте-Карло

В качестве одного из методов расчета используется квантовый алгоритм Монте-Карло, позволяющий рассчитать значения спиновых корреляционных функций при конечной, но достаточно низкой, температуре. В данном случае корреляционные функции могут быть оценены в асимптотическом режиме $r \gg a$. Метод позволяет получить значение спиновых корреляционных функций для достаточно больших решеток, таким образом, чтобы эффект конечного размера решетки был пренебрежимо мал.

Следует отметить тот факт, что физически фазе Нагаока соответствует случай достаточно больших значений λ . Гамильтониан данной модели выбирается в вид: $H_{U=\infty} = H_0 + H_{int}$, где одноузельная часть имеет вид

$$H_0 = \lambda \sum_i (\vec{S}_i \cdot \vec{s}_i + \frac{3}{4} n_i^d),$$

а междуузельным перескокам соответствует

$$H_{int} = 2t \sum_{ij\sigma} \tilde{d}_{i\sigma}^\dagger \tilde{d}_{j\sigma}, \quad t/\lambda \ll 1.$$

Особенностью квантового метода Монте-Карло является его зависимость от выбранного базиса. Использование модели Кондо-Гейзенберга позволяет в значительной степени улучшить сходимость расчетов благодаря двум обстоятельствам, а именно: 1) возможности диагонализировать одноузельное слагаемое H_0 и перейти к базису, в котором λ будет входить в Гамильтониан только в виде диагонального слагаемого. В процессе моделирования параметр λ может быть подобран достаточно большим, но конечным, таким образом конфигурации, включающие в себя λ -слагаемое могут возникать в процессе расчета, однако не учитываются в процессе вычисления корреляционных функций. Такой подход позволяет значительно улучшить эргодичность алгоритма и не противоречит соотношению детального баланса. 2) ослаблению проблемы знака при малом допировании, так как средний знак напрямую связан с количеством антикоммутирующих частиц. В частности, в случае одного допона проблема знака в расчетах исчезает. Данный факт и лежит в основе теоремы Нагаока, показывая что в случае одной дырки система ведет себя так же, как и бозонная система, где ферромагнетизм является естественным следствием статистики частиц.

Спиновые корреляционные функции для электронных операторов, рассчитанные в допонном представлении, имеют вид:

$$g(r) = \frac{4}{\Delta(r)} \sum_{ij} \langle (S_i^z + s_i^z)(S_j^z + s_j^z) \rangle \bar{\delta}(r - |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|), \quad (2.6)$$

где \mathbf{R}_i является радиус-вектором узла i , а $\Delta(r) = \sum_{ij} \bar{\delta}(r - |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|)$ и

$$\bar{\delta}(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } |x| \leq 0.5a, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (2.7)$$

где a является постоянной решетки и $\langle \dots \rangle$ означает среднее по всем подходящим конфигурациям, встречающимся в процессе работы алгоритма Монте-Карло. Корреляционные функции нормированы на величину $g(r = 0; \delta = 0) = 1$. Все численные расчеты проводились для решетки 20×20 в периодическими граничными условиями.

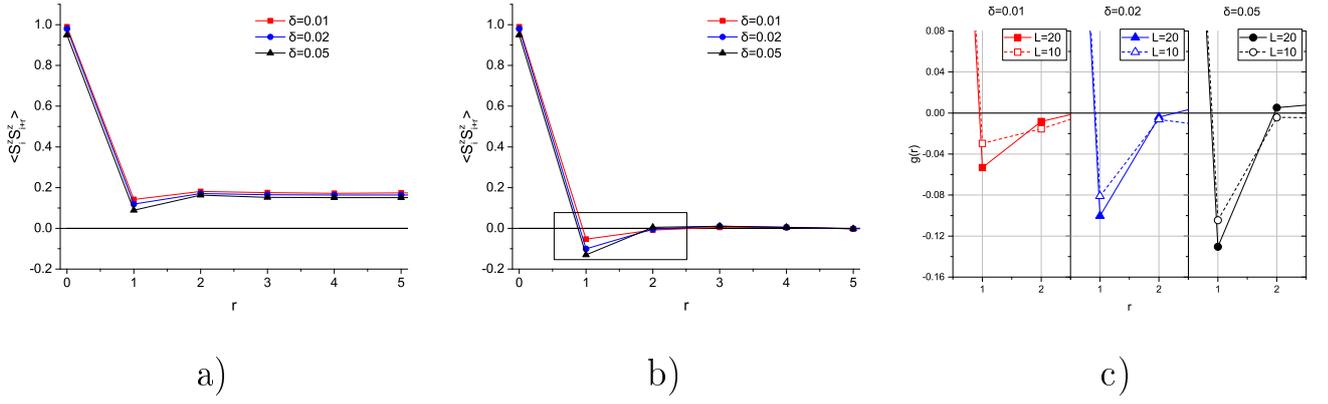


Рис. 2.1. а-б) Корреляционные функции для решетки 10×10 при различных уровнях допирования δ в случае hard-core бозонов (а) и фермионов (б). в) Выделенный фрагмент графика (б) отдельно для разных уровней допирования и при различных размерах решетки. Температура $T = 0.1t$.

На Рис.2.1(а) изображены спиновые корреляторы для случая hard-core бозонов (а) и для случая фермионов (б-с). В случае бозонов ферромагнитный порядок наблюдается в полном соответствии с результатом точных аналитических расчетов[52]. Ненулевая температура ожидаемо приводит к тому, что значение корреляционной функции при $r > 1$ отличается от единицы, однако оно все же остается не нулевым. Действительно, в соответствии с теоремой Мермина-Вагнера в $2D$ системе при конечной температуре не может присутствовать дальний порядок, однако из результатов расчета явно следует наличие квазидальнего упорядочения с корреляционной длиной $\xi > L$. Данный факт указывает на то, что в пределе $T = 0$, в соответствии с масштабированием корреляционной длины $\xi \sim 1/T$, при $T \ll t$ в системе должен присутствовать дальний ферромагнитный порядок.

На Рис.2.1(б-с) изображены спиновые корреляционные функции в случае фермионов. В отличие от аналогичных корреляторов для hard-core бозонов, в данном случае не присутствует никаких следов ферромагнитного упорядочения при конечном допировании. В частности корреляционные функции указывают на отсутствие даже ближнего ферромагнитного порядка, и демонстрируют тенденцию к слабому антиферромагнитному упорядочению при конечной

температуре[53]. Поведение системы при конечной температуре позволяет получить некоторые данные об основном состоянии. В частности, в том случае, если бы при $T = 0$ и $\delta = \delta_c$ имелся квантовый фазовый переход в ферромагнитное состояние, то при температурах $T \ll t$ и $\delta < \delta_c$ в системе присутствовал бы квазидальний порядок с корреляционной длиной $\xi \sim T^{1/z}$, где $z \geq 1$ является критическим индексом.

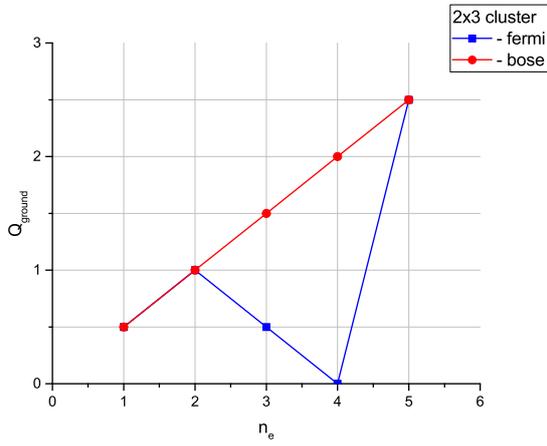
2.3. Точная диагонализация малых кластеров

Одним из способов анализа поведения системы в фазе Нагаока является вычисление основного состояния системы как функции допирования и суммарной проекции спина для малых кластеров с помощью точной диагонализации. При таком подходе размер используемых кластеров достаточно сильно ограничен (в нашей работе максимальный размер кластера – 4×4 узла), однако получаемый результат является точным и не подвержен ошибке аппроксимации.

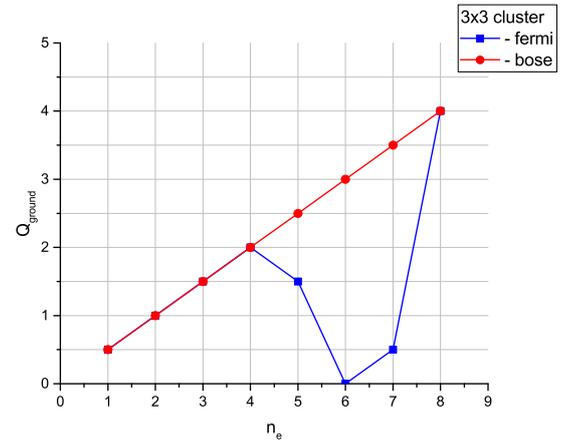
Аналогично вычислениям, произведенным с помощью квантового метода Монте-Карло, в данном случае рассматривается два случая: фермионов и hard-core бозонов.

Результаты вычисления спина основного состояния для различных значений малых кластеров представлены на Рис.2.2. В первую очередь рассмотрим тривиальный случай hard-core бозонов. Результаты точной диагонализации показывают, что значение спина основного состояния является максимально возможным при любом допировании, следовательно основное состояние всегда является насыщенным ферромагнетиком, что соответствует результатам[52], указывающими на стабильность ферромагнетизма[53].

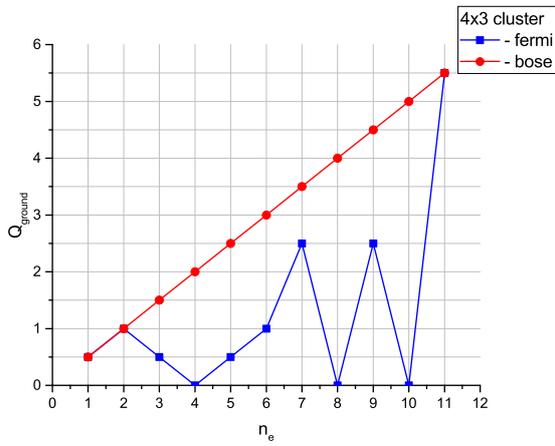
В случае фермионов следует отметить соответствие теореме Нагаока, утверждающей, что основное состояние в случае одной дырки является ферромагнитным. В случае двух дырок основное состояние является не только не ферро-



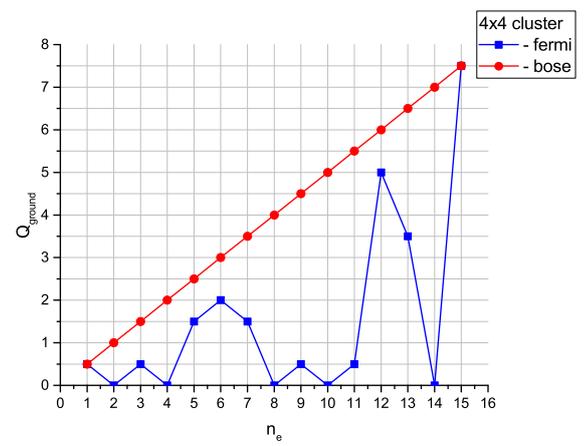
a)



b)



c)



d)

Рис. 2.2. Значение спина основного состояния при различном электронном заполнении $n_e = N - n_h$ и для разных размеров кластеров (с учетом периодических граничных условий).

магнитным, но так же имеет наименьшее из возможных значений спина. При дальнейшем допировании основное состояние так же не демонстрирует какой-либо тенденции к насыщенному ферромагнетизму, что полностью соответствует результатам, полученным с помощью других методов[54].

Интересным вопросом так же является характер возможного квантового фазового перехода, связанного с возникновением ферромагнетизма. Предположим, что существует термодинамически стабильная Нагаоковская фаза при конечном допировании в диапазоне $0 < \delta \leq \delta_{cr}$. Является ли разрушение такой фазы в термодинамическом пределе *непрерывным*, сопровождающимся последовательным уменьшением спина основного состояния $\Delta S = 1$ с ростом уровня допирования, или же такой переход является моментальным и сопровождается резким изменением спина основного состояния $\Delta S \gg 1$ при критическом допировании δ_{cr} ? Результаты точной диагонализации малых кластеров, изображенные на Рис.2.2, свидетельствуют о резком разрушении Нагаоковского ферромагнетизма, так как спин основного состояния меняется с максимального в случае одной дырки к минимальному в случае двух, но в то же время это не является прямым доказательством осуществления такого же сценария в термодинамическом пределе.

Кроме того, точная диагонализация малых кластеров позволяет рассчитать спиновые корреляционные функции для соседних узлов $\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle$. На Рис.2.3 отображены значения корреляционных функций для кластеров, аналогичных изображенным на Рис.2.2. Как и следовало ожидать, в случае hard-core бозонов корреляции соответствуют полностью ферромагнитному основному состоянию и значение пропорционально n_e^2 .

