На правах рукописи

Иванцов Илья Дмитриевич

# Сильные электронные корреляции в нормальной фазе слабодопированных ВТСП купратов

Специальность: 01.04.02 – теоретическая физика

### ΑΒΤΟΡΕΦΕΡΑΤ

диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики имени Н.Н. Боголюбова Объединённого института ядерных исследований.

Научный руководитель:	Кочетов Евгений Андреевич
	д. фм. н., начальник сектора Лаборатории теоретиче-
	ской физики им. Н. Н. Боголюбова ОИЯИ
Официальные оппоненты:	Михеенков Андрей Витальевич
	д. фм. н., руководитель Отдела теоретической
	физики Института физики высоких давлений им.
	Л.Ф.Верещагина Российской академии наук
	Рахманов Александр Львович
	д. фм. н., заведующий лаборатории №1 теоретической
	электродинамики конденсированного состояния Инсти-
	тута теоретической и прикладной электродинамики Рос-
	сийской академии наук
Ведущая организация:	Федеральное государственное бюджетное учреждение на-
	уки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева
	Уральского отделения Российской академии наук

Защита состоится \_\_\_\_\_\_ 2019 г. в \_\_\_\_\_ на заседании диссертационного совета Д 720.001.01 при Объединённом институте ядерных исследований (Лаборатория теоретической физики) по адресу: 141980, г. Дубна, Московской области, ул. Жолио-Кюри, д. 6.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте Объединённого института ядерных исследований (http://wwwinfo.jinr.ru/announce\_disser.htm).

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 г.

Учёный секретарь диссертационного совета Д 720.001.01, к. ф.-м. н.

Быстрицкий Юрий Михайлович

## Общая характеристика работы

#### 1. Актуальность темы исследования

Открытие высокотемпературной сверхпроводимости в купратах[1] явилось одним из наиболее значимых научных достижений конца XX века и дало толчок огромному количеству как теоретических, так и экспериментальных исследований в данной области. Перспективы практического применения высокотемпературных сверхпроводящих (ВТСП) купратов поистине безграничны, и обусловлены явлением высокотемпературной сверхпроводимости с критической температурой выше точки кипения азота ( $T_c > 77 K$ )[2]. Изучение высокотемпературной сверхпроводимости в купратах, на сегодняшний день, является одним из основных направлений физики конденсированного состояния. Но, несмотря на большие усилия, направленные на исследования в этой области, до сих пор не существует теоретического описания процессов, происходящих в ВТСП купратах. В общем случае сверхпроводимость проявляется как нестабильность нормального состояния, и понимание природы нормального состояния, из которого сверхпроводимость возникает, является исключительно важной задачей, которая, в перспективе, позволит перейти на качественно новый уровень в понимании физики высокотемпературной сверхпроводимости.

Изображенная на Рис.1(а) фазовая диаграмма отображает экспериментально известные данные о свойствах купратов при дырочном допировании. При слабом допировании купраты являются изолятором, и им присуще (квази)дальнее антиферромагнитное упорядочение. При промежуточном допировании и температурах  $T < T^*$  в ВТСП купратах реализуется псевдощелевая фаза, характеризующаяся частичной щелью на уровне Ферми[5] и, как следствие, арочной поверхностью Ферми, наблюдаемой в экспериментах по фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением(ARPES)[6], что указывает на неприменимость фермижидкостного описания. Стоит отметить тот факт, что температура, соответствующая переходу в фазу псевдощели значительно выше критической температуры сверхпроводимости. Диапазоны допирования, характерные для этих фаз, также различны. Данный факт, как и ряд экспериментальных наблюдений, свидетельствует в пользу того, что псевдощель не является прямым следствием формирования куперовских пар, а



Рис. 1. (а): Фазовая диаграмма ВТСП купратов из статьи [3]. (b): Фазовая диаграмма ВТСП купратов в присутствии магнитного поля из статьи [4].

поведение системы в данной фазе подчиняется описанию в рамках сильно коррелированных электронов.

Открытие квантовых осцилляций плотности электронных состояний в слабодопированном  $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}(YBCO)$  в сильном магнитном поле [7, 8, 9] выявило ряд особенностей поведения электронов в данном классе материалов, в частности, реконструкцию поверхности Ферми в маленькие карманы. Дальнейшие исследования установили, что площадь, ограниченная поверхностью Ферми, в данном случае пропорциональна уровню допирования  $\delta$  вместо пропорциональности величине  $1 + \delta$ , предсказанной теорией Ферми жидкости. Дальнейшие исследования также показали изменение знаков коэффициентов Холла[10] и Зеебека[11] в диапазоне допирования  $0.08 < \delta < 0.16$ , что указывает на то, что при низкой температуре проводимость является электронной, в отличие от характерной для псевдощелевой фазы дырочной проводимости, ожидаемой в данном диапазоне допирования. Такие свойства поверхности Ферми указывают на нарушение трансляционной симметрии в основном состоянии в отсутствие сверхпроводимости. Последующее обнаружение квантовых осцилляций в YBa<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub>O<sub>8</sub>[8, 12], HgBa<sub>2</sub>CuO<sub>4+δ</sub>[13] и ряде других соединений подтверждают то, что реконструкция поверхности Ферми и вызывающие ее явления являются общим свойством слабодопированных купратов.

Исследования структуры данного класса соединений подтвердили предположе-

ние о нарушении трансляционной симметрии, вызванном присутствием волны зарядовой плотности. Интересным является тот факт, что данная волна не соразмерна решетке и, в случае YBCO, описывается модуляционными векторами  $\mathbf{Q}_x = 2\pi(Q,0)$ и  $\mathbf{Q}_y = 2\pi(0,Q)$ , где  $Q \approx 0.31$ , лежащими в CuO<sub>2</sub> плоскости[14, 15, 16, 17]. Зарядовое упорядочение с длинной волны, варьирующейся от 3 до 5 постоянных решетки, также были обнаружены с помощью сканирующей туннельной микроскопии (STM) и рентгеновской дифракции (XRD) для большинства известных ВТСП купратов [18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27]. Кроме того, нарушение трансляционной симметрии волной зарядовой плотности присутствует именно в том диапазоне допирования, в котором наблюдается реконструкция поверхности Ферми и изменение знака носителей заряда, что позволяет сделать вывод о том, что эти явления связаны между собой.

Ряд феноменологических подходов подтвердил, что электронный карман в нодальном регионе поверхности Ферми может быть вызван нарушением трансляционной симметрии с помощью волны зарядовой плотности[28]. Расширение данной модели с помощью явного учета *d*-волнового форм фактора<sup>[29]</sup> позволило получить дополнительные маленькие дырочные карманы, что позволяет более точно описать экспериментальные данные [30]. В то время, как данный подход хорошо работает в узкой области допирования, соответствующей фазе волны зарядовой плотности, он не позволяет описать всю эволюцию поверхности Ферми в слабодопированной фазе, в частности не воспроизводит арочную поверхность Ферми, характерную для псевдощелевой фазы. Кроме того, феноменологические подходы включают в себя дополнительные подгоночные параметры, не связанные ни с какими физическими измеряемыми величинами и сильно влияющими на поведение системы. Описание реконструкции поверхности Ферми с учетом псевдощелевой фазы затруднено тем фактом, что ключевую роль в данном случае играют сильные электронные корреляции, являющиеся определяющими для свойств слабодопированных купратов. В то время, как большая часть феноменологических моделей пренебрегает влиянием кулоновского взаимодействия и рассматривает данную задачу в рамках одноэлектронного приближения среднего поля[31, 32], где волна зарядовой плотности вводится руками, соседство псевдощелевой фазы и фазы волны зарядовой плотности (ВЗП)

накладывает требование учета сильных электронных корреляций для получения полной картины поведения поверхности Ферми.

