

В. И. Кузьмин¹, С. В. Николаев^{1,2}¹ *Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН
Академгородок, 50, стр. 38, Красноярск, 660036, Россия*² *Сибирский федеральный университет
пр. Свободный, 79, Красноярск, 660041, Россия**valippkuz@gmail.com, svinikolaev@sfu-kras.ru*

ИССЛЕДОВАНИЕ АНОМАЛИЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ДИСПЕРСИИ В МОДЕЛИ ХАББАРДА, t - J - И t - J^* -МОДЕЛИ В РАМКАХ КЛАСТЕРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ X -ОПЕРАТОРОВ *

В рамках кластерной теории возмущений в представлении X -операторов Хаббарда рассчитана энергетическая структура электронов в модели Хаббарда, t - J - и t - J^* -модели с учетом уширения спектральных линий, соответствующего экспериментам по фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением. При энергиях порядка интеграла перескока I в полученных спектрах наблюдаются аномалии, схожие с высокоэнергетическими кинками, наблюдаемыми в экспериментах по фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением. Исследовано поведение высокоэнергетических аномалий электронной дисперсии при изменениях величины допирования и параметра кулоновского отталкивания. Проанализировано влияние трехцентровых коррелированных перескоков на результаты расчета.

Ключевые слова: высокотемпературная сверхпроводимость, электронная структура купратов, высокоэнергетические кинки, кластерные теории, модель Хаббарда, t - J -модель.

Введение

Метод фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) [1] позволяет экспериментально получить распределение спектральной интенсивности электронных состояний в первой зоне Бриллюэна и восстановить одночастичную спектральную функцию $A(k, \omega)$. В частности, данная методика позволила подробно исследовать низкоэнергетическую область (порядка 0,1 эВ ниже уровня Ферми) электронной структуры высокотемпературных сверхпроводников [1–2].

В последние годы развитие экспериментальной техники позволило расширить диапазон доступных в ARPES энергий до величин порядка 1 эВ [3]. ARPES эксперименты показали наличие так называемых высокоэнергетических кинков (далее, для краткости, НЕК – high energy kink) в дисперсии купратных сверхпроводников (для примера см. рис. 1) как дырочного, так и электронного типа в широком диапазоне допирования [3–7].

Однозначного мнения по поводу природы НЕК на данный момент не существует.

* Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 14-12-00061). Материал работы был представлен в качестве доклада на X Сибирском семинаре по сверхпроводимости и физике наноструктур «ОКНО-2014» (Новосибирск).

Тем не менее значительной для формирования таких аномалий представляется роль сильных электронных корреляций. В частности, учет сильных электронных корреляций в рамках однозонной модели Хаббарда позволяет наблюдать в дисперсии квазичастиц основные черты, присущие НЕК [3; 7–8].

В ряде теоретических работ [9–11] изучение высокоэнергетических аномалий в дисперсии квазичастиц проводилось в рамках t - J -модели. Эта модель является эффективной низкоэнергетической моделью для модели Хаббарда и получена из нее во втором порядке теории возмущений по параметру $\frac{t}{U}$ [12], где t – интеграл перескока между ближайшими соседями, U – величина кулоновского отталкивания электронов на одном узле. Однако, строго говоря, каноническое преобразование гамильтониана Хаббарда приводит к гамильтониану так называемой t - J^* -модели, которая содержит в себе слагаемое трехцентровых коррелированных перескоков H_3 , в отличие от стандартной t - J -модели. Данное обстоятельство может накладывать ограничения на применимость t - J -модели как эффективной для модели Хаббарда при энергиях порядка интеграла перескока ($\omega \propto t$) [13]. Отметим, что в рамках t - J -модели поведение типа НЕК наблюдалось только для случая дырочного допирования [10–11]. В рамках модели Хаббарда характерные аномалии наблюдались как при дырочном, так и при электронном допировании [3; 7] аналогично эксперименту.

