

Общая характеристика работы.

Актуальность работы.

Одна из самой привлекательных особенностей физики конденсированного состояния – способность объяснять и даже предсказывать свойства материалов, которые составляют наше непосредственное окружение. Существенный прорыв в этом направлении был сделан в середине 60-тых, когда Хоэнберг, Кона и Шем сформулировали теорию функционала плотности (*DFT*). Поскольку *DFT*, имеющий дело с электронной плотностью $n(\vec{r})$ в формулировке Хоэнберга-Кона или с $n(\vec{r})$ и одночастичными волновыми функциями $\Psi_j(\vec{r})$ в формулировке Кона-Шема (N -частичным уравнением Шредингера для специфического атомного окружения), эту теорию относят к первопринципным или *ab-initio* типам теоретических исследований. Вместе с приближением локальной плотности (*LDA*) или обобщенным градиентным приближением (*GGA*) для первоначально неизвестной величины энергии обменной корреляции, *DFT* обеспечивает количественное описание энергии основного состояния и зонной структура различных атомов, молекул, и металлов (см. например [1]).

Несмотря на успехи *DFT* подхода в исследовании твердых тел, основу которых составляют s и p атомы, *LDA* оказался не в состоянии описать переход металл-диэлектрик (*ПМД*) в окислах переходных металлов с частично заполненной $3d$ -оболочкой. Наиболее известная неудача состоит в том, что в рамках *LDA* подхода недопированный купрат La_2CuO_4 должен проявлять металлические свойства, тогда как на самом деле это - диэлектрик. Суть проблемы – наличие неэкранированного локального кулоновского взаимодействия (хаббардовское отталкивание) [2]. С точки зрения теории среднего поля, если хаббардовское отталкивание U много больше, чем ширина зоны W в однозонной электронной

системе, последняя расщепляется на две хаббардовские подзоны разделенные энергетической щелью порядка U . Спектральный вес квазичастиц перераспределяется между этими подзонами. В случае половинного заполнения, когда число частиц равняется числу состояний, уровень Ферми - в щели, и система - диэлектрик. В мультиорбитальной системе, наряду с хаббардовским отталкиванием имеются также локальные взаимодействия, подобные обмену Хунда J_H и межорбитальному отталкиванию V , обеспечивая богатый набор физических свойств реальных материалов. Как открытие хаббардовской щели, так и превалирующая роль локальных взаимодействий в окрестности половинного заполнения остаются за рамками возможностей LDA и GGA приближений.

Существуют несколько обобщений LDA , которые включают или просто моделирует эффекты локальных взаимодействий. Это $LDA+U$ [3] и $SIC-LSDA$ (self-interaction corrected local spin density approximation) [4]. Оба метода рассматривают локальные взаимодействия в приближении Хартри-Фока и приводят к антиферромагнитному диэлектрику в качестве основного состояния для La_2CuO_4 в противоположность к LDA расчетам, однако природа диэлектрической щели указана неправильно. Как в $LDA+U$, так и в $SIC-LSDA$ щель формируется в виде расщепления одноэлектронных состояний, благодаря спиновой или орбитальной поляризации материала в целом. Поэтому, в этих расчетах в парамагнитной фазе ($ПМ$) выше температуры Нееля (T_N) La_2CuO_4 будет находиться в металлическом состоянии, несмотря на наличие сильных электронных корреляций ($СЭК$) $U > W$. Имеется еще один существенный недостаток в *ab initio* расчетах, а именно, они игнорируют перераспределение спектральных весов между хаббардовскими подзонами. Этот эффект был уже включен в другой подход к вычислениям электронного спектра сильнокоррелированных систем - $LDA+DMFT$ ($LDA+dynamical\ mean\ field\ theory$)

[5-8]. Последний метод основывается на последовательной процедуре, где *LDA* зонная структура используется для того, чтобы вычислить значение собственно-энергетической части электрона в *DMFT* приближении. *DMFT* подход использует тот факт, что в пределе бесконечной размерности $d \rightarrow \infty$ в модели Хаббарда, собственно-энергетическая часть не зависит от импульса $\Sigma(\vec{k}, \omega) = \Sigma(\omega)$ [9-11]. Вычисленная частотная зависимость в $d \rightarrow \infty$ пределе несет важную информацию о динамических корреляциях и мотт-хаббардовском переходе. С другой стороны, пространственные корреляции становятся критически важными в низкоразмерных системах, подобно слоистым *BTCII* купратам. Именно поэтому правильная дисперсия и спектральная интенсивность для этих систем не могут быть получены в рамках *LDA+DMFT* подхода. Естественные обобщения этого метода *LDA+cluster* или *cellular DMFT (CDMFT)* [12-15], и *SDFT* (spectral density function theory) [16], обеспечивая зависимость собственно-энергетической части от импульса, таким образом, учитывают нелокальные корреляции.

Представленный в диссертации *LDA+GTB* метод – это не только один из подходов к изучению модели Хаббарда. С самого начала обобщенный метод сильной связи (*GTB* - generalized tight-binding method) был предложен [17], чтобы обобщить микроскопические зонные вычисления, с целью учесть *СЭК* при работе с диэлектриками Мотта-Хаббарда, к которым можно также отнести окислы переходных металлов. Подобно обычному методу сильной связи (tight-binding (*TB*-) method), мы стартуем с локальных электронных состояний (с соответствующими симметрией и химией, а также многоорбитальными эффектами), затем посредством Фурье-преобразования переходим в *k*-пространство и вычисляем зонную структуру. Из-за наличия *СЭК* мы не можем использовать одноэлектронные состояния, в качестве локальных фермионов в *d*-

орбитальной системе, поэтому вводим понятие хаббардовской квазичастицы – возбуждения между многоэлектронными конфигурациями d^n и $d^{n\pm 1}$, в отличие от обычного TB . Другими словами, GTB - сильно коррелированная версия TB метода.

Первые компьютерные коды были созданы и успешное приложение GTB расчетов было проделано для купратов в [18]. В первоначальной версии использовалась многозонная pd модель для La_2CuO_4 [19] с большим количеством эмпирических параметров в исходном гамильтониане. Для того чтобы избавиться от произвола в выборе параметров, объединенными усилиями исследовательских групп из г.Красноярска и г.Екатеринбурга был разработан гибридный $LDA+GTB$ метод [20]. В последствие, подобные идеи использовались, с целью изучения электронной структуры манганитов $La_{1-x}M_xMnO_3$ ($M=Sr, Ca, Ba$) [21] и кобальтитов $LaCoO_3$ [22]. $LDA+GTB$ можно рассматривать как прямое развитие атомного хаббардовского подхода [2] на реальные материалы, такие как окислы $3d$ -металлов. В идейном и математическом плане GTB – это специфическая версия кластерной теории возмущений в представлении X -операторов Хаббарда [23].

