

# Температурная зависимость спин-поляронных внутрищелевых состояний в недопированных антиферромагнитных купратах

© С.Г. Овчинников\*, М.М. Коршунов\*\*, Е.В. Захарова\*

\* Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, 660036 Красноярск, Россия

\*\* Max-Planck Institut für Physik komplexer Systeme, D-01187 Dresden, Germany

E-mail: sgo@iph.krasn.ru, mkor@iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию 7 ноября 2007 г.)

Исследована температурная эволюция внутрищелевых состояний, расположенных в щели с переносом заряда между валентной зоной и зоной проводимости и обусловленных эффектом спинового полярона, в режиме сильных электронных корреляций в  $t-t'-t''-J$ -модели недопированных антиферромагнитных купратов. Влияние температуры учитывалось посредством температурной перенормировки концентрации магнонов, которая была вычислена в модели Гейзенберга с учетом слабых межплоскостного обмена и внутрислокостной спиновой анизотропии, а также путем введения лоренциана с зависящей от температуры полушириной в виде, соответствующем концепции маргинальной Ферми-жидкости. При увеличении температуры спектральный вес внутрищелевого состояния, пропорциональный концентрации магнонов, увеличивается, что приводит к увеличению интенсивности соответствующего ему пика спектральной функции во всех точках зоны Бриллюэна. В точках  $(\pi/2, \pi/2)$  и  $(\pi, 0)$  имеет место сближение основного пика и спутанного пика, связанного с внутрищелевой зоной, а в точках  $(0, 0)$  и  $(\pi, \pi)$  — их удаление друг от друга.

Авторы благодарят за поддержку РФФИ (гранты № 06-02-16100 и 06-02-90537-BNTS), программу Президиума РАН „Квантовая макрофизика“ и INTAS (YS grant N 05-109-4891).

PACS: 74.72.-h, 74.25.Jb, 74.25.Na, 79.60.-i

## 1. Введение

Ключевым вопросом теории высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) является эволюция зонной структуры с допированием от антиферромагнитного (АФМ) диэлектрика до парамагнетика и сверхпроводника. Одной из интересных особенностей электронной структуры АФМ-фазы купратов является формирование так называемых внутрищелевых состояний („in-gap states“), расположенных в щели с переносом заряда между валентной зоной и зоной проводимости.

Появление внутрищелевых состояний в слабодопированных купратах было обнаружено экспериментально [1–3], а также выявлено теоретически [4–7] при расчете малых кластеров в  $t-J$ -модели, модели Хаббарда и трехзонной  $p-d$ -модели. Пиннинг химического потенциала с допированием, наблюдавшийся в экспериментальной работе [8], также служит косвенным подтверждением существования внутрищелевых состояний. Расчет зонной структуры  $\text{CuO}_2$ -слоя в рамках многозонной  $p-d$ -модели [9] в обобщенном методе сильной связи (ГТВ-метод [10]) с явным учетом сильных электронных корреляций показал, что внутрищелевое состояние в недопированных купратах имеет нулевой спектральный вес, а при допировании оно приобретает дисперсию и конечный спектральный вес, пропорциональный концентрации дырок [11,12]. Во всех моделях сильно коррелированных систем движение дырки на фоне АФМ-порядка перенормируется за счет спиновых флуктуаций,

что и составляет сущность эффекта спинового полярона. Учет этого эффекта в низкоэнергетической модели для купратов  $p$ -типа привел авторов [13] к выводу, что именно взаимодействие дырки со спиновыми флуктуациями приводит к формированию внутрищелевой зоны. Притом даже для недопированных купратов, таких как  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  (LSCO),  $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$  (SCOC) и  $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$  (CCOC), внутрищелевые состояния проявляются в виде небольшого низкоэнергетического спутанного пика, который может быть обнаружен в ARPES-экспериментах. Как наиболее интересные для эксперимента указаны точки  $(\pi, 0)$  и  $(\pi/2, \pi/2)$  зоны Бриллюэна, поскольку именно в этих точках спутанный пик ближе всего расположен к основному спектральному пику, формирующему потолок валентной зоны. Также было показано, что в купратах существуют два вклада в спектральный вес внутрищелевой зоны: среднеполевой вклад, пропорциональный допированию  $x$ , и вклад спиновых флуктуаций, пропорциональный концентрации магнонов  $2n(T)$ . Последняя величина зависит от температуры, что может привести к температурной зависимости интенсивности спутанного спектрального пика. Именно исследованию влияния температуры на формирование внутрищелевых состояний в недопированных купратах посвящена настоящая работа. Концентрация магнонов была вычислена в модели Гейзенберга с учетом слабых межплоскостного обмена и внутрислокостной спиновой анизотропии. Эта модель является эффектив-

ной низкоэнергетической моделью в недопированном случае.