В данной работе мы рассматриваем особенности высокоэнергетической области спектра электронной структуры, рассчитанной в рамках кластерной теории возмущений [14] в представлении X -операторов Хаббарда с контролируемым спектральным весом [15] в модели Хаббарда и в моделях t - J , t - J^* и обсуждаем применимость последних в контексте описания высокоэнергетических аномалий, характерных для экспериментов ARPES. Следует отметить, что кластерная теория возмущений с контролируемым спектральным весом позволяет точно учесть ближний магнитный порядок в кластере малого размера и при этом сохранять контроль над спектральным весом квазичастиц на всех этапах вычислений.

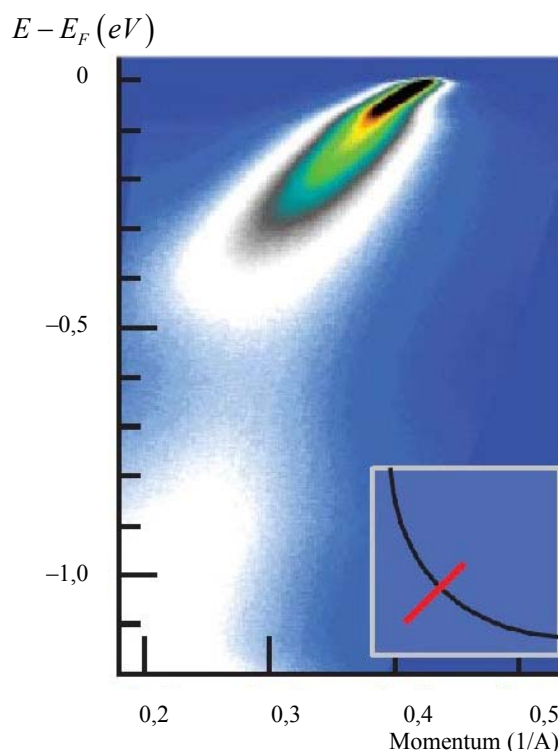


Рис. 1. Распределение спектрального веса, полученное в эксперименте ARPES на соединении $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$. На вставке соответствующее направление в первой зоне Бриллюэна. Взято из работы [4]

Модели и метод

Гамильтониан модели Хаббарда [16] имеет вид

$$H = \sum_{i\sigma} \left\{ (\varepsilon - \mu) n_{i\sigma} + \frac{U}{2} n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} \right\} - \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma},$$

где $a_{i\sigma}^\dagger$ и $a_{i\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электрона со спином σ на узле i , $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$ – оператор числа электронов на узле, μ – химпотенциал, $\bar{\sigma} = -\sigma$, U – кулоновское отталкивание на узле, t_{ij} – интеграл перескока с узла j на узел i и ε задает начало отсчета энергии.

В пределе $U \gg t$ можно перейти к гамильтониану t - J^* -модели [12]:

$$H = -t \sum_{i \neq j, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + J \sum_{i \neq j} \left(\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right) + H_3, \quad (1)$$

где $J = \frac{4t^2}{U}$. Трехцентровые коррелированные перескоки описываются выражением

$$H_3 = -\frac{t^2}{U} \sum_{j,\sigma} \sum_{\delta \neq \bar{\delta}} \left(c_{j+\delta,\sigma}^\dagger n_{j,\bar{\sigma}} c_{j+\delta',\sigma} - c_{j+\delta,\sigma}^\dagger c_{j,\bar{\sigma}}^\dagger c_{j,\sigma} c_{j+\delta',\bar{\sigma}} \right).$$

Квазифермиевские операторы $c_{i\sigma}^\dagger$ и $c_{i\sigma}$ здесь действуют в ограниченном гильбертовом пространстве с исключенными двухчастичными состояниями [17] и удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}^\dagger]_+ = \delta_{ij} \left[\delta_{\sigma\sigma'} (1 - n_{i,\bar{\sigma}}) + (1 - \delta_{\sigma\sigma'}) S_i^{-\sigma} \right],$$

$$[c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma'}^\dagger]_+ = [c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}]_+ = 0.$$

Как правило, слагаемым H_3 пренебрегают и работают с гамильтонианом t-J-модели, однако строгого обоснования такому приближению не существует. Более того, трехцентровые взаимодействия могут играть существенную роль в формировании высокотемпературного сверхпроводящего состояния [18].