Таким образом, в случае магнитоупорядоченных оксидов $3d$ -металлов, где пространственные корреляции и сильные электронные корреляции играют важную роль в физике основного состояния, теоретическое исследование электронной структуры представляет на сегодняшний день актуальную, увлекательную задачу, далекую от своего окончательного решения. С точки зрения практических приложений это также весьма насущная задача, направленная на выяснение физических механизмов высокотемпературной сверхпроводимости ($ВТСП$) в купратах и колоссального магнитосопротивления ($КМС$) в манганитах.

Цель диссертационной работы

1. Разработка теоретического подхода - обобщенного метода сильной связи и его первопринципного варианта $LDA+GTB$ к исследованию электронной структуры оксидов переходных элементов, с учетом $CЭК$;
2. Систематическое исследование электронной структуры и свойств наиболее актуальных оксидов переходных элементов: $BTCP$ купратов и манганитов с эффектом колоссального магнитосопротивления в рамках $LDA+GTB$ метода.

Научная новизна результатов представленных в диссертации:

В работах, посвященных исследованию заявленных целей диссертации, впервые:

1. Развита многоэлектронный метод $LDA+GTB$ для расчета электронной структуры систем с $CЭК$.
2. Исследованы механизмы формирования диэлектрического состояния в недопированных и допированных случаях.
3. Рассчитаны электронные структуры и фотоэмиссионные спектры $ARPES$ недопированных La_2CuO_4 и Nd_2CuO_4 купратов.
4. Показано изменение закона дисперсии на потолке валентной зоны при одноосной деформации CuO_6 октаэдра.
5. Вычислен параметр обменного взаимодействия в La_2CuO_4 , с учетом всех возбужденных состояний в двухчастичном секторе гильбертова пространства элементарной ячейке.
6. Показано существование внутрищелевых состояний магнитной природы при допировании купратов n - и p -типа. Пиннинг химпотенциала на этих состояниях может приводить к зарядовой неустойчивости.
7. Рассмотрены одноэлектронный и многоэлектронный механизмы концентрационной зависимости зонной структуры при допировании.

8. Расчет электронной структуры $LaMnO_3$ показал диэлектрическое состояние как в $A\Phi M$, так и $ПМ$ фазах.
9. Получено полуметаллическое состояние со 100%-ой поляризацией спинов для допированных манганитов p -типа.
10. Показано, что при ΦM - $ПМ$ переходе зона носителей сужается в два раза сильнее, чем в известном механизме двойного обмена.
11. Рассчитаны зонная структура и спектры $ARPES$ для допированных манганитов p -типа.
12. Найдены различия в природе отрицательного магнисопротивления допированных манганитов и халькогенидных шпинелей хрома.

Научная и практическая значимость работы.

В практическом плане работа представляет интерес, так как последовательно, на интуитивно понятном языке, вскрывает природу квазичастиц в значимых для оксидной электроники и спинтроники материалах, стимулирует дальнейшие теоретические и экспериментальные исследования в этом направлении.

Достоверность полученных в диссертационной работе результатов обеспечивается применением методов, широко апробированных для сильно-коррелированных систем (представление X -операторов, нуль-петлевое приближение Хаббард-I, и др.), обоснованным расчетом параметров гамильтониана с помощью LDA вычислений, а также приближений в заданных областях параметров. В вычислениях учтены структурный мотив исследуемых материалов, химическая и физическая специфика содержащихся в них элементов, а именно спиновые и орбитальные многоэлектронные конфигурации соответствующих ионов. В качестве основной исходной идеи, характеризующей область применения развитого подхода, фигурирует простая возможность наблюдения одноионных dd -переходов с соответствующими правилами запрета

по четности и спину, в окне прозрачности исследуемых материалов – оксидов переходных металлов.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

1. Процедура построения нового теоретического подхода - обобщенного метода сильной связи и его первопринципного варианта *LDA+GTB* к исследованию электронной структуры оксидов переходных элементов, с учетом *СЭК*;
2. Систематическое исследование электронной структуры наиболее актуальных оксидов переходных элементов: *BTCP* купратов и *KMC* манганитов в рамках *LDA+GTB* метода.

Апробация работы. Различные разделы этой работы были неоднократно представлены и обсуждались в течение нескольких лет (с 1998г. по 2011г.) на основных профильных отечественных и зарубежных конференциях: *Коуровка*, *ESTMAG*, *ФПС*, *ОКНО*, *MISM*, *SCES*, *ICM*, *ICTP* и др., а также опубликованы в научных изданиях: *Письма в ЖЭТФ*, *ЖЭТФ*, *УФН*, *ФТТ*, *Phys.Rev.B*, *JMMM*, *Springer series: Solid State Sciences* и др. Работа докладывалась на семинарах: ИФ им. Л.В. Киренского СО РАН, ФИ им.П.Н. Лебедева АН и ИФП им. П.Л. Капицы РАН. Число публикаций по теме диссертации: 32

Личный вклад автора

Разработана и реализована современная версия *GTB* метода и его первопринципной модификации *LDA+GTB*. Проведены расчеты электронной структуры недопированных и слабодопированных купратов и манганитов.

Соответствие диссертации научной специальности

Диссертация соответствует специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния. Представленные в ней результаты соответствуют: п.1 «Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и в том числе материалов световодов как в твердом, так и в

аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления»; п.4 «Теоретическое и экспериментальное исследование воздействия различных видов излучений, высокотемпературной плазмы на природу изменений физических свойств конденсированных веществ»; п.5 «Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения» Паспорта специальности.

Структура и объем диссертации.

Настоящая диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка цитируемой литературы и одного приложения. Работа включает в себя 332 страницы машинописного текста, с иллюстрациями и цитированной литературой.

Содержание работы

Во-введении обоснована актуальность выбора темы, сформулирована цель диссертационной работы. Здесь же описана структура диссертационной работы.

В первой главе проведен краткий обзор $LDA+U$ и $LDA+DMFT$ основных гибридных методов расчета электронной структуры $CЭК$ материалов. Отмечены основные достоинства и недостатки этих подходов.

