

# Magnetska i nabojna uređenja u Kupratnim supravodičima

---

**Nikšić, Goran**

**Doctoral thesis / Disertacija**

**2015**

*Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj:* **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

*Permanent link / Trajna poveznica:* <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:771605>

*Rights / Prava:* [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

*Download date / Datum preuzimanja:* **2024-10-04**



*Repository / Repozitorij:*

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)





Sveučilište u Zagrebu  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET

Goran Nikšić

# **MAGNETSKA I NABOJNA UREĐENJA U KUPRATNIM SUPRAVODIČIMA**

DOKTORSKI RAD

Zagreb, 2015.



Sveučilište u Zagrebu  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET

Goran Nikšić

# **MAGNETSKA I NABOJNA UREĐENJA U KUPRATNIM SUPRAVODIČIMA**

DOKTORSKI RAD

Mentor: Prof. dr. sc. Denis Sunko

Zagreb, 2015.



University of Zagreb  
FACULTY OF SCIENCE

Goran Nikšić

# **Magnetic and charge order in cuprate superconductors**

DOCTORAL THESIS

Supervisor: Professor Denis Sunko, PhD

Zagreb, 2015

Doktorski rad izrađen je na Sveučilištu u Zagrebu Prirodoslovno-matematičkom fakultetu,  
na Zavodu za teorijsku fiziku kondenzirane tvari

Mentor: prof. dr. sc. Denis Sunko

Doktorski rad ima: 97 stranica

Doktorski rad br.: \_\_\_\_\_

## **Zahvale**

Posebno zahvaljujem mentoru, prof. dr. sc. Denisu Sunku na neizmjernom strpljenju i kvalitetnom usmjeravanju. Tokom izrade ovog doktorata autorovom razumijevanju materije, od eksperimenata do teorije, doprinijeli su mnogi pojedinci iz Hrvatske i svijeta, a posebno znanstvena zajednica sa PMF-a u Zagrebu, Instituta za fiziku te Instituta Ruđer Bošković. Posebno zahvaljujem doc. dr. sc. Ivanu Kupčiću, prof. dr. sc. Slavenu Barišiću te dr. sc. Osoru Slavenu Barišiću.

*Ovaj rad posvećujem svojoj najdražoj Jeleni koja je uz mene u svemu, pružajući potporu kakvom ni sam koji put nisam u stanju uzvratiti. Ona je svjetlo mog života i najveći poticaj da napredujem kao osoba.*

## Sažetak

Glavna tema rada je magnetski odziv itinerantnih fermiona u nekoliko modela vodljivih ravnina u kupratnim visokotemperaturnim supravodičima. Poseban naglasak stavljamo na razlike u spektrima ispod i iznad temperature otvaranja pseudoprocjepa.

Na početku predstavljamo kuprate i njihov poprilično složen fazni dijagram. U fazi sa pseudoprocjepom, koja se javlja ispod karakteristične temperature  $T^*$ , samo dio Fermijeve plohe je u procjepu, a u njoj se pronalazi i mnoštvo različitih magnetskih i nabojnih uređenja. Postoje dvije osnovne vrste magnetskih spektara u kupratima: prvi koji nalikuje pješčanom satu, s dvije grane sa suprotnim disperzijama, i drugi sa samo jednom granom na visokim frekvencijama, karakterističan za živin kuprat Hg1201. Eksperimenti upućuju na moguće magnetsko porijeklo pseudoprocjepa, pa pretpostavljamo da on nastaje kondenzacijom neke vrste magnetskih fluktuacija s plauzibilnom disperzijom koja odgovara gornjoj grani opaženoj u eksperimentima. Takav dinamički otvoreni pseudoprocjep parametriziramo konstantnim statičkim procjepom na valnom vektoru  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{AF}$ . Eksplicitna  $\mathbf{k}$ -ovisnost procjepa nije potrebna za reprodukciju eksperimentalnih ARPES spektara, no gušenje procesa raspršenja elektrona na magnonima mora rasti s temperaturom.

Pokazujemo kako modeli bez međudjelovanja predviđaju i nekomenzurabilne magnetske faze, u suprotnosti s eksperimentima neutronske raspršenja u kojima su opaženi signali samo na komenzurabilnom vektoru  $\mathbf{Q}_{AF}$  na temperaturama blizu  $T^*$ . Uvođenje korelacija, uzrokovanih jakim kulonskim odbijanjem na bakrovim orbitalama, razrješava ovu nekonzistentnost i predviđa isključivo komenzurabilno AF uređenje na visokim temperaturama. Procjep oko vH točaka bilo kojeg porijekla, otvoren na  $\mathbf{Q}_{AF}$  ispod  $T^*$  dovodi do stvaranja potrebnog procjepa u magnetskom spektru. Gornju granu pobuđenja, točno iznad tog procjepa, stoga pripisujemo čestično-šupljinskim pobuđenjima, a ne nekom kolektivnom modu, što je uobičajeno u literaturi. Pokušaj interpretacije faze s pseudoprocjepom kao pravog AF prijelaza, rješavanjem Dysonove jednadžbe, kviri ove rezultate i udaljava ih od eksperimentalnog režima. Ovo je sukladno pretpostavci da pseudoprocjep nije fazni prijelaz, već postupni prijelaz. Isti procjep predviđa i korektnu vrijednost valnog vektora nabojnih uređenja, koja je viša od one u modelima bez međudjelovanja. Pitanje nabojnog uređenja koje se u nekim kupratima poput Bi2201 javlja blizu  $T^*$  ostaje otvoreno.

**Ključne riječi:** supravodič, kuprat, pseudoprocjep, neutronske raspršenje

Rad ima 97 stranica, 75 slika, 5 tablica i 47 literarnih navoda. Izvornik je napisan na hrvatskom jeziku.



## Abstract

The main focus of the thesis are magnetic responses of itinerant fermions in several models relevant for the  $\text{CuO}_2$  plane in cuprate superconductors. In particular, we study the changes in magnetic spectra on passing through the pseudogap phase.

First we introduce the cuprate superconductors and their rather complicated phase diagram. The pseudogap phase, appearing below a characteristic temperature  $T^*$ , features a partially gapped Fermi surface and the coexistence of several fluctuating spin and charge density waves. Magnetic spectra can be divided into two groups: one shaped like the hourglass, with two branches, and the other with only one, high energy branch (in the mercury cuprate  $\text{Hg1201}$ ). As suggested by experiments, this phase is most likely magnetic, so we assume it is brought on by a condensation of some magnetic mode with a plausible dispersion conforming with the upper branch of the magnetic excitations. The dynamically opened pseudogap is parametrised as a static gap at  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{\text{AF}}$  and no explicit  $\mathbf{k}$ -dependence is required to describe the gap shape measured in ARPES. The damping rate of this electron-magnon scattering, used here as a parameter, is required to increase with temperature.

Non-interacting metallic models are shown to predict incommensurate phases, in sharp contrast with neutron scattering experiments which observe only commensurate signals at  $\mathbf{Q}_{\text{AF}}$  at very high temperatures, close to  $T^*$ . Introducing strong correlations, caused by a strong Coulomb repulsion on the copper orbitals, resolves this inconsistency and recovers the tendency towards commensurate AF order at high temperatures. A gap of any origin, opening around the antinodal parts of the Fermi surface below  $T^*$  around  $\mathbf{Q}_{\text{AF}}$  opens a spin gap in the magnetic spectrum. The part of the upper branch of magnetic excitations, just above the gap, is therefore identified as interband particle-hole excitations, rather than the usual collective modes of some ordered state. Attempts to interpret the low-temperature response as a real phase transition, by solving the Dyson equation for an AF state, result in magnetic spectra differing greatly from the experimental ones. This is consistent with the assumption that the pseudogap phase boundary is a crossover rather than real phase transition. The same constant gap function reproduces the correct wave vector for the low-temperature charge density wave order, which is higher than the antinodal nesting of the non-interacting models. The bismuth cuprate  $\text{Bi2201}$  may, however, feature a CDW gap opening at the antinode already at  $T^*$ , therefore leaving open the question of the correct nesting vector for this class of cuprates.

**Keywords:** superconductor, cuprate, pseudogap, neutron scattering

The thesis contains 97 pages, 75 figures, 5 tables i 47 references. Originally written in Croatian.

# Sadržaj

<b>1. Uvod</b>	1
1.1. Od prvog otkrića do rekordera	1
1.2. Fazni dijagram kuprata	2
1.2.1. Supravodljiva faza	2
1.2.2. Pseudoprocjep	3
1.3. Uvodni teorijski koncepti i pojmovi	4
1.3.1. Struktura	5
1.3.2. Elektronske skale	6
1.3.3. Bozonski modovi i veličine	8
1.4. Teorijski opisi Fermijeve plohe i neutronske raspršenja	8
<b>2. Eksperimentalne tehnike i važniji rezultati na kupratnim uzorcima.</b>	11
2.1. ARPES - fotoelektrični učinak	11
2.2. Raspršenje neutrona	16
2.2.1. Lantanovi kuprati	18
2.2.2. Lantanov barijev kuprat	18
2.2.3. Živin kuprat Hg1201	19
2.2.4. Bizmutov i itrijev kuprat	20
2.3. Strukturna mjerenja i nabojna uređenja	20
2.4. Neriješena pitanja i glavni ciljevi rada	23
<b>3. Teorijski modeli</b>	24
3.1. Hubbardov model i antiferomagnetizam	25
3.2. Ugnježđenje u modelu s jednom vrpcom	27
3.2.1. Susceptibilnost i singularne točke	28
3.2.2. Komenzurabilno ili nekomenzurabilno uređenje	32
3.2.3. Neinteragirajući model s tri vrpce	33
3.2.4. Susceptibilnost u Emeryjevom modelu	34
3.2.5. Utjecaj temperature i popunjenja vrpce	35

3.2.6.	Apsolutni iznosi susceptibilnosti . . . . .	37
3.2.7.	Orbitalni rastav susceptibilnosti . . . . .	37
3.3.	Fermijeve plohe za različite valne vektore ugnježđenja . . . . .	39
3.4.	Korelacije u normalnom stanju . . . . .	41
3.4.1.	Kisik i bakar u $U_d \rightarrow \infty$ teoriji [35] . . . . .	41
3.4.2.	Visokotemperaturni fazni dijagram s jakim korelacijama . . . . .	45
3.4.3.	SDW susceptibilnost . . . . .	46
3.5.	Pseudoprocjep i dinamička slika . . . . .	48
3.5.1.	Vlastita energija elektrona porijeklom od elektron-bozon međudjelovanja . . . . .	49
3.5.2.	Kolektivni modovi itinerantnog i lokaliziranog podsustava . . . . .	50
3.5.3.	Gušenje u pseudoprocjepu i zatvaranje pseudoprocjepa . . . . .	52
3.6.	Susceptibilnost $\bar{\chi}^0(\mathbf{q}, \omega)$ ispod $T^*$ . . . . .	54
3.7.	Korelacije u stanju s procjepom . . . . .	57
3.7.1.	Utjecaj korelacija na magnetski spektar . . . . .	57
3.8.	Nabojno uređenje ispod $T^*$ . . . . .	57
3.9.	Usporedba s učincima supravodljivosti . . . . .	60
<b>4.</b>	<b>Rezultati</b> . . . . .	<b>62</b>
4.1.	Prilagodba parametara vrpce na ARPES u kupratima . . . . .	62
4.1.1.	Lantanovi kuprati (LSCO, LBCO) . . . . .	63
4.1.2.	Bizmutovi kuprati . . . . .	64
4.1.3.	Itrijevi kuprati (YBCO) . . . . .	65
4.1.4.	Živin barijev kuprat, Hg1201 . . . . .	66
4.2.	Magnetski spektar funkcije $\bar{\chi}^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)$ u kupratima . . . . .	67
4.2.1.	Hg1201 - živin kuprat . . . . .	68
4.2.2.	Lantanovi kuprati . . . . .	69
4.3.	Nabojna uređenja i veza sa spinskim . . . . .	70
<b>5.</b>	<b>Zaključak i rasprava rezultata</b> . . . . .	<b>71</b>
5.1.	Normalno stanje . . . . .	71
5.2.	Otvaranje pseudoprocjepa . . . . .	72
5.3.	Nabojno uređenje u fazi s pseudoprocjepom . . . . .	74
5.4.	Zaključak i perspektive . . . . .	75
<b>A.</b>	<b>Model s jednom vrpcom</b> . . . . .	<b>77</b>
<b>B.</b>	<b>AF uređenje u aproksimaciji srednjeg polja</b> . . . . .	<b>79</b>

<b>C. Disperzijske relacije Emeryjevog modela</b> . . . . .	83
C.1. Susceptibilnosti u trovrpčanom modelu . . . . .	84
<b>D. Verteks <math>U_{d\mu}</math></b> . . . . .	85
<b>E. <math>pdp</math> propagator</b> . . . . .	87
<b>F. SDW ljestvični dijagram</b> . . . . .	89
<b>Literatura</b> . . . . .	91
<b>Životopis</b> . . . . .	96

# Poglavlje 1

## Uvod

U ovom poglavlju predstavljamo kuprate uz kratak povijesni pregled istraživanja. Opisat ćemo njihova najzanimljivija svojstva i fazni dijagram, s naglaskom na fazu s pseudoprocjepom. Pred kraj uvodimo osnovne teorijske koncepte, neophodne za razumijevanje eksperimenata.

### 1.1 Od prvog otkrića do rekordera

Istraživanje supravodiča započelo je 1911. godine opažanjem da otpor elementarne žive iščezava na temperaturama ispod 4.2 K [1]. Klasični metalni supravodiči, kakva je i živa, prelaze u supravodljivo stanje tek na takvim, vrlo niskim temperaturama, ispod kritične temperature  $T_C \lesssim 10$  K. Potraga za visokom kritičnom temperaturom  $T_C$  je trajala desetljećima, čak i nakon otkrića mehanizma supravodljivog sparivanja. Najvažnija motivacija za postizanje supravodljivosti na višim temperaturama su golema ušteda u opskrbi električnom energijom i mnoge druge primjene za koje nije praktično hladiti sustave na jako niske temperature.

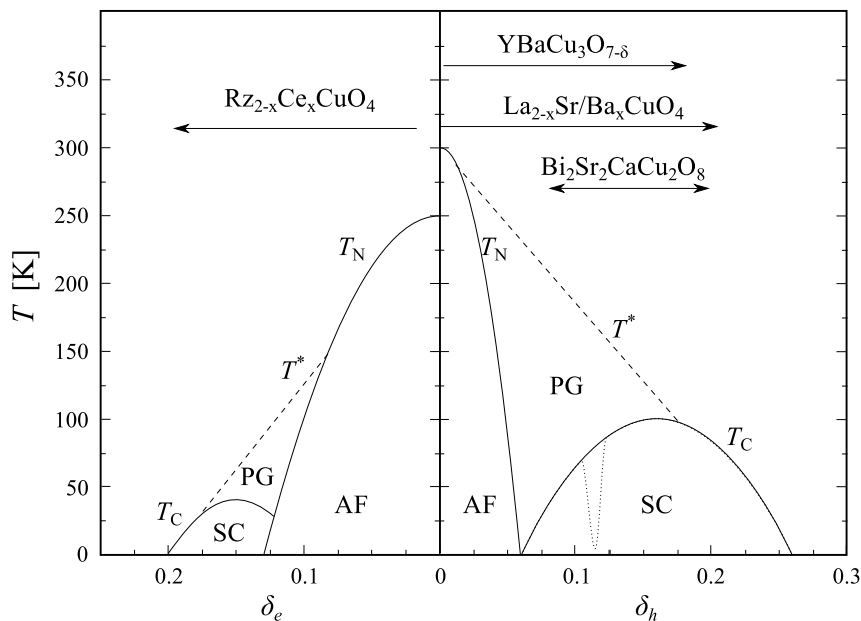
Prvi supravodič iz porodice kuprata otkriven je 1986. godine [2], a radi se o lantanovom barijevom kupratu (LBCO), kemijske formule  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ , s temperaturom supravodljivog prijelaza od 30 K, desetak K iznad do tada najviše poznate. Iz formule su vidljiva dva ključna strukturna elementa: vodljiva  $\text{CuO}_2$  ravnina te primjese oksida rijetkih metala, čijim dodavanjem se dramatično mijenjaju svojstva materijala. Osnovni spojevi (engl. *parent compound*) svih kuprata su antiferomagnetski izolatori, za LBCO to je lantanov kuprat  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ . LBCO i njemu srodan lantanov stroncijev kuprat (LSCO), kemijske formule  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , dopiranjem prolaze redom antiferomagnetsku (AF) fazu, fazu spinskog stakla, fazu s pseudoprocjepom, supravodljivu fazu te fazu klasičnog metala, uz faze lokalnog ili makroskopskog uređenja nabojnih ili spinskih pruga (engl. *stripes*).

Otkriće visokotemperaturne supravodljivosti (VTS) potaknulo je revoluciju u eksperimentalnim tehnikama, o kojima će više riječi biti u idućem poglavlju, ali i napredak u sintezi uzoraka. Tako je u prvih nekoliko godina kritična temperatura  $T_C$  porasla na preko 100 K, a u

trenutku pisanja ovog rada, rekord od 133 K (164 K pod tlakom) drži živin barijev kuprat (HBCO)  $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ . No osim tih, do prije 30-ak godina nevjerojatnih iznosa temperature supravodljivog prijelaza, fazni dijagram kuprata sadrži mnoštvo drugih zanimljivih faza i pojava.

## 1.2 Fazni dijagram kuprata

Najvažnije termodinamičke veličine u istraživanju kuprata su dopiranje 2D ravnine, temperatura, magnetsko polje i tlak (tipičan fazni dijagram skiciran je na slici 1.1). U ovom radu ćemo tlak i magnetsko polje ostaviti po strani, uz eventualni komentar gdje bude potrebno. Dopiranje je koncentracija nosilaca izražena kao broj nosilaca po jediničnoj ćeliji, koji za slučaj sa samo jednom vrpcom na Fermijevom nivou poprima vrijednost između 0 i 2, a za polupopunjenu vrpcu je jednak 1. Najčešće ćemo ga izraziti kao postotno odstupanje od koncentracije polupopunjene vrpce, tj. popunjeno od 1.15 šupljina odgovara 15% šupljinskog dopiranja.



**Slika 1.1:** Fazni dijagram kupratnih VTS (lijevo elektronska, desno šupljinska dopiranja) s prikazom supravodljivih (SC), antiferomagnetskih (AF) faza te faze s pseudoprocjepom. Temperatura otvaranja pseudoprocjepa  $T^*$  je uočljivo viša od supravodljive kritične temperature  $T_C$  za poddopirane uzorke oko 10% šupljinskog dopiranja. RZ je neki od elemenata rijetkih zemalja (Nd, Pr, Sm ili kombinacija La/Pr) kojima se elektronski dopiraju cerijevi kuprati. Oko šupljinskog dopiranja od otprilike 12.5% je crtkanom linijom označen pad supravodljive kritične temperature  $T_C$  u  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ .

### 1.2.1 Supravodljiva faza

Supravodljiva faza sa šupljinske strane je kupolastog oblika uz optimalno dopiranje između 15 i 20% i karakterizira je  $d$ -valni parametar uređenja, ali i koegzistencija s uređenjima vala

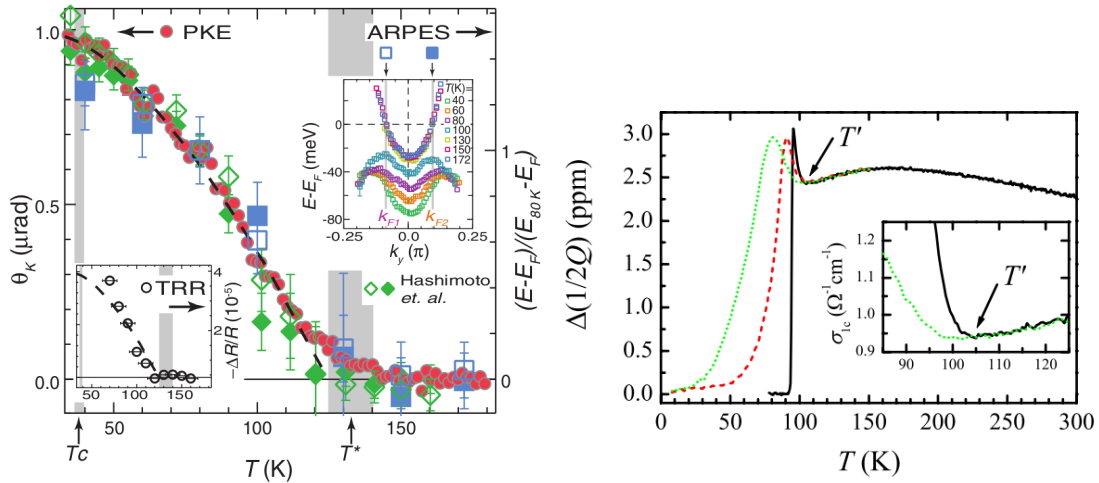
gustoće spina (eng. kratica SDW) ili vala gustoće naboja (eng. kratica CDW), što je upućivalo na spregu s tim uređenjima. LBCO uzorak dopiran s  $1/8$ , tj. 12.5% šupljina po jediničnoj ćeliji, doživljava s povećanjem temperature strukturni fazni prijelaz iz niskotemperaturne tetragonalne u niskotemperaturnu ortorompsku fazu, što naglo narušava supravodljivost i uspostavlja magnetsku fazu pruga, a to se na faznom dijagramu vidi kao duboki urez u SC fazi (slika 1.1). YBCO u svom faznom dijagramu sadrži sličnu anomaliju, no sniženje supravodljive kritične temperature  $T_C$  je znatno manje. Na elektronski dopiranoj strani nalazi se još jedna, manje stabilna supravodljiva faza, što se očituje nižom vrijednošću kritične temperature i užim rasponom dopiranja u kojem ona postoji.

U visokotemperaturnim supravodičima još uvijek se traga za uzrokom supravodljivog sparivanja. U uobičajenoj BCS teoriji kvanti titranja rešetke (fononi) posreduju raspršenju elektrona čije efektivno međudjelovanje može biti privlačno u nekom kratkom vremenskom intervalu. To dovodi do sparivanja, a na dovoljno niskoj temperaturi do kondenzacije parova. U kupratima je elektron-fonon međudjelovanje nedovoljno jako da bi objasnilo tako visoke kritične temperature  $T_C$ .

### 1.2.2 Pseudoprocjep

AF dio faznog dijagrama, uključujući i osnovni spoj s polupopunjenom vrpcom, je asimetričan: na elektronski dopiranoj strani AF postoji do visokih dopiranja, a na šupljinski dopiranoj strani dugodosežno AF uređenje nestaje već na nekoliko postotaka dopiranja te ga zamjenjuje faza s pseudoprocjepom (engl. *pseudogap*, PG), bez dugodosežnog reda. Smatra se da je riječ o postupnom prijelazu (engl. *crossover*), a ne pravom faznom prijelazu. Ta "faza" je metalna, budući da kutno razlučiva fotoemisija i ispod  $T^*$ , temperature otvaranja PG, mjeri jasnu, iako nepotpunu Fermijevu plohu. Temperaturna ovisnost tog procjepa podsjeća na ovisnost parametra uređenja faznog prijelaza drugog reda. Sličnu temperaturnu ovisnost imaju i opservable drugih eksperimentalnih proba (slika 1.2). U transportnim mjerenjima, međutim, pseudoprocjep se ne očituje tako jasno, iako se odstupanje od običnog metalnog režima uočava na istoj temperaturi  $T^*$ .

Za sada ne postoji jedinstveno mišljenje o porijeklu ove faze. Supravodljive fluktuacije, tj. pre-formirani Cooperovi parovi bez dugodosežne fazne koherencije su jedan od mogućih kandidata za objašnjenje PG faze. Ponašanje temperatura  $T_C$  i  $T^*$  u ovisnosti o magnetskom polju smatramo ključnim za razlučivanje njihovih porijekla: magnetsko polje uopće ne utječe na  $T^*$ , a potiskuje supravodljivi prijelaz prema 0 K. U skladu sa slikom 1.2b, supravodljive fluktuacije postoje u uskom rasponu temperatura  $T_C < T < T'$ , pri čemu je  $T' \ll T^*$  [4]. Ovo opažanje isključuje mogućnost scenarija u kojem SC fluktuacije otvaraju PG. U ovom radu ćemo stoga ispustiti supravodljivo sparivanje iz svih računa te usporediti svoje rezultate s onima iz znanstvene literature koji uključuju SC stanje.



**Slika 1.2:** Eksperimentalno opažanje pseudoprocjepa. Lijevo: kompilacija nekoliko tehnika iz [3], koje sve opažaju pojavu parametra uređenja na  $T^*$ ; desno: transportno mjerenje iz [4] u kojem se pseudoprocjep očituje kao mala promjena nagiba ovisnosti otpornosti o temperaturi ili promjena površinske impedancije (na slici) oko 200 K. Supravodljive fluktuacije su osjetljive na vanjska magnetska polja. Na ovaj način moguće je odrediti treću karakterističnu temperaturu  $T'$ , koja je iznad kritične temperature  $T_C$ , ali znatno ispod  $T^*$ .

Za PG fazu karakteristično je mnoštvo nabojnih i magnetskih lokalnih (fluktuirajućih) uređenja: val gustoće naboja (VGN, engl. CDW), val gustoće spina (VGS, engl. SDW) i miješana uređenja (pruge, engl. *stripes*). Redoslijed pojave tih lokalnih, fluktuirajućih faza ugrubo dijeli kuprate na dvije porodice: one s  $T^* > T_{\text{CDW}} > T_{\text{SDW}}$  (LSCO, LBCO) te one sa  $T^* \approx T_{\text{CDW}} \gg T_{\text{SDW}}$  (YBCO, BSCCO). Te fluktuacije su potencijalni kandidati za parametar uređenja u PG fazi. Postoji klasa fizikalnih teorija koje pretpostavljaju postojanje orbitalnih struja u osnovnom stanju [5]. Recentna mjerenja ukazuju na to da je taj scenarij malo vjerojatan [6].

Razumijevanje pseudoprocjepa smatramo važnim preduvjetom za razumijevanje visokotemperaturne supravodljivosti, budući da otvaranje pseudoprocjepa prethodi stvaranju supravodljivog stanja. Stoga će otkriće kritičnih fluktuacija koje uvode fazu pseudoprocjepa zasigurno olakšati i određivanje porijekla bozonskog "ljepila" odnosno posrednika supravodljivom sparivanju. Različiti spektri magnetskih pobuđenja i njihova osjetljivost na supravodljivo sparivanje su stoga posebno važni za razumijevanje obje faze pa u ovom radu najveću pažnju posvećujemo upravo magnetskim odzivima u različitim modelima. U 2. poglavlju predstaviti ćemo najvažnije eksperimentalne rezultate koji usmjeravaju postupke i raspravu u kasnijim poglavljima.

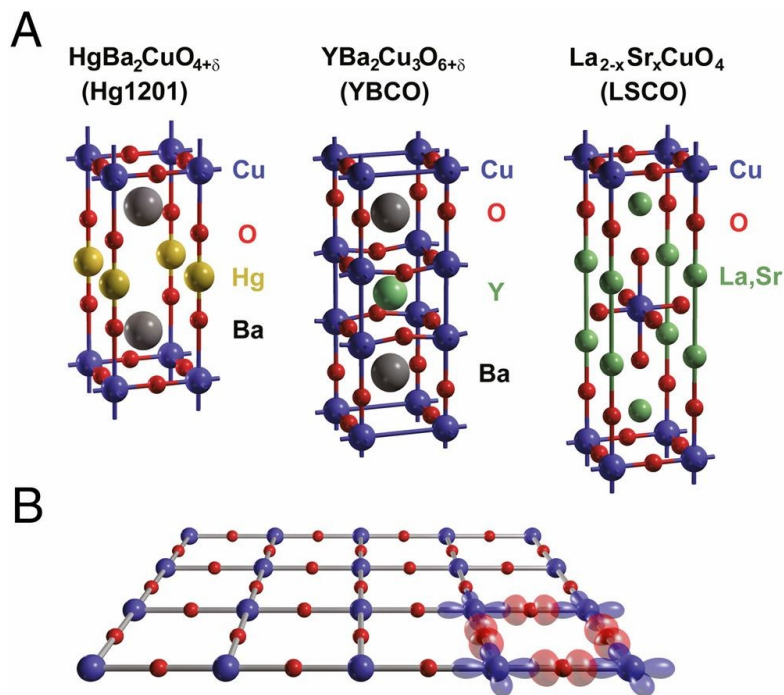
### 1.3 Uvodni teorijski koncepti i pojmovi

U ovom radu razmatramo svojstva i odziv itinerantnih elektrona, odnosno šupljina u 2D rešetci. Ovo potpoglavlje uvodi neke osnovne termine i teorijske koncepte koje ćemo koristiti u pregledu i interpretaciji eksperimentalnih rezultata u poglavlju 2.



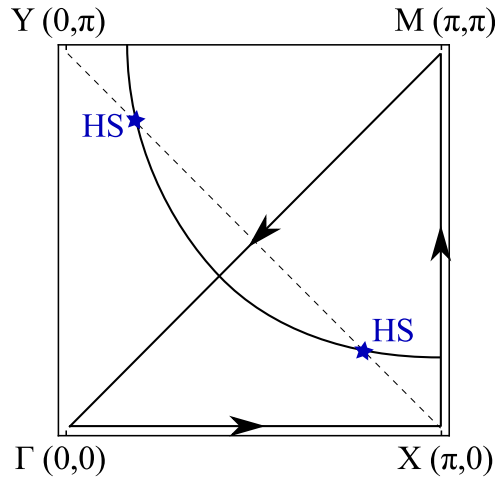
### 1.3.1 Struktura

Kuprati su spojevi slojevite građe, u kojoj se izmjenjuju slojevi oksida različitih metala, često s primjesama rijetkih zemalja (slika 1.3). Najznačajniji strukturni elementi su ravnine bakrovog oksida  $\text{CuO}_2$ . Te ravnine, zajedno s tzv. vršnim (engl. *apical*) kisikovim atomima izvan  $\text{CuO}_2$  ravnina i primjese rijetkih elemenata na složen način utječu na elektrone i fonone u rešetci. Radi jednostavnosti zadržat ćemo se na razmatranju kvadratne 2D rešetke, budući da je vodljivost najjača upravo u  $\text{CuO}_2$  ravninama [4], a iznos ortorompske distorzije rešetke u ortorompskim fazama veoma malen.



**Slika 1.3:** Struktura tri najznačajnija materijala te skica jedne ravnine bakrovog oksida. Vršni kisikovi atomi (na slici izvan  $\text{Cu}$ -ravnina) te primjese Hg, La, Ba premoštavaju  $\text{CuO}_2$  ravnine stvarajući među njima vrlo slabe veze. Vizualizacija je preuzeta iz [7].

Jedinična ćelija je dimenzije  $a \times a$ , gdje je parametar rešetke  $a$  tipično oko 0.38 nm. Recipročna rešetka je također kvadratna s parametrom reda veličine  $1.5 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$ . Vektore direktne i recipročne rešetke označavamo masnim uspravnim ( $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{k}$ ), a njihove iznose kosim slovima ( $r$ ,  $k$ ). Prvom Brillouinovom zonom (IBZ) nazivamo Wigner-Seitzovu ćeliju u recipročnom prostoru, tj. skup točaka koje su bliže ishodištu recipročne rešetke nego ijednom od njenih ostalih čvorova. U prikazu veličina u recipročnom prostoru valne vektore ćemo zapisati u jedinicama recipročne rešetke, tako da je rub IBZ na 0.5 tih jedinica. Koji put ćemo, radi izravne usporedbe s nekim eksperimentima, prikazivati bezdimenzionalnu veličinu  $ka$  čiji je raspon  $[0, \pi]$ , pa su  $(\pi, \pi)$  koordinate točke M na rubu BZ. Elektronske i bozonske disperzijske relacije te različite susceptibilnosti ćemo uobičajeno prikazivati samo duž linija visoke simetrije, a te linije i pripadne oznake su dane na slici 1.4.



**Slika 1.4:** Definicija linija visoke simetrije u IBZ. Najčešće ćemo prikazivati veličine u jednodimenzionalnoj varijabli  $qa$  koja obilazi trokut  $\Gamma$ – $X$ – $M$ – $\Gamma$  označen strelicama. Debela crna linija je prototip oblika fermijeve plohe kuprata, a plava zvjezdica označava tzv. "hotspotove" u kojima Fermijeva ploha siječe rub AF Brillouinove zone.

### 1.3.2 Elektronske skale

Svako elektronsko stanje definirano je spinskim indeksom  $\sigma$ , valnim vektorom  $\mathbf{k}$  koji odgovara pseudoimpulsu  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  te energijom. Energija je povezana s valnim vektorom  $\mathbf{k}$  disperzijskom relacijom  $E(\mathbf{k})$ . Nosioци u kupratima su daleko od režima neinteragirajućeg fermionskog plina, budući da je  $k_{Fa} \approx 1$ , pa je vrpčasta struktura nužna. Zbog toga ćemo koristiti aproksimaciju čvrste veze kao mikroskopski korektan opis disperzijske relacije. Širine vrpce u kupratima su tipično nekoliko eV, dok se najzanimljivije pojave za ovaj rad događaju u području širine 0.2 eV oko kemijskog potencijala.

U ravnini bakrovog oksida  $\text{CuO}_2$ , kemijskom potencijalu su najbliže kisikove  $2p$  te bakrove  $3d$  i  $4s$  orbitale. U dodacima su izvedene disperzijske relacije elektronskih vrpce u nekoliko modela koje koristimo:

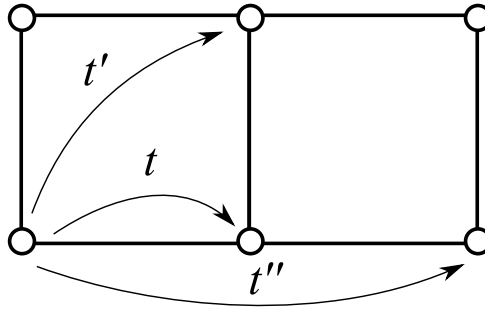
- Model jedne vrpce, u kojem se sve orbitale osim bakrove  $3d_{x^2-y^2}$  uzimaju u obzir efektivno, uz parametre preskoka na 1., 2., ... susjedne čvorove:

$$E(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a) - 4t' \cos k_x a \cos k_y a + \dots \quad (1.1)$$

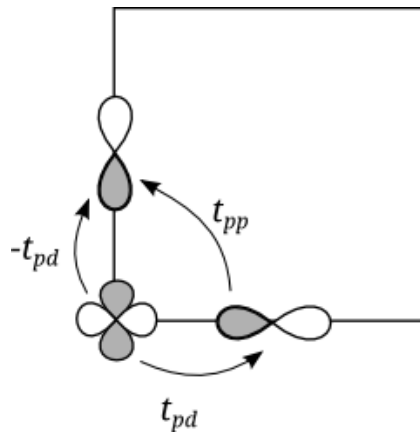
- Model s tri vrpce ( $L = 1, 2, 3$ ), u kojem su zadržane sve orbitale osim bakrove  $4s$ , uz efektivno povećanje preskoka među kisikovim orbitalama.

$$E_L(\mathbf{k}) = -2r(\mathbf{k}) \cos\left(\frac{\varphi(\mathbf{k})}{3} - \frac{2L\pi}{3}\right) + \frac{2}{3}\Delta_{pd} \quad (1.2)$$

Pomoćne funkcije  $r(\mathbf{k})$ ,  $\varphi(\mathbf{k})$  su definirane u dodacima i na složen način ovise o parame-



**Slika 1.5:** Efektivni preskoci na daleke čvorove kristalne rešetke. Najvažniji za kvalitativno korektan oblik Fermijeve plohe je  $t'$  koji mora imati predznak suprotan od  $t$ .



**Slika 1.6:** Orbitale uobičajenog Emeryjevog modela: uobičajena je konvencija  $t_{pp} < 0$ . Razmak energija nehibridiziranih orbitala,  $\Delta_{pd}$ , je tipično 1 – 1.5 eV.

trima modela  $t_{pd}$ ,  $t_{pp}$  i  $\Delta_{pd}$ .

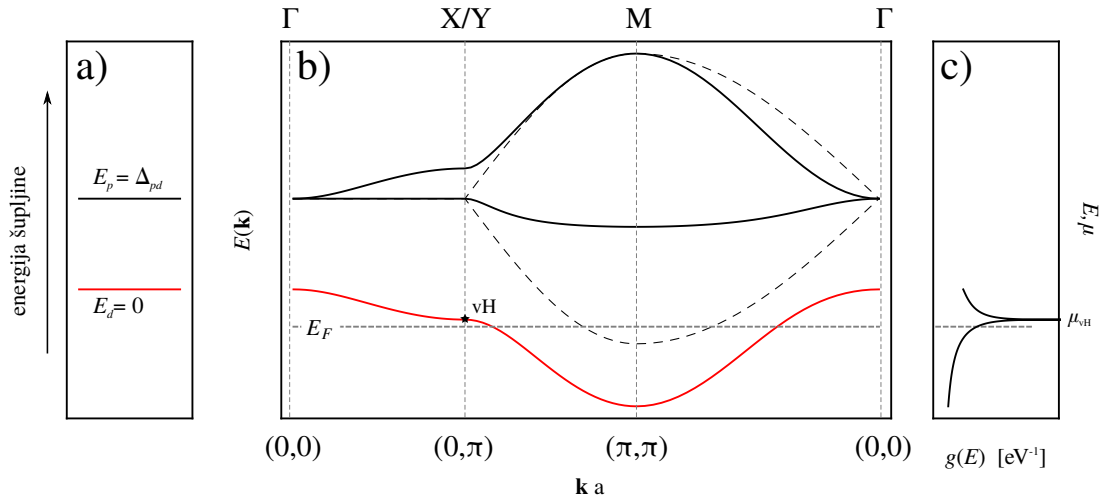
- Model sa sve četiri vrpce, koji može opisati sva svojstva Fermijeve plohe s korektnim iznosima energija orbitala [8] i integrala preskoka no otežava numeričko izvednjavanje opservabli.

Tipičan prikaz elektronskih vrpce je ilustriran na slici 1.7 u modelu tri vrpce.

Još jedan koristan pojam jest Fermijeva brzina elektrona/šupljine, tj. nagib disperzije:

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}). \quad (1.3)$$

U eksperimentima kutno razlučive fotoemisije nju se lako izravno mjeri te su ti iznosi reda veličine 1 – 2 eV Å. Disperzijska relacija u točki  $\mathbf{k}_{vH} = (\frac{\pi}{a}, 0)$  ima sedlenu točku (maksimum u  $k_x$  smjeru, minimum u  $k_y$  smjeru ili obrnuto) u kojoj je brzina jednaka nuli. Stoga je u toj točki gustoća stanja divergentna što uvelike utječe na neka svojstva nosilaca (na dnu i vrhu vrpce je Fermijeva brzina također nula, ali te točke nisu sedlene nego lokalni ekstermi). Većinu podataka o vodljivim elektronima tj. šupljinama dobivamo interpretacijom ARPES spektara, o kojima će biti više riječi u sljedećem poglavlju.



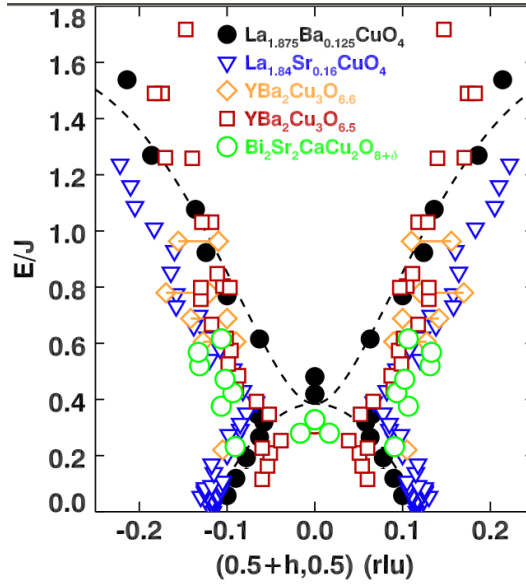
**Slika 1.7:** Ilustracija stvaranja vrpce u  $\text{CuO}_2$  ravnini. a) Energije nehibridiziranih orbitala razmaknute su za  $\Delta_{pd} \sim 1$  eV. b) Crtkane linije predstavljaju dvije vrpce sastavljene samo od kisikovih orbitala (ukupna širina kisikovih vrpce je  $8t_{pp}$ ). Debele linije su tri potpuno hibridizirane vrpce za LSCO parametrizaciju (parametri dalje u tekstu), a crvena linija je vezujuća (engl. *bonding* vrpca) koja siječe kemijski potencijal ( $E_F$  na  $T = 0$ ). Gusto crtka linija je srednji položaj kemijskog potencijala za poddopirane kuprate, a zvjezdica je tzv. van Hoveova (vH) točka, sedlena točka funkcije  $E(\mathbf{k})$ . c) Gustoća stanja vezujuće vrpce; singularitet se nalazi točno na energiji  $E_{vH}$ .

### 1.3.3 Bozonski modovi i veličine

Kristalna rešetka je za elektrone statična, budući da je njihovo kretanje redovima veličine brže od vibracija rešetke. Ipak, elektroni snažno međudjeluju sa titranjima rešetke (fononima) koje ćemo spominjati u raspravi o nabojnim uređenjima. Također, elektroni mogu stvoriti magnetske valove spina koje nazivamo magnonima, a za njih ćemo koristiti iste oznake kao i za fonone, budući da ih karakteriziraju isti kvantni brojevi. Valne vektore neke grane  $\lambda$  bozonskog moda označavat ćemo s  $\mathbf{q}$ , a pripadnu frekvenciju  $\omega_\lambda(\mathbf{q})$ . Tipične energije fononskih modova su do 50 meV, a magnonske oko 0.3 eV, uz donju granicu reda veličine 30 meV na  $\mathbf{Q}_{AF}$ , ispod koje spektralna snaga opada. Prikladno skalirani spektri magnetskih pobuđenja za nekoliko najvažnijih klasa kuprata prikazani su na slici 1.8. Oblik spektra podsjeća na pješčani sat pa se ti spektri često tako nazivaju u literaturi.

## 1.4 Teorijski opisi Fermijeve plohe i neutronske raspršenja

Najčešće su teorijski modeli započinjali Hamiltonijanom s jednom orbitalom na bakrovim atomima, budući da je magnetski moment na bakru odgovoran za svojstva osnovnog nedopiranog AF materijala. Plauzibilno ispuštanje kisikovih stupnjeva slobode uvodi efektivni integral superizmjene  $J$  između susjednih bakrovih orbitala. Za AF parametrizaciju takav Hubbardov model sa superizmjenom  $J$  može se prevesti u Heisenbergov, a za kuprate najvažnija posljedica ovog postupka je pojava akustičkih magnetskih pobuđenja kao rješenja  $(\mathbf{q}, \omega(\mathbf{q}))$  za nultočke



**Slika 1.8:** Magnetski spektri nekoliko klasa kuprata, skalirani na parametar superizmjene za pripadajuće nedopirane AF spojeve. Točke prikazuju lokalne maksimume intenziteta neutronske raspršenja, koji se često poistovjećuju s kolektivnim pobuđenjima (magnonima) s frekvencijom  $\omega(\mathbf{q})$ . Najvažnije opažanje jest pojava tih maksimuma na nekomenzurabilnom valnom vektoru blizu  $\mathbf{Q}_{\text{AF}}$  te spajanje donjih i gornjih grana magnetske disperzije u komenzurabilnom valnom vektoru na konačnoj frekvenciji  $\tilde{\omega}$ .

nazivnika interagirajuće susceptibilnosti [9, 10]:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)}{1 - U\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (1.4)$$

Da bi se objasnilo neke pojave u eksperimentalnom spektru magnetskih pobuđenja, bilo je najčešće potrebno računati susceptibilnost  $\chi^{(0)}$  u supravodljivom stanju i na temperaturama na kojima to nije opravdano.

Drugi pristup je bio resumacija susceptibilnosti s efektivnom  $\mathbf{q}$ -ovisnom superizmjenom  $J(\mathbf{q}) = J_0(\cos q_x a + \cos q_y a)$ , te interagirajućom susceptibilnošću [11, 12]

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)}{1 + J(\mathbf{q})\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (1.5)$$

Uz supravodljivi procjep, često je u takvim pristupima potreban konačan iznos efektivne superizmjene koji bi trebao iščezavati u modelu s jednom vrpcom:

$$J = \frac{4t^2}{U_d}. \quad (1.6)$$

Korektan izraz [13] za superizmjenju u 4 redu računa smetnje u Emeryjevom modelu je:

$$J = \frac{4t_{pd}^4}{(\Delta_{pd} + U_{pd})^2} \left( \frac{1}{U_d} + \frac{2}{2\Delta_{pd}U + p} \right). \quad (1.7)$$

Iako u limesu  $U_d \rightarrow \infty$  zadržava konačan iznos superizmjene, ovaj izraz prema autorima citiranog članka nije adekvatan budući da spomenuti razvoj sporo konvergira (ovaj član u redu je neovisan o  $t_{pp}$ !) i sasvim slučajno predviđa točan iznos.