В случае фермионов, однако, корреляции не демонстрируют никаких признаков ферромагнитного упорядочения за исключением случая одной дырки. При малом допировании существует ближнее антиферромагнитное упорядочение, описываемое в рамках Нагаоковских поляронов. Однако при дальнейшем увеличении уровня допирования корреляционные функции соответствуют ско-

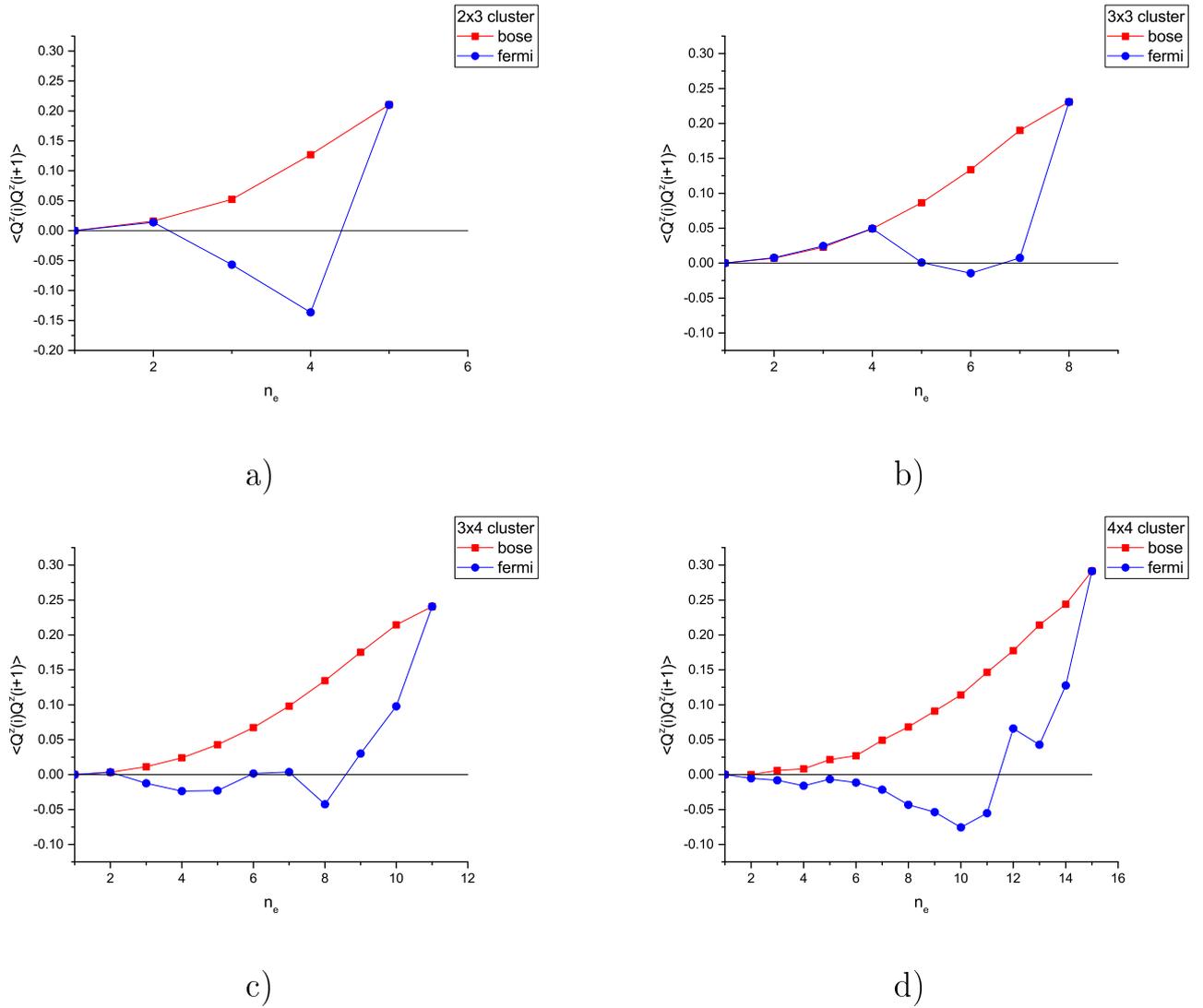


Рис. 2.3. Спиновые корреляционные функции $\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle$, рассчитанные для соседних узлов при различном электронном заполнении $n_e = N - n_h$ и различных размерах кластеров (с учетом периодических граничных условий).

рее ближайшему антиферромагнитному упорядочению, что соответствует приведенным ранее расчетам с помощью квантового метода Монте-Карло.

2.4. Существование насыщенного ферромагнетизма в случае двух дырок при различных граничных условиях

Дальнейший интерес представляет поведение системы при больших размерах решетки в случае нулевой температуры и допирования, отличного от единицы. Одним из наиболее важных результатов, достигнутых в исследовании фазы Нагаока, является вычисление спина основного состояния с помощью ре-нормгруппы матрицы плотности (DMRG)[54], указывающий на верхнюю границу критического уровня допирования $\delta_c = 0.2$. Однако, недостатками данного подхода является квазиодномерность метода, так как решетка ограничена в линейных размерах в одном из направлений, что не позволяет получать в полной мере достоверные результаты в случае $2D$ систем. Кроме того, метод позволяет учитывать только открытые граничные условия. Использование точной диагонализации в общем виде в таком случае является невозможным в силу того, что размерность Гильбертова пространства растет экспоненциальным образом с ростом числа узлов $\dim(H) = 3^N$, что приводит к необходимости диагонализации матриц размера $3^N \times 3^N$, где N является числом узлов решетки. На данный момент вычислительные мощности ограничивают максимальный размер решетки до пределов $N \sim 30$, что является недостаточным для получения данных, не подверженных эффектам конечного размера кластера.

Однако, для рассмотрения вопроса о возможности существования насыщенного ферромагнетизма диагонализация всего Гамильтониана является излишней. Следует отметить важный факт, что матрица Гамильтониана является блочно-диагональной, и каждому блоку соответствует свое значение сум-

Таблица 2.1. Размерность Гильбертова пространства при различных значения N_h и S_z

	$N_h = 1$	$N_h = 2$
$S_z = S_{max}$	N	$N \cdot (N - 1)/2$
$S_z = S_{max} - 1$	$N \cdot (N - 1)$	$N \cdot (N - 1) \cdot (N - 2)/2$

марного числа дырок N_h и суммарное значение проекции спина S_z . Таким образом, для каждого из возможных значений числа электронов и намагниченности Гамильтониан может быть диагонализирован отдельно. В данном случае нас интересует случай одной и двух дырок. Значения суммарной проекции спина будут ограничены максимальным значением (насыщенный ферромагнетизм) $S_z = S_{max} = N_h/2$ и случаем с одним перевернутым спином $S_z = S_{max} - 1 = N_h/2 - 1$. Размеры диагонализуемых матриц, в таком случае, степенным образом зависят от числа узлов и указаны в таблице (2.1).

Точная диагонализация Гамильтонианов таких размеров является возможной даже для достаточно больших решеток, в данной работе вплоть до 12×12 . Данный подход не позволяет получить значение спина основного состояния, но позволяет сделать выводы о разнице в энергиях между полностью поляризованным состоянием и состоянием с одним перевернутым спином. На Рис.2.4 представлены результаты точной диагонализации больших кластеров для различных линейных размеров N_x и N_y и различных граничных условий. При таких расчетах в зависимости от размеров решетки можно четко выделить две различающиеся фазы:

1) FP (fully polarized), что соответствующую случаю возможного насыщенного ферромагнетизма. Данная фаза соответствует случаю $E(S = S_{max}) < E(S = S_{max} - 1)$, то есть энергия состояния с максимальной суммарной проекцией спина меньше чем энергия, соответствующая случаю одного перевернутого спина. В данном случае ферромагнетизм основного состояния является

возможным, но не обязательным. Так как мы используем лишь узкий сектор Гильбертова пространства, возможность существования более низколежащего по энергии состояния при значениях спина $S = S_{max} - x$ не исключена, и мы не можем сделать никакого четкого вывода о значении спина основного состояния, но ключевым является тот факт, что ферромагнетизм в данном случае принципиально возможен.

2) SF (spin flipped), что соответствует случаю невозможности насыщенного ферромагнетизма. Данная фаза соответствует случаю $E(S = S_{max}) > E(S = S_{max} - 1)$, указывая на то, что как минимум спиновая конфигурация с одним перевернутым спином имеет более низкое значение собственной энергии. В данном случае мы так же не можем сделать никаких заключений о численном значении спина основного состояния, кроме того, что это значение точно не является максимальным $S \neq S_{max}$, так как имеется более низколежащее собственное состояние, где суммарная проекция спина не является максимальной. Следовательно насыщенный ферромагнетизм в данном случае невозможен.

Перейдем к рассмотрению фаз при различных граничных условиях.

На Рис.2.4(а) изображен случай открытых граничных условий, при которых у решетки отсутствует периодичность. В данном случае зависимость от размера решетки является нетривиальной, указывая на сильную зависимость результата от линейных размеров кластера. При малых размерах решетки (вплоть до 4×4) основное состояние никогда не является насыщенным ферромагнетиком, что полностью соответствует приведенным в предыдущей главе расчетам. Кроме того, результат указывает на то, что в случае квадратной решетки насыщенный ферромагнетизм так же не является возможным при любых размерах кластера. С другой стороны, нарушение C_4 симметрии при достаточно больших линейных размерах приводит к изменению спина основного состояния и возможности полной поляризации. Данный результат полностью объясняет результаты DMRG вычислений, в которых для моделирования двумерной системы использовалась решетка вида $2 \times N$, $4 \times N$ и $6 \times N$, где линейный размер

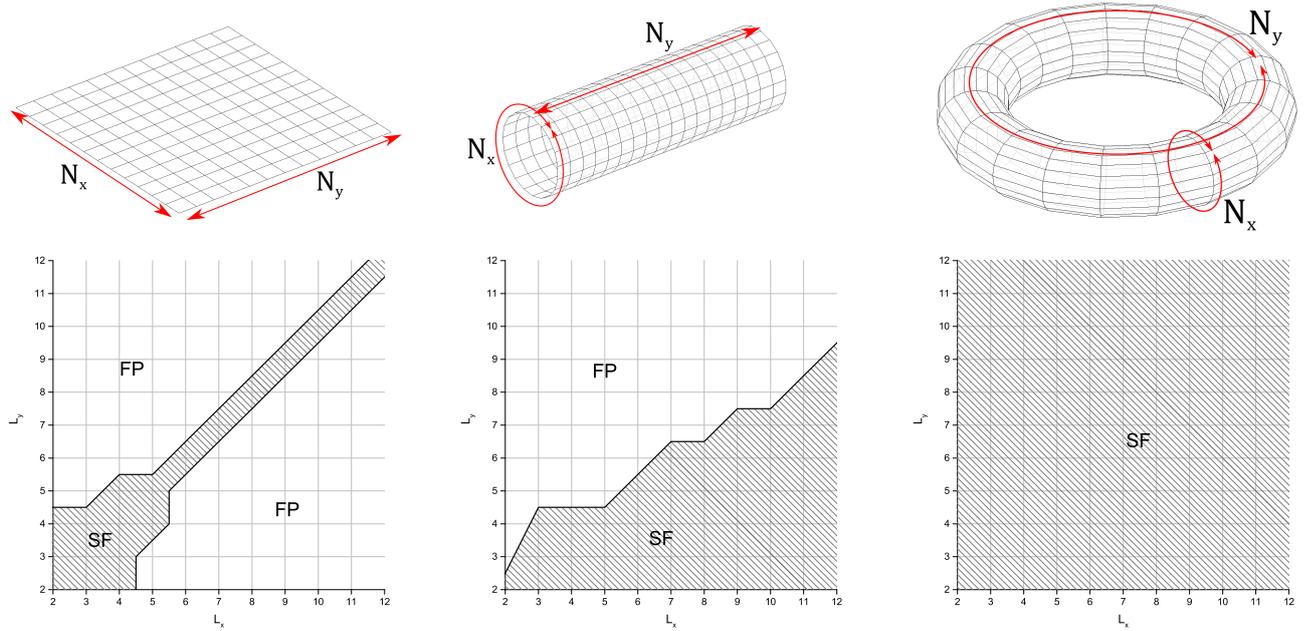


Рис. 2.4. Разница в энергиях между полностью поляризованным состоянием FP ($S = S_{max}$ и состоянием с одним перевернутым спином SF ($S = S_{max} - 1$)) в случае двух дырок для различных размеров решетки $N = N_x \times N_y$. Изображенные на нижней части рисунка фазы SF соответствуют случаю $E(S_{max} - 1) < E(S_{max})$, при котором насыщенный ферромагнетизм не реализуется, и FP соответствует случаю возможного насыщенного ферромагнетизма $E(S_{max} - 1) > E(S_{max})$. На верхней части рисунка изображены граничные условия, соответствующие (a): открытым граничным условиям, (b): смешанным граничным условиям с периодичностью вдоль оси x , (c): полностью периодическим граничным условиям.

