

На правах рукописи



Кузьмин Валерий Ипполитович

**ВЛИЯНИЕ БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА НА ЭЛЕКТРОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ
СВОЙСТВА СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Красноярск – 2020

Работа выполнена в Институте физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (ИФ СО РАН)

Научный руководитель: Овчинников Сергей Геннадьевич, д. ф.-м. н., профессор, руководитель научного направления «Магнетизм» Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук».

Официальные оппоненты: Некрасов Игорь Александрович, д. ф.-м. н., профессор РАН, член-корреспондент РАН, главный научный сотрудник лаборатории теоретической физики Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук»,

Стрельцов Сергей Владимирович, д. ф.-м. н., профессор РАН, член-корреспондент РАН, заведующий лабораторией теории низкоразмерных спиновых систем Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук».

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт физики высоких давлений имени Л. Ф. Верещагина Российской академии наук».

Защита состоится « 27 » ноября 2020 г. в 16:00 на заседании диссертационного совета Д 003.075.01 в ИФ СО РАН по адресу: 660036, г. Красноярск, Академгородок, 50, строение 38. С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФ СО РАН и на сайте <http://kirensky.ru>.

Автореферат разослан «__» _____ 2020 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук



Втюрин Александр Николаевич

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

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

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

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

Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие задачи:

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

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

Проведено детальное исследование температурной эволюции электронной структуры в модели Хаббарда и впервые показано, что изменения электронной структуры и ближнего антиферромагнитного порядка с допированием и температурой в значительной степени схожи и происходят в три стадии: сильной

псевдощели, слабой псевдощели и Ферми-жидкости, что коррелирует с данными фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением для ВТСР купратов.

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

Достоверность полученных результатов достигнута применением кластерной теории, корректно учитывающей ближние корреляции в сильно коррелированных системах. Полученные результаты в частных случаях находятся в согласии, а в остальных случаях не противоречат результатам, полученными другими авторами различными методами, в том числе, квантовым Монте-Карло, динамическим кластерным приближением, кластерной теорией возмущений, обобщенным приближением среднего поля и другими. Основные закономерности температурной и концентрационной зависимости электронной структуры, полученные в рамках модели Хаббарда, согласуются качественным образом с данными экспериментов по фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES). Аналогичным образом, основные черты фазовой диаграммы, рассчитанной в рамках эффективного спинового гамильтониана для модели Канамори, согласуются с данными экспериментов по Мёссбауэровской спектроскопии.

Основные положения, выносимые на защиту.

1. Кластерная теория возмущений может использоваться для выяснения критериев применимости упрощенных вариантов $t - J$ модели вместо модели Хаббарда вблизи половинного заполнения.
2. Изменение критериев применимости упрощенных вариантов $t - J$ модели вместо модели Хаббарда при малом допировании может быть получено в рамках кластерной теории возмущений.

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

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

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

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

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на семинарах в Институте физики им. Л.В. Киренского, а также были представлены на следующих международных и всероссийских конференциях и школах:

1. Международная зимняя школа физиков-теоретиков «КОУРОВКА-XXXV», ИФМ УРО СО РАН, Екатеринбург, Россия, 2014

2. School and workshop on strongly correlated electronic systems – novel materials and novel theories, ICTP, Trieste, Italy, 2015

3. V международная конференция «Фундаментальные проблемы высокотемпературной сверхпроводимости», ФИАН, Москва, Россия, 2015

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

Публикации. Основные результаты диссертации изложены в трех статьях в рецензируемых журналах, индексируемых базами Web of Science и Scopus, а также входящих в перечень ВАК РФ.

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

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы, изложена на 103 страницах, включает 39 рисунков. Список цитируемой литературы включает 180 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Первая глава диссертации посвящена обзору особенностей электронной структуры и магнитных свойств ВТСП купратов, систем со спиновыми кроссоверами, микроскопических моделей этих соединений, а также методов теоретического исследования сильно коррелированных систем.

Первый раздел **Главы 1** содержит информацию об особенностях электронной структуры ВТСП купратов, в частности, о псевдощелевом состоянии и его концентрационной и температурной эволюции. Также в нем представлены сведения об основных моделях CuO_2 плоскости, из которых базовой является модель Эмери. Низкоэнергетическую структуру модели Эмери отражает модель Хаббарда, для которой, в свою очередь, существуют эффективная низкоэнергетическая $t - J^*$ модель и ее упрощение - $t - J$ модель.