При известных достоинствах *ab initio* подхода и быстром численном алгоритме, в расчетах $LDA+U$ с кулоновским взаимодействием используется расщепление его операторной структуры, соответствующее приближению Хартри-Фока, которое не может рассматриваться в качестве удовлетворительного, так как не воспроизводит основные особенности электронного спектра в материалах с $CЭК$. Более обоснованной выглядит $LDA+DMFT$ схема расчета, в которой, однако, в силу специфики основного приближения, отсутствует учет пространственных флуктуаций и что ограничивает область применения таких расчетов, в частности,

для квазидвумерных структур *ВТСИ* купратов. В заключительном третьем разделе этой главы приведен обзор исследований электронной структуры материалов с *СЭК*, использующих кластерный подход и многочастичное представление с алгеброй *X*-операторов Хаббарда.

Во-второй главе излагается *LDA+GTB* подход к расчету электронной структуры *СЭК* материалов. Основной исходной точкой зрения для нашего подхода является наличие в оксидах переходных элементов орбитальных и спиновых степеней свобод (схема Рассел-Саундерса), что можно непосредственно контролировать, наблюдая спектр внутриионных *dd*-переходов с правилами отбора по спину и четности. На этом пути оказывается полезным представление Челлена-Лемана для одночастичной функции Грина (*ФГ*) (см. например [24]), где последняя может быть выражена через матричные элементы одноэлектронных операторов $a_{k\sigma}^{(+)}$ в базисе из собственных векторов гамильтониана *H*. Согласно [24] одночастичная *ФГ* $G_{\sigma} = \langle\langle a_{k\sigma} | a_{k\sigma}^{+} \rangle\rangle_{\omega}$ может быть записана как

$$G_{\sigma}(k, \omega) = \sum_m \left(\frac{A_m(k, \omega)}{\omega - \Omega_m^+} + \frac{B_m(k, \omega)}{\omega - \Omega_m^-} \right) \quad (1)$$

где квазичастичные энергии:

$$\Omega_m^+ = E_m(N+1) - E_0(N) - \mu, \quad \Omega_m^- = E_0(N) - E_m(N-1) - \mu, \quad (2)$$

а спектральный вес равен:

$$A_m(k, \omega) = |\langle 0, N | a_{k\sigma} | m, N+1 \rangle|^2, \quad B_m(k, \omega) = |\langle m, N-1 | a_{k\sigma} | 0, N \rangle|^2. \quad (3)$$

Здесь $|m, N\rangle$ это *m*-ое собственное состояние системы *N* электронов, $H|m, N\rangle = E_m|m, N\rangle$. Формально определение (1) может рассматриваться как сумма по различным квазичастицам с индексом *m*. Индекс *m* нумерует квазичастицы с электрическим зарядом *e*, энергией $\Omega_m^+(\Omega_m^-)$, и спектральным

весом $A_m(B_m)$. По сути, электрон представлен суперпозицией квазичастиц с зарядом e , некоторой энергией и спектральным весом. Понятно, что без указания на природу собственных состояний $|m, N\rangle$ это представление практически бесполезно. Полезной подсказкой к происхождению базиса из собственных векторов $|m, N\rangle$ гамильтониана H являются оптические исследования фторидов, хлоридов и оксидов переходных элементов [25-26], в окне прозрачности которых можно наблюдать спектр dd -переходов с соответствующими правилами отбора.

В GTB подходе структура $\Phi\Gamma$ имеет вид аналогичный (1), а функции $|n, N_e\rangle$ относятся к элементарной ячейке ($\mathcal{E}\mathcal{Y}$) с различным N_e числом частиц в нем. Величиной аналогичной хаббардовскому отталкиванию в $\mathcal{E}\mathcal{Y}$ является величина $U_{eff}^{mnl} \sim E(|m, N_e + 1\rangle) + E(|l, N_e - 1\rangle) - 2E(|n, N_e\rangle)$. Все межъячеечные взаимодействия учитываются по теории возмущения. Малый параметр - отношение величин эффективного переноса $t_{eff, mn}(\vec{k})$ и U_{eff}^{mnl} . В отличие от модели Хаббарда, величина малого параметра зависит от природы квазичастицы и вида кристаллического потенциала. Как следствие, метод получается орбитально зависимым, потому что не для всех $|m, N_e\rangle$ имеет место малый параметр, и образуются хаббардовские квазичастицы. В этой главе приведен также гамильтониан метода, записанный с использованием базиса функций Ванье (ΦB) и представления одноэлектронных операторов через операторы Хаббарда $X_i^{|p\rangle\langle q|}$:

$$c_{i\sigma}^{(+)} = \sum_{pq} \langle \vec{i}p | c_{i\sigma}^{(+)} | \vec{i}q \rangle X_i^{|p\rangle\langle q|}, \quad (4)$$

действующих в пространстве многочастичных состояний $|p\rangle \equiv |m, N\rangle$. Причем ΦB строятся из p и d орбиталей отдельно, так как локальное кулоновское

взаимодействие для этих орбиталей различно. Дан вывод основных уравнений для дисперсии:

$$\left\| \left(E - \Omega_m \right) \delta_{mm} - F(m) t_{eff,mm}(\vec{k}) \right\| = 0 \quad (5)$$

и спектральной интенсивности квазичастичных состояний:

$$A_\sigma(\vec{k}, E) = \left(-\frac{1}{\pi} \right) \sum_\lambda \text{Im} \left(G_{k\sigma}^{\lambda\lambda} \right) = \left(-\frac{1}{\pi} \right) \sum_{\lambda mn} \gamma_{\lambda\sigma}(m) \gamma_{\lambda\sigma}^+(n) \text{Im} D_k^{mn} \quad (6)$$

в нуль-петлевом приближении Хаббард-I. где $G_{k\sigma}^{\lambda\lambda} = \left\langle \left\langle c_{\vec{k}\lambda\sigma}^+ \left| c_{\vec{k}\lambda\sigma}^+ \right. \right\rangle \right\rangle_{E+i0}$. Для

некоторых типов квазичастиц спектральная интенсивность оказывается пренебрежимо малой или даже нулевой, за счет фактора заполнения

$F(m) = \left\langle X_i^{|p| \times |p|} \right\rangle + \left\langle X_i^{|q| \times |q|} \right\rangle = 0$ (начальное и конечное состояния квазичастичного

перехода незаселены). Формулы (5) и (6) представляют собой базис для

исследования электронной структуры материала, в котором *СЭК* играют основную роль в формировании основного состояния и будут использоваться

нами в дальнейшем (главы III и IV), с обобщением на случай двух подрешеток:

магнитной или орбитальной, для исследования электронных свойств *ВТСП*

купратов и *КМС* манганитов. Для учета специфики материала – его химсостава и

структуры, в сотрудничестве с учеными из *ИФМ* и *ИЭ УРО РАН* (Анисимовым

В.И., Некрасовым И.А. и Пчелкиной З.В.), предложен *LDA* метод вычисления

параметров *ГТВ* гамильтониана, определяющий минимальный базис из

блоховских функций в актуальной ΔE окрестности уровня Ферми для

построения соответствующих функций Ванье.