## 2. Дисперсия и спектральные функции внутрищелевых состояний

Наиболее общей моделью слоистых купратов является многозонная  $p-d$ -модель [9], которая помимо  $d_{x^2-y^2}$ -орбиталей меди и  $p_{x,y}$ -орбиталей плоскостного кислорода включает также  $d_{3z^2-r^2}$ -орбитали меди и  $p_z$ -орбитали апического кислорода. Полученные в рамках этой модели в обобщенном методе сильной связи законы дисперсии квазичастиц, их спектральные плотности и эволюция химического потенциала с допированием как в  $p$ - [11,12], так и в  $n$ -типе [14] находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Сформулированный недавно метод LDA + GTB [15], совмещающий в себе *ab initio* LDA-вычисления параметров многозонной  $p-d$ -модели и явный учет сильных электронных корреляций в GTB-методе, позволил получить эффективную низкоэнергетическую модель для купратов с полученными из первых принципов параметрами. Для  $n$ -типа эффективной моделью является  $t-t'-t''-J^*$ -модель ( $t-t'-t''-J$ -модель с учетом трехцентровых слагаемых), а для соединений  $p$ -типа со сложной структурой потолка валентной зоны — синглет-триплетная  $t-t'-t''-J^*$ -модель [16].

Поскольку в настоящей работе рассматриваются недопированные купраты и область малых энергий возбуждений ( $\sim 2J$ ), влияние синглет-триплетной гибридизации на потолок валентной зоны исчезающе мало. Потому далее будем исследовать спин-поляронный эффект в  $t-t'-t''-J$ -модели с гамильтонианом

$$H_{t-J} = (\varepsilon_1 - \mu) \sum_{f,\sigma} X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{f \neq g, \sigma} t_{fg} X_f^{\sigma 0} X_g^{0\sigma} + \sum_{f \neq g} J_{fg} \left( \mathbf{S}_f \mathbf{S}_g - \frac{1}{4} n_f n_g \right).$$

Здесь  $t_{fg}$  — интеграл перескока между узлами  $f$  и  $g$ ,  $J_{fg}$  — обменный интеграл,  $X_f^{pq} = |p_f\rangle\langle q_f|$  — оператор Хаббарда ( $|p_f\rangle, |q_f\rangle$  — состояния на узле  $f$ ),  $\mathbf{S}_f$  — оператор спина,  $n_f$  — оператор числа частиц,  $(\varepsilon_1 - \mu)$  — разница одноэлектронной энергии и химического потенциала.

Операторы спина и числа частиц выражаются через  $X$ -операторы Хаббарда

$$S_f^+ = X_f^{\sigma\bar{\sigma}}, \quad S_f^- = X_f^{\bar{\sigma}\sigma}, \\ S_f^z = \frac{1}{2} \left( X_f^{\sigma\sigma} - X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \right), \quad n_{f\sigma} = \sum_{\sigma} X_f^{\sigma\sigma}.$$

В рамках обобщенного метода сильной связи электрон в сильно коррелированной системе описывается как суперпозиция квазичастиц, связанных с возбуждениями между многоэлектронными  $n$ - и  $n+1$ -дырочными

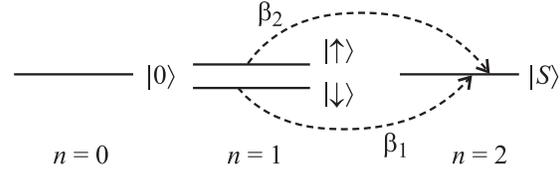


Рис. 1. Гильбертово пространство модели Хаббарда. Стрелками показаны квазичастичные возбуждения в верхней хаббардовской зоне.

термами элементарной ячейки, в качестве которой мы рассматриваем  $\text{CuO}_6$ -кластер. На рис. 1 показаны две квазичастицы  $\beta_1, \beta_2$ , формирующие потолок валентной зоны в АФМ-фазе (в парамагнитной фазе уровни в однодырочном секторе со спином вверх и вниз вырождены, а потому имеет место только одна квазичастица  $\beta_1 = \beta_2$ ). Спектральный вес этих квазичастиц в приближении среднего поля определяется числами заполнения начального и конечного состояний, т.е. факторами заполнения одночастичных состояний  $n_{A\sigma}$  и  $n_{B\sigma}$ , где  $A$  и  $B$  нумеруют АФМ-подрешетки,  $n_S$  — числа заполнения нижнего двухчастичного состояния (синглет  $|S\rangle$  симметрии  ${}^1A_{1g}$ ). Факторы заполнения  $n_m = \langle X^{mm} \rangle$  вычисляются самосогласованно с помощью уравнения на химический потенциал. Учитывая, что в приближении Хаббард-I для концентрации дырок  $n_h = 1 + x$  при нулевой температуре  $n_{A\uparrow} = n_{B\downarrow} = (1 - x)$ ,  $n_{A\downarrow} = n_{B\uparrow} = 0$ ,  $n_S = x$ , имеем для спектрального веса квазичастиц на подрешетке  $A$

$$F_A(\beta_1) = n_S + n_{A\uparrow} = 1, \quad F_A(\beta_2) = n_S + n_{A\downarrow} = x.$$

Отсюда видно, что именно  $\beta_2$  формирует зависящую от допирования внутрищелевую зону.