Второй раздел **Главы 1** посвящен явлению спинового кроссовера. Во-первых, в ней обсуждается суть данного явления на уровне иона в кристаллическом поле. Затем вводится проблема учета кооперативных эффектов и приводится описание минимальной модели - двухорбитальной модели Канамори с двумя электронами на узел, из которой следует эффективный спиновый гамильтониан, используемый в вычислениях в рамках данной диссертации.

В третьем разделе **Главы 1** приводится краткое обсуждение основных методов расчета электронной структуры в моделях сильно коррелированных электронных систем и место среди них кластерной теории возмущений, которая является основным методом в данной диссертации.

В четвертом разделе **Главы 1** излагаются подробности реализации кластерной теории возмущений в данной работе.

В пятом разделе **Главы 1** сформулированы цель и задачи настоящей диссертации.

Глава 2 представляет результаты по сравнению электронных структур модели Хаббарда и двух вариантов ее эффективной низкоэнергетической модели, $t - J^*$ и $t - J$ моделей, первая из которых содержит трехцентровые коррелированные перескоки, а во второй ими пренебрегается. Сравнение осуществляется в рамках кластерной теории возмущений с кластером 2×2 с учетом ближних корреляций между первыми и вторыми соседями.

Сравнение приводит к выводу о соответствии электронных структур всех трех моделей вблизи половинного заполнения на масштабе энергий $\omega \sim J$, где J - обменный интеграл. На высокоэнергетическом масштабе дисперсии в $t - J$ модели и модели Хаббарда значительно отличаются, но практически совпадают для модели Хаббарда и $t - J^*$ модели.

Рассмотрение электронной структуры трех моделей при невысоком значении кулоновского отталкивания, $U = 6t$, позволяет прийти к еще одному выводу. В области малой концентраций дырок дисперсия в $t - J$ модели даже на низкоэнергетическом масштабе заметно отличается по энергии и спектральному весу от двух других моделей. Тем не менее, для модели Хаббарда и $t - J^*$ модели законы дисперсии как при низких, так и при высоких энергиях похожи друг на друга, но спектральные веса в $t - J^*$ модели заметно отличаются по сравнению с моделью Хаббарда как для низкоэнергетических, так и высокоэнергетических спектров.

В **Главе 3** исследуются концентрационная и температурная эволюции электронной структуры в модели Хаббарда.

В первом разделе **Главы 3** исследуется концентрационная зависимость электронной структуры и ее корреляция с магнитным ближним порядком в системе при $T = 0$ в модели Хаббарда в рамках кластерной теории возмущений с кластером 4×4 (с учетом корреляций до девятой координационной сферы).

Эволюция распределения спектрального веса на уровне Ферми представлена на Рисунке 1 для основного набора параметров: $U = 8t, t' = -0.2t, t'' = 0.15t$, где t' и t'' - интегралы перескока между вторыми и третьими соседями. Данные согласуются с известными из ARPES фактом о росте Ферми-арки с допированием и ее трансформации в большую Ферми поверхность, а также отражают зависимость от допирования поверхности Ферми купратов $Tl_2Ba_2CuO_{6+\delta}$ и $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, в которых даже при весьма высоких значениях допирования не замечено топологического перехода от дырочной Ферми-поверхности вокруг точки (π, π) к электронной поверхности вокруг точки $(0, 0)$.

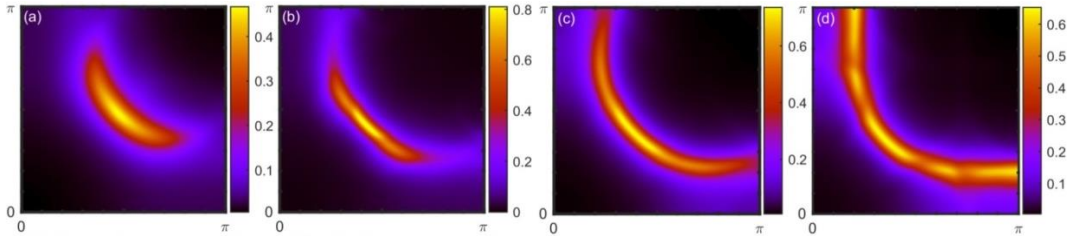


Рисунок 1. Карта распределения спектрального веса на поверхности Ферми при $T = 0$ при дырочном допировании (a) ≈ 0.05 , (b) $p \approx 0.13$, (c) $p \approx 0.19$, (d) $p = 0.25$.