выбирался достаточно большим $N \sim 50$. Таким образом результат DMRG расчетов, указывающих на критический уровень допирования $\delta_c = 0.2$ не противоречит нашим вычислениям, однако не в полной мере демонстрирует поведение истинно двумерной решетки. Действительно, в случае двух дырок и квадратной решетки 14×14 , являющейся максимальной в наших расчетах, следует, что уже при допировании $\delta = 2/(12 \cdot 12) \approx 0.0139$ насыщенный ферромагнетизм основного состояния невозможен. В то же время, он является возможным в случае прямоугольной решетки 11×12 , что соответствует допированию $\delta = 2/(11 \cdot 12) \approx 0.0152$. Более того, ферромагнетизм является допустимым и при значительно больших уровнях допирования, максимальным из которых является случай решетки 2×5 , где $\delta = 2/(2 \cdot 5)$, что совпадает с рассчитанным с помощью DMRG методом значением $\delta_c = 0.2$.

На Рис.2.4(b) изображен случай смешанных граничных условий, при которых периодичность решетки присутствует только в направлении x -оси, в то время как по y -оси остаются открытые граничные условия. В данном случае зависимость от размеров является не тривиальной, но вполне ожидаемой. Действительно, если периодичность решетки соблюдается вдоль значительно большей стороны, то насыщенный ферромагнетизм невозможен. В противном случае ферромагнитное основное состояние является допустимым.

На Рис.2.4(c) изображены результаты в случае периодических граничных условий, демонстрируя тривиальность зависимости фаз от размера решетки. В данном случае, при любых линейных размерах кластера, основное состояние не может являться насыщенным ферромагнетиком, что полностью соответствует результатам приведенных ранее расчетов диагонализации малых кластеров и квантового метода Монте-Карло.

На Рис.2.5 представлены значения разницы в энергиях собственных состояний с различной поляризацией, полученные для кластеров $N \times N$ с периодическими граничными условиями. Верхняя кривая соответствует разнице между полностью поляризованным основным состоянием и состоянием с одним

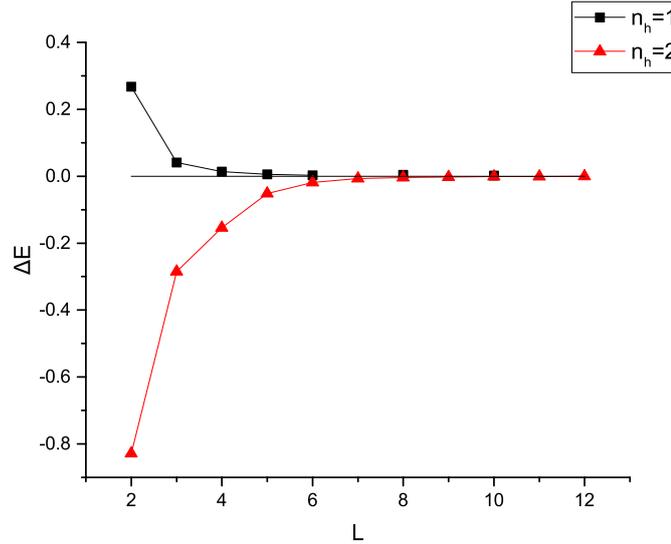


Рис. 2.5. Разница между энергиями полностью поляризованного состояния и состояния с одним перевернутым спином $\Delta E = E(S_{max} - 1) - E(S_{max})$ в случае одной дырки (верхняя кривая) и двух дырок (нижняя кривая) на квадратной решетке $L \times L$ с периодическими граничными условиями.

перевернутым спином для одной дырки $\Delta E = E(Q_{max} - 1) - E(Q_{max})$. При любом значении размера кластера и любых граничных условиях данная величина будет являться положительной, что означает присутствие насыщенного ферромагнетизма и полностью соответствует теореме Нагаока. Нижняя кривая соответствует случаю двух дырок и указывает на невозможность насыщенного ферромагнетизма. В данном случае нас интересует асимптотика ΔE , которая является величиной порядка $\mathcal{O}(1/N)$.

Данные результаты показывают, что для расчетов свойств основного состояния Нагаоковской фазы необходимо так же учитывать конкретный тип граничных условий и размер решетки, который, в некоторых случаях, оказывает даже более существенное влияние на поведение системы, чем уровень допирования. Такое необычное поведение системы объясняется тем, что разница между энергиями полностью насыщенного ферромагнитного состояния и состояний с перевернутым спином является величиной порядка $\mathcal{O}(1/N)$ [55, 14]. В то же время влияние граничных условий является величиной того же порядка, что и

обеспечивает явную зависимость от геометрии решетки. Если в случае периодических граничных условий, представляющих тривиальный характер зависимости от линейных размеров, вопрос о термодинамическом пределе является достаточно простым, то в случае открытых и смешанных граничных условий данный предел не является очевидным. В частности, такое поведение может означать отсутствие термодинамического предела как такового в силу некоммутативности предельных переходов по линейным размерам кластеров. Однако следует отметить, что изначальная теорема Нагаока и вопрос о Нагаоковской фазе сформулирован для решетки с периодическими граничными условиями, и в данном случае приведенные в данной главе результаты указывают на нестабильность Нагаоковской фазы при конечном допировании.

2.5. Заключение

В заключении следует отметить, что отсутствие следов ферромагнитного упорядочения в корреляционных функциях, рассчитанных с помощью метода квантового Монте-Карло и точной диагонализации малых кластеров в случае периодических граничных условий указывает на термодинамическую нестабильность фазы Нагаока. Результаты точной диагонализации больших решеток и квантового Монте-Карло демонстрируют, что значение критической концентрации $\delta_c \leq 0.01$ существенно ниже, чем предполагалось ранее. Данные результаты подтверждают предположение о том, что критическая концентрация в действительности равна нулю. В случае открытых и смешанных граничных условий стабильность Нагаоковского ферромагнетизма в сильной степени зависит от конкретного типа граничных условий и размеров решетки, что не дает возможности сделать выводы о свойствах модели в термодинамическом пределе и даже о его существовании. Однако, само наличие такой зависимости указывает на нетривиальность физических свойств системы, скрытых за сильными электронными корреляциями.

Глава 3

Реконструкция поверхности Ферми в фазе волны зарядовой плотности

3.1. Введение

Открытие квантовых осцилляций плотности электронных состояния в слабодопированном $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ (YBCO) в сильном магнитном поле [3, 56, 57] выявило ряд особенностей поведения электронов в данном классе материалов, в частности реконструкцию поверхности Ферми в маленькие карманы. Дальнейшие исследования установили, что площадь, ограниченная поверхностью Ферми, в данном случае пропорциональна уровню допирования δ вместо пропорциональности величине $1 + \delta$, предсказанной теорией Ферми жидкости. Дальнейшие исследования так же показали изменение знаков коэффициентов Холла [5] и Зеебека [6] в диапазоне допирования $0.08 < \delta < 0.16$, что указывает на то, что при низкой температуре проводимость является электронной, в отличие от характерной для псевдощелевой фазы дырочной проводимости, ожидаемой в данном диапазоне допирования. Такие свойства поверхности Ферми указывают на нарушение трансляционной симметрии в основном состоянии в отсутствие сверхпроводимости. Последующее обнаружение квантовых осцилляций в $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ [56, 58], $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ [59] и ряде других соединений подтверждают то, что реконструкция поверхности Ферми и вызывающие ее явления являются общим свойством слабодопированных купратов.

Исследования структуры данного класса соединений подтвердили предположение о нарушении трансляционной симметрии, вызванном присутствием волны зарядовой плотности. Интересным является тот факт, что данная волна не соразмерна решетки и, в случае YBCO, описывается модуляционными векторами $\mathbf{Q}_x = 2\pi(Q, 0)$ и $\mathbf{Q}_y = 2\pi(0, Q)$, где $Q \approx 0.31$, лежащими в CuO

плоскости [4, 24, 25, 26]. Зарядовое упорядочение с длиной волны, варьирующейся от 3 до 5 постоянных решетки, так же были обнаружены с помощью сканирующей туннельной микроскопии (STM) и рентгеновской дифракции (XRD) для большинства известных ВТСП купратов [60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69]. Кроме того, нарушение трансляционной симметрии волной зарядовой плотности присутствует именно в том диапазоне допирования, в котором наблюдается реконструкция поверхности Ферми и изменение знака носителей заряда, что позволяет сделать вывод о том, что эти явления связаны между собой.

Ряд феноменологических подходов подтвердил, что электронный карман в нодалном регионе поверхности Ферми может быть вызван нарушением трансляционной симметрии с помощью волны зарядовой плотности [18]. Расширение данной модели с помощью явного учета d -волнового форм фактора [70] позволило получить дополнительные маленькие дырочные карманы, что позволяет более точно описать экспериментальные данные [7]. В то время, как данный подход хорошо работает в узкой области допирования, соответствующей фазе волны зарядовой плотности, он не позволяет описать всю эволюцию поверхности Ферми в слабодопированной фазе, в частности не воспроизводит арочную поверхность Ферми, характерную для псевдощелевой фазы. Кроме того, феноменологические подходы включают в себя дополнительные подгоночные параметры, не связанные ни с какими физическими измеряемыми величинами и сильно влияющие на поведение системы. Описание реконструкции поверхности Ферми с учетом псевдощелевой фазы затруднено тем фактом, что ключевую роль в данном случае играют сильные электронные корреляции, являющиеся определяющими для свойств слабодопированных купратов. В то время, как большая часть феноменологических моделей пренебрегает влиянием кулоновского взаимодействия и рассматривает данную задачу в рамках одноэлектронного приближения среднего поля [17, 71], где волна зарядовой плотности вводится руками, соседство псевдощелевой фазы и фазы ВЗП накладывает требование учета сильных электронных корреляций для получения полной картины поведения поверхности

Ферми.

3.2. Модель

По аналогии с феноменологическими моделями, описывающими реконструкцию поверхности Ферми в присутствии волн зарядовой плотности, рассмотрение начинается со стандартной *tigh-binding* модели

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \quad (3.1)$$

на квадратной двумерной решетке, где вектора трансляции задаются в виде $\mathbf{E}_x = (1, 0)$ и $\mathbf{E}_y = (0, 1)$ (здесь и далее постоянная решетки a полагается равной единице). В данном подходе нарушение трансляционной симметрии происходит за счет разбиения бесконечной решетки на кластеры размером $L \times L$, что приводит к увеличению векторов трансляции $\mathbf{T}_x = (L, 0)$, $\mathbf{T}_y = (0, L)$ и возникновению соответствующих им волновых векторов $\mathbf{Q}_x = (\frac{2\pi}{L}, 0)$ и $\mathbf{Q}_y = (0, \frac{2\pi}{L})$. В таком случае, трансляционная симметрия не сохраняется для изначальной решетки, но присутствует для кластеров с соответствующими векторами трансляции. Так как экспериментальные данные указывают на существование несоответствующего зарядового упорядочения с длиной волны $L \approx 3.2$ (в YBCO) [25, 26], размер кластера выбирается максимально близким целым значением, в данном случае $L = 3$. В таком случае, кластеры 3×3 рассматриваются как новые элементарные ячейки, с более сложной внутренней структурой, а Гамильтониан в таком представлении имеет вид:

$$H = \sum_{fg} H_{fg}^{\text{int}} + \sum_f H_f^0, \quad H_{fg}^{\text{int}} = \sum_{ab\sigma} t_{ab}^{fg} c_{fa\sigma}^\dagger c_{gb\sigma} \quad (3.2)$$

где f и g являются кластерными индексами, a и b обозначают узлы внутри соответствующих кластеров, t_{ab}^{fg} является матрицей интегралов перескоков, переписанной в представлении кластеров.