Сильные электронные корреляции в полной мере проявляют себя в так называемом Нагаоковском пределе ( $U = \infty$ ) модели Хаббарда[33]. В этом случае бесконечно сильное кулоновское отталкивание приводит к тому, что электроны с разными проекциями спина не могут занимать один и тот же узел. Несмотря на простую форму Гамильтониана, физика, скрытая в этой модели, является нетривиальной и обусловлена исключительно сильными электронными корреляциями. Одним из ключевых вопросов остается вопрос о термодинамической устойчивости фазы Нагаока. Иными словами, вопрос о том, является ли ферромагнитное состояние основным при конечном допировании в термодинамическом пределе.

## 2. Цели и задачи работы

Основная цель работы заключается в исследовании свойств нормальной фазы ВТСП купратов, описываемых в рамках моделей с сильными электронными корреляциями, и в изучении влияния таких корреляций на свойства слабодопированных купратов.

Для достижения этой цели был поставлен ряд задач:

- Исследование устойчивости дальнего антиферромагнитного порядка при допировании системы и зависимости такой устойчивости от величины электронных корреляций.
- Исследование влияния Кондо-взаимодействия на спектральные свойства и характеристики спинового и зарядового упорядочения в модели Кондо-Гейзенберга.
- 3. Анализ поведения поверхности Ферми в слабодопированной фазе купратов в присутствии волны зарядовой плотности.
- Анализ поведения носителей заряда на уровне Ферми в широком диапазоне допирования.

5. Изучение свойств сильно коррелированных электронов в предельном случае бесконечно сильного кулоновского отталкивания (так называемая фаза Нагаока). В данном случае модель не содержит явного антиферромагнитного взаимодействия и поведение системы определяется исключительно констрейнтом отсутствия двойного заполнения.

#### 3. Результаты работы, выносимые на защиту

- В рамках модели Кондо-Гейзенберга показано, что сильные электронные корреляции в купратах приводят к разрушению антиферромагнитного упорядочения уже при очень малом допировании и возникновению псевдощели в данной фазе, что полностью согласуется с экспериментом.
- 2. Показано, что в пределе бесконечно сильных корреляций (фаза Нагаока) непрерывный фазовый переход в полностью поляризованную ферромагнитную фазу не может быть реализован ни при каком конечном допировании. Показано, что магнитный порядок основного состояния напрямую зависит от типа граничных условий и характера решетки, что указывает на нетривиальность термодинамического предела.
- 3. Разработан подход, позволяющий качественно описать реконструкцию поверхности Ферми в слабодопированных купратах. Данный метод позволяет воспроизвести как поверхность Ферми в фазе псевдощели, так и изменение ее топологии в фазе волны зарядовой плотности, что объясняет экспериментально наблюдаемое изменение знака коэффициентов Холла и Зеебека при низких температурах в сильном магнитном поле.
- 4. Предложен механизм, объясняющий возникновение экспериментально наблюдаемых низкочастотных квантовых осцилляций плотности электронных состояний в купратах в фазе волны зарядовой плотности с помощью эффективного замыкания квазичастичных орбит вследствие Брэгговского отражения на границах редуцированной зоны Бриллюэна. Этот механизм объясняет ряд наблюдаемых в эксперименте особенностей электронной/дырочной проводимости в слабодопированных купратах.

#### 4. Научная новизна и практическая значимость работы

Впервые реконструкция поверхности Ферми воспроизведена в рамках микроскопической модели, явным образом учитывающей сильные электронные корреляции и существование волны зарядовой плотности, не требующей введения дополнительных феноменологических параметров. Данное поведение поверхности Ферми позволяет объяснить эксперименты, демонстрирующие изменение знака коэффициентов Холла[10] и Зеебека[11] в диапазоне допирование  $0.08 < \delta < 0.16$ , возникновение полностью электронной проводимости при допировании  $\delta \approx 0.10[30]$ , а также экспериментальные данные по измерению теплоемкости слабодопированных купратов[34].

Предложен механизм, объясняющий возникновение квантовых осцилляций плотности электронных состояний в присутствии сильного магнитного поля[7] в фазе волны зарядовой плотности. Данный механизм позволяет объяснить, каким образом арочные поверхности Ферми могут образовывать эффективно замкнутую орбиту, что является необходимым условием для возникновения квантовых осцилляций плотности электронных состояний в магнитном поле.

Приведенные в диссертации расчеты указывают на то, что используемый подход позволяет описать поверхности Ферми как в псевдощелевой фазе[6], так и в фазе волны зарядовой плотности, чего до сих пор не было достигнуто в рамках феноменологических моделей.

Впервые была показана зависимость от граничных условий устойчивости ферромагнетизма в фазе Нагаока. Данный результат указывает на то, что система сильно коррелированных фермионов даже в отсутствие взаимодействия проявляет нетривиальные физические свойства, такие как неустойчивость термодинамического предела.

#### 5. Апробация работы

Результаты диссертации опубликованы в следующих 4 статьях в журнале, входящем в список ВАК:

1. I. Ivantsov, A. Ferraz, E. Kochetov / Quantum Monte Carlo study of the itinerant-

localized model of strongly correlated electrons: Spin-spin correlation functions // Phys. Rev. B - 2016. - Vol. 94. - pp. 235118

- I. Ivantsov, A. Ferraz, E. Kochetov / Breakdown of the Nagaoka phase at finite doping // Phys. Rev. B - 2017. - Vol. 95. - pp. 155115
- I. Ivantsov, A. Ferraz, E. Kochetov / Itinerant-localized model of strongly correlated electrons: Fermi surface reconstruction // Phys. Rev. B - 2017. - Vol. 96. - pp. 195161
- I. Ivantsov, A. Ferraz, E. Kochetov / Fermi surface reconstruction in underdoped cuprates: Origin of electron pockets // Phys. Rev. B - 2018. - Vol. 98. - pp. 214511

Результаты работы представлены на международных и всероссийских конференциях:

- 2017 Winter workshop/school on localization, interactions and superconductivity, Landau Institute for Theoretical Physics, Черноголовка, Россия
- The XXI International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (AYSS-2017), JINR, OMUS, Dubna, Russia
- 3. 48th meeting of the PAC for Condensed Matter Physics, JINR, Dubna, Russia
- 4. Emergent phenomena in strongly correlated quantum matter, International Institute of Physics, Натал, Бразилия
- Международная зимняя школа физиков-теоретиков «Коуровка XXXVII», ИФМ УрО РАН, Екатеринбург, Россия
- 6. 49th meeting of the PAC for Condensed Matter Physics, JINR, Dubna, Россия

#### 6. Личный вклад автора

Автор принимал непосредственное участие в постановке задач, разработке численных алгоритмов и компьютерных программ, проведение расчетов, анализе полученных результатов и публикации статей. Личный вклад автора в результаты и основные положения, выносимые на защиту, является определяющим.