Вместе с поверхностью Ферми рассмотрены детально отношение R антинодального к нодальному спектральных весов и симметризованная относительно уровня Ферми спектральная функция, как приведено на Рисунке 2 (a). При малых допированиях, соответствующих Ферми-арке [см. Рисунок 1 (a), (b)] отношение R является практически постоянным и достаточно малым - такое

состояние с $R \ll 1$ обозначим сильной псевдощелью - SPG (Strong pseudogap), которая видна в виде ярко выраженного провала на уровне Ферми на Рисунке 2(b). При допировании $p \gtrsim 0.15$ проявляется значительный рост отношения R , поверхность Ферми близка к Ферми-жидкостной [см. Рисунок 1 (c)], но псевдощель еще открыта, как видно из Рисунка 2. Такое состояние с $R \lesssim 1$ в дальнейшем называем слабой псевдощелью - WPG (Weak pseudogap). При большом допировании $p = 0.25$ имеем поведение, характерное для слабокоррелированного металла [см. Рисунок 1 (d), Рисунок 2 (b)], обозначаемое в дальнейшем нормальной Ферми-жидкостью - NFL (Normal Fermi liquid).

Анализ внутрикластерной спиновой корреляционной функции, приведенной до пятой координационной сферы на Рисунке 3, показывает, что переход от сильной к слабой псевдощели сопровождается ослаблением ближнего антиферромагнитного (АФМ) порядка. Ближний АФМ характеризуется следующим чередованием знаков корреляционных функций: $C_1 < 0, C_2 > 0, C_3 > 0, C_4 < 0$ и $C_5 > 0$ и присутствует при $p = 0, p = 0.0625$ и $p = 0.125$. При дальнейшем допировании коррелятор на третьей координационной сфере меняет знак, что говорит о фрустрации АФМ. При высоком допировании, $p = 0.25$, наблюдается слабо коррелированный случай, когда значительно по величине только значение C_1 .

В конце раздела проведен аналогичный анализ спектральной функции и спиновых корреляторов для другого набора параметров - с нулевым интегралом перескока между третьими соседями. При данном наборе наблюдается эволюция электронной структуры, характерная для другого купрата, $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, для которого в ARPES наблюдается топологический переход от дырочной Ферми поверхности вокруг точки (π, π) к электронной поверхности вокруг $(0,0)$. В результате сделаны аналогичные выводы.

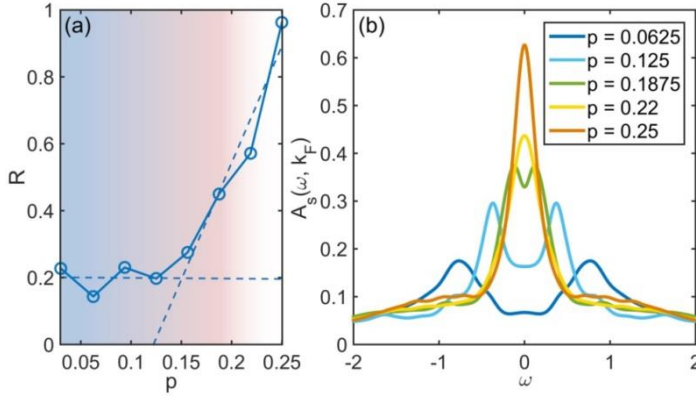


Рисунок 2. (a) Величина R в зависимости от допирования; пунктирные линии получены линейной аппроксимацией; (b) симметризованный антинодальный спектр.

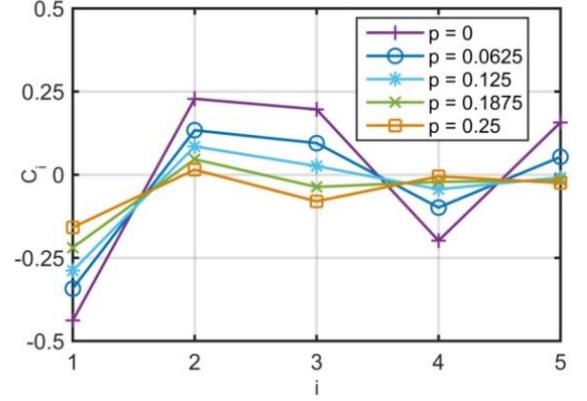


Рисунок 3. Спиновые корреляторы (1) в зависимости от допирования при $T = 0$. По оси абсцисс номер координационной сферы.