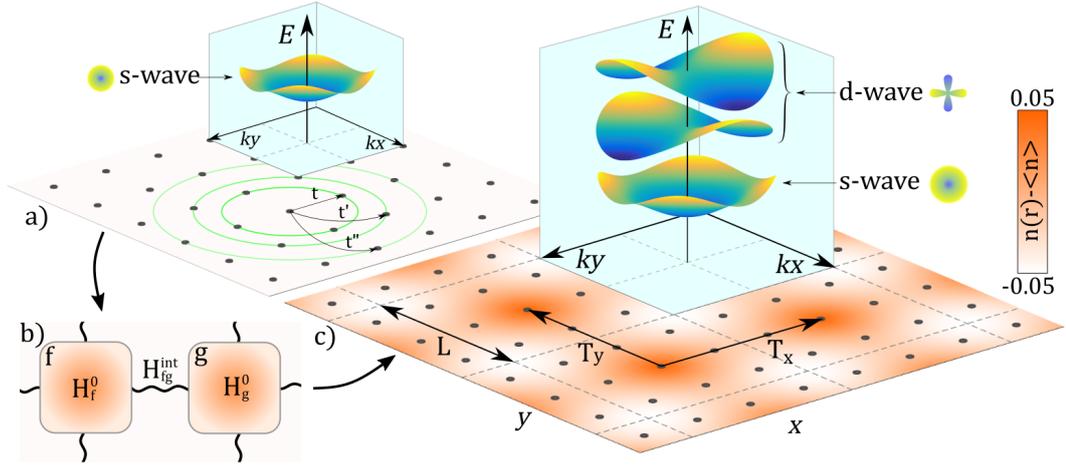


Рис. 3.1. **(а)**: Изначальная модели сильной связи (*tight-binding*) на квадратной решетке с перескоками на первые t , вторые t' и третьи t'' координационные сферы. Закон дисперсии соответствует *s-wave* симметрии и описывается в рамках известного выражения $\varepsilon(\mathbf{k}) = 2t(\cos(k_x) + \cos(k_y)) + 4t'\cos(k_x)\cos(k_y) + 2t''(\cos(2k_x) + \cos(2k_y))$. **(б)**: Схематическое изображение Гамильтониана в представлении сверхрешетки. **(в)**: Сверхрешетка, состоящая из кластеров 3×3 . Пространственное распределение заряда на исходной решетке изображено цветом. Вставка схематически изображает закон дисперсии для кластеров, содержащий как *s-wave*, так и *d-wave* моды.

$c_{fa\sigma}^\dagger$ является стандартным оператором рождения электрона на узле a кластера f с проекцией спина σ . В таком представлении H_{fg}^{int} соответствует взаимодействию между кластерами f и g , в то время как H_f^0 является внутрикластерным слагаемым, определяющим внутреннюю структуру кластера f . В случае стандартной *tight-binding* модели $H_f^0 = H_{ff}^{\text{int}}$, что приводит к каноническому Ферми жидкостному поведению системы с цилиндрической поверхностью Ферми. Однако, в данном подходе внутрикластерная часть модернизируется за счет добавления сильного кулоновского одноузельного отталкивания $U \sum_a n_{fa\uparrow} n_{fa\downarrow}$. В пределе большого U Гамильтониан может быть записан в виде $t - J$ модели:

$$H_f^0 = \sum_{ab\sigma} (t_{ab}^{ff} - \mu\delta_{ab}) \tilde{c}_{fa\sigma}^\dagger \tilde{c}_{fb\sigma} + J \sum_{ab} \mathbf{S}_{fa} \cdot \mathbf{S}_{fb}, \quad (3.3)$$

где $J = 4t^2/U$ - константа спинового обменного взаимодействия, электронные операторы являются спроектированными на редуцированное Гильбертово пространство $\tilde{c}_{a\sigma} = c_{a\sigma}(1 - n_{a-\sigma})$, а \mathbf{S}_{fa} являются операторами спина электрона.

Следующим шагом является численная точная диагонализация H_f^0 для каждого кластера, что позволяет переписать Гамильтониан (3.2) в базисе собственных волновых функций кластера и вычислить электронные спектральные функции $A(\mathbf{k}, \varepsilon)$ для изначальной решетки в рамках кластерной теории возмущений (Приложение Б).

Следует отметить две важные особенности, связанные с этим методом.

1) Вследствие того, что в данном подходе используются конечные кластеры с открытыми граничными условиями, распределение заряда внутри кластера является неоднородным. При переходе к изначальной решетки такая неоднородность обеспечивает моделирование волны зарядовой плотности с волновыми векторами \mathbf{Q}_x и \mathbf{Q}_y , что изображено на Рис.3.1(с). Данная особенность позволяет качественно воспроизвести экспериментально наблюдаемое зарядовое упорядочение [26].

2) Стандартные феноменологические подходы учитывают только *s-wave* перескоки, что является недостаточным для полноценного воспроизведения поведения слабодопированных купратов. В таких моделях *d-wave* перескоки могут быть добавлены исключительно вручную, что не опирается ни на какие физические процессы и не может дать явного понимания реконструкции поверхности Ферми. В данном подходе межкластерное взаимодействие записывается в базисе собственных функций внутрикластерной части, которая, в свою очередь, включает в себя сильное кулоновское взаимодействие. Такой подход приводит к влиянию сильных корреляций на форму межкластерного взаимодействия и естественному возникновению *d-wave* мод в межкластерной части. Таким образом, в Гамильтониане данной модели не присутствует никаких слагаемых, соответствующих введению в систему заранее определенного дальнего порядка вручную. Единственным феноменологическим параметром, введенным в модель, является величина модуляционного вектора $Q = 1/3$, выбирающаяся из соображений соответствия экспериментально наблюдаемой величине, а реконструкция поверхности Ферми является прямым следствием сильного кулонов-

ского отталкивания.

3.3. Изменение топологии поверхности Ферми и возникновение квантовых осцилляций

Данный метод позволяет построить поверхности Ферми в широком диапазоне допирования, что позволяет проследить всю эволюцию поверхности Ферми. Как известно, в случае малого допирования в купратах реализуется псевдощелевая фаза, при которой экспериментальные наблюдения не выявили никаких следов квантовых осцилляций [72], что свидетельствует о нефермижидкостном поведении системы и соответствует наблюдаемым в ARPES измерениях арочным поверхностям Ферми [73, 74]. Однако физика, лежащая в основе таких арок, до сих пор остается не ясной. Теоретические модели [75], как и численные расчеты [76, 77], предполагают, что данный тип разомкнутых поверхностей Ферми реализуется из-за перераспределения спектрального веса вдоль одной из сторон дырочного кармана, расположенного в нодальной области, в то время как другая его сторона является незанятой. Результаты вычисления поверхностей Ферми в фазе "чистой" псевдощели ($\delta < 0.08$), приведенные в данной главе, подтверждают такой сценарий в том случае, когда карман не касается границ редуцированной зоны Бриллюэна, что изображено на Рис. 3.2(e). Данные расчеты подтверждают предположение о том, что волновые вектора, соединяющий концы Ферми арок в фазе псевдощели являются отличными от векторов волны зарядовой плотности.

Несмотря на тот факт, что в данной модели трансляционная симметрия нарушена при любом уровне допирования, в том числе и для фазы чистой псевдощели, наблюдаемые поверхности Ферми в этой фазе не подвергаются качественному влиянию волны зарядовой плотности и являются арочными в полном соответствии с ARPES экспериментами, указывающими на нулевой спектральный вес в антинодальной области [2]. Данный факт объясняется тем, что псевдощеле-

вая фаза обуславливается сильным кулоновским взаимодействием[78] даже в отсутствие нарушения трансляционной симметрии, и при малом уровне допирования (в фазе "чистой" псевдощели) волны зарядовой плотности не оказывают достаточного влияния на топологию поверхности Ферми. Данное утверждение подтверждается многочисленными численными расчетами, выполненными в рамках разнообразных кластерных подходов (CPT[79, 80, 19], C-DMFT[77, 81, 82]) для различных размеров кластеров, подтверждающими арочную структуру поверхности Ферми, качественно соответствующую полученной в данной работе.

Однако, при возрастании допирования влияние волны зарядовой плотности становится более существенным и приводит к реконструкции поверхности Ферми, что находится в согласии с некоторыми теоретическими предсказаниями[23, 83]. В то время как при $\delta < 0.08$ реализуется фаза псевдощели, при повышении уровня допирования поверхность Ферми подвергается изменению топологии (Рис.3.2(f)) при критическом значении $\delta \approx 0.09$, что напрямую связано с расходимостью эффективной массы носителей заряда[84, 85]. При данной концентрации дырок поверхность Ферми начинает касаться границ редуцированной зоны Бриллюэна, что приводит к тому, что вектор, соединяющий концы арки поверхности Ферми становится равным вектору модуляции волн зарядовой плотности, и сигнализирует о переходе в фазу волны зарядовой плотности. Изменение топологии поверхности Ферми приводит к тому, что электроны рассеиваются на Брэгговских плоскостях, образованных волной зарядовой плотности, что приводит к формированию замкнутых в импульсном пространстве поверхностей, изображенных на Рис.3.3(с). Как и в случае псевдощели, спектральный вес перераспределен на одну из сторон кармана. Однако, за счет Брэгговского отражения в точках пересечения поверхности Ферми с границами редуцированной зоны Бриллюэна квазичастицы могут образовывать эффективно замкнутую орбиту ((1, 8), (2, 3), (4, 5) и (6, 7) на Рис.3.3(с)), соединяя квазичастичные состояния с одинаковой энергией, но отличной на вектор \mathbf{Q} величиной импульса. Таким образом, разъединенные Ферми арки, расположенные в но-

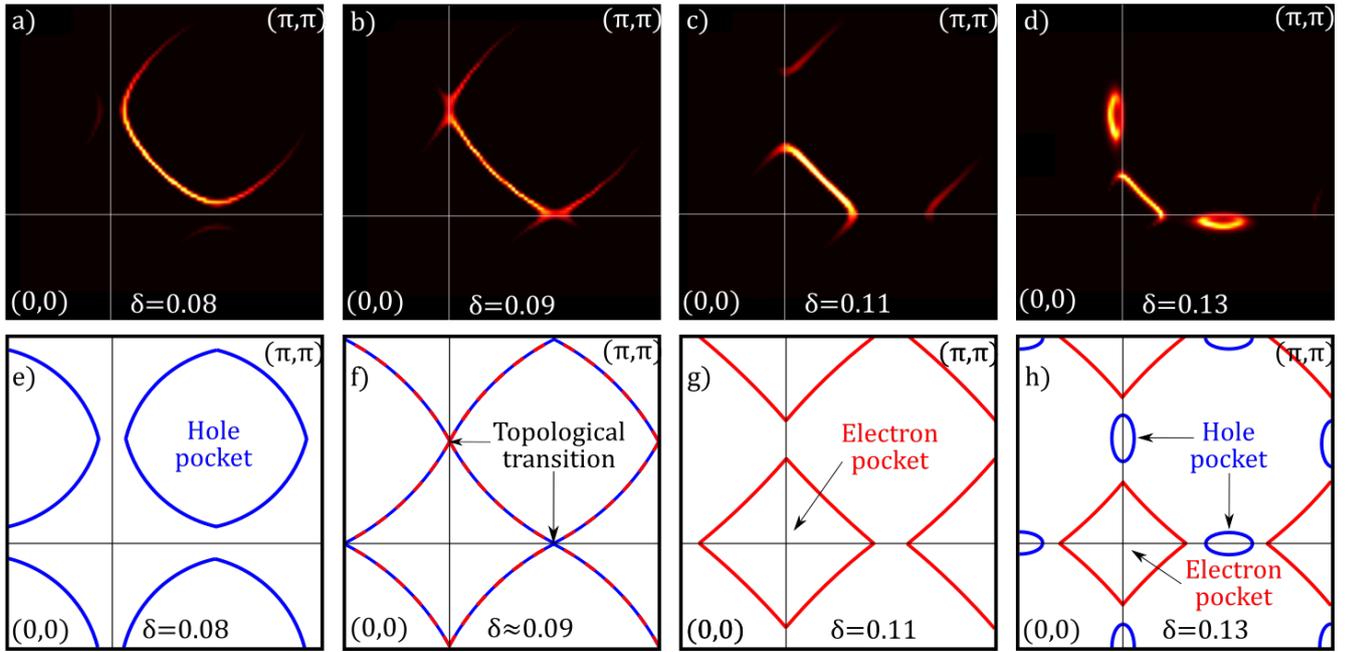


Рис. 3.2. Поверхности Ферми, вычисленные для различных значений параметра допирования δ с учетом (a-d) распределения спектрального веса и без него, в виде полюсов функций Грина (e-f). Сплошные линии $k_x = \pi/3$ и $k_y = \pi/3$ отображают Брэгговские плоскости на границах редуцированной зоны Бриллюэна. Параметры $t - J$ модели, использованные в расчетах: $t' = -0.27$, $t'' = 0.2$, $J = 0.5$, температура $T = 10^{-4}$ (здесь и далее энергия измеряется в величинах t).

дальней области, могут образовывать эффективно замкнутую квазичастичную орбиту, что приводит к возможности появления квантовых осцилляций малой частоты в сильном магнитном поле. Тот же самый механизм лежит в основе еще более низкочастотных квантовых осцилляций, предположительно объясняемых наличием маленьких дырочных карманов в дополнении к электронному. Кроме того, данные дырочные карманы связывают с существованием d -wave упорядочения, что так же было подтверждено в экспериментальных исследованиях купратов [74, 86, 87].