Здесь же показано, что работа только с низколежащими по энергии

многочастичными состояниями $|m, N\rangle$ недостаточна для решения некоторых

физических задач. Например, для расчета обменной константы или вычисления

положения уровня Ферми в материалах с *СЭК*.

Влияние правил отбора на общее число валентных состояний при вычислении матричных элементов разложения электрона (дырки) на квазичастицы (4) и, как следствие, на характер основного состояния (металл или диэлектрик) разобрано в приложении П.2 . Показано, что при наличии запрета на квазичастичные дырочные состояния с наименьшей энергией связи – frs состояния,

допированный материал находится в диэлектрическом состоянии (см. Рис.1).

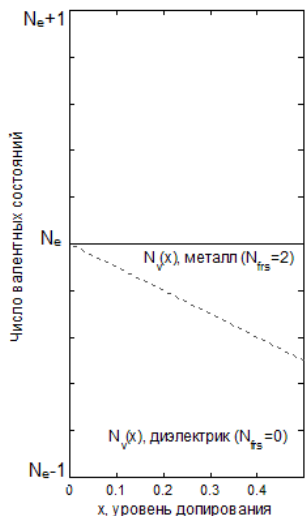


Рис.1 Зависимость числа валентных состояний $N_v(x)$ от уровня допирования материала, при наличии запрета в правилах отбора для (x) на существование дырочных состояний с минимальной энергией связи (frs)- на потолке пакета валентной зон (штриховая линия) и для frs разрешенных состояний (сплошная линия). Число частиц на ЭЯ: $N(x) = N_e - x$.

В третьей главе приведена реализация $LDA+GTV$ подхода для исследования электронной структуры однослойных $BTSP$ купратов n - и p -типов, где использован структурный мотив и химическое содержание CuO_2 слоя. Показано, что соответствие конфигурационного пространства электронной подсистемы CuO_2 слоя конфигурационному пространству модели Хаббарда зависит от положения апического кислорода и возрастает при его удалении от CuO_2 слоя.

Соответствие между пространствами нарушается за счет ${}^3B_{1g}$ триплетных состояний, конкурирующих с синглетом Жанга-Райса A_{1g} за основное состояние, при сближении апического кислорода с CuO_2 слоем (см. Рис.2)

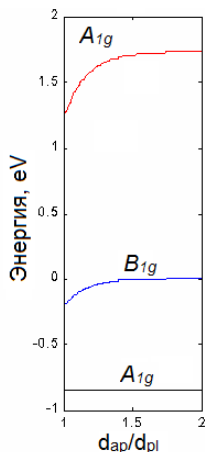


Рис.2 Зависимости энергии $|A_{1g}\rangle$ и $|{}^3B_{1g}\rangle$ двухдырочных состояний от отношения расстояния от атома меди до апического кислорода к аналогичному расстоянию до плоскостного кислорода - d_{ap}/d_{pl} , где $\Delta_d = 2eV$ и $\Delta_{ap} = 0.5eV$

Соответствующий вклад от этих состояний в валентной зоне зафиксирован в окрестности $(\pi, 0)$ точки зоны Бриллюэна. Механизм появления триплетных состояний позволил идентифицировать эффекты химического сжатия в *ARPES* спектрах диэлектрических составов $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_{8+\delta}$ с различной степенью замещения $Ca^{2+} \leftrightarrow Y^{3+}$ ($0.92 \geq x \geq 0.55$). Показано также, что в *AФМ* фазе недопированных купратов на потолке валентной зоны и на дне зоны проводимости образуются внутрищелевые (*in-gap*) состояния с нулевой спектральной плотностью, связанные с наличием *AФМ* упорядочения (см. Рис.3).

Проведены расчеты спектральной интенсивности квазичастичных состояний по всей зоне Бриллюэна (*ЗБ*) и анализ четности квазичастичных состояний в симметричных точках *ЗБ*. Результаты расчетов согласуются с результатами линейно поляризованных *ARPES* исследований *ВТСП* материалов.

Показано, что форма наблюдаемой в *ARPES* “остаточной поверхности Ферми” в диэлектрических составах оксихлоридов $Ca_2CuO_2Cl_2$ и $Sr_2CuO_2Cl_2$ формально

совпадает с \vec{k} -областью вклада квазичастиц, образованных с участием A_{1g} состояний.

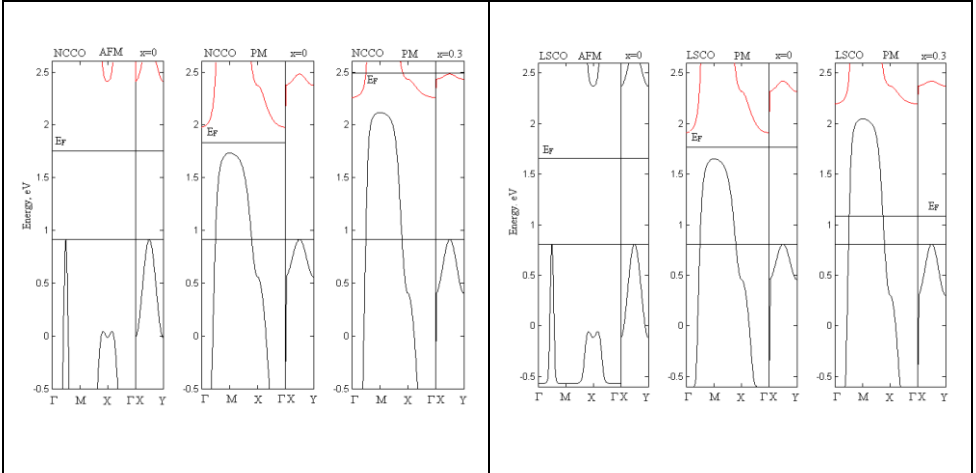


Рис.3. LDA+GTB дисперсия в NCCO в АФМ ($x=0$) и ПМ ($x=0;0.3$) фазах. Начало отсчета по вертикальной оси соответствует энергии d_x орбитали.

