

Анализ поляризованных ARPES-спектров недопированных купратов

© В.А. Гавричков, А.А. Борисов, С.Г. Овчинников

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

E-mail: gav@iph.krasn.ru

(Поступила в Редакцию 10 января 2001 г.)

С помощью обобщенного метода сильной связи исследована спектральная плотность в ARPES-спектрах антиферромагнитных диэлектриков $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ и $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ вдоль основных симметричных направлений зоны Бриллюэна. Установлено, что на потолке валентной зоны данных недопированных соединений в АФМ фазе имеется псевдощель магнитной природы $E_v(\mathbf{k}) \sim 0-0.4\text{eV}$ между виртуальным уровнем и самой валентной зоной, а близость триплета ${}^3B_{1g}$ и уровня ZR-синглета может являться причиной наблюдаемого подобия дисперсии вдоль направлений $\Gamma \leftrightarrow M$ и $X \leftrightarrow Y$. Рассчитанная четность поляризованных ARPES-спектров в точках Γ, M, X для АФМ фазы с учетом парциальных вкладов является положительной. Указаны также условия наблюдения парциальных вкладов в поляризованных ARPES-экспериментах. За счет спиновых флуктуаций виртуальный уровень приобретает дисперсию и малый спектральный вес. Вероятно, эффекты затухания просто не позволяют его разрешить на фоне основного квазичастичного пика.

Работа выполнена при поддержке Красноярского научного фонда (КНФ грант № 9F0039).

Исследование методом фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) диэлектриков $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ и $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ является одним из способов изучения эволюции электронной структуры ВТСП соединений с допированием. Существующие записи ARPES-спектров вдоль основных симметричных направлений с различной поляризацией синхротронного излучения позволяют классифицировать валентные состояния по их симметричным свойствам. Действительно, как в структуре $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ так и в $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ можно выделить три группы валентных состояний. Первая группа является инвариантом при отражении относительно плоскости эмиссии. Вторая и третья группы — соответственно четная и нечетная при аналогичном отражении. Согласно правилам отбора [1], в ARPES-спектрах с вектором поляризации, параллельным плоскости эмиссии, будет наблюдаться только четная группа, а в спектрах с перпендикулярной поляризацией — только нечетная группа состояний. В перпендикулярной геометрии вектор поляризации всегда параллелен CuO_2 -плоскости. Поэтому вклад от валентных состояний p_z, d_z , связывающих плоскости в единую трехмерную структуру, будет виден только в спектрах с параллельной геометрией.

Суммируем основные результаты ARPES-исследования [2], касающиеся настоящей работы.

1) Анализ заселенности $n(\mathbf{k})$ [3], полученной из ARPES-спектров антиферромагнитных диэлектриков $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ и $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$, показывает особенность в $n(\mathbf{k})$ при пересечении \mathbf{k} -контура, близкого к контуру поверхности Ферми, предсказанного ранее зонными вычислениями. Дисперсия квазичастичного пика по \mathbf{k} -контур "остаточной поверхности Ферми" близка к d -подобной $|\cos(k_x a) - \cos(k_y a)|$ зависимости. Поскольку последняя является аналогичной d -подобной дисперсии псевдощели в недопированном $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ (Dy) и сверхпроводящей щели в оптимально допированном соединении,

имеется отчетливая связь между всеми тремя энергетическими щелями.

2) С другой стороны, зависимость $|\cos(k_x a) - \cos(k_y a)|$ имеет линейный характер в окрестности $M = (\pi/2; \pi/2)$. Подобная линейная зависимость имеется в дисперсии спинов $\sim J\sqrt{\cos^2(k_x a) - \cos^2(k_y a)}$ [4]. Однако экспериментальная дисперсия в окрестности M скорее квадратична, чем линейна [2].

3) Несмотря на хорошее отображение наблюдаемой дисперсии в рамках $t-t'-t''-J$ модели, в ее приложении к реальным системам имеется особенность. В $t-t'-t''-J$ модели дисперсия вдоль $\Gamma = (00) \leftrightarrow M(\pi, \pi)$ и $X = (\pi, 0) \leftrightarrow Y(0, \pi)$ обусловлена различными параметрами J и t' соответственно. Поэтому наблюдаемое сходство в дисперсиях вдоль этих различных направлений накладывает неправдоподобно жесткие ограничения на параметры модели. Имеющиеся объяснения универсальности этого факта связаны с самосогласованным борновским приближением в теории $t-t'-t''-J$ модели [5].

4) В работах с поляризованным излучением указывается на положительную четность ARPES-спектров диэлектриков в симметричных точках Γ, M, X, Y [6], причем значение четности изменяется с допированием. В пределах $t-t'-t''-J$ модели интерпретировать четность невозможно. Поэтому теоретические работы, касающиеся поляризованных ARPES-зависимостей, основываются на приближении локальной плотности (LDA) в методе функционала плотности (DFM) [7]. Результаты, полученные в рамках LDA, позволяют анализировать четность. Для закона дисперсии однако отсутствует аналогия с успешными результатами $t-t'-t''-J$ модели. В частности, не удается воспроизвести квазичастичный пик, соответствующий состоянию Жанга-Райса на самом потолке валентной зоны.

В настоящей работе анализируется спектральная плотность оксихлоридов $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ и $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$, получен-

ная при различных поляризациях излучения. Результаты, полученные здесь в рамках обобщенного метода сильной связи (ОМСС) [8], являются естественным обобщением результатов $t-t'-t''-J$ модели и допускают ясное физическое толкование.

В первом разделе статьи приведено краткое описание ОМСС и основные формулы для дисперсии и спектральной плотности.

Во втором разделе изложены результаты численных расчетов дисперсионных зависимостей, а также амплитуды квазистатического пика в спектральной плотности по направлениям $\Gamma \leftrightarrow M \leftrightarrow X \leftrightarrow Y$ и $X \leftrightarrow Y$ в парамагнитной (ПМ) и АФМ фазах. Вычислены парциальные вклады в спектральную плотность от различных орбиталей. Это важно с точки зрения идентификации ARPES-спектров, так как они могут иметь различную четность и сечения рассеяния падающего излучения. Определена природа энергетической щели и форма дисперсии по \mathbf{k} -контуре "остаточной поверхности Ферми".

В третьем разделе приведен симметричный анализ парциальных вкладов в точках Γ, M, X, Y , указаны виды поляризации, при которых возможно наблюдать различные вклады, а также положительная четность суммарного вклада.

В четвертом разделе рассмотрено влияние спиновых флуктуаций на зонную структуру оксихлоридов.

1. Спектральная плотность в ОМСС

В этой части статьи дана краткая формулировка ОМСС, где элементарный ячейкой будет служить кластер $\text{CuO}_6(\text{CuO}_4\text{Cl}_2)$, проблема неортогональности молекулярных орбиталей соседних кластеров решена явным образом — построением соответствующих функций Ванье на $d_{x^2-y^2}, d_{3z^2-r^2}, p_x, p_y, p_z$ — пятиорбитальном исходном базисе атомных состояний.

В новом симметричном базисе одноячеечная часть гамильтониана факторизуется, позволяя классифицировать по симметрии все возможные эффективные одночастичные возбуждения в плоскости CuO_2 . Последующая точная диагонализация гамильтониана элементарной ячейки и переход к представлению операторов Хаббарда позволяют выполнить учет перескоковой части гамильтониана.