Najranije nakon otkrića visokotemperaturne supravodljivosti, upravo je SC stanje bilo najizgledniji kandidat za objašnjenje svojstava metalne PG faze. Prije svega, u BCS stanju već postoji procjep  $\Delta_{SC}$  koji je opažen u eksperimentima, a postojale su indikacije pre-formiranih Cooperovih parova iznad  $T_C$ . Nekoherencija i s njome povezana duljina Fermijeve luka najčešće se modeliraju, npr. gušenjem koje raste s temperaturom te time zatvara procjep na dijelu Fermijeve plohe [14]. U radovima K. Levin i M. R. Normana često je postojanje nekomenzurabilnih vrhova pripisano koherentnim faktorima u BCS stanju [11, 12, 15] u sprezi s efektivnom superizmjnom.  $\mathbf{k}$ -ovisan BCS procjep stvara različite energije praga za međuvrpane procese što stvara nekomenzurabilne maksimume. Ovakav učinak može imati i procjep nekog drugog podrijetla, kao što ćemo pokazati u ovom radu. Drugi procjep, različit od  $\Delta_{SC}$  je nužan, budući da se neki učinci procjepa u vrpici opažaju i izvan supravodljive faze, tj. za  $\Delta_{SC} = 0$ .

Vrijedi istaknuti i tzv. spin-fermion model u kojem se, u najjednostavnijoj aproksimaciji, spregom između lokaliziranog magnetskog moda i fermionskog magnetskog moda javlja uzorak sličan onom viđenom u eksperimentima raspršenja neutrona. No postojanje procjepa je i u takvim pristupima [16] bilo pripisano supravodljivosti. Vođeni eksperimentima opisanima u potpoglavlju 1.2.2, ostavljamo po strani supravodljivo uređenje i pristupamo fazi sa pseudoprocjepom kao fluktuirajućoj magnetskoj fazi. Čestično-šupljinski simetrični signali, karakteristični za BCS stanje, vidljivi su isključivo ispod  $T_C$ , što ćemo komentirati u kasnijim poglavljima gdje bude potrebno. Ranijim istraživanjem pokazano je da kisikova orbitala ima znatan udio u valnoj funkciji osnovnog stanja [17, 18] te ostajemo pri Emeryjevom modelu kao početnom koraku.

## Poglavlje 2

# Eksperimentalne tehnike i važniji rezultati na kupratnim uzorcima.

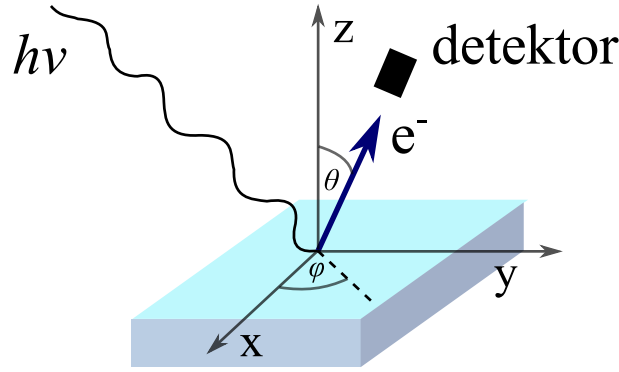
Od otkrića VTS napredovale su ili su iz temelja razvijene mnogobrojne eksperimentalne metode koje se danas naširoko primjenjuju u fizici kondenzirane tvari. Uz transportna mjerenja, najvažnije tehnike su svakako raspršenje elektromagnetskih valova, kutno razlučiva fotoemisija i raspršenje neutrona. U ovom poglavlju ćemo opisati nekoliko eksperimentalnih tehnika te njihova najvažnija opažanja.

### 2.1 ARPES - fotoelektrični učinak

Fotoelektrični učinak je, najjednostavnije rečeno, izbacivanje elektrona iz materijala pre-davanjem energije fotonom. Ona mora biti dovoljno visoka da savlada izlazni rad iz metala i da preda elektronu minimalnu kinetičku energiju da ga se elektrodom može odvući s površine metala. Kutno razlučiva fotoemisija (engl. **A**ngular **R**esolved **P**hotoemission **S**pectroscopy) je isti učinak, ali selektivan po smjeru kretanja fotona i elektrona/šupljine, što omogućuje eksperi-mentalno opažanje disperzijske relacije popunjenih stanja,  $E(\mathbf{k})$ . Vezanje elektrona u materijalu za upadajući foton opisano je matričnim elementom koji ovisi o smjeru upada, energiji fotona te materijalu.

Tipičan uređaj je prikazan shematski na slici 2.1. Kao izvor fotona koriste se laseri ili sinkrotronski izvori rendgenskih zraka visokih energija. Tipične energije fotona su oko 5 eV za laserske izvore koji nude veliku razlučivost u valnom vektoru na štetu razlučivosti u energiji te suženom rasponu dostupnih valnih vektora. Sinkrotronski izvori omogućuju visoke energije snopa (15 - 150 eV), čime je moguće optimizirati eksperiment, prema potrebnom matričnom elementu vezanja, što čini dostupnima valne vektore iz prvih nekoliko Brillouinovih zona.

Proces fotoemisije se obično modelira procesom s tri koraka [19]. Upadajući foton i izlazeći elektron opisuju se ravnim valovima, poput slobodnih čestica, a proces emisije kvantnomeha-



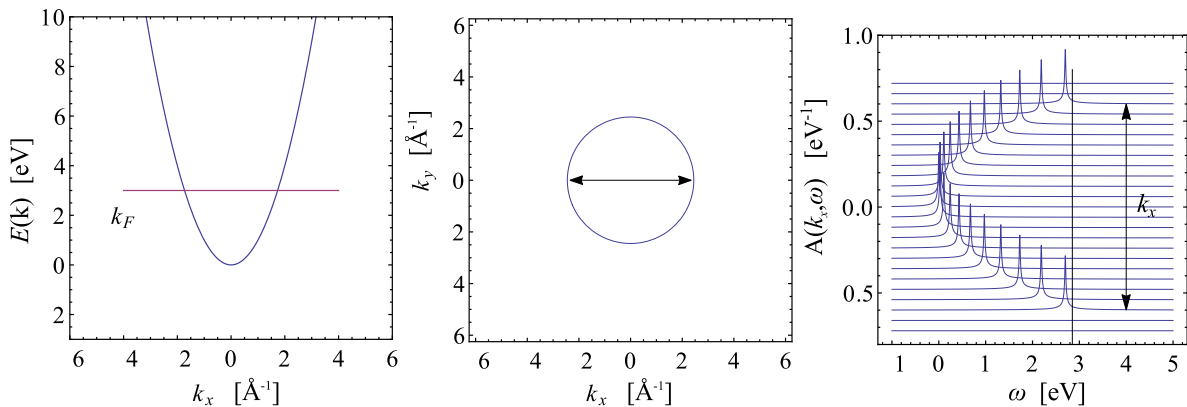
**Slika 2.1:** Geometrija  $\mathbf{k}$ -ovisne fotoemisije, odnosno ARPES eksperimenta. Energije i valni vektori ulazećeg fotona i izlazećeg elektrona su dovoljne za određivanje stanja elektrona prije procesa emisije.

ničkim matričnim elementom. Iako je ovaj model aproksimativan, putovanje fotoelektrona do površine metala, gubici energije, i slično, mogu se uzeti u obzir efektivno pa je vrlo uspješno korišten u objašnjavanju mnogih eksperimenata.

Diferencijalni udarni presjek za fotoemisiju na određenom valnom vektoru i frekvenciji proporcionalan je spektralnoj funkciji materijala, koja je najvažnija opservabla iz koje se može iščitati mnoštvo važnih informacija o materijalu. Vrhovi različitih širina u spektru nazivaju se kvantnomehničkim "stanjima" elektrona određenom valnim vektorom  $\mathbf{k}$  i energijom  $E(\mathbf{k})$ , iako to često nisu dugoživuća svojstvena stanja. U idealnom materijalu bez raspršenja na nečistoćama i bozonskim modovima, spektar bi se sastojao od oštih vrhova  $\delta(\omega - E(\mathbf{k}))$  (primjer spektralne funkcije neinteragirajućeg plina slobodnih čestica prikazan je na slici 2.2):

$$G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - E(\mathbf{k}) + i\eta} \quad (2.1)$$

$$A^{(0)}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.2)$$



**Slika 2.2:** Disperzijska relacija slobodnog elektronskog plina: a) presjek u energiji i jednoj komponenti valnog vektora; b) 2D presjek na konstantnoj energiji; c) zamišljeni ARPES spektar idealnog sustava bez ikakvih raspršenja. Svakom stanju  $E(\mathbf{k})$  odgovara po jedan beskonačno uzak vrh u spektralnoj funkciji.



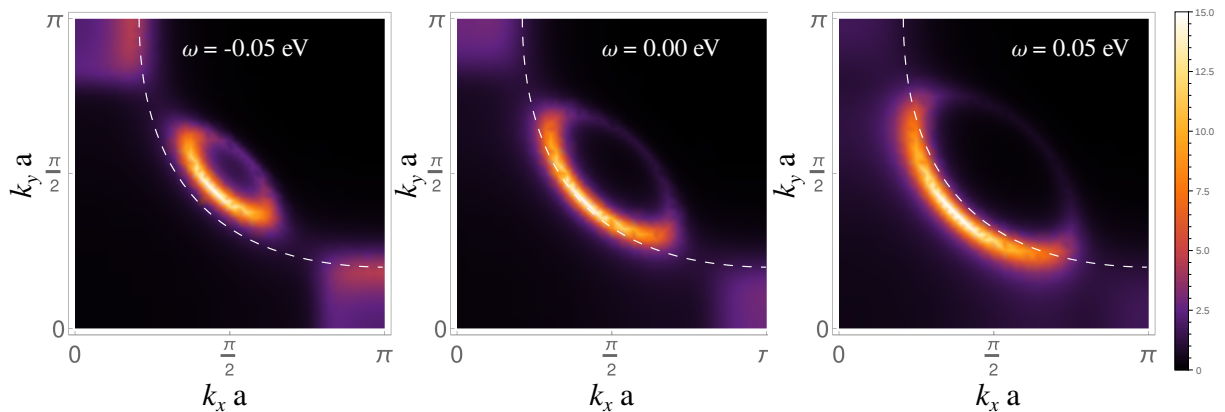
Svako međudjelovanje u takvom čistom sustavu uvodi nesavršenosti: neka stanja postanu zabranjena, nekima se srednje vrijeme života skрати, stanja se miješaju i nastaju kvazičestice. Te procese opisujemo vlastitom energijom (kvazi)čestice  $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ , kompleksnom funkcijom čiji realni dio predstavlja promjenu energije čestice  $E(\mathbf{k}) \rightarrow E(\mathbf{k}) + \Sigma'(\mathbf{k}, \omega)$ , a imaginarni predstavlja širinu u frekvenciji, tj. recipročno srednje vrijeme života  $\Sigma''(\mathbf{k}, \omega)$ . Budući da je to funkcija frekvencije, potrebna je detaljnija analiza spektra da bi se iz njega dobile točne informacije o međudjelovanjima:

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - E(\mathbf{k}) + \Sigma(\mathbf{k}, \omega)} \quad (2.3)$$

$$A(\mathbf{k}) = (-) \frac{1}{\pi} \frac{\Sigma''(\mathbf{k}, \omega)}{(\omega - E(\mathbf{k}) + \Sigma'(\mathbf{k}, \omega))^2 + \Sigma''(\mathbf{k}, \omega)^2} \quad (2.4)$$

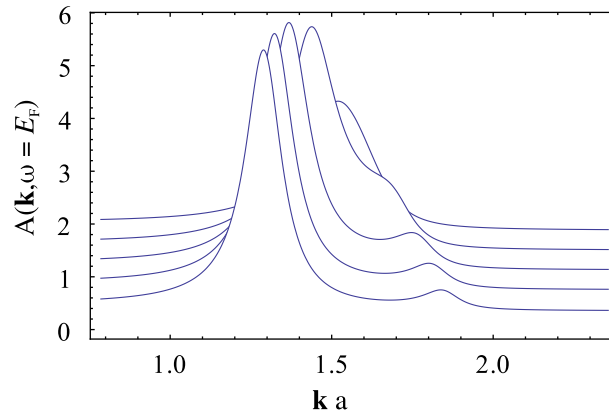
Rezultate ARPES mjerenja prikazuje se na nekoliko načina, u potrazi za elektronskim stanjima na Fermijevoj nivou ili ispod njega:

- "Fermi map" je prikaz intenziteta na Fermijevoj energiji bojom. Ovaj tip prikaza omogućuje identifikaciju stanja koja su prisutna na Fermijevoj plohi sa značajnim intenzitetom te onih koja prividno nedostaju u usporedbi s nekim neinteragirajućim modelom. Najvažnije opažanje u ovom prikazu jest oblik Fermijeve plohe te raspon valnih vektora u kojima su značajni utjecaji međudjelovanja i procjepa. Raspršenja proširuju stanja u valnom vektoru i frekvenciji čime se spušta iznos maksimuma spektralne linije te ona postaje razmazana na ovom prikazu. Procjep u vrpici može pomaknuti neka elektronska stanja na energije ispod ili iznad  $E_F$  (slika 2.3a, c). Na slici smo za ilustraciju ovih pojava koristili parametrizacija  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$  kuprata.



**Slika 2.3:** Intenzitet kakav bi izmjerio ARPES na  $E_F$  ( $\omega = 0$ ) te malo ispod i iznad  $E_F$  u sustavu s otvorenim procjepom te povećanim gušenjem oko vH točaka. Primjećuje se smanjeni intenzitet oko  $\mathbf{k}_{vH}$  te potpuno iščezavanje stanja s Fermijeve energije u tzv. "hotspotu". Stanja ispod i iznad Fermijeve energije otkrivaju disperzijske relacije vrpce. Prazna stanja malo iznad  $E_F$  danas se mogu opažati i običnim, jednofotonskim ARPES uređajem uz pažljivu analizu.

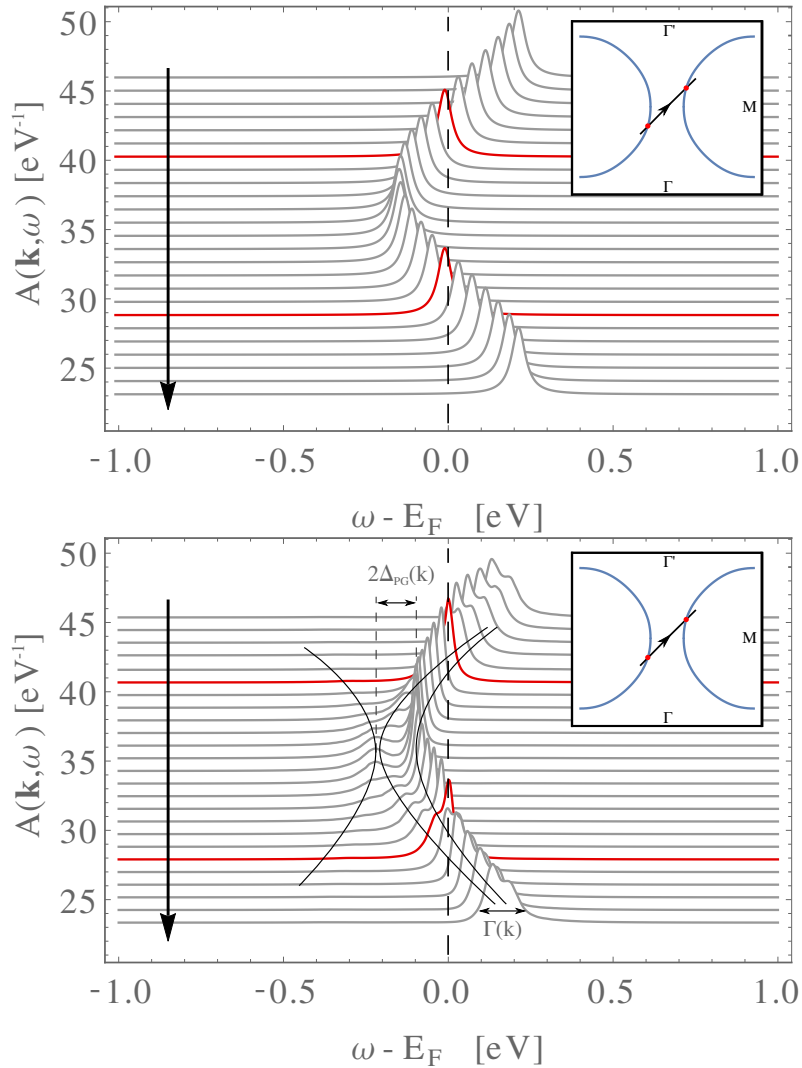
- MDC (engl. Momentum distribution cut, raspodjela po valnim vektorima) je jednodimenzionalni prerez Fermi map prikaza (slika 2.4). Na konstantnoj frekvenciji prikazujemo intenzitet na valnim vektorima duž jednog reza (linije u BZ). Ovaj prikaz omogućuje jasan prikaz širine spektralnih linija u valnom vektoru koje također jako variraju među stanjima.



**Slika 2.4:** MDC prikaz spektralne funkcije za model sa statičkim procjepom u kojem se vidi vrpca (lijevi, visoki signal) te sjena vrpce (manji signal desno).

- EDC (eng. Energy distribution cut, prerez raspodjele po energijama) je prikaz izmjerene spektralne funkcije u ovisnosti o energiji. Najčešće se na istom prikazu kombinira EDC-ove za više valnih vektora ili više temperatura kako bi se prikazalo npr. otvaranje procjepa ili pomak neke spektralne linije. Sa EDC prikaza može se vizualno iščitati mnoštvo važnih parametara koje ćemo kasnije koristiti u modeliranju vodljivih elektrona, a to su:
  1. iznosi i lokacije procjepa u vrpci,
  2. širina  $\Gamma$  spektralnih linija, koja parametrizira učinke raspršenja, koji stvaraju imaginarni dio vlastite energije,
  3. Fermijeva brzina  $v_F(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$  (nagib disperzije u različitim točkama u BZ),
  4. položaj i nagib prijeloma u disperziji.

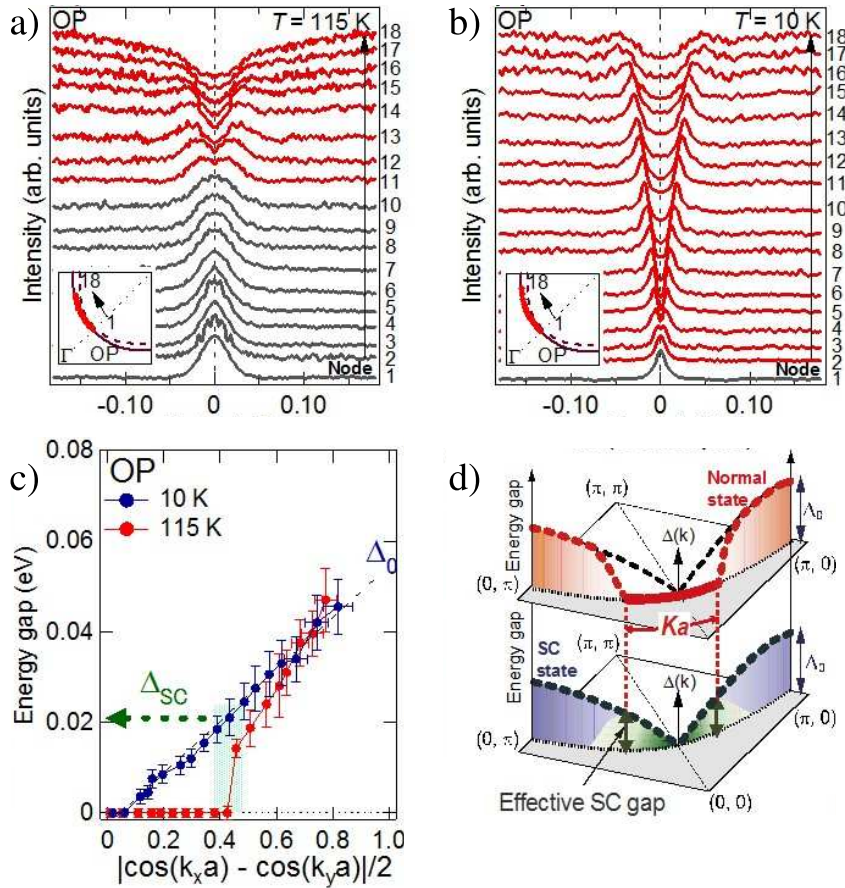
Promotrimo jedan primjer spektralne funkcije neinteragirajućeg sustava te jednog u kojem postoji raspršenje na AF magnonskom modu (slika 2.5 predstavlja EDC bez Fermijeve funkcije tako da budu vidljiva i prazna stanja iznad kemijskog potencijala). Neinteragirajuća slika podsjeća na primjer slobodnog plina sa slike 2.2, no lokalni minimum predstavlja vH točku, a ne dno parabolične vrpce. Na slici s međudjelovanjem primjećuje se: a) na lokalnom minimumu izbjegnuto presjecanje (anticrossing) vrpce i njezine slike pomaknute za valni vektor  $\mathbf{Q}_{AF}$ ; b) pseudoprocjep otvoren na vH točki, rascjepljenje vrpce na svim valnim vektorima, koje potječe od  $\mathbf{q} = 0$  procesa; širenje i sužavanje spektralnih linija. Crvenim linijama često se označava valni vektor  $k_F$  ili njemu najbliži koji se dovoljno približava Fermijevoj energiji. Valni vektori za svaki EDC su razmaknuti duž y-osi, a točke kojima odgovaraju nalaze se duž linije na manjoj, umetnutoj slici.



**Slika 2.5:** EDC prikaz spektralne funkcije za LSCO parametrizaciju bez raspršenja (gore) te s raspršenjem na magnonima (dolje). Sa slike možemo iščitati iznos pseudoprocjepa  $\Delta(\mathbf{k})$  i širine spektralnih linija  $\Gamma(\mathbf{k})$ .

- Često se u literaturi prikazuje i varijacija procjepa duž Fermijeve energije. Budući da je dio Fermijeve plohe unutar procjepa, na tim dijelovima se njen položaj definira kao lokalni maksimum potisnutog intenziteta, ma kako nizak bio. Tako se dobije niz točaka u cijeloj IBZ u kojima se zatim mjeri iznos procjepa (slika 2.6).

Budući da intenzitet spektralne funkcije duž disperzijske relacije u kupratima dosta varira, na određenim energijama je teško odrediti točne vrijednosti  $(\mathbf{k}, E(\mathbf{k}))$  fermionskih stanja. Konkretno, disperzija određena iz EDC i MDC prikaza nije nužno ista [21], a razlika nastupa otprilike 1.5 – 2 eV ispod Fermijevog nivoa. Glavni razlog, osim matičnih elemenata vezanja elektrona na fotone, jest vjerojatno nekoherentan dio spektra, porijeklom od nabojnog nereda na bakrovim orbitalama, kojeg teorija opisana u poglavlju 3 korektno predviđa. Budući da nas zanimaju predviđanja neutronske spektara, ove razlike ne dolaze do izražaja. Prilagodbe parametara vrpce ćemo vršiti u rasponu energija širine  $\sim 0.1$  eV oko Fermijevog nivoa.

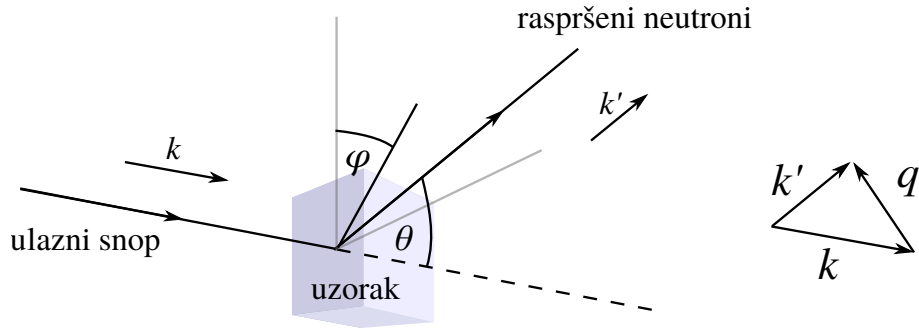


**Slika 2.6:** Procjepi u BSCCO-u prema [20]. a) Pseudoprocjep duž Fermijeve plohe (odozgo prema dolje redom u točkama od ruba do dijagonale BZ) na  $T = 115 \text{ K} \gg T_C$ . Stanja uz rub zone imaju procjep, uz dijagonalu nemaju. b) Isto, na  $T = 10 \text{ K} \ll T_C$ , gdje je procjep otvoren u svim točkama osim na dijagonali IBZ. c) Procjepi (SC i PG) u odnosu na uobičajenu  $d$ -valnu funkciju. PG znatno odstupa od te ovisnosti. d) Čest prikaz procjepa duž Fermijeve plohe, iako za PG ovaj način vizualizacije može voditi do krivih zaključaka [REF na kasnije poglavlje]. Gore: pseudoprocjep (ovdje označen kao "normalno stanje", dolje  $d$ -valni SC procjep).

## 2.2 Raspršenje neutrona

Budući da je neutron nabojno neutralan, jedino se može raspršiti na magnetskom momentu u materijalu. Posebno, raspršenje spinski polariziranih neutrona osjetljivo je na iznos lokalnog magnetskog momenta, tj. moguće je izvršiti izvrtnje spina neutrona. Takvi eksperimenti mogu u današnje vrijeme izmjeriti i jako male iznose lokalnih magnetskih momenata.

Upadajući i izlazeći neutron može se opisati ravnim valom valnog vektora  $\mathbf{k}_{i/s}$ , tj. kao slobodna čestica količine gibanja  $\mathbf{p}_{i/s} = \hbar\mathbf{k}_{i/s}$ . Slika 2.7 prikazuje skicu jednog postava za mjerenje spektra raspršenja neutrona. Iz zakona očuvanja lako se definiraju energija i količina gibanja prenesene uzorku:



Slika 2.7: Geometrija eksperimentalnog postava za mjerenje spektra raspršenja neutrona.

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s, \quad (2.5)$$

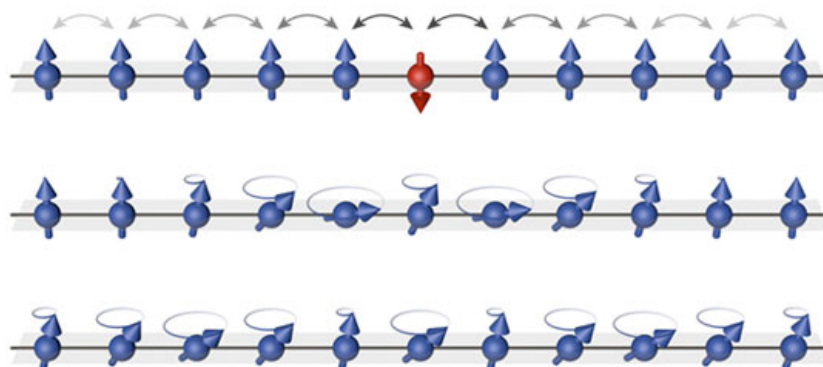
$$\omega = E_i - E_s = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_s^2}{2m}. \quad (2.6)$$

Udarni presjek raspršenja je proporcionalan matričnom elementu koji ovisi o materijalu, valnim vektorima i energiji neutrona te magnetskom strukturnom faktoru:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{q}, \omega) \sim n(\omega, T) \mathcal{M}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) S(\mathbf{q}, \omega), \quad (2.7)$$

pri čemu je  $n$  Boseova funkcija, a magnetski strukturni faktor  $S$  je jednak imaginarnom dijelu magnetske susceptibilnosti. Prema fluktuacijsko-disipacijskom teoremu, to znači da raspršenje izravno mjeri ravnotežne magnetske fluktuacije u sustavu. Vrh, tj. lokalni maksimum funkcije  $S(\mathbf{q}, \omega)$  identificira se s nekim pobuđenjem sustava na tom valnom vektoru i frekvenciji, a statički maksimum ( $\omega = 0$ ) ukazuje na postojanje magnetskog uređenja (slično kao što pojava maksimuma u raspršenju rendgenskih zraka znači postojanje ravnine kristalne rešetke).

Maksimum na  $\mathbf{q} = 0$  odgovara feromagnetskom uređenju, u kojem se magnetski moment ne mijenja iz ćelije u ćeliju u cijelom kristalu. Maksimum na  $\mathbf{q}a = (\pi, \pi)$  znači da postoji anti-feromagnetska superrešetka, tj. da se dogodila antiferomagnetska dimerizacija. Maksimumi na nekomenzurabilnom valnom vektoru ukazuju na pojavu superrešetke nekomenzurabilne s kristalnom rešetkom, tj. na postojanje vala gustoće spina velike valne duljine s obzirom na dimenziju jedinične ćelije (slika 2.8). Orijeentacija tog magnetskog uređenja se u kupratima mijenja od klase do klase, u ovisnosti o dopiranju. Uređenje s valnim vektorom paralelnim sa smjerom Cu-O veza se u literaturi naziva kolinearnim, a uređenje s valnim vektorom u smjeru O-O veza (pod kutem od  $45^\circ$  u odnosu na kolinearno) dijagonalnim. Parametar nekomenzurabilnosti  $\delta$  definira se najčešće kao pomak od AF valnog vektora.



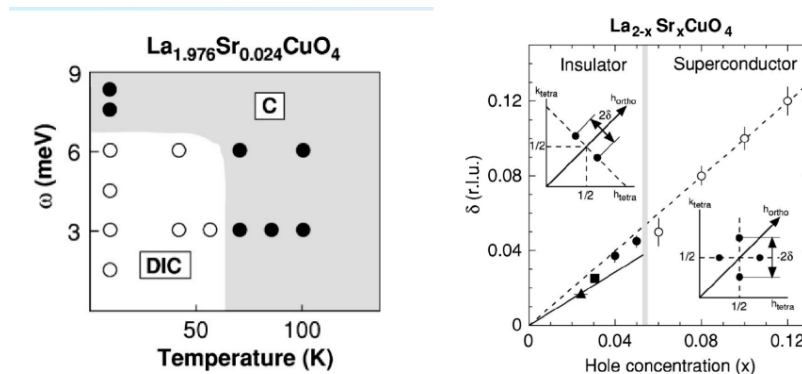
**Slika 2.8:** Neutron može promijeniti orijentaciju jednog spina (gore), no elektroni međudjeluju pa se time uvijek pokreće val magnetizacije kroz cijelu rešetku. Statički analogon se naziva valom gustoće spina (SDW) i predstavlja smrznuti magnon, baš kao što smrzavanje fonona uzorkuje val gustoće naboja (CDW).

### 2.2.1 Lantanovi kuprati

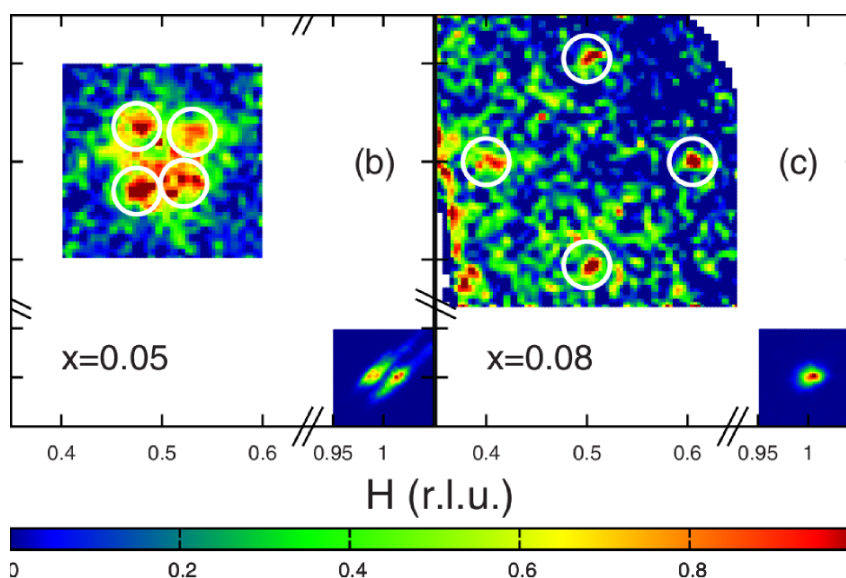
Na visokim temperaturama, na svim dopiranjima, lantanovi kuprati imaju širok komenzurabilan signal na  $\mathbf{Q}_{AF}$  malo ispod  $T^*$ , a iznad te temperature nema superrešetke. Vrlo slabo šupljinski dopirani uzorci LSCO i LBCO materijala su pravi antiferomagneti, što potvrđuje pojava signala na valnom vektoru  $\mathbf{Q}_{AF}$ . Taj signal se oko 2.5% dopiranja proširi te već oko 4% prelazi u četiri dijagonalno nekomenzurabilna vrha, udaljena od  $\mathbf{Q}_{AF}$  dijagonalno za iznos  $\delta \approx 0.05$  jedinica recipročne rešetke. Sa dopiranjem  $\delta$  raste sve do oko 8% dopiranja kad se uređenje naglo promijeni u kolinearno nekomenzurabilno s  $\delta$  koje je i dalje proporcionalno dopiranju (slika 2.9). Na višim frekvencijama, u neelastičnom raspršenju neutrona (INS) se opaža disperzijska relacija magnetskih pobuđenja oblika pješčanog sata: donja grana nastaje sužavanjem kolinearnih nekomenzurabilnih signala sve do uskog vrata, na frekvenciji  $\omega_v$ , na kojoj se oni spajaju u jedan, komenzurabilni. Na još višim frekvencijama signali se ponovno šire i čine gornju granu "pješčanog sata" na  $\omega > \omega_v$  koja je dijagonalno nekomenzurabilna. Ova rotacija signala nije objašnjena u literaturi.

### 2.2.2 Lantanov barijev kuprat

Lantanov barijev kuprat je jedinstven među kupratima, budući da prolazi kroz strukturni fazni prijelaz oko dopiranja od 1/8, tj. 12.5% šupljina. Na tom dopiranju supravodljiva kritična temperatura  $T_C$  pada na oko 1 K, a iznad nje postoji kombinirano nabojno-spinsko lokalno uređenje. Oko 6% dopiranja u LBCO-u se također događa rotacija nekomenzurabilnih signala kao u LSCO-u (2.10).



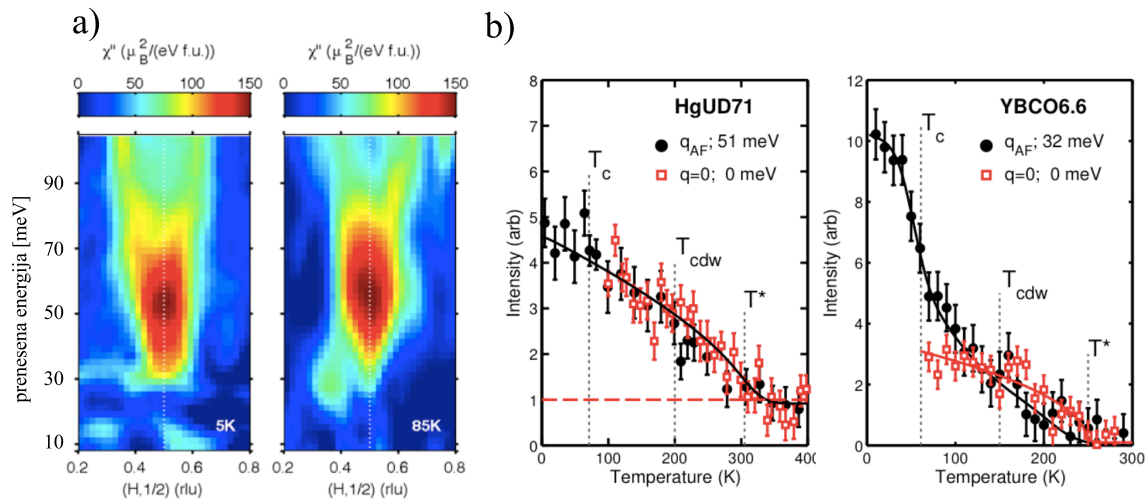
**Slika 2.9:** Valni vektori magnetskog nekomenzurabilnog uređenja u LSCO-u, preuzeti iz [22]. Lijevo: fazni dijagram pojave dijagonalno nekomenzurabilnog signala u neutronsom rasprešenju za uorak izrazito niskog dopiranja - na visokim frekvencijama i temperaturama signal je komenzurabilan. Desno: ovisnost iznosa i orijentacije nekomenzurabilnog valnog vektora o dopiranju.



**Slika 2.10:** Nekomenzurabilni signali u neutronsom raspršenju u LSCO-u [23]. Lijevo: dijagonalni na niskim dopiranjima, izvan supravodljivog područja. Desno: statički kolinearni signali magnetskog uređenja koegzistiraju sa supravodljivošću.

### 2.2.3 Živin kuprat Hg1201

U Hg1201, recentna mjerenja [24] opažaju jednu izotropnu granu magnetskih pobuđenja. Ona postoji na frekvencijama iznad  $\omega_v \approx 50$  meV, ispod koje spektralna snaga iščezava. Uz tu glavnu granu, na eksperimentalnim slikama se nazire i druga grana vrlo malog intenziteta koja naliči na početak donje grane "pješčanog sata", vidljivog u drugim kupratima. Ovaj oblik spektra je neosjetljiv na supravodljivi prijelaz, kao što se vidi i iz temperaturne ovisnosti signala na  $Q_{AF}$ . Stoga je Hg1201 vjerojatno najbolji kuprat za modeliranje metalnog odziva bez uključivanja supravodljivosti.



**Slika 2.11:** Raspršenje neutrona na poddopiranom uzorku Hg1201 kuprata sa  $T_C = 71$  K iz [24]. a) imaginarni dio magnetske susceptibilnosti na 5 K, duboko ispod supravodljivog prijelaza; te  $85\text{K} > T_C$ . Vidljiva je jedna komenzurabilna grana iznad komenzurabilnog maksimuma oko 50 meV, bez znatnog pojačanja signala na niskim energijama ili pojave nekomenzurabilne rezonancije poznate iz drugih kuprata. b) Usporedba temperaturne ovisnosti  $\mathbf{q} = 0$  i  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{AF}$  signala za YBCO i Hg1201: u Hg1201 je  $\mathbf{Q}_{AF}$  signal izrazito neosjetljiv na supravodljivi prijelaz.

### 2.2.4 Bizmutov i itrijev kuprat

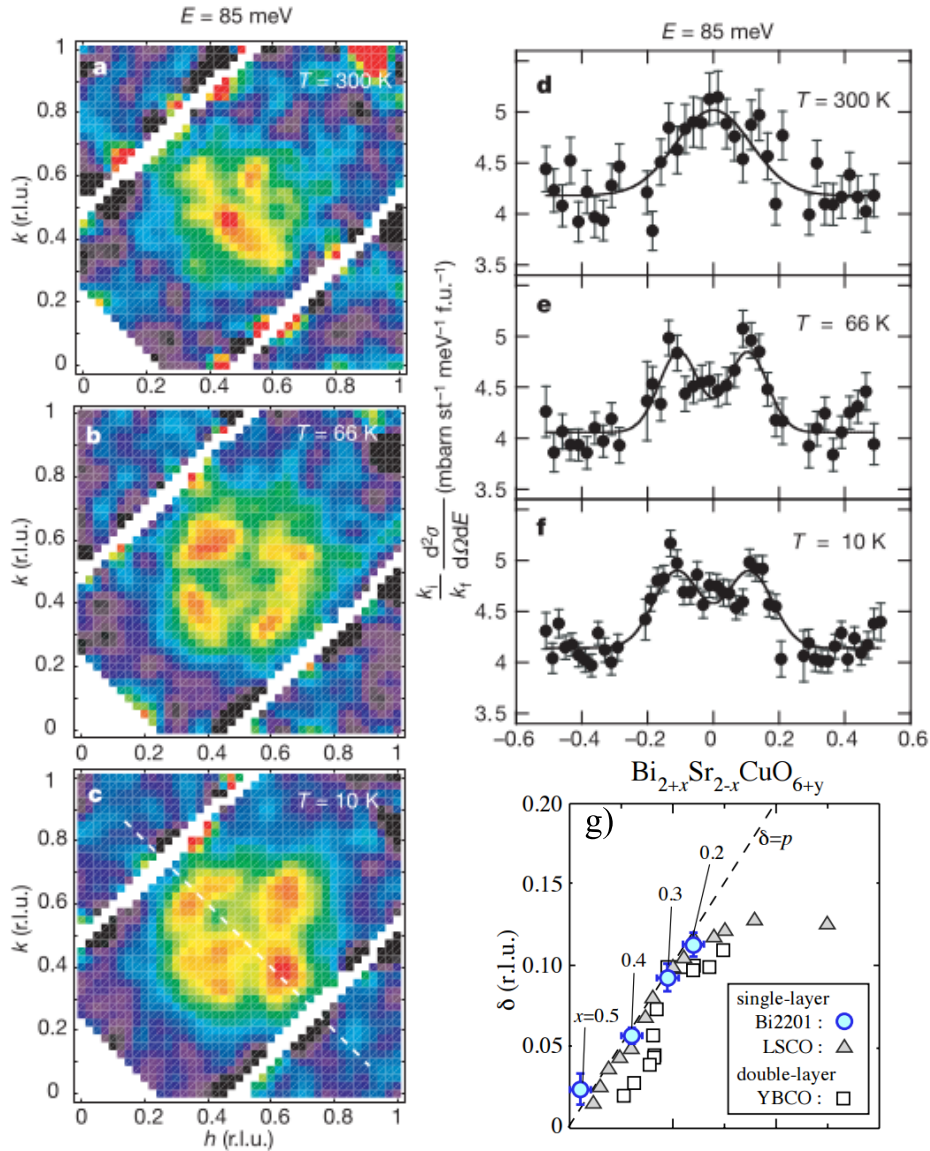
Slično kao i u lantanovim kupratima, u BSCCO-u i YBCO-u postoji spektar s dvije grane, koji podsjeća na pješčani sat (slika 2.12). Prolaskom kroz supravodljivi prijelaz, u niskofrekventnom dijelu "pješčanog sata" iščezava spektralna snaga ispod  $\omega_{res}$  gdje se javlja tzv. rezonancija, tj. pojačanje intenziteta.

## 2.3 Strukturna mjerenja i nabojna uređenja

Ovdje ćemo pružiti kratak osvrt na raspršenje rendgenskih zraka. Osim osnovnih informacija o dimenzijama jedinične ćelije i prostornom rasporedu atoma unutar nje, ove tehnike mogu opaziti i pojavu superrešetki. U kupratima one se javljaju u fazama s valovima gustoće ili lokalnim fluktuacijama nekog od tih uređenja. Primjer takvog signala je signal nabojnog uređenja u živinom kupratu Hg1201 (slika 2.13) koji se javlja na  $T_{CDW} = 220$  K, oko 100 K ispod temperature otvaranja pseudoprocjepa, koji se očituje kao signal oko  $\mathbf{q} = 0$  u neutronsom raspršenju, spomenutom ranije. Slično tome, u bizmutovim i lantanovim kupratima (slika 2.14) pronađeni su CDW signali na nekomenzurabilnim mjestima [26] koji slabe prolaskom kroz supravodljivi prijelaz.

Prema dosadašnjim rezultatima, čini se da postoje dvije kvalitativno različite vrste magnetskih valova gustoće, te barem dvije vrste nabojnih. U jednoravninskom BSCCO-u nabojno uređenje se javlja samo na višim dopiranjima a temperatura njegove pojave se poklapa s tempe-

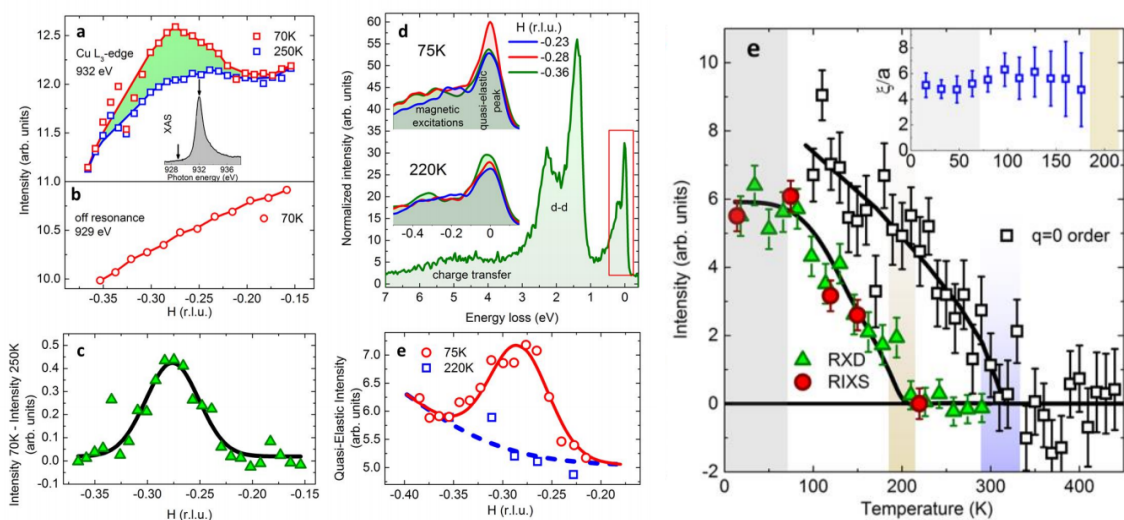




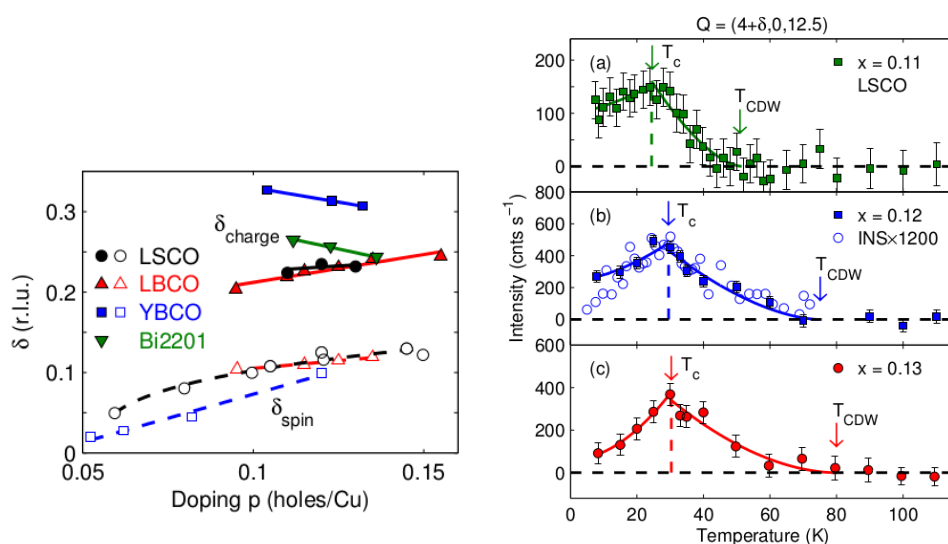
**Slika 2.12:** Lijevo: a) - c) Spektar magnetskih pobuđenja na različitim frekvencijama otkriva donju granu pješčanog sata u YBCO-u. Napomena: četiri nekomenzurabilna signala orijentirana su u smjeru CuO veza, ali je u [25] za prikaz korištena zarotirana BZ. d) - f) Oko temperature pseudoprocjepa signal je komenzurabilan, a diskomenzuracija se javlja hlađenjem uzorka. g) Sabrana ovisnost parametra nekomenzurabilnosti za tri važne klase kuprata. Linearna ovisnost za poddopirane materijale je univerzalna, čak i za različite orijentacije nekomenzurabilnog uređenja.

raturum pseudoprocjepa, tj. opada s dopiranjem. Rezonantno neelastično raspršenje rendgenskih zraka (RIXS) [28] ukazuje na razliku  $T_{CDW}$  i  $T^*$  manju od 5 K na dopiranjima između 10% i 15%, a to znači da je u tom materijalu CDW uređenje vjerojatno jače vezano za pseudoprocjep magnetskog podrijetla ili možda čak ima isto porijeklo.