Рис.4. LDA+GTB дисперсия в LSCO в АФМ ($x=0$) и ПМ ($x=0;0.3$) фазах. Щель (непрямая) сильно сокращается ПМ фазе вплоть до величины $E_g \sim 0.1$ eV при $x=0.3$.

Рассчитанная константа обменного взаимодействия $J^{eff} \approx 0.15eV$ в недопированных ВТСП материалах находится в хорошем согласии с величиной, определенной из экспериментов по неупругому рассеяния нейтронов. Показано, что имеют место два основных вклада в обменное взаимодействие, связанных с синглетными состояниями A_{1g} - антиферромагнитный и триплетными состояниями ${}^3B_{1g}$ - ферромагнитный. Причем, в силу структурной и химической специфики купратов, преобладание АФМ вкладов настолько велико, что в гипотетической ситуации, когда основным состоянием допированной дырки

являлся бы не A_{1g} синглет Жанга-Райса, а триплет ${}^3B_{1g}$, $A\Phi M$ характер обменного взаимодействия сохраняется. Сам факт преобладания $A\Phi M$ вклада обусловлен химическим составом и структурным мотивом $BTCP$ материалов.

Исследованы электронные свойства допированных $BTCP$ купратов n - и p -типов. Природа in - gap состояний на потолке валентной зоны имеет $A\Phi M$ происхождение - состояния приобретают отличный от нуля спектральный вес при допировании и наличии $A\Phi M$ упорядочения.

Расчет дисперсионных зависимостей, спектральной интенсивности и положения уровня Ферми в $BTCP$ материалах n - и p -типа приводит к выводу, что уровень Ферми в эксперименте [27] ведет себя так, как будто он находится в зоне in - gap состояний (см. Рис.5). Вследствие зависимости спектральной интенсивности in - gap состояний от допирования выполняется критерий $\partial\mu/\partial x < 0$ существования

зарядово-неоднородных состояний в слабодопированных купратах.

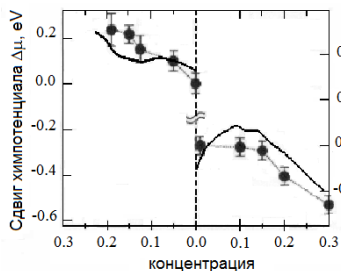


Рис.5. Зависимость сдвига химпотенциала $\Delta\mu(x)$ от концентрации допирующей компоненты. Точки – эксперимент [27]. Сплошная линия – теория.

В рамках $LDA+GTB$ расчетов примесных эффектов при замещении La^{3+} двухвалентными элементами установлено явное преобладание многоэлектронных эффектов $CЭК$ над обычными эффектами замещения – влиянием примесных изменений параметров решетки на электронную структуру $BTCP$ купратов n - и p -типов.

В четвертой главе приведена реализация $LDA+GTV$ подхода для исследования электронной структуры манганитов p -типа с использованием структурного мотива недопированного $LaMnO_3$. Построен многоэлектронный базис исходных состояний ячейки с учетом высокоспиновых состояний марганца $S = 3/2; 2; 5/2$ для секторов конфигурационного пространства с различным числом частиц на элементарную ячейку. Орбитальное упорядочение учитывалось в духе работ Кугеля-Хомского и соответствует искажению простой кубической структуры до $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ сверхструктурного мотива. Состояния лигандов (кислорода) также учтены. В процессе численной диагонализации одноячеечной части гамильтониана показано, что соответствие конфигурационного пространства электронной системы структурного MnO_6 блока конфигурационному пространству модели двойного обмена отсутствует из-за наличия частично заполненных e_g орбиталей и эффекта Яна-Теллера, снимающего орбитальное вырождение.

Рассчитаны дисперсионные зависимости, спектральные интенсивности квазичастичных состояний вдоль симметричных направлений простой кубической зоны Бриллюэна в $A\Phi M$ и PM фазах.

В недопированном орбитально-упорядоченном $LaMnO_3$ получено диэлектрическое состояние как $A\Phi M$, так и PM фазах.

Характерной особенностью манганитов является присутствие in-gap состояний на потолке валентной зоны, которые в отличие от аналогичных состояний в купратах имеют орбитальное происхождение, т.е. они исчезают вместе с эффектами орбитального упорядочения, но не магнитного порядка. Общее свойство этих состояний в манганитах и купратах заключается в том, что их спектральная интенсивность в недопированных составах близка к нулю ($T \sim 0K$). Как показывают $LDA+GTV$ расчеты, при ΦM - PM переходе сужение

валентной зоны в *ПМ* фазе составило $\sim \frac{1}{2}\cos(\theta/2)$, т.е. вдвое большую величину, чем в модели двойного обмена с участием одного носителя: дырки или электрона [28].

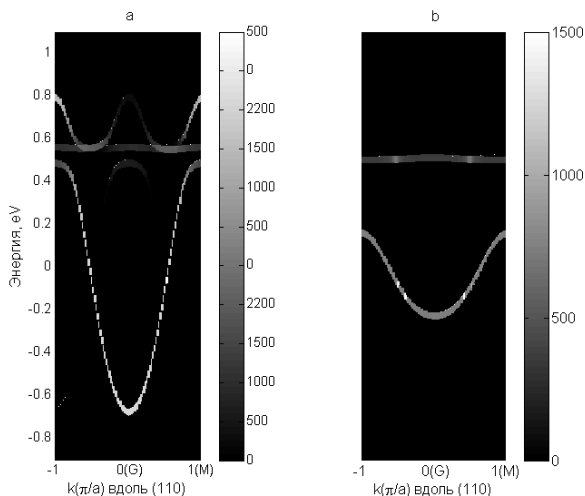


Рис.6. Спектральная интенсивность квазичастиц валентной зоны и зоны внутрицелевых состояний для ФМ (а) и ПМ (б) фаз при $x=0.3$ вдоль направления $[110]$ зоны Бриллюэна. Шкала справа указывает на величину спектральной

интенсивности $A(\vec{k}, E)$ для данной энергии и волнового вектора.