Исходный гамильтониан многозонной $p-d$ модели может быть записан обычным образом

$$H = H_d + H_p + H_{pd} + H_{pp}, \quad H_d = \sum_r H_d(r),$$

$$H_d(r) = \sum_{\lambda\sigma} \left[(\varepsilon_\lambda - \mu) d_{\lambda r\sigma}^+ d_{\lambda r\sigma} + \frac{1}{2} U_\lambda n_{\lambda r}^\sigma n_{\lambda r}^{-\sigma} - J_d d_{\lambda r\sigma}^+ d_{\lambda r\sigma'} + d_{\lambda' r\sigma}^+ d_{\lambda r\sigma} + \sum_{r'} V_{\lambda\lambda'} n_{\lambda r}^\sigma n_{\lambda' r'}^{\sigma'} \right],$$

$$H_p = \sum_i H_p(i), \quad H_p(i) = \sum_{\alpha\sigma} \left[(\varepsilon_\alpha - \mu) p_{\alpha i\sigma}^+ p_{\alpha i\sigma} + \frac{1}{2} U_\alpha n_{\alpha i}^\sigma n_{\alpha i}^{-\sigma} + \sum_{\alpha' i' \sigma'} V_{\alpha\alpha'} n_{\alpha i}^\sigma n_{\alpha' i'}^{\sigma'} \right],$$

$$H_{pd} = \sum_{\langle i,r \rangle} H_{pd}(i, r),$$

$$H_{pd}(i, r) = \sum_{\alpha\lambda\sigma\sigma'} \left(t_{\lambda\alpha} p_{\alpha i\sigma}^+ d_{r\lambda\sigma} + V_{\alpha\lambda} n_{\alpha i}^\sigma n_{\lambda r}^{\sigma'} \right),$$

$$H_{pp} = \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha\beta\sigma} \left(t_{\alpha\beta} p_{\alpha i\sigma}^+ p_{\beta j\sigma} + \text{h.c.} \right), \quad (1)$$

где $n_{\lambda i}^\sigma = d_{\lambda i\sigma}^+ d_{\lambda i\sigma}$; $n_{\alpha i}^\sigma = p_{\alpha i\sigma}^+ p_{\alpha i\sigma}$. Индексы r и i пробегает по позициям $d_{x^2-y^2}, d_{3z^2-r^2}$ и $p_x p_y p_z$ -наборов локализованных атомных орбиталей. Аналогично $\varepsilon_\lambda = \varepsilon_{d_x}$, ($\lambda = d_x$), ε_{d_z} , ($\lambda = d_z$) и $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_p$, ($\alpha = p_x, p_y$), ε_{p_z} , ($\alpha = p_z$) — энергии соответствующих атомных орбиталей; $t_{\lambda\alpha} = t_{pd}$, ($\lambda = d_x; \alpha = p_x, p_y$), $t_{pd}/\sqrt{3}$, ($\lambda = d_z, \alpha = p_x, p_y$) — матричные элементы перескока медь-кислород; $t_{\alpha\beta} = t_{pp}$ — матричные элементы перескока между ближайшими ионами кислорода; $U_\lambda = U_d$, ($\lambda = d_x, d_z$) и $U_\alpha = U_p$, ($\alpha = p_x, p_y, p_z$) — внутриатомные кулоновские взаимодействия на меди и кислороде; $V_{\alpha\lambda} = V_{pd}$, ($\alpha = p_x, p_y; \lambda = d_x, d_z$); V'_{pd} , ($\alpha = p_z; \lambda = d_x, d_z$) — энергии кулоновского отталкивания между медью и кислородом. Все матричные элементы кулоновского и обменного взаимодействия предполагаются не зависящими от вида d - или p -плоскостных орбиталей. Штрих относится к взаимодействию с апиическим кислородом в CuO_6 или с ионом хлора в CuO_4Cl_2 . Последующие шаги в преобразовании исходного гамильтониана аналогичны [8]. Поэтому приведем здесь только ключевые формулы. Все вычисления проделаны для плоскости CuO_2 , разбитой на кластеры $\text{CuO}_6(\text{CuO}_4\text{Cl}_2)$.

С помощью линейного преобразования \hat{S} введем новые операторы уничтожения $a_{k\sigma}$ и $b_{k\sigma}$ дырок в молекулярных орбиталях кислорода

$$\begin{pmatrix} b_{k\sigma} \\ a_{k\sigma} \end{pmatrix} = \hat{S} \begin{pmatrix} p_{xk\sigma} \\ p_{yk\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i s_x / \mu_k & i s_y / \mu_k \\ i s_y / \mu_k & -i s_x / \mu_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_{xk\sigma} \\ p_{yk\sigma} \end{pmatrix},$$

$$\mu_k^2 = s_x^2 + s_y^2, \quad |\hat{S}| = 1. \quad (2)$$

Новые операторы удовлетворяют необходимым коммутационным соотношениям $\{b_{k\sigma}^+, a_{p\sigma}\} = 0$. В новом представлении гамильтониан (1) приобретает вид суммы внутриячеечных H_c и межъячеечных H_{cc} слагаемых

$$H = H_c + H_{cc}, \quad H_c = \sum_{f\sigma} H_{f\sigma}, \quad H_{f\sigma} = h^{(a)} + h^{(b)} + h^{(ab)},$$

$$h^{(b)} = (\varepsilon_b n_b^\sigma + \varepsilon_{d_x} n_{d_x}^\sigma) + \frac{1}{2} U_d n_{d_x}^\sigma n_{d_x}^{-\sigma} + \frac{1}{2} U_b n_b^\sigma n_b^{-\sigma} + \sum_{\sigma'} V_{pd} n_{d_x}^\sigma n_b^{\sigma'} - \tau_b (d_{x\sigma}^+ b_\sigma + \text{h.c.}),$$