Для выхода за рамки приближения Хаббард-I необходимо вычислять однопетлевые поправки к собственной энергии [17]. В ферромагнитном и АФМ-состояниях основной вклад при низких температурах  $T \ll J$  вносят спин-волновые возбуждения (спин-поляронный эффект) [18]. В соответствии с работой [18] основной эффект спиновых возбуждений заключается в спин-волновой перенормировке чисел заполнения, а именно, мы должны иметь

$$n_{A\uparrow} = (1 - x)(1 - n_{sf}), \quad n_{A\downarrow} = (1 - x)n_{sf}, \quad n_S = x, \quad (1)$$

где  $n_{sf} = n(T) - n(0)$ ,  $n(0)$  и  $n(T)$  — концентрации магновов при нулевой и конечной температурах соответственно. Вообще величина  $n_{sf}$  связана с уменьшением подрешеточной намагниченности за счет спиновых флуктуаций

$$\langle S_A^z \rangle = (1 - x) \left[ 1/2 - (n(0) + n_{sf}) \right]. \quad (2)$$

Спектральный вес квазичастиц на подрешетке  $A$  с учетом (2) равен

$$F_A(\beta_1) = x + (1-x)(1-n_{sf}),$$

$$F_A(\beta_2) = x + (1-x)n_{sf},$$

или, при малых  $x$  и  $n_{sf}$ ,  $F_A(\beta_1) \approx 1 - n_{sf}$ ,  $F_A(\beta_2) \approx x + n_{sf}$ .

Таким образом, даже при  $x = 0$  ( $T \neq 0$ ) получаем  $F_A(\beta_2) \neq 0$ , т.е. эффект спинового полярона должен приводить к формированию внутрищелевых состояний даже в недопированных соединениях  $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$  и  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  при ненулевой температуре.

Расщепляя уравнения движения на электронную функцию Грина  $\hat{G}_{k\sigma}$ , для  $t-t'-t''-J$ -модели в приближении Хаббард-I, но учитывая перенормировки чисел заполнения (1), что соответствует учету главных при низких температурах вкладов в массовый оператор [18], получаем спектр квазичастиц

$$E_{k\uparrow}^{\pm} = \varepsilon_1 - \mu + \frac{1}{2} \left[ t_k^A + t_k^{A'} - J_0^B - J_0^A - J_0^{A'} \pm K_k \right], \quad (3)$$

где

$$K_k = \sqrt{(t_k^A + t_k^{A'} - J_0^B + J_0^A + J_0^{A'})^2 (1 - 2n_{sf})^2 + 4(t_k^B)^2 (1 - n_{sf}) n_{sf}},$$

$t_k^B$  ( $J_0^B$ ) — перескок (обмен) в импульсном пространстве между ближайшими соседями,  $t_k^A$ ,  $t_k^{A'}$  ( $J_0^A$ ,  $J_0^{A'}$ ) — между вторыми и третьими соседями.

Спектральные функции  $A_{k\sigma}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [\text{Sp} \hat{G}_{k\sigma}]$  можно представить в виде

$$\begin{aligned} A_{k\uparrow}(E) &= u_k^2 \delta(E - E_{k\uparrow}^+) + v_k^2 \delta(E - E_{k\uparrow}^-), \\ A_{k\downarrow}(E) &= v_k^2 \delta(E - E_{k\downarrow}^+) + u_k^2 \delta(E - E_{k\downarrow}^-), \end{aligned} \quad (4)$$

где

$$u_k^2 = \frac{1}{2} - (1 - 2n_{sf})^2 \frac{(J_0^B - J_0^A - J_0^{A'} - t_k^A - t_k^{A'})}{2\Delta E_k},$$

$$v_k^2 = 1 - u_k^2, \quad \Delta E_k \equiv E_{k\uparrow}^+ - E_{k\uparrow}^-.$$