Следует отметить, что наличие электронного кармана, вызванного редуцированием зоны Бриллюэна, не нарушает теоремы Латтинжера и указывает на частично фермижидкостное поведение системы, в отличие от псевдощелевой фазы. Существуют так же экспериментальные свидетельства, указывающие на то, что низкоэнергетический транспорт в слабодопированных купратах, харак-

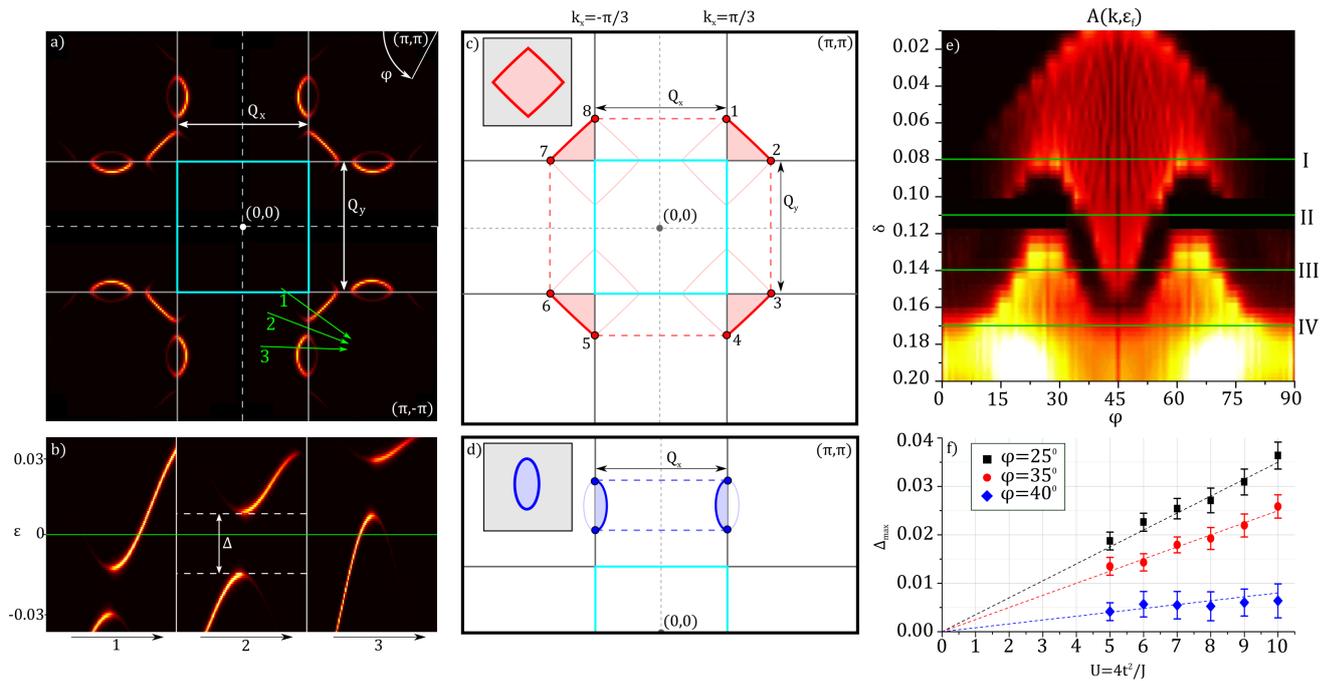


Рис. 3.3. **(а)**: Поверхность Ферми, вычисленная в рамках метода кластерной теории возмущений при допировании $\delta = 0.14$ с полушириной Лоренциана $\eta = 0.01$. Остальные параметры модели такие же, как и на Рис.3.2. Срезы спектральной функции в направлениях 1, 2 и 3 (зеленые линии) изображены на рисунке **(б)**: Горизонтальная зеленая линия соответствует уровню Ферми. Δ обозначает величину щели, образованной за счет расщепления зон. **(с)** Схематическое изображение формирования электронного кармана. Пронумерованные точки соответствуют точкам Брэгговского отражения. Стороны электронного кармана с ненулевым спектральным весом обозначены красным, а эффективная площадь поверхности Ферми закрашена. Вставка схематически отображает эффективный карман на поверхности Ферми. **(д)** Схематическое изображение формирования дырочных карманов. На рисунках **(а,с,д)** первая редуцированная зона Бриллюэна отображена голубым цветом, Брэгговским плоскостям соответствуют прямые $k_x, k_y = \pm\pi/3$, а Q_x и Q_y являются векторами модуляции волны зарядовой плотности. **(е)** Распределение спектрального веса на поверхности Ферми, проинтегрированное вдоль направления, задающегося углом φ (график **(а)**) из точки (π, π) при различных значениях уровня допирования δ . Каждому горизонтальному срезу соответствует поверхность Ферми при указанном допировании δ . Срезы, пронумерованные римскими цифрами, соответствуют фазам, изображенным на Рис.3.4. Срезу III так же соответствует поверхность Ферми **(б)**. **(ф)** Зависимость максимальной величины щели от параметра кулоновского отталкивания U .

теризующий электронные карманы, в действительности обладает свойствами стандартной Ферми жидкости [72, 88, 89, 84].

Электрон-электронное взаимодействие открывает щель на границе редуцированной зоны Бриллюэна в точках Брэгговского отражения (Рис.3.3(b)). Величина такой щели линейно зависит от величины взаимодействия U (Рис.3.3(f)), что указывает на то, что именно кулоновское взаимодействие вызывает подобное расщепление зонной структуры. Данная фаза реализуется в диапазоне допирования $0.09 < \delta < 0.16$ (Fig.3.3(e)) и соответствует возникновению зоны проводимости и валентной зоны.

3.4. Плотность электронных и дырочных состояний на уровне Ферми

Прямое вычисление знака обратной эффективной массы с помощью расчета второй производной закона дисперсии ($m_{\text{eff}}^{-1} = \partial^2 E(\mathbf{k}) / \partial \mathbf{k}^2$) позволяет воспроизвести ключевые особенности модели в широком диапазоне допирования. Результаты, представленные на Рис.3.4(a) соответствуют экспериментальным данным о том, что при $\delta < 0.09$ проводимость является полностью дырочной, что характеризует фазу "чистой" псевдощели.

Однако, реконструкция поверхности Ферми, начинающаяся при $\delta \approx 0.09$ и заканчивающаяся при $\delta \approx 0.15$ приводит к значительному снижению концентрации дырочных носителей и возникновению электронной проводимости. Именно этот диапазон допирования характеризуется присутствием Брэгговской щели и резким падением "среднего знака" носителей заряда:

$$\sigma = \int_{BZ} A(\mathbf{k}, \varepsilon_f) \text{sign}(m_{\text{eff}}) d\mathbf{k}, \quad (3.4)$$

где $A(\mathbf{k}, \varepsilon_f)$ является спектральной функцией на поверхности Ферми и \int_{BZ} обозначает интегрирование по всей зоне Бриллюэна. Поведение данной функции показывает, что в области "чистой" псевдощели проводимость является дыроч-

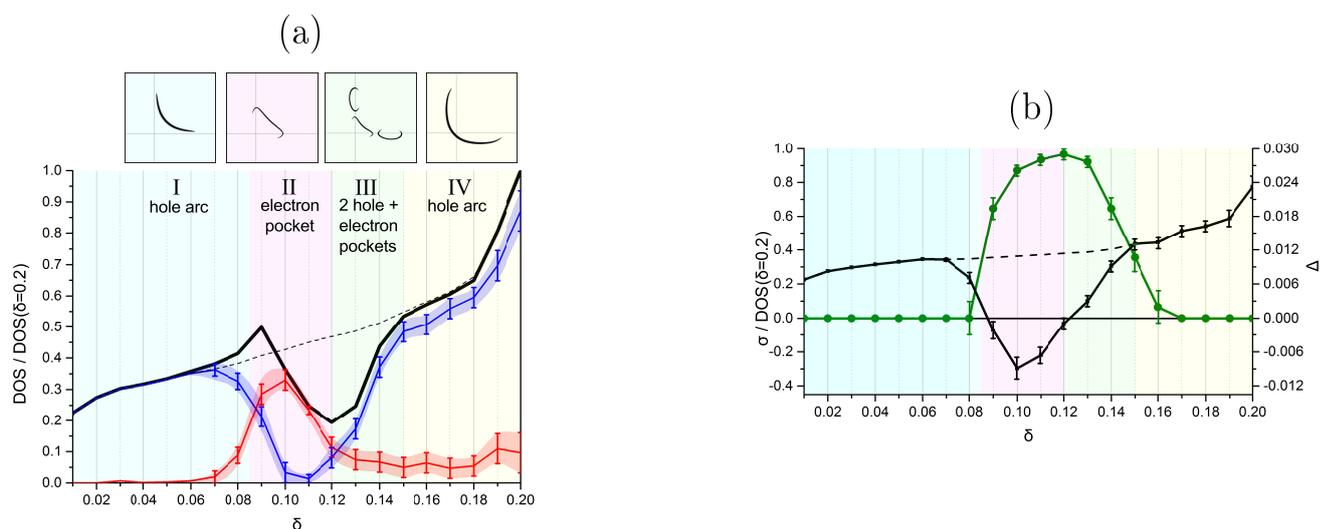


Рис. 3.4. (a) Зависимость плотности электронных состояний (DOS) на поверхности Ферми от уровня допирования δ , нормированная на величину $\text{DOS}(\delta = 0.2)$. Красная и синяя кривая соответствуют плотности электронных и дырочных носителей заряда соответственно. (b) Черная кривая отображает зависимость среднего знака носителей заряда σ от уровня допирования δ (значения слева). Зеленая линия соответствует величине щели ВЗП Δ (значения справа). Пунктирные черные линии на графиках (a) и (b) соответствуют фазе "чистой" псевдощели без реконструкции поверхности Ферми.

ной, в то время как в фазе волны зарядовой плотности преобладает электронная проводимость, либо возможно сосуществование электронных и дырочных носителей тока. Кроме того, суммарный спектральный вес носителей на поверхности Ферми подвергается значительному уменьшению, что соответствует экспериментам по измерению теплоемкости [8, 90]. При допировании $\delta > 0.16$ восстанавливается фаза чистой псевдощели, что следует из поведения среднего знака носителей заряда и величины щели Δ .

Данный подход успешно воспроизводит и некоторые более тонкие детали реконструкции поверхности Ферми, характерные для фазы волны зарядовой плотности [91]. В частности, в то время как существуют аргументы как за, так и против существования маленьких дырочных карманов в дополнении к одному электронному в фазе ВЗП, приведенные расчеты показывают что обе эти фазы реализуются при различных значениях допирования. При переходе от фазы "чистой" псевдощели к фазе ВЗП поверхность Ферми содер-

жит исключительно электронные носители заряда в диапазоне допирования $0.09 < \delta < 0.12$. При дальнейшем увеличении степени допирования дырочные карманы возникают как прямое следствие наличия d -wave слагаемых в межкластерном взаимодействии, что находится в полном соответствии с экспериментальными результатами[7], указывающими на существование исключительно электронной проводимости в узкой области допирования $\delta \approx 0.10$. Такое поведение указывает на то, что электронные карманы могут существовать как отдельно, так и вместе с дырочными карманами, что так же подтверждается экспериментами по измерению магнитосопротивления[92].

3.5. Заключение

В заключении следует отметить, что в рамках модели Кондо-Гейзенбера удастся Показано, что в случае сильных корреляций квазидальний антиферромагнитный порядок быстро разрушается с ростом допирования и полностью пропадает при допированиях порядка $\delta \approx 0.08$, что полностью соответствует экспериментальным данным. С ослаблением величины Кондо-взаимодействия, ответственной за электронные корреляции, разрушение антиферромагнитного упорядочения происходит медленнее и приводит к восстановлению (квази)дальнего порядка в случае $\lambda = 0$.

В отсутствие антиферромагнитного порядка, при допированиях, соответствующих псевдощелевой фазе, именно сильные корреляции приводят как к возникновению псевдощелевых арочных поверхностей Ферми, так и реконструкции данных поверхностей в электронные карманы, допускающие существование квантовых осцилляций плотности электронных состояний в сильных магнитных полях, в фазе волны зарядовой плотности. При ослаблении величины Кондо-взаимодействия $\lambda < 6t$ данная реконструкция не наблюдается, что указывает на то, что сильные корреляции играют ключевую роль в описании поведения фазы волны зарядовой плотности. При дальнейшем ослаблении вели-

чины корреляций пропадают следы псевдощелевой фазы и поверхность Ферми восстанавливает фермижидкостную форму.