Исследованы электронные свойства допированных *КМС* манганитов $La_{1-x}M_xMnO_3$ ($M=Sr, Ca, Ba$) *p*-типа в *ФМ* и *ПМ* фазах с орбитальным упорядочением и концентрациями допирующей компоненты $0 \leq x \leq 0.3$. Соответствующий вклад от *in-gar* состояний, орбитального происхождения, зафиксирован на потолке валентной зоны в *КМС* манганитах как *ФМ*, так и в *ПМ* фазах. Спектральная интенсивность орбитальных *in-gar* состояний пропорциональна уровню допирования материала. Как показывают *LDA+GTB* расчеты, в *ФМ* фазе *КМС* манганитов воспроизводится состояние спинового полуметалла с 100%-ной

спиновой поляризацией при $T=0K$, когда для квазичастицы с одной проекцией спина имеет место металлический характер спектра, а для другой проекции – диэлектрический. Имеет место качественное согласие рассчитанной спектральной интенсивности по симметричным направлениям $3B$ на Рис.6 с результатами уникальных *ARPES* исследований $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ кубических манганитов [29].

Изучение положения уровня Ферми и плотности состояний при $x = 0.05 \div 0.3$ шагом $\Delta x = 0.05$ показывает, что в T_C точке магнитного фазового перехода для пространственно однородного *ПМ* состояния явление *ПМД* отсутствует.

Рассчитанная зонная структура в однородном случае, как в *ФМ*, так и в *ПМ* фазах при использованных *LDA* параметрах демонстрирует металлический характер (см. Рис.7). Найдены условия, при которых в *ПМ* фазе уровень Ферми все же может находиться в щели ян-теллеровского происхождения.

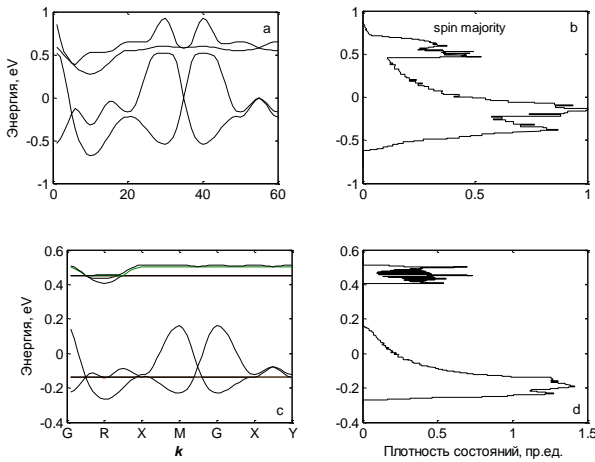


Рис.7. Дисперсия, плотность состояний и уровень Ферми при $x = 0.3$ для спина “по намагниченности” в *ФМ* фазе (a,b) и с вырождением по спину в *ПМ* фазе (c,d). Для спина вниз в состоянии *СПМ* плотность состояний мала ($\sim 10^{-8}$) при $T = 0K$ по

сравнению со спином вверх.

Действительно, *ПМ* сужение валентной зоны оказывается больше величины расщепления с ней *in-gap* зоны, вследствие эффекта Яна-Теллера, и мы можем наблюдать эффекты заполнения только в *ПМ* фазе в материалах с запрещенными *frs* состояниями - состояниями дырок с наименьшей энергией связи. Сам эффект диэлектризации обусловлен наличием *СЭК*, а сложная структура потолка валентной зоны - наличием эффекта Яна-Теллера в кубических материалах. Согласно нашим результатам эффект *КМС* – следствие факта частичного восстановления магнитного упорядочения в поле при температурах $\sim T_C$ ($300K$), т.е. имеет место в высоких полях.

В пятой главе на примере хромовых шпинелей $A^2Cr_2B_4^6$ ($A^2 = Hg, Cd; B^6 = Se, S$), обладающих высоким отрицательным магнитосопротивлением, описан расчет вклада от примесного механизма рассеяния в электро- и магнитосопротивление этих материалов, а также его сравнение с аналогичным вкладом в сопротивление манганитов *p*-типа. Проведено теоретическое исследование примесного механизма электро- и магнитосопротивления в приближении времени релаксации и периодической модели Андерсона с *sd* обменом с учетом многоэлектронных состояний 4A_2 иона Cr^{3+} , а также $^3T_1(d^4)$ и $^5E(d^4) - Cr^{2+}(d^4)$. В ходе исследования использовалась “примесная” диаграммная техника Абрикосова-Горькова-Дзялошинского [30] с обобщением ее на различные типы квазичастиц. Особенность примесного механизма состоит в том, что как полевые, так и температурные зависимости имеют место в подвижности носителей. В модели использованы электронные конфигурации *d*-состояний, характерных для хромовых шпинелей, обладающих большими значениями отрицательного магнитного сопротивления ($HgCr_2Se_4$ *n*-типа).

В согласии с экспериментальными данными [31] магнитосопротивление имеет отрицательный характер с максимумом в T_C - точке ПМ-ФМ магнитного фазового перехода. Для статической проводимости получаем:

$$\sigma = e^2 \sum_{\sigma} g_{\sigma}^0 \int \frac{d\Omega}{4\pi} \left(\frac{\partial \xi_{k\sigma}}{\partial k} \right)^2 u_{k\sigma}^2 \tau_{eff}^{\sigma} \Big|_{k=k_F} \quad (7)$$

где эффективная скорость релаксации (все обозначения, относящиеся к импульсам на поверхности Ферми, далее опускаются).

$$\left(\tau_{eff}^{\sigma} \right)^{-1} = \frac{u_{\sigma}^2}{\tau_{ir}} + \frac{\left(K_{\sigma} v_{\sigma}^2 \right)^2}{u_{\sigma}^2 \tau_d} \quad (8)$$

где транспортное время для носителей в $c(s,p)$ -состояниях (для зарядов в d -состояниях транспортное время релаксации не возникает):

$$\tau_{ir}^{-1} = c_1 g_0 \int d\Omega |\Delta_1(\theta)|^2 (1 - \cos(\theta)) / 4\pi \quad (9)$$