С учетом перескоков до третьих соседей имеем

$$t_k^B = 2t(\cos k_x + \cos k_y), \quad t_k^A = 4t' \cos k_x \cos k_y,$$

$$t_k^{A'} = 2t''(\cos 2k_x + \cos 2k_y),$$

$$J_0^B = 4J, \quad J_0^A = 4J', \quad J_0^{A'} = 4J''.$$

Если обратить  $n_{sf}$  в нуль, то немедленно получим одно бездисперсионное состояние и одно состояние с дисперсией, определяемой внутривузельными перескоками  $t'$  и  $t''$ ,

$$E_{k\uparrow}^- \Big|_{n_{sf}=0} = \varepsilon_1 - \mu - J_0^A - J_0^{A'},$$

$$E_{k\uparrow}^+ \Big|_{n_{sf}=0} = \varepsilon_1 - \mu + t_k^A + t_k^{A'} - J_0^B. \quad (5)$$

Для  $n_{sf} = 0$  имеем  $u_k^2 = 0$ ,  $v_k^2 = 1$ , и остается только одна отличная от нуля спектральная функция

$A_{k\uparrow}(E) = \delta(E - E_{k\uparrow}^-)$ , соответствующая потолку валентной зоны для  $p$ -типа купратов (состоянию с дисперсией (5)).

Поскольку параметры перескоков и обмена в  $t-t'-t''-J$ -модели были получены в LDA + GTB-методе [15], единственным неизвестным параметром задачи является концентрация магнонов  $n(T)$ . Следующий раздел посвящен вычислению этого параметра или, точнее, вычислению подрешеточной намагниченности (2).

### 3. Температурная зависимость спектральных функций

Поскольку, как отмечено в предыдущем разделе, спектральный вес квазичастиц пропорционален концентрации магнонов, эволюция спектральных функций с температурой будет определяться в основном именно температурной зависимостью этой концентрации. Ранее, анализируя эксперименты по нейтронному рассеянию, мы оценили концентрацию магнонов как  $n(0) \approx 0.138$  [13]. Однако для выяснения температурной зависимости спектральных пиков такой оценки недостаточно. Недопированные купраты являются АФМ-диэлектриками, поэтому для описания спиновой подсистемы и вычисления зависимости концентрации магнонов от температуры воспользуемся квазидвумерной моделью Гейзенберга для спина 1/2. Поскольку в работе [19] было показано, что в этой модели учет слабой внутривузельной спиновой анизотропии  $\eta$  существенно влияет на температуру Нееля, мы также исследуем влияние этого параметра на зависимость  $n_{sf}$  от температуры.

Запишем гамильтониан модели Гейзенберга в следующем виде:

$$\begin{aligned} \hat{H} = J & \left( \sum_{i,\delta_1} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+\delta_1} + \eta \sum_{i,\delta_1} S_i^z S_{i+\delta_1}^z + \lambda_2 \sum_{i,\delta_2} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+\delta_2} \right. \\ & \left. + \lambda_3 \sum_{i,\delta_3} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+\delta_3} + \sum_{i,\delta_{\perp j}} \lambda_{\perp j} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+\delta_{\perp j}} \right), \end{aligned}$$

где  $J$  — обменное взаимодействие между ближайшими соседями,  $\lambda_2$  и  $\lambda_3$  ( $\lambda_i = J_i/J$ ,  $i = 2, 3$ ) описывают внутривузельные обмены между вторыми и третьими соседями соответственно,  $\eta$  — внутривузельная спиновая анизотропия,  $\lambda_{\perp j}$  описывают межвузельные обмены. В недопированном режиме низкотемпературная фаза  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  является орторомбической, но по мере допирования кристаллическая структура  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  становится тетрагональной (так называемая  $T$ -структура); такая структура характерна для сверхпроводящей фазы. По этой причине во многих работах рассматривается именно тетрагональная структура даже при изучении недопированного LSCO. Правомочность этого подхода проиллюстрирована в работе [19]. Мы также будем работать с тетрагональной структурой LSCO.

Точное уравнение движения для  $S_l^+$  линейзуется в приближении Тябликова [20]

$$\begin{aligned}
 i\dot{S}_l^+ = & 2J \left( \sum_{\delta_1} \langle S_l^z \rangle S_{l+\delta_1}^+ - (1+\eta) \sum_{\delta_1} \langle S_{l+\delta_1}^z \rangle S_l^+ \right. \\
 & + \lambda_2 \sum_{\delta_2} \langle S_l^z \rangle S_{l+\delta_2}^+ - \lambda_2 \sum_{\delta_2} \langle S_{l+\delta_2}^z \rangle S_l^+ \\
 & + \lambda_3 \sum_{\delta_3} \langle S_l^z \rangle S_{l+\delta_3}^+ - \lambda_3 \sum_{\delta_3} \langle S_{l+\delta_3}^z \rangle S_l^+ \\
 & + \lambda_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}^{FM}} \langle S_l^z \rangle S_{l+\delta_{\perp}^{FM}}^+ - \lambda_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}^{FM}} \langle S_{l+\delta_{\perp}^{FM}}^z \rangle S_l^+ \\
 & \left. + \lambda_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}^{AFM}} \langle S_l^z \rangle S_{l+\delta_{\perp}^{AFM}}^+ - \lambda_{\perp} \sum_{\delta_{\perp}^{AFM}} \langle S_{l+\delta_{\perp}^{AFM}}^z \rangle S_l^+ \right).
 \end{aligned}$$

