

Взаимосвязь концентрационных зависимостей спиновой восприимчивости и электронной структуры в купратах

В. И. Кузьмин⁺¹⁾, М. М. Коршунов⁺, С. В. Николаев^{+,*}, Т. М. Овчинникова[×], С. Г. Овчинников^{+,*}

⁺Институт физики им. Л. В. Киренского, Федеральный исследовательский центр
“Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук”, 660036 Красноярск, Россия

^{*}Сибирский федеральный университет, 660041 Красноярск, Россия

[×]Институт леса им. В. Н. Сукачева, Федеральный исследовательский центр
“Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук”, 660036 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 3 июня 2024 г.

После переработки 3 июня 2024 г.

Принята к публикации 5 июня 2024 г.

В рамках кластерной теории возмущений для сильно-коррелированных электронных систем рассчитаны зависимости электронной структуры и спиновой восприимчивости от допирования. Изменение восприимчивости при увеличении допирования качественно соответствуют экспериментальным данным по резонансному неупругому рентгеновскому рассеянию и неупругому рассеянию нейтронов, а также расчетам в рамках квантового метода Монте-Карло.

DOI: 10.31857/S1234567824130081, EDN: FJAJLE

1. Введение. Развитие методов резонансного неупругого рентгеновского рассеяния (RIXS – *Resonant inelastic x-ray scattering*) позволило экспериментально получить информацию о динамической магнитной восприимчивости [1–3], что дополняет результаты неупругого рассеяния нейтронов (INS – *inelastic neutron scattering*) [4–6]. Для купратов типа $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ известна сильная зависимость электронных и магнитных свойств от допирования x . Так, с ростом x система эволюционирует от антиферромагнитного мотт-хаббардовского диэлектрика при $x = 0$ через еще недостаточно понятое псевдощелевое состояние с ближним магнитным порядком до нормального металла с ферми-жидкостными свойствами при больших допированиях $x \propto 0.25$. Известно, что сильные электронные корреляции (СЭК) в этих материалах не позволяют описать их физические свойства в рамках стандартных одноэлектронных приближений в широкой области фазовой диаграммы. Для адекватного описания псевдощелевого состояния необходимо учесть зависящие от допирования изменения ближнего антиферромагнитного состояния. Для решения такой задачи привлекаются численно точные методы для конечных кластеров, например, квантовый метод Монте-Карло (КМК) [7–9]. В то же время и для электронной структуры, и для коллективных

возбуждений в кристалле важна и трансляционная инвариантность, которая может быть учтена с помощью таких подходов, как динамическая теория среднего поля и ее обобщения [10] и в рамках кластерных теорий [11]. В настоящей работе используется кластерная теория возмущений (CPT – *cluster perturbation theory*) [12–14], в которой собственные состояния малого кластера находятся численно точно и используются для записи межкластерных перескоков и взаимодействий в рамках теории возмущений с помощью собственных многоэлектронных состояний кластера.

2. Метод расчета. Метод расчета электронной структуры в CPT описан во многих работах и, де-факто, уже является стандартным [12–14]. Недавно были развиты методы расчета динамических зарядовых и спиновых корреляционных функций на основе CPT [15], названные, соответственно, Charge-CPT и Spin-CPT. Там использовалась точная диагонализация кластеров 3×3 в модели Эмери. В таком кластере точно учитываются спиновые корреляции до 5-й координационной сферы. Метод расчета близок к использованным в работах [16–18] подходам. В настоящей работе метод Spin-CPT применяется к модели Хаббарда

$$H = \sum_{i,\sigma} \left\{ (\varepsilon - \mu) n_{i,\sigma} + \frac{U}{2} n_{i,\sigma} n_{i,\bar{\sigma}} \right\} - \sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}, \quad (1)$$

¹⁾e-mail: kuz@iph.krasn.ru

где $c_{i,\sigma}$ обозначает оператор уничтожения электрона на узле i со спином σ , $\bar{\sigma} = -\sigma$, $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ – оператор количества частиц, t_{ij} – интеграл перескока, U – кулоновское отталкивание на узле.