Процедура разбиения решетки на кластеры и анализ возможных покрытий для модели Хаббарда подробно описаны в работе [19]. Мы действуем аналогичным образом для t-J*-модели, покрывая решетку трансляциями кластера 2×2 . Заметим, что можно выделить три типа трехцентровых перескоков: между узлами одного, двух и трех соседних кластеров. Учитывая данное обстоятельство, перегруппируем слагаемые в гамильтониане (1). В результате получим:

$$H = \sum_f h^c(f) + \sum_{f,\Delta i} h^{cc}(f, f + \Delta i) + \sum_{f,\Delta i, \Delta j} h^{ccc}(f, f + \Delta i, f + \Delta j).$$

где f , $f + \Delta i$ и $f + \Delta j$ – кластерные индексы.

Проведем процедуру точной диагонализации гамильтониана $h^c(f)$ и на базисе его собственных состояний построим X-операторы Хаббарда $X^{pq} = |p\rangle\langle q|$ [20]. После этого перепишем гамильтониан t-J*-модели в следующем виде:

$$H = \sum_{f,p} E_p X_f^{pp} + \sum_{f,\Delta i,\alpha,\beta} \left\{ t_{\alpha\beta}(f, f + \Delta i) + t_{\alpha\beta}^*(f, f + \Delta i) \right\} X_f^\alpha X_{f+\Delta i}^\beta + \sum_{f,\Delta i,\lambda,\lambda'} w_{\lambda\lambda'}(f, f + \Delta i) X_f^\lambda X_{f+\Delta i}^{\lambda'}$$

$$+ \sum_{f,\Delta i,\Delta j,\alpha,\lambda,\beta} t_{\alpha\beta\lambda}^*(f, f + \Delta i, f + \Delta j) X_f^\alpha X_{f+\Delta i}^\lambda X_{f+\Delta j}^\beta. \quad (2)$$

В формуле (2) E_p – энергия собственного состояния $|p\rangle$; $t_{\alpha\beta}(f, f + \Delta i)$, $t_{\alpha\beta}^*(f, f + \Delta i)$ и $w_{\lambda\lambda'}(f, f + \Delta i)$ – матричные элементы слагаемых гамильтониана в X-представлении, ответственных за перескоки, трехцентровые взаимодействия и обмен соответственно; $t_{\alpha\beta\lambda}^*(f, f + \Delta i, f + \Delta j)$ – матричные элементы трехкластерной части гамильтониана в X-представлении; α, β – квазифермиевские и λ, λ' – квазибозевские корневые векторы.

Для запаздывающей функции Грина

$$D_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = \langle\langle X_{\tilde{\mathbf{k}}}^\alpha | X_{\tilde{\mathbf{k}}}^{-\beta} \rangle\rangle_\omega$$

в приближении Хаббард-I для межкластерных возмущений получаем следующее выражение:

$$\mathbf{D}^{-1}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = (\mathbf{D}^0(\omega))^{-1} - \mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}}), \quad (3)$$

где

$$\mathbf{V}(\tilde{\mathbf{k}}) = \mathbf{T}(\tilde{\mathbf{k}}) + \mathbf{T}^*(\tilde{\mathbf{k}}) + \mathbf{J}, \quad (4)$$

$$D_{\alpha\beta}^0(\omega) = \frac{F(\alpha)}{\omega - \Omega(\alpha)} \delta_{\alpha,\beta}, \quad (5)$$

$$\Omega(\alpha) = \varepsilon_p(N+1) - \varepsilon_q(N) - \mu, \quad (6)$$

$$F(\alpha) \equiv F(p, q) = \langle X^{pp} \rangle + \langle X^{qq} \rangle. \quad (7)$$