Для расчета термодинамических свойств используем двухвременные запаздывающие коммутаторные функции Грина при конечных температурах ( $f \in A$ ,  $g \in B$ , где  $A$  и  $B$ -магнитные подрешетки)

$$\begin{aligned}
 \langle \langle S_f^+ | S_{f'}^- \rangle \rangle_E &= \frac{2}{N} \sum_k G_k^{AA}(E) e^{ik(f-f')}, \\
 \langle \langle S_g^+ | S_{f'}^- \rangle \rangle_E &= \frac{2}{N} \sum_k G_k^{BA}(E) e^{ik(g-f')}.
 \end{aligned}$$

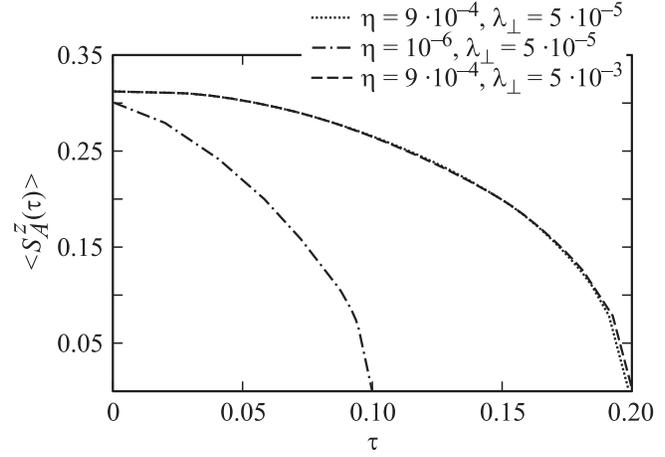
В импульсном представлении получаем следующие выражения для функций Грина:

$$\begin{aligned}
 G_k^{AA}(E) &= \frac{2S(E + Sn(k))}{E^2 - S^2(n^2(k) - I^2(k))} \equiv \frac{2S(E + Sn(k))}{E^2 - S^2E^2(k)}, \\
 G_k^{BB}(E) &= \frac{2S(E - Sn(k))}{E^2 - S^2(n^2(k) - I^2(k))} \equiv \frac{2S(E - Sn(k))}{E^2 - S^2E^2(k)}, \\
 G_k^{AB} = G_k^{BA}(E) &= -\frac{2S^2I(k)}{E^2 - S^2(n^2(k) - I^2(k))} \\
 &\equiv -\frac{2S^2I(k)}{E^2 - S^2E^2(k)},
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 n(k) &= 2J \left[ (1-\eta)z_1 + \frac{z_{\perp}}{2} \lambda_{\perp} - \lambda_2 z_2 (1 - \cos k_x \cos k_y) \right. \\
 &\quad \left. - \lambda_3 z_3 \left( 1 - \frac{\cos 2k_x + \cos 2k_y}{2} \right) \right. \\
 &\quad \left. - \frac{z_{\perp} \lambda_{\perp}}{2} \left( 1 - \cos \frac{(k_x - k_y)}{2} \cos \frac{k_z}{2} \right) \right], \\
 I(k) &= 2J \left[ \frac{z_1}{2} (\cos k_x + \cos k_y) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{z_{\perp} \lambda_{\perp}}{2} \cos \frac{(k_x + k_y)}{2} \cos \frac{k_z}{2} \right].
 \end{aligned}$$

Здесь  $z_i$  ( $i = 1, 2, 3, \perp$ ) — число соответствующих соседей. Таким образом, для  $S = 1/2$  самосогласованное



**Рис. 2.** Температурная зависимость подрешеточной намагниченности для трех различных наборов параметров  $\eta$  и  $\lambda_{\perp}$  ( $J = 0.141$  eV,  $\lambda_2 = \lambda_3 = 0.0942$  [19]). Здесь шкала температуры приведена в безразмерных единицах:  $\tau = T/J$ .