Slična pojava sprege može se opaziti u razlici  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{AF}$  odziva u Hg1201 i YBCO. U itrijevom kupratu ulaskom u supravodljivu fazu  $\mathbf{Q}_{AF}$  odziv raste, što upućuje na povezanost ova dva uređenja, dok se u Hg1201 ta dva uređenja potpuno razvežu. U lantanovim kupratima, između 10 i 15% šupljinskog dopiranja, valni vektor  $\mathbf{q}_{CO}$  nabojnog uređenja i parametar neko-

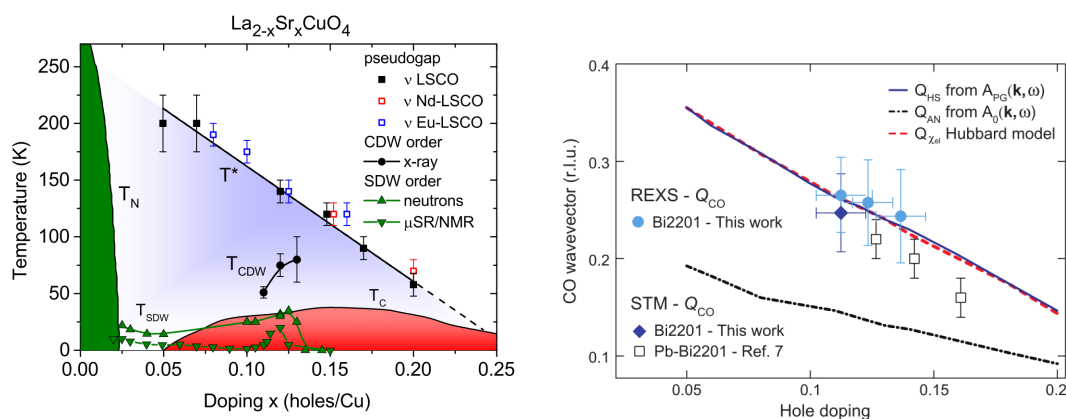


**Slika 2.13:** Rezultati eksperimenata raspršenja rendgenskih zraka na uzorku Hg1201 iz [27]. Lijevo: pojava signala na oko 0.28 j.r.r.; desno: temperaturna ovisnost CDW signala te  $q = 0$  signala pridruženog pseudoprocjepu.



**Slika 2.14:** CDW fluktuacije prate ovisnost SDW fluktuacija u lantanovim kupratima: oba nekomenzurabilna vektora rastu s porastom dopiranja. Na desnoj slici se jasno opaža slabljenje CDW signala ispod  $T_C$  što znači da su ta dva uređenja termodinamički superotstavljena. U jednoravninskom BSCCO-u CDW valni vektor se smanjuje dopiranjem.

menzurabilnosti  $\delta_{IC}$  magnetskog uređenja imaju istu ovisnost o temperaturi, uz poznatu relaciju  $\mathbf{q}_{CO} = 2\delta_{IC}$ . Na nižim dopiranjima nabojno uređenje nestaje zajedno s promjenom orijentacije SDW uređenja.



**Slika 2.15:** Eksperimentalni fazni dijagrami LSCO (lijevo) i BSCCO (desno). Ovisnosti  $T_{CDW}$  su im različite i, kao i na prošloj slici, prate ovisnost valnog vektora o dopiranju.

## 2.4 Neriješena pitanja i glavni ciljevi rada

U ovom radu pokušat ćemo istovremeno objasniti oblik Fermijeve plohe u kupratima te magnetske spektre opažene u eksperimentima raspršenja neutrona. Promatrajući samo pokretljive nosioce, pokušat ćemo klasificirati kuprate prema orijentaciji i iznosu magnetskih i nabojnih uređenja. Pokazat ćemo fenomenološki model otvaranja pseudoprocjepa AF fluktuacijama te opisati značaj koju ima upravo takav procjep za stvaranje dviju grana pobuđenja, opaženih u eksperimentima. Dat ćemo kratak uvid u moguća uređenja ispod temperature otvaranja pseudoprocjepa  $T^*$ , iako će glavina rezultata biti fokusirana na temeprature u neposrednoj blizini  $T^*$ . Temeljna opažanja na kojima ćemo bazirati zaključke su:

- Fermijeva ploha ima  $d4$  simetriju
- Intenzitet na  $E_F$  iščezava bliže vH točkama, iako ne na isti način u različitim kupratima
- Magnetski odziv ima dvije grane koje se spajaju na komenzurabilnom valnom vektoru i konačnoj frekvenciji; ovaj oblik, koji podsjeća na pješčani sat, nije univerzalan; u živinom kupratu Hg1201 donja grana nije vidljiva.
- Valni vektori nabojnih uređenja imaju različite ovisnosti o dopiranju u nekoliko klasa kuprata te ih nije moguće opisati jednostavnim ugnježđenjem kao u kvazi-jednodimenzionalnim materijalima s valom gustoće naboja.

# Poglavlje 3

## Teorijski modeli

U ovom poglavlju ćemo dati pregled teorijskih koncepata i razviti model, krenuvši od aproksimacije čvrste veze u neinteragirajućim modelima do otvaranja pseudoprocjepa i opisa nekih svojstava niskotemperaturne faze.

Na početku opisujemo faze s različitim valnim vektorima uređenja u 2D ravnini koje predviđaju modeli s jednom vrpcom na Fermijevom nivou. Općenito, i modeli s jednom i s više orbitala po jediničnoj ćeliji predviđaju mogućnost nekomenzurabilnih uređenja s valnim vektorom blizu  $\mathbf{Q}_{AF}$ . Glavni nedostatak modela s jednom orbitalom (npr.  $t - J$  model) jest oslanjanje na nefizikalno velike efektivne preskoke unutar rešetke te, vrlo često, na koherentne faktore supravodljivog stanja čak i na  $T \gg T_C$ . Najčešće su takvi modeli mogli opisati jednu opservablu, ostajući nekonzistentni s drugim eksperimentima.

Oslanjajući se na nekoliko važnih eksperimentalnih opažanja, opisanih u prošlom poglavlju, uvodimo Emeryjev model s tri vrpce i u njemu tražimo razrješenje svih nekonzistentnosti. Iznad temperature otvaranja pseudoprocjepa, metal sa Fermijevom plohom kakvu imaju kuprati također bi trebao imati nekomenzurabilne SDW/CDW faze, suprotno eksperimentima. Bogatija struktura ovog modela i korelacije omogućuju uklanjanje tih nekonzistentnosti. Najjača skala u Hamiltonijanu je svakako jako kulonsko odbijanje šupljina na bakrovoj orbitali (Hubbardov član) koji uvodi korelacije među nosiocima već u normalnom stanju iznad  $T^*$ . Te korelacije promoviraju kao dominantno *komenzurabilno* uređenje s valnim vektorom  $\mathbf{Q}_{AF}$  na svim eksperimentalno dostupnim dopiranjima, sukladno brojnim eksperimentima. Bez ovog učinka nije moguće započeti konzistentan opis faze s pseudoprocjepom. Opis jakih korelacija naslanja se na lokalno baždarno invarijantnu teoriju razvijenu u istoj istraživačkoj grupi [29].

Znajući da je prijelaz (ili crossover) na  $T^*$  komenzurabilan, u modelu ga otvaramo raspršenjem fermiona na nekom bozonskom modu centriranim upravo oko  $\mathbf{Q}_{AF}$ , te tražimo magnetske (kolektivne) modove za račun vlastite energije ispod  $T^*$ . Pokazujemo kako rješenje jednadžbe za magnonsku disperzijsku relaciju  $(1 - U\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega))$  ne postoji u normalnom stanju *metalnih* nosilaca, dok je spinski val lokaliziranih spinova pogodan kandidat za otvaranje pseudopro-

cjepa. Otvaranje pseudoprocjepa modeliramo kao pravi fazni prijelaz sa statičkim procjepom sa  $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_{AF}$ , ali s konačnom širinom vrpce koja simulira imaginarni dio vlastite energije. Pokazat ćemo da ovaj postupak daje istovjetne slike ARPES spektara kao i dinamički otvoreni pseudoprocjep.  $T^*$  stoga identificiramo sa  $T_{(MF)}$  za AF fazni prijelaz i eksperimentalno opaženi  $\Delta_{PG}$  sa  $\Delta_{AF}$ , modelirajući nekoherenciju fenomenološkim gušenjem procesa. Ovo nije jedini mogući scenarij otvaranja pseudoprocjepa, budući da postoje naznake da njegovom otvaranju pogoduju promjene *izvan*  $\text{CuO}_2$  ravnine.

Bez obzira na porijeklo pseudoprocjepa, dvije efektivne vrpce nastale njegovim otvaranjem generiraju novi, bogatiji spektar čestično-šupljinskih (*ph*, prema engl. particle-hole) i kolektivnih pobuđenja na  $T < T^*$  pa je naš pristup vrlo općenit i daje konkretna kvalitativna predviđanja u skladu s eksperimentima. Iste jake korelacije koje su otvorile pseudoprocjep na komenzuralnom valnom vektoru mogu dramatično promijeniti kvalitativan izgled magnetskog spektra na niskim temperaturama te pomiču valni vektor nabojnog uređenja u skladu s eksperimentima raspršenja rendgenskih zraka. Ova opažanja otvaraju prostor budućoj klasifikaciji kuprata s obzirom na redosljed faznih prijelaza i prirodu pseudoprocjepa.

### 3.1 Hubbardov model i antiferomagnetizam

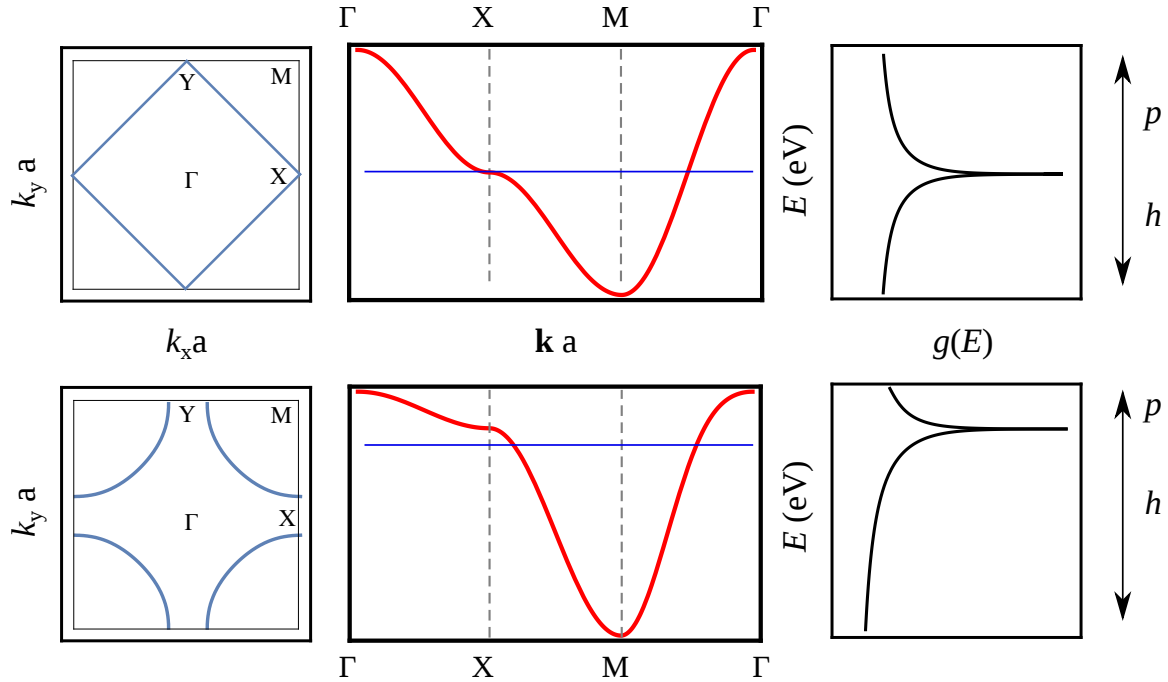
U AF fazi bakrova  $3d_{x^2-y^2}$  orbitala sadrži veliki magnetski moment koji mijenja predznak između susjednih elementarnih ćelija. Stoga ne čudi da je većina ranijih modela dopiranih kuprata, motivirana blizinom izolatorske AF faze, kretala od pretpostavke da je velika većina naboja lokalizirana upravo na toj bakrovoj orbitali. Kisikove orbitale u ovom pristupu su tretirane efektivno, kao integral superizmjene bakrovih orbitala što vodi na Heisenbergov model i dobro opisuje AF uređenje i magnetska pobuđenja.

Takav pristup započinje modelom kristalne rešetke s jednim atomom po jediničnoj ćeliji s energijom  $E_0$  koju uzimamo za ishodište energije elektrona. Vjerojatnost preskoka elektrona s jednog čvora kristalne rešetke na prvi susjedni (oba bakrova atoma) opisana je matricnim elementom  $t$ . Daljnji preskoci se moraju uključiti kako bi Fermijeva ploha imala ispravnu zakrivljenost za realistično popunjenje. Svega nekoliko daljih preskoka je smisleno uzeti u obzir, budući da nije fizikalno opravdano očekivati preskoke na udaljenosti mnogo veće od konstante kristalne rešetke. Disperzijska relacija (izvod u dodatku A) u aproksimaciji prvih i drugih susjeda glasi

$$E(\mathbf{k}) = -2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - 4t' \cos(k_x a) \cos(k_y a). \quad (3.1)$$

Slika 3.1 prikazuje kvalitativnu promjenu uvedenu pojavom preskoka na druge susjede. Taj dijagonalni preskok u kristalnoj rešetci ruši *ph* simetriju koja je nužna za korektan opis oblika Fermijeve plohe. Za  $t' = 0$  gustoća stanja divergira za  $vH$  dopiranje točno na sredini vrpce kao  $\log^2(\mu - \mu_{vH})$ , dok  $t' < 0$  ublažava taj singularitet na  $\log(\mu - \mu_{vH})$  i pomiče ga na šupljinski

dopiranu stranu. Budući da su u toj točki nosioci spori (Fermijeva brzina im iščezava), a gustoća stanja divergira, ova točka će imati posebno važan utjecaj na svojstva mjerljiva u eksperimentima.



**Slika 3.1:** Fermijeva ploha (lijevo), vrpca duž linija visoke simetrije u IBZ (sredina) te gustoća stanja (desno) za model s jednom orbitalom po jediničnoj ćeliji. U gornjem redu prikazane su slike za  $t' = 0$ , a u donjem za konačnu vrijednost preskoka na druge susjede  $t' = -0.35t$ .

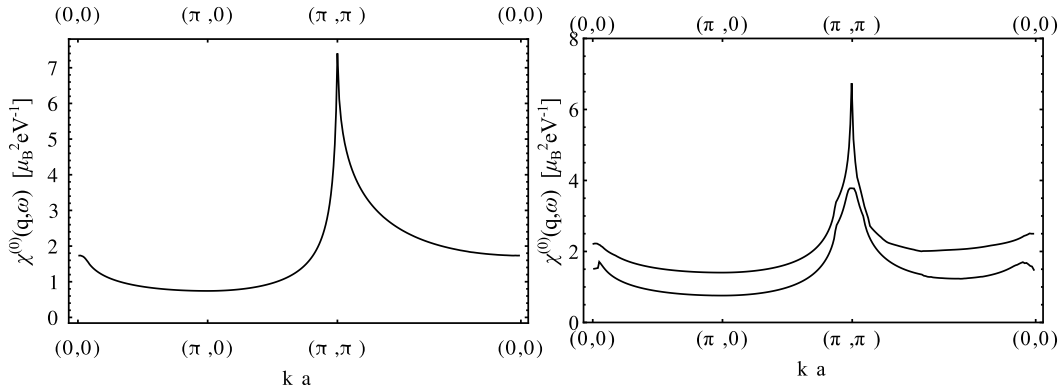
U idealiziranom modelu, bez nečistoća i raspršenja, neinteragirajuća magnetska susceptibilnost (definicija i izvod u idućem odlomku) ima sličan logaritamski singularit na AF valnom vektoru. To znači da će se sustav sigurno urediti [9, 10] za po volji slabo međudjelovanje (tzv. slabo vezanje, engl. "weak coupling" režim). Uvjet nestabilnosti je izveden u dodatku B, a u aproksimaciji srednjeg polja glasi

$$1 - U\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega = 0) = 0. \quad (3.2)$$

Najniža temperatura  $T > 0$  na kojoj je uvjet zadovoljen na nekom valnom vektoru postaje temperatura faznog prijelaza 2. vrste u aproksimaciji srednjeg polja,  $T_{MF}$ . Ista jednadžba na  $T < T_{MF}$  i konačnim frekvencijama daje disperzijsku relaciju magnetskih pobuđenja. Osnovno stanje modela sa  $t' = 0$  je antiferomagnetsko s akustičkim magnetskim pobuđenjima (magnonima), a to odgovara osnovnom, nedopiranom spoju kakav je  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ .

U realnim sustavima nužno je koristiti  $t' < 0$ , no i tada je uvjet divergencije rijetko ispunjen. Susceptibilnost u bilo kojem kanalu mora sadržavati i nekoherentne doprinose te učinke raznih raspršenja koja uvode konačna vremena života tj. konačne širine spektralnih linija. Uzmimo za primjere vrpce s redom malom i velikom vrijednošću  $t' < 0$  (slika 3.2); već raspršenja reda

veliĉine  $k_B T$  mogu singularitet na komezurabilnom valnom vektoru uĉiniti nevidljivim. Stoga je potrebno potraŹiti uvjete nestabilnosti sustava pokretnih nosilaca na svim valnim vektorima te ispitati kako na njih utjeĉe promjena parametara, primjerice popunjenja vrpce i temperature.



**Slika 3.2:** Lijevo: Magnetska susceptibilnost neinteragirajućeg sustava divergira na AF valnom vektoru,  $\mathbf{Q}_{AF} \cdot \mathbf{a} = (\pi, \pi)$  kao  $\log^2(|\mathbf{q} - \mathbf{Q}_{AF}|)$  za  $t' = 0$  i  $\mu = \mu_{vH}$ . Desno: magnetska susceptibilnost za  $t' < 0$  s gušenjem od 0 i 5 meV; već ovo vrlo slabo gušenje uništava singularitet. Isti uĉinak ima temperatura od 50ak K.

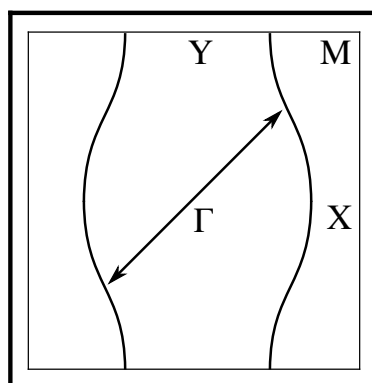
### 3.2 UgnjeŹenje u modelu s jednom vrpcom

Prije detaljne analize magnetske susceptibilnosti te popisa karakteristiĉnih valnih vektora, zanimljivih za fazne prijelaze u kupratima, predstaviti ĉemo koncept ugnjeŹenja te model kojim identificiramo te valne vektore.

U 1D materijalima u kojima djelomiĉno popunjena vrpca sijeĉe kemijski potencijal, elastiĉno raspršenje stanja na Fermijevoj plohi moŹe nosiocu promijeniti valni vektor za  $q \approx 0$  ili  $q \approx 2k_F$ , bez obzira na mehanizam raspršenja. Budući da su to i jedina dva stanja na  $E_F$ , postojanje takvog kanala ĉe nuŹno dovesti do singularno jakog raspršenja i otvorit će se procjep barem na nekom dijelu Fermijeve plohe. Prototipni materijali ovog tipa su 1D i kvazi-1D (Q1D) materijali s valom gustoće naboja (VGN) ili spina (VGS) poput Bechgaardovih soli, plavih bronci ili  $\text{BaVS}_3$  (primjer takve Fermijeve plohe i vektora prikazan je na slici 3.3).

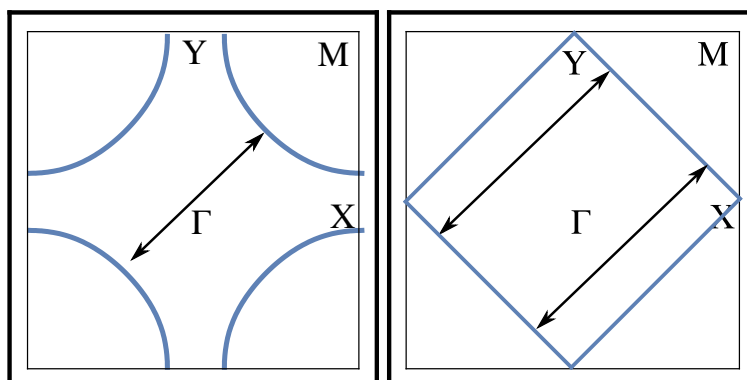
Translacijom za neki valni vektor  $\mathbf{Q}$  moguće je cijelu Fermijevu plohu preslikati u samu sebe, što se kolokvijalno naziva ugnjeŹenje (engl. *nesting*). Idealnim ugnjeŹenjem naziva se ono koje dovodi do divergencije susceptibilnosti, što omogućuje uređenje za po volji slabo meĹudjelovanje  $U$ . Najĉešće, meĹudtim, dolazi do nesavršenog ugnjeŹenja u kojem nema divergencije interagirajuće susceptibilnosti pa postoji konaĉna minimalna kritiĉna vrijednost  $U_c$  iznad koje je moguće uređenje.

Sliĉna pojava se moŹe primijetiti i u 2D sustavima (slika 3.4), no takvo raspršenje ĉe biti singularno samo ukoliko postoji znaĉajan ravan dio Fermijeve plohe koji će se raspršiti sa stanjima suprotnih valnih vektora, baš kao u 1D sluĉaju. Za ranije spomenutu  $ph$ -simetriĉnu 2D vrpcu



**Slika 3.3:** Ugnježđenje kvazi-1D vrpce. Sva ili približno sva stanja na Fermijevoj energiji se mogu raspršiti s odgovarajućim parom udaljenim za isti valni vektor.

ta divergencija se postiže na polupopunjenju, a tada sustav nastoji spontano prijeći u uređeno antiferomagnetsko stanje [9, 10]. U općenitom slučaju, magnetska susceptibilnost će umjesto singulariteta imati lokalne maksimume ili prijelome (engl. *cusp*) na valnim vektorima na kojima se dvije Fermijeve plohe tangencijalno dodirnu. Uvjet nestabilnosti na magnetski fazni prijelaz je dan istom relacijom (3.2).



**Slika 3.4:** Ugnježđenje 2D vrpce kuprata. Lijevo: realni materijali nemaju savršeno ugnježđenje pa će dominantno biti raspršenje na valnom vektoru na kojem je susceptibilnost najveća, a taj valni vektor jako ovisi o vrijednostima parametara modela. Desno: za  $t' = 0$  ili  $t_{pp} = 0$  u 2D sustavima može postojati savršeno ugnježđenje, tj. susceptibilnost na nacrtanom valnom vektoru divergira jer postoji beskonačno mnogo identičnih doprinosa raspršenju. Ovaj režim, iako konceptualno važan i dobro istražen, je daleko od eksperimentalno značajnog.

### 3.2.1 Susceptibilnost i singularne točke

Neka vanjska proba, npr. neutron ili foton, može izbaciti elektron u nepopunjeno kvantno stanje, čime nastaje i šupljina s kvantnim brojevima ispražnjenog stanja; ta stanja (čestično i šupljinsko) mogu nezavisno propagirati i međudjelovati te se vezati na druga vanjska polja. Magnetska susceptibilnost mjeri gustoću stanja takvih pobuđenja, koja su definirana razlikom valnih vektora čestice i šupljine  $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$  te frekvencijom koja odgovara razlici njihovih energija,



$\omega = E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ . Kemijski potencijal  $\mu$  i temperatura  $T$  u našim računima su vanjski parametri koji mogu kvalitativno klasificirati režime modela. Kemijski potencijal namješamo numerički tako da na svakoj temperaturi postignemo traženo efektivno dopiranje vrpce. U uobičajenim jedinicama  $\mu_B^2 \text{ eV}^{-1}$  po jediničnoj ćeliji, magnetska susceptibilnost u računu smetnje na konačnim temperaturama definirana je kao

$$\chi_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, i\nu_n) = -\mu_B^2 \sum_{\mathbf{k}, i\omega_n} \mathcal{G}_{\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) \mathcal{G}_{\sigma'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + i\nu_n), \quad (3.3)$$

a budući da je paramagnetsko stanje rotacijski invarijantno, sve komponente spinske susceptibilnosti su ekvivalentne pa možemo ispustiti spinski indeks. Tada je, nakon sumacije po  $\omega_n$  te analitičkog produženja  $i\nu_n \rightarrow \omega + i\eta$  dobijemo konačan izraz za retardiranu magnetsku susceptibilnost

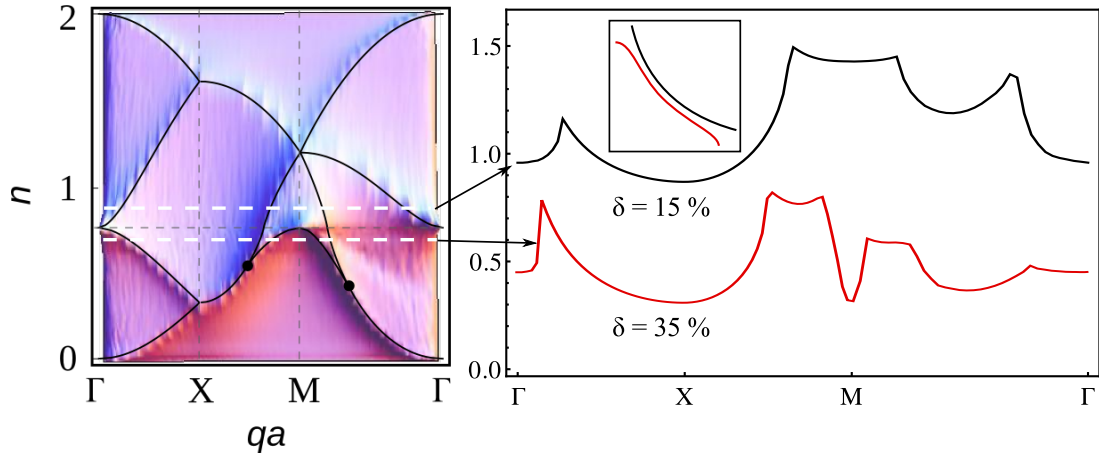
$$\chi_m(\mathbf{q}, \omega) = -\mu_B^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mu}(E_{\mathbf{k}}) - f_{\mu}(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\hbar\omega + i\eta - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}}}, \quad (3.4)$$

gdje je  $f_{\mu}(E)$  Fermijeva raspodjela na zadanoj temperaturi. Integralnu jezgru označavat ćemo sa  $\chi^{(0)}$ , koja je jedan od elementarnih Feynmanovih dijagrama u računu smetnje:

$$\chi_m(\mathbf{q}, \omega) = -\mu_B^2 \chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) \quad (3.5)$$

Dalje u tekstu elektronskim stanjima je dodijeljena energija  $E_{\mathbf{k}}$ , a šupljinskim  $E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$  te odgovarajući valni vektori. Susceptibilnost snažno ovisi o relativnim iznosima  $\mathbf{q}$  i  $\omega$ . Brojnik podintegralne funkcije susceptibilnosti na  $T = 0$  poprima vrijednost 0 kad su oba stanja (čestično i šupljinsko) prazna ili oba popunjena, a  $\pm 1$  ukoliko je samo jedno popunjeno. Nazivnik susceptibilnosti ima rezonantnu formu pa je izborom  $\mathbf{q}$ ,  $\omega$ ,  $\mu$ , ali i temperature  $T$  moguće učiniti integralnu jezgru singularnom. Infinitesimalni parametar  $\eta > 0$  čuva kauzalnost računa, no u realnim materijalima zamijenit će ga gušenje, odnosno konačna širina spektralne linije.  $\mathbf{k}$ -ovisnost i iznose gušenja ćemo raspraviti u poglavlju o prilagodbi parametara vrpce. Promjenom nekog od gore popisanih parametara, singulariteti iz nazivnika mogu ući ili izaći iz područja integracije definirano brojnikom. Takve kritične točke uzrokuju ranije spomenute lomove, vrhove ili singularitete u susceptibilnosti, koji razdvajaju intervale monotonosti susceptibilnosti u valnom vektoru i frekvenciji. Takvih točaka u cijeloj IBZ ima kontinuum, no posebno ih je zanimljivo promotriti duž linija visoke simetrije. Ovdje ćemo promatrati samo statički limes  $\omega = 0$ , budući da tražimo valne vektore uređenja. Slični kvalitativni režimi mogu se identificirati i na konačnim frekvencijama, ali je teže pronaći analitičke izraze za kritične valne vektore. Sve susceptibilnosti u ovom poglavlju izvrijednjene su s malom vrijednošću gušenja  $\eta = 1 \text{ meV}$  i  $T \lesssim 10 \text{ K}$  kako bi vrhovi bili što naglašeniji.

Slika 3.5 prikazuje susceptibilnost duž  $\Gamma-X-M-\Gamma$  linije u svim dopiranjima, uz dva izdvojena dopiranja ispod i iznad  $\delta_{\text{vH}}$ . Prateći promjenu susceptibilnosti na konstantnom popu-



**Slika 3.5:** Lijevo: Susceptibilnost  $\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega = 0)$  u ovisnosti o valnom vektoru duž linija visoke simetrije ( $x$ -os) i popunjenju vrpce ( $y$ -os). Iznos susceptibilnosti je prikazan kao visina u  $z$ -smjeru, a lokalni maksimumi i lomovi su naglašene crnim linijama. Valne vektore tih maksimuma je moguće analitički odrediti kao funkciju kemijskog potencijala, a time i popunjenje (formule u tekstu). Desno: ista susceptibilnost, izdvojena kao prevez lijeve slike za dopiranja od 15% i 35% (odgovarajuće Fermijeve plohe na umetcima).

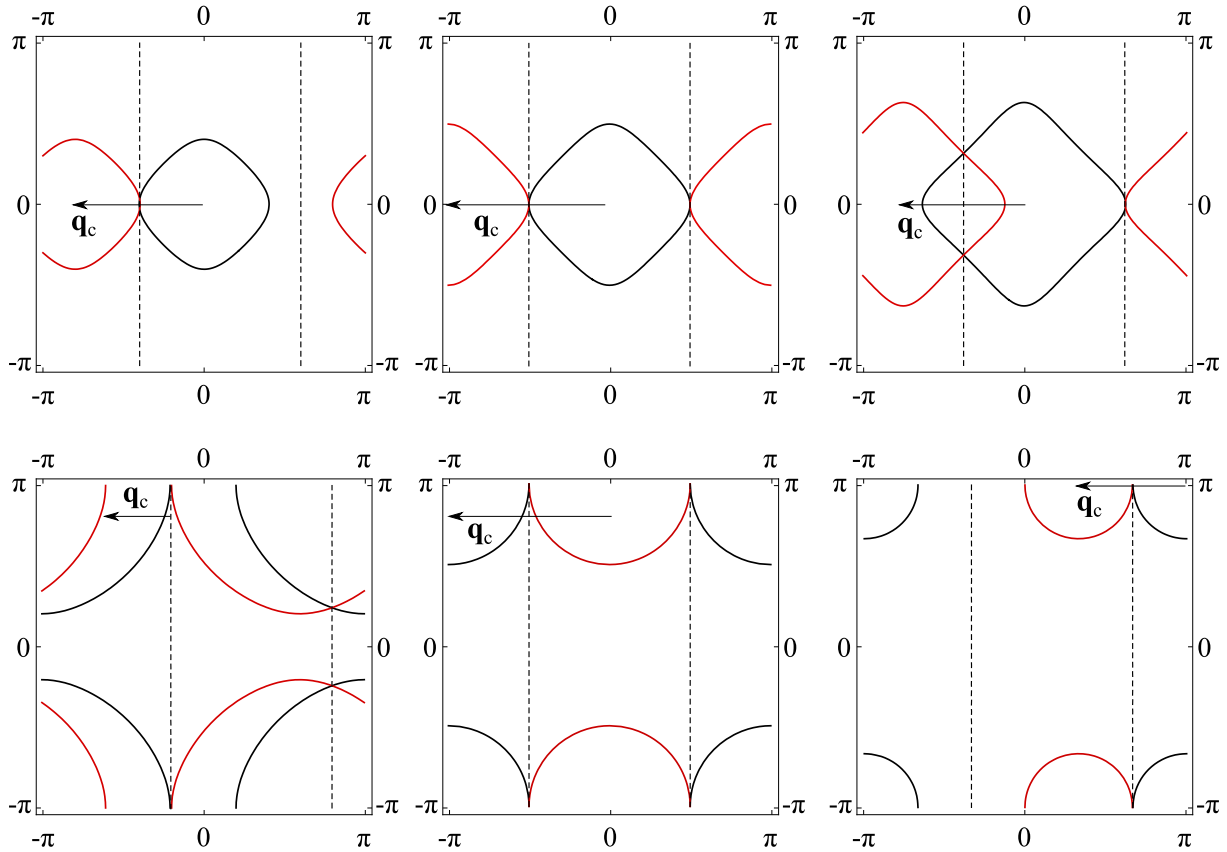
njenju (horizontalno na slici), promjećujemo postojanje do 5 intervala monotonosti razdvojenih točkama u kojima susceptibilnost nije glatka funkcija (prijelomi funkcije u varijabli valnog vektora). Za gotovo praznu ili gotovo popunjenu vrpcu postoje 2 takva loma, koja razdjeljuju 3 intervala monotonosti, a bliže vH dopiranju i polupopunjenoj vrpici oko  $n \approx 1$  postoji redom 3, 4 odnosno 5 lomova. Ovdje popisujemo sve lomove, vrhove i singularitete u  $\mathbf{q}$ -ovisnosti funkcije  $\chi^{(0)}$ , budući da predstavljaju valne vektore mogućih nabojnih ili spinskih uređenja i pobuđenja.

### Linija $\Gamma-X$

Na slici 3.5 promatramo liniju  $\Gamma-X$ ; za svako dopiranje postoji točno jedan valni vektor na kojem susceptibilnost ima lom/maksimum. "Cik-cak" ponašanje te linije u ovisnosti o dopiranju može se lako objasniti grafički, promatrajući uvjet dodira (ugnježđenja) dviju Fermijevih ploha, definiranih sa  $E(\mathbf{k}) = \mu$  (elektroni) i  $E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = \mu$  (šupljine). Za slučaj gotovo potpuno prazne vrpce s Fermijevom plohom oblika kružnice i  $\mu \ll E_{vH}$  taj valni vektor će odgovarati točno  $2k_F$ , što odgovara režimu Linhardove funkcije slobodnog neinteragirajućeg elektronskog plina). Budući da je funkcija  $E(\mathbf{k})$  periodička, vektor  $2k_F$  postiže svoju maksimalnu vrijednost  $\frac{\pi}{a}$  kad dodirne rub BZ. To odgovara dopiranju na kojem Fermijeva ploha prolazi točkom  $(\frac{\pi}{2a}, 0)$ , (na sredini gore na slici 3.6 - Fermijeve plohe se diraju u dvjema točkama  $(\pm \frac{\pi}{2a}, 0)$ ).

Daljnijim punjenjem vrpce lom se pomiče prema nižim valnim vektorima, jer se šupljinska Fermijeva ploha dodiruje s elektronskom s druge strane IBZ ( $k_x < 0$ ). Kritični valni vektor iznosi  $2k_{x,sredina}$ , gdje koordinatu rubne točke u kojoj se događa ugnježđenje određujemo iz uvjeta  $E(k_x, 0) = \mu$ .

Za  $\mu > E_{vH}$  analiza je analogna, budući da je simetrija podintegralne funkcije ista, ali se



**Slika 3.6:** Čestična (crno) i šupljinska (crveno) Fermijeva ploha, udaljene duž  $x$ -osi za valni vektor dovoljan da se tek dodirnu u jednoj točki. Valni vektor pomaka je skiciran na dijelu Fermijeve plohe na kojem je najbolje uočljiv. Gore:  $\mu < E_{vH}$ , dolje:  $\mu > E_{vH}$ . Slijeva nadesno, tri karakteristične situacije objašnjene u tekstu:  $k_{F,x} < \frac{\pi}{2a}$  (lijevo),  $k_{F,x} = \frac{\pi}{2a}$  (sredina) i  $k_{F,x} > \frac{\pi}{2a}$  (desno).

ugnježđenje događa na rubu IBZ, pa je jednadžba za određivanje valnog vektora  $E(k_x, \frac{\pi}{a}) = \mu$ .

Analički izrazi za kritične valne vektore su:

$$q_c = \begin{cases} 2 \arccos\left(\left|\frac{\mu+2t}{E_{vH}+2t}\right|\right), & \mu \leq E_{vH} \\ 2 \arccos\left(-\frac{|\mu-2t|}{E_{vH}-2t}\right), & \mu \geq E_{vH} \end{cases} \quad (3.6)$$

### Linija X–M

Sličnim načinom razmišljanja i geometrijskim odnosom dviju Fermijevih ploha možemo pronaći valne vektore na kojima se javljaju lomovi duže preostale dvije linije visoke simetrije u BZ. Ugnježđenje povezuje točke čija je  $x$  ili  $y$  komponenta valnog vektora točno  $\frac{\pi}{2a}$ , budući da je jedna od komponenti vektora ugnježđenja točno  $\frac{\pi}{a}$ . Drugu komponentu određujemo iz uvjeta  $E(k_{x,rub}, \frac{\pi}{a}) = \mu$ , a valni vektor ugnježđenja je jednak  $(2k_{x,rub}, \frac{\pi}{a})$ . Valni vektore su duž X–M

linije su:

$$q_{c1} = 2 \arccos \left( -\frac{\mu}{2t} \right), \quad \text{za sva dopiranja} \quad (3.7)$$

$$q_{c2} = 2 \arccos \sqrt{\frac{4t'(\mu - 4t')}{\left(t + \mu \frac{t'}{t}\right)^2 - 16t'^2}}, \quad \text{samo za } \mu \leq E_{vH}, \quad (3.8)$$

no dva loma postoje samo za  $\mu < E_{vH}$ , ali i dopiranja manja od kritične vrijednosti, definirane kemijskim potencijalom  $E_c < \mu < E_{vH}$ , gdje je  $E_c = \frac{-t^2 - 8t'^2 + t\sqrt{t^2 + 32t'^2}}{2t'}$ . Tu vrijednost određujemo iz uvjeta  $q_{c1} = q_{c2}$ . Oba loma se sjedinjuju u jedan, i na  $\mathbf{qa} = (\pi, \pi)$  što za vH dopiranje ( $\mu = E_{vH}$ ) dovodi do logaritamske divergencije susceptibilnosti, tj.  $\log^2$  divergencije za  $t' = 0$ .

### Linija M– $\Gamma$

Slično, valni vektori su:

$$q_{c1} = 2 \arccos \frac{-t + \sqrt{t^2 - \mu t'}}{2t'} \quad (3.9)$$

$$q_{c2} = 2 \arccos \sqrt{\frac{t'(\mu - 4t')}{t^2 - 4t'^2}}, \quad \text{samo za } \mu \leq E_{vH}, \quad (3.10)$$

a baš kao i u prošlom odlomku,  $q_{c2}$  nestaje a dopiranja manja od kritičnog, za koje vrijedi  $q_{c1} = q_{c2}$ , a zadano je s kemijskim potencijalom  $E_c = E_{vH} \left( 1 - 4 \left( \frac{t'}{t} \right)^2 \right)$ .

Iznad vH se javlja novi drugi lom, na malim valnim vektorima, dan izrazom:

$$q_{c2}' = 2 \arccos \sqrt{\frac{\mu}{4t'}} \quad (3.11)$$

### 3.2.2 Komenzurabilno ili nekomenzurabilno uređenje

Svi valni vektori na kojima  $\chi^{(0)}$  ima lokalni maksimum su potencijalni valni vektori uređenog stanja. Posebno, promjenom iznosa  $t'$  moguće je globalnim maksimumom učiniti  $\mathbf{Q}_{AF}$  ili neki od valnih vektora  $q_c$  na nekomenzurabilnom mjestu blizu  $\mathbf{Q}_{AF}$ . To znači da model s jednom vrpcom predviđa mogućnost nekomenzurabilnog faznog prijelaza na  $T^*$ .

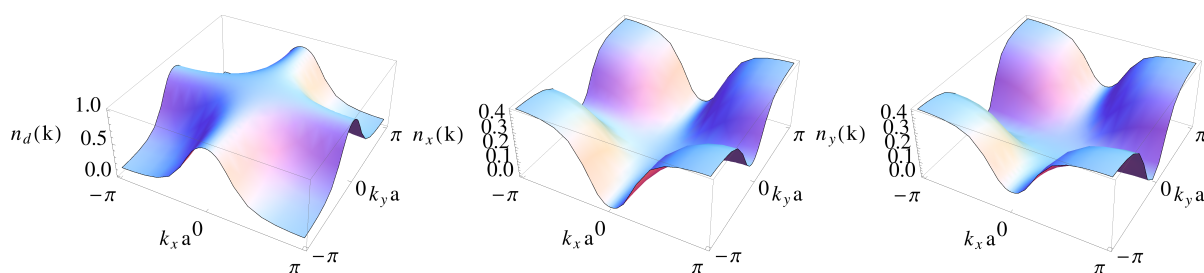
Ovo je jedna od važnih motivacija za korištenje bogatijeg modela s tri vrpce u istraživanju magnetskog odziva. Eksperimenti neutronske raspršenja sistematski detektiraju komenzurabilne fluktuacije na visokim temperaturama  $T \lesssim T^*$ . Do trenutka pisanja ovog rada autoru nije poznato niti jedno istraživanje koje nalazi nekomenzurabilne signale u neutronske raspršenju blizu  $T^*$ , već na znatno nižim temperaturama. Nadalje, materijali poput YBCO-a i troravninskog Bi2232 u modelu s jednom vrpcom zahtijevaju predaleke preskoke ili nefizikalno velike iznose preskoka na druge susjede. Ukoliko su zanimljive samo pojave u cjelovitoj vrpci (bez

rastava na orbitale) i frekvencije blizu Fermijeve energije, to je dovoljno dobar model za disperzijsku relaciju. Za potpuni, mikroskopski točan opis nosilaca u  $\text{CuO}_2$  ravnini potrebne su 3 ili 4 orbitale, što obogaćuje strukturu modela i unosi komplikacije zbog kojih je egzaktno rješenje još teže postići nego u jednovrpčanom modelu. Temeljno eksperimentalno opažanje koje čini ovakvo obogaćivanje modela nužnim jest činjenica da elektroni, tj. šupljine provode značajni udio vremena na kisikovim orbitalama [30].

### 3.2.3 Neinteragirajući model s tri vrpce

U vrlo značajnom i često citiranom članku iz 1987. [31], V. J. Emery je postulirao minimalan model kuprata s jednom ravninom bakrenog oksida, skiciran u uvodnom poglavlju. Disperzijska relacija jedine vrpce koja siječe kemijski potencijal (vezujuća vrpca) je  $E_B(\mathbf{k})$  (izvod i definicije u dodacima).