Полученные в расчетах поверхности Ферми позволяют оценить диапазоны существования псевдощелевой фазы $\delta < 0.25$ и фазы волны зарядовой плотности $0.14\delta < 0.2$, что находится в хорошем согласии с экспериментальными данными. Кроме того, анализ влияния граничных условий указывает на то, что такое поведение является в большей степени свойством модели с незначительным влиянием артефактов численных вычислений. Данный результат позволяет сделать вывод о том, что именно сильные корреляции и порождаемый ими констрейнт отсутствия двойного заполнения узла электронами ответственен за нетривиальную физику слабодопированной фазы ВТСП купратов.

Заключение

В рамках настоящей диссертации было исследовано влияние сильных корреляций на поведение электронов в нормальной фазе ВТСП купратов. В рамках метода квантового Монте-Карло показано быстрое разрушение антиферромагнитного порядка при допировании системы в модели Кондо-Гейзенберга. В рамках кластерной теории возмущений построены поверхности Ферми и продемонстрирована их реконструкция из арочных поверхностей в псевдощелевой фазы в эффективно замкнутые поверхности в фазе волны зарядовой плотности и дальнейшее восстановление фермижидкостного поведения вне псевдощелевой фазы. Данный результат был впервые воспроизведен в рамках микроскопической модели без привлечения дополнительных феноменологических параметров и находится в хорошем количественном согласии с экспериментальными данными.

В случае модели Хаббарда с бесконечно сильным кулоновским отталкиванием на одном узле продемонстрирована термодинамическая неустойчивость насыщенного ферромагнетизма в случае конечного допирования. Более того, была выявлена прямая зависимость возможности существования Нагаоковского ферромагнетизма от типа граничных условий и характера решетки, что указывает на нетривиальность термодинамического предела. Данный результат означает, что даже в отсутствие какого-либо взаимодействия сам констрейнт, запрещающий двойное заполнения узла, приводит к нетривиальному поведению системы.

В рамках $t - J$ модели с нарушение трансляционной симметрии воспроизведена реконструкция поверхности Ферми волной зарядовой плотности и показано изменение ее топологии, приводящее к возникновению электронной проводимости. Был предложен механизм, объясняющий существование низкочастотных квантовых осцилляций плотности электронных состояний, наблюдаемых в эксперименте. Такой механизм, реализуемый за счет Брэгговского отражения

электронов на границах редуцированной зоны Бриллюэна, дает возможность описать квантовые осцилляции как следствие нарушения трансляционной симметрии волной зарядовой плотности, возникающей в псевдощелевой фазы.

Приложение А

Квантовый метод Монте-Карло

Используемый в данной работе квантовый метод Монте-Карло базируется на *Continuous Time World Line* (CTWL) алгоритме[93]. В общем виде Гамильтониан системы записывается в виде:

$$H = H_0 + H_1, \quad (\text{A.1})$$

где H_0 и H_1 являются диагональной и недиагональной частью Гамильтониана соответственно:

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{i,p} E_p X_i^{pp} + \sum_{ij,pq} V_{ij}^{pq} X_i^{pp} X_j^{qq} \\ H_1 &= \sum_{ij,pqrs} T_{ij}^{pqrs} X_i^{pq} X_j^{rs}, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

где $X_i^{pq} = |p\rangle\langle q|$ является оператором Хаббарда, действующим на узле i . Метод основан на разложении в ряд статистической суммы в представлении взаимодействия:

$$\begin{aligned} e^{-\beta H} &= e^{-\beta H_0} T_\tau [e^{-\int_0^\beta H_1(\tau) d\tau}] \\ Z &= \text{Sp}(e^{-\beta H_0} (1 - \int_0^\beta H_1(\tau) d\tau + \int_0^\beta \int_0^{\tau_1} H_1(\tau_1) H_1(\tau_2) d\tau_1 d\tau_2 - \dots)), \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

где T_τ - оператор упорядочения по τ , а $H_1(\tau) = e^{-\tau H_0} H_1 e^{\tau H_0}$.

В процессе работы метода генерируются конфигурации, соответствующие слагаемым из разложения статистической суммы А.3. На Рис.А.1 изображены примеры конфигурации, появляющихся в процессе работы алгоритма. Статистический вес каждой конфигурации является произведением множителей, соответствующих как горизонтальным, так и вертикальным отрезкам. Каждому горизонтальному отрезку в состоянии $|p\rangle$ на узле i соответствует множитель

$$\exp(E_p \cdot (\tau_2 - \tau_1) + \sum_j \int_{\tau_1}^{\tau_2} V_{ij}^p \mathbf{q}_j(\tau) d\tau),$$

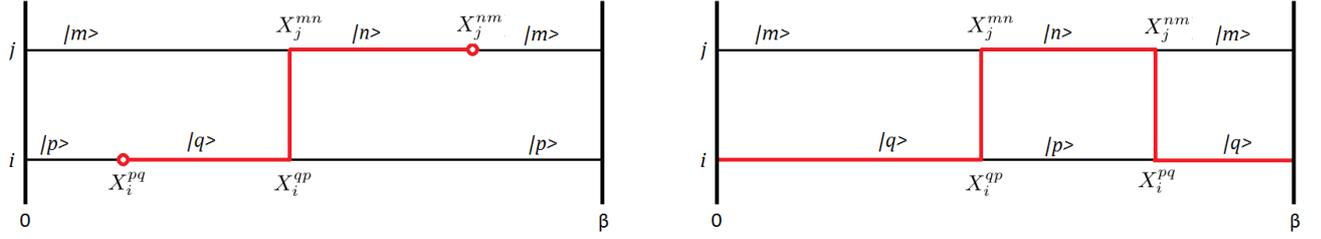


Рис. А.1. Пример обновления конфигурации системы, изображенный на диаграмме. Прямым участкам соответствуют собственные одноузельные состояния, а узлам соответствуют недиагональные операторы Хаббарда, связывающие между собой одноузельные состояния.

где τ_1 и τ_2 мнимые времена начала и конца отрезка, а $\mathbf{q}_j(\tau)$ описывает состояние горизонтального участка на узле j в момент мнимого времени τ . Каждый вертикальный отрезок, соединяющий узлы с операторами X_i^{pq} и X_j^{mn} соответствует множителю T_{ij}^{pqmn} .

В работе [94] была предложена модификация алгоритма, позволяющая значительно повысить сходимость вычислений. Данное улучшение заключается в добавлении к Гамильтониану фиктивного слагаемого:

$$H_\nu = \sum_{ipq} \nu_{pq} (X_i^{mn} + X_i^{nm}), \quad (\text{A.4})$$

где значения ν_{pq} являются достаточно малыми и выбираются исходя из условий конкретной задачи. Данная добавка приводит к возникновению нефизических конфигураций, которые, однако, не вносят вклада в вычисление средних, но приводят к значительному повышению эргодичности алгоритма. Таким образом, каждый узел с оператором X_i^{pq} , не связанный вертикальным отрезком с другим узлом (Рис.А.1), соответствует множителю ν_{pq} из (А.4). В процессе работы алгоритма конфигурации обновляются с помощью заранее заданных процедур. Такие процедуры могут быть выбраны произвольным образом, но не должны противоречить Гамильтониану А.2, а полный набор таких процедур должен удовлетворять требованию эргодичности. Для модели Хаббарда и $t - J$ модели алгоритм и примеры процедур описаны в статьях [94, 95]. Общая схема алгоритма выглядит имеет следующий вид:

1. Формируется произвольная начальная конфигурация. Выбор начальной конфигурации не влияет на результат расчетов, таким образом единственным требованием к конфигурации является соответствие требованиям Гамильтониана системы.
2. Случайным образом выбирается процедура обновления конфигурации.
3. Случайным образом выбирается узел i и мнимое время τ_1 и τ_2 , на которых будет происходить обновление. Если действие процедуры невозможно осуществить при данных i, τ_1 и τ_2 , то процесс переходит к пункту 5.
4. Вычисляет вероятность принятия процедуры обновления W . Если $W > R$, где R является случайным числом $R \in [0, 1]$, то происходит обновление конфигурации.
5. Рассчитываются необходимые физические величины текущей конфигурации и дополняются средние значения, рассчитываемые в течении всей работы алгоритма(A.5). После этого алгоритм переходит к пункту 2.

Среднее значение какой-либо физической величины A вычисляются по формуле:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{\text{MC}} A_{\text{MC}} \text{sign}(\text{conf})}{\sum_{\text{MC}} \text{sign}(\text{conf})}, \quad (\text{A.5})$$

где \sum_{MC} обозначает суммирование по всем физическим конфигурациям, возникающим в процессе работы алгоритма, A_{MC} - значение оператора A в текущей конфигурации, а $\text{sign}(\text{conf})$ является знаком текущей конфигурации.

Преимуществом квантового метода Монте-Карло является $\mathcal{O}(N)$ сходимость алгоритма, которая, однако, значительно затруднена *проблемой знака*. В силу антикоммутиации фермионов и того факта, что T_{ij}^{pqmn} может принимать отрицательные значение, статистический вес конфигураций может быть отрицательным, что приводит к необходимости суммирования знакопеременных рядов. Данный факт приводит к экспоненциальному росту ошибки вычислений в

зависимость от обратной температуры $\Delta \sim e^{\beta E}$ и значительно ухудшает сходимость алгоритма. Таким образом, методы квантового Монте-Карло являются актуальными только в том случае, если проблема знака не слишком велика и позволяет проводить вычисления с приемлемой точностью.

Приложение Б

Кластерная теория возмущений

Данный метод, развитый в статьях [96, 97, 78, 98], основан на точном учете ближнего взаимодействия в рамках точной диагонализации малых кластеров, и последующем учете межкластерного взаимодействия в рамках теории возмущений. Метод позволяет вычислить спектральные функции и восстановить поверхности Ферми системы при различных уровнях допирования и в широком диапазоне параметров.

Первым шагом данного метода является разбиение изначальной решетки на кластеры фиксированного размера и последующая перегруппировка Гамильтониана таким образом, чтобы отделить межкластерные и внутрикластерные слагаемые:

$$H = \sum_i H_i^0 + \sum_{ij} H_{ij}^{\text{int}} \quad (\text{Б.1})$$

где H_i^0 – внутрикластерное взаимодействие кластера i , а H_{ij}^{int} – взаимодействие между кластерами i и j . Внутрикластерная часть H_i^0 диагонализуется и в базисе собственных состояний кластера строятся операторы Хаббарда $X_i^{pq} = |p\rangle\langle q|$. В таком базисе Гамильтониан имеет вид:

$$H = \sum_{ip} \varepsilon_p X_i^{pp} + \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} T_{ij}^{\alpha\beta} X_i^\alpha X_j^\beta, \quad (\text{Б.2})$$

где ε_p – собственная энергия состояния $|p\rangle$, греческими буквами обозначены мультииндексы $\alpha = (p, q)$, а $T_{ij}^{\alpha\beta}$ является межкластерным взаимодействием, записанным в новом базисе. При переходе в импульсное пространство операторы Хаббарда преобразуются как:

$$X_j^\alpha = \frac{1}{\sqrt{N^*}} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} e^{i\tilde{\mathbf{k}}\mathbf{R}_j} X_{\tilde{\mathbf{k}}}^\alpha, \quad (\text{Б.3})$$

где $\tilde{\mathbf{k}}$ является волновым вектором в редуцированной зоне Бриллюэна, N^* -

число кластеров в сверхрешетке, а \mathbf{R}_j - радиус-вектор узла j . В импульсном представлении Гамильтониан принимает вид:

$$H = \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_p \varepsilon_p(\tilde{\mathbf{k}}) X_{\tilde{\mathbf{k}}}^{pp} + \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \sum_{\alpha\beta} T^{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}) X_{\tilde{\mathbf{k}}}^{\alpha} X_{\tilde{\mathbf{k}}}^{\beta}, \quad (\text{Б.4})$$

Следующим шагом является вычисления функции Грина, построенной на операторах Хаббарда

$$G_{\alpha\beta}(i, \tau_1; j, \tau_2) = \langle\langle X_i^{\alpha}(\tau_1) | X_j^{\beta}(\tau_2) \rangle\rangle. \quad (\text{Б.5})$$

Осуществив переход в импульсное пространство для функций Грина записывается уравнение Дайсона, которое в матричном виде принимает форму:

$$\hat{G}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)^{-1} = \hat{G}^0(\omega)^{-1} - \hat{T}(\tilde{\mathbf{k}}), \quad (\text{Б.6})$$

где

$$G_{\alpha\beta}^0(\omega) = \delta_{\alpha\beta} \frac{\langle X^{pp} \rangle_0 + \langle X^{qq} \rangle_0}{\omega - \varepsilon_q + \varepsilon_p + \mu}, \quad (\text{Б.7})$$

где $\langle X^{pp} \rangle_0$ является числом заполнения состояния $|p\rangle$, полученным из точной диагонализации внутрикластерной части Гамильтониана, μ - химический потенциал. Данная функций Грина определена в редуцированной зоне Бриллюэна. Электронная функция Грина на изначальной решетке восстанавливается следующим образом:

$$G_{\sigma}^{\text{el}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{N_c} \sum_{\alpha\beta} \sum_{ij} \gamma_{i\sigma}^{\dagger\alpha} \gamma_{j\sigma}^{\beta} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} G_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega), \quad (\text{Б.8})$$

где $\gamma_{i\sigma}^{\dagger\alpha} = \langle p | a_{i\sigma}^{\dagger} | q \rangle$ при $\alpha = (p, q)$ - является разложением оператора рождения электрона в базисе собственных состояний кластера. N_c - число узлов в кластере, \mathbf{k} - вектор в изначальной зоне Бриллюэна, а $G_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$ - функция Грина, полученная из решения уравнения (Б.6).