#### 7. Структура и объем работы

В первой главе для описания слабодопированных купратов используется модель Кондо-Гейзенберга сильно коррелированных электронов, являющаяся расширением t - J модели. При таком подходе стандартная решетка t - J модели расслаивается на:

1) решетку Гейзенберговских спинов, описывающих локализованные электроны и которым соответствуют операторы  $\vec{s} \in SU(2)$ .

 решетку квазичастиц допирования (допонов), описывающих делокализованные электроны которым соответствуют операторы d<sub>i</sub>.

Гамильтониан такой модели принимает вид:

$$H_{KH} = \sum_{ij\sigma} 2t_{ij} d^{\dagger}_{i\sigma} d_{j\sigma} + J \sum_{ij} \vec{s_i} (1 - n^d_i) \cdot \vec{s_j} (1 - n^d_j) + \lambda \sum_i (\vec{s_i} \cdot \vec{m_i} + \frac{3}{4} n^d_i), \quad (1)$$

где  $d_{i\sigma}^{\dagger}$  - оператор рождения допона на узле *i* с проекцией спина  $\sigma$ ,  $\vec{m}_i = \sum_{\sigma',\sigma} \tilde{d}_{i\sigma'}^{\dagger} \vec{\tau}_{\sigma'\sigma} \tilde{d}_{i\sigma}$ соответствует спину допона, а  $\vec{s}_i$  является решеточным спином и описывает локализованные электроны,  $n_i^d = \sum_{\sigma} d_{i\sigma}^{\dagger} d_{i\sigma}$ , а  $\lambda$  является параметром Кондо-взаимодействия, ответственным за реализацию констрейнта отсутствия двойного заполнения. Действительно, при  $\lambda = \infty$  модель редуцируется к стандартной t - J модели[35], а в случае  $\lambda = 0$  корреляции пропадают, и Гамильтониан расцепляется на модель Гейзенберга для решеточных спинов и tight-binding модель для допонов.

В рамках такой модели становится возможным отделить друг от друга антиферромагнитную составляющую сильного кулоновского отталкивания и слагаемое, отвечающее за констрейнт отсутствия двойного заполнения узла электронами, что недоступно в случае t - J модели, где двойное заполнение заранее запрещено, и в случае модели Хаббарда, где обоим эффектам соответствует единственный параметр U.

Такой подход дает возможность оценить влияние как антиферромагнитных корреляций, так и констрейнта отсутствия двойного заполнения по отдельности при различных уровнях допирования, что позволяет определить причину, вызывающую столь необычное поведение ВТСП купратов.

В рамках квантового метода Монте-Карло (Приложение А) рассчитаны спиновые корреляционные функции, позволяющие оценить величину антиферромагнит-



Рис. 2. (а) Спиновые корреляционные функции g(r) при J = 0.4t (а) в логарифмическом масштабе при разных уровнях допирования  $\delta$  и  $\lambda = \infty$ (а) и разных значениях  $\lambda$  и  $\delta = 0.08$ (b). Сплошные и пунктирные линии соответствуют t' = t'' = 0 и (t' = -0.27t, t'' = 0.2t) соответственно. Температура T = 0.1t.

ного порядка. Функции:

$$g(r) = 4\Delta^{-1}(r) \sum_{ij} \langle (s_i^z + m_i^z)(s_j^z + m_j^z) \rangle e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \bar{\delta}(r - |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|)$$
(2)

описывают корреляции физических электронов, оператор спина которых имеет вид  $\vec{S}_i = \vec{s}_i + \vec{m}_i$ .  $\mathbf{K} = (\pi, \pi)$  является волновым вектором антиферромагнитного упорядочения,  $\mathbf{R}_i$  – радиус-вектор узла *i*, нормировочная функция определяется как  $\Delta(r) = \sum_{ij} \bar{\delta}(r - |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|),$  и

$$\bar{\delta}(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } |x| \le 0.5a, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases}$$
(3)

где *а* является постоянной решетки, а (...) обозначает усреднение по всем спиновым конфигурациям, используемым в расчетах в методе квантового Монте-Карло.

На Рис.2(а) изображены спиновые корреляционные функции при различных уровнях допирования. Критическая концентрация, свидетельствующая о разрушении квазидальнего порядка и характеризующаяся экспоненциальным спадом корреляционной функции с ростом расстояния(на графике в логарифмическом масштабе имеет вид прямой) достигается при  $\delta_c = 0.08$  при J = 0.4t. Подавление квазидальнего порядка в случае конечной температуры соответствует подавлению истинного дальнего порядка, существующего при нулевой температуре. Несмотря на то, что полученные величины критического допирования не обязаны соответствовать случаю нулевой температуры, их значения, по крайней мере, должны быть достаточно близки.

На Рис.2(b) спиновые корреляционные функции g(r) изображены при критической концентрации допонов ( $\delta = 0.08$  при J = 0.4) при различных значениях корреляционного параметра  $\lambda$ . В случае  $\lambda = 0$  корреляции между локализованными и делокализованными электронами пропадают и модель расцепляется на tight-binding модель для допонов и Гейзенберговскую модель для решеточных спинов, в которой при любом допировании будет присутствовать квазидальний антиферромагнитный порядок. Локальный констрейнт отсутствия двойного заполнения играет ключевую роль в разрушении антиферромагнитного упорядочения, и при  $\lambda > 10t$  значения спиновых корреляционных функций становятся практически идентичными, что указывает на насыщение по  $\lambda$ . В случае промежуточных значений  $\lambda$  противостояние антиферромагнитного и Кондо-взаимодействия слабеет, что приводит к повышению верхней границы антиферромагнитной фазы[36].

Кроме того, эволюция поверхности Ферми исследована в рамках кластерной теории возмущений (Приложение Б), позволяющей получать спектральные функции системы при нулевой температуре. Данный метод основан на первичной точной диагонализации малых кластеров с Гамильтонианом модели Кондо-Гейзенберга и последующем расчете спектральных функции межкластерного взаимодействия в базисе собственных состояний малых кластеров. Использование открытых граничных условий также позволяет смоделировать волну зарядовой плотности, возникающую из-за неоднородного распределение заряда внутри кластера.

В результате расчетов показано, что при росте допирования (начиная от δ = 0.08, что соответствует разрушению квазидальнего антиферромагнитного порядка) эволюцию поверхности Ферми, отображенную на Рис.3, можно описать в четыре этапа:

 В области допирования 0.08 ≤ δ ≤ 0.14 поверхность Ферми представляет из себя арки, расположенные в нодальной области зоны Бриллюэна (Рис.3(a-b)). Данный тип поверхностей Ферми характерен для фазы псевдощели[37].



Рис. 3. Спектральная функция на уровне Ферми в первом квадранте зоны Бриллюэна при различных уровнях допирования  $\delta$ , рассчитанная в рамках кластерной теории возмущений для кластера 3 × 3. Параметры моделиJ = 0.4t,  $\lambda = 10^3 t$ ,  $T = 10^{-3} t$ , t' = -0.27t и t'' = 0.2t. Уширение Лоренциана в методе кластерной теории возмущений задается величиной  $\eta = 0.02$ .