В формуле (4) $\mathbf{T}(\tilde{\mathbf{k}})$, $\mathbf{T}^*(\tilde{\mathbf{k}})$, и \mathbf{J} – матрицы перескоков, трехцентровых взаимодействий и обменного взаимодействия соответственно. В (3)–(7) $\mathbf{D}^0(\omega)$ – локальная функция Грина, $F(\alpha)$ – фактор заполнения, вектор $\tilde{\mathbf{k}}$ определен в редуцированной зоне Бриллюэна.

Связь между электронной функцией Грина и функцией $D_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega)$ определяется соотношением [21]

$$G_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{N_c} \sum_{\alpha\beta} \sum_{i,j=1}^{N_c} \gamma_{\sigma i}(\alpha) \gamma_{\sigma j}(\beta) e^{-ik(r_i - r_j)} D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega), \quad (8)$$

где вектор \mathbf{k} принадлежит исходной зоне Бриллюэна и учтено, что $D_{\alpha\beta}(\tilde{\mathbf{k}}, \omega) = D_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega)$ [22]. В (8) N_c – количество узлов в кластере, равное четырем в нашем случае, $\gamma_{\sigma i}(\alpha)$ – матричные элементы опе-

ратора $c_{i\sigma}$ в представлении кластерных операторов Хаббарда.

Аналогично работе [15] введем f -фактор для контроля полного спектрального веса фермиевских квазичастиц:

$$f \equiv \frac{\sum_{\alpha} |\gamma_{i\sigma}(\alpha)|^2 F(\alpha)}{(1+p)/2}, \quad (9)$$

где p – степень дырочного допирования, определяющая концентрацию электронов на

узел $\langle n_{i\sigma} \rangle = \frac{1-p}{2}$. Спектральная функция

$$A_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\delta \rightarrow +0} (\text{Im} G_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega + i\delta + \mu)) \quad (10)$$

удовлетворяет соотношению

$$\int d\omega A_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = \left\langle [c_{k\sigma}, c_{k\sigma}^+]_{+} \right\rangle = f(1+p)/2.$$

При учете всех корневых векторов α в (9) $f = 1$. В наших вычислениях не учитывается часть переходов таким образом, что учет оставшихся приводит к выполнению условия $f \geq 0,995$, что позволяет существенно сократить время вычислений без значительного влияния на конечный результат.

Допирование дырками осуществляется по схеме, приведенной в работе [19]. Для кластера с четырьмя узлами схема выглядит следующим образом. Гильбертово пространство состояний кластера разбивается на сектора с определенным числом электронов в кластере N . Далее определяются нижние энергетические термы в секторах гильбертова пространства с $N = 4$ и $N = 3$ и устанавливается вероятность их заселения в зависимости от величины дырочного допирования на узел p , как $1 - x$ и x соответственно. В данном случае четырехузельного кластера $x = 4p$ и в дальнейших расчетах мы ограничиваемся максимальной величиной допирования $p = 0,25$. Для увеличения степени допирования необходимо учесть следующие сектора гильбертова пространства.

Результаты

При обсуждении результатов, полученных нами в модельных расчетах, под «кинком» будем понимать резкое изменение на-

клона дисперсионной кривой с провалом в величине спектрального веса, качественно схожее с высокоэнергетическими аномалиями, наблюдаемыми в экспериментах ARPES (см. рис. 1).