Во втором разделе **Главы 3** исследуется эволюция электронной структуры с температурой при допировании $p = 1/6$ с использованием кластера из двенадцати узлов. В начале показано, что результаты для кластера 4×4 и двенадцатиузельного обладают достаточным сходством для их сопоставления, а также, что температурная зависимость спектров при половинном заполнении находится в качественном согласии с результатами квантового Монте-Карло [3].

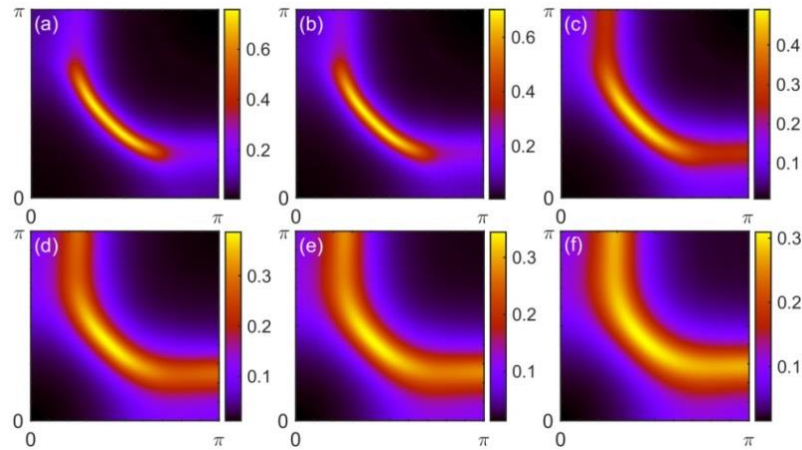


Рисунок 4. Карта распределения спектрального веса на уровне Ферми, полученная с 12-узельным кластером при допировании $p = 1/6$ и обратной температуре (a) $\beta = 10000/t$, (b) $\beta = 24/t$, (c) $\beta = 12/t$, (d) $\beta = 8/t$, (e) $\beta = 6/t$, (f) $\beta = 4/t$. Для $t = 0.1$ eV этим значениям соответствует температура (в K): (a) 0.1, (b) 48, (c) 97, (d) 145, (e) 193, (f) 290.

Далее для основного набора параметров $U = 8t, t' = -0.2t, t'' = 0.15t$ проводится анализ спектральной функции и спиновых корреляторов в зависимости от обратной температуры β , аналогичный предыдущему разделу. Имеется рост Ферми-арки с температурой в качественном согласии с ARPES (см. Рисунок 4). Аналогично можно выделить случай сильной псевдощели при малых температурах, которому соответствует ближний АФМ. Дальнейшее нагревание приводит к переходу SPG-WPG при $\beta \sim 12/t$ с нарушением ближнего АФМ (коррелятор для третьей координационной сферы меняет знак). При еще большем нагревании происходит переход WPG-NFL: при $\beta \sim 4/t$ имеется слабо коррелированное состояние с большой Ферми поверхностью.

Третий раздел **Главы 3** посвящен сравнению эволюции спектральных свойств с допированием и температурой с переходами Лифшица с перестройкой топологии поверхности Ферми, которые были получены в рамках обобщенного приближения среднего поля (далее, GMFA - generalized mean field approximation) в $t - J^*$ модели для ВТСП купратов [4]. Такое сравнение приводится на Рисунке 5.

В целом наблюдается качественное согласие во всех трех случаях. Тем не менее, в GMFA реализуются только замкнутые Ферми-карманы, что находится в противоречии с данными ARPES, где наблюдаются Ферми-арки в псевдощелевой фазе, с длиной, зависящей от допирования и температуры. Такое поведение реализуется, только если за счет электронной собственной энергии будет подавлен спектральный вес на части Ферми-контура. В представленных здесь вычислениях именно такое поведение имеет место. В рамках данной работы нельзя сделать утверждение, что наблюдаемые переходы являются резкими переходами Лифшица. Возможно, переходы от SPG к WPG при T_1^* и от WPG к NFL при T^* , схематически изображенные на Рисунке 5 (d), являются кроссоверами, а не резкими переходами, в силу динамических вкладов в собственно-энергетическую часть на уровне Ферми.