$$\begin{aligned}
 h^{(a)} &= (\varepsilon_a n_a^\sigma + \varepsilon_{d_z} n_{d_z}^\sigma + \varepsilon_{p_z} n_{p_z}^\sigma) + \frac{1}{2} U_d n_{d_z}^\sigma n_{d_z}^{-\sigma} + \frac{1}{2} U_a n_a^\sigma n_a^{-\sigma} \\
 &+ \frac{1}{2} U'_p n_{p_z}^\sigma n_{p_z}^{-\sigma} + \sum_{\sigma'} (V_{pd} n_{d_z}^\sigma n_{p_z}^{\sigma'} + V_{pd} n_{d_z}^\sigma n_a^{\sigma'}) \\
 &+ \tau_a (d_{z\sigma}^+ a_\sigma + \text{h.c.}) - \tau'_{pd} (d_{z\sigma}^+ + \text{h.c.}) - t'_{pp} (a_\sigma^+ p_{z\sigma} + \text{h.c.}); \\
 h^{(ab)} &= \sum_{\sigma'} U_d n_{d_x}^\sigma n_{d_z}^{\sigma'} + U_{ab} n_a^\sigma n_b^{\sigma'} \\
 &+ V_{pd} n_{d_x}^\sigma n_a^{\sigma'} + V_{pd} n_b^\sigma n_{d_z}^{\sigma'} + V'_{pd} n_{d_x}^\sigma n_{p_z}^{\sigma'}, \\
 H_{cc} &= \sum_{(i \neq j)} \sum_{\sigma} (h_{hop}^{(b)} + h_{hop}^{(a)} + h_{hop}^{(ab)}), \\
 h_{hop}^{(b)} &= -2t_{pd} \mu_{ij} (d_{x\sigma}^+ b_{j\sigma} + b_{i\sigma}^+ d_{x\sigma}) - 2t_{pp} \nu_{ij} b_{i\sigma}^+ b_{j\sigma}, \\
 h_{hop}^{(a)} &= \frac{2t_{pd}}{\sqrt{3}} \lambda_y (d_{z\sigma}^+ a_{j\sigma} + \text{h.c.}) \\
 &+ 2t_{pp} \nu_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} - 2t'_{pp} \lambda_{ij} (p_{z\sigma}^+ a_{j\sigma} + \text{h.c.}), \\
 h_{hop}^{(ab)} &= \frac{2t_{pd}}{\sqrt{3}} \xi y (d_{z\sigma}^+ b_{j\sigma} + \text{h.c.}) \\
 &+ 2t_{pp} \chi_{ij} (a_{i\sigma}^+ b_{j\sigma} + \text{h.c.}) - 2t'_{pp} \xi_{ij} (p_{z\sigma}^+ b_{j\sigma} + \text{h.c.}), \quad (3)
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_b &= \varepsilon_p - 2t_{pp} \nu_{00}, & \varepsilon_a &= \varepsilon_p + 2t_{pp} \nu_{00}, \\
 \tau_b &= 2t_{pd} \mu_{00}, & \tau_a &= 2t_{pd} \lambda_{00} / \sqrt{3}, \\
 \tau'_{pd} &= 2t'_{pd} / \sqrt{3}, & \tau'_{pp} &= 2t'_{pp} \lambda_{00}.
 \end{aligned}$$

Коэффициенты μ_{ij} , ν_{ij} , λ_{ij} относятся к гибридизации состояний одной и той же симметрии и зависят только от расстояния между узлами i и j . Коэффициенты ξ_{ij} и χ_{ij} относятся к гибридизации состояний, принадлежащих к различным a_1 - и b_1 -представлениям, и меняют знак при отражении вдоль одной из x - или y -осей. Явный вид этих коэффициентов приведен в работах [8,9].

Далее определим собственные значения и состояния одноячеечного гамильтониана H_c и перепишем полный гамильтониан H в терминах этих собственных состояний. В вакуум-секторе имеем собственное состояние: $a^{10} p^6$ или $|0\rangle$. В однодырочном b_1 -секторе на базе $|d_{x\sigma}^+| = 0\rangle$ - и $|b_\sigma^+| = 0\rangle$ -состояний собственные векторы $|\tilde{b}_p\rangle = \beta_p(b)|b_\sigma^+|0\rangle + \beta_p(d_x)|d_{x\sigma}^+|0\rangle$ с энергиями $\varepsilon_{1\tilde{b}_p}$, $p = 1, 2$ найдены с помощью точной диагонализации матрицы

$$\hat{h}^{(b)} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{d_x} & -\tau_b \\ -\tau_b & \varepsilon_b \end{pmatrix}. \quad (4)$$

В однодырочном a_1 -секторе на базе $|a_\sigma^+|0\rangle$ -, $|p_{z\sigma}^+|0\rangle$ - и $|d_{z\sigma}^+|0\rangle$ -состояний собственные векторы $|\tilde{a}_p\rangle = \alpha_p(a)|a_\sigma^+|0\rangle + \alpha_p(p_z)|p_{z\sigma}^+|0\rangle + \alpha_p(d_z)|d_{z\sigma}^+|0\rangle$ с энергиями $\varepsilon_{1\tilde{a}_p}$, $p = 1, 2, 3$ найдены с помощью точной диагонализации матрицы

$$\hat{h}^{(a)} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{d_z} & \tau_a & -\tau'_{pd} \\ \tau_a & \varepsilon_a & -t'_{pd} \\ -\tau'_{pd} & -t'_{pd} & \varepsilon_{p_z} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Аналогично находим собственные $|\tilde{A}_q\rangle$ -состояния с энергией $\varepsilon_{2\tilde{A}_q}$ в двухдырочном A_1 -секторе $|\tilde{A}_q\rangle = \sum_i A_{qi} |A_i\rangle$, где коэффициенты — собственные векторы A_{qi} , $i, q = 1-9$ и набор базисных синглетных функций $|A_i\rangle$. При этом в качестве одного из базовых состояний в нем фигурирует ZR-синглет $|ZR\rangle$. В B_1 -двухдырочном секторе это триплетные собственные состояния $|\tilde{B}_{qM}\rangle = \sum_i B_{qi} |B_{iM}\rangle$, $q = 1-6$,

($M = -1, 0, 1$) с энергиями $\varepsilon_{2\tilde{B}_q}$, коэффициентами B_{qi} и набором базисных функций $|B_{qM}\rangle$. Таким образом, диагонализация гамильтониана для кластера $\text{CuO}_6(\text{CuO}_4\text{Cl}_2)$ проводится отдельно в различных секторах с числом дырок $n = 0, 1, 2$.

В работе [10] обнаружено две возможности стабилизации $|\tilde{B}_{1M}\rangle$ -состояния в качестве основного: 1) с уменьшением энергии p -орбиталей ионов O или Cl в апической позиции, 2) с уменьшением параметра $\Delta_d = \varepsilon_{d_z} - \varepsilon_{d_x}$ кристаллического поля.

Согласно этим оценкам, энергетический интервал между триплетным и синглетным состояниями $\Delta\varepsilon_2 \sim 0.5 \text{ eV}$ [10]. Как следствие наличие двух конкурирующих по энергии состояний $|\tilde{A}_1\rangle$ и $|\tilde{B}_{1M}\rangle$ в области реалистичных значений параметров приводит к необходимости одновременного их учета в качестве базисных состояний нашей модели и невозможности дальнейшей редукции к эффективной однозонной модели Хаббарда или $t-t'-t''-J$ модели. В результате точной диагонализации гамильтониан H_c для антиферромагнитной фазы приобретает вид

$$\begin{aligned}
 H_c &= \sum_{pf\sigma} (\varepsilon_{1pG} - \mu) X_{f\sigma}^{pp} + \sum_{qf\sigma} (\varepsilon_{2qG} - 2\mu) X_{f\sigma}^{qq}, \\
 f_G &= \begin{cases} f_A, & f \in A, \\ f_B, & b \in B. \end{cases} \quad (6)
 \end{aligned}$$

Здесь p и q нумеруют однодырочные и двухдырочные термы ячейки, $X_f^{pq} = |p\rangle\langle q|$ — операторы Хаббарда, построенные на точных состояниях ячейки. Уровни подрешеток расщеплены полем антиферромагнитного состояния $\varepsilon_{1pA} = \varepsilon_{1p} - \sigma h$, $\varepsilon_{1pB} = \varepsilon_{1p} + \sigma h$. Величина $h \sim J(S_z)$, где J — эффективное обменное взаимодействие ближайших соседей. С допированием величина h уменьшается, обращаясь в нуль в парамагнитной фазе. В настоящей работе авторы ограничиваются несамосогласованным расчетом, в котором магнитное состояние считается заданным (антиферромагнитное или парамагнитное при $T = 0$). В новом базисе одноэлектронные операторы приобретают вид

$$c_{f\lambda\sigma} = \sum_m \gamma_{\lambda\sigma}(m) X_{f\sigma}^m, \quad (7)$$