Наши результаты для распределения спектрального веса при $U = 12$ вдоль направления $(0,0) \rightarrow (\pi,\pi)$ представлены на рис. 2. Пики спектральной функции аппроксимированы лоренцианом с полушириной $\delta = 0,1t$ (см. формулу (10)) для соответствия разрешению ARPES. Можно заметить, что для модели Хаббарда (рис. 2, б) с допированием становится явно заметным кинк в дисперсии при энергии около $\omega = -6t$. Результаты в рамках t -J-модели (рис. 2, а) имеют только качественное сходство с вышеупомянутым поведением: кинк в t -J-модели оказывается при допировании 0,075 выше по энергии примерно на 0,5 эВ, чем в модели Хаббарда, и имеет большую протяженность по энергии. Сравнивая рис. 2, б и в, видим, что учет трехцентровых коррелированных перескоков обеспечивает хорошее количественное согласие в поведении высокоэнергетических аномалий в модели Хаббарда и t -J*-модели.

На рис. 3 представлены результаты для $U = 6$. Естественно ожидать, что различие между результатами в t -J-модели (рис. 3, а) и модели Хаббарда (рис. 3, б) увеличится при данном значении кулоновского отталкивания. Действительно, распределение спектрального веса для t -J-модели в целом существенно отличается от полученного для модели Хаббарда. Высокоэнергетический кинк в t -J-модели смещен при допировании 0,075 примерно на $1t$ (около $\omega = -3,5t$ в модели Хаббарда), протяженность кинка по энергии также оказывается сильно завышенной по сравнению с кинком в модели Хаббарда. Тем не менее при данном U учет трехцентровых перескоков в t -J*-модели дает количественное согласие с моделью Хаббарда и позволяет получить кинк той же протяженности по энергии и при том же значении.

Заключение

Таким образом, наш расчет показал, что кластерная теория возмущений в представлении X-операторов Хаббарда позволяет обнаружить кинки, схожие с высокоэнергетическими аномалиями в ARPES экспери-