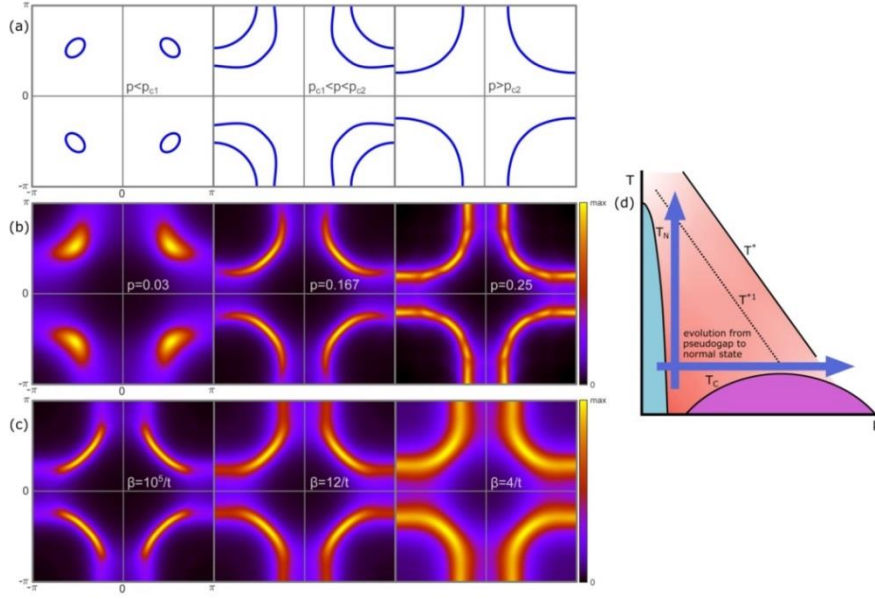


Рисунок 5. (а) Схематическое изображение Ферми-поверхности в GMFA для трех значений допирования, разделенных тремя переходами Лифшица, (b) результат СРТ с использованием кластера 4×4 при $T = 0$, (c) результат СРТ с использованием 12-узельного кластера при $p = 1/6$ для различных температур, (d) предполагаемая схема фазовой диаграммы, вытекающей из данных расчетов: стрелки обозначают два направления, изучаемые в данной работе, T_N - температура Нееля, T_c - температура сверхпроводящего перехода, T^* - температура псевдощели (переход WPG-NFL), T_1^* - переход SPG-WPG.

Последняя **Глава 4** посвящена исследованию негейзенберговских эффектов в системах со спиновыми кроссоверами по давлению в рамках эффективного спинового гамильтониана для двухзонной модели Канамори с двумя электронами на узел, который описывает ион с двумя состояниями - высокоспиновое (HS - high spin) $S = 1$ - и низкоспиновое (LS - low spin) $S = 0$ - состояния, и межатомное обменное взаимодействие высокоспиновых ионов

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

где J - параметр обменного взаимодействия, $\mathbf{S}_i$ - оператор спина $S = 1$, n_i - оператор числа электронов в HS состоянии, последнее слагаемое в (2) описывает LS термы, ε_s - параметр разницы энергий для HS и LS состояний, или спиновая щель, пропорциональная внешнему давлению.

В первом разделе **Главы 4** приведены результаты вычислений в рамках кластерной теории среднего поля с кластером 2×2 . Получена фазовая диаграмма в координатах спиновая щель - температура, включающая неелевский АФМ и немагнитную фазу, фазовый переход второго рода по температуре в гейзенберговском пределе и фазовый переход первого рода по давлению в окрестности спинового кроссовера. С использованием параметров из экспериментов по Мёссбауэровской спектроскопии под высоким давлением в алмазных наковальнях на соединении ферропериклаз $(\text{Mg}, \text{Fe})\text{O}$ [5], получена нетривиальная зависимость константы Кюри парамагнитной восприимчивости (Рисунок 6), определяемой формулой

$$C = \mu^2(1 - n_{LS})S(S + 1). \quad (3)$$

При давлении на несколько процентов ниже критического увеличение температуры приводит к простому уменьшению эффективного магнитного момента. При давлении ниже критического примерно на один процент магнитный момент оказывается практически независимым от температуры. Очень близко к критическому давлению имеется заметная LS-составляющая при температуре Нееля, и тепловые флуктуации приводят к увеличению HS-составляющей. Выше критического давления с увеличением давления замедляется температурный рост эффективного магнитного момента.