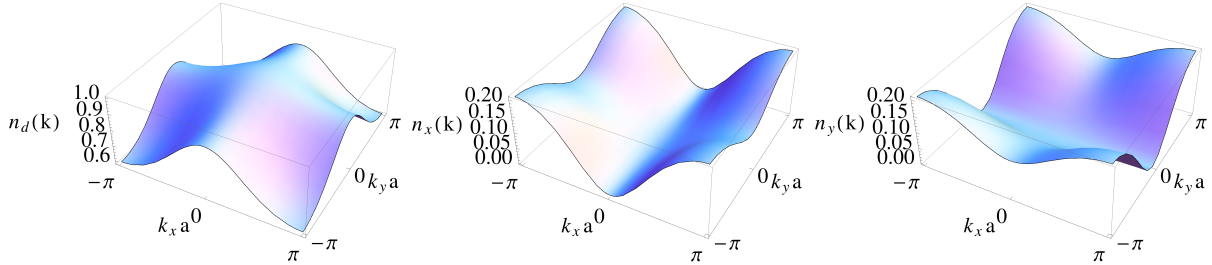
Kvalitativno razlikovanje bakrovih i kisikovih orbitala najvažnija je pretpostavka ovog modela. Šupljine na kisikovim orbitalama hibridiziraju se direktnim preskokom koji ima simetriju kisikove podrešetke, zarotirane u odnosu na bakrovu za  $45^\circ$  dok se kisik-bakar hibridizacija provodi preskokom u smjeru bakrove rešetke (duž glavnih osi kristala). Ove simetrije moraju poštivati i svojstvene valne funkcije - pojedina  $\mathbf{k}$ -stanja elektrona u BZ mogu imati bitno različit orbitalni sastav. Tako područja oko  $\nu\text{H}$  točke koja imaju male Fermijeve brzine imaju dominantan udio bakrove  $d$  orbitale, dok dijelovi oko dijagonale BZ, a posebno rubni dijelovi sadrže većinom kisikove  $p$  orbitale (slika 3.7). Stoga se često spora, lokalizirana stanja u vrpci poistovjećuju sa stanjima na orbitalama bakra, a brza stanja oko dijagonale IBZ s vodljivim, metalnim kisikovim stanjima.



**Slika 3.7:** Iznosi svojstvenih vektora, tj. projekcija vezujuće vrpce na orbitale bakra, kisika na  $x$ -osi te kisika na  $y$ -osi 2D rešetke. Korišteni su parametri  $t_{pd} = 0.15$  eV,  $t_{pp} = 0.45$  eV i  $\Delta_{pd} = 0.75$  eV.

$\mathbf{k}$ -ovisni udjeli pojedine orbitale u vrpci su kvadrati apsolutnih vrijednosti svojstvenih vektora Hamiltonijana Emeryjevog modela (izvod u dodatku C), tj. projektori orbitala na valne funkcije. Te iste projekcije orbitala za valne funkcije kasnije će postati važni gradivni elementi kohrentnih faktora susceptibilnosti, sadržavajući mnoštvo informacija o strukturi materijala i simetrijama. Za umjerenu parametrizaciju sa slike projektori na kisikove  $x$  i  $y$  orbitale su veoma slični. Njihova sličnost raste s porastom iznosa  $t_{pp}$ , tako da slabo hibridizirane kisikove orbitale

( $|t_{pp}| \rightarrow 0$ ) imaju vrlo različite udjele u vH točkama duž različitih kristalnih osi. Za parametризacije bliske LSCO-u, projekcija vrpce na kisikovu  $x$  orbitalu sadrži u vH točki u  $x$ -smjeru skoro isključivo  $d$  i  $x$ -orbitale, a u vH točki duž  $y$ -osi  $x$ -orbitala ima skoro zanemariv udio (slika 3.8). U ovakvim režimima, stoga očekujemo veću težnju faznoj separaciji na domene sa  $x/y$  orijentacijom pruga, što je u ovim sustavima i opaženo.



**Slika 3.8:** Iznosi svojstvenih vektora, kao na prošloj slici, za 3 puta manju vrijednost  $t_{pp}$  preskoka. Ova promjena uvodi znatnu asimetriju među kisikovim projektorima, budući da manji  $t_{pp}$  znači i manju izravnu hibridizaciju kisikovih orbitala.

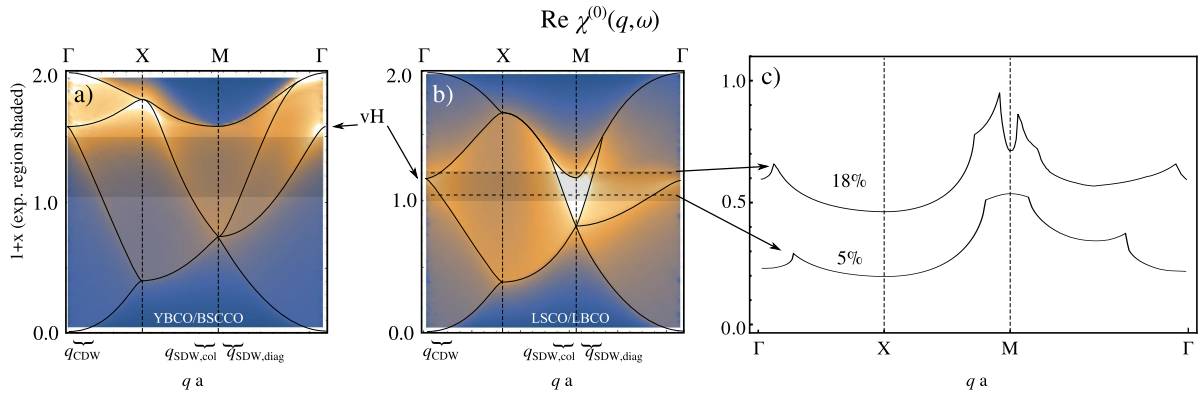
### 3.2.4 Susceptibilnost u Emeryjevom modelu

Budući da su disperzije  $E_L(\mathbf{k})$  rješenja kubne jednadžbe, one su vrlo složene nelinearne funkcije preskoka  $t_{pd}$  i  $t_{pp}$  te  $\Delta_{pd}$ . Stoga nije moguće analitički odrediti valne vektore lomova i maksimuma u susceptibilnosti  $\chi^{(0)}$ . Simetrija orbitala omogućuje egzaktnu faktorizaciju svojstvenog polinoma kubne jednadžbe, pa duž dijagonale BZ postoji kompaktniji izraz za  $E_B(\mathbf{k})$ , a time i za  $q_c$  blizu AF valnog vektora:

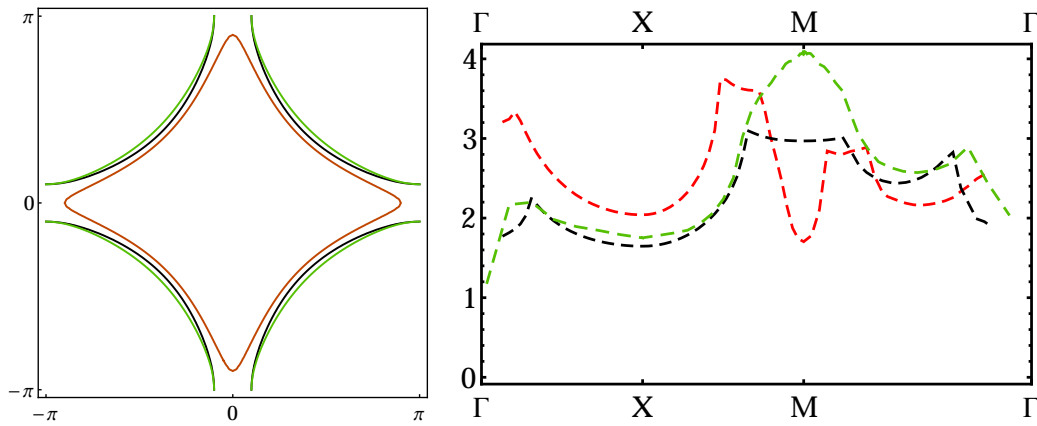
$$q_{c,\Gamma-M} = (-) \frac{2}{\pi} \arcsin \left( \frac{\sqrt{\mu} \sqrt{\mu - \Delta_{pd}}}{2\sqrt{2t_{pd}^2 - t_{pp}\mu}} \right) \quad (3.12)$$

Budući da su lomovi i maksimumi susceptibilnosti ovisni samo o obliku Fermijeve plohe, na svakom dopiranjju postoji jednak broj tih singulariteta kao i u jednovrpčanom modelu (slika 3.9).

AF valni vektor u ovom modelu također može biti globalni maksimum, što vodi na komenzurabilno AF uređenje, ali i plitak lokalni minimum, što opet ostavlja mogućnost nekomenzurabilnog faznog prijelaza. Slika 3.10 prikazuje dva vrlo bliska parametarska režima u kojima susceptibilnost ima dramatičnu promjenu iz nekomenzurabilnog u komenzurabilno. Model s tri vrpce bez međudjelovanja stoga ne može objasniti pojavu komenzurabilnog prijelaza na  $T^*$ .



**Slika 3.9:** Susceptibilnost  $\chi^{(0)}$  za dvije ekstremne parametrizacije u modelu 3 vrpce: lijevo veliki  $t_{pp}$ , bliže YBCO-u; u sredini mali  $t_{pp}$ , bliže LSCO-u. Crne linije koje označavaju lokalne maksimume i lomove u susceptibilnosti su vodilje za oči, određene numerički. Desno: susceptibilnost za jako poddopirano i predopirano vrpce.

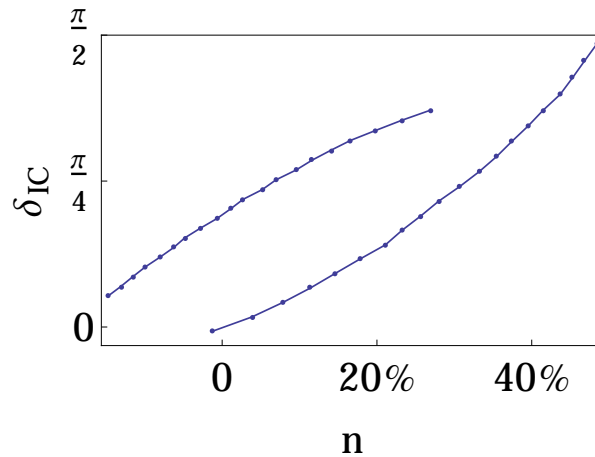


**Slika 3.10:** Crveno: zatvorena Fermijeva ploha i pripadna susceptibilnost koja, kao i u jednovrpčanom modelu, ima dubok minimum na  $\mathbf{Q}_{AF}$ . Crno i zeleno: dva parametarska režima s veoma sličnom Fermijevom plohom i bitno različitom susceptibilnošću. Sustav kojem odgovaraju crne linije trebao bi imati nekomenzurabilno SDW, a onaj sa zelenim linijama komenzurabilno AF uređenje. Eksperimenti neutronskega raspršenja, međutim, opažaju isključivo komenzurabilan prijelaz na  $T^*$ , kako je opisano u prošlom poglavlju.

### 3.2.5 Utjecaj temperature i popunjenja vrpce

Promotrimo detaljnije valni vektor duž X–M linije, koji se često identificira s vektorom SDW uređenja kolinearnog s rešetkom bakrovih atoma. Sa slike 3.9 vidljivo je da se taj vektor smanjuje udaljavanjem od vH dopiranja te da on poprima svoju maksimalnu vrijednost,  $\mathbf{Q}_{AF}$  na elektronskim dopiranjima, dok se u eksperimentima komenzurabilnost javlja na polupopunjenu. Ranije smo opisali da ovaj valni vektor odgovara ugnježđenju točke na Fermijevoj plohi kojoj je  $x$  ili  $y$  koordinata jednaka  $\frac{\pi}{2a}$ . To znači da će komenzurabilno uređenje (s valnim vektorom  $\mathbf{Q}_{AF} \cdot \mathbf{a} = (\pi, \pi)$ ) biti moguće samo ako *obje* komponente tog vektora budu jednake, odnosno ako Fermijeva ploha polupopunjene vrpce prođe točkom  $(\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a})$ . Taj uvjet je ispunjen samo modelu s jednom vrpcom za  $t' = 0$  i Emeryjevom modelu za  $t_{pp} = 0$  (slika 3.11).

U protivnom će uvijek valni vektor nekomenzurabilnog SDW uređenja biti konačan i različit od  $\mathbf{Q}_{AF}$  za polupopunjeni uzorak. To znači da u ovom potpuno itinerantnom modelu u kojem promatramo uzorke na  $T \lesssim T^*$  nije moguće objasniti linearnu ovisnost tog vektora nekomenzurabilnog SDW uređenja, opaženu u svim jako poddopiranim kupratima (slika 2.9) na  $T \ll T^*$ . Lokalizirani modeli vode ka restauraciji komenzurabilnog uređenja za polupopunjenu vrpcu, no ne mogu objasniti postojanje Fermijeve plohe velike zakrivljenosti na jako malim dopiranjima. Pretpostavljamo da bi pristup s nekomenzurabilnim SDW osnovnim stanjem mogao pomiriti ove dvije oprečne granice i ispitati termodinamičku stabilnost nekomenzurabilnih faza na  $T \approx 0$  K.

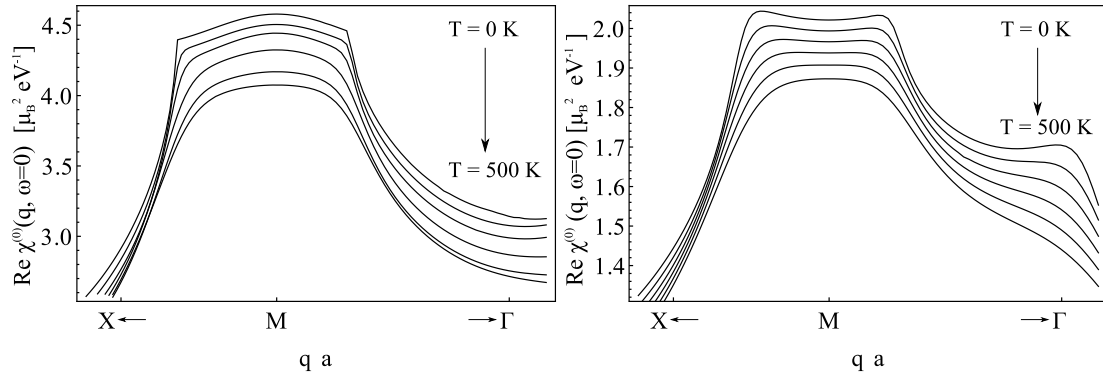


**Slika 3.11:** Parametar nekomenzurabilnosti za  $t_{pp} < 0$  (gornja krivulja) i  $t_{pp} = 0$  (donja krivulja). Isključivo za  $t_{pp} = 0$  (ili, analogno,  $t' = 0$  u modelu s jednom vrpcom) nekomenzurabilnost iščezava na polupopunjenju. Za sve konačne vrijednosti  $t_{pp}$  ( $t'$ ), nekomenzurabilni SDW vektor postaje komenzurabilan ( $\mathbf{Q}_{AF}$ ), na nekom konačnom elektronskim dopiranjima, suprotno eksperimentima. Ovo ukazuje na ograničenost metalnog pristupa na konačna šupljinska dopiranja.

Promotrimo još temperaturnu ovisnost nekomenzurabilnih vrhova u neinteragirajućem modelu. Na  $T = 0$  svi singulariteti podintegralne funkcije (nultočke nazivnika) ulaze u područje integracije u brojniku naglo, u jednoj vrijednosti prenesenog impulsa  $\mathbf{q}$ , jer Fermijeve funkcije imaju nagli skok. Konačna temperatura razmazuje Fermijeve raspodjele pod integralom, a zbog toga sve singularne točke ulaze u regiju integracije postepeno rastućim intenzitetom. Slika 3.12 prikazuje temperaturnu ovisnost  $\chi^{(0)}$  za dvije parametrizacije s podjednakim valnim vektorima prijeloma blizu  $\mathbf{Q}_{AF}$ . Budući da su ti nekomenzurabilni vektori blizu  $\mathbf{Q}_{AF}$  definirani ugnježđenjem točaka na Fermijevom luku, oko dijagonale IBZ, s porastom  $t_{pp}$  će rasti i njihova udaljenost od  $0.5\mathbf{Q}_{AF}$ . Iz toga slijedi da će tek na temperaturama iznosa  $k_B T^{**} \sim t_{pp}$  nekomenzurabilni vrhovi biti vidljivo razmazani i zaobljeni. Tako će porastom temperature uvijek  $\mathbf{Q}_{AF}$  postati globalni maksimum susceptibilnosti, no karakteristična temperatura  $T^{**}$  na kojoj  $\mathbf{Q}_{AF}$  postaje globalni maksimum je proporcionalna i šupljinskom dopiranjima. Stoga ta temperatura već za umjerena dopiranja može postići vrijednosti preko 500 K, 2 – 3 puta veće nego u eksperimentima. Potrebna temperatura na kojoj niskotemperaturni nekomenzurabilni signali



postaju komenzurabilni mora biti jednaka ili niža  $T^*$ , tj. između 100 i 300 K, ovisno o dopiranju. Tek uvođenjem jakih korelacija moći ćemo postići komenzurabilan prijelaz na realističnim temperaturama za sva dopiranja.



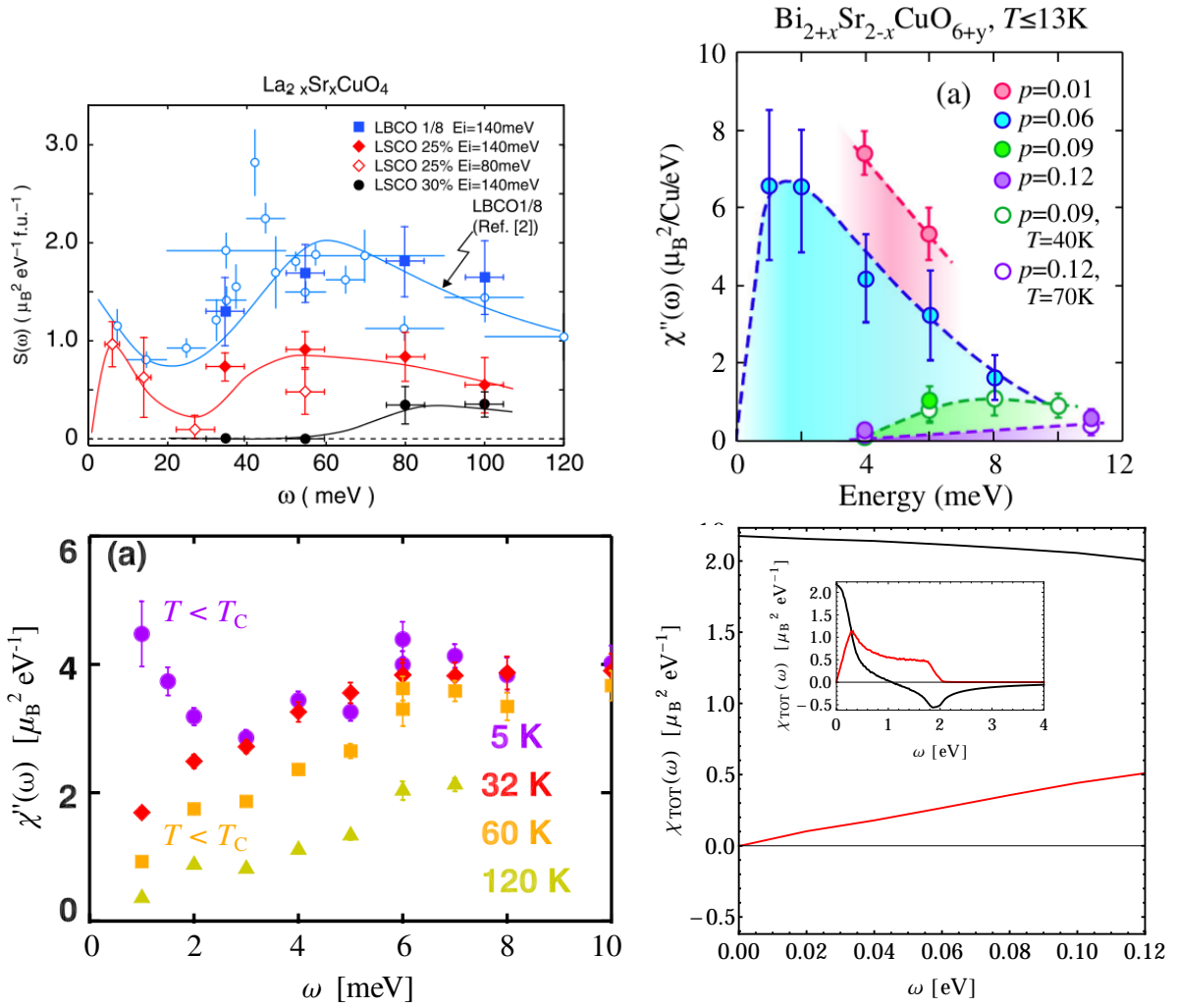
**Slika 3.12:** Valni vektori singularnih točaka susceptibilnosti se približavaju  $\mathbf{Q}_{AF}$  povećanjem temperature. Za parametrizacije u kojima je  $\mathbf{Q}_{AF}$  globalni maksimum na  $T = 0$  (lijevo), taj vektor ostaje globalni maksimum na svim konačnim temperaturama. Za nekomenzurabilne parametrizacije (desno), za koje je  $\mathbf{Q}_{AF}$  lokalni minimum, taj vektor će postati globalni maksimum za neku konačnu vrijednost  $T^{**}$  koja je proporcionalna  $t_{pp}$  i šupljinskom dopiranju. Na obje slike korištene su temperature od 50 do 700 K redom odozgo prema dolje.

### 3.2.6 Apsolutni iznosi susceptibilnosti

Važna provjera konzistentnosti s eksperimentalnim vrijednostima jest apsolutni iznos svih susceptibilnosti. Točan iznos  $\text{Im } \chi$  je poprilično teško izračunati iz eksperimenta, pa se stoga najčešće prikazuju izmjereni intenziteti na  $(\mathbf{q}, \omega)$  u proizvoljnim jedinicama. Međutim, u novije vrijeme je napretkom eksperimentalnih tehnika i analize postalo uobičajeno prikazivati susceptibilnosti u jedinicama Bohrovih magnetona po jedinici energije, iako najčešće za lokalnu, integriranu susceptibilnost. Iznosi tih susceptibilnosti su tako između 1 i  $10 \mu_B^2 \text{ eV}^{-1}$ , što se izvrsno slaže s iznosima susceptibilnosti za jače dopirane uzorke (primjer je prikazan na slici 3.13). Magnetski odziv vodljivih elektrona zadovoljavajuće opisuje umjereno i jače poddopirane kuprate, dok bi na manjim dopiranjima vjerojatno prikladniji opis bio neki od lokaliziranih modela.

### 3.2.7 Orbitalni rastav susceptibilnosti

Bogata struktura Emeryjevog modela odražava se i u susceptibilnostima raznih stupnjeva slobode. U ranijim poglavljima i odlomcima promatrali smo samo ukupnu susceptibilnost. Magnetska, dielektrična i druge susceptibilnosti mogu se raspisati kao korelacijske funkcije spina ili naboja na pojedinoj orbitali ili kombinaciji orbitala. Posebno su zanimljive one susceptibilnosti koje u uobičajenom rječniku predstavljaju susceptibilnost na prelijevanje naboja



**Slika 3.13:** Lokalna susceptibilnost (integral  $\chi^0(\mathbf{q}, \omega)$  po cijeloj IBZ) u prirodnim jedinicama. a) U LSCO-u [32], b) u BSCCO-u [33], c) u LBCO-u [34]; d) susceptibilnost bez procjepa - realni dio je prikazan crnom, a imaginarni crvenom linijom. Iznosi lokalne susceptibilnosti su veoma blizu eksperimentalnima za jače poddopirane, metalne uzorke. Veća odstupanja nastupaju za jako poddopirane uzorke, koji su daleko od metalnog režima.

između bakrovih i kisikovih orbitala te između dviju kisikovih orbitala. Generalizirana susceptibilnost  $\chi_{a,b;c,d}^{(0)}$  koja sadrži  $\mathbf{k}$ -ovisne projektore promatranih orbitala definirana je u dodatku C, a njezini neiščezavajući doprinosi su:

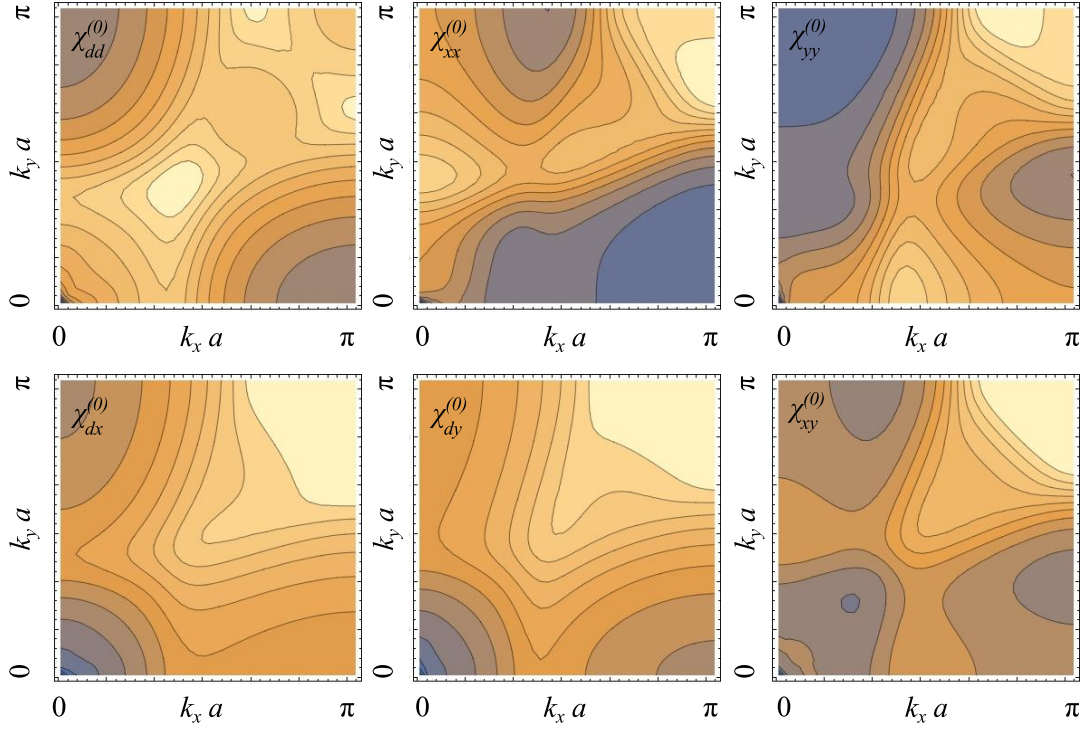
$$\chi_{xx}^{(0)}, \chi_{yy}^{(0)}, \chi_{dd}^{(0)}, \quad (3.13)$$

koji redom opisuju susceptibilnost dvije kisikove orbitale, duž  $x/y$  osi kristala, te bakrove orbitale. Susceptibilnosti poput  $\chi_{xy}^{(0)}, \chi_{xd}^{(0)}, \chi_{yd}^{(0)}$  opisuju prelijevanje naboja između raznoimenih orbitala. Na slici 3.14 prikazujemo sve elemente susceptibilnosti. Globalni maksimumi u ovom neinteragirajućem modelu se uglavnom nalaze na nekomenzurabilnim mjestima. Kisikove susceptibilnosti  $xx$  i  $yy$  su povezane jednostavnom simetrijom zrcaljenjem oko dijagonale IBZ, a

slična veza postoji i između susceptibilnosti  $\chi_d$  i  $\chi_{yd}$ :

$$\chi_{xx}^{(0)}(q_x, q_y, 0) = \chi_{yy}^{(0)}(q_y, q_x, 0) \quad (3.14)$$

$$\chi_{xd}^{(0)}(q_x, q_y, 0) = \chi_{yd}^{(0)}(q_y, q_x, 0) \quad (3.15)$$



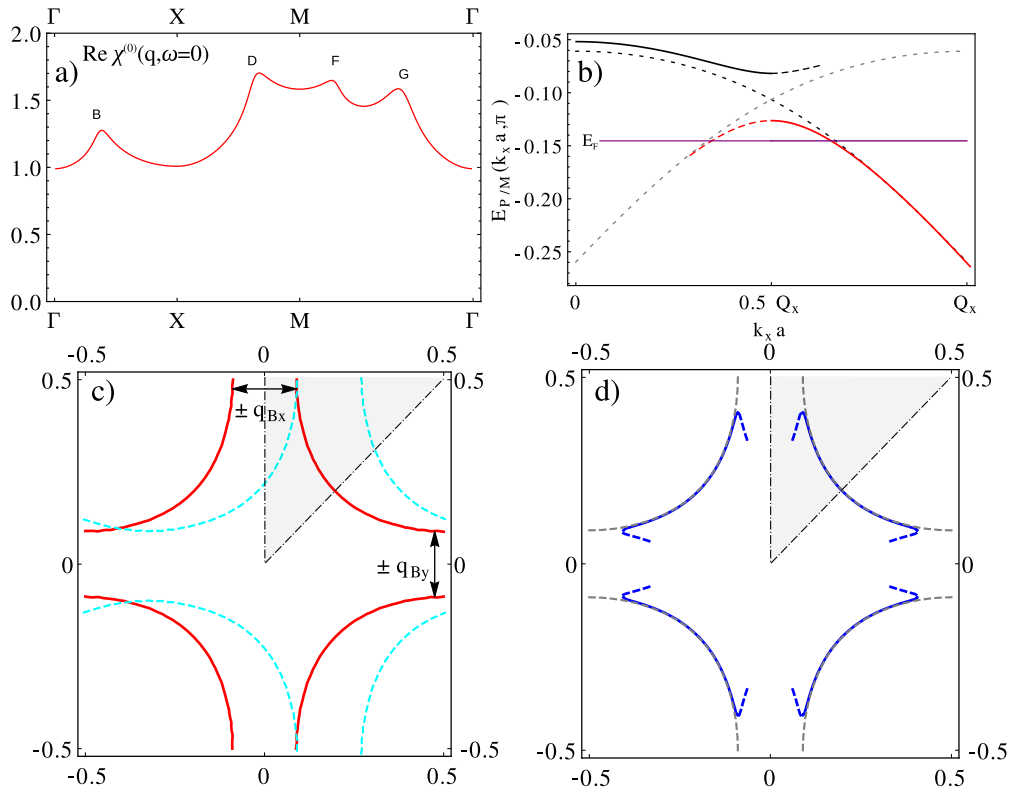
**Slika 3.14:** Komponente susceptibilnosti pojedinih stupnjeva slobode u Emeryjevom modelu (svjetlije boje znače veću vrijednost). U gornjem redu:  $\chi_{dd}^{(0)}$  s nekomenzurabilnim vrhovima kao globalnim maksimumima te  $\chi_{xx}^{(0)}$  i  $\chi_{yy}^{(0)}$  koje su međusobno zrcalne oko dijagonale IBZ. U donjem redu:  $\chi_{dx}^{(0)}$ ,  $\chi_{dy}^{(0)}$  i  $\chi_{xy}^{(0)}$ .

Sve ranije popisane singularne točke nalaze se na istim mjestima u ovim susceptibilnostima, a razlikuju im se samo relativne težine zbog različitih projektora. Ove susceptibilnosti su važan gradivni element ukupne susceptibilnosti u uređenoj fazi interagirajućeg modela. Ta susceptibilnost  $\chi_{SDW}$  na  $T \ll T^*$  nije glavna tema ovog rada, no u potpoglavlju 3.4.3 ćemo skicirati njeno kvalitativno ponašanje.

### 3.3 Fermijeve plohe za različite valne vektore ugnježđenja

Prije uvođenja međudjelovanja, promotrit ćemo kakve Fermijeve plohe bi generirao fazni prijelaz na svakom od kritičnih valnih vektora te ih usporediti s eksperimentima. Po analogiji s Peierlsovom modelom za CDW sustave te ekvivalentnim modelom za SDW/AF uređenje [9], raspršenje stvara dvije nove vrpce od stare vezujuće vrpce Emeryjevog modela. Preostale dvije vrpce Emeryjevog modela su udaljene za nekoliko eV te ih nije potrebno razmatrati prilikom

otvaranja procjepa u vezujućoj. Za umjereno poddopirane sustave postoje 4 valna vektora potencijalnih ugnježđenja, tj. faznih prijelaza, koji odgovaraju maksimumima neinteragirajuće susceptibilnosi popisanim ranije. Proces preklapanja vrpce i otvaranja procjepa je ilustriran na slici 3.15. Za razliku od supravodljivog procjepa, CDW/SDW se ne otvara simetrično oko  $E_F$  pa se procjep na odabranom valnom vektoru nalazi iznad kemijskog potencijala. Detaljni izvod vrpce i njihovih spektralnih težina je raspisan u dodacima.



**Slika 3.15:** Primjer otvaranja procjepa u vrpce na valnom vektoru asociranom s valnom gustoće naboja. a) Susceptibilnost s 4 lokalna maksimuma. Za ilustraciju biramo vektor  $\mathbf{q}_B$  (oznake preuzete iz [18]). b) Crtkanim linijama prikazane su stara vrpca  $E(\mathbf{k})$  i njezina slika  $E(\mathbf{k} - \mathbf{q}_B)$ . Debele linije su "nove" vrpce nakon otvaranja procjepa, prikazane u proširenoj zonskoj reprezentaciji ("staroj" BZ), tako da su im pridijeljene odgovarajuće težine, prikazane intenzitetom linije. c) BZ sa starom vrpcom i njenom slikom prije otvaranja procjepa. d) "nove" vrpce u proširenoj zonskoj reprezentaciji; crtkanе linije vizualiziraju zakrivljenost Fermijeve plohe na rubu područja gdje joj težina pada na 0. Pune linije označavaju dio s težinom  $\approx 1$ . Sivo zasjenjeno područje je dio BZ u kojem je aktivno raspršenje s vektorom  $\mathbf{q}_{Bx}$ . Zrcaljenjem i rotacijama preslikavamo taj učinak na cijelu BZ.

Sličan postupak vrijedi za sve valne vektore na kojima susceptibilnosti doživljavaju lomove. Svaki od tih valnih vektora vodi na otvaranje procjepa sa Fermijevom plohom koja se u manjoj ili većoj mjeri razilazi s eksperimentalnom (slika 3.16). Četiri valna vektora za poddopirane materijale su:

- valni vektor  $q_B$  duž  $\Gamma$ -X linije, koji se često asocira sa signalom CDW uređenja u raspršenju rendgenskih zraka. On predviđa nakon rekonstrukcije vrpce i otvaranja procjepa samo jednu Fermijevu plohu (nema malih Fermijevih "džepova", engl. *pockets*) koja je

zakrivljena prema sredini BZ. Oba predviđanja su u suprotnosti s eksperimentima, iako postoji mogućnost da je ovakav proces ipak važan za jednoravninski BSCCO u kojem se CDW fluktuacije javljaju odmah ispod  $T^*$ .

- valni vektor  $q_D$  duž X–M linije koji se pridružuje kolinearnom SDW uređenju ili kolinearnim prugama u kupratima. Ovakvo uređenje također predviđa samo jednu Fermijevu plohu koja ima procjep duž dijagonale, suprotno ARPES mjerenjima.
- valni vektor  $q_F$  duž M– $\Gamma$  linije blizu  $\mathbf{Q}_{AF}$  koji odgovara dijagonalnom nekomenzurabilnom SDW uređenju, viđenom u jako poddopiranom LSCO-u, također predviđa otvaranje procjeka duž dijagonale BZ, pa ne odgovara eksperimentalnom režimu.
- valni vektor  $q_G$  duž M– $\Gamma$  linije blizu  $\mathbf{q} = 0$  otvara procjep na točnom mjestu, ali je manja Fermijeva ploha zanemarive površine, uz krivu zakrivljenost velike.

Vođeni rezultatima neutronske raspršenja (oko  $T^*$  je signal uvijek komenzurabilan, na  $\mathbf{Q}_{AF}$ ) te oblikom Fermijeve plohe, uzimamo na razmatranje i sam valni vektor  $\mathbf{Q}_{AF}$ . On predviđa točnu zakrivljenost Fermijeve plohe (slika 3.17) te dozvoljava postojanje 2 razdvojena dijela Fermijeve plohe: jedan ovalnog oblika oko dijagonale BZ, ugrubo centriran na  $\mathbf{qa} = (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ , te drugi, manji, oko vH točke. Važne je odmah istaknuti da su zbog hibridizacije i simetrije rešetke te dvije Fermijeve plohe, redom dominirane nosiocima na kisikovim odnosno bakrovim orbitalama.

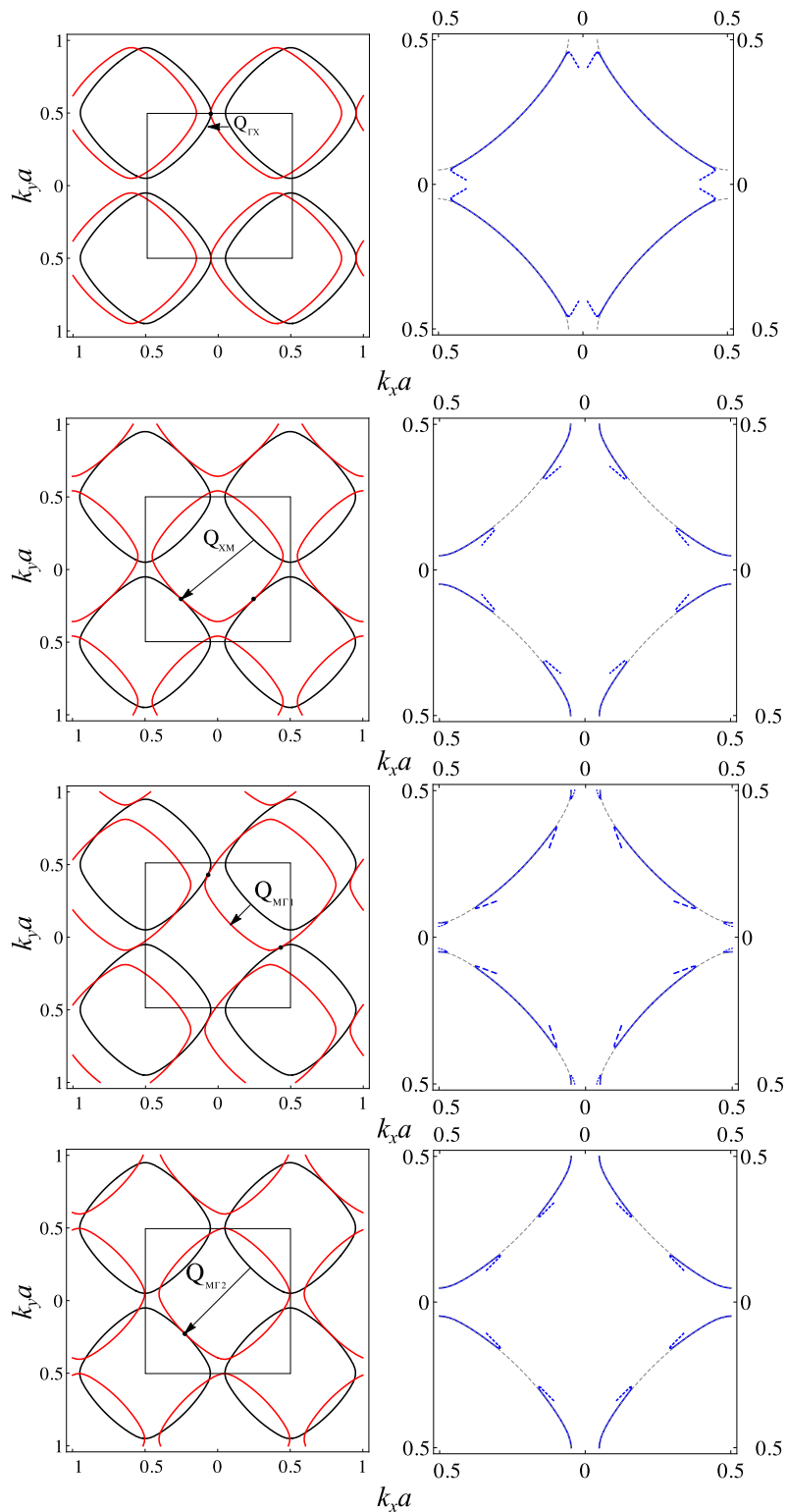
Budući da na  $\mathbf{Q}_{AF}$  nije uvijek globalni maksimum susceptibilnosti, a samo sa tim valnim vektorom su konzistentni oblik i simetrija Fermijeve plohe te komenzurabilne fluktuacije na  $T \lesssim T^*$ , ta dva opažanja mogu se objasniti samo u interagirajućem Emeryjevom modelu.

## 3.4 Korelacije u normalnom stanju

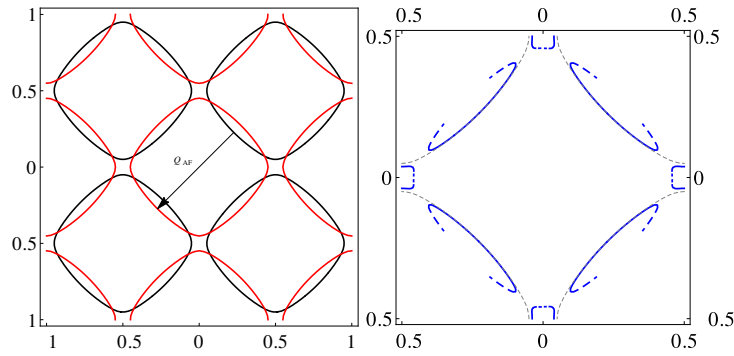
Hubbardov član je najveća energijska skala u kupratnim supravodičima, sa iznosom reda veličine 10 eV, što efektivno zabranjuje dvostruku popunjenost bakrove  $3d$  orbitale. Egzaktno rješenje u Emeryjevom modelu nije moguće pa je potrebno naći odgovarajuću aproksimaciju koja poštuje hijerarhiju energijskih skala.

### 3.4.1 Kisik i bakar u $U_d \rightarrow \infty$ teoriji [35]

Uvođenje međudjelovanja traži izvednjavanje najdivergentnijih Feynmanovih dijagrama viših redova. Ovdje popisujemo nekoliko gradivnih elemenata čije su definicije i izvodi opisani u dodacima. Vakuum perturbacijske teorije je metal sastavljen od kisikovih orbitala te potpuno prazne orbitale bakra. Kisikove šupljine u metalnom stanju su međusobno potpuno hibridizirane, s konačnim iznosom kemijskog potencijala  $\mu$  te povremeno posjećuju orbitale bakra na energiji  $E_d < \mu$  (ta skala razmaka je oko 1 eV). Perturbativni parametar je upravo



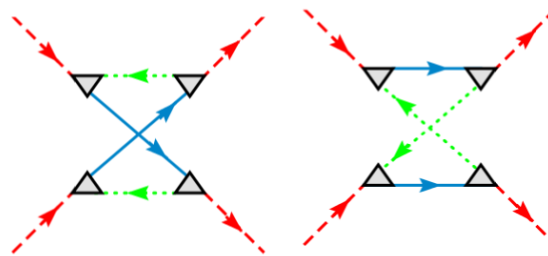
**Slika 3.16:** Lijevi stupac: Fermijeve plohe razmaknute za karakteristične nesting vektore za oko 15% dopirani LSCO. Svi valni vektori odgovaraju potencijalnim valnim vektorima uređenja, tj. položajima lokalnih maksimuma i lomova u neinteragirajućoj susceptibilnosti. Desni stupac: iste Fermijeve plohe s procjepom otvorenim na odgovarajućim valnim vektorima, u proširenoj zonskoj reprezentaciji i uvećane. Crtkane linije označavaju smjer zakrivljenosti rekonstruiranih Fermijevih ploha s one strane gdje im je težina zanemariva.



**Slika 3.17:** Za  $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_{AF}$  (lijevo) rezultat je Fermijeva ploha dobre simetrije i ispravne zakrivljenosti (desno). Također, ovaj model omogućuje postojanje dvije različite Fermijeve plohe usporedivog iznosa na kakve upućuju eksperimenti kvantnih oscilacija. Korišteni su isti parametri za LSCO kao i na slici 3.16.

$n_d$ , popunjenost bakrove orbitale, iako je formalni "mali" parametar u Hamiltonijanu  $t_{pd}$ , koji dovodi do opisanog procesa hibridizacije preskokom  $p-d$ .

Dvostruka popunjenost bakrove  $d$  orbitale je energijski nepovoljna, a u ovom se formalizmu izbjegava uvođenjem procesa "čekanja": svaka šupljina mora pričekati da se bakrova orbitala isprazni prije nego preskoči na nju. Proces izmjene dviju šupljina na bakrovoj orbitali je lokalni, a promjena energije šupljine u procesu skoka na bakrovu orbitalu je  $\Delta_{d\mu} = \mu - E_d$ . Ova teorija je korektno opisala pojavu nekoherentnih stanja daleko od Fermijevog nivoa, koja potječu od lokalnog nereda na atomima bakra [29]. Budući da je dio spektralne težine ostao na kemijskom potencijalu, možemo u daljnjim računa uzeti u obzir koherentnu vrpcu iz neinteragirajućeg Emeryjevog modela. Sve parametra modela, prilagođene na eksperimente, je potrebno interpretirati kao efektivne, renormalizirane jakim međudjelovanjem na orbitalama bakra.



**Slika 3.18:** Dva doprinosa efektivnom međudjelovanju šupljina na jednoj bakrovoj orbitali, u formalizmu pomoćnih bozona i fermiona [29]. Crvene linije su metalne šupljine, a plave i zelene pomoćni bozoni i fermioni.