- 2. Наиболее интересной является область допирования 0.14 ≤ δ ≤ 0.2, изображенная на Рис.3(c-f) и отображающая реконструкцию поверхности Ферми вследствие присутствия волны зарядовой плотности. Наиболее четко такая реконструкция видна на Рис.3(d). Поверхность Ферми представляет из себя комбинацию из нодального электронного карма, дополненного двумя маленькими дырочными карманами вблизи антинодальной области.
- В области допирования 0.2 ≤ δ ≤ 0.25(Рис.3(g)) волна зарядовой плотности не реконструирует поверхность Ферми, и в системе вновь реализуется псевдощелевое поведение.
- В области допирования 0.25 ≤ δ(Рис.3(h)) поверхность Ферми представляет из себя большой дырочный цилиндр с центром в точке (π, π), характерный для стандартного фермижидкостного поведения системы.

Расчет поверхностей Ферми в случае кластеров 4 × 4 и в случае неравномерного пространственного распределения значений химического потенциала позволил оценить эффекты конечного размера кластеров и показал, что подобное поведение поверхности Ферми является не артефактом численного метода, а имеет физические причины, связанные с сильными электронными корреляциями.

Таким образом можно заключить, что в отсутствие антиферромагнитного порядка, при допированиях, соответствующих псевдощелевой фазе, именно сильные корреляции приводят как к возникновению псевдощелевых арочных поверхностей Ферми, так и реконструкции данных поверхностей в электронные карманы, допускающие существование квантовых осцилляций плотности электронных состояний в сильных магнитных полях, в фазе волны зарядовой плотности. Кроме того, при ослаблении величины Кондо-взаимодействия  $\lambda < 6t$ , данная реконструкция не наблюдается, что указывает на то, что сильные корреляции играют ключевую роль в описании поведения фазы волны зарядовой плотности. При дальнейшем ослаблении величины корреляций пропадают следы псевдощелевой фазы и поверхность Ферми восстанавливает фермижидкостную форму.

Во второй главе рассматривается вопрос о возможности существования насыщенного ферромагнитного основного состояния в случае конечного допирования в фазе Нагаока. В рамках квантового метода Монте-Карло для модели Кондо-Гейзенберга с бесконечным кулоновским отталкивание

$$H_{U=\infty} = \sum_{ij\sigma} 2t_{ij} d^{\dagger}_{i\sigma} d_{j\sigma} + \lambda \sum_{i} (\vec{S}_i \cdot \vec{s}_i + \frac{3}{4} n^d_i) \quad \lambda \gg t$$
<sup>(4)</sup>

рассчитываются спиновые корреляционные функции (Рис.4). Метод позволяет получить значение корреляционных функций для достаточно больших решеток, таким образом, чтобы эффект конечного размера решетки был пренебрежимо мал.

Корреляционные функции рассматриваются в двух случаях:

- 1. В случае hard-core бозонов в системе присутствует (квази)дальний ферромагнитный порядок, что соответствует аналитическим результатам[38].
- 2. В случае Ферми-статистики ферромагнитное упорядочение отсутствует при всех уровнях допирования, рассмотренных в расчетах, что указывает на то, что критический уровень допирования  $\delta_c < 0.01$ .

В рамках точной диагонализации малых кластеров вычисляется спин основного состояния для конечных решеток при различных уровнях допирования. В слу-



Рис. 4. а-b) Корреляционные функции для решетки  $10 \times 10$  при различных уровнях допирования  $\delta$  в случае hard-core бозонов (a) и фермионов (b). c) Выделенный фрагмент графика (b) отдельно для разных уровней допирования и при различных размерах решетки. Температура T = 0.1t.

чае hard-core бозонов такой спин является максимальным при любом количестве дырок, что явно указывает на ферромагнитное основное состояние вне зависимости от уровня допирования. В случае фермионов ферромагнетизм существует только в случае одной дырки, в полном соответствии с теоремой Нагаока. В случае двух дырок спин основного состояния является минимальным для всех рассмотренных кластеров, что указывает на резкое изменение значения спина и свидетельствует в пользу существование фазового перехода первого рода.

В случае больших решеток Гамильтониан не может быть диагонализован точно в силу экспоненциального роста размера матрицы Гамильтониана  $dim(H) = 3^N$ , однако, для рассмотрения вопроса о возможсности существования насыщенного ферромагнетизма диагонализация всего Гамильтониана является излишней. Следует отметить важный факт, что матрица Гамильтониана является блочно-диагональной, и каждому блоку соответствует свое значение суммарного числа дырок  $N_h$  и суммарное значение проекции спина  $S_z$ . В случае модели Хаббарда с бесконечным кулоновским отталкивание при допировании  $N_h = 1, 2$  и при суммарной проекции спина  $S_z = (N - N_h)/2, (N - N_h)/2 - 1$  размер матрицы Гамильтониана не превышает  $< N^3$ , что позволяет произвести численную точную диагонализацию этих секторов Гильбертова пространства для достаточно больших решеток.

На Рис.5 представлены результаты точной диагонализации больших кластеров для различных линейных размеров  $N_x$  и  $N_y$  и различных граничных условий.



Рис. 5. На верхней части рисунка изображены граничные условия, соответствующие (**a**): открытым граничным условиям, (**b**): смешанным граничным условиям с периодичностью вдоль оси *x*, (**c**): полностью периодическим граничным условиям. На нижней части изображены фазы в зависимости от линейных размеров решетки.

При таких расчетах в зависимости от размеров решетки можно четко выделить две различающиеся фазы:

 FP (fully polarized), что соответствующую случаю возможного насыщенного ферромагнетизма. Данная фаза соответствует случаю E(S = S<sub>max</sub>) < E(S = S<sub>max</sub> -1), то есть энергия состояния с максимальной суммарной проекцией спина меньше чем энергия, соответствующая случаю одного перевернутого спина.

 2) SF (spin flipped), что соответствует случаю невозможности насыщенного ферромагнетизма. Данная фаза соответствует случаю E(S = S<sub>max</sub>) > E(S = S<sub>max</sub> -1), указывая на то, что как минимум спиновая конфигурация с одним перевернутым спином имеет более низкое значение собственной энергии.

На Рис.5(а) изображен случай открытых граничных условий, при которых у решетки отсутствует периодичность. В данном случае зависимость от размера решетки является нетривиальной, указывая на сильную зависимость результата от линейных размеров кластера. Результат указывает на то, что в случае квадратной решетки насыщенный ферромагнетизм не возникает. Нарушение C<sub>4</sub> симметрии при достаточно больших линейных размерах приводит к изменению спина основного состояния и возможности полной поляризации. Данный результат полностью объясняет результаты вычислений с помощью метода ренормгруппы матрицы плотности (DMRG)[39], в которых для моделирования двумерной системы использовалась решетка вида  $2 \times N$ ,  $4 \times N$  и  $6 \times N$ , где линейный размер выбирался достаточно большим  $N \sim 50$ . Таким образом результат DMRG расчетов, указывающих на критический уровень допирования  $\delta_c = 0.2$  не противоречит приведенным в данной главе вычислениям, однако не в полной мере демонстрирует поведение истинно двумерной решетки. Действительно, в случае двух дырок и квадратной решетки  $12 \times 12$ , являющейся максимальной в данных расчетах, следует, что уже при допировании  $\delta = 2/(12 \cdot 12) \approx 0.0139$  насыщенный ферромагнетизм основного состояния невозможен. В то же время, он является возможным в случае прямоугольной решетки  $11 \times 12$ , что соответствует допированию  $\delta = 2/(11 \cdot 12) \approx 0.0152$ . Более того, ферромагнетизм является допустимым и при значительно больших уровнях допирования, максимальным из которых является случай решетки  $2 \times 5$ , где  $\delta = 2/(2 \cdot 5)$ , что совпадает с рассчитанным с помощью DMRG метода значением  $\delta_c = 0.2$ .