Смоделирована зависимость намагниченности от допирования и температуры в $(\text{Mg}, \text{Fe})\text{O}$. Фазовая диаграмма намагниченности представлена на Рисунке 7 (а). В широком диапазоне давлений реализуется гейзенберговское поведение, при котором температура Нееля линейно растет с давлением. Далее она достигает максимума и при $P \approx P_c$ резко обращается в ноль, как следствие фазового перехода первого рода. Отклонения от гейзенберговского поведения проявляются при $P \sim 51$ GPa для $T = 0$ и при $P \sim 45$ GPa вблизи комнатной температуры, как видно из спиновых корреляторов на Рисунке 7 (b). Также видно нетривиальную возвратную зависимость от температуры для спиновой корреляционной функции. При давлении немного выше критического основное

состояние низкоспиновое диамагнитное, но с ростом температуры проявляются парамагнитные корреляции ближнего порядка, постепенно уменьшающиеся с дальнейшим ростом температуры.

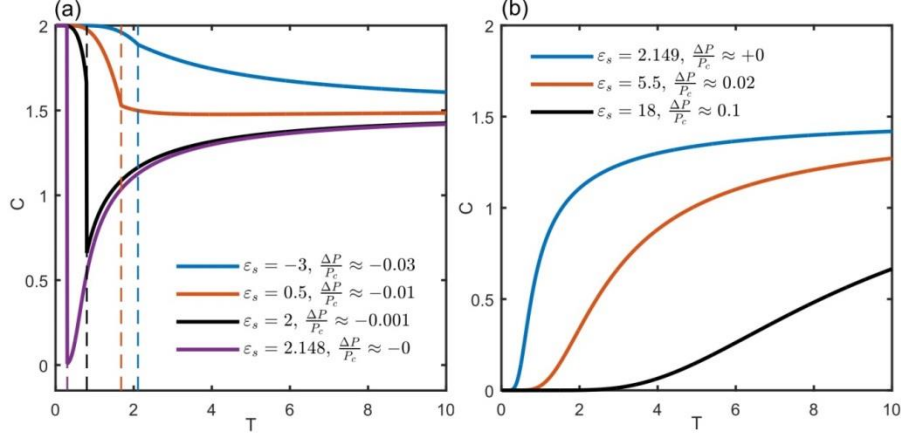


Рисунок 6. Температурная зависимость константы Кюри, определяемой уравнением (4.4) для различных значений параметра спиновой щели (давления) (а) при давлении ниже критического 55 ГПа, (б) выше критического давления.

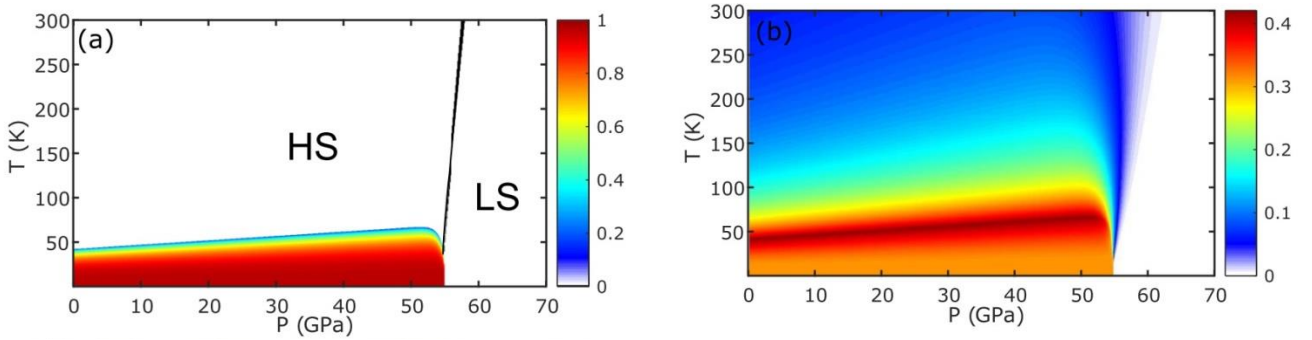


Рисунок 7. (а) Средняя намагниченность подрешетки и (б) поперечный спиновый коррелятор для ближайших соседей, рассчитанные для параметров ферропериклаза в 2×2 CMF. Черная линия обозначает изолинию $n_{LS} = 0.5$.