Pomoćni bozoni i fermioni uvedeni su u ovom formalizmu kako bi se lakše tretiralo zakone očuvanja u opisanom procesu u svim redovima računa smetnje. Jedan elementarni verteks perturbativnog računa prikazan je na slici 3.18. Taj proces definira efektivno međudjelovanje

proizašlo iz zabrane dvostrukog popunjenja bakrove orbitale. Egzaktan iznos verteksa je

$$t_{pd}^4 \frac{2E_d - \omega_1 - \omega_2}{\prod_{s=1}^4 (E_d - \omega_s - 2i\eta)}, \quad (3.16)$$

gdje su  $\omega_s$  četiri vanjske frekvencije dijagrama (izvod u dodatku D). Propagatori koji ulaze u verteks moraju predstavljati šupljine na kisikovim orbitalama, koje možemo zapisati kao

$$G_p^0(\mathbf{k}, \omega) = \sum_l \frac{|t_{ld}(\mathbf{k})|^2}{\omega - E_{p,l}(\mathbf{k}) \pm i\eta}, \quad (3.17)$$

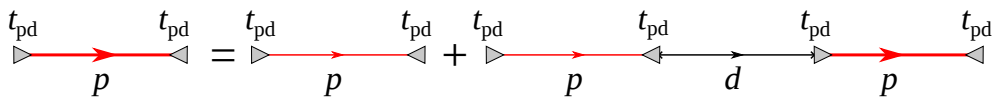
gdje je  $l$  indeks kisikovitih vrpce. Budući da na svakom vrhu dolazi do preskoka na bakrovu orbitalu, javlja se efektivan verteks, označen trokutom na dijagramima, proporcionalan matricnom elementu preskoka u miješanoj reprezentaciji,  $t_{ld}(\mathbf{k})$ . U najjednostavnijoj aproksimaciji, sve itinerantne šupljine se nalaze približno na energiji  $\omega_i = \mu$ , pa  $\omega - E_d$  prelazi u ranije spomenuti  $\Delta_{d\mu}$  te se cijeli dijagram može svesti na konstantu

$$U_{\text{eff}} \approx \text{Re } U_{d\mu} = \frac{t_{pd}^4}{\Delta_{d\mu}^3}. \quad (3.18)$$

Zanemarivanje frekvencijske ovisnosti i imaginarnog dijela tog verteksa, proces preskoka na bakar aproksimiramo kao trenutačan proces. Ovo doduše narušava baždarnu invarijantnost, no budući da nas za opis magnetske susceptibilnosti zanima područje frekvencija manjih od 0.1 eV, znatno manje od  $\Delta_{d\mu} \sim 1$  eV, radi se o opravdanoj aproksimaciji.

Sve čestice koje ulaze u taj verteks mogu dalje preskakati na prazne bakrove orbitale, kao u uobičajenoj hibridizaciji koja je jednočastični proces. Stoga susceptibilnost itinerantnog dijela nosilaca tako računamo kao konvoluciju dva tzv.  $pdp$  propagatora, koji su rješenje Dysonove jednadžbe na slici 3.19: u nazivniku se javlja točno ista disperzijska relacija kao i za neinteragirajući model s tri vrpce, no u brojniku se javlja netrivialna spektralna težina, tj. reziduum propagatora kojeg ćemo dalje označvati s  $z_{\mathbf{k}}$ . U dodatku E pokazano je da je taj reziduum proporcionalan koncentraciji nosilaca na bakru u svakom  $\mathbf{k}$ -stanju

$$z_{\mathbf{k}} = \left( \frac{E_B}{t_{pd}} \right)^2 n_d(\mathbf{k}). \quad (3.19)$$



**Slika 3.19:** Hibridizacijom kisikovitih i bakrovih šupljina nastaju propagatori triju vrpce s istim disperzijskim relacijama kao i neinteragirajući model, no s netrivialnom spektralnom težinom  $z_{\mathbf{k}}$ .



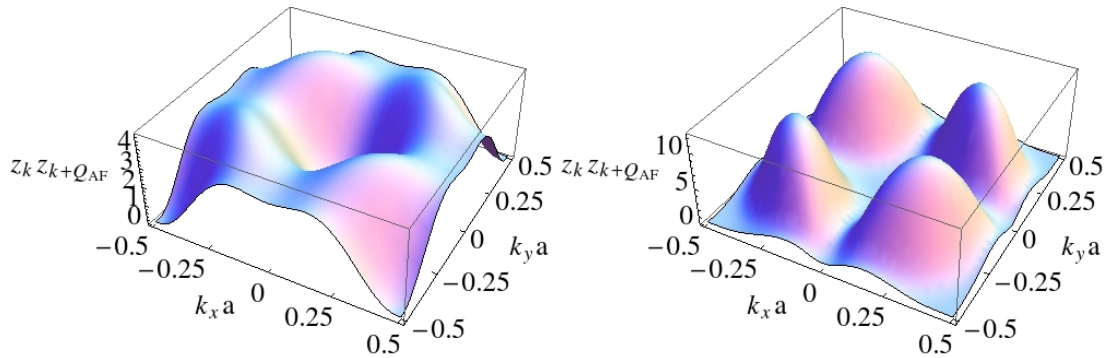
U susceptibilnost se tako uvodi multiplikativni faktor uz integracijsku jezgru:

$$\chi^{(1)}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} z_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \frac{f_{\mu}(\mathbf{k}) - f_{\mu}(\mathbf{k}+\mathbf{q})}{\hbar\omega + i\eta - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}}} \quad (3.20)$$

koji dramatično utječe na susceptibilnost. Ovime  $\chi^{(1)}$  postaje elementarna susceptibilnost od koje se grade unutarnji dijagrami, budući da je svaki proces raspršenja lokalni i mora uključivati preskoke s kisikovih vrpca na bakrove orbitale. Vanjski dijelovi dijagrama sadržavat će samo vertekse eventualnih vezanja na vanjska polja. Od ovih gradivnih elemenata može se sastaviti dijagramatska teorija svih renormalizacija u svim redovima računa smetnje, čiju skicu ćemo prikazati u idućim odlomcima.

### 3.4.2 Visokotemperaturni fazni dijagram s jakim korelacijama

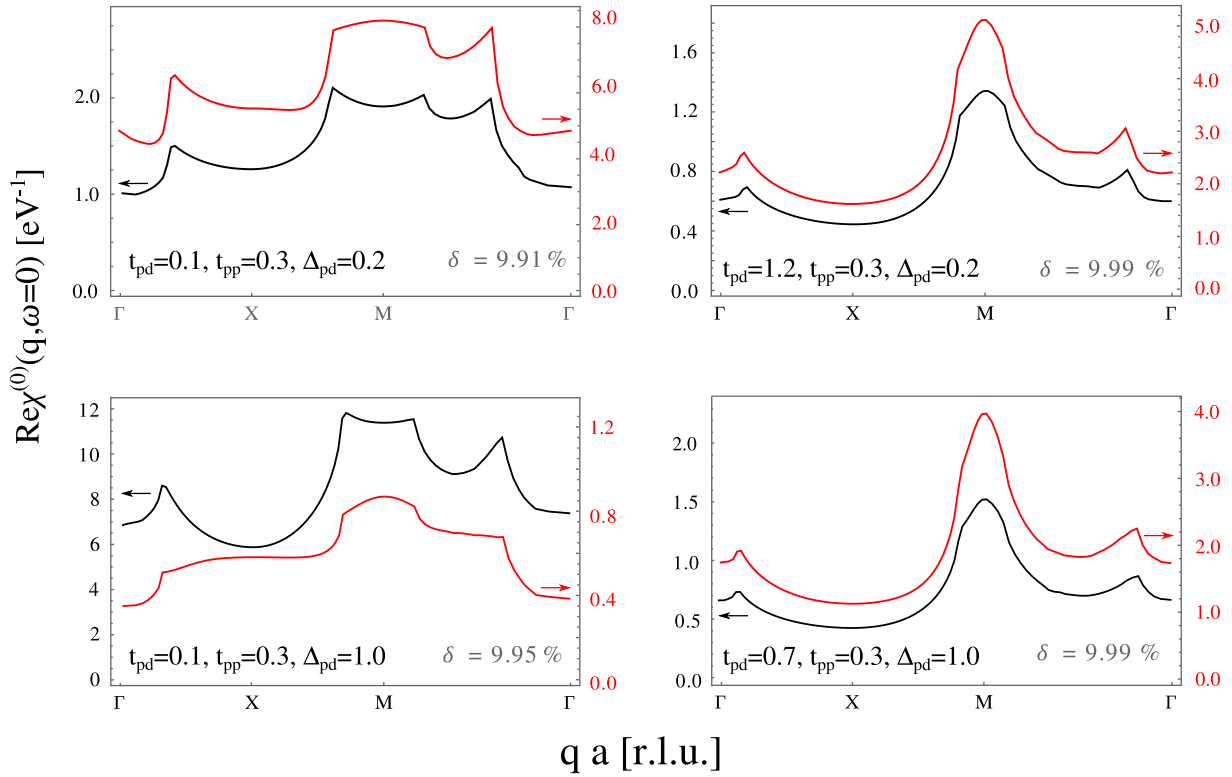
Multiplikativni faktor, uveden u prošlom poglavlju, sastoji se od dva dijela:  $\mathbf{k}$ -ovisne koncentracije nosilaca na bakrovim orbitalama koja slabo varira u BZ te prefaktora proporcionalnog disperziji nosioca s valnim vektorom  $\mathbf{k}$  koji monotono raste prema rubu BZ. Za male vrijednosti vanjskog impulsa  $\mathbf{q}$ , ukupni produkt  $z_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$  također monotono raste prema rubu zone, ali za vrijednosti oko  $\mathbf{q}a = (\pi, \pi)$  (slika 3.20) ima oštar maksimum na  $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$  (produkt rasutuće i padajuće funkcije stvara maksimum između njihovih ekstrema).



**Slika 3.20:** Produkt spektralnih težina dvaju propagatora koji ulaze u podintegralnu funkciju za susceptibilnost na valnom vektoru  $\mathbf{Q}_{AF}$ , lijevo za LSCO, desno za YBCO. Pojačan doprinos dolazi od eksperimentalno vidljivih Fermijevih lukova, umanjeno od  $vH$ .

Taj učinak ima za posljedicu kvalitativnu promjenu u  $\mathbf{q}$ -ovisnosti unutarnjih susceptibilnosti u dijagramima: bez iznimke, na eksperimentalno relevantnim dopiranjima nalazimo maksimum na *komenzurabilnom* valnom vektoru  $\mathbf{Q}_{AF}$ . Slika 3.21 prikazuje tu pojavu na nekoliko međusobno vrlo udaljenih parametrizacija Emeryjevog modela. Valja uočiti da faktor koji potječe od jakih korelacija ima popriličan utjecaj i na apsolutni iznos ove susceptibilnosti, te da je može uvećati ili umanjiti čak i za faktor 10. No taj faktor je posljedica omjera  $\frac{E_B(\mathbf{k})}{t_{pd}}$  u susceptibilnosti koji se u ljestvičnom dijagramu množi s  $\frac{t_{pd}}{\Delta d\mu}$ . Ta dva faktora su međusobno približno recipročna

pa numerički učinak na konačnu susceptibilnost ostaje reda  $\sim 1$ . Vjerujemo da su sva pravila suma i apsolutne iznosi susceptibilnosti time očuvani kao i u uobičajenim pristupima Hubbardovom modelu s tri vrpce.

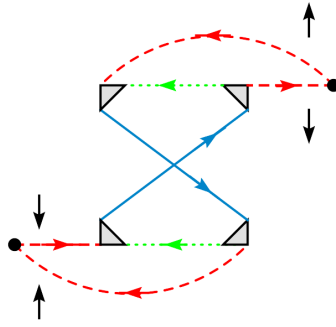


**Slika 3.21:** Susceptibilnosti  $\chi^{(0)}$  (crno) i  $\chi^{(1)}$  (crveno) za četiri međusobno daleka parametarska režima za umjerena, eksperimentalno dostupna dopiranja. Čak i u parametrizacijama u kojima bi  $\chi^{(0)}$  vodila na nekomenzurabilno uređenje,  $\mathbf{Q}_{AF}$  je globalni maksimum nakon uvođenja korelacija, čime se restaurira težnja *komenzurabilnom* uređenju. Na slikama je korištena temperatura  $T = 0$  radi bolje vidljivosti lomova i maksimuma. Na višim temepaturama je težnja *komenzurabilnom* uređenju još naglašenija, budući da se bočni maksimumu oko  $(\pi, \pi)$  razmažu na konačnoj temperaturi.

### 3.4.3 SDW susceptibilnost

Nakon uvođenja korelacija i procesa čekanja, uobičajeni RPA pristup interagirajućoj susceptibilnosti nije više korektan. Potrebno ga je modificirati kako bismo uključili upravo opisane jake korelacije u efektivni račun nalik aproksimaciji slučajnih faza (RPA). Promotrimo dijagram sa slike 3.22 koji opisuje međudjelovanje para čestica-šupljina koje se jednom pokušaju sresti na bakrovom atomu:

Četverokraki verteks je aproksimiran efektivnim međudjelovanjem, konstantom  $U_{d\mu}$ , a time vanjske fermionske linije prelaze u elementarni dijagram  $\chi^{(1)}$ . U dodacima F je prikazan detaljan izvod za dijagram u ovom najnižem redu te generalizacija na cijeli RPA lanac u kojemu se izmjenjuju međudjelovanje  $U_{d\mu}$  i dijagram  $\chi^{(1)}$ . Time ukupni izraz, resumiran do beskonačnog



**Slika 3.22:** Dijagram raspršenja u najnižem redu u lokalnom međudjelovanju  $U_{d\mu}$  - prvi član u beskonačnom redu za susceptibilnost. Crveno: metalne šupljine na kisiku; plavo i zeleno: pomoćni bozoni i fermioni.

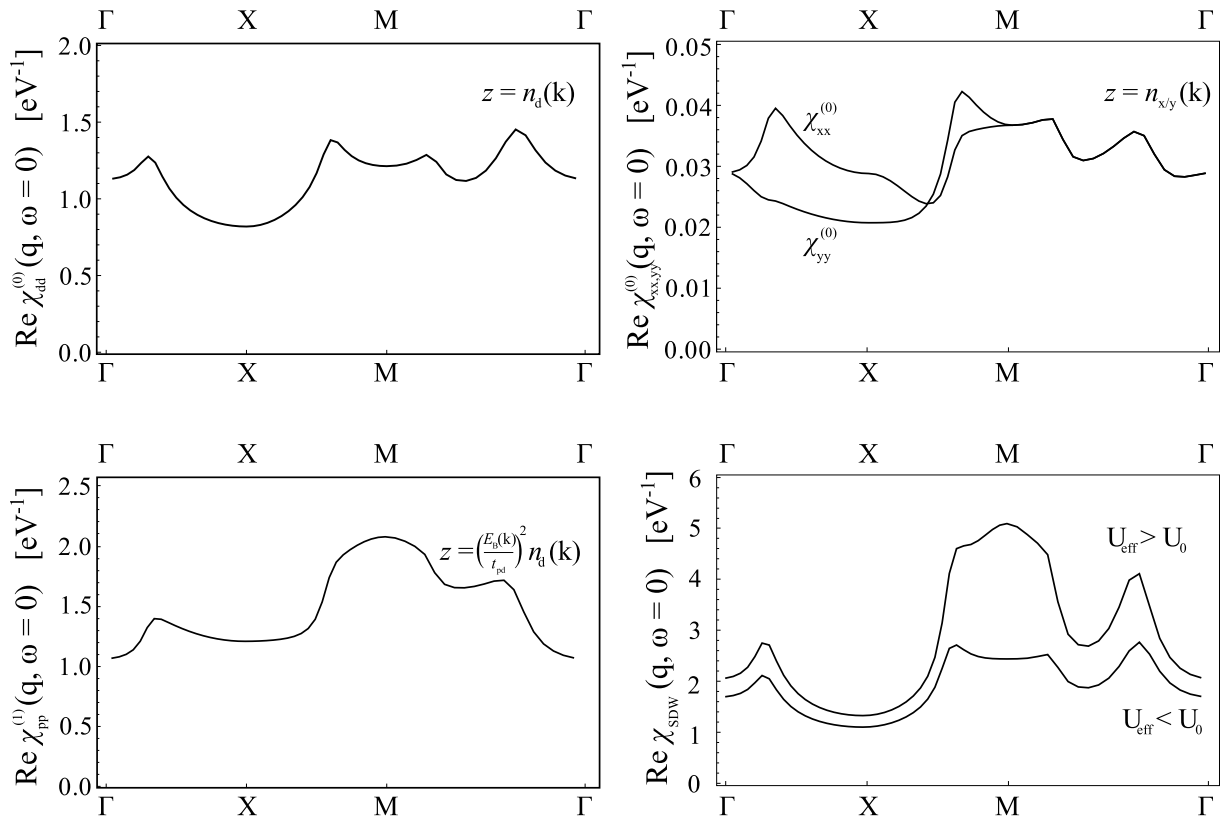
reda u RPA, glasi

$$\chi_{SDW} = \chi_{ll'}^{(0)} + \chi_{lp}^{(0)} \frac{U_{d\mu}}{1 - U_{d\mu} \chi_{pp}^{(1)}} \chi_{p'l'}^{(0)}. \quad (3.21)$$

Orbitale  $l$  i  $l'$  su vanjske varijable koje opisuju koji spinski stupanj slobode ispitujemo neutronskim raspršenjem. Slika 3.23 prikazuje kvalitativno ponašanje gradivnih elemenata  $\chi_{ll'}$  te ukupnu susceptibilnost  $\chi_{SDW}$  za spinove na bakrovim orbitalama:

- Sve kvalitativne promjene (lomovi i maksimumi opisani ranije) su vidljivi u svim susceptibilnostima, budući da potječu isključivo od oblika Fermijeve plohe.
- Susceptibilnost bakrovih orbitala je općenito veća, budući da joj je doprinos elektronskih stanja oko vH točke pojačan u odnosu na kisikove orbitale.
- Susceptibilnost u nazivniku je uvijek komezurabilna zbog ranije opisanog učinka korelacija te će uvijek dovesti do faznog prijelaza na  $\mathbf{Q}_{AF}$ .
- Malom promjenom jakosti međudjelovanja ukupan odziv može se promijeniti iz komezurabilnog u nekomezurabilni, što znači da će promjenom temperature iznos susceptibilnosti u nazivniku varirati dovoljno za isti učinak. Oko  $T_{MF}$  susceptibilnost ima maksimum u temperaturi čime fazni prijelaz postaje komezurabilan. Na temperaturama ispod faznog prijelaza općenito amplitudna susceptibilnost opada pa očekujemo restauraciju nekomezurabilnih uređenja. Potpuni opis niskotemperaturne faze zajedno s orbitalnim rastavom odziva ostavljamo za daljnja istraživanja.

Rezultat s slike 3.23 je važan zbog još jedne provjere konzistentnosti. Naime, vrh na malim valnim vektorima duž dijagonale ( $M-\Gamma$  linija) na prikazanoj slici je globalni maksimum što dovodi u pitanje stvaranje uređenja s malim valnim vektorom. No taj vrh potječe od ugnježđenja rubnih dijelova Fermijeve plohe. Umjesto potpunog samosuglasnog računa, možemo uvesti isto fenomenološko  $\mathbf{k}$ -ovisno gušenje korišteno za opis ARPES mjerenja (intenzitet na Fermijevoj energiji iz prošlog poglavlja). Takvo gušenje, očekivano, potiskuje signale na malim valnim vektorima (slika 3.24) i restaurira područje oko  $\mathbf{Q}_{AF}$  kao najzanimljivije u potrazi za faznim

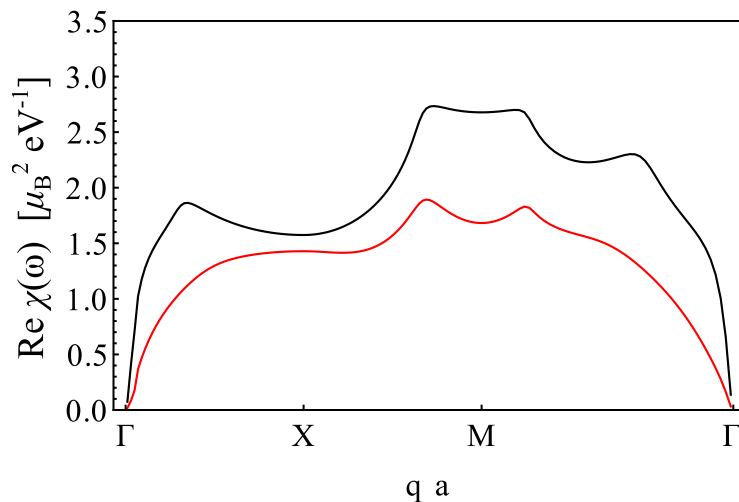


**Slika 3.23:** Gore: susceptibilnost bakrovih orbitala (lijevo) te kisikovih  $x, y$  orbitala. Učinak projektora opisanih ranije cijepa odziv kisikovih orbitala u cijeloj BZ osim duž dijagonale, na kojoj su zbog simetrije ekvivalentne. Dolje:  $\chi^{(1)}$  susceptibilnost s  $z_{\mathbf{k}}$  spektralnim težinama uvedenim korelacijama na bakru (lijevo) te ukupna susceptibilnost bakrovih orbitala  $\chi_{SDW}$  za  $l = l' = d$  te 2 bliske vrijednosti efektivnog međudjelovanja (desno). Mala promjena međudjelovanja uzrokuje dramatičnu promjenu magnetskog odziva, a isti učinak će za konstantno međudjelovanje imati postepeno spužtanje temperature prema  $T^*$  čime predviđamo komenzurabilan odziv na  $T^*$ .

prijelazom.

### 3.5 Pseudoprocjep i dinamička slika

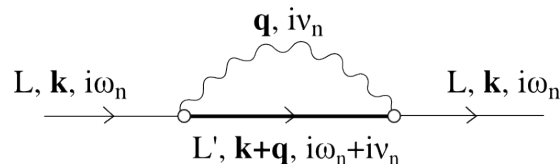
Svi daljnji računi magnetskih susceptibilnosti su vršeni u modelu sa statičkim procjepom u vrpci, analognom uobičajenoj aproksimaciji srednjeg polja za AF sustave [9, 10]. Stvarni pseudoprocjep može biti uzrokovan različitim fluktuacijama, a postoje i slutnje da je uzrokovan ili pojačan AF fluktuacijama ili neredom *izvan* CuO<sub>2</sub> ravnine [36]. U ovom odjeljku ćemo pretpostaviti da se pseudoprocjep otvara u međudjelovanju s magnetskim bozonskim modom plauzibilne disperzije i simetrije. Pokazat ćemo kako se takvim postupkom dobije slika vodljivih fermiona ekvivalentna statičkom modelu, u kojem su numerički računi znatno jednostavniji i stabilniji, a čije rezultate ćemo iznijeti kasnije.



**Slika 3.24:** Susceptibilnost  $\chi^{(0)}$  s konstantnim malim gušenjem, na 50 K (crno) te s  $\mathbf{k}$ -ovisnim gušenjem (crveno) s maksimumom na vH točki. Doprinos od dijelova Fermijeve plohe uz rub BZ je znatno potisnut, čime nestaju i maksimumi na malim valnim vektorima, karakteristični za pojavu vala gustoće naboja.

### 3.5.1 Vlastita energija elektrona porijeklom od elektron-bozon međudjelovanja

Uređeno stanje nastaje kondenzacijom elementarnih pobuđenja koja lome neku od simetrija (npr. mekšanje fononskog moda konačnog valnog vektora za CDW sustave). Jako kulonsko odbijanje  $U_d \rightarrow \infty$  favorizira pokušaj AF uređenja  $\text{CuO}_2$  rešetke, tj. lokalizacije nosilaca. Budući da u normalnom stanju elektroni sigurno dio vremena provode kao lokalizirani spinovi, promotrit ćemo povratni utjecaj valova takvih spinova na fermione. Riječ je o sumi svih procesa u kojima fermion tokom propagacije emitira i ponovno apsorbira jedan virtualni bozon određene frekvencije i valne duljine. Taj proces na dovoljno niskim temperaturama možemo smatrati dovoljno rijetkim da je opravdano zanemariti procese u kojima se isti bozonski mod više puta rasprši na elektronima prije nego se reapsorbira. Dijagram sa slike 3.25 prikazuje jedan takav elementarni proces, tzv. ireducibilnu vlastitu energiju. Ona je kompleksna funkcija koja svojim realnim i imaginarnim dijelovima definira pomak energije i vrijeme života interagirajućeg kvantnog stanja fermiona.



**Slika 3.25:** Najjednostavniji dijagram vlastite energije elektrona u međudjelovanju s jednim bozonskim modom; ova funkcija ulazi u definiciju spektralne funkcije.

Konačni izraz za retardiranu vlastitu energiju je poznat iz većine udžbenika o računu smet-

nje:

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\lambda} g^2 |g^\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 \frac{\omega^{(0)}(\mathbf{q})}{\omega(\mathbf{q})} \left( \frac{f_\mu(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + n(\mathbf{q})}{\hbar\omega + i\eta - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_F) + \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})} + \right. \quad (3.22)$$

$$\left. + \frac{1 - f_\mu(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + n(\mathbf{q})}{\hbar\omega + i\eta - (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_F) - \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})} \right). \quad (3.23)$$

Dva člana u zagradi opisuju apsorpciju i emisiju bozonskog moda, a elektron-bozon vezanje ćemo aproksimirati konstantom radi jednostavnosti. Parametar  $\eta$  je u  $T = 0$  računu smetnje infinitezimalan i vodi računa o kauzalnosti. U interagirajućem sustavu će, radi samosuglasnosti, biti zamijenjen konačnim parametrom gušenja  $\Gamma$ , koje je važan radi uspostave eksperimentalno opravdanog režima.

Spektralna funkcija u najnižoj aproksimaciji, dobivena rješavanjem odgovarajuće Dysonove jednadžbe, glasi:

$$A(\mathbf{k}, \omega) = (-) \frac{1}{\pi} \text{Im} \left( \frac{1}{\omega - (E_{\mathbf{k}} - E_F) - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)} \right) \quad (3.24)$$

Najvažnija provjera konzistentnosti računa jest očuvanje spektralne snage, tj. pravilo suma. Ukupni integral po frekvencijama za svaki  $\mathbf{k}$  mora biti jednak 1, što je u svim korištenim modelima bilo ispunjeno.

### 3.5.2 Kolektivni modovi itinerantnog i lokaliziranog podsustava

Za dinamičku sliku je važno identificirati bozonski mod kojeg je plauzibilno uvrstiti u račun. Kolektivna pobuđenja itinerantnih nosilaca jedan su od kandidata za taj bozonski mod koji posreduje međudjelovanje elektorna i šupljina. Njegovu disperzijsku relaciju tražimo rješavanjem iste jednadžbe (3.2) za temperaturu  $T_{\text{MF}}$  faznog prijelaza, ali na konačnim frekvencijama  $\omega > 0$ . Susceptibilnost  $\chi^0(\mathbf{q}, \omega)$  je u normalnom stanju monotona funkcija temperature i frekvencije te stoga na  $T > T_{\text{MF}}$  ne postoji rješenje  $\omega(\mathbf{q})$  pa ni kolektivni mod itinerantnih fermiona.

Budući da se nosioci dio vremena nalaze u lokaliziranim stanjima, pretpostavit ćemo da se, barem na visokim frekvencijama, elektroni raspršuju na takvim modovima. Uobičajeno je takve kolektivne spinske valove parametrizirati Heisenbergovim modelom. Jako odbojno međudjelovanje u sustavu koji ima 1 elektron po čvoru rešetke će uzrokovati prijelaz u AF izolatorsko stanje u kojem je jedina dinamika proces izmjene. Ovaj efektivni Heisenbergov Hamiltonijan je jedan od graničnih slučajeva Hubbardovog modela s polupopunjenom vrpcom [9, 10]. Mi ćemo ga koristiti i za poddopirane sustave, budući da visokoenergijski dio spektra nije bitno različit od onoga za polupopunjenu vrpcu, tj. nedopirani AF materijal. Disperzijska relacija pobuđenja takvog AF sustava je, u najčešćoj aproksimaciji:

$$\hbar\omega(\mathbf{q}) = 2J \sqrt{4 - (\cos(q_x a) + \cos(q_y a))^2} \quad (3.25)$$

U jednovrpčanom modelu je to i jedina magnonska grana, no njezina disperzija je akustička, tj.  $\omega(\mathbf{Q}_{AF}) = 0$ . Promotrimo sada sustav u kojem takvi lokalizirani spinovi na bakrovim orbitalama međudjeluju s ekvivalentnim kolektivnim modovima s kisikovih orbitala. Disperzijske relacije neinteragirajućih modova su tada

$$\hbar\omega_d(\mathbf{q}) = 2J_{dd}\sqrt{4 - (\cos(q_x a) + \cos(q_y a))^2}, \quad (3.26)$$

$$\hbar\omega_p(\mathbf{q}') = 2J_{pp}\sqrt{4 - (\cos(q'_x a') + \cos(q'_y a'))^2}, \quad (3.27)$$

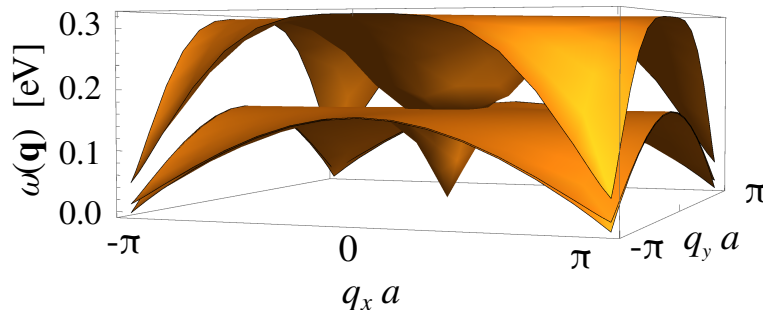
gdje se varijable s crticama odnose na zarotiranu rešetku kisikovih orbitala za koju vrijedi  $a' = \frac{a}{\sqrt{2}}$ . Rotacijom za  $45^\circ$  te translacijom možemo transformirati tu disperzijsku relaciju u Brillouinovu zonu definiranu bakrovom rešetkom, čime nastaju dvije ekvivalentne grane:

$$\hbar\omega_p(\mathbf{q}) = 4J_{pp}\sqrt{1 - \sin\left(\frac{q_x a}{2}\right)^2 \sin\left(\frac{q_y a}{2}\right)^2}, \quad (3.28)$$

Efektivno međudjelovanje tih pobuđenja može se parametrizirati integralom izmjene  $J_{pd}$ , te pripadnim članom

$$J_{pd} \sin \frac{q_{x/y} a}{2}, \quad (3.29)$$

te se, analogno dijagonalizaciji  $3 \times 3$  elektronskog Hamiltonijana, dobiju tri disperzijske relacije magnona, prikazane na slici 3.26. Najvažnije opažanje ovog jednostavnog modela, vođenog simetrijom rešetke, jest pojava procjepa u najvišoj, bakrovoj magnonskoj grani.  $\omega(\mathbf{Q}_{AF})$  poprima eksperimentalnu vrijednost oko 30 meV za vrijednost parametra  $J_{pd} \sim 10$  meV, budući da je taj član pomnožen simetrijskim faktorom  $2\sqrt{2}$ . Ovime smo potisnuli lokalizirane magnone bakrovih orbitala na frekvencije iznad  $\tilde{\omega}$ , koju poistovjećujemo s frekvencijom grla disperzije pješčanog sata. U stanju sa pseudoprocjepom ćemo na  $\omega < \tilde{\omega}$  tražiti pojavu donje grane disperzije od metalnih nosilaca.



**Slika 3.26:** Tri disperzijske relacije magnona - grana najviše energije koja potječe od spinova na bakrovim orbitalama ima konačan procjep u točki  $(\pi, \pi)$

Preostale dvije grane kisikovih magnona možemo zanemariti, budući da smo u prošlom poglavlju pokazali da je njihova susceptibilnost nekoliko redova veličine manja. Njihov jedini

učinak je bio otvaranje procjepa u disperziji spinskih valova elektrona na bakrovim orbitalama. Moguće je da je neka od tih grana odgovorna za pojavu druge grane magnetske disperzije, koju u nekim eksperimentalnim člancima nazivaju akustičkom po analogiji s fononskim modovima. Budući da je ta slaba "akustička" disperzija zapravo vidljiva isključivo na visokim frekvencijama  $\omega > 100$  meV te daleko od  $\mathbf{Q}_{AF}$ , ispuštamo je iz daljnjeg razmatranja.

Ovime smo odabrali disperzijsku relaciju moda kojeg ćemo uvrstiti u vlastitu energiju elektron-bozon međudjelovanja, budući da ona zadovoljava nekoliko važnih eksperimentalnih opažanja:

- Ima minimum na komenzurabilnom vektoru  $\mathbf{Q}_{AF}$
- Njezin visokoenergijski dio odgovara eksperimentalno opaženim magnonima koje se često identificira s lokaliziranim stanjima s energijskom skalom superizmjene.
- Poštuje simetriju rešetke, zbog koje je minimum na  $\mathbf{Q}_{AF}$  na konačnoj frekvenciji.

### 3.5.3 Gušenje u pseudoprocjepu i zatvaranje pseudoprocjepa

Radi općenitosti, isprobali smo poopćenu disperzijsku relaciju (3.30) koja dozvoljava konačan procjep u  $\mathbf{q} = 0$ ,  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{AF}$ , nijednoj ili obje točke. Četiri korištena parametarska režima su popisana u tablici 3.1 te ilustrirana na slici 3.27.

$$\hbar\omega(\mathbf{q}) = \sqrt{\omega_0^2 + c_0^2 \left(4 - (\cos(q_x a) + \cos(q_y a))^2\right) + \omega_\pi \left(\frac{1}{4} (2 - \cos(q_x a) - \cos(q_y a))^2\right)} \quad (3.30)$$

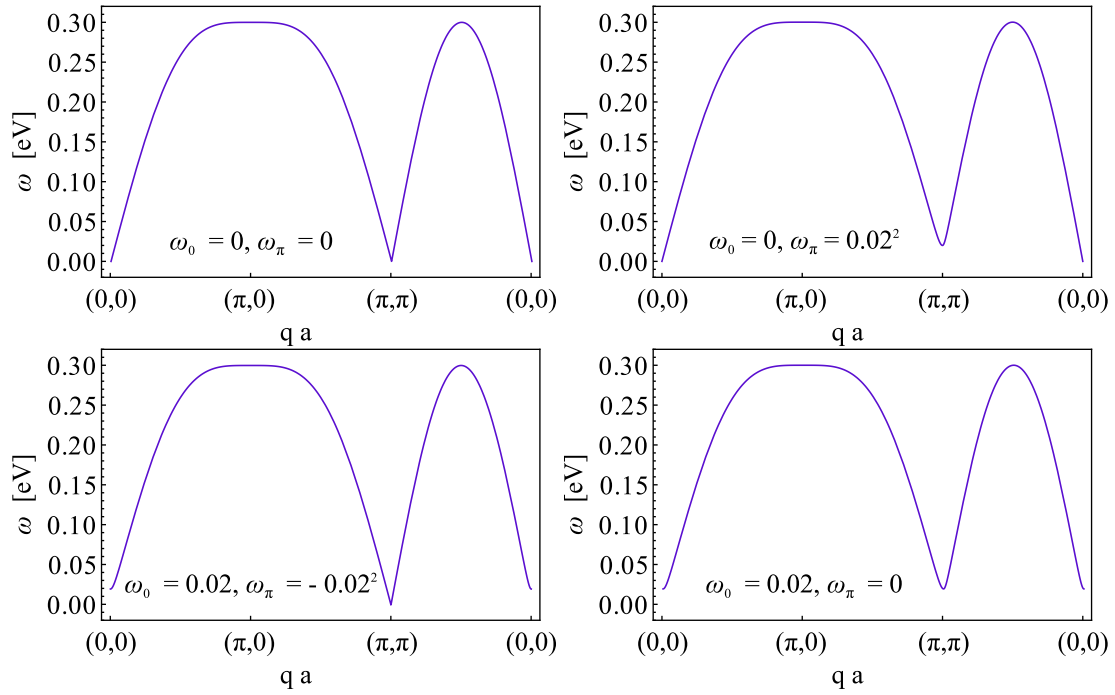
**Tablica 3.1:** Parametri magnonske disperzije za četiri modela karakteristična za poddopirane kuprate i nedopirani osnovni materijal.

	osnovni (oba akustička)	akustički u $\mathbf{q} = 0$	akustički u $\mathbf{Q}_{AF}$	bez akustičke
$\omega_0$	0.0 eV	0.0 eV	0.02 eV	0.02 eV
$c_0$	0.15 eV	0.15 eV	0.15 eV	0.15 eV
$\omega_\pi$	0.0 eV	$0.02^2$ eV	$-0.02^2$ eV	0.0 eV

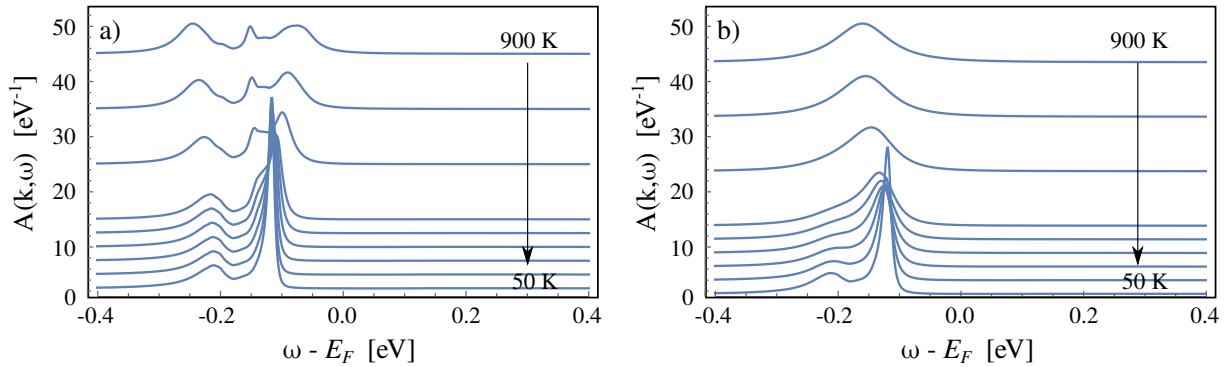
U svim korištenim modelima porastom temperature povećava se očekivana vrijednost najpopunjenijeg bozonskog stanja, pa se pseudoprocjep efektivno *širi* prema višim temperaturama (slika 3.28). To nije točna temperaturna evolucija, budući da procesi gušenja, parametrizirani parametrom  $\eta$  u nazivniku, također moraju jačati porastom temperature. Linearna ovisnost gušenja poput  $\eta = 0.0005 \frac{\text{eV}}{\text{K}} \cdot T$  daje dovoljno dobro slaganje s eksperimentalno opaženim otvaranjem pseudoprocjepa: porastom temperature procjep se zatvara, a spektralne linije se šire.

Ovakva plauzibilna slika otvaranja pseudoprocjepa može se vrlo zadovoljavajuće preslikati na statički model (slika 3.29) kojeg ćemo koristiti u računu magnetskih susceptibilnosti na tem-



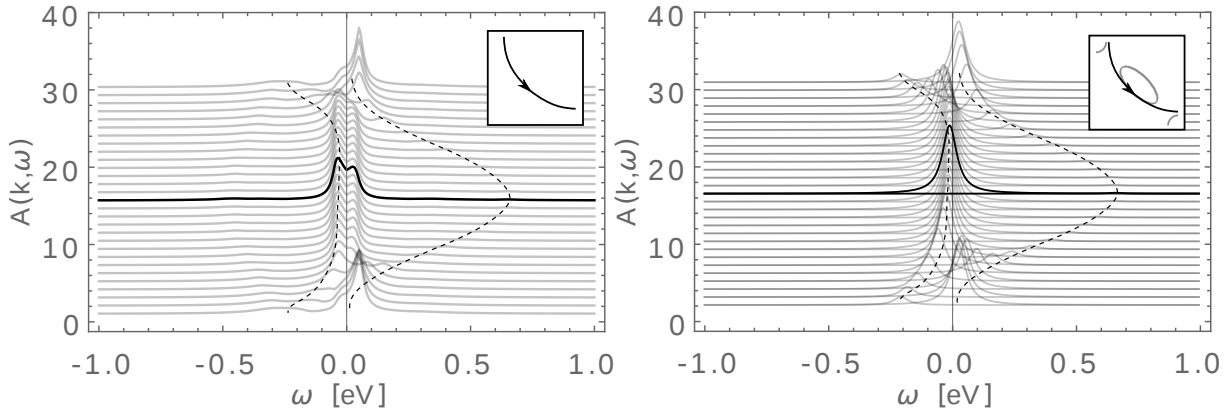


**Slika 3.27:** Četiri karakteristična režima za bozonski mod aktivan na  $0$  i  $\mathbf{Q}_{AF}$ : akustički i optički završetci u  $\mathbf{q} = 0$  i  $\mathbf{Q}_{AF}$ . Omjer procjepa i gušenja na oba kritična valna vektora će dominantno utjecati na spektralne funkcije.



**Slika 3.28:** Spektralna funkcija u rasponu od  $T = 50$  K do 900 K u vH točki ( $\mathbf{k}a = (\pi, 0)$ ). a) Sa konstantnim gušenjem od 5 meV - pseudoprocjep se širi porastom temperature, suprotno eksperimentu; na višim temperaturama se javlja i središnji vrh usred pseudoprocjepa [37]. b) Ista slika s gušenjem proporcionalnim temperaturi (0.0005 meV/K), čime se procjep s temperaturom *zatvara*, sukladno eksperimentima. Ovo gušenje korišteno je u svim spektralnim funkcijama s elektron-bozon međudjelovanjem.

peraturama ispod ujedno otkriva i ispravnu interpretaciju  $\mathbf{k}$ -ovisnosti pseudoprocjepa. U literaturi se sistematski pseudoprocjep crta duž Fermijeve plohe kao jako  $\mathbf{k}$ -ovisan: velikog iznosa oko  $\mathbf{k}_{vH}$ , a zanemarivo malen u širokom rasponu valnih vektora oko dijagonale BZ. Takva interpretacija je naivna i prije svega nepotrebno složena budući da zahtjeva opravdanje  $\mathbf{k}$ -ovisnosti. Konstantan procjep  $\Delta_{AF}$  otvoren na  $\mathbf{Q}_{AF}$  je dovoljan za dobar opis varijacije procjepa duž Fermijeve plohe, budući da je Fermijev luk zanemarivo osjetljiv na iznos procjepa, za razliku od regija blizu *hotspotova* i  $\mathbf{k}_{vH}$ .



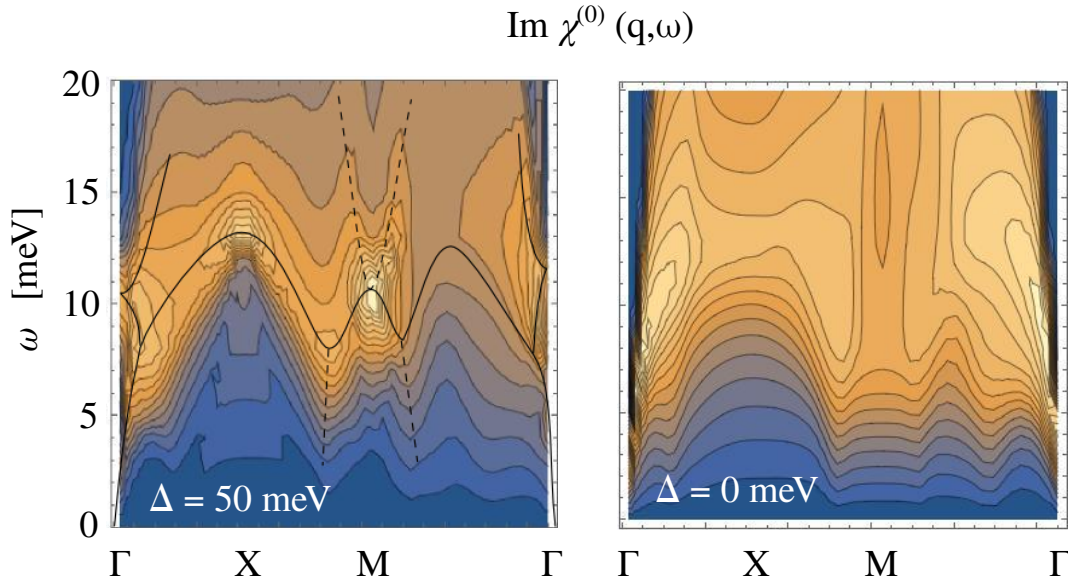
**Slika 3.29:** Spektralna funkcija za točke duž Fermijeve plohe (visokotemperaturne, bez procjepa, prikazane na umetcima): lijevo za raspršenje na magnonima na 50 K, desno za efektivno neinteragirajući sustav sa statičkim procjepom. Na obje slike je radi jasnoće prikaza ispuštena Fermijeva funkcija koja čini vidljivima samo stanja ispod Fermijeve energije. Tamnija linija odgovara valnom vektoru na Fermijevoj energiji na dijagonali BZ. Za svaki egzaktan otvoreni pseudoprocjep moguće je pronaći ekvivalentan sustav sa statičkim procjepom koji dovoljno dobro opisuje Fermijevu plohu. Cijepanje Fermijeve plohe donje vrpce na  $\omega = 0$  na dva bliska maksimuma je posljedica  $\mathbf{q} = 0$  procesa, koji su na ovoj slici zadržani radi ilustracije njihovog učinka. Valja uočiti kako je ovakvim procjepom očuvan Fermijev luk u širem rasponu valnih vektora, a procjep je vidljiv samo blizu vH točaka, sukladno svim ARPES eksperimentima.