уравнение для АФМ-параметра порядка  $S(\tau)$  можно представить в виде ( $\tau = \frac{T}{J}$  — безразмерная температура)

$$S(\tau) = \frac{1/2}{I(\tau)}, \quad I(\tau) = \frac{2}{N} \sum_k \frac{n(k)}{E(k)} \coth \frac{S(\tau)E(k)}{2\tau}. \quad (6)$$

При  $\tau \rightarrow 0$  ( $\coth x \rightarrow 1$ ) получаем намагниченность при нулевой температуре

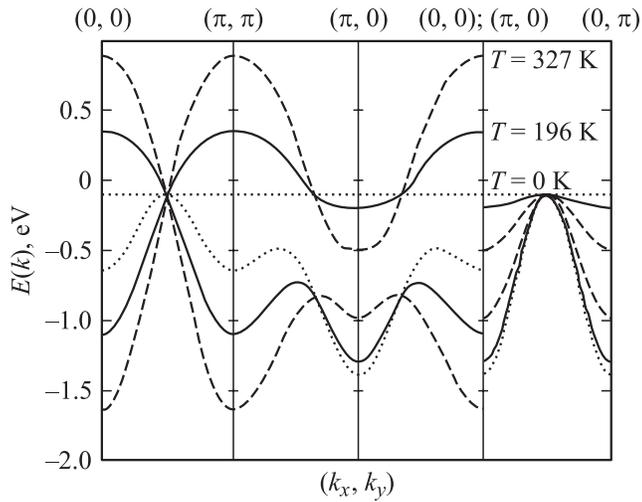
$$S(0) = \frac{1/2}{I_1}, \quad I_1 = \frac{2}{N} \sum_k \frac{n(k)}{E(k)}.$$

В другом пределе  $\tau \rightarrow \tau_N$  ( $\tau_N$  — температура Нееля)  $S(\tau) \rightarrow 0$ . Так как  $\coth(x) \rightarrow \frac{1}{x}$  при  $x \rightarrow 0$ , из (6) следует выражение для критической температуры

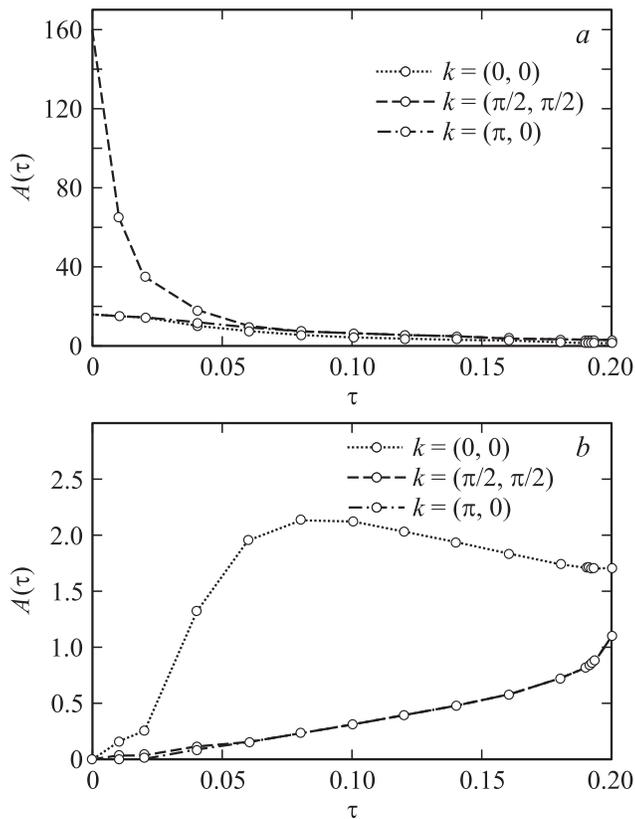
$$\tau_N = \frac{1/4}{I_2}, \quad I_2 = \frac{2}{N} \sum_k \frac{n(k)}{E^2(k)}.$$

На рис. 2 представлена температурная зависимость подрешеточной намагниченности для трех различных наборов параметров  $\eta$  и  $\lambda_{\perp}$  ( $J = 0.141$  eV,  $\lambda_2 = \lambda_3 = 0.0942$  [19]). Видно, что влияние внутриплоскостной анизотропии  $\eta$  на намагниченность гораздо сильнее, чем влияние межплоскостного обмена. Увеличение анизотропии стабилизирует АФМ-порядок, и температура Нееля увеличивается. Наилучшее согласие с экспериментальной величиной температуры Нееля  $T_N = 325 \pm 5$  К [21–23] дает следующая комбинация параметров:  $\eta = 9 \cdot 10^{-4}$  и  $\lambda_{\perp} = 5 \cdot 10^{-5}$ . В дальнейших расчетах использовались такие параметры. Намагниченность при нулевой температуре с данными параметрами равна  $S(0) = 0.3119$ .