Во втором разделе **Главы 4** обсуждается зависимость результатов от размера системы. Показано, что при увеличении размера результаты в гейзенберговском пределе стремятся к полученным в рамках квантового метода Монте-Карло [6].

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

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

На защиту выносятся следующие основные результаты:

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

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

3. В рамках кластерной теории возмущений в модели Хаббарда исследована температурная эволюция электронного спектра при дырочном допировании $p = \frac{1}{6}$ с учетом ближних корреляций до седьмой координационной сферы с кластером из двенадцати узлов. Сравнение с концентрационной зависимостью спектра электронов при $T = 0$ с кластером 4×4 с учетом

корреляций до девятой сферы выявило похожий характер эволюции электронной структуры от режима сильной псевдощели к режиму нормальной ферми жидкости с промежуточным состоянием слабой псевдощели. Результаты расчетов зависимости спектральных функций от допирования при $T = 0$ близки к имеющимся в литературе, температурная зависимость спектров с двумя типами псевдощелей получена впервые.

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

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

6. Найдено нетривиальное возвратное поведение с температурой константы Кюри парамагнитной восприимчивости и спиновых корреляционных функций вблизи спинового кроссовера. Используя параметры из экспериментов для ферропериклаза $(Mg, Fe)O$ при высоких давлениях, получена фазовая диаграмма данного соединения и произведена оценка диапазонов давления и температуры, при которых возможно наблюдать найденное возвратное поведение в эксперименте.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1. 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 // Phys. Rev. B 2014, Vol. 90, no. 24, P. 245104.
2. Kuz'min V. I., Orlov Yu. S., Zarubin A. E., Ovchinnikova T. M., Ovchinnikov S. G. Magnetism in spin crossover systems: Short-range order and effects beyond the Heisenberg model // Phys. Rev. B 2019, Vol. 100, no. 14, P. 144429.
3. Kuz'min V. I., Visotin M. A., Nikolaev S. V., Ovchinnikov S. G. Doping and temperature evolution of pseudogap and spin-spin correlations in the two-dimensional Hubbard model // Phys. Rev. B 2020, Vol. 101, no. 11, P. 115141.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. R.O. Jones and O. Gunnarsson, The density functional formalism, its applications and prospects // Rev. Mod. Phys. 1989, Vol. 61, no. 3, P. 689.
2. Mattheis L. F. Electronic band properties and superconductivity in $\text{La}_{2-y}\text{X}_y\text{CuO}_4$ // Phys. Rev. Lett. 1987, Vol. 58, no. 10, P. 1028.
3. Gröber C., Eder R., Hanke W. Anomalous low-doping phase of the Hubbard model // Phys. Rev. B. 2000, Vol. 62, no. 7, P. 4336.
4. Korshunov M. M., Ovchinnikov S. G., Doping-dependent evolution of low-energy excitations and quantum phase transitions within an effective model for high- T_c copper oxides. // Eur. Phys. J. B 2007, Vol. 57, no. 3, P. 271.
5. Lyubutin I.S., Ovchinnikov S.G. Spin crossovers in Mott–Hubbard insulators at high pressures // J. Magn. Magn. Mater. 2012, Vol. 324, no. 21, P. 3538 .
6. Harada K., Kawashima N. Loop algorithm for Heisenberg models with biquadratic interaction and phase transitions in two dimensions // J. Phys. Soc. Jpn. 2001, Vol. 70, no. 1, P.13.

Отпечатано в типографии Института физики им. Л.В. Киренского
 Сибирского отделения Российской академии наук – обособленного подразделения
 ФИЦ КНЦ СО РАН. Тираж 60 экз. Заказ № 9.
 Объем 1.16 усл. печ. л.. Формат 60×84/16.
 660036, Красноярский край,
 г. Красноярск, ул. Академгородок, 50, стр. 38