### 3.6 Susceptibilnost $\bar{\chi}^0(\mathbf{q}, \omega)$ ispod $T^*$

Uvođenje statičkog procjepa stvara dvije vrpce od kojih svaka može presjecati Fermijev nivo ili biti procjepom potisnuta s njega. Elementarna susceptibilnost  $\bar{\chi}^{(0)}$  sadrži četiri doprinosa: dva unutarvrpčana i dva međuvrpčana. Za razliku od susceptibilnosti bez procjepa, više ne postoji monotono padajući kontinuum  $ph$  pobuđenja sve do  $\omega = 0$  eV; na svakom valnom vektoru postoji različita energija praga za  $ph$  pobuđenja. Budući da je za valni vektor  $\mathbf{Q}_{AF}$  najznačajniji doprinos onaj u blizini vH točke, na tom valnom vektoru prag iznosi točno  $2\Delta_0$ . Na toj energiji se nalazi oštar maksimum, koji podsjeća na rezonanciju  $\tilde{\omega}$ , no u ovom metalnom računu porijeklo mu je u AF procjepu (slika 3.30). Koristeći manje gušenje u integraciji, možemo jasnije razaznati detalje u ponašanju susceptibilnosti i identificirati porijeklo pojedinih maksimuma i "disperzija" vrhova koji podsjećaju na kolektivna pobuđenja iz lokalizirane slike.

Unutarvrpčana pobuđenja podsjećaju na akustičke fonone, budući da imaju linearnu disperziju oko  $\mathbf{q} = 0$ , a međuvrpčane na optičke, budući da im je na svim valnim vektorima frekvencija konačna. Valja napomenuti da ovo nisu kolektivna pobuđenja, iako njihov intenzitet može biti pojačan zbog procjepa. Čak štoviše, relativne širine vrhova u  $\bar{\chi}^{(0)}$  odgovaraju širinama opaženim u raspršenju neutrona, koja su reda veličine 0.03 – 0.05 u jedinicama recipročne rešetke. Moguće je da su upravo ovakva  $ph$  pobuđenja često krivo interpretirana kao kolektivni modovi nekog uređenog stanja.

Amplitudna i fazna susceptibilnost  $\bar{\chi}_{zz}$  i  $\bar{\chi}_{+-}$  ispod AF prijelaza se razlikuju, budući da su

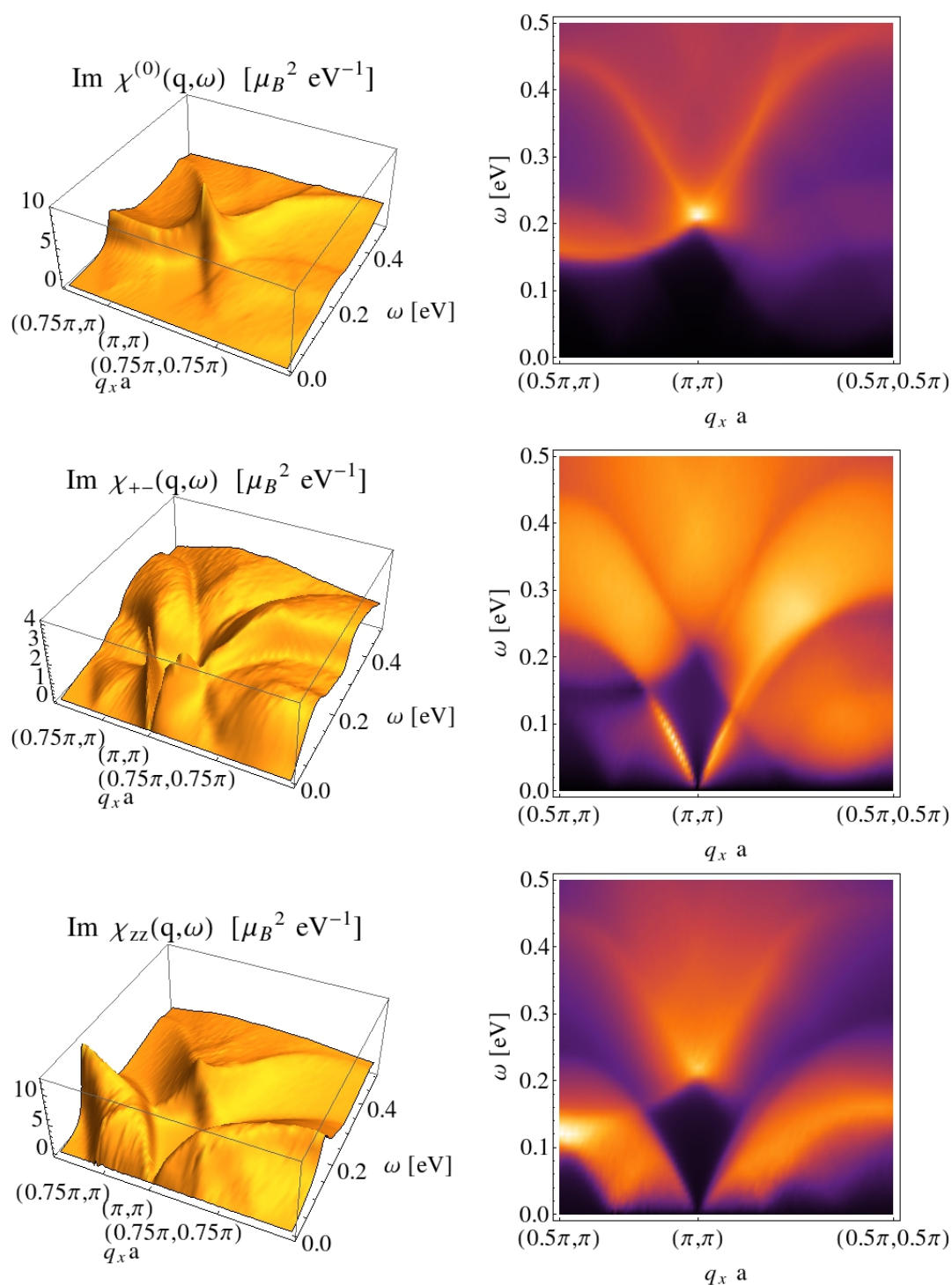


**Slika 3.30:** Imaginarni dio neinteragirajuće elementarne susceptibilnosti  $\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)$  s procjepom (lijevo) i bez njega (desno). Bez procjepa nema nikakvih pojava u susceptibilnosti: spinskog procjepa, "rezonancija" i slično. Linije na lijevoj slici su vodilje za oko duž lokalnih maksimuma koji podsjećaju na akustičke unutarvrpčane i "optičke" međuvrpčane čestično-šupljinske procese.

rješenja dviju različitih Dysonovih jednadžbi (izrazi su popisani u dodatku B). Osim gore spomenute susceptibilnosti  $\bar{\chi}^{(0)}$ ,  $\bar{\chi}_{zz}$  i  $\bar{\chi}_{+-}$  sadrže još dvije slične elementarne susceptibilnosti koje odražavaju činjenicu da je faznim prijelazom divergiralo raspršenje na  $\mathbf{Q}_{\text{AF}}$ . Takva resumirana susceptibilnost (slika 3.31 prikazuje primjer za Hg1201 kuprat) sadrži uske, jasne akustičke unutarvrpčane polove na energijama  $\omega \lesssim 1.5\Delta$  oko  $\mathbf{Q}_{\text{AF}}$  te široke, slabo definirane međuvrpčane polove oko  $2\Delta$ . Njihovo širenje se može objasniti kao Landauovo gušenje kolektivnih modova ulaskom u područje u  $(\mathbf{q}, \omega)$  prostoru u kojem postoje  $ph$  pobuđenja. Eksperimentalni spektri su u oštroj suprotnosti s ovakvom magnetskom susceptibilnošću:

- širine spektralnih linija moraju biti dosta velike, od 20-50 meV, ovisno o  $\mathbf{k}$ ,
- $\bar{\chi}^0$  je dovoljna za točno objašnjenje opaženih neutronske spektara: međuvrpčana  $ph$  pobuđenja imaju korektnu disperziju i relativne intenzitete kao i gornja grana disperzije pješčanog sata.
- resumacija magnetske susceptibilnosti kviri kvalitativno ponašanje spektra magnetskih pobuđenja iz  $\bar{\chi}^0$ .

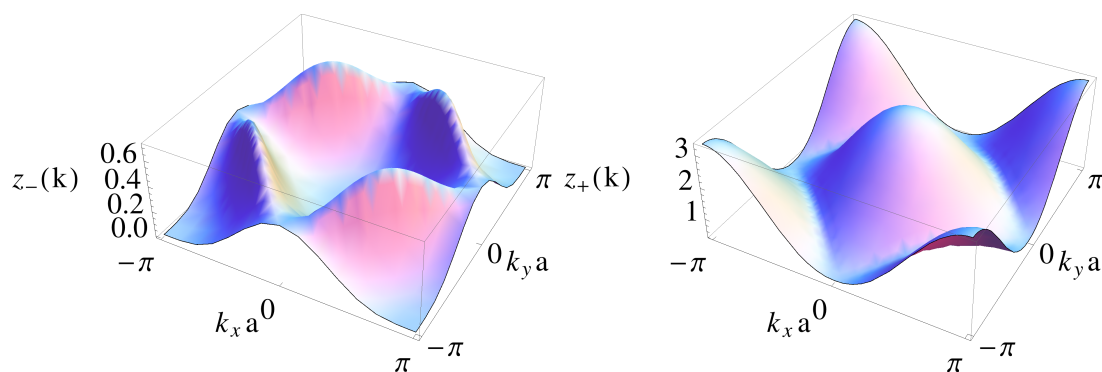
Vidimo da je naivna resumacija, vođena krivom pretpostavkom o pravom faznom prijelazu na  $T^*$ , varljiva i kviri slaganje s eksperimentima. Također, procjep određen iz AF jednadžbe samo-suglasnosti je prevelik za faktor 4, što odgovara točno korekcijskom faktoru potrebnom drugdje u kupratima - 75% spektralne težine otpada na nekoherentne procese. Korektnu vrijednost procjepa potrebno je uvrstiti bez samo-suglasnog računa i zanemariti dijagrame višeg reda.



**Slika 3.31:** Imaginarni dio susceptibilnosti za 10% dopirani Hg1201 u 3D i konturnom prikazu. Gore: elementarna fazna susceptibilnost sa samosuglasno određenim procjepom: maksimum na  $\mathbf{Q}_{AF}$  potječe od "rezonancije" vH točaka dviju vrpca, koje su udaljene za točno  $2\Delta$ . Sredina: fazna susceptibilnost resumirana do beskonačnog reda, koja sadrži kolektivne unutarvrpčane (ispod  $1.5\Delta$ ) i široke međuvrpčane grane (iznad  $2\Delta$ ). Resumacija je narušila slaganje s eksperimentom! Dolje: amplitudna susceptibilnost, resumirana do beskonačnosti, također u suprotnosti s oblikom niskofrekventnih pobuđenja.

### 3.7 Korelacije u stanju s procjepom

Otvaranjem procjepa dolazi do preklapanja stare BZ i stvaranja novih vrpce. U takvom stanju, zadržavamo multiplikativni težinski faktor  $z_k$  u susceptibilnosti gdje je potrebno, no i njega je potrebno preklopiti kako bi odgovarajući dijelovi vrpce imali ispravne težine. Na slici 3.32 prikazane su "stare" vrpce (bez procjepa) te "nove" (s procjepom) i faktor  $z_k$  za oba slučaja. Budući da ćemo najčešće spominjati AF uređenje sa valnim vektorom  $(\pi, \pi)$ , linija preklapanja zone je antidijagonala,  $k_y a = \pi - k_x a$ . Tako nastaju funkcije  $z_k^+$  i  $z_k^-$  koje predstavljaju ispravne težine dviju AF-rascijepljenih vrpce. Ovo je posebno važno, budući da numeričku integraciju vršimo u proširenoj zoni, tj. Brillouinovoj zoni kakva je prije otvaranja procjepa, radi numeričke stabilnosti i brzine. Ovako preklopljene težine, uvrštene u susceptibilnost sa procjepom  $\bar{\chi}^0$ , daju korektno slaganje s  $\chi^{(0)}$  (visokotemperaturna susceptibilnost bez procjepa) na  $T_{MF}$ .



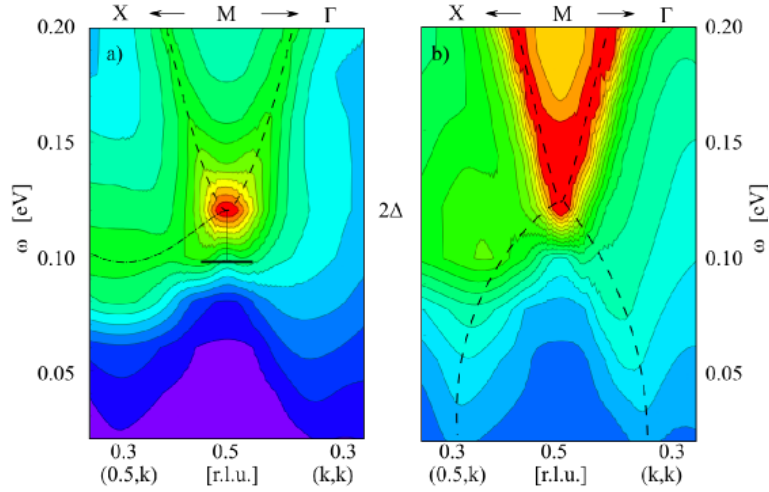
**Slika 3.32:** Preklopljene spektralne težine  $z_k$  za donju i gornju AF vrpce u korištenom režimu malog procjepa.

#### 3.7.1 Utjecaj korelacija na magnetski spektar

U niskotemperaturnoj uređenoj fazi korelacije pojačavaju susceptibilnost u neposrednoj okolini  $\mathbf{Q}_{AF}$  kao i u normalnom stanju, pa su samim time i sve pojave uzrokovane procjepom naglašenije. Najvažnije opažanje je pojava niskofrekventnih "grana" s disperzijom prema dolje (slika 3.33), koje identificiramo s donjom polovicom disperzije "pješčanog sata" poznatog iz itrijevih i lantanovih kuprata. Ova pojava je prisutna čak i za parametre živinog kuprata, korištene na slici 3.33, što omogućuje određivanje kriterija za raspon utjecaja korelacija, o čemu će više riječi biti u poglavlju s raspravom i rezultatima.

### 3.8 Nabojno uređenje ispod $T^*$

Uređenje sa statičkim valom gustoće naboja nastaje smrzavanjem nekon fonona na netrivialnom valnom vektoru, čime dolazi do uvišestručenja jedinične ćelije, najčešće dimerizacije ili



**Slika 3.33:** Učinak korelacija na niskotemperaturni magnetski spektar sa procjepom  $\Delta > 0$ . Maksimum na  $\mathbf{Q}_{AF}$  i  $\omega = 2\Delta$  te grana pobuđenja na frekvencijama iznad  $2\Delta$  su vidljivi, ali se podigao intenzitet niskofrekvencijske nekomenzurabilne grane "pješčanog sata".

tetramerizacije[38]. Do ove pojave dovodi elektron-fonon vezanje opisano Hamiltonijanom oblika:

$$H_{ep} = \sum_{\lambda, \mathbf{q}} u_{\lambda, \mathbf{q}} \sum_{LL' \mathbf{k}\sigma} \frac{g}{\sqrt{N}} g_{\lambda}^{LL'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) c_{L' \mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{L \mathbf{k}\sigma}, \quad (3.31)$$

gdje je  $u_{\lambda, \mathbf{q}}$  pomak rešetke,  $g_{\lambda}^{LL'}$  su verteksi elektron-fonon vezanja (izvedeni ili popisani u dodacima), a  $g$  njegova jakost.

Vlastita energija fonona u međudjelovanju s vodljivim elektronima je proporcionalna odgovarajućoj susceptibilnosti

$$\hbar \Pi_{\lambda}(\mathbf{q}, \omega) = g^2 V_0 \chi_{\lambda\lambda}(\mathbf{q}, \omega) \quad (3.32)$$

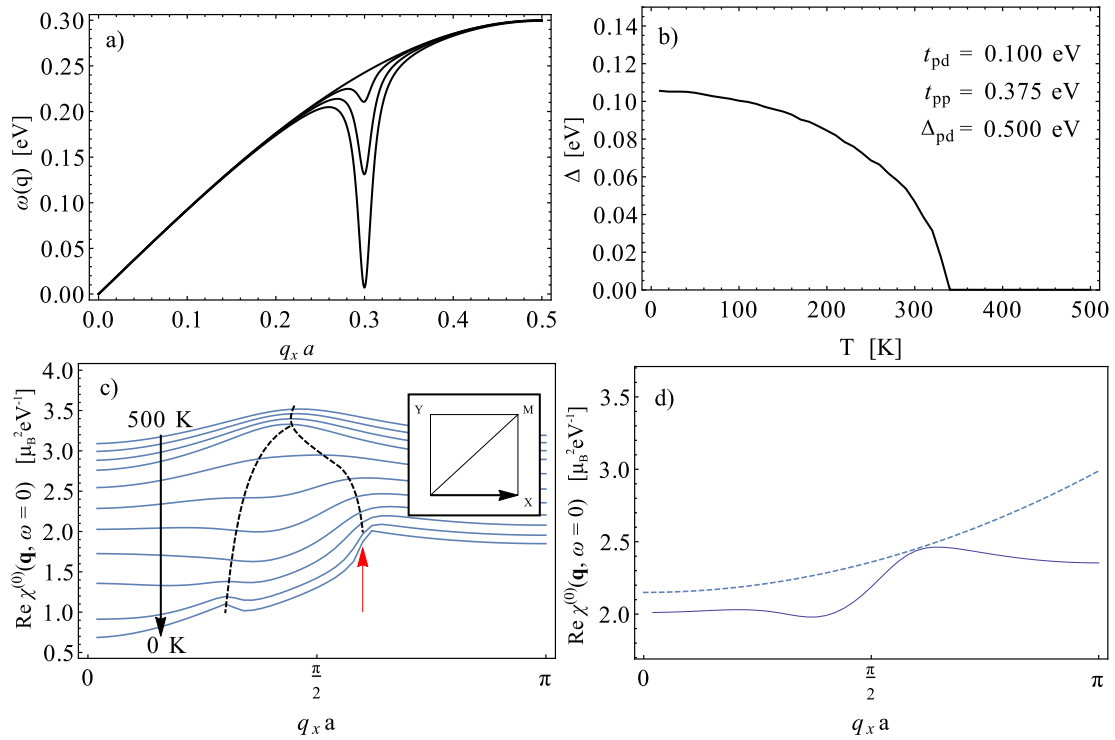
$$= g^2 \frac{V_0}{V} \sum_{LL' \mathbf{k}\sigma} \left| g_{\lambda}^{LL'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \right| \frac{f_{L'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - f_L(\mathbf{k})}{\hbar \omega + i\eta + E_{L'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_L(\mathbf{k})} \quad (3.33)$$

Ovaj minimalni model korektno opisuje tzv. mekšanje fonona snižavanjem temperature: susceptibilnost je na dovoljno visokim temperaturama monotono padajuća funkcija temperature pa snižavanjem temperature njen iznos raste. Tako za određenu vrijednost konstante vezanja postoji konačna temperatura na kojoj je na određenom valnom vektoru zadovoljena relacija

$$\omega^2 = \left( \omega_{\lambda}^{(0)}(\mathbf{q}) \right)^2 - g^2 V_0 \chi_{\lambda\lambda}(\mathbf{q}, \omega) = 0, \quad (3.34)$$

tj. frekvencija tog kolektivnog moda je pala na nulu. Materijal u kojem je moguće pronaći rješenje takvo da na  $T > 0$  vrijedi  $\omega(\mathbf{q}) = 0$  doživjet će fazni prijelaz u stanje vala gustoće naboja s valnom duljinom  $\lambda = \frac{2\pi}{\mathbf{q}}$ . Primjer takve temperaturne ovisnosti je prikazan na slici 3.34a: frekvencija moda oko jednog valnog vektora se spušta hlađenjem. Val gustoće naboja se

u, primjerice živinim i itrijevim kupratima, javlja ispod temperature pseudoprocjepa na kojoj se javlja lokalno magnetsko uređenje. Stoga je potrebno promotriti mogućnost stvaranja lokalnog, fluktuirajućeg vala gustoće naboja u sustavima u kojima već postoji, npr. AF procjep. Na slici 3.34b prikazujemo promjenu susceptibilnosti duž  $\Gamma$ –X linije prolaskom kroz  $T_{MF}$  za AF uređenje. U ovisnosti o parametrima sustava, veći maksimum može potjecati od unutarvrpčanog ugnježđenja male ili velike Fermijeve plohe. U svim eksperimentima koji su nam poznati, spomenutima u prošlom poglavlju, CDW signal nalazi na *višem* valnom vektoru nego za vrpcu bez procjepa. Stoga smo odabrali parametarski režim u kojima jači maksimum potječe od ugnježđenja velike plohe, tj. Fermijevog luka.



**Slika 3.34:** Model mekšanja fononskog moda na oko  $q_x = 0.3$  jedinice recipročne rešetke spuštanjem temperature: a) shematska disperzijska relacija fonona, redom na temperaturama od 350 do 150 K; b) temperaturna ovisnost AF procjepa koji će pomaknuti valni vektor ugnježđenja  $\mathbf{Q}_{CDW}$  na više vrijednosti ( $T_{CDW}$  je ovdje oko 320 K, maksimum procjepa 0.1 eV); c) CDW susceptibilnost u širokom temperaturnom rasponu za parametre i samosuglasno određeni procjep sa b); crtkana linija označava položaje maksimuma koji potječu od unutarvrpčanog ugnježđenja male i velike Fermijeve plohe, redom na manjim odnosno većim valnim vektorima; crvena strelica označava eksperimentalnu vrijednost  $\mathbf{Q}_{CDW}$  iz [27]; d)  $\mathbf{q}$ -ovisno elektron-fonon vezanje (crtkana linija) i CDW susceptibilnost na  $T_{CDW, MF}$  za iste parametre sa b).

Važna razlika u odnosu na Hubbardov model za magnetsko uređenje jest  $\mathbf{k}$ -ovisnost elektron-fonon vezanja. Budući da CDW valni vektor nije globalni maksimum (situacija ilustrirana na slici 3.34d) nabojne susceptibilnosti, elektron fonon vezanje morat će poprimiti oblika  $\frac{1}{\sqrt{c^2+q^2}}$  ili sličan (ovdje samo postuliramo plauzibilan oblik). Vezanje mora omogućiti (lokalno) uređenje na valnom vektoru korektnog iznosa, oko 0.2 – 0.3 jedinice recipročne rešetke. U aprok-

simaciji čvrste veze [39] elektron-fonon vezanje proporcionalno je  $\frac{1}{\sqrt{\omega_\lambda(\mathbf{q})}}$ , iz čega možemo zaključiti da se nužno radi o vezanju na optički fonon. Konstanta  $c^2$  tada odgovara frekvenciji tog fononskog moda u dugovalnoj aproksimaciji.

### 3.9 Usporedba s učincima supravodljivosti

Budući da koristimo konstantan procjep u vrpici, ovdje ćemo dati kratak prikaz oblika Fermijeve plohe i procjeka u supravodljivom stanju. U najjednostavnijem modelu (korištenom u npr. [14]), Greenova funkcija u BCS stanju se može zapisati kao:

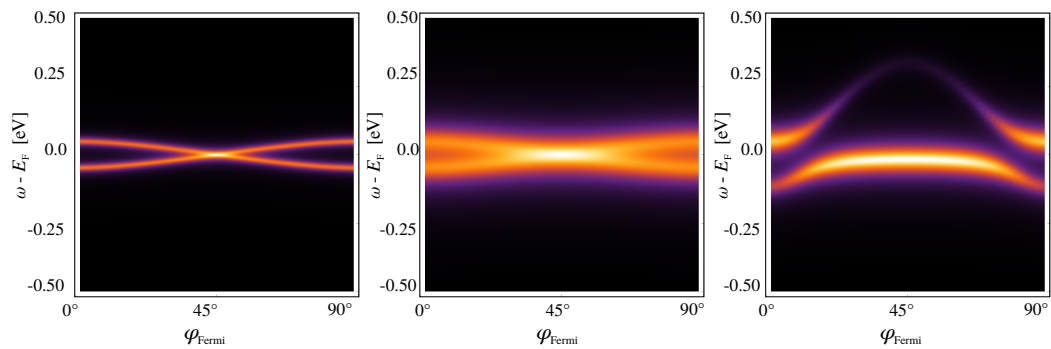
$$G_{SC}(\mathbf{k}, \omega)^{-1} = \hbar\omega - E(\mathbf{k}) + E_F + i\Gamma - \frac{\Delta^2(\mathbf{k})}{\hbar\omega + E(\mathbf{k}) - E_F + i\Gamma}, \quad (3.35)$$

gdje je  $\Delta(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\Delta_0(\cos(k_x a) - \cos(k_y a))$  supravodljivi procjep oblika  $d$ -vala. Radi usporedbe, u istoj aproksimaciji bi Greenova funkcija za AF uređenje bila

$$G_{AF}(\mathbf{k}, \omega)^{-1} = \hbar\omega - E(\mathbf{k}) + E_F + i\Gamma - \frac{\Delta_0^2}{\hbar\omega - E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_F + i\Gamma}. \quad (3.36)$$

U  $d$ -valnom supravodljivom stanju procjep iščezava isključivo na dijagonali IBZ pa je gušenje, odnosno širina spektralne linije, jedini parametar koji može zatvoriti procjep u dovoljno širokom intervalu valnih vektora oko dijagonale IBZ. To znači da bi se za postizanje realističnih širina spektralnih linija oko  $vH$  točke gušenje efektivno trebalo smanjivati približavanjem toj točki, suprotno eksperimentu. AF stanje ispravno narušava čestično-šupljinsku simetriju daleko od  $vH$  točaka, a može objasniti i prividnu čestično šupljinsku simetriju u samoj  $vH$  točki.  $vH$  točke su međusobno udaljene za točno  $\mathbf{Q}_{AF}$  pa se u njima uvijek AF procjep otvara simetrično.





**Slika 3.35:** EDC usporedba spektralne funkcije duž neinteragirajuće fermijeve plohe za LSCO parametризaciju: a) sa supravodljivim procjepom s malim gušenjem; b) sa supravodljivim procjepom s velikim gušenjem i c) konstantni AF procjep. U supravodljivom stanju je nužno uvesti veliko gušenje kako bi se dva spektralna maksimuma spojila u jedan u širem rasponu valnih vektora oko dijagonale IBZ (na slici 35 – 55°). AF koji se po definiciji ne otvara simetrično oko  $E_F$  već u stanjima udaljenim za  $\mathbf{Q}_{AF}$ , korektno otvara procjep blizu vH točaka i ostavlja dugačak Fermijev luk bez potrebe za nefizikalno velikim gušenjima.

# Poglavlje 4

## Rezultati

U ovom poglavlju opisujemo postupak prilagodbe parametara vrpce na nekoliko klasa kuprata te rezultirajući magnetski spektar za svaku od njih.

### 4.1 Prilagodba parametara vrpce na ARPES u kupratima

ARPES je među najzaslužnijim tehnikama za razvoj razumijevanja VTS. Njime se izravno mjeri koliko ima nosilaca naboja te kakva su im svojstva. Generički, u kupratima postoji samo jedan tip nosilaca (elektroni ili šupljine) čija Fermijeva ploha je šupljinska, sa središtem u  $M$  točki prve Brillouinove zone. Manji broj uzoraka LSCO-a je moguće dopirati preko  $vH$  dopiranja, tako da imaju elektronsku Fermijevu plohu. Potklasa cerijevih kuprata se dopira isključivo elektronski i jedina su proba elektronski dopiranog dijela faznog dijagrama. Zajednička svojstva mogu se sažeti kao:

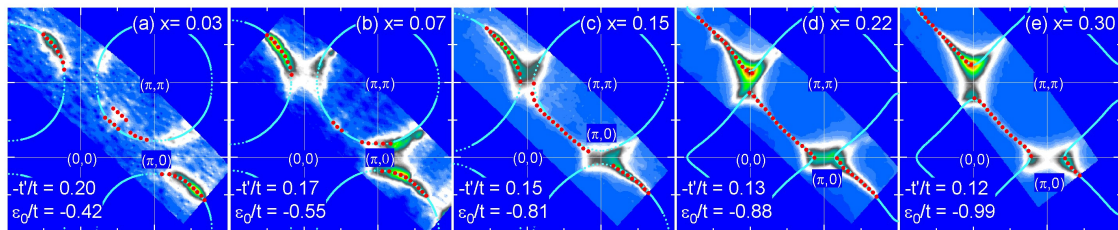
1. Fermijeva ploha izgleda kao zaobljeni kvadrat ili kružnica sa središtem u  $M$  točki
2. dio Fermijeve plohe nije vidljiv budući da je u pseudoprocjepu, a ta stanja su šira u  $k$  i  $\omega$ ; dio plohe oko dijagonale IBZ se često naziva Fermijevim lukom (engl. Fermi *arc*)
3. oblik, tj.  $k$ -ovisnost pseudoprocjepa, se mijenja s dopiranjem, temperaturom i klasom materijala
4. u SC fazi javlja se drugi procjep,  $d$ -valne simetrije smješten simetrično oko kemijskog potencijala

Ova tehnika daje temeljne informacije za model magnetskog odziva, budući da pruža uvid u oblik Fermijeve plohe, koncentraciju nosilaca te njihova vremena života. Gdje je god moguće, pokušali smo izvršiti prilagodbu eksperimentalne vrpce na vezujuću vrpcu Emeryjevog modela. Realna vrpca doživljava nekoliko prijeloma, odnosno naglih promjena nagiba udaljavanjem od kemijskog potencijala. Podrijetlo tih skala nije sasvim razjašnjeno, iako se neki od tih lomova pripisuju elektron-fonon međudjelovanju. Modeli vrpce koje koristimo ne sadržavaju takve učinke pa sve parametre prilagodbi smatramo efektivno renormaliziranim, s

vrijednostima kakve su iščitane iz eksperimentalnih rezultata. Kako bismo što točnije opisali niskoenergetske procese, sve parametre ugađamo tako da dio vrpce tik uz kemijski potencijal ima eksperimentalno korektan nagib, odnosno Fermijevu brzinu, što je potrebno za sve analize u kasnijim poglavljima.

#### 4.1.1 Lantanovi kuprati (LSCO, LBCO)

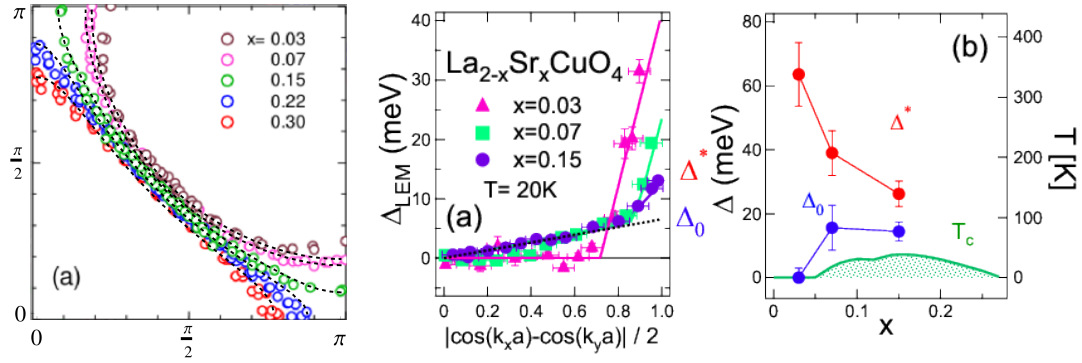
Fermijeva ploha LSCO i LBCO spojeva je vrlo slična: za niska šupljinska dopiranja je oblika kružnice oko M točke, za viša dopiranja, blizu vH točke je približno kvadrat zarotiran za  $45^\circ$  u odnosu na Cu-O veze, a za naddopirane uzorke je zatvorena, oblika kvadrata zaobljenih vrhova.



**Slika 4.1:** ARPES presjeci na Fermijevoj energiji za LSCO uzorke u širokom rasponu dopiranja [40]. Važno je primijetiti da se čak i u AF uzorcima s dopiranjem oko 1% primjećuje komad Fermijeve plohe. Duljina Fermijevog luka raste sa šupljinskim dopiranjem te oko vH dopiranja on seže u potpunosti do vH točke.

Za jako poddopirane lantanove kuprate ( $\delta < 3\%$  šupljina) nije moguće pronaći parametre koji u modelu s tri vrpce točno opisuju Fermijev luk i dio Fermijeve plohe uz rub zone istovremeno. Za to je potrebno koristiti model 4 vrpce [8] ili efektivni preskok na druge susjede, no budući da nas zanima samo faza pseudoprocjepa, zanemarit ćemo na tim dopiranjima dio vrpce oko ruba IBZ, budući da je na svim zanimljivim temperaturama u procjepu. Uzevši to u obzir, odredili smo parametre vrpce za nekoliko karakterističnih dopiranja za LSCO u modelu tri vrpce (slika 4.2 i tablica 4.1).

Opažene ovisnosti temperatura  $T^*$  i  $T_C$  o dopiranju su veoma različite (slika 4.2 b i c): supravodljiva kritična temperatura u poddopiranom području raste s dopiranjem, dok temperatura otvaranja pseudoprocjepa opada. Te ovisnosti o dopiranju prate i iznosi pripadajućih procjepa. Procjep također različito varira duž Fermijeve plohe u obje faze. U supravodljivom stanju, duž Fermijeve plohe opažen je  $d$ -valni supravodljivi procjep, dok za  $T > T_C$  konstantan procjep otvoren raspršenjem na  $\mathbf{Q}_{AF}$  izvrsno opisuje opaženu jaku  $\mathbf{k}$ -ovisnost procjepa. Realističnu vrijednost procjepa za umjereno poddopirani LSCO (oko 35 – 40 meV), koju ćemo koristiti za temperature  $T < T^*$ , čitamo sa slike 4.2.



**Slika 4.2:** Lijevo: Prilagodba ARPES maksimuma intenziteta na Fermijevoj energiji na model s tri vrpce. Na niskim dopiranjima prilagodbu vršimo samo na središnji dio Fermijeve plohe, budući da su njeni dijelovi na rubu BZ jako zamučeni i unutar procjepa. Točke predstavljaju maksimume MDC-ova iz [40], a parametri prilagodbe su dani u tablici 4.1. Sredina i desno: PG i SC procjepi u LSCO-u, prema [41].

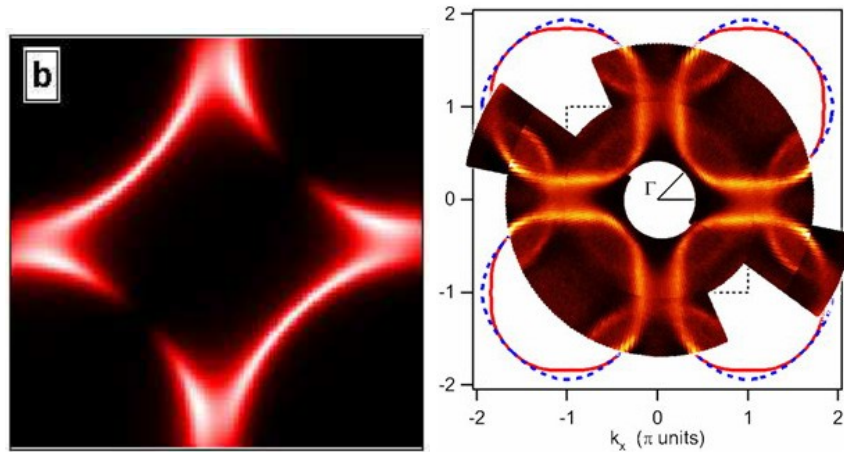
**Tablica 4.1:** Parametri modela s tri vrpce za lantanove kuprate na nekoliko karakterističnih dopiranja. Energije kisikovih orbitala su degenerirane ( $\Delta_{pp} = 0$ ).

dopiranje	$t_{pd}$ [eV]	$t_{pp}$ [eV]	$\Delta_{pd}$ [eV]	$E_F - E_{vH}$
3%	0.5	0.6	1.5	-0.146
7%	0.5	0.6	1.5	-0.117
15%	0.5	0.4	1.5	-0.016
22%	0.5	0.4	1.5	0.012
30%	0.5	0.4	1.5	0.047

#### 4.1.2 Bizmutovi kuprati

Najjednostavniji članovi porodice, BSCCO s jednom i dvije  $\text{CuO}_2$  ravnine, tzv. Bi2201 i Bi2212, imaju nešto veću zakrivljenost Fermijeve plohe nego lantanovi kuprati (slika 4.3) pa je potrebna veća vrijednost parametra  $t_{pp}$  koji uzrokuje zakrivljenost. Kompliciranije je opisati Bi2223, spoj s 2 neekvivalentne ravnine bakrenog oksida u kojemu stoga dvije vrpce sijeku Fermijev nivo. Na rubu IBZ Fermijeva ploha podsjeća na Q1D materijale, zbog izraženog ravnog dijela Fermijeve plohe. Ovakav oblik može pogodovati razvoju nekog uređenja sa, na primjer, valom gustoće naboja. Razmatranje višeravninskih spojeva ostavljamo za kasnija istraživanja.

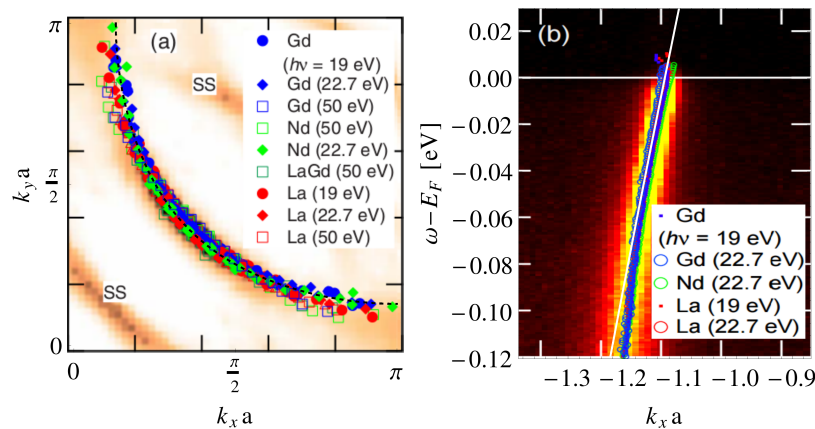
$\mathbf{k}$ -ovisnost PG i SC procjepa kvalitativno je slična onoj u LSCO-u, no supravodljivo područje je pomaknuto na niža dopiranja. Stoga za primjer računa na bizmutovim kupratima uzimamo umjereno dopirane materijale s parametrizacijom koja obuhvaća nekoliko materijala [42, 43] (slika 4.4).



**Slika 4.3:** Fermijeve plohe jednoravninskog [42, 43] i troravninskog [44] Bizmutovog kuprata. Jednoravninski ima Fermijevu plohu sličnu LSCO-u, troravninski YBCO-u, s dugim ravnim dijelovima uz rub IBZ, sličnim 1D CDW sustavima. Iščezavanje Fermijevog luka na lijevoj slici je posljedica matričnog elementa foton-elektron vezanja, a ne pojava procjepa.

**Tablica 4.2:** Parametri modela s tri vrpce za bizmutove kuprate u kojima jedna vrpca siječe kemijski potencijal.

materijal i dopiranje	$t_{pd}$ [eV]	$t_{pp}$ [eV]	$\Delta_{pd}$ [eV]	$E_F - E_{vH}$
Bi-2201 24%	0.375	0.75	0.75	-0.146



**Slika 4.4:** Prilagodbe modela tri vrpce za Bi2201 kuprat (parametri u tablici 4.2). Prilagodba je vršena, kao i za LSCO, na nagib blizu Fermijeve energije.

### 4.1.3 Itrijski kuprati (YBCO)

Itrijev barijev kuprat ima nešto složeniju strukturu, zbog koje postoje dvije neekvivalentne ravnine te 1D lanci bakrenog oksida. Fermijeve plohe svih tih objekata sijeku Fermijev nivo te su stoga vidljivi u ARPES spektrima. Složenu strukturu vrpce približno ćemo ovdje opisati jednom vrpcom koja siječe Fermijev nivo te je izrazito ravna uz rub BZ. Velike ravne dijelove Fermijeve plohe moguće je postići velikim efektivnim preskokom na bakrovu 4s orbitalu no takav model umanjuje efikasnost numeričkog izvednjavanja u kasnijim računima. U jednovr-

**Tablica 4.3:** Parametri modela s tri vrpce za Fermijev luk itrijevog kuprata s  $\mathbf{k}$ -ovisnim gušenjem te parametri modela s jednom vrpcom za prilagodbu cijele Fermijeve plohe sve do ruba IBZ.

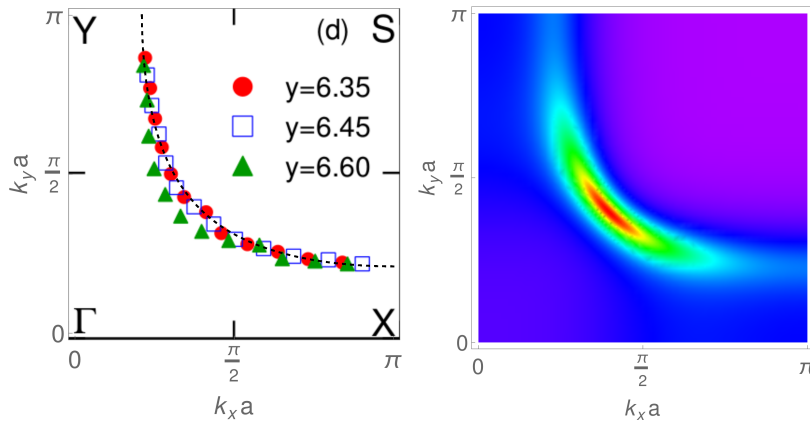
materijal i dopiranje	$t_{pd}$ [eV]	$t_{pp}$ [eV]	$\Delta_{pd}$ [eV]	$E_F - E_{vH}$
YBCO $\approx 10\%$	0.1	-0.75	0.75	-0.27
materijal i dopiranje	$t$ [eV]	$t'$ [eV]	$t''$ [eV]	$E_F - E_{vH}$
YBCO 15%	-0.2	-0.4	0.1	-0.165

pčanom, jednostavnijem modelu taj učinak modeliramo efektivnim preskokom na druge i treće susjede,  $t', t''$ .

U fazi pseudoprocjepa YBCO je dobar primjer materijala koji na svim dopiranjima ima izrazito kratak Fermijev luk. Za opis takvih Fermijevih ploha, a bez uvođenja procjepa, dovoljan je uobičajeni model s tri vrpce, no potrebno je uvrstiti  $\mathbf{k}$ -ovisne fenomenološke širine spektralnih linija. Primjer takve funkcije je

$$\Gamma_{\mathbf{k}} = \Gamma_0 + \Gamma_1 (\cos(k_x a) - \cos(k_y a))^2, \quad (4.1)$$

a karakteristične vrijednosti parametara su  $\Gamma_0 = 0.05$  eV i  $\Gamma_1 \sim 0.1$  eV.



**Slika 4.5:** Prilagodbe modela s jednom vrpcom i preskocima na druge i treće susjede (parametri u tablici 4.3). Lijevo: gola Fermijeva ploha, desno: intenzitet na Fermijevom nivou sličan eksperimentalnom je dobiven korištenjem  $\mathbf{k}$ -ovisnog gušenja koje je pojačano na rubu IBZ.

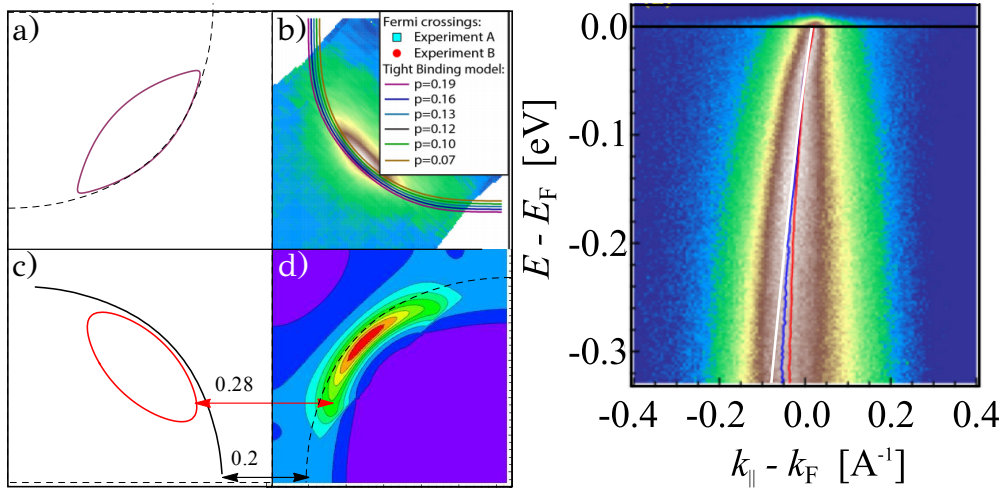
#### 4.1.4 Živin barijev kuprat, Hg1201

Živin kuprat formule  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$ , skraćeno Hg1201, ističe se u novije vrijeme [24, 27, 45] zbog velike čistoće uzoraka koje je moguće postići. To se očituje niskim rezidualnim otporom u transportnim mjerenjima, pravilnom kalanju kristala bitnom za ARPES mjerenja, ali i relativno čistim spektrima raspršenja neutrona i rendgenskih zraka.