где $c_{\lambda f\sigma} = d_{x f\sigma}, d_{z f\sigma}, a_{f\sigma}, b_{f\sigma}, p_{z f\sigma}$ и m — номер корневого вектора $\alpha_m(pq)$. Здесь для упрощения работы с операторами Хаббарда используются удобные обозначения Зайцева [11]. Матричные элементы $\gamma_{\lambda\sigma}(m)$

($m = 0, 1, \dots, 31$), соответствующие этим корневым векторам, вычисляются непосредственно с помощью процедуры точной диагонализации гамильтониана H_c и представлены в [8]. Мы учитываем только два нижних термина (b_1 и a_1) в одночастичном и \hat{A}_1 и \hat{B}_{1M} в двухчастичном секторах. Следовательно, в (6) $|p\rangle = |\tilde{a}_1\rangle, |\tilde{b}_1\rangle$ и $|q\rangle = |\tilde{A}_1\rangle, |\tilde{B}_{1M}\rangle$. Остальные термы лежат много выше по энергии и несут существенны для физики низкоэнергетических возбуждений. Соответствующие дисперсионные соотношения для валентной зоны были получены с помощью уравнений движения для функций Грина, построенных на операторах Хаббарда.

$$G_{k\sigma}^{\lambda\lambda'} = \langle\langle c_{k\lambda\sigma} | c_{k\lambda'\sigma}^+ \rangle\rangle_E = \sum_{mn} \gamma_{\lambda\sigma}(m) \gamma_{\lambda'\sigma}^+(n) D_{k\sigma}^{mn}, \quad (8)$$

где

$$\hat{D}_{k\sigma} = \begin{pmatrix} \hat{D}_{k\sigma}(AA) & \hat{D}_{k\sigma}(AB) \\ \hat{D}_{k\sigma}(BA) & \hat{D}_{k\sigma}(BB) \end{pmatrix},$$

$$D_{k\sigma}^{mn}(AB) = \langle\langle X_{k\sigma}^m | Y_{k\sigma}^n \rangle\rangle_E.$$

В результате в приближении Хаббард I дисперсионные зависимости определяются уравнением

$$\left\| (E - \Omega_m^G) \delta_{mn} / F_{f\sigma}^G(m) - 2 \sum_{\lambda\lambda'} \gamma_{\lambda\sigma}^*(m) T_{\lambda\lambda'}^{pG}(\mathbf{k}) \gamma_{\lambda'\sigma}(n) \right\| = 0. \quad (9)$$

Уравнение (9) похоже на обычное одноэлектронное уравнение метода сильной связи, отличаясь от него двумя моментами. Во-первых, одночастичные энергии определены как резонансы между многоэлектронными состояниями. Во-вторых, факторы заполнения $F_{f\sigma}^G(m) = \langle X_{f\sigma}^{pq} \rangle + \langle X_{f\sigma}^{qq} \rangle$ приводят к концентрационной зависимости как дисперсионных соотношений, так и амплитуды квазичастичного пика в спектральной плотности. С математической точки зрения мы имеем дело с уравнением обобщенной задачи на собственные значения, где вместо привычной "матрицы неортогональности" фигурирует обратная матрица соответствующих факторов заполнения. Каждый корневой вектор α_m определяет фермиевскую квазичастицу с зарядом и спином 1/2, их локальные энергии равны $\Omega_m^G = \varepsilon_{2qG} - \varepsilon_{1pG}$.

Формула (9) является удобной для расчета дисперсионных зависимостей в том смысле, что позволяет получить все возможные квазичастичные состояния. Однако не все из них могут наблюдаться в эксперименте. Как известно, в ARPES-экспериментах проявляются не сами дисперсионные зависимости, а амплитуда спектральной плотности квазичастичных пиков

$$A_{\sigma}(\mathbf{k}, E) = \left(-\frac{1}{\pi} \right) \sum_{\lambda} \text{Im} (G_{k\sigma}^{\lambda\lambda}) = \left(-\frac{1}{\pi} \right) \sum_{\lambda mn} \gamma_{\lambda\sigma}(m) \times \gamma_{\lambda\sigma}^+(n) \text{Im} (D_{k\sigma}^{mn}(AA) + D_{k\sigma}^{mn}(BB)). \quad (10)$$

Благодаря соответствующим факторам заполнения, для некоторых типов квазичастиц спектральная плотность может оказаться пренебрежимо малой или даже нулевой.

Следовательно, в эксперименте соответствующий квазичастичный пик отсутствует. В силу большой размерности $\hat{D}_{k\sigma}$ 32×32 , анализ спектральной плотности невозможен в аналитическом виде. Численный расчет спектральной плотности по формуле (10) проводился вдоль основных симметричных направлений зоны Бриллюэна при $T = 0$. Для ПМ фазы закон дисперсии и спектральная плотность получаются с помощью одноподрешеточных аналогов формул (9) и (10).

2. Результаты численного расчета спектральной плотности

На рис. 1 приведены результаты расчета дисперсии квазичастичного пика на потолке валентной зоны $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ и $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ вдоль основных симметричных направлений зоны Бриллюэна в АФМ и ПМ фазах при $T = 0$. В ПМ фазе вычисленная дисперсия аналогична наблюдаемой в оптимально допированных образцах $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}(Dy)$ [12]. Наиболее интересной особенностью нашего спектра в АФМ фазе является наличие на самом потолке валентной зоны энергетического уровня с нулевой спектральной плотностью, не имеющего соответствующей отметки в ARPES-спектрах. Действительно, в недопированном антиферромагнетике мы имеем дело с $\alpha_{0\sigma}(\tilde{b}_{1\uparrow} \leftrightarrow \tilde{A}_1)$ - и $\alpha_{0\sigma}(\tilde{b}_{1\downarrow} \leftrightarrow \tilde{A}_1)$ -квазичастицами на самом потолке валентной зоны. При нулевой температуре без учета квантовых флуктуаций числа заполнения однодырочного $|\tilde{b}_{1\sigma}\rangle$ -состояния для одной из проекций спина как в A -, так и в B -подрешетках равны нулю. Поэтому для одной из проекций спина в недопированном случае имеет место бездисперсный уровень, названный в работе [8] виртуальным уровнем. Поскольку переходы между пустыми состояниями имеют нулевую амплитуду, соответствующий этому переходу пик в спектральной плотности не наблюдается. Это типичный эффект сильных корреляций.

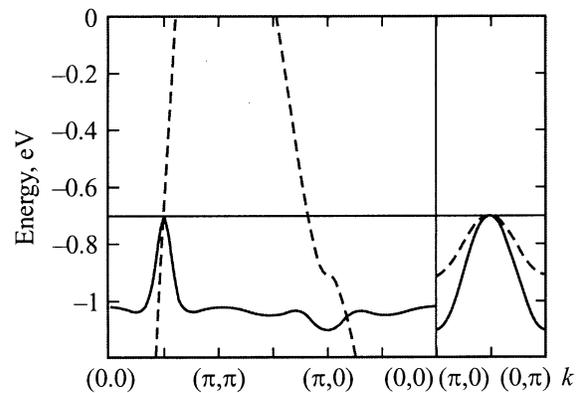


Рис. 1. Дисперсия на потолке валентной зоны в АФМ (сплошная линия) и ПМ (штриховая линия) фазах при $T = 0$ вдоль основных направлений зоны Бриллюэна, рассчитанная по формуле (9).