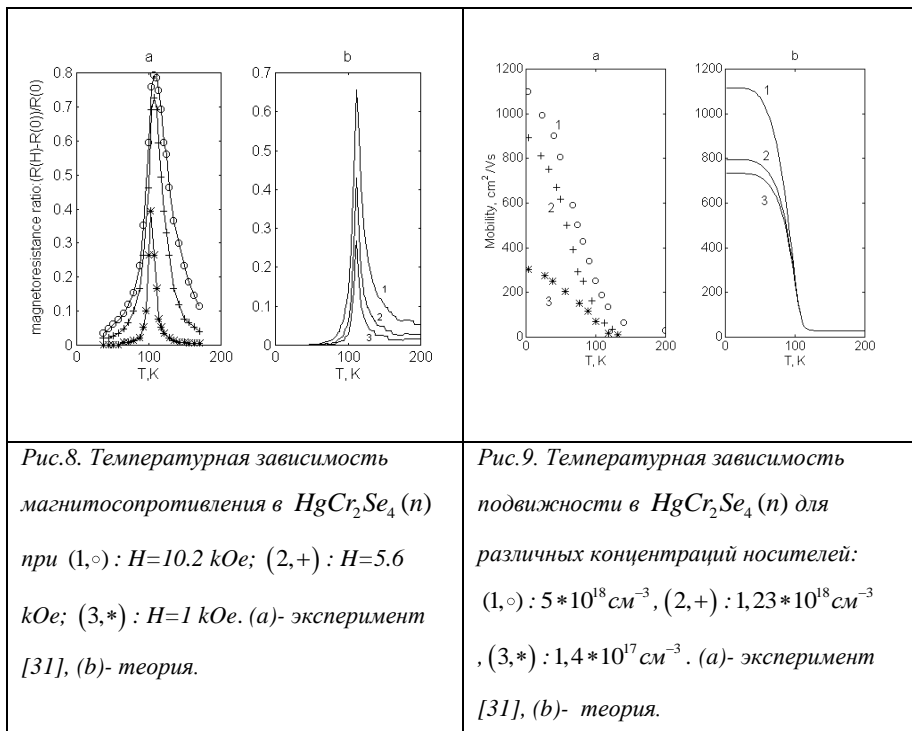
В частном случае квадратичного закона дисперсии для c -зоны:

$$\sigma = e \sum_{\sigma} n_{\sigma} u_{\sigma}^2 \mu_{eff}^{\sigma}, \quad \text{где} \quad \mu_{eff}^{\sigma} = \frac{e}{m} \left(\frac{u_{\sigma}^2}{\tau_{ir}} + \frac{K_{\sigma} v_{\sigma}^2}{\tau_d} \right)^{-1} = \left(\frac{\mu_s}{\mu_s} + \frac{K_{\sigma} v_{\sigma}^2}{\mu_d} \right)^{-1} \quad (10)$$

где $n_{eff}^{\sigma} = u_{\sigma}^2 n_{\sigma}$ - эффективная концентрация носителей со спином σ , пребывающих в c - состояниях с присутствием для последних эффективной массой m и скоростью $\frac{\partial \xi_k}{\partial k}$. Эффективная скорость релаксации (8), в согласии с правилом Матиссена, является аддитивной по скоростям релаксаций τ_{ir}^{-1} и $(\tau_d^{\sigma})^{-1}$ с весами u_{σ}^2 и $K_{\sigma} v_{\sigma}^2$. Их смысл заключается в вероятности, с которой носитель участвует в рассеянии на соответствующем потенциале Δ_1 и Δ_2 для c - и d -состояний.

Специфические черты МП, такие как химсостав, симметрия и величина постоянной решетки существенно влияют в этой формуле на проводимость, ведь положение d -зоны относительно дна зоны проводимости, также как и величины

парциальных плотностей s - и d -состояний определяются природой магнитного материала. Максимальная величина магнитосопротивления определяется разницей в подвижности квазичастиц в d - и s -примесных каналах рассеяния.



Сравнительное исследование электро- и магнитосопротивлений в KMC манганитах и халькогенидных шпинелях хрома показало, что несмотря на формальную возможность объяснения отрицательного магнитосопротивления с максимумом в T_C , а также смены кривизны в полевой зависимости сопротивления при переходе из $ПМ$ в $ФМ$ фазу в T_C , примесный механизм не может быть сопоставлен с природой KMC эффекта в манганитах.

Действительно, как свидетельствуют *ARPES* исследования в этих материалах, *ПМД* явление имеет место благодаря уменьшению плотности состояния на уровне Ферми (на 90%) и образования псевдощели в *ПМ* фазе, а не за счет колоссальных изменений в подвижности носителей (см. Рис.8-9), как это имеет место, например, в халькогенидных шпинелях $HgCr_2Se_4(n)$ [31].

В заключение приведены наиболее значимые результаты, полученные с использованием *LDA+GTB* подхода.

Основные результаты и выводы

1. Разработан гибридный метод *LDA+GTB* для расчета электронной структуры многоэлектронных сильнокоррелированных систем. Предложенный метод основан на процедуре точной диагонализации многоэлектронного гамильтониана внутри элементарной ячейки с последующим учетом межъячеечных перескоков и взаимодействий по теории возмущений.
2. Показано, что электронные системы с кулоновским взаимодействием и различной кратностью орбитального и спинового вырождения основного состояния элементарной ячейки в недопированном случае являются диэлектриками при $T=0K$. Найдены условия, когда за счет правил отбора по спину и орбитальному моменту диэлектрическое состояние сохраняется и в допированном случае.
3. Рассчитанные электронные структуры Nd_2CuO_4 и La_2CuO_4 купратов соответствуют антиферромагнитному диэлектрику с потолком валентной зоны в точке $\vec{k} = (\pi/2; \pi/2)$ в антиферромагнитной и в точке $\vec{k} = (\pi, \pi)$ в парамагнитной фазах, а также с минимумом зоны проводимости в точке $\vec{k} = (\pi, 0)$ и в $\vec{k} = (0, 0)$, $\vec{k} = (\pi, 0)$ для антиферромагнитной и парамагнитной фаз соответственно. Величины непрямой диэлектрической щели:

- $E_g (La_2CuO_4) \approx 1.7eV$ и $E_g (Nd_2CuO_4) \approx 1.6eV$ согласуются с экспериментальными данными $E_g = 1.5 \div 2eV$. Симметричные характеристики рассчитанных линейно поляризованных *ARPES* спектров недопированных купратов для антиферромагнитной фазы совпадают с экспериментальными данными.
4. Показано, что одноосное сжатие CuO_6 октаэдра приводит к изменению структуры потолка валентной зоны и спектра *ARPES*, согласующемуся с данными *ARPES* экспериментов для $Bi_2Sr_2Ca_{1-x}Y_xCu_2O_{8+\delta}$.
5. Проведено вычисление обменной константы недопированных *ВТСП* материалов: $J^{eff} \approx 0.15eV$, с учетом всех возбужденных состояний. Установлено, что обменное взаимодействие складывается из большого количества обменных антиферромагнитных (с участием синглетов A_{1g}) и ферромагнитных (с участием спиновых триплетов ${}^3B_{1g}$) вкладов. Показано что, ферромагнитные составляют в обменном взаимодействии малую (порядка 4%) долю.
6. Установлено, что при *n*- и *p*- типе допирования возникают внутрищелевые состояния (вблизи дна зоны проводимости в купратах *n*-типа и на потолке валентной зоны в купратах *p*-типа). Их спектральная интенсивность пропорциональна уровню допирования. Установлена возможность зарядовой неустойчивости ($\partial\mu/\partial x < 0$) при малых концентрациях допирования как в *p*-, так и в *n*- типе купратов, когда уровень Ферми находится в области внутрищелевых состояний.
7. Рассмотрено одноэлектронный и многоэлектронный механизмы концентрационной зависимости при допировании купратов. Показано, что при малом допировании преобладает многоэлектронный механизм.