**Tablica 4.4:** Parametri modela s tri vrpce za malo poddopirani Hg1201. Za ostala dopiranja, u nedostatku eksperimentalnih mjerenja, koristimo iste orbitalne parametre i pomičemo samo kemijski potencijal.

dopiranje	$t_{pd}$ [eV]	$t_{pp}$ [eV]	$\Delta_{pd}$ [eV]	$E_F - E_{vH}$
$\sim 10\%$	0.2	0.75	1.0	-0.171

U trenutku pisanja ovog rada dostupan je samo jedan skup mjerenja ARPES spektara, onaj blizu optimalnog dopiranja, u supravodljivom stanju. Pretpostavljamo da će evolucija Fermijeve plohe slijediti onu kod jednoravninskog BSCCO-a, budući da su im strukture i ARPES spektri u dostupnim fazama veoma slični. Parametri Fermijeve plohe su dani u tablici 4.4, a oblik i prilagodbe na nekoliko dopiranja su prikazane na slici 4.6, usporedno s eksperimentalnim slikama.



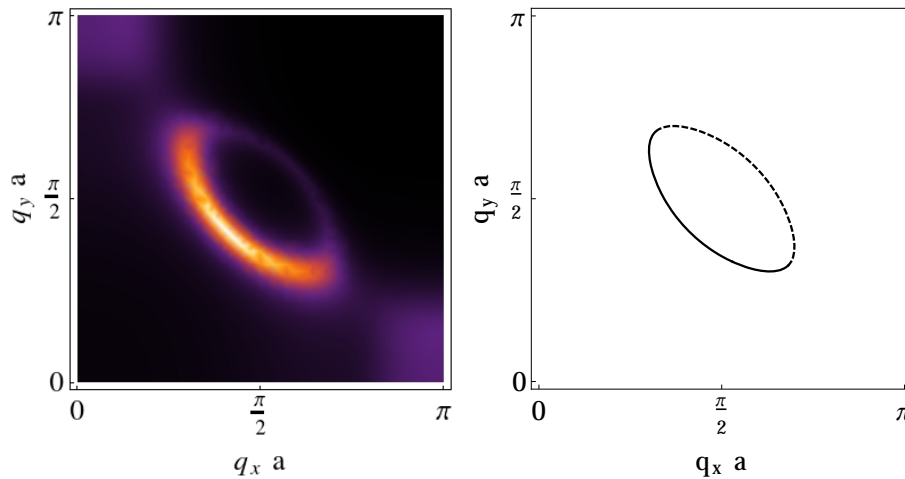
**Slika 4.6:** Lijevo: ARPES Fermijeve plohe Hg1201 blizu optimalnog dopiranja te nekoliko prikaza prilagodbi korištenih u ovom radu. a) Prilagodba s  $\mathbf{k}$ -ovisnim procjepom, većim oko  $vH$  točaka, daje premalu zakrivljenost lukova blizu *hotspotova*; b) eksperimentalna slika iz [45] s nekoliko prilagodbi za različita dopiranja iz originalnog članka, u kojima nije korišten procjep; c) prilagodba s konstantnim procjepom  $\Delta_0 = 0.035$  eV. d) obojeni prikaz intenziteta na Fermijevoj energiji za prilagodbe bez procjepa, ali s  $\mathbf{k}$ -ovisnim gušenjem - širine spektralnih linija su proporcionalne funkciji  $(\cos(k_x) - \cos(k_y))^n$ , gdje je  $n = 4$ . Ovaj član simulira procese gušenja koji su pojačani oko  $vH$  točaka zbog povećane gustoće stanja i dobro opisuje eksperimentalne rezultate. Desno: nagib eksperimentalne Fermijeve plohe iz [45] te naša prilagodba (bijela linija) na srednji nagib u blizini Fermijevog nivoa.

## 4.2 Magnetski spektar funkcije $\overline{\chi}^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)$ u kupratima

Ove rezultate ćemo samo prikazati za dva suprotstavljena režima: jedan s veoma kratkim Fermijevim lukom (Hg1201) te jedan sa skoro potpunim (LSCO). YBCO i jednoravninski BSCCO koji imaju slične Fermijeve plohe Hg1201 i LSCO-u će imati veoma slične spektre s minimalnim kvantitativnim razlikama.

### 4.2.1 Hg1201 - živin kuprat

Za ovaj materijal u trenutku pisanja ovog rada postoji samo jedan članak sa ARPES slikom Fermijeve plohe, koju smo u prošlom odlomku koristili za utvrđivanje parametarskih režima. Najmanji mogući procjep kojeg je moguće postići rješavajući samosuglasnu AF jednadžbu je 0.1 eV, što je za faktor 4 veće od potrebnoga za točan položaj maksimuma na  $\mathbf{Q}_{AF}$  u neutronsom raspršenju. Efektivno međudjelovanje iznosi  $U_{min} = 0.49$  eV. Fermijeva ploha za taj procjep, međutim, izgleda točno kao eksperimentalna (slika 4.7), uz  $\mathbf{k}$ -ovisno gušenje, pojačano oko vH točaka.

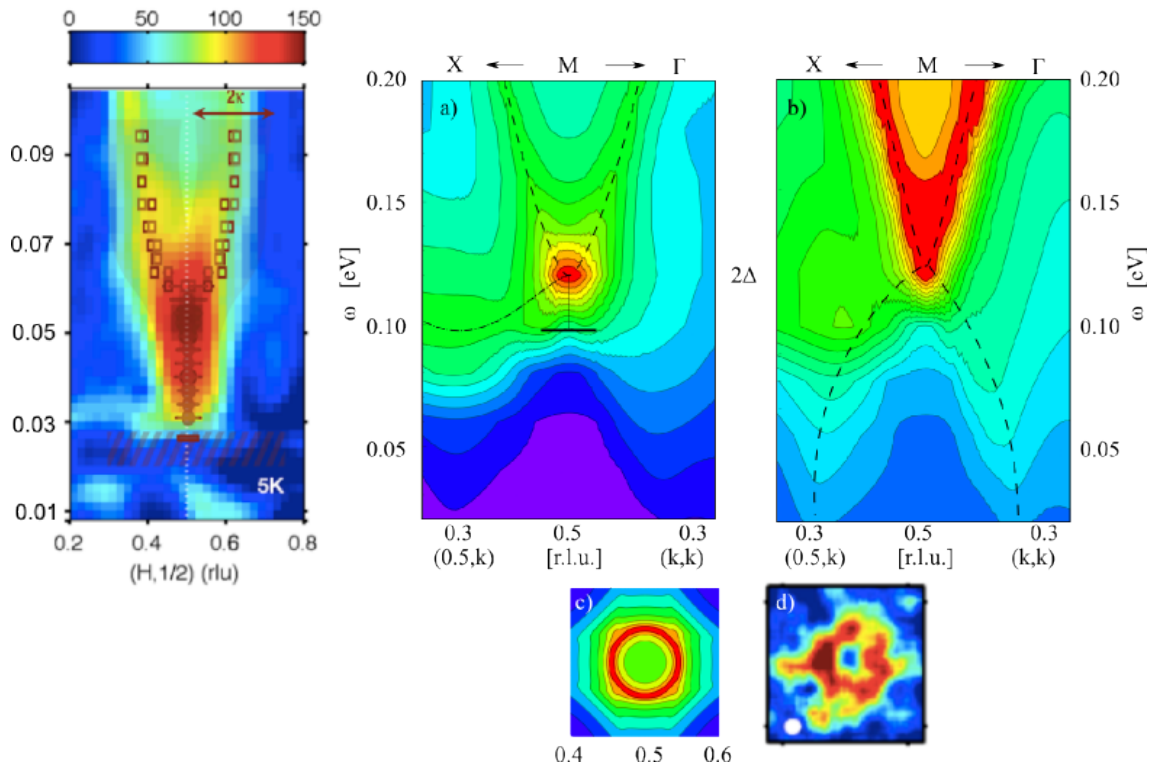


**Slika 4.7:** Fermijeva ploha za Hg1201 parametre i samosuglasno određen procjep od 0.1 eV. Korištena je fenomenološka  $\mathbf{k}$ -ovisna širina spektralne linije.

Magnetska  $ph$  pobuđenja na  $\mathbf{Q}_{AF}$  su najjača na  $\omega = 2\Delta$ , kako je opisano u prošlom poglavlju, budući da je sva spektralna težina ispod te frekvencije potisnuta procjepom. Disperzija pobuđenja, iščitana iz lokalnih maksimuma intenziteta, u potpunosti je u skladu s eksperimentalnim opažanjem: postoji samo gornja grana koja se akustički širi iz  $(\mathbf{q}, \omega) = (\mathbf{Q}_{AF}, 2\Delta)$ . Povećanje gušenja i/ili blaga ovisnost procjepa o valnom vektoru mogu dalje približiti ovu sliku eksperimentalnoj, budući da oba učinka šire globalni maksimum na  $2\Delta$  u frekvenciji.

Uključivanjem korelacija putem spektralnih težina  $z_k^\pm$  u spektru Hg1201 se javlja uzorak sličan disperziji pješčanog sata, u suprotnosti s eksperimentima. Ovo otvara mogućnost da je pseudoprocjepa u tom, inače vrlo uređenom materijalu, uzrokuje orbitalni nered izvan ravnine, a ne magnetske fluktuacije i jako kulonsko međudjelovanje u ravnini. Bez obzira na to porijeklo pseudoprocjepa, nakon njegovog otvaranja, položaj unutarvrpčanog ugnježđenja se pomiče s oko 0.2 na oko 0.3 jedinica recipročne rešetke (slika 3.34) što točno odgovara eksperimentalnom valnom vektoru [27].



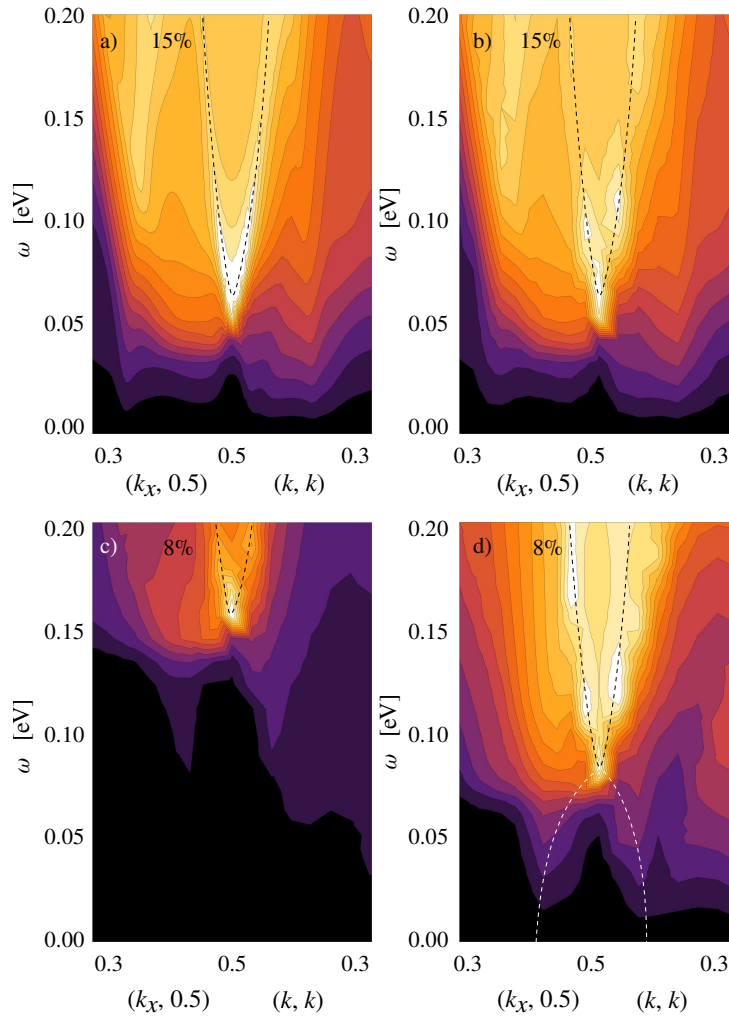


**Slika 4.8:** U živinom kupratu postoji samo gornja, visokoenergijska grana magnetskih pobuđenja (lijevo, slika preuzeta iz [24]). Budući da je Fermijev luk u Hg1201 kratak, nosioci manje vremena provode na bakrovoj  $3d$  orbitali, pa su učinci korelacija slabi. Dodavanje korelacija naglašava donju granu pobuđenja ispod  $2\Delta$ , suprotno eksperimentima (sredina i desno, objašnjenje na slici 3.33). Dolje: u našem računu, obje grane pobuđenja su izotropne u Brillouinovoj zoni, u skladu s eksperimentom iz reference [24].

## 4.2.2 Lantanovi kuprati

Lantanovi kuprati imaju nešto duže Fermijeve lukove koji sežu skoro do  $vH$  točkaka [40, 46] pa stanja na Fermijevom nivou duže vrijeme provode na bakrenim orbitalama. To povećava vjerojatnost nalaženja dviju šupljina na istom bakrovom atomu, pa stoga očekujemo veći utjecaj korelacija na cijelu vrpču. Na umjerenim dopiranjima nekomenzurabilni međuvrpčani maksimumi ispod  $2\Delta$  su vidljivi i bez korelacija, budući da su bliže  $\mathbf{Q}_{AF}$ , za razliku od Hg1201. Na dopiranjima koje bi odgovaralo skoro optimalnom i slabo predopiranom LSCO-u tim nekomenzurabilnim granama slabi intenzitet, zbog čega im se i usporava širenje s povećavanjem iznosa dopiranja. Podsjetimo, ovo je ponašanje točno opaženo u lantanatima: blizu optimalnog dopiranja linearna ovisnost nekomenzurabilnih signala o dopiranju saturira.

Dvije pojave koje nedostaju u niskofrekventnom dijelu spektra su statički maksimumi  $\text{Im } \chi$  na  $\omega = 0$  te povratak na komenzurabilno uređenje na polupopunjenju. Ove učinke nije moguće reproducirati u potpuno itinerantnom pristupu bez stvarnog SDW osnovnog stanja.



**Slika 4.9:** Imaginarni dio susceptibilnosti ispod  $T^*$  za LSCO. a) Dopiranje od 15%, s malim gušenjem s kojim je gornja grana prejaka u odnosu na pozadinu. b) Isto dopiranje, uz realistično gušenje koje smanjuje razliku između gornje i donje grane pobuđenja. Nekomenzurabilni vrhovi donje grane su slabi i daljnjim dopiranjem ne mijenjaju značajno intenzitet i lokaciju, u skladu sa saturacijom opaženom u stvarnom LSCO-u. c) Dopiranje oko 8% za veći procjep određen samosuglasno, kakav bi više odgovarao AF materijalu. d) Isto, za manji procjep, koji odgovara iznosu izmjenom ARPES-om.

### 4.3 Nabojna uređenja i veza sa spinskim

U prošlom poglavlju smo pokazali kako otvaranje procjepa uvijek pomiče CDW valni vektor ka višim vrijednostima. To je univerzalno svojstvo vrpce, budući da se otvaranjem procjepa točke s tangencijalnim ugnježđenjem pomiču dalje od vH točke. Eksperimentalni odnos  $q_{CDW} = 2\delta_{IC}$  nije moguće iščitati s Fermijeve plohe iz ARPES mjerenja, a metalni model predviđa smanjenje  $q_{CDW}$  porastom šupljinskog dopiranja, što dovodi u pitanje kako bi trebalo iščitati vektore ugnježđenja iz APRES mjerenja za LSCO. Odnos iznosa procjepa, zakrivljenosti Fermijeve plohe i širine spektralnih linija komplicira istovremenu interpretaciju oblika Fermijeve plohe i rezultirajućeg neutronskeg spektra. Za BSCCO, u kojem se CDW javlja odmah ispod  $T^*$ , a  $q_{CDW}$  se smanjuje šupljinskim dopiranjem, CDW vjerojatno nastaje ugnježđenjem rubnih dijelova Fermijeve plohe, slično kao što je na slici 3.34 prikazano za Hg1201.

# Poglavlje 5

## Zaključak i rasprava rezultata

Predstavljamo rezultate i opravdanja pretpostavki, krenuvši od najviših temperaturama prema  $T = 0$ . Fermion-bozon međudjelovanje u normalnom stanju otvara pseudoprocjep kojeg u upečatljivo korektnoj aproksimaciji možemo zamijeniti pravim procjepom s konačnom širinom spektralne linije. Ovaj korak olakšava račun susceptibilnosti ispod temperature  $T^*$ , koju ovdje poistovjećujemo s  $T_{MF}$  AF prijelaza. Ispod te temperature promatramo susceptibilnost fermionskog sustava s beskonačnom resumacijom, karakterističnom za prave fazne prijelaze, te bez nje.

### 5.1 Normalno stanje

Temeljna eksperimentalna opažanja u normalnom stanju kuprata, važna za ovaj doktorat su u mnogome međusobno pomirena jedinstvenim pristupom u kojem su bakrovi i kisikovi stupnjevi slobode tretirani ravnopravno. Transport potječe dominantno od metalnih šupljina na kisikovim atomima, čime favorizirani smjer vodljivosti postaje upravo smjer kisikove podrešetke.

U takvom metalnom normalnom stanju, na temperaturama iznad  $T^*$ , jake korelacije uvodimo kao posljedicu jakog kulonskog odbijanja, u najnižem redu teorije koja konzistentno poštuje lokalne zakone očuvanja u svakom redu. Te korelacije su efektivno slabe u odnosu na osnovno kulonsko međudjelovanje i mogu se svesti na lokalni statički član  $U_{d\mu} \ll U_d$ . Pretpostavljamo da zadržavanje tog člana najnižeg reda, unatoč narušavanju baždarne invarijantnosti, neće u bitnome kvariti kvalitativne zaključke. Teorija na koju se rad oslanja [29] korektno predviđa pojavu nekoherentnih doprinosa dalje od Fermijevog nivoa i koherentnu vrpcu smanjene spektralne težine na Fermijevom nivou. Ovime je opravdano zadržati metalno stanje kao početno.

Fermijeva ploha ima  $d_4$  simetriju i ispravnu zakrivljenost uz kemijski i spektroskopski korektne vrijednosti parametara korištenih u aproksimaciji čvrste veze. Ti parametri, iščitani iz eksperimentalnih rezultata, u ovoj efektivnoj teoriji se smatraju renormaliziranim jakim me-

đudjelovanjem na bakrovim orbitalama. Pokazali smo kako, za eksperimentalno dostupna dopiranja, metalna faza predviđa mogućnost komenzurabilnog ili nekomenzurabilnog uređenja, u ovisnosti o veoma složenom odnosu mikroskopskih parametara. Korelacije popravljaju ovaj rezultat te je predviđanje Emeryjevog modela s  $U_d \rightarrow \infty$  komenzurabilno AF stanje, bez iznimke za sve parametrizacije poddopiranih kuprata, u slaganju s rezultatima neutronske raspršenja te ARPES-a ispod pseudoprocjepa, gdje je također očuvana  $d_4$  simetrija.

Magnetska pobuđenja AF tipa su odsutna u normalnom stanju, budući da jednadžba za kolektivne modove nema rješenja, pa pojavu komenzurabilnih pobuđenja pripisujemo statičkim spinovima na bakrovim orbitalama. Oni odgovaraju lokaliziranom i nekoherentnom dijelu nosilaca kojeg u ovom radu ostavljamo po strani budući da se nalazi nekoliko eV daleko od Fermijevega nivoa. Također, predviđamo veći značaj tog lokaliziranog doprinosa jako blizu AF faze, za koju taj doprinos predviđaju i  $t - J$  modeli. Pseudoprocjep na  $T^*$  otvaramo međudjelovanjem šupljina s bozonima tog lokaliziranog podsustava, čija disperzija je slična onoj osnovnog nedopiranog AF kuprata.

## 5.2 Otvaranje pseudoprocjepa

Recentni eksperimenti pokazuju da nered izvan  $\text{CuO}_2$  ravnina pogoduje fazi s pseudoprocjepom a narušava supravodljivu fazu [36]. Pseudoprocjep stoga možda otvaraju procesi koji nemaju porijeklo u toj ravnini. Ovdje smo pretpostavili da ga otvara raspršenje na spomenutom magnetskom modu, vođeni plauzibilnim argumentom i simetrijom rešetke. Takvo raspršenje korektno otvara procjep na dijelovima Fermijeve plohe udaljenima za otprilike  $\mathbf{Q}_{\text{AF}}$ , blizu vH točaka. Identificirali smo parametarski režim koji korektno opisuje otvaranje pseudoprocjepa te procese raspršenja čiji intenzitet raste s temperaturom. Linearna ovisnost gušenja o temperaturi u vlastitoj energiji elektrona porijeklom od raspršenja na magnonima se pokazala dovoljnom za konzistentnost s eksperimentima.

Za opis niskotemperaturne faze, dinamička slika je zamijenjena statičkom radi jednostavnosti numeričkog računa. Pokazali smo da postoji izrazito dobro slaganje obje slike uz povećanje širina fermionskih spektralnih linija te iznosa pseudoprocjepa na oko  $\sim 0.1$  eV, kao u ARPES eksperimentima. Statičku sliku je stoga potrebno shvatiti kao efektivnu, koja simulira oba učinika opažena u dinamičkoj slici i eksperimentima: pojavu procjepa i širenje spektralnih linija viđene. U suprotnom, ovaj uobičajeni pristup srednjeg polja u statičkoj slici [9, 10] kviri ovako izgrađenu konzistentnu sliku. Niskotemperaturne spektre, ispod  $T_{\text{MF}}$  se u takvim pristupima traži u nekom obliku resumirane susceptibilnosti u spinskim i nabojnim kanalima (potpuni izrazi su dani u dodacima):

$$\chi = \frac{\chi^{(0)}}{1 - U_{\text{eff}}\chi^{(0)}}. \quad (5.1)$$

Teorijske i eksperimentalne nekonzistentnosti resumiranog pristupa su:

- Faznog prijelaza s dugodosežnim redom na  $T^*$  nema. Resumacija susceptibilnosti i potraga za kolektivnim magnetskim pobuđenjima kao polovima interagirajuće susceptibilnosti predstavlja naivnu interpretaciju niskotemperaturne faze kao prave termodinamičke faze.
- Bez obzira na promatrani kanal (spinski, nabojni), spektar pobuđenja je daleko od eksperimentalnog - resumacija generira uske kolektivne akustičke polove ispod procjepa koji potječu od vH točkaka. Ovakva pobuđenja bi doduše bila karakteristična za bakrove nosioce kojih ima povećan udio u vH dijelu BZ, no ispod  $T^*$  oni bi trebali imati konačan procjep na  $\mathbf{Q}_{AF}$ . Druga, optička grana pobuđenja je nekorektno plitke disperzije i preširoka da bi bila pridruživa eksperimentalnoj.
- Samosuglasna jednadžba predviđa previsoku vrijednost za procjep, sada interpretiran kao nekoherentno lokalno uređenje. Faktor korekcije je oko 0.25, tj. procjep je 4 puta veći od eksperimentalnog (faktor 0.25 potreban je u literaturi i za korekciju spektralne težine i u drugim opservablama).

Odustajanje od resumirane susceptibilnost pažnju usmjerava na najniži red resumacije, susceptibilnost  $\bar{\chi}^{(0)}$  koja u sebi sadrži ranije otvoreni procjep. Na temperaturama blizu 0, ona ima mnoga dobra svojstva. Postoji procjep na frekvencijama  $0 < \omega < 2\Delta_{PG}$  na valnom vektoru  $\mathbf{Q}_{AF}$ , koji odgovara suženom dijelu disperzije pješčanog sata. Za živin kuprat model korektno predviđa odsustvo donje granice magnonske disperzije. Iznad procjepa, za sve oblike Fermijeve plohe postoji izotropna grana međuvrpčanih pobuđenja koja je još jedno eksperimentalno univerzalno svojstvo kuprata. Na frekvencijama iznad 0.1 eV ta grana je vjerojatno u većoj mjeri pomiješana s lokaliziranim modovima koji i u AF stanju [9] potječu od međuvrpčanih procesa. Niskoenergijski, slabo nekomenzurabilni maksimum iz neutronske raspršenja na Hg1201 objasnili smo kao produžetak međuvrpčane grane ispod  $2\Delta$  kojem se ispod procjepa jako smanjio intenzitet. Uvođenje učinaka jakih korelacija pojačava magnetski odziv oko  $\mathbf{Q}_{AF}$  te naglašava niskoenergijske grane. To su točno grane magnetskog spektra "pješčanog sata" koje imaju disperziju prema dolje.

Vrpca s procjepom omogućuje skraćivanje Fermijevog luka s temperaturom i dopiranjem te otvara mogućnost otvaranja SDW ili CDW uređenja na nekomenzurabilnim valnim vektorima. Procjep je nužan kako bi ugnježđenje pri rubu IBZ dalo korektan iznos  $\mathbf{Q}_{CDW}$ , veći nego za vrpca bez procjepa.

Utjecaj jakih korelacija na magnetski odziv mora biti to jači, što je veći udio bakrovih stanja na Fermijevoj energiji, kao npr. u lantanovim i bizmutovim kupratima, gdje luk Fermijeve plohe seže sve do ruba BZ koji je jače populiran bakrovim stanjima. Uključivanje jakih korelacija za te materijale je stoga opravdano, a vodi korektno i na pojavu niskoenergijske disperzije "pješčanog sata". U niskoenergijskom dijelu spektra nedostaju tri bitna fenomena:

- Donja grana, pojačana uvođenjem  $z_k$  faktora, je također izotropna i nema maksimume za diskretne vrijednosti orijentirane u smjeru bakrove ili kisikove rešetke. Naš pristup je ograničen na temperature malo ispod  $T^*$  pa ne sadrži pruge niti SDW/CDW. Takva uređenja, uspostavljena oko  $T = 0$  će favorizirati neki od smjerova uvjetovanih simetrijom rešetke, što se očituje diskretnim maksimumima oko  $\mathbf{Q}_{AF}$ .
- na  $\omega = 0$  izostaje porast i maksimum intenziteta u  $\text{Im } \chi$ , viđen u nekim eksperimentima. Budući da je taj porast opažen isključivo ispod temperature supravodljivog prijelaza  $T_C$ , pretpostavljamo da će dodavanje supravodljivosti na stanje s pseudoprocjepom razriješiti ovaj nedostatak.
- U nekim kupratima ostaje neobjašnjen iznimno velik iznos magnetske susceptibilnosti na komenzurabilnoj rezonanciji.

### 5.3 Nabojno uređenje u fazi s pseudoprocjepom

U jednoravninskom BSCCO-u (Bi2201) temperatura pojave nabojnog uređenja je tek nešto niža od  $T^*$ , dok je pravi SDW prisutan na 5 – 10 K, tj. znatno niže. Stoga postoji mogućnost da je u tom materijalu za otvaranje pseudoprocjepa odgovorno upravo CDW ugnježđenje s malim valnim vektorom duž  $\Gamma$ –X linije. Činjenica da u Bi2201 nisu opažene dvije frekvencije kvantnih oscilacija opravdava ovu pretpostavku, budući da nisu potrebne dvije Fermijeve plohe. No, s obzirom da je valni vektor tog uređenja veći nego što bismo očekivali iz ugnježđenja rubnih dijelova Fermijeve plohe, smatramo ovaj scenarij malo vjerojatnim. Budući da se u ovom radu opisani AF pseudoprocjep otvara na  $T^*$  te, kao i svaki parametar uređenja, najbrže raste blizu temperature prijelaza, za očekivati je da će već malo ispod  $T^*$  ugnježđenje za CDW biti pomaknuto dovoljno za opažanje korektnog iznosa  $\mathbf{q}_{CDW}$ .

U LSCO-u i LBCO-u  $T_{CO}$  ima suprotan trend s dopiranjem te prati temperaturnu ovisnost kolinearnog SDW uređenja, čime se otvara pitanje sprege za dva uređenja. Iako je poznata invarijanta Ginzburg-Landauove teorije koja može objasniti vezu 2 vala gustoće spina s 1 valom gustoće naboja, za sada nije pronađeno mikroskopsko opravdanje takve veze. Naime, na Fermijevoj plohi iz ARPES mjerenja nije moguće identificirati iste valne vektore koji bi doveli do ugnježđenja i nekomenzurabilnog SDW-a kakav je opažen u raspršenju neutrona.

Na niskim dopiranjima ( $< 10\%$ ) ne vrijedi veza  $\mathbf{q}_{CDW} = 2\delta_{IC}$  te ne postoji CDW ekvivalent dijagonalno nekomenzurabilnoj SDW fazi. Budući da opravdanje za takve pojave ne možemo naći u itinerantnom modelu, pretpostavljamo da je nužno uvesti statičke nabojno-spinske pruge u osnovno stanje prilikom računa.

## 5.4 Zaključak i perspektive

Prvi važan rezultat jest da jake korelacije omogućuju komenzurabilan odgovor unutar cijelog raspona parametrizacija Emeryjevog modela, za razliku od neinteragirajućih modela. Ovaj rezultat objašnjava i oblik mjerenih Fermijevih ploha ispod  $T^*$ , koje uvijek imaju  $d4$  simetriju, a procjep se javlja isključivo blizu  $vH$  točaka. Odziv blizu optimalnog dopiranja je ispravnog iznosa u ovom metalnom modelu, dok značajnije odstupa u slabo dopiranom dijelu faznog dijagrama u kojem dominiraju lokalizirana stanja.

Drugo važno opažanje jest dramatično odstupanje resmirane susceptibilnosti od eksperimentalno mjerene. Takva resumacija ima smisla za ekstremno poddopirane uzorke, koji doista doživljavaju AF fazni prijelaz, i u kojima je udio lokaliziranih nosilaca dominantan, što je režim suprotan našem. Nulti red takve resumacije uključuje samo učinke procjeka i korektno reproducira spektre živinog kuprata, a uz uvedene korelacije i lantanovih kuprata, isključivo od itinerantnih nosilaca. Važno je naglasiti kako zaključci i opažanja u modelu s procjepom ne ovise o njegovom porijeklu, pa očekujemo da će opstati i nakon otkrića njegovog stvarnog porijekla. Lokalizirani dio spektra je vjerojatno odgovoran za otvaranje procjeka, izravno (magnetskim korelacijama) ili neizravno (osjetljivošću na nered izvan vodljivih ravnina), dok itinerantni nosioci propagacijom u sustavu s procjepom obogaćuju niskoenergijski dio spektra.

Tokom izrade i pisanja ovog rada pojavilo se mnogo novih smjerova za daljnja istraživanja. Neka od neriješenih pitanja su tehničke prirode, a neka su fundamentalna i dio su najvažnijih neriješenih problema u kupratnim supravodičima.

- Svi naboji u  $\text{CuO}_2$  ravnini dio vremena provode lokalizirani na nekoj od orbitala. Pokazali smo kratkom simetrijskom analizom kako spektar pobuđenja takvih lokaliziranih spinova može biti bogatiji od jednostavnog jednovrpnog AF. Podrobnijom analizom bilo bi potrebno utvrditi u kojoj mjeri takav model može objasniti pojavu nekoliko grana magnetskih pobuđenja različitih intenziteta. Prema našim opažanjima, očekujemo da spinovi na bakrovim orbitalama stvaraju granu najviših energija i najveće spektralne snage oko  $Q_{AF}$ , dok se na nižim energijama ta pobuđenja miješaju što otvara procjep na  $Q_{AF}$ .
- Miješanje s kisikovim granama koje potječu od delokaliziranih nosilaca obogaćuje strukturu niskofrekventnog dijela spektra. Ti itinerantni nosioci moraju imati neki oblik procjeka u vrpci kako bi na  $Q_{AF}$  unutarvrpnici procesi bili zamijenjeni međuvrpnim s konačnim pragom  $2\Delta$ .
- Pseudoprocjep bi prema nekim novim istraživanjima mogao biti uzrokovan neredom i korelacijama izvan ravnine [36]. Ukoliko taj procjep doista nije intrinzično svojstvo  $\text{CuO}_2$  ravnine, potrebno je odrediti kakav točno utjecaj ima orbitalni nered izvan ravnine. Usprkos tome, naši kvalitativni zaključci ostaju valjani jer se oslanjaju na postojanje procjeka, a ne nužno i na njegovo porijeklo.

- Ovdje smo pokazali da se, otvaranjem pseudoprocjepa na niskim temperaturama može očekivati mnoštvo magnetskih i nabojnih uređenja na različitim valnim vektorima koja su u energijskoj kompeticiji. Njihovu termodinamičku stabilnost preostaje ispitati u modelu koji eksplicitno sadrži takva uređenja u osnovnom stanju.



# Dodatak A

## Model s jednom vrpcom

Hamiltonijan takve rešetke bez kulonskog i drugih međudjelovanja dan je vlastitim Hamiltonijanom jedne orbitale na nekom čvoru  $H^{(0)}(\mathbf{r}_n)$  te potencijalom ostalih atoma u rešetci  $V^{(1)}$ . Taj potencijal možemo smatrati malom smetnjom koja mijenja vlastitu energiju orbitale te uzrokuje preskoke na susjedne čvorove, budući da je njegovim uvođenjem neko stanje na  $n$ -tom čvoru prestalo biti svojstveno ukupnom Hamiltonijanu. Hamiltonijan orbitala i preskoka glase u direktnom prostoru:

$$H^{(0)} = \sum_n E_0 c_{n\sigma}^\dagger c_{n\sigma} \quad (\text{A.1})$$

$$H^{(1)} = \sum_{\langle nm \rangle} t_{nm} c_{n\sigma}^\dagger c_{m\sigma} + h.c. \quad (\text{A.2})$$

Fizikalnog smisla ima uzeti u obzir preskoke na prve ( $\mathbf{r}_m = \mathbf{r}_n$ ) i druge susjede ( $\mathbf{r}_m = \mathbf{r}_n \pm a\hat{x}$  ili  $\mathbf{r}_m = \mathbf{r}_n \pm a\hat{y}$ ) koje ćemo označiti redom s  $t$  i  $t'$ . Vlastitu energiju  $E_0 + E_1$  ćemo uzeti kao ishodište osi energije. Ovaj Hamiltonijan se lako riješi u  $\mathbf{k}$ -prostoru; Fourier-transformirani operatori stvaranja i poništenja fermiona su:

$$c_{n\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \quad (\text{A.3})$$

$$c_{n\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n} c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (\text{A.4})$$

Uz sumu koja se svodi na delta funkciju

$$\sum_n e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_n} = N\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \quad (\text{A.5})$$

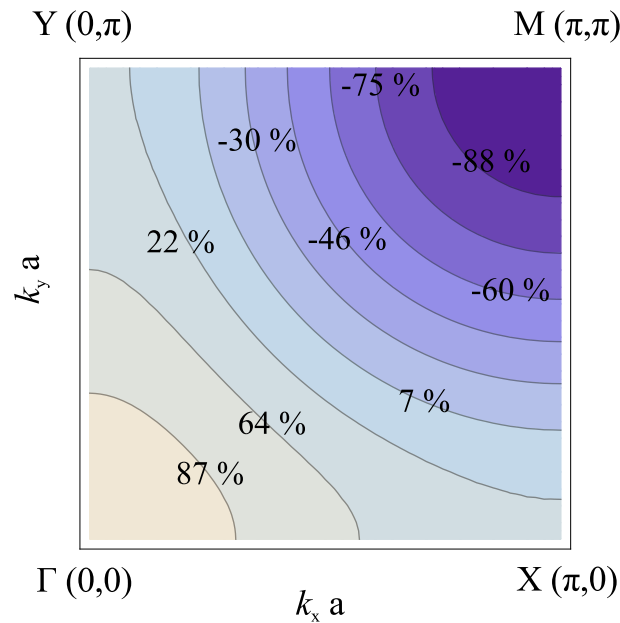
Hamiltonijan poprima dijagonalan oblik iz kojeg lako očitamo disperzijsku relaciju Blochovih

valova:

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} E(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \quad (\text{A.6})$$

$$E(\mathbf{k}) = -2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - 4t' \cos(k_x a) \cos(k_y a). \quad (\text{A.7})$$

Prvi član (prvi susjedi) je čestično-šupljinski simetričan (dispersijska relacija je parna funkcija oko gore definiranog ishodišta), dok drugi lomi tu simetriju vrpce, što je nužno za realističan oblik Fermijeve plohe. Na slici A.1 su prikazani oblici Fermijevih ploha za jednu umjerenu parametrizaciju koja bi odgovarala, primjerice LSCO-u.



**Slika A.1:** Fermijeve plohe za različita dopiranja

Teorija s međudjelovanjima bit će izgrađena od neinteragirajućih ("golih") propagatora koji glase za  $T = 0$  formalizam osnovnog stanja:

$$G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\theta(E_{\mathbf{k}} - E_F)}{\omega - E_{\mathbf{k}} + i\eta} + \frac{\theta(E_F - E_{\mathbf{k}})}{\omega - E_{\mathbf{k}} - i\eta} \quad (\text{A.8})$$

te konačnotemperaturni (Matsubarin) propagator:

$$\mathcal{G}^{(0)}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\hbar\omega_n - (E_{\mathbf{k}} - \mu)} \quad (\text{A.9})$$

# Dodatak B

## AF uređenje u aproksimaciji srednjeg polja

Hubbardov jednovrščani model često je korišten za opis faznog prijelaza uzrokovanog jakim lokalnim međudjelovanjem, najčešće odbojnim kulonskim. Primjer jednog takvog računa je [9] kojeg ćemo ovdje usporediti s našim modelom. Glavna razlika, zbog koje se mnogi kvalitativni i kvantitativni rezultati u ovom radu razlikuju od onih u citiranim člancima, jest pojava čestično-šupljinske asimetrije u vrpci. Efektivni preskok na druge susjede  $t'$  je dosta značajnog iznosa, budući da je njegov relativni učinak na  $ph$  asimetriju pojačan čak i za male vrijednosti  $\frac{t'}{t}$ . Druga razlika dolazi do izražaja prelaskom na viševrščane modele, gdje uvodimo jake korelacije prema referencama [29, 35].

Početni Hamiltonijan sastoji se od kinetičke energije pokretnih nosilaca te odbojnog Hubbardovog člana

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_n \hat{n}_{n\uparrow} \hat{n}_{n\downarrow}. \quad (\text{B.1})$$

Prelaskom u  $\mathbf{k}$ -prostor, drugi član prelazi u

$$\frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}, \quad (\text{B.2})$$

tj. uzrokuje izmjenu spina, valnog vektora i energije među elektronima. Znajući da se najjače raspršenje događa blizu valnog vektora  $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_{\text{AF}} = (\pi, \pi)$ , možemo zadržati samo taj doprinos u Hamiltonijanu te ga upotrebom Wickovog teorema prevesti u efektivni Hamiltonijan s 2 stanja

$$H = \sum_{l'l'\mathbf{k}\sigma} H^{ll'} c_{l\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{l'\mathbf{k}\sigma}. \quad (\text{B.3})$$

Stanje  $l = +$  odgovara nesmetanom elektronu s disperzijskom relacijom  $E_{\mathbf{k}}$ , a  $l = -$  stanju sa suprotne strane Fermijeve plohe, udaljenom za  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_{\text{AF}}$ . Nediagonalni elementi koji

raspršuju ta dva stanja proporcionalni su  $U$ , tako da u aproksimaciji srednjeg polja glase:

$$H^{+-} = -\Delta\sigma = -\frac{U\sigma_0}{2N}\sigma, \quad (\text{B.4})$$

gdje je  $\sigma_0 = \langle \sigma_z \rangle$  očekivana vrijednost magnetizacije po čvoru kristalne rešetke u uređenoj fazi, a  $\sigma = \pm 1$   $z$ -projekcija spina elektrona.

Hamiltonijan se dijagonalizira  $2 \times 2$  unitarnom transformacijom [9, 47] čime nastaju dvije vrpce s disperzijskim relacijama

$$E_{P/M}(\mathbf{k}) = \frac{E_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2}\right)^2 + \Delta^2}. \quad (\text{B.5})$$

Sa  $L$  ovdje označvamo indeks dviju AF vrpce  $L = P, M$  prema predznaku ispred korijena, a transformacija koja dijagonalizira sustav je definirana matricno:

$$c_{L\mathbf{k}\sigma} = \sum_{l=\pm} U_{lL}(\mathbf{k}, \sigma) c_{l\mathbf{k}\sigma} \quad (\text{B.6})$$

$$U_{lL}(\mathbf{k}, \sigma) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi_{\mathbf{k}}}{2} & -\sigma \sin \frac{\varphi_{\mathbf{k}}}{2} \\ \sigma \sin \frac{\varphi_{\mathbf{k}}}{2} & \cos \frac{\varphi_{\mathbf{k}}}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{B.7})$$

Pomoćna faza je koristan i kompaktan zapis, posebno važan za magnetske vertekse, koji bi se za  $t' < 0$  znatno komplicirali u standardnoj notaciji.

$$\varphi_{\mathbf{k}} = \frac{2\Delta}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - E_{\mathbf{k}}}. \quad (\text{B.8})$$

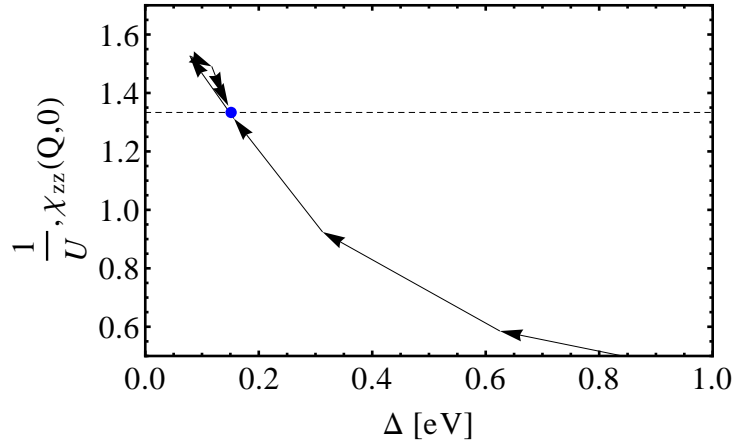
Uvjet samosuglasnosti srednjeg polja (magnetizacija na čvoru) svodi se na određivanje vrijednosti procjepa za koju je susceptibilnost  $\chi_{zz}(\mathbf{Q}_{AF}, \omega = 0)$  jednaka  $1/U$ , a taj uvjet glasi:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}}' \frac{f_M(\mathbf{k}) - f_P(\mathbf{k})}{E_P(\mathbf{k}) - E_M(\mathbf{k})}, \quad (\text{B.9})$$

pri čemu sumacija ide po reduciranoj BZ, a parametar  $\Delta$  u disperzijskim relacijama je nepoznat i potrebno ga je odrediti numerički. Samosuglasnost se postiže iterativnom procedurom: početni korak je račun desne strane jednadžbe za zanemarivo malenu te iznimno veliku vrijednost procjepa  $\Delta$ . Time dobivamo dvije granične vrijednosti  $\Delta_{min}$  i  $\Delta_{max}$  procjepa a iteracije se vrše sužavanjem tog intervala (slika B.1). Desna strana jednadžbe samosuglasnosti je monotono padajuća funkcija procjepa  $\Delta$ . Ukoliko je na njenoj sredini ( $\frac{\Delta_{min} + \Delta_{max}}{2}$ ) vrijednost desne strane jednadžbe samosuglasnosti veća od  $1/U$ , tada ta vrijednost postaje  $\Delta_{max}$  pa se rješenje traži u intervalu procjepa na manjim vrijednostima. U suprotnom, ta vrijednost postaje novi  $\Delta_{min}$  te se

u idućoj iteraciji ispituje interval na većim vrijednostima procjepa. Opisani postupak konvergira u 10 – 40 iteracija s velikom točnošću. Za  $t' < 0$  potrebno je u svakoj iteraciji promijeniti kemijski potencijal kako bi efektivno dopiranje vrpce (broj čestica), bilo očuvano. Postupak je također iterativan i potpuno istovjetan već opisanome, uz jednadžbu:

$$n = \frac{1}{N} \sum_{Lk\sigma} f(E_L(\mathbf{k})) \quad (\text{B.10})$$



**Slika B.1:** Samosuglasno rješavanje jednadžbe za procjep  $\Delta$ . Lijeva strana jednadžbe je konstanta  $\frac{1}{U}$ , označena crtkanom horizontalnom linijom. Desna strana je monotono padajuća funkcija procjepa, a smjer iteracija je označen strelicama. Korišteni su parametri za LSCO te  $U = 0.75$  eV, a dopiranje je u svakoj iteraciji samosuglasno održano na 10%. Točna vrijednost označena je plavim krugom i iznosi  $\Delta = 0.151$  eV.