На Рис.5(b) изображен случай смешанных граничных условий, при которых периодичность решетки присутствует только в направлении *x*-оси, в то время как по *y*-оси остаются открытые граничные условия. В данном случая зависимость от размеров является не *линейной*, но вполне ожидаемой. Действительно, если периодичность решетки соблюдается вдоль значительно большей стороны, то насыщенный ферромагнетизм невозможен. В противном случае ферромагнитное основное состояния является допустимым.

На Рис.5(с) изображены результаты в случае периодических граничных условий, демонстрируя тривиальность зависимости фаз от размера решетки. В данном случае, при любых линейных размерах кластера, основное состояние не может являться насыщенным ферромагнетиком, что полностью соответствует результатам приведенных ранее расчетов диагонализации малых кластеров и квантового метода Монте-Карло.

Данные результаты показывают, что для расчетов свойств основного состояния Нагаоковской фазы необходимо также учитывать конкретный тип граничных условий и размер решетки, который, в некоторых случаях, оказывает даже более существенное влияние на поведение системы, чем уровень допирования. Если в случае периодических граничных условий, представляющих тривиальный характер зависимости от линейных размеров, вопрос о термодинамическом пределе является достаточно простым, то в случае открытых и смешанных граничных условий данный предел не является очевидным. В частности, такое поведение может означать отсутствие термодинамического предела как такового в силу некоммутативности предельных переходов по линейным размерам кластеров. Однако следует отметить, что изначальная теорема Нагаока и вопрос о Нагаоковской фазе сформулирован для решетки с периодическими граничными условиями, и в данном случае приведенные в данной главе результаты указывают на нестабильность Нагаоковской фазы при конечном допировании.

В третьей главе реконструкция поверхности Ферми в фазе волны зарядовой плотности рассмотрена более детально. Нарушение трансляционной симметрии и существование волны зарядовой плотности смоделировано за счет разбиения бесконечной решетки на конечные кластеры  $L \times L$ , внутри которых взаимодействие осуществляется в рамках t - J модели, что приводит к увеличению векторов трансляции  $\mathbf{T}_x = (L, 0), \mathbf{T}_y = (0, L)$  и возникновению соответствующих им волновых векторов  $\mathbf{Q}_x = (\frac{2\pi}{L}, 0)$  и  $\mathbf{Q}_y = (0, \frac{2\pi}{L})$ . Так как экспериментальные данные указывают на существование несоразмерного зарядового упорядочения с длиной волны  $L \approx 3.2$  (в YBCO)[16, 17], размер кластера выбирается максимально близким целым значением, в данном случае L = 3, а Гамильтониан имеет вид:

$$H = \sum_{fg} H_{fg}^{\text{int}} + \sum_{f} H_{f}^{0}, \quad H_{fg}^{\text{int}} = \sum_{ab\sigma} t_{ab}^{fg} c_{fa\sigma}^{\dagger} c_{gb\sigma}$$
(5)

где f и g являются кластерными индексами, a и b обозначают узлы внутри соответствующих кластеров,  $t_{ab}^{fg}$  является матрицей интегралов перескоков, переписанной в представлении кластеров,  $c_{fa\sigma}^{\dagger}$  является стандартным оператором рождения электрона на узле a кластера f с проекцией спина  $\sigma$ . Внутрикластерная часть имеет вид:

$$H_f^0 = \sum_{ab\sigma} (t_{ab}^{ff} - \mu \delta_{ab}) \tilde{c}_{fa\sigma}^{\dagger} \tilde{c}_{fb\sigma} + J \sum_{ab} \mathbf{S}_{fa} \cdot \mathbf{S}_{fb}, \tag{6}$$

где  $J = 4t^2/U$  - константа спинового обменного взаимодействия, электронные операторы являются спроектированными на редуцированное Гильбертово пространство



Рис. 6. Поверхности Ферми, вычисленные для различных значений параметра допирования  $\delta$  с учетом (**a**-**d**) распределения спектрального веса и без него, в виде полюсов функций Грина (**e**-**f**). Сплошные линии  $k_x = \pi/3$  и  $k_y = \pi/3$  отображают Брэгговские плоскости на границах редуцированной зоны Бриллюэна. Параметры t - J модели, использованные в расчетах: t' = -0.27, t'' = 0.2, J = 0.5, температура  $T = 10^{-4}$  (здесь и далее энергия измеряется в величинах t).

 $\tilde{c}_{a\sigma} = c_{a\sigma}(1-n_{a-\sigma})$ , а  $\mathbf{S}_{fa}$  являются операторами спина электрона. Следующим шагом является численная точная диагоналиация  $H_f^0$  для каждого кластера, что позволяет переписать Гамильтониан(5) в базисе собственных волновых функций кластера и вычислить электронные спектральные функции  $A(\mathbf{k},\varepsilon)$  для изначальной решетки в рамках кластерной теории возмущений (Приложение Б).

Данный метод позволяет построить поверхности Ферми в широком диапазоне допирования, что позволяет проследить всю эволюцию поверхности Ферми. Как известно, в случае малого допирования в купратах реализуется псевдощелевая фаза, при которой экспериментальные наблюдения не выявили никаких следов квантовых осцилляций[40], что свидетельствует о нефермижидкостном поведении системы и соответствует наблюдаемым в ARPES измерениях арочным поверхностям Ферми[41, 42]. Результаты вычисления поверхностей Ферми в фазе "чистой"псевдощели( $\delta < 0.09$ ), приведенные в данной главе, подтверждают такой сценарий в том случае, когда карман не касается границ редуцированной зоны Бриллюэна, что изображено на Рис.6(е). Данные расчеты подтверждают предположение о том, что волновые вектора, соединяющий концы Ферми арок в фазе псевдощели являются отличными от векторов волны зарядовой плотности. Несмотря на тот факт, что в данной модели трансляционная симметрия нарушена при любом уровне допирования, в том числе и для фазы чистой псевдощели, наблюдаемые поверхности Ферми в этой фазе не подвергаются качественному влиянию волны зарядовой плотности и являются арочными.