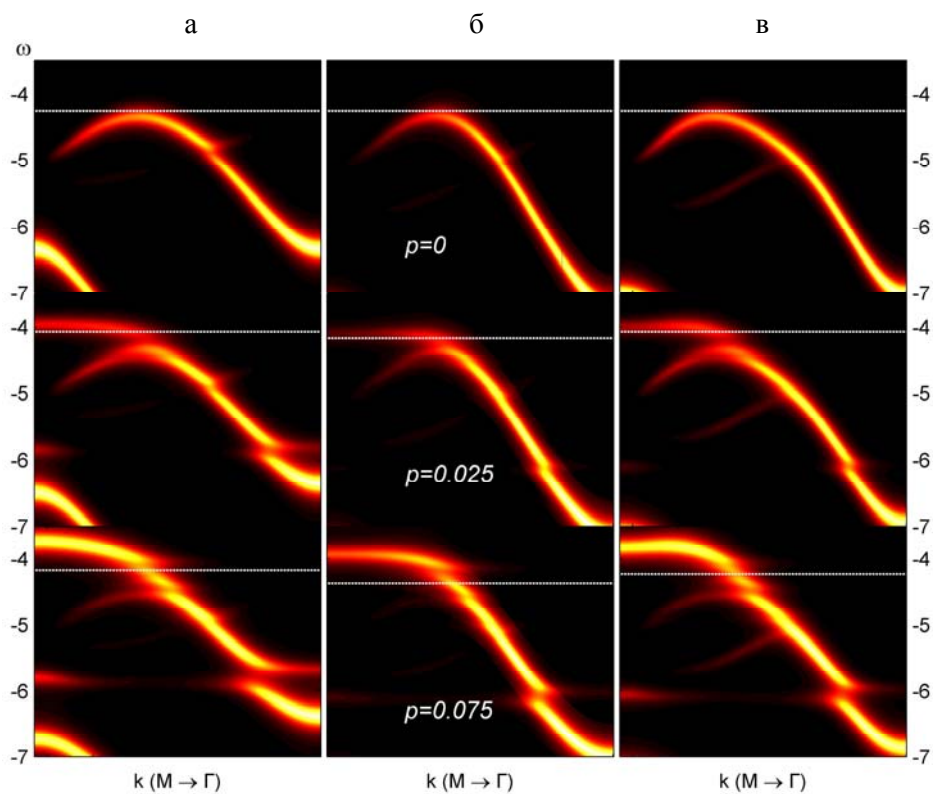


Рис. 2. Изменение закона дисперсии $\omega(k)$ с допированием p для t - J -модели (а), нижней хаббардовской зоны модели Хаббарда (б) и t - J^* -модели (в) при $U = 12$ в нодальном направлении первой зоны Бриллюэна. Здесь и ниже пунктирной прямой обозначено положение химпотенциала, $\Gamma = (0, 0)$, $M = (\pi, \pi)$, энергия указана в единицах интеграла перескока t

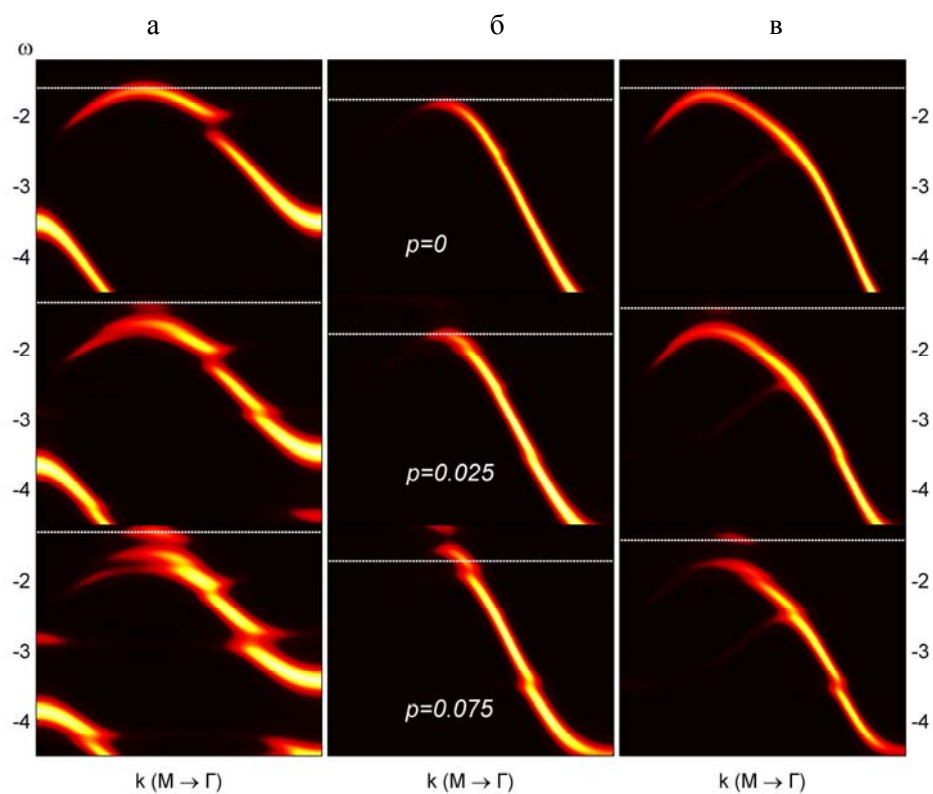


Рис. 3. То же, что и на рис. 2 при $U = 6$

ментах, как в модели Хаббарда, так и в моделях t - J и t - J^* . Причем в нашем случае природа этих дисперсионных аномалий связана только с электронными корреляциями, что согласуется с результатами работы [23]. Однако между кинками в модели Хаббарда и t - J -модели мы видим существенные количественные различия. В рамках t - J^* -модели, наоборот, видно количественное согласие в протяженности по энергии и положению кинков с теми, что получены в модели Хаббарда. Вследствие этого мы делаем заключение о том, что учет трехцентровых взаимодействий в низкоэнергетической эффективной модели является важным при исследовании высокоэнергетических аномалий электронной дисперсии в спектрах ВТСП купратов.