U tako određenom uređenom stanju najzanimljivije su renormalizirane susceptibilnosti, koje ovdje navodimo u notaciji kompaktnijoj za  $t' < 0$  [47].

$$\bar{\chi}_{zz}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\bar{\chi}_{zz}^0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - U\bar{\chi}_{zz}^0(\mathbf{q}, \omega)} \quad (\text{B.11})$$

$$\begin{aligned} \bar{\chi}_{+-}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \omega) = & \frac{\bar{\chi}_{+-}^0(\mathbf{q}, \omega) [1 - U\bar{\chi}_{+-}^0(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, \omega)] + U\bar{\chi}_{+-}^Q(\mathbf{q}, \omega)^2}{[1 - U\bar{\chi}_{+-}^0(\mathbf{q}, \omega)] [1 - U\bar{\chi}_{+-}^0(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, \omega)] - U^2\bar{\chi}_{+-}^Q(\mathbf{q}, \omega)^2} \delta(\mathbf{q}, \mathbf{q}') + \\ & + \frac{\bar{\chi}_{+-}^Q(\mathbf{q}, \omega)}{[1 - U\bar{\chi}_{+-}^0(\mathbf{q}, \omega)] [1 - U\bar{\chi}_{+-}^0(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, \omega)] - U^2\bar{\chi}_{+-}^Q(\mathbf{q}, \omega)^2} \delta(\mathbf{q}, \mathbf{q}' \pm \mathbf{Q}), \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

a ireducibilne susceptibilnosti sastoje se od po 2 unutarvrpčana i 2 međuvrpčana doprinosa.  $\bar{\chi}^0(\mathbf{q})$  i  $\bar{\chi}^0(\mathbf{q} + \mathbf{Q})$  su susceptibilnosti u kojima je ukupna količina gibanja 0, a u  $\bar{\chi}^Q$  ona iznosi  $Q$  te je konačna samo na  $\omega > 0$ :

$$\bar{\chi}_{zz}^0(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{LL'\mathbf{k}} \left| m_{\uparrow\uparrow}^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \right|^2 \chi_{LL',\text{int}}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \quad (\text{B.13})$$

$$\bar{\chi}_{+-}^0(\mathbf{q}, \mathbf{q}, \omega) = \sum_{LL'\mathbf{k}} \left| m_{\uparrow\downarrow}^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \right|^2 \chi_{LL',\text{int}}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \quad (\text{B.14})$$

$$\bar{\chi}_{+-}^0(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, \mathbf{q} + \mathbf{Q}, \omega) = \sum_{LL'\mathbf{k}} \left| m_{\uparrow\downarrow}^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{Q}) \right|^2 \chi_{LL',\text{int}}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \quad (\text{B.15})$$

$$\bar{\chi}_{+-}^Q(\mathbf{q}, \mathbf{q}, \omega) = \sum_{LL'\mathbf{k}} m_{\uparrow\downarrow}^{LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) m_{\uparrow\downarrow}^{*LL'}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{Q}) \chi_{LL',\text{int}}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) \quad (\text{B.16})$$

$$\chi_{LL',\text{int}}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = \frac{f_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - f_L(\mathbf{k})}{\hbar\omega + i\eta + E_{L'}(\mathbf{k}) - E_L(\mathbf{k} + \mathbf{q})}, \quad (\text{B.17})$$

gdje je  $\chi_{LL',\text{int}}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q})$  pokrata za integracijsku jezgru, a magnetski verteksi su kompaktno definirani ranije uvedenom pomoćnom fazom  $\varphi_{\mathbf{k}}$  koja dijagonalizira Hamiltonijan:

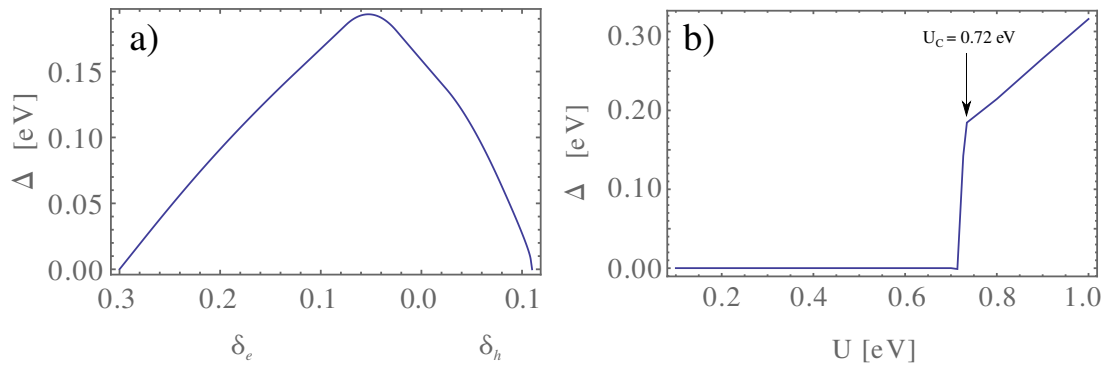
$$m_{\uparrow\uparrow}^{LL}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = \cos^2\left(\frac{\varphi_{\mathbf{k}} - \varphi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2}\right) \quad (\text{B.18})$$

$$m_{\uparrow\uparrow}^{LL}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = \sin^2\left(\frac{\varphi_{\mathbf{k}} - \varphi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2}\right) \quad (\text{B.19})$$

$$m_{\uparrow\downarrow}^{LL}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = \cos^2\left(\frac{\varphi_{\mathbf{k}} + \varphi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2}\right) \quad (\text{B.20})$$

$$m_{\uparrow\downarrow}^{LL}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = \sin^2\left(\frac{\varphi_{\mathbf{k}} + \varphi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2}\right) \quad (\text{B.21})$$

Slika B.2 prikazuje ovisnost procjepa o dopiranju. Tako dobivena AF faza je asimetrična oko polupopunjenja, baš kao u eksperimentima, što znači da je  $t' < 0$  dovoljan za taj učinak. Raspršenja i korelacije umjesto dugodosežnog AF uspostavljaju PG fazu u poddopiranim kupratima.  $t' < 0$  također uvodi minimalnu jakost međudjelovanja za koju je fazni prijelaz moguć. Za 10% šupljinskog dopiranja ta vrijednost je oko 0.72 eV.



**Slika B.2:** a) Samosuglasno određeni procjep u ovisnosti o popunjenju vrpce koji dobro slijedi eksperimentalni fazni dijagram AF i PG faza. Korišten je model s 1 vrpcom i  $U = 0.72$  eV. b) Fiksiranje međudjelovanja  $U$  na minimalnu vrijednost za postizanje neiščezavajućeg procjepa.

# Dodatak C

## Disperzijske relacije Emeryjevog modela

Neinteragirajući efektivni Hamiltonijan u aproksimaciji čvrste veze sastoji se od lokaliziranih orbitala (bakrova  $3d_{x^2-y^2}$ , koju ćemo označavati kratko  $d$  te kisikove  $2p_{x/y}$  orbitale) te preskoka na prve susjede:

$$H = H^{(0)} + H^{(1)} \quad (\text{C.1})$$

$$H^{(0)} = \sum_{nl\sigma} E_l c_{nl\sigma}^\dagger c_{nl\sigma} \quad (\text{C.2})$$

$$H^{(1)} = \sum_{l'l'} \sum_{\langle nm \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} t_{nm}^{l'l'} c_{nl\sigma}^\dagger c_{ml'\sigma'} \quad (\text{C.3})$$

Na sličan način u Fourierove transformate, potrebne u rješavanju Schrödingerove jednadžbe u ovom sustavu, ulaze sume po orbitalama  $l'$ , te se javlja pripadni indeks vrpce  $L = 1, 2, 3$ . Tako rješenje u  $\mathbf{k}$ -prostoru tražimo kao linearnu kombinaciju orbitala:

$$c_{L\mathbf{k}\sigma}^\dagger = \sum_{l\mathbf{k}} U_{lL}(\mathbf{k}) c_{l\mathbf{k}\sigma} \quad (\text{C.4})$$

gdje je  $U_{lL}$  element unitarne matrice koja dijagonalizira Hamiltonijan. Dijagonalizirani oblik je

$$H = \sum_{L\mathbf{k}\sigma} E_L(\mathbf{k}) c_{L\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{L\mathbf{k}\sigma}, \quad (\text{C.5})$$

gdje su vrpce dane Cardanovom formulom za korijene kubne jednadžbe:

$$E_L(\mathbf{k}) = -2r(\mathbf{k}) \cos\left(\frac{\varphi(\mathbf{k})}{3} - \frac{2L\pi}{3}\right) + \frac{2}{3}\Delta_{pd} \quad (\text{C.6})$$

$$\varphi(\mathbf{k}) = \arccos\left(\frac{q(\mathbf{k})}{r(\mathbf{k})^3}\right), \quad (\text{C.7})$$

$$r(\mathbf{k}) = \sqrt{-p(\mathbf{k})}, \quad (\text{C.8})$$

$$3p(\mathbf{k}) = \frac{3ac(\mathbf{k}) - b(\mathbf{k})^2}{3a^2}, \quad (\text{C.9})$$

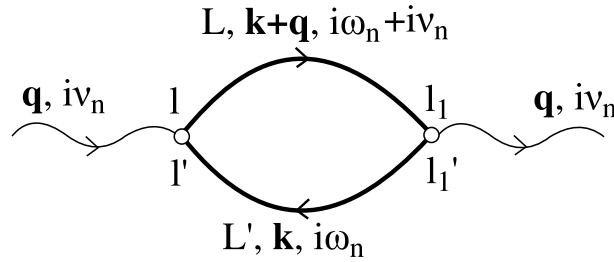
$$2q(\mathbf{k}) = \frac{2b(\mathbf{k})^3}{27a^3} - \frac{b(\mathbf{k})c(\mathbf{k})}{3a^2} + \frac{d(\mathbf{k})}{a}, \quad (\text{C.10})$$

a funkcije  $p, q$  i  $r$  su izvedene iz koeficijenata  $a, b, c, d$  kubne jednadžbe. Indeksi vrpci su  $A$  (antibonding, razvezujuća),  $N$  (nonbonding, nevezujuća) te  $B$  (bonding, vezujuća) koja jedina siječe kemijski potencijal u kupratima.

## C.1 Susceptibilnosti u trovrpčanom modelu

Vanjska proba može se vezati na lokalnu gustoću naboja, struje ili spina, pa će odziv biti proporcionalan odgovarajućoj korelacijskoj funkciji tj. susceptibilnosti. Generalizirana nabojna susceptibilnost, prikazana dijagramatski kao elementarni Feynmanov dijagram s jednom petljom na slici C.1, glasi

$$\chi_{a,b;c,d}^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{LL'} U_{aL}(\mathbf{k}) U_{bL'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) U_{cL'}^*(\mathbf{k} + \mathbf{q}) U_{dL}^*(\mathbf{k}) \frac{f_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - f_{L'}(\mathbf{k})}{\hbar\omega + i\eta - E_L(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + E_{L'}(\mathbf{k})}. \quad (\text{C.11})$$



**Slika C.1:** Dijagram elementarne susceptibilnosti u normalnom stanju: valovita linija predstavlja vanjsku probu, npr. foton, fonon ili magnon. Slova  $l, l'$  označavaju orbitale na koje se ona veže ( $x, y, d$ ).

Iako bi ovakva matrica trebala imati 81 različiti član, u stvarnosti simetrija kristalne rešetke i međudjelovanja dramatično reducira taj broj. Tako su najvažnije unutarčelijske susceptibilnosti odzivi na promjenu *razlike* energija orbitala, tj. one koje definiraju prelijevanje naboja i struja između pojedinih orbitala, što možemo zapisati kompaktnije kao npr.

$$\chi_{pd}^{(0)} = \chi_{pd;dp}^{(0)}, \quad \chi_{pp}^{(0)} = \chi_{xy;yx}^{(0)} \quad (\text{C.12})$$

te istoimene susceptibilnosti koji predstavljaju odziv na promjenu energije orbitale

$$\chi_{xx}^{(0)} = \chi_{xx;xx}^{(0)}, \quad (\text{C.13})$$

$$\chi_{yy}^{(0)} = \chi_{yy;yy}^{(0)}, \quad (\text{C.14})$$

$$\chi_{dd}^{(0)} = \chi_{dd;dd}^{(0)}. \quad (\text{C.15})$$



# Dodatak D

## Verteks $U_{d\mu}$

Uvođenjem međudjelovanja  $U_d$  u model  $\text{CuO}_2$  ravninu, Hamiltonijan dobiva novi član

$$H = \sum_L E_L(\mathbf{k}) + U_d \sum_n n_{d\uparrow}(\mathbf{r}_n) n_{d\downarrow}(\mathbf{r}_n), \quad (\text{D.1})$$

a time nestaje mogućnost analitičkog rješavanja problema. Hamiltonijan i proces njegovog rješavanja u metalnom režimu, opisan u referencama [29, 35], zapisani su u miješanoj reprezentaciji, budući da je vodeći proces raspršenja onaj u kojem dvije pokretne šupljine izbjegavaju istovremeno doći u isto orbitalu bakrovog atoma. U opisu procesa tog raspršenja dviju pokretnih šupljina, kisikove orbitale hibridiziramo samo međusobno, a lokalizirana stanja na bakrovim orbitalama rastavljaju se na dvije pomoćne čestice, fermion bez spina i bozon koji "prenosi" informaciju o spinu šupljine koja je ušla na bakrenu orbitalu. Time Hamiltonijan poprima oblik:

$$H_{0\lambda} = \sum_{l\mathbf{k}\sigma} E_p(l)(\mathbf{k}) p_{l\mathbf{k}\sigma}^\dagger p_{l\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} (E_d + \lambda) b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\sigma} + \lambda \sum_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} \quad (\text{D.2})$$

$$H_I = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l\mathbf{k}\mathbf{q}\sigma} T_{dl}(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{q}} p_{l\mathbf{k}\sigma} + h.c., \quad (\text{D.3})$$

gdje je  $T_{dl}(\mathbf{k})$  hibridizacijski član bakar-kisik u miješanoj  $\mathbf{r}, \mathbf{k}$  reprezentaciji. Budući da su propagatori fermiona  $B(\omega)$  i  $F(\omega)$  lokalizirani, nedisperzivni su i ne prenose količinu gibanja:

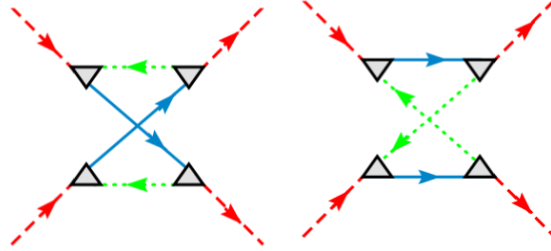
$$B_\lambda^{(0)}(\omega) = \frac{1}{\omega - E_d - \lambda + i\eta} \quad (\text{D.4})$$

$$F_\lambda^{(0)}(\omega) = \frac{1}{\omega - \lambda - i\eta}. \quad (\text{D.5})$$

$\lambda$  je pomoćni kemijski potencijal perturbacijske teorije o čijoj vrijednosti ne smiju ovisiti mjerljive fizikalne veličine. Jedan lokalni proces raspršenja dvije šupljine na jednom atomu bakra (slika D.1). Budući da su svi propagatori pomoćnih bozona i fermiona u najnižem redu nedisperzivni, u dijagramu se o prijenosu količine gibanja brine  $\delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3+\mathbf{q}_4}$ . Dijagram sadrži

jednu zatvorenu petlju, pa stoga postoji jedna interna frekvencija  $\Omega$ :

$$t_{pd}^4 \Lambda(\{\omega_i\}) = t_{pd}^4 \sum_{\Omega} \frac{1}{\omega_1 - \Omega - E_d - \lambda + i\eta} \frac{1}{\Omega - \lambda - i\eta} \frac{1}{\omega_2 - \Omega - E_d - \lambda' + i\eta} \frac{1}{\Omega - \lambda' - i\eta} \quad (\text{D.6})$$



**Slika D.1:** Dva doprinosa efektivnom međudjelovanju šupljina na jednoj bakrovoj orbitali, u formalizmu pomoćnih bozona i fermiona [29].

Preostaju integrali po frekvencijama koji su trivijalni nakon rastava na parcijalne razlomke, uz zakon očuvanja energije čestice koje ulaze u verteks ( $\omega_1 + \omega_2 = \omega_3 + \omega_4$ ):

$$t_{pd}^4 \Lambda(\{\omega_i\}) = t_{pd}^4 \sum_{\Omega} \frac{A}{\omega_1 - \Omega - E_d - \lambda + i\eta} + \frac{B}{\Omega - \lambda - i\eta} + \frac{C}{\omega_2 - \Omega - E_d - \lambda' + i\eta} + \frac{D}{\Omega - \lambda' - i\eta}$$

$$A = \frac{1}{(E_d - \omega_1)(E_d + \lambda - \lambda' - \omega_3)(\lambda - \lambda' + \omega_2 - \omega_3)}$$

$$B = -\frac{1}{(E_d - \omega_1)(\lambda - \lambda' + \omega_1 - \omega_3)(E_d - \lambda + \lambda' - \omega_1 - \omega_2 + \omega^3)}$$

$$C = -\frac{1}{(E_d - \omega_2)(\lambda - \lambda' + \omega_2 - \omega_3)(E_d - \lambda + \lambda' - \omega_1 - \omega_2 + \omega_3)}$$

$$D = \frac{1}{(E_d - \omega_2)(E_d + \lambda - \lambda' - \omega_3)(\lambda - \lambda_c + \omega_1 - \omega_3)}. \quad (\text{D.7})$$

U računu je pretpostavljeno da su kemijski potencijali  $\lambda$  međusobno različiti da bi se izbjegla moguća nefizikalna kraćenja te je na kraju uzeto  $\lambda = \lambda'$  čime konačni izrazi, korektno, ne ovise o pomoćnim parametrima. Suma reziduuma na kraju daje za realni dio verteksa iznos:

$$t_{pd}^4 \Lambda(\{\omega_s\}) = t_{pd}^4 \frac{2E - d - \omega_1 - \omega_2}{\prod_{s=1\dots 4} (E_d - \omega_s)} \quad (\text{D.8})$$

što se u slučaju malih odnaka kisikovih šupljina od kemijskog potencijala svodi na:

$$t_{pd}^4 \Lambda = \frac{2t_{pd}^4}{\Delta_{d\mu}^3} \quad (\text{D.9})$$

# Dodatak E

## *pdp* propagator

Budući da je u granici  $U_d \rightarrow \infty$  jedino međudjelovanje itinerantnih šupljina efektivno odbijanje kad se dvije šupljine pokušaju sresti na istom bakrovom čvoru rešetke, svaki unutarnji dijagram raspršenja mora započeti i završiti na bakrovoj orbitali. Stoga je hibridizaciju unutarnjih kiskovih linija potrebno vršiti s propagatorom  $G_p^{(0)}(\mathbf{k}, \omega)$  (dalje, skraćeno,  $G^{(0)}$ , u referenci [29] označenim s  $\Gamma^{(0)}$ ). On sadrži polove obiju kisikovih vrpce te projektore na bakrovu  $d$  orbitalu,  $T_{dL}(\mathbf{k})$ , označe trokutima na svim dijagramima. Sve do krajnjeg koraka ćemo ispustiti dimenzionalni faktor  $t_{pd}^{-2}$ . Ovaj propagator predstavlja jednočestičnu propagaciju šupljina, dok se sve dvočestične korelacije uvode verteksom  $\Lambda$ , tj. njegovom aproksimacijom  $U_{d\mu}$ , opisanom u dodatku D. Sa  $D(\mathbf{k}, \omega)$  označavamo propagator bakrovih šupljina.

$$D^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - E_d + i\eta} \quad (\text{E.1})$$

$$G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{l=\pm} \frac{|T_{dL}(\mathbf{k})|^2}{\omega - E_{p,L}(\mathbf{k}) \pm i\eta} \quad (\text{E.2})$$

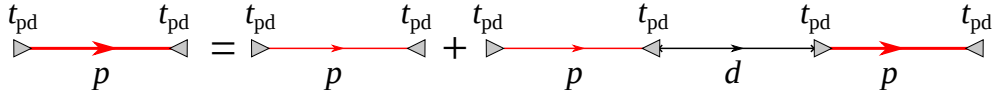
Jednočestična Dysonova jednadžba za  $G(\mathbf{k}, \omega)$ , prikazana na slici E.1, glasi:

$$G(\mathbf{k}, \omega)^{-1} = G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega)^{-1} - D^0(\mathbf{k}, \omega) \quad (\text{E.3})$$

$$= \left( \frac{|T_{d-}(\mathbf{k})|^2}{\omega - E_-(\mathbf{k})} + \frac{|T_{d+}(\mathbf{k})|^2}{\omega - E_+(\mathbf{k})} \right)^{-1} - \frac{1}{\omega - E_d} \quad (\text{E.4})$$

$$= \frac{(\omega - E_-(\mathbf{k}))(\omega - E_+(\mathbf{k}))}{|T_{d+}(\mathbf{k})|^2(\omega - E_-(\mathbf{k})) + |T_{d-}(\mathbf{k})|^2(\omega - E_+(\mathbf{k}))} - \frac{1}{\omega - E_d} \quad (\text{E.5})$$

Valja napomenuti kako ovi izrazi ne uključuju popravke višeg reda vlastitih energija pomoćnih čestica, koje opisuju korelacije na orbitalama bakrovih atoma. Ovakve popravke su analizirane u referenci [35], te je pokazano kako u nižem redu računa spektar oko  $E_F$  ostaje koherentan, iako smanjene spektralne težine. Zato je opravdano koristiti koherentne vrpce u računima koji uzimaju u obzir procese blizu  $E_F$ .



**Slika E.1:** *pdp* hibridizacija karakteristična za unutarnje dijagrame, koji ne sadrže vanjska polja već samo efektivno odbojno međudjelovanje šupljina na bakrovim atomima. Crvene linije s trokutima su kisikovi propagatori s projektorima na bakrove orbitale, crna linija je bakrov propagatodot u najnižoj aproksimaciji, a debele crvene linije su hibridizirani *pdp* propagatori, tj. rješenje Dysonove jednadžbe sa slike.

Reorganizacijom nazivnika točno se pojavi kubna jednadžba za dijagonalizaciju neinteragirajućeg Hamiltonijana (radi čistoće zapisa promatramo samo realni dio):

$$(\omega - E_d)(\omega - E_-(\mathbf{k}))(\omega - E_+(\mathbf{k})) - |T_{d+}(\mathbf{k})|^2(\omega - E_-(\mathbf{k})) - |T_{d-}(\mathbf{k})|^2(\omega - E_+(\mathbf{k})) \quad (\text{E.6})$$

pa rješenje za  $G(\mathbf{k}, \omega)$  ima egzaktne jednočestične polove koji odgovaraju disperzijama triju vrpce potpuno neinteragirajućeg Emeryjevog modela (ta rješenja su dana cardanovom formulom i popisana u dodatku C). Primijetimo da se u brojniku  $G$  propagatora nalazi se netrivialna spektralna težina:

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{(\omega - E_d)[|T_{d+}(\mathbf{k})|^2(\omega - E_-(\mathbf{k})) + |T_{d-}(\mathbf{k})|^2(\omega - E_+(\mathbf{k}))]}{(\omega - E_B(\mathbf{k}))(\omega - E_N(\mathbf{k}))(\omega - E_A(\mathbf{k}))} \quad (\text{E.7})$$

$$= \frac{(\omega - E_d)}{(\omega - E_B(\mathbf{k}))(\omega - E_N(\mathbf{k}))(\omega - E_A(\mathbf{k}))} \times \left[ |T_{d+}(\mathbf{k})|^2(\omega - E_-(\mathbf{k})) + |T_{d-}(\mathbf{k})|^2(\omega - E_+(\mathbf{k})) - (\omega - E_d)(\omega - E_-(\mathbf{k}))(\omega - E_+(\mathbf{k})) + (\omega - E_d)(\omega - E_-(\mathbf{k}))(\omega - E_+(\mathbf{k})) \right] \quad (\text{E.8})$$

$$= -(\omega - E_d) + \frac{(\omega - E_d)^2(\omega - E_-(\mathbf{k}))(\omega - E_+(\mathbf{k}))}{(\omega - E_B(\mathbf{k}))(\omega - E_N(\mathbf{k}))(\omega - E_A(\mathbf{k}))}. \quad (\text{E.9})$$

Uglata zagrada u drugom redu je proširena do potpunog polinoma za tri vrpce, čime propagator dobiva regularan dio  $(\omega - E_d)$  kojeg dalje zanemarujemo te singularni dio s tri pola. Reziduum propagatora za vezujuću vrpcu (jedinu koja siječe kemijski potencijal) glasi

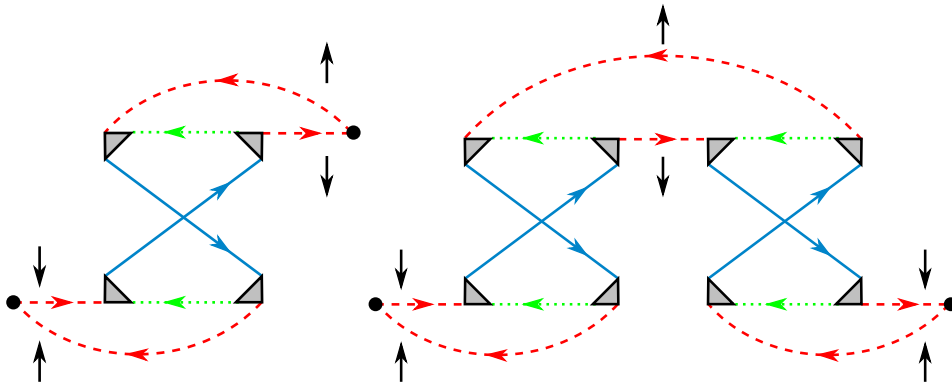
$$z_{\mathbf{k}B} = \left( \frac{E_B - E_d}{t_{pd}} \right)^2 \frac{E_-(\mathbf{k}) - E_B(\mathbf{k})}{E_N(\mathbf{k}) - E_B(\mathbf{k})} \frac{E_+(\mathbf{k}) - E_B(\mathbf{k})}{E_A(\mathbf{k}) - E_B(\mathbf{k})} = \left( \frac{E_B - E_d}{t_{pd}} \right)^2 n_d(\mathbf{k}), \quad (\text{E.10})$$

a skraćeno je u tekstu zovemo  $z_{\mathbf{k}}$ . Ekvivalentan postupak bi za propagator bakrovih šupljina dao težinu jednaku  $n_d(\mathbf{k})$  bez prefaktora, koja je točno  $\mathbf{k}$ -ovisna popunjenost bakrove orbitale.

# Dodatak F

## SDW ljestvični dijagram

Promotrimo prva dva reda u ljestvičnim (engl. *ladder*), dijagramu za magnetsku susceptibilnost (slika F.1). Ovdje "red" računa smetnje broji istoimene dolaske dviju šupljina na bakrovu orbitalu, tj. vertekse  $\Lambda$ .

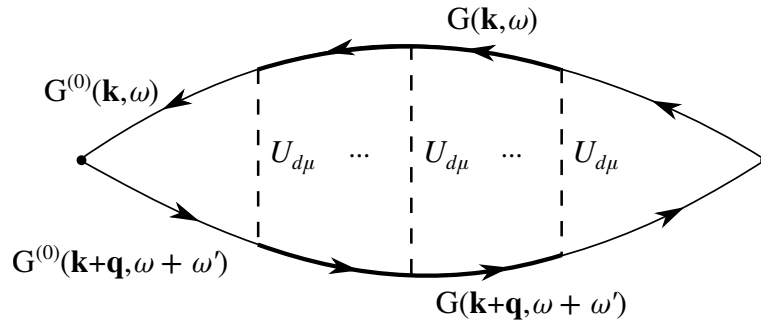


**Slika F.1:** Lijevo: dijagram 1. reda u efektivnom međudjelovanju  $U_{d\mu}$  za SDW susceptibilnost. Crveno: metalne šupljine na kisiku; plavo i zeleno: pomoćni bozoni i fermioni. Crni krug označava vezanje na vanjsko polje, a trokut  $T_{d1}(\mathbf{k})$  preskok na orbitalu bakra. Desno: Dijagram 2. reda u efektivnom međudjelovanju  $U_{d\mu}$  za SDW susceptibilnost.

Svako međudjelovanje  $\Lambda$  uvrštavamo kao efektivni statički i lokalni verteks  $U_{d\mu}$ . Time linije šupljina na kisikovim orbitalama postaju *pdp* propagatori koji na svojim krajevima skaču na orbitale bakra, a njihovi konvoluirani parovi prelaze u elementarne dijagrame  $\chi^{(1)}(\mathbf{q}, \omega)$ . Glavna razlika u odnosu na neinteragirajući RPA lanac, u kojem bi na njihovom mjestu bila susceptibilnost  $\chi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)$ , jest faktor pod  $\mathbf{k}$ -integralom koji potječe od spektralnih težina  $z_{\mathbf{k}}$ . Ovim postupkom je iz egzaktno nerješive teorije dobivena efektivna teorija čiji SDW dijagram računamo kao uobičajeni ljestvični dijagram sa slike F.2.

Tako dijagram sa slike prelazi u jednostavan produkt

$$\chi_{lp}^{(0)} U_{d\mu} \chi_{pp}^{(1)} U_{d\mu} \chi_{p'l'}^{(0)}, \quad (\text{F.1})$$



**Slika F.2:** Dijagram višeg reda u efektivnom međudjelovanju  $U_{d\mu}$ . Unutarnji propagatori, između 2 verteksa imaju efektivne spektralne težine  $z_{\mathbf{k}}$ , a vanjski projektore na orbitale  $l, l'$  s vanjske strane dijagrama, a  $T_{d\pm}(\mathbf{k})$  s unutraje.

a iteracijom unutarnjih dijagrama do beskonačnog reda taj se izraz može generalizirati. Oznaka  $l$  predstavlja orbitalu čiji magnetski odziv promatramo. Dodavanjem trivijalnog člana nultog reda,  $\chi_{ll'}^{(0)}$  i sumiranjem geometrijskog reda dobivamo konačan izraz za magnetsku susceptibilnost:

$$\chi_{SDW} = \chi_{ll'}^{(0)} + \chi_{lp}^{(0)} \frac{U_{d\mu}}{1 - U_{d\mu} \chi_{pp}^{(1)}} \chi_{p'l'}^{(0)}. \quad (\text{F.2})$$

Ova susceptibilnost se može računati za različite kombinacije orbitala  $l, l'$ . Najjednostavniji je račun za korelacijsku funkciju itinerantne komponente spinova na bakrovim orbitalama (lokalizirana komponenta je izražena pomoću propagatora pomoćnih bozona i fermiona i za sada je ostavljamo po strani). Projektori  $l$  i  $l'$  proporcionalni su  $T_{dl}(\mathbf{k})$ , čime u "vanjskim" susceptibilnostima  $\chi_{lp}^{(0)}$  ukupni prefaktor postaje isti kao i za  $\chi_{pp}^{(1)}$ .

# Literatura

- [1] Heike Kamerlingh Onnes. Further experiments with liquid helium. d. on the change of electric resistance of pure metals at very low temperatures etc. v. the disappearance of the resistance of mercury. *Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden*, Nov 1911.
- [2] J.G. Bednorz and K.A. Müller. Possible high  $T_C$  superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 64(2):189–193, 1986.
- [3] Rui-Hua He, M. Hashimoto, H. Karapetyan, J. D. Koralek, J. P. Hinton, J. P. Testaud, V. Nathan, Y. Yoshida, Hong Yao, K. Tanaka, W. Meevasana, R. G. Moore, D. H. Lu, S.-K. Mo, M. Ishikado, H. Eisaki, Z. Hussain, T. P. Devereaux, S. A. Kivelson, J. Orenstein, A. Kapitulnik, and Z.-X. Shen. From a single-band metal to a high-temperature superconductor via two thermal phase transitions. *Science*, 331(6024):1579–1583, 2011.
- [4] M. S. Grbić, M. Požek, D. Paar, V. Hinkov, M. Raichle, D. Haug, B. Keimer, N. Barišić, and A. Dulčić. Temperature range of superconducting fluctuations above  $T_C$  in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  single crystals. *Phys. Rev. B*, 83:144508, Apr 2011.
- [5] Sergey S. Pershoguba, Kostyantyn Kechedzhi, and Victor M. Yakovenko. Proposed chiral texture of the magnetic moments of unit-cell loop currents in the pseudogap phase of cuprate superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 111:047005, Jul 2013.
- [6] Sergey S. Pershoguba, Kostyantyn Kechedzhi, and Victor M. Yakovenko. Erratum: Proposed chiral texture of the magnetic moments of unit-cell loop currents in the pseudogap phase of cuprate superconductors [Phys. Rev. Lett. **111**, 047005 (2013)]. *Phys. Rev. Lett.*, 113:129901, Sep 2014.
- [7] Neven Barišić, Mun K. Chan, Yuan Li, Guichuan Yu, Xudong Zhao, Martin Dressel, Ana Smontara, and Martin Greven. Universal sheet resistance and revised phase diagram of the cuprate high-temperature superconductors. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 110(30):12235–12240, 2013.
- [8] E. Pavarini, I. Dasgupta, T. Saha-Dasgupta, O. Jepsen, and O. K. Andersen. Band-structure

- trend in hole-doped cuprates and correlation with  $t_{c\max}$ . *Phys. Rev. Lett.*, 87:047003, Jul 2001.
- [9] J. R. Schrieffer, X. G. Wen, and S. C. Zhang. Dynamic spin fluctuations and the bag mechanism of high- $T_c$  superconductivity. *Phys. Rev. B*, 39:11663–11679, Jun 1989.
- [10] Andrey V. Chubukov and David M. Frenkel. Renormalized perturbation theory of magnetic instabilities in the two-dimensional Hubbard model at small doping. *Phys. Rev. B*, 46:11884–11901, Nov 1992.
- [11] Qimiao Si, Yuyao Zha, K. Levin, and J. P. Lu. Comparison of spin dynamics in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  and  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ : Effects of fermi-surface geometry. *Phys. Rev. B*, 47:9055–9076, Apr 1993.
- [12] M. R. Norman. Magnetic collective mode dispersion in high-temperature superconductors. *Phys. Rev. B*, 63:092509, Feb 2001.
- [13] Henk Eskes and John H. Jefferson. Superexchange in the cuprates. *Phys. Rev. B*, 48:9788–9798, Oct 1993.
- [14] M. R. Norman, A. Kanigel, M. Randeria, U. Chatterjee, and J. C. Campuzano. Modeling the fermi arc in underdoped cuprates. *Phys. Rev. B*, 76:174501, Nov 2007.
- [15] Ying-Jer Kao, Qimiao Si, and K. Levin. Frequency evolution of neutron peaks below  $T_c$ : commensurate and incommensurate structure in  $\text{La}_{0.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$  and  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$ . *Phys. Rev. B*, 61:R11898–R11901, May 2000.
- [16] Yunkyung Bang. The two-component spin-fermion model for high- $T_c$  cuprates: its applications in neutron scattering and arpes experiments. *New Journal of Physics*, 14(4):043030, 2012.
- [17] D.K. Sunko. Destabilization of the zhang-riche singlet at optimal doping. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 109(4):652–658, 2009.
- [18] G. Nikšić, I. Kupčić, O. S. Barišić, D. K. Sunko, and S. Barišić. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 27(4):969–975, 2014.
- [19] David W. Lynch and Clifford G. Olson. *Photoemission studies of High-Temperature Superconductors*. Cambridge university Press, 1 edition, 1999.
- [20] Shin-ichiro Ideta, Teppei Yoshida, Atsushi Fujimori, Hiroaki Anzai, Taisuke Fujita, Akihiro Ino, Masashi Arita, Hirohumi Namatame, Masaki Taniguchi, Zhi-Xun Shen, Kenichi



- Takashima, Kenji Kojima, and Shin-ichi Uchida. Energy scale directly related to superconductivity in high- $T_c$  cuprates: Universality from the temperature-dependent angle-resolved photoemission of  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$ . *Phys. Rev. B*, 85:104515, Mar 2012.
- [21] Z. . Pan, P. Richard, A. V. Fedorov, T. Kondo, T. Takeuchi, S. L. Li, P. Dai, G. D. Gu, W. Ku, Z. Wang, and H. Ding. "universal quasiparticle decoherence in hole- and electron-doped high- $t_c$  cuprates". *eprint arXiv:cond-mat/0610442*, October 2006.
- [22] M. Matsuda, M. Fujita, K. Yamada, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, H. Hiraka, Y. Endoh, S. Wakimoto, and G. Shirane. Static and dynamic spin correlations in the spin-glass phase of slightly doped  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . *Phys. Rev. B*, 62:9148–9154, Oct 2000.
- [23] S. R. Dunsiger, Y. Zhao, B. D. Gaulin, Y. Qiu, P. Bourges, Y. Sidis, J. R. D. Copley, A. Kallin, E. M. Mazurek, and H. A. Dabkowska. Diagonal and collinear incommensurate spin structures in underdoped  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ . *Phys. Rev. B*, 78:092507, Sep 2008.
- [24] M. K. Chan, C. J. Dorow, L. Mangin-Thro, Y. Tang, Y. Ge, M. J. Veit, X. Zhao, A. D. Christianson, J. T. Park, Y. Sidis, P. Steffens, D. L. Abernathy, P. Bourges, and M. Greven, 2014. arXiv:1402.4517.
- [25] SM Hayden, HA Mook, Pengcheng Dai, TG Perring, and F Doğan. The structure of the high-energy spin excitations in a high-transition-temperature superconductor. *Nature*, 429(6991):531–534, 2004.
- [26] T. P. Croft, C. Lester, M. S. Senn, A. Bombardi, and S. M. Hayden. Charge density wave fluctuations in  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  and their competition with superconductivity. *Phys. Rev. B*, 89:224513, Jun 2014.
- [27] W. Tabis, Y. Li, M. Le Tacon, L Braicovich, A. Kreyssig, M. Minola, G. Dellea, E. Weschke, M. J. Veit, M. Ramazanoglu, A. I. Goldman, T. Schmitt, G. Ghiringhelli, N. Barišić, M. K. Chan, C. J. Dorow, G. Yu, X. Zhao, B. Keimer, and M. Greven, 2014. arXiv:1402.7658.
- [28] R. Comin, A. Frano, M. M. Yee, Y. Yoshida, H. Eisaki, E. Schierle, E. Weschke, R. Surtarto, F. He, A. Soumyanarayanan, Yang He, M. Le Tacon, I. S. Elfimov, Jennifer E. Hoffman, G. A. Sawatzky, B. Keimer, and A. Damascelli. Charge order driven by fermi-arc instability in  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2 - x\text{La}_x\text{CuO}_{6+\delta}$ . *Science*, 343(6169):390–392, 2014.
- [29] Osor Slaven Barišić and Slaven Barišić. *J. Supercond. Nov. Magn.*, 25:669–676, 2012. i sadržana literatura.
- [30] Ivan Kupčić, Slaven Barišić, and Eduard Tutiš. Electric-field-gradient analysis of high- $T_c$  superconductors. *Phys. Rev. B*, 57:8590–8600, Apr 1998.

- [31] V. J. Emery. Theory of high- $T_c$  superconductivity in oxides. *Phys. Rev. Lett.*, 58:2794–2797, Jun 1987.
- [32] John M. Tranquada, Guangyong Xu, and Igor A. Zaliznyak. Superconductivity, antiferromagnetism, and neutron scattering. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 350(0):148 – 160, 2014.
- [33] M. Enoki, M. Fujita, T. Nishizaki, S. Iikubo, D. K. Singh, S. Chang, J. M. Tranquada, and K. Yamada. Spin-stripe density varies linearly with the hole content in single-layer  $\text{Bi}_{2+x}\text{Sr}_{2-x}\text{CuO}_{6+y}$  cuprate superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 110:017004, Jan 2013.
- [34] Zhijun Xu, C. Stock, Songxue Chi, A. I. Kolesnikov, Guangyong Xu, Genda Gu, and J. M. Tranquada. Neutron-scattering evidence for a periodically modulated superconducting phase in the underdoped cuprate  $\text{La}_{1.905}\text{Ba}_{0.095}\text{CuO}_4$ . *Phys. Rev. Lett.*, 113:177002, Oct 2014.
- [35] Slaven Barišić and Osor Slaven Barišić, 2011. arXiv:110.1947.
- [36] Yoshinori Okada, Tsunehiro Takeuchi, Teruhisa Baba, Shik Shin, and Hiroshi Ikuta. Origin of the anomalously strong influence of out-of-plane disorder on high- $T_c$  superconductivity. *Journal of the Physical Society of Japan*, 77(7):074714, 2008.
- [37] D. K. Sunko and S. Barišić. Central peak in the pseudogap of high  $T_c$  superconductors. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, 46(2):269–279, 2005.
- [38] I. Kupčić. Thermally activated charge carriers and mid-infrared optical excitations in quarter-filled cdw systems. *The European Physical Journal B*, 62(1):27–37, 2008.
- [39] S. Barišić. Rigid-atom electron-phonon coupling in the tight-binding approximation.i. *Phys. Rev. B*, 5:932–941, Feb 1972.
- [40] T. Yoshida, X. J. Zhou, K. Tanaka, W. L. Yang, Z. Hussain, Z.-X. Shen, A. Fujimori, S. Sahrakorpi, M. Lindroos, R. S. Markiewicz, A. Bansil, Seiki Komiyama, Yoichi Ando, H. Eisaki, T. Kakeshita, and S. Uchida. Systematic doping evolution of the underlying fermi surface of  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . *Phys. Rev. B*, 74:224510, Dec 2006.
- [41] T. Yoshida, M. Hashimoto, S. Ideta, A. Fujimori, K. Tanaka, N. Mannella, Z. Hussain, Z.-X. Shen, M. Kubota, K. Ono, Seiki Komiyama, Yoichi Ando, H. Eisaki, and S. Uchida. Universal versus material-dependent two-gap behaviors of the high- $T_c$  cuprate superconductors: Angle-resolved photoemission study of  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . *Phys. Rev. Lett.*, 103:037004, Jul 2009.

- [42] W. Meevasana, F. Baumberger, K. Tanaka, F. Schmitt, W. R. Dunkel, D. H. Lu, S.-K. Mo, H. Eisaki, and Z.-X. Shen. Extracting the spectral function of the cuprates by a full two-dimensional analysis: Angle-resolved photoemission spectra of  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$ . *Phys. Rev. B*, 77:104506, Mar 2008.
- [43] M. Hashimoto, T. Yoshida, A. Fujimori, D. H. Lu, Z.-X. Shen, M. Kubota, K. Ono, M. Ishikado, K. Fujita, and S. Uchida. Effects of out-of-plane disorder on the nodal quasiparticle and superconducting gap in single-layer  $\text{Bi}_2\text{Sr}_{1.6}\text{L}_{0.4}\text{CuO}_{6+\delta}$ , (L=La, Nd, Gd). *Phys. Rev. B*, 79:144517, Apr 2009.
- [44] A. A. Kordyuk, S. V. Borisenko, M. S. Golden, S. Legner, K. A. Nenkov, M. Knupfer, J. Fink, H. Berger, L. Forró, and R. Follath. Doping dependence of the fermi surface in  $\text{BiPb}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ . *Phys. Rev. B*, 66:014502, Jun 2002.
- [45] I. M. Vishik, N. Barišić, M. K. Chan, Y. Li, D. D. Xia, G. Yu, X. Zhao, W. S. Lee, W. Meevasana, M. Devereaux, T. P. and Greven, and Z.-X. Shen. Angle-resolved photoemission spectroscopy study of  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ . *Phys. Rev. B*, 89:195141, May 2014.
- [46] R-H He, X J Zhou, M Hashimoto, T Yoshida, K Tanaka, S-K Mo, T Sasagawa, N Man-nella, W Meevasana, H Yao, M Fujita, T Adachi, S Komiya, S Uchida, Y Ando, F Zhou, Z X Zhao, A Fujimori, Y Koike, K Yamada, Z Hussain, and Z-X Shen. Doping dependence of the  $(\pi, \pi)$  shadow band in la-based cuprates studied by angle-resolved photoemission spectroscopy. *New Journal of Physics*, 13(1):013031, 2011.
- [47] I. Kupčić. privatna komunikacija.

# Životopis

Goran Nikšić rođen je u Zagrebu 16. listopada 1984. godine gdje je od 1991. do 1999. godine pohađao II Osnovnu školu Barola Kašića i matematički smjer X Gimnazije u Zagrebu. Maturirao je 2003. godine sa temom spektroskopskih metoda u analitičkoj kemiji. Zahvaljujući brojnim ljetnim školama znanstvene tematike, upisao je istraživački studij fizike na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu u Zagrebu. Diplomirao je na teorijskom usmjerenju fizike kondenzirane tvari 27.10.2008. na temu "Supravodljivi procjep u ravninama bakrovog oksida".

Nakon završetka studija upisao je doktorski studij iz fizike kondenzirane tvari na Fizičkom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu te se zaposlio kao asistent na istoj instituciji. Tokom doktorata objavio je 5 radova u časopisima te sudjelovao na 5 konferencija, škola i radionica, uglavnom međunarodnima.

## Popis objavljenih djela

### Rad u časopisima

1. Nikšić, G., Sunko, D. K., Barišić, S., "Effect of strong correlations above the pseudogap temperature in underdoped cuprates" (u postupku objave)
2. Nikšić, G., Kupčić, I., Barišić, O. S., Sunko, D. K., Barišić, S., "Multiband Responses in High- $T_c$  Cuprate Superconductors", Journal of superconductivity and novel magnetism, Vol. 27, No.4, 2014., str. 969-975
3. Nikšić, G., Sunko, D.K., Barišić, S., "Spin and charge order in Hg1201", Physica B - Condensed Matter, Vol. 460, 2015., str. 218-221
4. Nikšić, G., Kupčić, I., Sunko, D. K., Barišić, S., "In-plane oxygens in high-temperature superconducting cuprates", Journal of superconductivity and novel magnetism, Vol. 26, 2013, str. 2669-2673
5. Nikšić, G., Kupčić, I., Sunko, D. K., Barišić, S., "Incommensurate SDW in cuprates", Physica B - Condensed Matter, Vol. 407, 2012., str. 1799-1802

### Sažeci u zbornicima skupova

- Nikšić, G., Sunko, D. K., Barišić, S., "Magnetic and Ionic Effects in High-temperature Superconductors" (2014.)
- Nikšić, G., Sunko, D. K., Barišić, S., "Nekomenzurabilni val gustoće spina i pseudoprojecij u kupratnim visokotemperaturnim supravodičima" (2013.)
- Nikšić, G., Sunko, D. K., Barišić, S., "SDW in cuprates - the role of oxygens" (2011.)
- Nikšić, G., Kupčić, I., Sunko, D., Barišić, S., "The role of in-plane oxygens in high- $T_c$  superconducting cuprates" (2011.)
- Kupčić, I., Nikšić, G., Barišić, S., "Comparison of the occupation numbers  $n_d$  in  $\text{La}_{(2-x)}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  estimated by NMR/NQR and ARPES probes" (2010.)