Однако, при возрастании допирования влияние волны зарядовой плотности становится более существенным и приводит к реконструкции поверхности Ферми, что находится в согласии с некоторыми теоретическими предсказаниями[43, 44]. В то время как при  $\delta < 0.08$  реализуется фаза псевдощели, при повышении уровня допирования изменяется топология поверхности Ферми (Puc.6(f))(при критическом значении  $\delta \approx 0.09$ ), что напрямую связано с расходимостью эффективной массы носителей заряда[45, 46]. При данной концентрации дырок поверхность Ферми начинает касаться границ редуцированной зоны Бриллюэна, что приводит к тому, что вектор, соединяющий концы арок поверхности Ферми становится равным вектору модуляции волн зарядовой плотности, что сигнализирует о переходе в фазу волны зарядовой плотности. Изменение топологии поверхности Ферми приводит к тому, что электроны рассеиваются на Брэгговских плоскостях, образованных волной зарядовой плотности, что приводит к формированию замкнутых в импульсном пространстве поверхностей, изображенных на Рис.7(с). Как и в случае псевдощели, спектральный вес перераспределен на одну из сторон кармана. Однако, за счет Брэгговского отражения в точках пересечения поверхности Ферми с границами редуцированной зоны Бриллюэна квазичастицы могут образовывать эффективно замкнутую орбиту ((1,8), (2,3), (4,5) и (6,7) на Рис.7(с)), соединяя квазичастичные состояния с одинаковой энергией, но отличной на вектор Q величиной импульса. Таким образом, разъединенные Ферми арки, расположенные в нодальной области, могут образовывать эффективно замкнутую квазичастичную орбиту, что приводит к возможности появления квантовых осцилляций малой частоты в сильном магнитном поле. Тот же самый механизм лежит в основе еще более низкочастотных квантовых осцилляций, предположительно объясняемых наличием маленьких дырочных карманов в дополнении к электронному Рис.7(d). Данные дырочные карманы связывают с существование *d*-wave упорядочения, что также было подтверждено



Рис. 7. (а): Поверхность Ферми, вычисленная в рамках метода кластерной теории возмущений при допировании  $\delta = 0.14$  с полушириной Лоренциана  $\eta = 0.01$ . Остальные параметры модели такие же, как и на Рис.6. Срезы спектральной функции в направлениях 1,2 и 3 (зеленые линии) изображены на рисунке (b): Горизонтальная зеленая линия соответствует уровню  $\Phi$ ерми.  $\Delta$  обозначает величину щели, образованной за счет расщепления зон. (с) Схематическое изображение формирования электронного кармана. Пронумерованные точки соответствуют точкам Брэгговского отражения. Стороны электронного кармана с ненулевым спектральным весом обозначены красным, а эффективная площадь поверхности Ферми закрашена. Вставка схематически отображает эффективный карман на поверхности Ферми. (d) Схематическое изображение формирования дырочных карманов. На рисунках (a,c,d) первая редуцированная зона Бриллюэна отображена голубым цветом, Брэгговским плоскостям соответствуют прямые  $k_x, k_y = \pm \pi/3$ , а  $Q_x$  и  $Q_y$  являются векторами модуляции волны зарядовой плотности. (е) Распределение спектрального веса на поверхности Ферми, проинтегрированное вдоль направления, задающегося углом  $\varphi$  (график (a)) из точки ( $\pi,\pi$ ) при различных значениях уровня допирования  $\delta$ . Каждому горизонтальному срезу соответствует поверхность Ферми при указанном допировании  $\delta$ . Срезы, пронумерованные римскими цифрами, соответствуют фазам, изображенным на Рис.8. Срезу III также соответствует поверхность Ферми (b). (f) Зависимость максимальной величины щели от параметра кулоновского отталкивания U.





Рис. 8. (а) Зависимость плотности электронных состояний (DOS) на поверхности Ферми от уровня допирования δ, нормированная на величину DOS(δ = 0.2). Красная и синяя кривая соответствуют плотности электронных и дырочных носителей заряда соответственно.
(b) Черная кривая отображает зависимость среднего знака носителей заряда σ от уровня допирования δ (значения слева). Зеленая линии соответствует величине щели ВЗП Δ (значения справа). Пунктирные черные линии на графиках (а) и (b) соответствуют фазе "чистой" псевдощели без реконструкции поверхности Ферми.

в экспериментальных исследованиях купратов [42, 47, 48].

Причиной такой реконструкции поверхности Ферми является возникновение на границах редуцированной зоны Бриллюэна анизотропной щели Рис.7(b,e), что приводит к разделению псевдощелевой дырочной поверхности Ферми на электронную в нодальной области и, при допировании  $\delta > 0.12$ , дырочную, состоящую из двух карманов. Величина такой щели линейно зависит от U Рис.7(f), что указывает на то, что причиной такой реконструкции поверхности Ферми является сильное кулоновское отталкивание. Действительно, в случае U = 0 щель пропадает, и поверхность Ферми становится фермижидкостной при любом допировании.

Прямое вычисление знака обратной эффективной массы с помощью расчета второй производной закона дисперсии  $(m_{\rm eff}^{-1} = \partial^2 E(\mathbf{k})/\partial \mathbf{k}^2)$  позволяет воспроизвести ключевые особенности модели в широком диапазоне допирования. Результаты, представленные на Рис.8(а) соответствуют экспериментальным данным о том, что при  $\delta < 0.09$  проводимость является полностью дырочной, что характеризует фазу "чистой" псевдощели. Однако, реконструкция поверхности Ферми, начинающаяся при  $\delta \approx 0.09$  и заканчивающаяся при  $\delta \approx 0.15$  приводит к значительному снижению концентрации дырочных носителей и возникновению электронной проводимости, в диапазоне допирования, характерном для Брэгговской щели. Кроме того, суммарный спектральный вес носителей на поверхности Ферми подвергается значительному уменьшению, что соответствует экспериментам по измерению теплоемкости[34, 49]. При допировании  $\delta > 0.16$  восстанавливается фаза чистой псевдощели, что следует из поведения среднего знака носителей заряда и величины щели  $\Delta$ .

Данный подход успешно воспроизводит и некоторые более тонкие детали реконструкции поверхности Ферми, характерные для фазы волны зарядовой плотности, такие как существование исключительно электронной проводимости при  $\delta \approx$ 0.10[30], в то время как возникновение дополнительных дырочных карманов происходит при увеличении степени допирования из-за наличия *d*-wave слагаемых в межкластерном взаимодействии. Такое поведение указывает на то, что электронные карманы могут существовать как отдельно, так и вместе с дырочными карманами, что также подтверждается экспериментами по измерению магнитосопротивления[50].

В Заключении диссертационной работы сформулированы выводы, соответствующие положениям выносимым на защиту.

В Приложении А изложен алгоритм квантового метода Монте-Карло, использующийся в данной диссертации для вычисления спиновых корреляционных функций в Главе 1 и Главе 2.

В Приложении Б изложен метод кластерной теории возмущений, использующийся в данной диссертации для вычисления спектральных функций и поверхностей Ферми в Главе 1 и Главе 3.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, двух приложений и списка литературы. Объем диссертации – 85 страниц. Список литературы содержит 99 наименований.