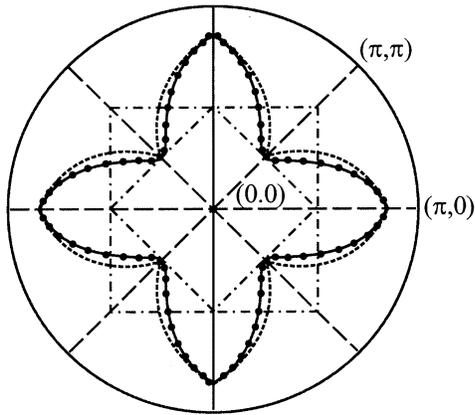


Рис. 2. Дисперсия псевдощели $E_S(\mathbf{k})$ по $X \leftrightarrow Y$ контуру. Штриховая линия — зависимость $|\cos(k_x a) - \cos(k_y a)|$, сплошная линия — зависимость $|\cos(k_x a) \cos(k_y a)|$, точки — результаты численного расчета по формуле (9). Величина расстояния от границы антиферромагнитной зоны Бриллюэна до точки расчета равна дисперсии.

Таким образом, энергетическую щель между валентной зоной и зоной проводимости в оксихлоридах при $T = 0$ можно представить как $E_g(\mathbf{k}) = E_{ct}(\mathbf{k}) + E_S(\mathbf{k})$, где $E_{ct}(\mathbf{k})$ — полупроводниковая щель, связанная с переносом заряда (charge transfer gap), и $E_S(\mathbf{k})$ — энергетический зазор между виртуальным уровнем и валентной зоной. Поскольку оба последних относятся к одному типу квазичастиц с одной и той же проекцией спина, но существующих на фоне различных компонент спинового дублета $|b_\sigma\rangle$, $E_S(\mathbf{k})$ имеет магнитную природу и отсутствует в ПМ. Из-за отсутствия основных признаков полупроводниковой щели, а также из-за нулевого значения в $\mathbf{k} = M$ далее в отношении $E_S(\mathbf{k})$ будем употреблять термин псевдощель. На рис. 2 представлена дисперсия псевдощели $E_S(\mathbf{k})$ вдоль границы антиферромагнитной зоны Бриллюэна на фоне d -подобной зависимости $|\cos(k_x a) - \cos(k_y a)|$, чтобы продемонстрировать явную связь искомой псевдощели в антиферромагнитных диэлектриках с псевдощелью в слабодопированных и со сверхпроводящей щелью в оптимально допированных образцах [2]. Близость вычисленной и наблюдаемой в [2] дисперсии позволяет предположить, что \mathbf{k} -контур ”остаточной поверхности Ферми”, наблюдаемый авторами [3] в антиферромагнитном диэлектрике $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$, может быть отметкой в ARPES-спектрах от валентной зоны. Причиной этого может быть чистая двухмерность квазичастичных состояний на любом \mathbf{k} -контуре, близком к $X \leftrightarrow Y$ -контуру. Во всех остальных симметричных направлениях расчеты воспроизводят ненулевые вклады в спектральную плотность от внеплоскостных d_z - и p_z -орбиталей (см. далее). Множители $T_{\lambda\lambda'}(k) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}_i} T_{\lambda\lambda'}(\mathbf{R}_i) e^{ik\mathbf{R}_i}$ в (9) не содержат межподрешеточных слагаемых для любого \mathbf{k} на $X \leftrightarrow Y$ -контуре и дисперсия вдоль последнего может

быть только вида $\sim \cos(k_x a) \cos(k_y a)$. На рис. 2 эта зависимость, как и следовало ожидать, в точности ложится на результаты численного расчета. В действительности наблюдается, скорее, квадратичная зависимость в окрестности M [2], полагаем, что это не $|\cos(k_x a) - \cos(k_y a)|$, а $\cos(k_x a) \cos(k_y a)$ зависимость.

Согласно нашим расчетам, причина подобия дисперсий в АФМ фазе вдоль различных $\Gamma \leftrightarrow M$ и $X \leftrightarrow Y$ симметричных направлений заключается в сильной гибридизации валентной зоны синглета Жангла–Райса с нижележащей зоной триплета ${}^3B_{1g}$ в точках Γ и M . Полученное здесь сходство определяется только значениями параметров, связанных с апиическими ионами Cl или O . Кроме того, в наших результатах имеется сильная анизотропия эффективных масс в окрестности $\mathbf{k} = M$ с соотношением $m_{\text{eff}}^{XY}/m_{\text{eff}}^{\Gamma M} \sim 10$, поэтому подобие касается лишь ширины дисперсии в этих направлениях.

Спектральная плотность $A(\mathbf{k}, E)$ вычислялась вдоль четырех основных симметричных направлений зоны Бриллюэна: $\Gamma \leftrightarrow M$, $M \leftrightarrow X$, $X \leftrightarrow \Gamma$, $X \leftrightarrow Y$ для ПМ и АФМ. Как следует из (10), спектральная плотность аддитивна, поэтому имеется возможность вычислить парциальные вклады в спектральную плотность от всех орбиталей, принятых в расчет,

$$A(\mathbf{k}, E) = \sum_{\lambda\sigma} A_{\lambda\sigma}(\mathbf{k}, E),$$

где индекс $\lambda = d_x, b, a, d_z, p_z$. Как будет ясно из дальнейшего, аддитивное представление является удобным при анализе поляризационных ARPES-зависимостей. На рис. 3, a, b представлены \mathbf{k} -зависимости амплитуды спектральной плотности и ее парциальных вкладов вдоль $\Gamma \leftrightarrow M$ -симметричного направления для АФМ и ПМ соответственно. При реалистичных значениях параметров, взятых в расчет [8], триплетный уровень ${}^3B_{1g}$ находится на 0.7 eV выше по энергии уровня A_{1g} синглета Жанга–Райса. Как и следовало ожидать, при переходе в ПМ фазу \mathbf{k} -зависимость амплитуды квазичастичного пика теряет

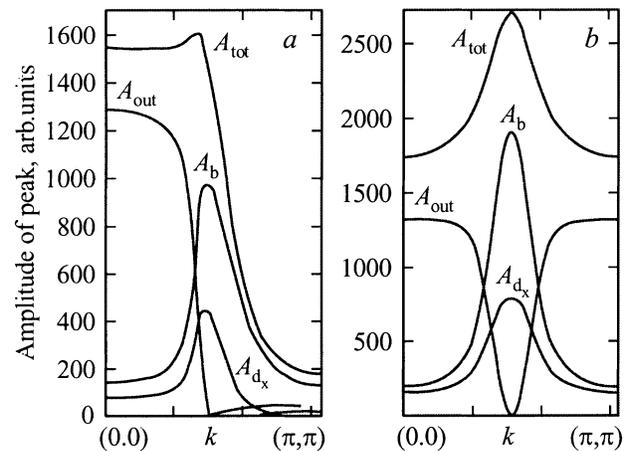


Рис. 3. \mathbf{k} -зависимость парциальных вкладов в амплитуду квазичастичного пика вдоль направления $\Gamma \leftrightarrow M$. a — ПМ, b — АФМ.