На рис. 3 показаны законы дисперсии квазичастиц при различных значениях температуры:  $T_1 = 0$  К,  $T_2 = 196$  К,  $T_3 = 327$  К. Параметры  $t-t'-J$ -модели для



**Рис. 3.** Законы дисперсии квазичастиц вдоль основных направлений зоны Бриллюэна квадратной решетки для различных значений температуры:  $T_1 = 0$  К (пунктирная линия),  $T_2 = 196$  К (сплошная линия),  $T_3 = 327$  К (штриховая линия).



**Рис. 4.** Зависимость спектральных функций от температуры ( $\tau = T/J$ ) в трех симметричных точках зоны Бриллюэна: амплитуды основных пиков (a) и амплитуды внутрищелевых (in-gap) спутников (b).

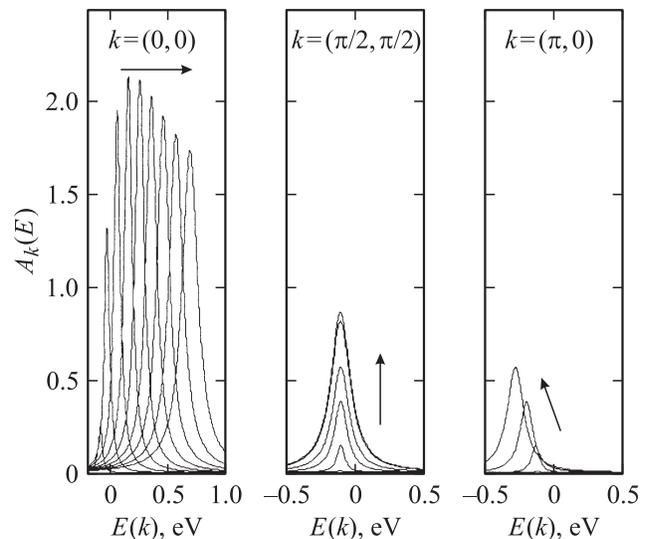
купратов  $p$ -типа взяты из табл. IV работы [15] и равны  $t = 0.679$  eV,  $t' = -0.093$  eV,  $J = 0.141$  eV,  $J' = J'' = 0.013$  eV. Имеет место уменьшение расстоя-

ния между двумя ветвями спектра квазичастиц в точках  $(\pi, 0)$  и  $(\pi/2, \pi/2)$  с ростом температуры.

На рис. 4 приведена зависимость спектральных функций от температуры в нескольких симметричных точках зоны Бриллюэна. Принятое приближение не содержит информации о ширине спектральных линий, поскольку в выражения для спектральных функций входят обычные дельта-функции. Мы использовали искусственное уширение спектральных пиков с помощью лоренциана с полушириной  $\delta = \sqrt{E^2 + \pi^2 T^2}$ , соответствующей нефермижидкостной картине [24,25], где полагали  $E = 0.02$  eV, т.е. значению экспериментального разрешения ARPES экспериментов. Помимо основного спектрального пика для отличных от нуля значений  $n_{sf}$  появляется небольшой спутник при энергиях выше  $-0.5$  eV. Этот спутниковый пик и есть внутрищелевое состояние, обусловленное эффектом спинового полярона, со спектральным весом, пропорциональным  $n_{sf}(T)$ . При увеличении температуры спектральный вес внутрищелевого состояния, пропорциональный  $n_{sf}(T)$ , увеличивается, что приводит к увеличению интенсивности соответствующего ему спектрального пика во всех точках зоны Бриллюэна. Такая картина качественно согласуется с результатами работы [26], где аналогичные расчеты были выполнены в  $t-t'-t''-J$ -модели методом точной диагонализации.

## 4. Заключение

В настоящей работе влияние температуры учитывалось посредством температурных перенормировок концентрации магнонов, которая была вычислена в модели Гейзенберга с учетом слабых межплоскостного обмена и внутривплоскостной спиновой анизотропии. Вследствие сильных корреляций перенормировки чисел заполнения



**Рис. 5.** Зависимость спектральных функций внутрищелевых спутников от безразмерной температуры  $\tau$  в трех симметричных точках зоны Бриллюэна. Стрелками показано направление роста температуры.