Основной целью данного метода является получение спектральных функций $A(\mathbf{k}, \omega)$ и построение соответствующих поверхностей Ферми $A(\mathbf{k}, 0)$. Такие спектральные функции легко получить из функций Грина:

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow \infty^+} \text{Im} G(\mathbf{k}, \omega + \mu + i\eta) \quad (\text{Б.9})$$

В численной реализации наиболее ресурсоемкими являются два шага данного метода, которые требуют дополнительного упоминания:

1. В данной работе метод использовался как для кластеров 3×3 , так и для кластеров 4×4 . В первом случае достаточно малый размер кластера позволяет провести полную точную диагонализацию внутрикластерной части, в то время как для больших кластеров диагонализация производится с помощью алгоритма Ланцоша, что позволяет получить лишь ограниченное число наиболее низколежащих по энергии собственных состояний.
2. Уравнение (Б.6) решается в матричном виде, где размер матрицы $G_{\alpha\beta}$ является количеством возможных значений $\alpha = (p, q)$, что в общем случае приводит к матрице $G_{\alpha\beta} = [s^{2N_c}, s^{2N_c}]$, где s – число одноузельных состояний (в случае $t - J$ модели $s = 3$: $|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$). Решение уравнение на нахождение обратной матрица такого размера является излишним и требует слишком много вычислительных ресурсов, поэтому число возможных значений α редуцируется таким образом, чтобы для всех возможных α значение $f = \sum_{\alpha} \gamma_{i\sigma}^{\dagger\alpha} \gamma_{i\sigma}^{\alpha} (\langle X^{pp} \rangle_0 + \langle X^{qq} \rangle_0)$ было близким к максимальному. Такой подход позволяет отбросить большую часть переходов, вносящий пренебрежимо малый вклад в спектральную функцию, что позволяет значительно сократить время вычислений.

Список литературы

1. Bednorz, J. G. Müller, K. A., Possible high T_c superconductivity in the Ba – La – Cu – O system // Zeitschrift für Physik B Condensed Matter - 1986, Vol. 64. - P. 189.
2. 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., Shen, H. T. 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.
3. 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.
4. 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.
5. LeBoeuf, D., Electron pockets in the Fermi surface of hole-doped high- T_c superconductors // Nature - 2007, Vol. 450. - P. 533.
6. Chang, J., Daou, R., Proust, C., LeBoeuf, D., Doiron-Leyraud, N., Laliberté, F., Pingault, B., Ramshaw, B. J., Liang, R., Bonn, D. A., Hardy, W. N., Takagi, H., Antunes, A. B., Sheikin, I., Behnia, K., Taillefer, L., Nernst and Seebeck Coefficients of the Cuprate Superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.67}$: A Study of Fermi Surface Reconstruction // Physical Review Letters - 2010, Vol. 104. - P. 057005.
7. Doiron-Leyraud, N., Badoux, S., de Cotret, S. R., Lepault, 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 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ // Nature Communications - 2015, Vol. 6. - P. 6034.

8. Proust, C. Taillefer, L., The Remarkable Underlying Ground States of Cuprate Superconductors // Annual Review of Condensed Matter Physics - 2019, Vol. 10. - P. 409.
9. Hussey, N. E., Buhot, J., Licciardello, S., A tale of two metals: contrasting criticalities in the pnictides and hole-doped cuprates // Reports on Progress in Physics - 2018, Vol. 81. - P. 052501.
10. Tranquada, J. M., Cuprates Get Orders to Charge // Science - 2012, Vol. 337. - P. 811.
11. Hubbard, J., Electron correlations in narrow energy bands // Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences - 1963, Vol. 276. - P. 238.
12. Chao, K. A., Spalek, J., Oles, A. M., Kinetic exchange interaction in a narrow S -band // Journal of Physics C: Solid State Physics - 1977, Vol. 10. - P. L271.
13. Ribeiro, T. C. Wen, X.-G., New Mean-Field Theory of the $tt't''J$ Model Applied to High- T_c Superconductors // Physical Review Letters - 2005, Vol. 95. - P. 057001.
14. Ribeiro, T. C. Wen, X.-G., Doped carrier formulation and mean-field theory of the $tt't''J$ model // Physical Review B - 2006, Vol. 74. - P. 155113.
15. Ivantsov, I., Ferraz, A., Kochetov, E., Quantum Monte Carlo study of the itinerant-localized model of strongly correlated electrons: Spin-spin correlation functions // Physical Review B - 2016, Vol. 94. - P. 235118.
16. Norman, M. R., Kanigel, A., Randeria, M., Chatterjee, U., Campuzano, J. C., Modeling the Fermi arc in underdoped cuprates // Physical Review B - 2007, Vol. 76. - P. 174501.
17. Allais, A., Chowdhury, D., Sachdev, S., Connecting high-field quantum oscillations to zero-field electron spectral functions in the underdoped cuprates // Nature Communications - 2014, Vol. 5. - P. 5771.
18. Harrison, N. Sebastian, S. E., Protected Nodal Electron Pocket from Multiple-Q Ordering in Underdoped High Temperature Superconductors // Physical

- Review Letters - 2011, Vol. 106. - P. 226402.
19. Kuz'min, V. I., Nikolaev, S. V., Ovchinnikov, S. G., Comparison of the electronic structure of the Hubbard and $t-J$ models within the cluster perturbation theory // Physical Review B - 2014, Vol. 90. - P. 245104.
 20. Lanczos, C., An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators // Journal of Research of the National Bureau of Standards - 1950, Vol. 45. - P. 255.
 21. Abanov, A., Chubukov, A. V., Schmalian, J., Quantum-critical theory of the spin-fermion model and its application to cuprates: Normal state analysis // Advances in Physics - 2003, Vol. 52. - P. 119.
 22. Ivantsov, I., Ferraz, A., Kochetov, E., Breakdown of the Nagaoka phase at finite doping // Physical Review B - 2017, Vol. 95. - P. 155115.
 23. Harrison, N. Sebastian, S. E., On the relationship between charge ordering and the Fermi arcs observed in underdoped high T_c superconductors // New Journal of Physics - 2014, Vol. 16. - P. 063025.
 24. Wu, T., Emergence of charge order from the vortex state of a high-temperature superconductor // Nature communications - 2013, Vol. 4. - P. 2113.
 25. Blanco-Canosa, S., Frano, A., Schierle, E., Porras, J., Loew, T., Minola, M., Bluschke, M., Weschke, E., Keimer, B., Tacon, M. L., Resonant x-ray scattering study of charge-density wave correlations in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ // Physical Review B - 2014, Vol. 90. - P. 054513.
 26. Tabis, W., Charge order and its connection with Fermi-liquid charge transport in a pristine high- T_c cuprate // Nature communications - 2014, Vol. 5. - P. 5875.
 27. Nagaoka, Y., Ferromagnetism in a Narrow, Almost Half-Filled s Band // Physical Review - 1966, Vol. 147. - P. 392.
 28. Richmond, P. Rickayzen, G., Ferromagnetism in narrow non-degenerate energy bands - a variational principle // Journal of Physics C: Solid State Physics - 1969, Vol. 2. - P. 528.
 29. Riera, J. A. Young, A. P., Ferromagnetism in the one-band Hubbard model //

- Physical Review B - 1989, Vol. 40. - P. 5285(R).
30. Yokoyama, H. Shiba, H., Variational Monte-Carlo Studies of Hubbard Model. I // Journal of the Physical Society of Japan - 1987, Vol. 56. - P. 1490.
 31. Müller-Hartmann, E., Hanisch, T., Hirsch, R., Ferromagnetism of Hubbard models // Physica B: Condensed Matter - 1993, Vol. 186-188. - P. 834.
 32. Becca, F. Sorella, S., Nagaoka Ferromagnetism in the Two-Dimensional Infinite- U Hubbard Model // Physical Review Letters - 2001, Vol. 86. - P. 3396.
 33. Mielke, A. Tasaki, H., Ferromagnetism in the Hubbard model // Communications in Mathematical Physics - 1993, Vol. 158. - P. 341.
 34. Sütő, A., Absence of highest-spin ground states in the Hubbard model // Communications in Mathematical Physics - 1991, Vol. 140. - P. 43.
 35. Tian, G.-S., Stability of the Nagaoka state in the one-band Hubbard model // Physical Review B - 1991, Vol. 44. - P. 4444.
 36. Putikka, W. O., Luchini, M. U., Ogata, M., Ferromagnetism in the two-dimensional $t - J$ model // Physical Review Letters - 1992, Vol. 69. - P. 2288.
 37. Tasaki, H., From Nagaoka's Ferromagnetism to Flat-Band Ferromagnetism and Beyond: An Introduction to Ferromagnetism in the Hubbard Model // Progress of Theoretical Physics - 1998, Vol. 99. - P. 489.
 38. Tasaki, H., Extension of Nagaoka's theorem on the large- U Hubbard model // Physical Review B - 1989, Vol. 40. - P. 9192.
 39. Park, H., Haule, K., Marianetti, C. A., Kotliar, G., Dynamical mean-field theory study of Nagaoka ferromagnetism // Physical Review B - 2008, Vol. 77. - P. 035107.
 40. Braghin, F. L., Ferraz, A., Kochetov, E., Breakdown of the mean-field description of the Nagaoka phase // Physical Review B - 2008, Vol. 78. - P. 115109.
 41. Fazekas, P., Menge, B., Müller-Hartmann, E., Ground state phase diagram of the infinite dimensional Hubbard model: A variational study // Zeitschrift für

- Physik B Condensed Matter - 1990, Vol. 78. - P. 69.
42. Shastry, B. S., Krishnamurthy, H. R., Anderson, P. W., Instability of the Nagaoka ferromagnetic state of the $U = \infty$ Hubbard model // Physical Review B - 1990, Vol. 41. - P. 2375.
 43. von der Linden, W. Edwards, D. M., Ferromagnetism in the Hubbard model // Journal of Physics: Condensed Matter - 1991, Vol. 3. - P. 4917.
 44. Basile, A. G. Elser, V., Stability of the ferromagnetic state with respect to a single spin flip: Variational calculations for the $U = \infty$ Hubbard model on the square lattice // Physical Review B - 1990, Vol. 41. - P. 4842.
 45. Hanisch, T., Uhrig, G. S., Müller-Hartmann, E., Lattice dependence of saturated ferromagnetism in the Hubbard model // Physical Review B - 1997, Vol. 56. - P. 13960.
 46. Carleo, G., Moroni, S., Becca, F., Baroni, S., Itinerant ferromagnetic phase of the Hubbard model // Physical Review B - 2011, Vol. 83. - P. 060411(R).
 47. Ferraz, A., Kochetov, E., Uchoa, B., Comment on “New Mean-Field Theory of the $t - t' - t'' - J$ Applied to High- T_c Superconductors ” // Physical Review Letters - 2007, Vol. 98. - P. 069701.
 48. Pepino, R. T., Ferraz, A., Kochetov, E., Doped carrier formulation of the $t - J$ model: Projection constraint and the effective Kondo-Heisenberg lattice representation // Physical Review B - 2008, Vol. 77. - P. 035130.
 49. Maška, M. M., Mierzejewski, M., Ferraz, A., Kochetov, E. A., Ising $t - J$ model close to half filling: a Monte Carlo study // Journal of Physics: Condensed Matter - 2009, Vol. 21. - P. 045703.
 50. Maška, M. M., Mierzejewski, M., Kochetov, E., The Ising version of the $t - J$ model // Philosophical Magazine - 2014, Vol. 95. - P. 583.
 51. Ferraz, A. Kochetov, E., Gauge invariance and spinon-dopon confinement in the $t - J$ model: implications for Fermi surface reconstruction in the cuprates // The European Physical Journal B - 2013, Vol. 86. - P. 512.
 52. Fledderjohann, A., Langari, A., Müller-Hartmann, E., Mütter, K.-H.,