21

## Список литературы

- Bednorz, J. G.Müller, K. A., Possible high T<sub>c</sub> superconductivity in the Ba - La - Cu - O system // Zeitschrift für Physik B Condensed Matter - 1986, Vol. 64. - P. 189.
- Wu, M. K., Ashburn, J. R., Torng, C. J., Hor, P. H., Meng, R. L., Gao, L., Huang, Z. J., Wang, Y. Q., Chu, C. W., Superconductivity at 93 K in a new mixed-phase Y-Ba-Cu-O compound system at ambient pressure // Physical Review Letters -1987, Vol. 58. - P. 908.
- Hussey, N. E., Buhot, J., Licciardello, S., A tale of two metals: contrasting criticalities in the pnictides and hole-doped cuprates // Reports on Progress in Physics - 2018, Vol. 81. - P. 052501.
- Tranquada, J. M., Cuprates Get Orders to Charge // Science 2012, Vol. 337. P. 811.
- Timusk, T.Statt, B., The pseudogap in high-temperature superconductors: an experimental survey // Reports on Progress in Physics - 1999, Vol. 62. - P. 61.
- Shen, K. M., Ronning, F., Lu, D. H., Baumberger, F., Ingle, N. J. C., Lee, W. S., Meevasana, W., Kohsaka, Y., Azuma, M., Takano, M., Shen, H. T. Z.-X., Nodal Quasiparticles and Antinodal Charge Ordering in Ca<sub>2-x</sub>Na<sub>x</sub>CuO<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> // Science -2005, Vol. 307. - P. 901.
- Doiron-Leyraud, N., Proust, C., LeBoeuf, D., Levallois, J., Bonnemaison, J.-B., Liang, R., Bonn, D. A., Hardy, W. N., Taillefer, L., Quantum oscillations and the Fermi surface in an underdoped high-T<sub>c</sub> superconductor // Nature - 2007, Vol. 447. - P. 565.
- Yelland, E. A., Singleton, J., Mielke, C. H., Harrison, N., Balakirev, F. F., Dabrowski,
   B., Cooper, J. R., Quantum Oscillations in the Underdoped Cuprate YBa<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub>O<sub>8</sub>
   // Physical Review Letters 2008, Vol. 100. P. 047003.
- Sebastian, S. E., Harrison, N., Palm, E., Murphy, T. P., Mielke, C. H., Liang, R., Bonn, D. A., Hardy, W. N., Lonzarich, G. G., A multi-component Fermi surface in the vortex state of an underdoped high-T<sub>c</sub> superconductor // Nature - 2008, Vol. 454. - P. 200.

- 10. LeBoeuf, D., Electron pockets in the Fermi surface of hole-doped high- $T_c$  superconductors // Nature 2007, Vol. 450. P. 533.
- Chang, J., Daou, R., Proust, C., LeBoeuf, D., Doiron-Leyraud, N., Laliberté, F., Pingault, B., Ramshaw, B. J., Liang, R., Bonn, D. A., Hardy, W. N., Takagi, H., Antunes, A. B., Sheikin, I., Behnia, K., Taillefer, L., Nernst and Seebeck Coefficients of the Cuprate Superconductor YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6.67</sub>: A Study of Fermi Surface Reconstruction // Physical Review Letters - 2010, Vol. 104. - P. 057005.
- Bangura, A. F., Fletcher, J. D., Carrington, A., Levallois, J., Nardone, M., Vignolle, B., Heard, P. J., Doiron-Leyraud, N., LeBoeuf, D., Taillefer, L., Adachi, S., Proust, C., Hussey, N. E., Small Fermi Surface Pockets in Underdoped High Temperature Superconductors: Observation of Shubnikov-de Haas Oscillations in YBa<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub>O<sub>8</sub> // Physical Review Letters - 2008, Vol. 100. - P. 047004.
- Barišić, N., Universal quantum oscillations in the underdoped cuprate superconductors // Nature Physics - 2013, Vol. 9. - P. 761.
- Wu, T., Mayaffre, H., Krämer, S., Horvatić, M., Berthier, C., Hardy, W. N., Liang, R., Bonn, D. A., Julien, M.-H., Magnetic-field-induced charge-stripe order in the high-temperature superconductor YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>v</sub> // Nature - 2011, Vol. 477. - P. 191.
- Wu, T., Emergence of charge order from the vortex state of a high-temperature superconductor // Nature communications - 2013, Vol. 4. - P. 2113.
- Blanco-Canosa, S., Frano, A., Schierle, E., Porras, J., Loew, T., Minola, M., Bluschke, M., Weschke, E., Keimer, B., Tacon, M. L., Resonant x-ray scattering study of charge-density wave correlations in YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6+x</sub> // Physical Review B - 2014, Vol. 90. - P. 054513.
- 17. Tabis, W., Charge order and its connection with Fermi-liquid charge transport in a pristine high- $T_c$  cuprate // Nature communications 2014, Vol. 5. P. 5875.
- Tranquada, J., Sternlieb, B., Axe, J., Nakamura, Y., Uchida, S., Evidence for stripe correlations of spins and holes in copper oxide superconductors // Nature - 1995, Vol. 375. - P. 561.
- Fink, J., Soltwisch, V., Geck, J., Schierle, E., Weschke, E., Büchner, B., Phase diagram of charge order in La<sub>1.8-x</sub>Eu<sub>0.2</sub>Sr<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub> from resonant soft x-ray diffraction // Physical Review B 2011, Vol. 83. P. 092503.

- Ghiringhelli, G., Tacon, M. L., Minola, M., Blanco-Canosa, S., Mazzoli, C., Brookes, N. B., Luca, G. M. D., Frano, A., Hawthorn, D. G., He, F., Loew, T., Sala, M. M., Peets, D. C., Salluzzo, M., Schierle, E., Sutarto, R., Sawatzky, G. A., Weschke, E., Keimer, B., Braicovich, L., Long-Range Incommensurate Charge Fluctuations in (Y,Nd)Ba<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6+δ</sub> // Science - 2012, Vol. 337. - P. 821.
- Achkar, A. J., Sutarto, R., Mao, X., He, F., Frano, A., Blanco-Canosa, S., Tacon, M. L., Ghiringhelli, G., Braicovich, L., Minola, M., Sala, M. M., Mazzoli, C., Liang, R., Bonn, D. A., Hardy, W. N., Keimer, B., Sawatzky, G. A., Hawthorn, D. G., Distinct Charge Orders in the Planes and Chains of Ortho-III-Ordered YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6+δ</sub> Superconductors Identified by Resonant Elastic X-ray Scattering // Physical Review Letters - 2012, Vol. 109. - P. 167001.
- 22. LeBoeuf, D., Krämer, S., Hardy, W. N., Liang, R., Bonn, D. A., Proust, C., Thermodynamic phase diagram of static charge order in underdoped YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>y</sub> // Nature Physics - 2012, Vol. 9. - P. 79.
- Blackburn, E., Chang, J., Hücker, M., Holmes, A. T., Christensen, N. B., Liang, R., Bonn, D. A., Hardy, W. N., Rütt, U., Gutowski, O., v. Zimmermann, M., Forgan, E. M., Hayden, S. M., X-Ray Diffraction Observations of a Charge-Density-Wave Order in Superconducting Ortho-II YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6.54</sub> Single Crystals in Zero Magnetic Field // Physical Review Letters - 2013, Vol. 110. - P. 137004.
- Hoffman, J. E., Hudson, E. W., Lang, K. M., Madhavan, V., Eisaki, H., Uchida, S., Davis, J. C., A Four Unit Cell Periodic Pattern of Quasi-Particle States Surrounding Vortex Cores in Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>8+δ</sub> // Science - 2002, Vol. 295. - P. 466.
- Kohsaka, Y., Taylor, C., Fujita, K., Schmidt, A., Lupien, C., Hanaguri, T., Azuma, M., Takano, M., Eisaki, H., Takagi, H., Uchida, S., Davis, J. C., An Intrinsic Bond-Centered Electronic Glass with Unidirectional Domains in Underdoped Cuprates // Science - 2007, Vol. 315. - P. 1380.
- 26. Kivelson, S. A., Bindloss, I. P., Fradkin, E., Oganesyan, V., Tranquada, J. M., Kapitulnik, A., Howald, C., How to detect fluctuating stripes in the hightemperature superconductors // Reviews of Modern Physics - 2003, Vol. 75. - P. 1201.
- 27. Vershinin, M., Misra, S., Ono, S., Abe, Y., Ando, Y., Yazdani, A., Local Ordering

in the Pseudogap State of the High- $T_c$  Superconductor Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>8+ $\delta$ </sub> // Science - 2004, Vol. 303. - P. 1995.