Список литературы

1. *Damascelli A., Hussain Z., Shen Z.* Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors // *Rev. Mod. Phys.* 2003. Vol. 75. No. 2. P. 473–541.
2. *Armitage N. P., Fournier P., Greene R. L.* Progress and perspectives on electron-doped cuprates // *Rev. Mod. Phys.* 2010. Vol. 82. No. 3. P. 2421–2487.
3. *Schmitt F., Moritz B., Johnston S., Mo S.-K., Hashimoto M., Moore R. G., Lu D.-H., Motoyama E., Greven M., Devereaux T. P., Shen Z.-X.* High-energy anomaly in $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ investigated by angle-resolved photoemission spectroscopy and quantum Monte Carlo simulations // *Phys. Rev. B.* 2011. Vol. 83. No. 19. P. 195123-1–195123-10.
4. *Zhang W., Liu G., Meng J., Zhao L., Liu H., Dong X., Lu W., Wen J. S., Xu Z. J., Gu G. D., Sasagawa T., Wang G., Zhu Y., Zhang H., Zhou Y., Wang X., Zhao Z., Chen C., Xu Z., Zhou X. J.* High Energy Dispersion Relations for the High Temperature $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ Superconductor from Laser-Based Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy // *Phys. Rev. Lett.* 2008. Vol. 101. No. 1. P. 017002-1–017002-4.
5. *Valla T., Kidd T. E., Yin W.-G., Gu G. D., Johnson P. D., Pan Z.-H., Fedorov A. V.* High-Energy Kink Observed in the Electron Dispersion of High-Temperature Cuprate Superconductors // *Phys. Rev. Lett.* 2007. Vol. 98. No. 16. P. 167003–167003-4.
6. *Vishik I. M., Barišić N., Chan M. K., Li Y., Xia D. D., Yu G., Zhao X., Lee W. S., Meevasana W., Devereaux T. P., Greven M., Shen Z.-X.* Angle-resolved photoemission spectroscopy study of $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ // *Phys. Rev. B.* 2014. Vol. 89. No. 19. P. 195141–195141-9.
7. *Moritz B., Schmitt F., Meevasana W., Johnston S., Motoyama E. M., Greven M., Lu D. H., Kim C., Scalettar R. T., Shen Z.-X., Devereaux T. P.* Effect of strong correlations on the high energy anomaly in hole- and electron-doped high- T_c superconductors // *New J. Phys.* 2009. Vol. 11. No. 9. P. 093020-1–093020-12.
8. *Sakai S., Motome Y., Imada M.* Doped high- T_c cuprate superconductors elucidated in the light of zeros and poles of the electronic Green's function // *Phys. Rev. B.* 2010. Vol. 82. No. 13. P. 134505-1–134505-16.
9. *Manousakis E.* String excitations of a hole in a quantum antiferromagnet and photoelectron spectroscopy // *Phys. Rev. B.* 2007. Vol. 75. No. 3. P. 035106-1–035106-10.
10. *Zemljic M. M., Prelovsek P., Tohyama T.* Temperature and Doping Dependence of the High-Energy Kink in Cuprates // *Phys. Rev. Lett.* 2008. Vol. 100. No. 3. P. 036402-1–036402-4.
11. *Tan F., Wang Q.-H.* Two-Mode Variational Monte Carlo Study of Quasiparticle Excitations in Cuprate Superconductors // *Phys. Rev. Lett.* 2008. Vol. 100. No. 11. P. 117004-1–117004-4.
12. *Chao K. A., Spalek J. and Oles A. M.* Kinetic exchange interaction in a narrow S-band // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1977. Vol. 10. No. 10. P. L271-L276.
13. *Kuz'min V. I., Nikolaev S. V., Ovchinnikov S. G.* Comparison of the electronic structure of the Hubbard and t - J -models within the cluster perturbation theory // *Phys. Rev. B.* 2014. Vol. 90. No. 24. P. 245104-1–245104-5.
14. *Sénéchal D., Perez D., Pioro-Ladrière M.* Spectral Weight of the Hubbard Model through Cluster Perturbation Theory // *Phys. Rev. Lett.* 2000. Vol. 84. No. 3. P. 522–525.
15. *Николаев С. В., Овчинников С. Г.* Кластерная теория возмущений для модели Хаббарда с точным учетом ближнего магнитного порядка в кластере 2×2 // *ЖЭТФ.* 2010. Т. 138, вып. 4. С. 717–728.
16. *Hubbard J.* Electron Correlations in Narrow Energy Bands // *Proc. R. Soc. Lond. A.* 1963. Vol. 276. No. 1365. P. 238–257.
17. *Изюмов Ю. А.* Сильно коррелированные электроны: t - J -модель // *УФН.* 1997. Т. 167, вып. 5. С. 465–497.