На первом этапе локальная спиновая корреляционная функция вычисляется точно через собственные многоэлектронные состояния кластера:

$$[\hat{\chi}_c]_{i,j}(\Omega) = \sum_{\mu} \left[\frac{\langle 0 | S_i^+ | \mu \rangle \langle \mu | S_j^- | 0 \rangle}{\Omega - (E_{\mu} - E_0) + i\delta} - \frac{\langle 0 | S_j^- | \mu \rangle \langle \mu | S_i^+ | 0 \rangle}{\Omega + (E_{\mu} - E_0) + i\delta} \right], \quad (2)$$

где индексы i и j нумеруют узлы в кластере, $S_i^{+(-)}$ – оператор увеличения (уменьшения) проекции спина на узле i , $|\mu\rangle$ – собственные состояния кластера с энергиями E_{μ} , Ω – частота. Процедура получения матрицы межкластерных взаимодействий аналогична построению одночастичной СРТ на X -операторах Хаббарда [14] и приводит к двухчастичной функции Грина в приближении СРТ в виде, подобном приближению хаотических фаз (RPA – Random phase approximation):

$$\hat{\chi}_{CPT}^{-1}(\mathbf{k}, \Omega) = \hat{\chi}_c^{-1}(\Omega) - \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{k}), \quad (3)$$

где $\mathbf{k}$ – волновой вектор, матрица $\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{k})$ получена посредством рассмотрения межкластерных взаимодействий в пределе $t - J$ модели и аналогична по структуре обычной матрице перескоков $\hat{\mathbf{T}}(\mathbf{k})$ в СРТ. Трансляционная инвариантность решетки восстанавливается при расчете функции

$$\chi(\mathbf{k}, \Omega) = \frac{1}{N_c} \sum_{i,j} e^{-i(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\mathbf{k}} [\hat{\chi}_{CPT}]_{i,j}(\mathbf{k}, \Omega), \quad (4)$$

где $\mathbf{r}_i$ – положение узла i в кластере. В настоящей работе мы делаем расчет электронной структуры и спиновых корреляционных функций с кластером 4×4 , что позволяет точно учесть ближний магнитный порядок до 9-го соседа включительно.

3. Результаты расчета. На рисунке 1 показаны изменения с допированием электронной структуры и спиновой восприимчивости в рамках модели Хаббарда с учетом перескоков между первыми и вторыми соседями с параметрами $t = 0.56$ и $t' = -0.06$ и хаббардовским отталкиванием $U = 3.22$. Здесь и далее энергия приводится в эВ, а параметры подобраны для воспроизведения низкоэнергетической электронной структуры модели Эмери купратов [19]. Верхний ряд демонстрирует карты распределения спектральной плотности электронов на нулевой частоте, $A(\mathbf{k}, \omega = 0)$, в первой четверти зоны Бриллюэна.

Это распределение соответствует поверхности Ферми. В недопированном случае мотт-хаббардовского диэлектрика спектральная плотность везде близка к нулю. При малом допировании $x = 0.0625$ в антинодальном направлении спектральный вес мал для всех волновых векторов, в то время как в нодальном направлении имеется максимум функции распределения электронов – это и есть псевдощелевое состояние и широко обсуждаемая ферми-арка, наблюдаемая в экспериментах. Для $x = 0.125$ спектральный вес электронов на поверхности Ферми в антинодальном направлении еще заметно меньше, чем вес в нодальном направлении. Такое состояние можно назвать слабой псевдощелью с центром поверхности Ферми в точке (π, π) . Вблизи оптимального допирования $x = 0.1875$ спектральный вес практически одинаков на всей поверхности Ферми, что характерно для нормальной ферми-жидкости. Распределение спектрального веса электронов для передопированного случая с $p = 0.25$ показывает, что произошел переход Лифшица и сформировалась новая поверхность Ферми с центром в точке $\Gamma = (0, 0)$.

Проанализируем теперь спиновую восприимчивость как функцию волнового вектора и энергии (нижний ряд на рис. 1). В недопированном случае четко виден спин-волновой характер возбуждений с линейным законом дисперсии и максимумом спинового отклика в точке (π, π) . Похожая дисперсия и распределение спектрального веса получены методом КМК в работе [16]. При допировании и ослаблении антиферромагнитных корреляций в окрестности точки (π, π) максимум спинового отклика сдвигается в область больших энергий. Аналогичное поведение также было получено методом КМК [16]. Рост энергии спиновых возбуждений при допировании обнаружен экспериментально в спектрах RIXS [18]. В этих экспериментах не обнаружено низкоэнергетических спиновых возбуждений, предсказанных в расчетах RPA [20]. Заметим, что в области больших допирований, характеризующейся дисперсией почти свободных электронов ($x = 0.1875$ и $x = 0.25$), низкоэнергетический спиновый отклик присутствует на несоизмеримых волновых векторах, что согласуется с данными INS по $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [21, 5], а также с расчетами RPA [20] и кластерного обобщения RPA – CPT-RPA [15].