- Ferromagnetism in a hard-core boson model // The European Physical Journal B - 2005, Vol. 43. - P. 471.
53. Hirsch, J. E., Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study // Physical Review B - 1985, Vol. 31. - P. 4403.
 54. Liu, L., Yao, H., Berg, E., White, S. R., Kivelson, S. A., Phases of the Infinite U Hubbard Model on Square Lattices // Physical Review Letters - 2012, Vol. 108. - P. 126406.
 55. Takahashi, M., $I = \infty$ Hubbard Model on Finite Lattices // Journal of the Physical Society of Japan - 1982, Vol. 51. - P. 3475.
 56. Yelland, E. A., Singleton, J., Mielke, C. H., Harrison, N., Balakirev, F. F., Dabrowski, B., Cooper, J. R., Quantum Oscillations in the Underdoped Cuprate $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ // Physical Review Letters - 2008, Vol. 100. - P. 047003.
 57. Sebastian, S. E., Harrison, N., Palm, E., Murphy, T. P., Mielke, C. H., Liang, R., Bonn, D. A., Hardy, W. N., Lonzarich, G. G., A multi-component Fermi surface in the vortex state of an underdoped high- T_c superconductor // Nature - 2008, Vol. 454. - P. 200.
 58. Bangura, A. F., Fletcher, J. D., Carrington, A., Levallois, J., Nardone, M., Vignolle, B., Heard, P. J., Doiron-Leyraud, N., LeBoeuf, D., Taillefer, L., Adachi, S., Proust, C., Hussey, N. E., Small Fermi Surface Pockets in Underdoped High Temperature Superconductors: Observation of Shubnikov–de Haas Oscillations in $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ // Physical Review Letters - 2008, Vol. 100. - P. 047004.
 59. Barišić, N., Universal quantum oscillations in the underdoped cuprate superconductors // Nature Physics - 2013, Vol. 9. - P. 761.
 60. Tranquada, J., Sternlieb, B., Axe, J., Nakamura, Y., Uchida, S., Evidence for stripe correlations of spins and holes in copper oxide superconductors // Nature - 1995, Vol. 375. - P. 561.
 61. Fink, J., Soltwisch, V., Geck, J., Schierle, E., Weschke, E., Büchner, B., Phase diagram of charge order in $\text{La}_{1.8-x}\text{Eu}_{0.2}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ from resonant soft x-ray diffraction // Physical Review B - 2011, Vol. 83. - P. 092503.

62. Ghiringhelli, G., Tacon, M. L., Minola, M., Blanco-Canosa, S., Mazzoli, C., Brookes, N. B., Luca, G. M. D., Frano, A., Hawthorn, D. G., He, F., Loew, T., Sala, M. M., Peets, D. C., Salluzzo, M., Schierle, E., Sutarto, R., Sawatzky, G. A., Weschke, E., Keimer, B., Braicovich, L., Long-Range Incommensurate Charge Fluctuations in $(Y,Nd)Ba_2Cu_3O_{6+\delta}$ // *Science* - 2012, Vol. 337. - P. 821.
63. Achkar, A. J., Sutarto, R., Mao, X., He, F., Frano, A., Blanco-Canosa, S., Tacon, M. L., Ghiringhelli, G., Braicovich, L., Minola, M., Sala, M. M., Mazzoli, C., Liang, R., Bonn, D. A., Hardy, W. N., Keimer, B., Sawatzky, G. A., Hawthorn, D. G., Distinct Charge Orders in the Planes and Chains of Ortho-III-Ordered $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$ Superconductors Identified by Resonant Elastic X-ray Scattering // *Physical Review Letters* - 2012, Vol. 109. - P. 167001.
64. LeBoeuf, D., Krämer, S., Hardy, W. N., Liang, R., Bonn, D. A., Proust, C., Thermodynamic phase diagram of static charge order in underdoped $YBa_2Cu_3O_y$ // *Nature Physics* - 2012, Vol. 9. - P. 79.
65. Blackburn, E., Chang, J., Hücker, M., Holmes, A. T., Christensen, N. B., Liang, R., Bonn, D. A., Hardy, W. N., Rütt, U., Gutowski, O., v. Zimmermann, M., Forgan, E. M., Hayden, S. M., X-Ray Diffraction Observations of a Charge-Density-Wave Order in Superconducting Ortho-II $YBa_2Cu_3O_{6.54}$ Single Crystals in Zero Magnetic Field // *Physical Review Letters* - 2013, Vol. 110. - P. 137004.
66. Hoffman, J. E., Hudson, E. W., Lang, K. M., Madhavan, V., Eisaki, H., Uchida, S., Davis, J. C., A Four Unit Cell Periodic Pattern of Quasi-Particle States Surrounding Vortex Cores in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ // *Science* - 2002, Vol. 295. - P. 466.
67. Kohsaka, Y., Taylor, C., Fujita, K., Schmidt, A., Lupien, C., Hanaguri, T., Azuma, M., Takano, M., Eisaki, H., Takagi, H., Uchida, S., Davis, J. C., An Intrinsic Bond-Centered Electronic Glass with Unidirectional Domains in Underdoped Cuprates // *Science* - 2007, Vol. 315. - P. 1380.
68. Kivelson, S. A., Bindloss, I. P., Fradkin, E., Oganessian, V., Tranquada, J. M.,

- Kapitulnik, A., Howald, C., How to detect fluctuating stripes in the high-temperature superconductors // *Reviews of Modern Physics* - 2003, Vol. 75. - P. 1201.
69. Vershinin, M., Misra, S., Ono, S., Abe, Y., Ando, Y., Yazdani, A., Local Ordering in the Pseudogap State of the High- T_c Superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ // *Science* - 2004, Vol. 303. - P. 1995.
70. Allais, A., Bauer, J., Sachdev, S., Density wave instabilities in a correlated two-dimensional metal // *Physical Review B* - 2014, Vol. 90. - P. 155114.
71. Maharaj, A. V., Hosur, P., Raghu, S., Crisscrossed stripe order from interlayer tunneling in hole-doped cuprates // *Physical Review B* - 2014, Vol. 90. - P. 125108.
72. LeBoeuf, D., Doiron-Leyraud, N., Vignolle, B., Sutherland, M., Ramshaw, B. J., Levallois, J., Daou, R., Laliberté, F., Cyr-Choinière, 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 // *Physical Review B* - 2011, Vol. 83. - P. 054506.
73. Yang, H.-B., Rameau, J. D., Pan, Z.-H., Gu, G. D., Johnson, P. D., Claus, H., Hinks, D. G., Kidd, T. E., Reconstructed Fermi Surface of Underdoped $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ Cuprate Superconductors // *Physical Review Letters* - 2011, Vol. 107. - P. 047003.
74. Comin, R., Frano, A., Yee, M. M., Yoshida, Y., Eisaki, H., Schierle, E., Weschke, E., Sutarto, R., He, F., Soumyanarayanan, A., He, Y., Tacon, M. L., Elfimov, I. S., Hoffman, J. E., Sawatzky, G. A., Keimer, B., Damascelli, A., Charge Order Driven by Fermi-Arc Instability in $\text{Bi}_2\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CuO}_{6+\delta}$ // *Science* - 2013, Vol. 343. - P. 390.
75. Yang, K.-Y., Rice, T. M., Zhang, F.-C., Phenomenological theory of the pseudogap state // *Physical Review B* - 2006, Vol. 73. - P. 174501.
76. Ivantsov, I., Ferraz, A., Kochetov, E., Itinerant-localized model of strongly correlated electrons: Fermi surface reconstruction // *Physical Review B* - 2017,

- Vol. 96. - P. 195161.
77. Stanescu, T. D., Kotliar, G., Fermi arcs and hidden zeros of the Green function in the pseudogap state // Physical Review B - 2006, Vol. 74. - P. 125110.
 78. S en echal, D., Tremblay, A.-M. S., Hot Spots and Pseudogaps for Hole- and Electron-Doped High-Temperature Superconductors // Physical Review Letters - 2004, Vol. 92. - P. 126401.
 79. 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 // The European Physical Journal B - 2007, Vol. 57. - P. 271.
 80. Kohno, M., Mott Transition in the Two-Dimensional Hubbard Model // Physical Review Letters - 2012, Vol. 108. - P. 076401.
 81. Ferrero, M., Cornaglia, P. S., Leo, L. D., Parcollet, O., Kotliar, G., Georges, A., Pseudogap opening and formation of Fermi arcs as an orbital-selective Mott transition in momentum space // Physical Review B - 2009, Vol. 80. - P. 064501.
 82. 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 // Physical Review B - 2010, Vol. 82. - P. 134505.
 83. Harrison, N., Sebastian, S. E., Magnetotransport signatures of a single nodal electron pocket constructed from Fermi arcs // Physical Review B - 2015, Vol. 92. - P. 224505.
 84. Sebastian, S. E., Harrison, N., Altarawneh, M. M., Liang, R., Bonn, D. A., Hardy, W. N., Lonzarich, G. G., Fermi-liquid behavior in an underdoped high- T_c superconductor // Physical Review B - 2010, Vol. 81. - P. 140505(R).
 85. Ramshaw, B. J., Sebastian, S. E., McDonald, R. D., Day, J., Tan, B. S., Zhu, Z., Betts, J. B., Liang, R., Bonn, D. A., Hardy, W. N., Harrison, N., Quasiparticle mass enhancement approaching optimal doping in a high- T_c superconductor // Science - 2015, Vol. 348. - P. 317.

86. Fujita, K., Hamidian, M. H., Edkins, S. D., Kim, C. K., Kohsaka, Y., Azuma, M., Takano, M., Takagi, H., Eisaki, H., Uchida, S., Allais, A., Lawler, M. J., Kim, E.-A., Sachdev, S., Davis, J. C. S., Direct phase-sensitive identification of a d-form factor density wave in underdoped cuprates // Proceedings of the National Academy of Sciences - 2014, Vol. 111. - P. E3026.
87. Forgan, E. M., Blackburn, E., Holmes, A. T., Briffa, A. K. R., Chang, J., Bouchenoire, L., Brown, S. D., Liang, R., Bonn, D., Hardy, W. N., Christensen, N. B., Zimmermann, M. V., Hücker, M., Hayden, S. M., The microscopic structure of charge density waves in underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.54}$ revealed by X-ray diffraction // Nature Communications - 2015, Vol. 6. - P. 10064.
88. Proust, C., Vignolle, B., Levallois, J., Adachi, S., Hussey, N. E., Fermi liquid behavior of the in-plane resistivity in the pseudogap state of $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ // Proceedings of the National Academy of Sciences - 2016, Vol. 113. - P. 13654.
89. Grissonnanche, G., Laliberté, F., Dufour-Beauséjour, S., Matusiak, M., Badoux, S., Tafti, F. F., Michon, B., Riopel, A., Cyr-Choinière, O., Baglo, J. C., Ramshaw, B. J., Liang, R., Bonn, D. A., Hardy, W. N., Krämer, S., LeBoeuf, D., Graf, D., Doiron-Leyraud, N., Taillefer, L., Wiedemann-Franz law in the underdoped cuprate superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ // Physical Review B - 2016, Vol. 93. - P. 064513.
90. Michon, B., Girod, C., Badoux, S., Kačmarčík, J., Ma, Q., Dragomir, M., Dabkowska, H. A., Gaulin, B. D., Zhou, J.-S., Pyon, S., Takayama, T., Takagi, H., Verret, S., Doiron-Leyraud, N., Marcenat, C., Taillefer, L., Klein, T., Thermodynamic signatures of quantum criticality in cuprate superconductors // Nature - 2019, Vol. 567. - P. 218.
91. Ivantsov, I., Ferraz, A., Kochetov, E., Fermi surface reconstruction in underdoped cuprates: Origin of electron pockets // Physical Review B - 2018, Vol. 98. - P. 214511.
92. Vignolle, B., Ramshaw, B. J., Day, J., LeBoeuf, D., Lepault, S., Liang, R., Hardy, W. N., Bonn, D. A., Taillefer, L., Proust, C., Coherent-axis transport

- in the underdoped cuprate superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ // *Physical Review B* - 2012, Vol. 85. - P. 224524.
93. 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 // *Journal of Experimental and Theoretical Physics* - 1998, Vol. 87. - P. 310.
94. Prokof'ev, N., Svistunov, B., Tupitsyn, I., "Worm" algorithm in quantum Monte Carlo simulations // *Physics Letters A* - 1998, Vol. 238. - P. 253.
95. Troyer, M., Non-local updates for quantum monte carlo simulations, in *AIP Conference Proceedings*, volume 600, page 156, AIP, 2003.
96. Sénéchal, D., Perez, D., Pioro-Ladrière, M., Spectral Weight of the Hubbard Model through Cluster Perturbation Theory // *Physical Review Letters* - 2000, Vol. 84. - P. 522.
97. Sénéchal, D., Perez, D., Plouffe, D., Cluster perturbation theory for Hubbard models // *Physical Review B* - 2002, Vol. 66. - P. 075129.
98. Maier, T., Jarrell, M., Pruschke, T., Hettler, M. H., Quantum cluster theories // *Reviews of Modern Physics* - 2005, Vol. 77. - P. 1027.