18. Вальков В. В., Валькова Т. А., Дзебисашивили Д. М., Овчинников С. Г. Сильное влияние трехцентровых взаимодействий на формирование сверхпроводимости $d_{x^2-y^2}$ -симметрии в t - J^* -модели // Письма в ЖЭТФ. 2002. Т. 75, вып. 8. С. 450–453.

19. Николаев С. В., Овчинников С. Г. Влияние дырочного допирования на электронную структуру и поверхность Ферми в модели Хаббарда в рамках кластерной теории возмущений с контролируемым спектральным весом // ЖЭТФ. 2012. Т. 141, вып. 1. С. 135–150.

20. Зайцев Р. О. Обобщенная диаграммная техника и спиновые волны в анизотропном антиферромагнетике // ЖЭТФ. 1975. Т. 68, вып. 1. С. 207–215.

21. Sénéchal D., Perez D., Plouffe D. Cluster perturbation theory for Hubbard models // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 66. No. 7. P. 075129-1–075129.

22. Maier T., Jarrell M., Pruschke T., Hettler M. H. Quantum cluster theories // Rev. Mod. Phys. 2005. Vol. 77. No. 3. P. 1027–1080.

23. Byczuk K., Kollar M., Held K., Yang Y.-F., Nekrasov I.A., Pruschke Th., Vollhardt D. // Nature Physics. 2007. Vol. 3. No. 3. P. 168–171.

Материал поступил в редколлегию 25.12.2014

V. I. Kuz'min¹, S. V. Nikolaev²

¹ Institute of Physics of SB RAS
Akademgorodok, 50, building 38, Krasnoyarsk, 660036, Russian Federation

² Siberian Federal University
79 Svobodnyi Ave., Krasnoyarsk, 660041, Russian Federation

valippkuz@gmail.com, svinikolaev@sfu-kras.ru

INVESTIGATION OF ANOMALIES IN THE ELECTRONIC DISPERSION OF THE HUBBARD MODEL, t - J AND t - J^* MODELS WITHIN THE CLUSTER PERTURBATION THEORY IN THE X-OPERATOR REPRESENTATION

The electronic structure with the spectral line broadening corresponding to the angle-resolved photoemission spectroscopy resolution has been calculated for the Hubbard model, t - J and t - J^* models within the norm-conserving cluster perturbation theory. The electronic dispersion anomalies similar to the high-energy kinks observed in the angle-resolved photoemission spectroscopy experiments are obtained at the energy scale of order of the hopping integral t . The doping dependence of the high-energy anomalies for different Coulomb repulsion values is discussed. The influence of the three-site correlated hopping on the results is analyzed.

Keywords: high-temperature superconductivity, electronic structure of cuprates, high-energy kinks, cluster perturbation theory, the Hubbard model, t - J -model