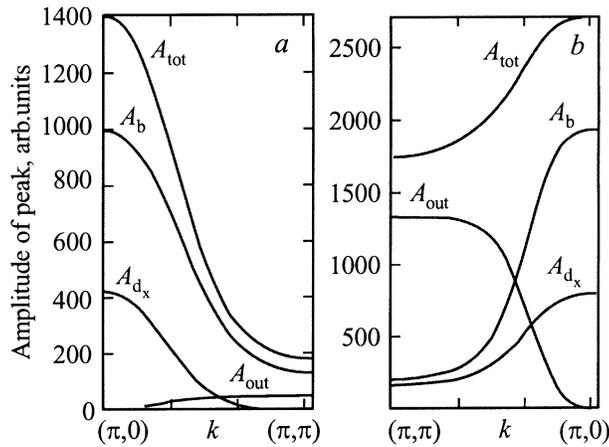


Рис. 4. k -зависимость парциальных вкладов в амплитуду квазичастичного пика вдоль направления $M \leftrightarrow X$. a — ПМ, b — АФМ.

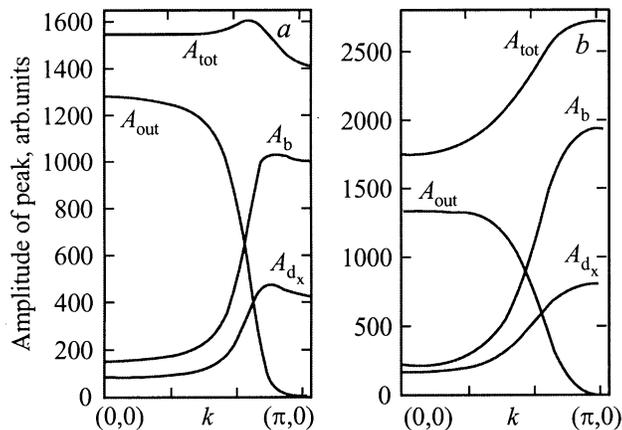


Рис. 5. k -зависимость парциальных вкладов в амплитуду квазичастичного пика вдоль направления $\Gamma \leftrightarrow X$. a — ПМ, b — АФМ.

симметрию по отношению к точке M . Если в $\mathbf{k} = \Gamma$ по-прежнему имеет место подавляющий вклад от внеплоскостных орбиталей $A_{\text{out}}(\mathbf{k}, E) = A_{d_z}(\mathbf{k}, E) + A_{p_z}(\mathbf{k}, E)$, амплитуда квазичастичного пика в точке M сильно уменьшается. Остаточная спектральная плотность в этой симметричной точке обусловлена подмешиванием состояний из зоны проводимости с участием только плоскостных орбиталей d_x и b .

На рис. 4, a, b представлена k -зависимость амплитуды квазичастичного пика вдоль симметричного $M \leftrightarrow X$ направления зоны Бриллюэна. Как в антиферрофазе, так и в парафазе в $\mathbf{k} = X$ имеет место вклад только от плоскостных b - и d_x -орбиталей $A_{\text{pl}}(\mathbf{k}, E) = A_{d_x}(\mathbf{k}, E) + A_b(\mathbf{k}, E)$. Вклад от p_z - и d_z -состояний в этой симметричной точке обращается в нуль, причем амплитуда спектральной плотности монотонно возрастает вдоль $M \leftrightarrow X$ как в антиферрофазе, так и в парафазе. Особый интерес представляет симметричное направление $\Gamma \leftrightarrow X$ (рис. 5, a, b),

где наряду с аналогичным подавлением парциального вклада $A_{\text{out}}(\mathbf{k}, E)$ в $\mathbf{k} = X$ имеет место кроссовер от монотонного роста амплитуды квазичастичного пика в АФМ фазе к немонотонной с максимумом в окрестности $\mathbf{k} = (2\pi/3, 0)$ ПМ фазе. Аналогичный максимум наблюдается в ARPES-спектрах соединения $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ при $T = 150 \text{ K}$ [2]. Анализ собственных состояний вдоль этого симметричного направления показал, что для ПМ фазы существование максимума в точке $\sim (2\pi/3, 0)$ связано с максимальным подмешиванием состояний зоны проводимости. На парциальных вкладах плоскостных b - и d_x -орбиталей максимум наблюдается по той же причине. Вдоль $X \leftrightarrow Y$ симметричного направления как в АФМ, так и в ПМ фазах зависимость амплитуды квазичастичного пика от волнового вектора практически отсутствует. Здесь амплитуда складывается только из $A_{d_x}(\mathbf{k}, E)$ - и $A_b(\mathbf{k}, E)$ -вкладов.

На рис. 6 и 7 в трехмерном виде показана спектральная плотность $A(\mathbf{k}, E)$ вдоль направления $\Gamma \leftrightarrow M$. Как для ПМ, так и для АФМ видно отсутствие квазичастичного

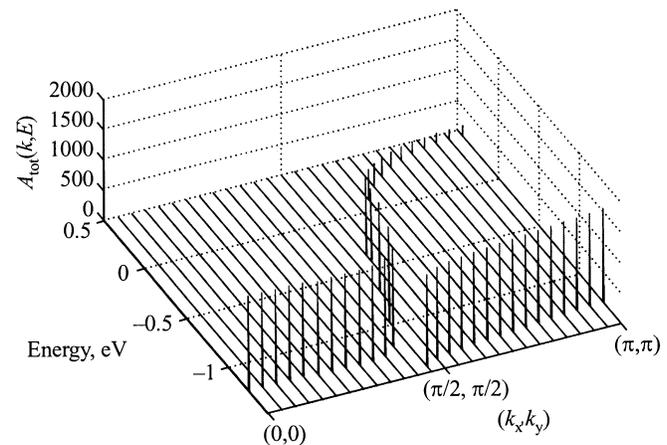


Рис. 6. Трехмерный вид k -зависимости амплитуды спектральной плотности вдоль направления $\Gamma \leftrightarrow M$ в ПМ.

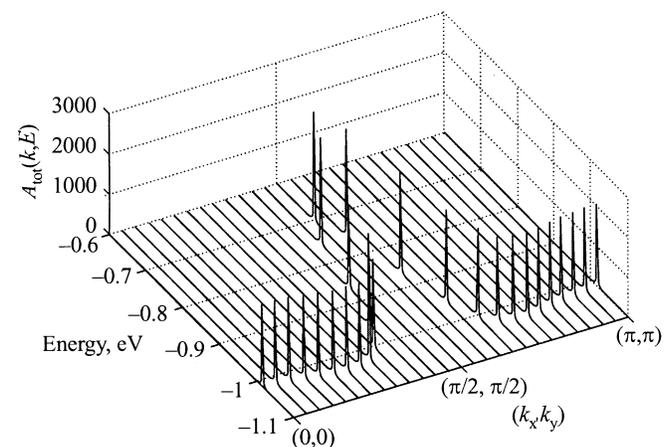


Рис. 7. Трехмерный вид k -зависимости амплитуды спектральной плотности вдоль направления $\Gamma \leftrightarrow M$ в АФМ.