4. Заключение. Изучена эволюция электронной структуры и спиновых возбуждений с допированием в кластерной теории возмущений для модели Хаббарда купратов с кластером 4×4 . Расчет динамической спиновой восприимчивости на основе кластерной теории возмущений в рамках метода Spin-CPT

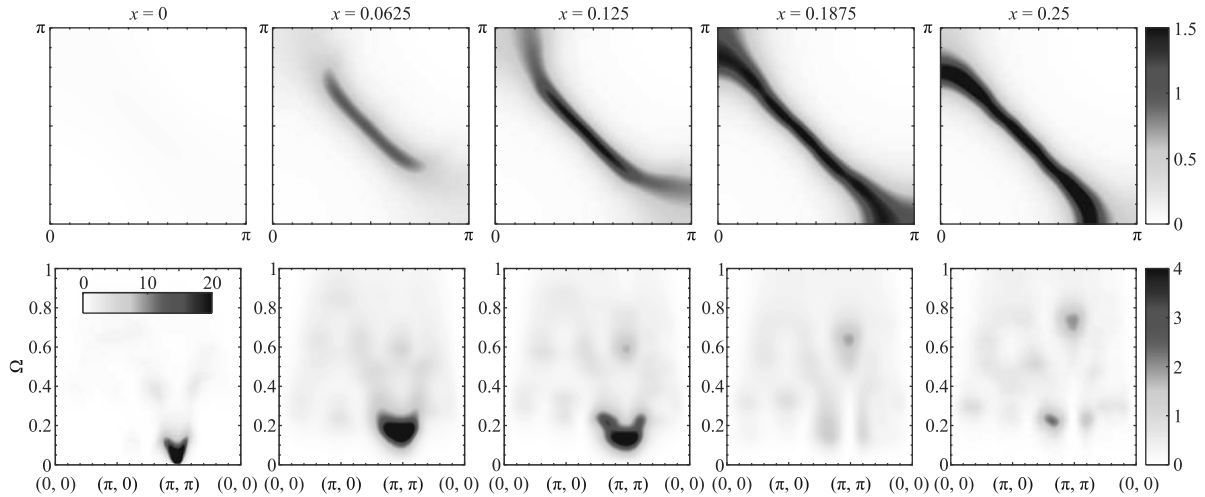


Рис. 1. (Цветной онлайн) Изменения с допированием спектральной функции на уровне Ферми, суть поверхности Ферми (верхний ряд), и карты спинового отклика $\text{Im}\chi(\mathbf{k}, \Omega)$ (нижний ряд) для пяти концентраций допирования $x = 0, 0.0625, 0.125, 0.1875, 0.25$. Отметим, что для наглядности шкала интенсивности в нижнем левом рисунке отличается от всех остальных рисунков нижнего ряда

дополнен межкластерным взаимодействием, имеющим подобную RPA структуру. Показано, как при переходе от диэлектрического состояния к псевдощелевому происходит переход от магнной дисперсии к парамагнной с доминирующим вкладом спектрального веса на антиферромагнитном волновом векторе (π, π) . В то же время, при переходе от псевдощелевого состояния к слабо коррелированному металлу, спиновый отклик при низких энергиях перераспределяется на несоизмеримые вектора.

В данных расчетах не возникает несоизмеримого отклика при малых допированиях на малых энергиях, который был обнаружен в купратах $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ и $\text{YBa}_2\text{CuO}_{6+x}$ [4, 5] и получен в рамках теории возмущений для сильно коррелированных электронов [22–25]. В нашей теории для электронной структуры, характерной для псевдощелевой фазы, имеют место максимум спинового отклика в точке (π, π) и возбуждения, схожие с парамагнонами. Такого рода картина спиновой восприимчивости наблюдалась в $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ [6]. Возможно, другие наборы параметров могут привести к несоизмеримому отклику типа нижней ветви “песочных часов”, что представляет интерес для дальнейших исследований.