приводят не только к изменению интенсивности пиков спектральных функций, но и к изменению их энергий, т.е. к изменению импульсной зависимости спектра квазичастиц. Это приводит к тому, что с ростом температуры изменяются как взаимное расположение энергий пиков (рис. 5), так и их интенсивности. Наибольшие сдвиги спутанных пиков имеют место в точке  $(0, 0)$ , однако из-за малости матричного элемента возбуждения фотоэлектрона в окрестности точки  $\Gamma$  эти изменения недоступны в ARPES-экспериментах. Поэтому мы предлагаем исследовать рост интенсивности спутанных пиков в точках  $(\pi, 0)$  и  $(\pi/2, \pi/2)$ , указанный стрелками на рис. 5, что вполне доступно ARPES-измерениям. Эффекты конечного времени жизни квазичастиц, происходящие из-за рассеяния на термических и спиновых флуктуациях, были смоделированы введением вместо дельта-функций в (4) лоренциана конечной ширины. В данном подходе не учитывается сильная  $k$ -зависимость затухания квазичастиц, которая может привести к существенному размытию спектральных пиков в некоторых  $k$ -точках и невозможности их экспериментального наблюдения. Однако, как показывает наше исследование, при комнатных температурах интенсивность спутанного спектрального пика ненулевая при всех значениях импульса, потому что сильное подавление интенсивности в некоторых  $k$ -точках не исключает возможности наблюдения внутрищелевого состояния.

## Список литературы

- [1] M. Suzuki. Phys. Rev. B **39**, 2312 (1989).
- [2] S. Uchida, T. Ido, H. Takagi, T. Arima, Y. Tokura, S. Tajima. Phys. Rev. B **43**, 7942 (1991).
- [3] А.В. Баженов, А.В. Горбунов, В.Е. Тимофеев. ЖЭТФ **104**, 3193 (1993).
- [4] W. Stephan, P. Horsch. Phys. Rev. Lett. **66**, 2258 (1991).
- [5] E. Dagotto, A. Moreo, F. Ortolani, J. Riera, D.J. Scalapino. Phys. Rev. Lett. **67**, 1918 (1991).
- [6] Y. Ohta, K. Tsutsui, W. Koshibae, T. Shimoizato, S. Maekawa. Phys. Rev. B **46**, 14 022 (1992).
- [7] R. Press, W. Hanke, W. von der Linden. Phys. Rev. Lett. **75**, 1344 (1995).
- [8] N. Harima, J. Matsuno, A. Fujimori, Y. Onose, Y. Taguchi, Y. Tokura. Phys. Rev. B **64**, 220 507R (2001).
- [9] Yu. Gaididei, V. Loktev. Phys. Status Solidi B **147**, 307 (1988).
- [10] S.G. Ovchinnikov, I.S. Sandalov. Physica C **161**, 607 (1989).
- [11] В.А. Гавричков, С.Г. Овчинников, А.А. Борисов, Е.Г. Горячев. ЖЭТФ **118**, 422 (2000).
- [12] V. Gavrichkov, A. Borisov, S.G. Ovchinnikov. Phys. Rev. B **64**, 235 124 (2001).
- [13] S.G. Ovchinnikov, A.A. Borisov, V.A. Gavrichkov, M.M. Korshunov. J. Phys.: Cond. Mater **16**, L93 (2004).
- [14] В.А. Гавричков, С.Г. Овчинников. ЖЭТФ **125**, 630 (2004).
- [15] M.M. Korshunov, V.A. Gavrichkov, S.G. Ovchinnikov, I.A. Nekrasov, Z.V. Pchelkina, V.I. Anisimov. Phys. Rev. B **72**, 165 104 (2005).
- [16] М.М. Коршунов, С.Г. Овчинников. ФТТ **43**, 399 (2001).
- [17] Р.О. Зайцев. ЖЭТФ **68**, 207 (1975).
- [18] А.Н. Подмарков, И.С. Сандалов. ЖЭТФ **86**, 1461 (1984).

- [19] M. Manojlović, M. Pavkov, M. Škrinjar, M. Pantić, D. Kapor, S. Stojanović. Phys. Rev. B **68**, 014 435 (2003).
- [20] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. 2-е изд. Наука, М. (1975).
- [21] R.J. Brigneau, M. Greven, M.A. Kaster, Y.S. Lee, B.O. Wells, G. Shirane. Cond-mat/9903124.
- [22] J. Rossat-Mignod, L.P. Regnault, P. Bourges, P. Burlet, C. Vettier, J.Y. Henry. Frontiers in solid state sciences: magnetism and superconductivity. World Scientific, Singapore (1994).
- [23] B. Keimer, N. Belk, R.J. Brigneau, A. Cassanho, C.Y. Chen, R.W. Irwin, G. Shirane. Phys. Rev. B **46**, 14 034 (1992).
- [24] C.M. Varma, P.B. Littlewood, S. Schmitt-Rink. Phys. Rev. Lett. **63**, 1996 (1989).
- [25] M.M. Zemljic, P. Prelovsek. Phys. Rev. B **75**, 104 514 (2007).
- [26] Y. Shibata, T. Tohyama, S. Maekawa. Phys. Rev. B **59**, 1840 (1999).