- Harrison, N.Sebastian, S. E., Protected Nodal Electron Pocket from Multiple-Q Ordering in Underdoped High Temperature Superconductors // Physical Review Letters - 2011, Vol. 106. - P. 226402.
- Allais, A., Bauer, J., Sachdev, S., Density wave instabilities in a correlated twodimensional metal // Physical Review B - 2014, Vol. 90. - P. 155114.
- 30. Doiron-Leyraud, N., Badoux, S., de Cotret, S. R., Lepault, S., LeBoeuf, D., Laliberté, F., Hassinger, E., Ramshaw, B. J., Bonn, D. A., Hardy, W. N., Liang, R., Park, J.-H., Vignolles, D., Vignolle, B., Taillefer, L., Proust, C., Evidence for a small hole pocket in the Fermi surface of underdoped YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>y</sub> // Nature Communications - 2015, Vol. 6. - P. 6034.
- Allais, A., Chowdhury, D., Sachdev, S., Connecting high-field quantum oscillations to zero-field electron spectral functions in the underdoped cuprates // Nature Communications - 2014, Vol. 5. - P. 5771.
- Maharaj, A. V., Hosur, P., Raghu, S., Crisscrossed stripe order from interlayer tunneling in hole-doped cuprates // Physical Review B - 2014, Vol. 90. - P. 125108.
- Nagaoka, Y., Ferromagnetism in a Narrow, Almost Half-Filled s Band // Physical Review - 1966, Vol. 147. - P. 392.
- Proust, C.Taillefer, L., The Remarkable Underlying Ground States of Cuprate Superconductors // Annual Review of Condensed Matter Physics - 2019, Vol. 10. -P. 409.
- 35. Pepino, R. T., Ferraz, A., Kochetov, E., Doped carrier formulation of the t-J model: Projection constraint and the effective Kondo-Heisenberg lattice representation // Physical Review B - 2008, Vol. 77. - P. 035130.
- 36. Ivantsov, I., Ferraz, A., Kochetov, E., Quantum Monte Carlo study of the itinerantlocalized model of strongly correlated electrons: Spin-spin correlation functions // Physical Review B - 2016, Vol. 94. - P. 235118.
- Norman, M. R., Kanigel, A., Randeria, M., Chatterjee, U., Campuzano, J. C., Modeling the Fermi arc in underdoped cuprates // Physical Review B - 2007, Vol. 76. - P. 174501.

- Fledderjohann, A., Langari, A., Müller-Hartmann, E., Mütter, K.-H., Ferromagnetism in a hard-core boson model // The European Physical Journal B -2005, Vol. 43. - P. 471.
- Liu, L., Yao, H., Berg, E., White, S. R., Kivelson, S. A., Phases of the Infinite U Hubbard Model on Square Lattices // Physical Review Letters - 2012, Vol. 108. -P. 126406.
- LeBoeuf, D., Doiron-Leyraud, N., Vignolle, B., Sutherland, M., Ramshaw, B. J., Levallois, J., Daou, R., Laliberté, F., Cyr-Choinière, O., Chang, J., Jo, Y. J., Balicas, L., Liang, R., Bonn, D. A., Hardy, W. N., Proust, C., Taillefer, L., Lifshitz critical point in the cuprate superconductor YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>y</sub> from high-field Hall effect measurements // Physical Review B - 2011, Vol. 83. - P. 054506.
- Yang, H.-B., Rameau, J. D., Pan, Z.-H., Gu, G. D., Johnson, P. D., Claus, H., Hinks,
   D. G., Kidd, T. E., Reconstructed Fermi Surface of Underdoped Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>8+δ</sub>
   Cuprate Superconductors // Physical Review Letters 2011, Vol. 107. P. 047003.
- 42. Comin, R., Frano, A., Yee, M. M., Yoshida, Y., Eisaki, H., Schierle, E., Weschke, E., Sutarto, R., He, F., Soumyanarayanan, A., He, Y., Tacon, M. L., Elfimov, I. S., Hoffman, J. E., Sawatzky, G. A., Keimer, B., Damascelli, A., Charge Order Driven by Fermi-Arc Instability in Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2-x</sub>La<sub>x</sub>CuO<sub>6+δ</sub> // Science 2013, Vol. 343. P. 390.
- 43. Harrison, N.Sebastian, S. E., On the relationship between charge ordering and the Fermi arcs observed in underdoped high T<sub>c</sub> superconductors // New Journal of Physics - 2014, Vol. 16. - P. 063025.
- Harrison, N.Sebastian, S. E., Magnetotransport signatures of a single nodal electron pocket constructed from Fermi arcs // Physical Review B - 2015, Vol. 92. - P. 224505.
- Sebastian, S. E., Harrison, N., Altarawneh, M. M., Liang, R., Bonn, D. A., Hardy,
   W. N., Lonzarich, G. G., Fermi-liquid behavior in an underdoped high-T<sub>c</sub> superconductor // Physical Review B 2010, Vol. 81. P. 140505(R).
- 46. Ramshaw, B. J., Sebastian, S. E., McDonald, R. D., Day, J., Tan, B. S., Zhu, Z., Betts, J. B., Liang, R., Bonn, D. A., Hardy, W. N., Harrison, N., Quasiparticle mass enhancement approaching optimal doping in a high-T<sub>c</sub> superconductor // Science -2015, Vol. 348. - P. 317.
- 47. Fujita, K., Hamidian, M. H., Edkins, S. D., Kim, C. K., Kohsaka, Y., Azuma, M.,

Takano, M., Takagi, H., Eisaki, H., i. Uchida, S., Allais, A., Lawler, M. J., Kim, E.-A., Sachdev, S., Davis, J. C. S., Direct phase-sensitive identification of a d-form factor density wave in underdoped cuprates // Proceedings of the National Academy of Sciences - 2014, Vol. 111. - P. E3026.

- 48. Forgan, E. M., Blackburn, E., Holmes, A. T., Briffa, A. K. R., Chang, J., Bouchenoire, L., Brown, S. D., Liang, R., Bonn, D., Hardy, W. N., Christensen, N. B., Zimmermann, M. V., Hücker, M., Hayden, S. M., The microscopic structure of charge density waves in underdoped YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6.54</sub> revealed by X-ray diffraction // Nature Communications - 2015, Vol. 6. - P. 10064.
- Michon, B., Girod, C., Badoux, S., Kačmarčík, J., Ma, Q., Dragomir, M., Dabkowska, H. A., Gaulin, B. D., Zhou, J.-S., Pyon, S., Takayama, T., Takagi, H., Verret, S., Doiron-Leyraud, N., Marcenat, C., Taillefer, L., Klein, T., Thermodynamic signatures of quantum criticality in cuprate superconductors // Nature - 2019, Vol. 567. - P. 218.
- Vignolle, B., Ramshaw, B. J., Day, J., LeBoeuf, D., Lepault, S., Liang, R., Hardy, W. N., Bonn, D. A., Taillefer, L., Proust, C., Coherentc-axis transport in the underdoped cuprate superconductor YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>y</sub> // Physical Review B - 2012, Vol. 85. - P. 224524.