Финансирование работы. Авторы В.И. Кузьмин, С.В. Николаев, С.Г. Овчинников выражают благодарность Российскому научному фонду, проект # 24-12-00044, за поддержку.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

1. L. J. P. Ament, M. van Veenendaal, T. P. Devereaux, J. P. Hill, and J. van den Brink, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 705 (2011).
2. Y. Peng, G. Dellea, M. Minola, and et al. (Collaboration), *Nature Phys.* **13**, 1201 (2017).
3. H. C. Robarts, M. García-Fernández, J. Li, A. Nag, A. C. Walters, N. E. Headings, S. M. Hayden, and K.-J. Zhou, *Phys. Rev. B* **103**, 224427 (2021).
4. V. Hinkov, P. Bourges, S. Pailhes, Y. Sidis, A. Ivanov, C. D. Frost, T. G. Perring, C. T. Lin, D. P. Chen, and B. Keimer, *Nat. Phys.* **3**(11), 780 (2007).
5. O. J. Lipscombe, B. Vignolle, T. G. Perring, C. D. Frost, and S. M. Hayden, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 167002 (2009).
6. M. K. Chan, C. J. Dorow, L. Mangin-Thro, Y. Tang, Y. Ge, M. J. Veit, G. Yu, X. Zhao, A. D. Christianson, J. T. Park, Y. Sidis, P. Steffens, D. L. Abernathy, P. Bourges, and M. Greven, *Nat. Commun.* **7**(1), 10819 (2016).
7. N. Prokof'ev, B. Svistunov, and I. Tupitsyn, *JETP Lett.* **64**, 911 (1996).
8. V. Kashurnikov and A. Krasavin, *JETP* **105**, 69 (2007).
9. E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, and P. Werner, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 349 (2011).
10. G. Rohringer, H. Hafermann, A. Toschi, A. A. Katanin, A. E. Antipov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, and K. Held, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 025003 (2018).
11. T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. H. Hettler, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1027 (2005).
12. D. Sénéchal, D. Perez, and M. Pioro-Ladrière, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 522 (2000).

13. С. В. Николаев, С. Г. Овчинников, *ЖЭТФ* **141**, 135 (2011).
14. V. I. Kuz'min, M. A. Visotin, S. V. Nikolaev, and S. G. Ovchinnikov, *Phys. Rev. B* **101**, 115141 (2020).
15. V. I. Kuz'min, S. V. Nikolaev, M. M. Korshunov, and S. G. Ovchinnikov, *Materials* **16**(13), 4640 (2023).
16. Y. F. Kung, C. Bazin, K. Wohlfeld, Y. Wang, C.-C. Chen, C. J. Jia, S. Johnston, B. Moritz, F. Mila, and T. P. Devereaux, *Phys. Rev. B* **96**, 195106 (2017).
17. E. M. Pärskke, Y. Wang, B. Moritz, T. P. Devereaux, C.-C. Chen, and K. Wohlfeld, *Phys. Rev. B* **99**, 205102 (2019).
18. Y. Y. Peng, E. W. Huang, R. Fumagalli, M. Minola, Y. Wang, X. Sun, Y. Ding, K. Kummer, X. J. Zhou, N. B. Brookes, B. Moritz, L. Braicovich, T. P. Devereaux, and G. Ghiringhelli, *Phys. Rev. B* **98**, 144507 (2018).
19. M. M. Korshunov, V. A. Gavrichkov, S. G. Ovchinnikov, I. A. Nekrasov, Z. V. Pchelkina, and V. I. Anisimov, *Phys. Rev. B* **72**, 165104 (2005).
20. C. Monney, T. Schmitt, C. E. Matt, J. Mesot, V. N. Strocov, O. J. Lipscombe, S. M. Hayden, and J. Chang, *Phys. Rev. B* **93**, 075103 (2016).
21. S. Wakimoto, K. Yamada, J. M. Tranquada, C. D. Frost, R. J. Birgeneau, and H. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 247003 (2007).
22. M. V. Eremin, A. A. Aleev, and I. M. Eremin, *JETP Lett.* **84**, 167 (2006).
23. M. V. Eremin, A. A. Aleev, and I. M. Eremin, *JETP* **106**, 752 (2008).
24. M. V. Eremin, I. M. Shigapov, and I. M. Eremin, *Eur. Phys. J.* **85**, 1 (2012).
25. M. V. Eremin, I. M. Shigapov, and H. T. D. Thuy, *J. Phys. Condens. Matter* **25**(34), 345701 (2013).