Характеристика отдельных вкладов в общую спектральную плотность

	I	II	III	IV
	$\Gamma(D_{4h}) \leftrightarrow M(D_{4h})$		$\Gamma \leftrightarrow X(D_{2h})$	
A_{dx}	odd, (B_{1g})	odd, (B_{1g})	even	even, (A_g)
A_b	0, (E_u)	odd, (B_{1g})	0	even, (A_g)
$A_{in} = A_{dx} + A_b$	0 + odd	odd	0 + even	even
A_a	0, (E_u)	even, (A_{1g})	0	odd, (B_{2u})
$A_{out} = A_{dz} + A_{pz} + A_a$	\sim even, (A_{1g})	even, (A_{1g})	\sim even	\sim even, (A_g)
$A_{tot} = A_{in} + A_{out}$	\sim even	\sim even	\sim even	\sim even

Примечание. Условия экспериментального наблюдения. Столбцы I, III: (A_{dx} , A_b , A_{out}) видны соответственно в (перпендикулярной, любой, параллельной) поляризации; столбец II: (A_{in} , A_{out}) видны соответственно в (перпендикулярной, параллельной) поляризации; столбец IV: (A_{in} , A_{out}) видны в параллельной поляризации.

пика в области энергий виртуального уровня. Для ПМ наблюдается также вклад триплетного квазичастичного пика.

3. Поляризационная зависимость ARPES-спектров

Дополнительная информация о природе состояний валентной зоны может быть получена с помощью записи ARPES-спектров в параллельной и перпендикулярной поляризации вектора электрического поля относительно плоскости фотоэмиссии.

Далее проанализируем поляризационную зависимость спектральной плотности (10) с учетом четности и размеров парциальных вкладов. При анализе ARPES-спектров будем пренебрегать эффектами магнитного рассеяния, так как они меньше зарядового на множитель ($\hbar\omega/mc^2$). Однако сами зарядовые эффекты в свою очередь сильно зависят от наличия и вида магнитного упорядочения.

В таблице приведены \mathbf{k} -группы, неприводимые представления и соответствующие четности плоскостных и внеплоскостных вкладов в общую спектральную плотность в Γ -, M -, X -симметричных точках зоны Бриллюэна для АФМ фазы.

Как ясно из таблицы, наличие ненулевого фототока с Γ связано с малым E_u неприводимым представлением \mathbf{k} -группы для $\alpha_{0\sigma}(\tilde{b}_{1,\sigma'} \leftrightarrow {}^1\tilde{A}_1)$ -квазичастиц, но не с дополнительным квазичастичным состоянием. Особенностью фототока в центре зоны Бриллюэна является его пропорциональность вкладу в спектральную плотность только от кислородных орбиталей. Четность общего вклада в спектральную плотность $A_{tot}(\mathbf{k}, E)$ приведена с учетом размеров парциальных вкладов в соответствующих точках зоны Бриллюэна.

В сочетании с линейно-поляризованным излучением различная ориентация образцов в ARPES-эксперименте позволяет разделять исследовать состояния валентной зоны с той или иной четностью. Более того, имеется возможность наблюдать эволюцию самой четности с допированием [6]. В случае оксихлоридов квазичастичный пик наблюдался в $\Gamma \leftrightarrow M$ - и $\Gamma \leftrightarrow X$ -направлениях только

в параллельной геометрии эксперимента. Это возможно только для четных валентных состояний. Простое сравнение с результатами поляризационных ARPES-исследований [6] показывает соответствие рассчитанной четности, наблюдаемой в недопированных соединениях. Поскольку положительное значение четности в Γ и M обусловлено внеплоскостным вкладом $A_{out}(\mathbf{k}, E)$, амплитуда квазичастичного пика должна еще зависеть от угла падения параллельно поляризованного излучения.

4. Влияние спиновых флуктуаций на зонную структуру в АФМ

В нашем несамосогласованном подходе зависимость электронной структуры от магнитного упорядочения возникает через факторы заполнения $F_\sigma(m)$ в уравнении (9). Для потолка валентной зоны определяющую роль играют квазичастицы $\alpha_{0\sigma}(\tilde{b}_{1,\sigma'} \leftrightarrow {}^1\tilde{A}_1)$, $\alpha_{1\sigma}(\tilde{b}_{1,\sigma'} \leftrightarrow {}^3\tilde{B}_{1,0})$ и $\alpha_{2\sigma}(\tilde{b}_{1,\sigma} \leftrightarrow {}^3\tilde{B}_{1,2\sigma})$, причем в недопированном случае оксихлоридов, когда двухдырочные термы незаполнены, $F_{\sigma'}(\alpha_{1\sigma}) = \langle n_{\tilde{b},\sigma'} \rangle$. Для ненулевых матричных элементов $\gamma_{\lambda\sigma}(m)$ ($m = 0, 1 \dots 31$) (7) в АФМ фазе с подрешетками $A \langle S_A^z \rangle = \langle S^z \rangle$ и $B \langle S_B^z \rangle = -\langle S^z \rangle$ факторы заполнения могут быть записаны в виде ($\sigma = \pm 1/2$): $F_{-\sigma}^G(\alpha_{0\sigma}) = F_{\sigma}^G(\alpha_{1\sigma}) = 1/2 - 2\sigma \langle S_G^z \rangle$, $F_{\sigma}^G(\alpha_{2\sigma}) = 1/2 + 2\sigma \langle S_G^z \rangle$, где $G = A, B$. До настоящего момента мы ограничивались изинговским порядком, полагая $\langle S^z \rangle = 1/2$. Простейший способ самосогласования расчета заключается в построении эффективного гамильтониана, который будет иметь вид гейзенберговского гамильтониана с антиферромагнитным обменом J , а затем в самосогласованном расчете $\langle S^z \rangle$. Таким образом можно учесть локальные спиновые флуктуации (нулевые колебания в АФМ фазе), учет же нелокальных флуктуаций вида $\langle S_i^+ S_j^- \rangle$ требует выхода за рамки приближения Хаббард I, принятого в настоящей работе. Детальный анализ применимости такого подхода и сравнение с известными результатами по магнитным полярионам в $t-t'-J$ модели дан в работе [13].

Вследствие нулевых колебаний возникает, как известно, квантовое сокращение спина: $\langle S^z \rangle = 1/2 - n_0$. Вели-

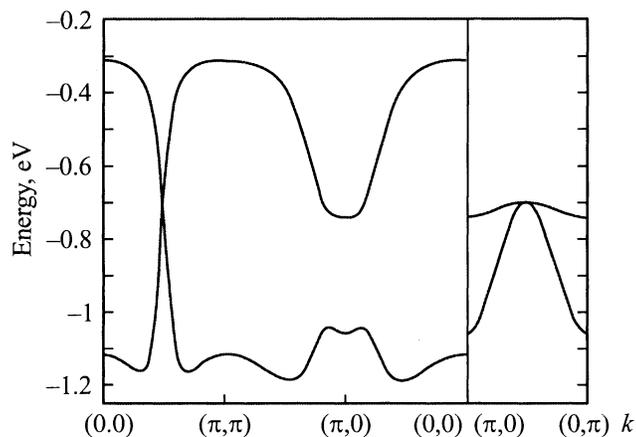


Рис. 8. Дисперсия на потолке валентной зоны в АФМ фазе с учетом спиновых флуктуаций вдоль основных направлений зоны Бриллюэна. Квантовое сокращение спина $n_0 = 0.1$.

чина сокращения n_0 может быть рассчитана разными методами, в теории спиновых волн для двухмерного АФМ $n_0 \approx 0.2$ [14]. Учет спиновых флуктуаций существенно меняет зонную структуру (рис. 8). Действительно, бездисперсный уровень на рис. 1 имеет нулевую дисперсию и нулевой спектральный вес потому, что $F_{\downarrow}^A(\alpha_{0\uparrow}) = 0$ в изинговском варианте расчета. За счет флуктуаций $F_{\downarrow}^A(\alpha_{0\uparrow}) = n_0$, $F_{\downarrow}^B(\alpha_{0\uparrow}) = 1 - n_0$, что дает дисперсию и спектральный вес $\sim n_0$. Таким образом, зонная структура недопированного АФМ с учетом спиновых флуктуаций подобна зонной структуре допированного изинговского АФМ с учетом дырок концентрации $x = n_0$. Малость спектрального веса соответствующей зоны приводит к тому, что она воспринимается как низкоэнергетический спутник в ARPES-спектрах. Не исключено, что эффекты затухания вообще не позволяют его разрешить. Тем не менее подобные спутники, интенсивность которых (и тем самым спиновых флуктуаций) растет с ростом T , получены недавно квантовым методом Монте-Карло для модели Хаббарда [15].

Суммируем результаты расчета, последующего анализа и сравнения их с экспериментальными ARPES-данными.

1) Благодаря небольшому энергетическому зазору ~ 0.7 eV между уровнем триплета ${}^3B_{1g}$ и уровнем ZR-синглета, в Γ - и M -симметричных точках имеет место сильная гибридизация валентной зоны синглета и низлежащей зоны триплета ${}^3B_{1g}$. Гибридизация обуславливает подобие дисперсии вдоль направлений $\Gamma \leftrightarrow M$ и $X \leftrightarrow Y$ в АФМ фазе. Однако наши вычисления предсказывают анизотропию эффективных масс в $\mathbf{k} = M$ с соотношением $m_{\text{eff}}^{XY}/m_{\text{eff}}^{\Gamma M} \approx 10$. В целом валентная зона не имеет двухмерного характера. Как следствие при отклонении угла падения параллельно поляризованного излучения от нормального амплитуда квазичастичного пика в Γ - и M -симметричных точках будет возрастать для АФМ фазы.

2) На потолке валентной зоны в $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ и $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ в АФМ фазе имеется псевдощель магнитной природы: $E_s(\mathbf{k}) \sim 0-0.4$ eV между виртуальным уровнем и самой валентной зоной, обращаются в нуль в точке M зоны Бриллюэна. Виртуальному уровню отвечает малая спектральная плотность при $T = 0$, пропорциональная концентрации нулевых спиновых флуктуаций n_0 . Дисперсия псевдощели вдоль направления $X \leftrightarrow Y$ находится в хорошем согласии с дисперсией по \mathbf{k} -контуре "остаточной поверхности Ферми". Вклад в спектральную плотность вдоль этого направления происходит исключительно от плоскостных d_x, b -орбиталей и, следовательно, спектр носит двухмерный характер. В ПМ псевдощель отсутствует, а дисперсия валентной зоны аналогична дисперсии оптимально допированных образцов $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}(Dy)$ [12].

3) Рассчитанная четность ARPES-спектров в точках Γ, M, X для АФМ фазы с учетом парциальных вкладов является положительной в соответствии с [6]. Наличие ненулевого фототока в Γ связано с малым E_u -неприводимым представлением для состояния $\alpha_{0\sigma}(\tilde{b}_{1,\sigma'} \leftrightarrow {}^1\tilde{A}_1)$ -квазичастицы с $\mathbf{k} = \Gamma$, но не с дополнительным спутничным состоянием. Особенностью фототока в центре зоны Бриллюэна является также его пропорциональность вкладу в спектральную плотность только от плоскостных кислородных орбиталей.

4) Учет спиновых флуктуаций существенно меняет зонную структуру. Действительно, бездисперсный уровень в АФМ фазе имеет нулевую дисперсию и нулевой спектральный вес в изинговском варианте расчета. За счет флуктуаций уровень приобретает дисперсию и спектральный вес. При этом зонная структура оксихлоридов с учетом спиновых флуктуаций подобна зонной структуре допированного изинговского АФМ. Малый спектральный вес виртуального уровня, приобретенный за счет спиновых флуктуаций, приводит к тому, что он должен восприниматься как низкоэнергетический спутник в ARPES-спектрах. Вероятно, эффекты затухания вообще не позволяют его разрешить на фоне основного квазичастотного пика.

Авторы благодарят проф. А. Лихтенштейна (Голландия) за полезные советы, проф. Д.М. Эдвардса (Великобритания) и проф. А. Олеса (Польша) за внимание к настоящей работе, молодых сотрудников проф. В. Нолтинга (Германия): Тильмана Хиккеля и Питера Синюкова за интенсивное обсуждение настоящей работы.

Список литературы

- [1] Z. Zangwill. Physics at Surfaces. Cambridge University Press, Cambrigg, England (1988).
- [2] T. Tohyama, S. Maekawa. Supercond. Sci. Technol. **13**, 17 (2000).
- [3] F. Ronning, C. Kim, D.I. Feng, D.S. Marshall, A.G. Loeser, L.L. Miller, J.N. Eckstein, I. Bozovic, Z.-X. Shen. Science **282**, 2067 (1998).

- [4] R.B. Laughlin. Phys. Rev. Lett. **79**, 9, 1726 (1997).
- [5] T. Tohyama, Y. Shibata, S. Mackawa, Z.-X. Shen, N. Nagaosa, Z.Z. Miller. J. Phys. Soc. Japan **69**, 9, 3716 (2000).
- [6] M. Grioni, H. Berger, S. Larosa, I. Vobornik, F. Zwick, G. Margaritondo, R. Kelley, J. Ma, M. Onellion. Physica **B230–232**, 825 (1997).
- [7] R. Hayn, H. Rosner, V.Yu. Yushankhai, S. Haffner, C. Durr, H. Knupfer, G. Krabbes, H.S. Golden, J. Fink, H. Eschrig, D.J. Singh, N.T. Hein, A.A. Menovsky, Ch. Jung, G. Reichardt. Phys. Rev. **B60**, 1, 645 (1999).
- [8] В.А. Гавричков, С.Г. Овчинников, А.А. Борисов, Е.Г. Горячев. ЖЭТФ **118**, 2, 422 (2000).
- [9] R. Raimondi, J.H. Jefferson, L.F. Feiner, Phys. Rev. **B53**, 13, 8774 (1996).
- [10] В.А. Гавричков, С.Г. Овчинников. ФТТ **40**, 2, 184 (1998).
- [11] Р.О. Зайцев. ЖЭТФ **68**, 1, 207 (1975).
- [12] D.S. Marshall, D.S. Dessau, A.G. Loeser, C.-H. Park, A.Y. Matsuura, J.N. Eckstein, I. Bozovic, P. Fournier, A. Kapitulnik, W.E. Spicer, Z.-X. Shen. Phys. Rev. Lett. **76**, 25, 4841 (1996).
- [13] С.Г. Овчинников. ЖЭТФ **107**, 3, 796 (1995).
- [14] P. Horsch, W. von der Linden. Z. Phys. **B72**, 181 (1988).
- [15] C. Grober, R. Eder, W. Hanke. Phys. Rev. **B62**, 7, 4336 (2000).