8. Показано, что недопированный $LaMnO_3$ характеризуется диэлектрическим основным орбитально-упорядоченным состоянием как в антиферромагнитной, так и в парамагнитной фазах. Рассчитанная величина диэлектрической щели $E_g \approx 2eV$ находится в соответствии с экспериментальными данными.
9. Показано, что в металлической ферромагнитной фазе допированного манганита p -типа электронная структура основного состояния описывает спиновый полуметалл со 100% -ой поляризацией. Рассчитанные спектры *ARPES* для допированных манганитов качественно совпадают с экспериментальными данными.
10. При *ФМ-ПМ* переходе в электронной структуре манганитов имеет место сильное парамагнитное сужение дисперсии квазичастиц $\sim \frac{1}{2} \cos(\theta/2)$ - в два раза превышающее аналогичный эффект в модели двойного обмена для одного носителя. В результате в парамагнитной фазе допированных манганитов на потолке валентной зоны открывается энергетическая щель ян-теллеровского происхождения.
11. Расчет вклада от механизма рассеяния носителей на примесях и дефектах в подвижность и магнитосопротивление допированных манганитов, ферромагнитных халькогенидных хромовых шпинелей показал согласие с экспериментальными данными для хромовых шпинелей n -типа. На основе сравнения механизмов рассеяния носителей в допированных манганитах и ферромагнитных халькогенидных хромовых шпинелях n -типа установлено различие в природе отрицательного магнитосопротивления в шпинелях и манганитах.

Основные публикации по теме диссертации.

1. Гавричков В.А., Чернов В.К., Иванова Н.Б., Вейсиг Г.С., Бояршинов Ю.Б. Температурная зависимость подвижности в магнитном полупроводнике $HgCr_2Se_4$ // ФТТ. - 1986. - Т. 28. - С. 289-291.
2. Гавричков В.А., Овчинников С.Г. Низкоэнергетический спектр электронов в оксидах меди в многозонной p-d модели // ФТТ. - 1998. - Т. 40. - С. 184-190.
3. Ovchinnikov S.G., Balaev A.D., Gavrichkov V.A., Ivanova N.B. Quasiparticle band structure of ferromagnetic semiconductors, in «Magnetism and electron correlation in local-moment systems: rare-earth elements and compounds. - ed.by M. Donath, P. A., Dowben, W. Nolting. - World Scientific. - 1998. - P. 407-430.
4. Гавричков В.А., Овчинников С.Г. Особенности примесного электросопротивления в ферромагнетиках с малой концентрацией носителей // ФТТ. -1999. - Т. 41. - С. 68-76.
5. Гавричков В.А., Иванова Н.Б., Овчинников С.Г., Аминов Т.Г., Балаев А.Д., Шабунина Г.Г., Чернов В.К., Петухов М.В. Сравнение механизмов отрицательного магнитосопротивления в марганцевых перовскитах и хромовых шпинелях // ФТТ. - 1999. - Т. 41. - С.1800-1804.
6. Gavrichkov V.A., and Ovchinnikov S.G. An impurity resistivity of doped manganese perovskites // Physica B. - 1999. - Vol. 259-261. - P. 828-830.
7. Гавричков В.А., Борисов А., Овчинников С.Г., Горячев Е.Г. Эволюция зонной структуры квазичастиц с допированием в оксидах меди в рамках обобщенного метода сильной связи // ЖЭТФ. - 2000. - Т. 91(2). - С. 369-383.
8. Гавричков В.А., Борисов А.А., Овчинников С.Г., Кузьмин Е.Г. Электронная структура и симметрия параметра порядка высокотемпературных сверхпроводников // УФН. - 1999. - Т. 170. - С.189.

9. Gavrichkov V.A., Borisov A.A., Ovchinnikov S.G. Angle-resolved photoemission data and quasiparticle spectra in antiferromagnetic insulators $Sr_2CuO_2Cl_2$ and $Ca_2CuO_2Cl_2$ // *Phys. Rev. B*. - 2001. - Vol. 64. - P. 235124.
10. Гавричков В.А., Борисов А.А., Овчинников С.Г. Анализ поляризованных ARPES-спектров недопированных купратов // *ФТТ*. - 2001. - Т. 43(10). - С. 1799.
11. Gavrichkov V.A., Kuzmin E.V., Ovchinnikov S.G., Mamalis A.G. // *International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics*. - 2002. - Vol. 13. - P. 343-348.
12. Борисов А.А., Гавричков В.А., и Овчинников С.Г. Температурная и концентрационная зависимости электронной структуры оксидов меди в обобщенном методе сильной связи // *ЖЭТФ*. - 2003. - Т. 124. - С. 862-870.
13. Borisov A.A., Gavrichkov V.A., Ovchinnikov S.G. Doping dependence of the band structure and chemical potential in cuprates by generalized tight binding method // *Mod. Phys. Letters*. - 2003. - Vol. B17. - P. 479-486.
14. Korshunov M.M., Gavrichkov V.A., Ovchinnikov S.G., Manske D., Eremin I. Effective parameters of the band dispersion in n-type high- T_c superconductors // *Physica C*. - 2004. - Vol. 402.- P. 365–370.
15. Korshunov M.M., Gavrichkov V.A., Ovchinnikov S.G., Manske D., Eremin I. Effective parameters of the band dispersion in n-type high- T_c superconductors // *Physica C*. - 2004. - Vol. 402. - P. 365-370.
16. Korshunov M.M., Gavrichkov V.A., Ovchinnikov S.G., Pchelkina Z.V., Nekrasov I.A., Korotin M.A., Anisimov V.I. Parameters of the Effective Singlet-Triplet Model for Band Structure of High- T_C Cuprates by Various Approaches // *ЖЭТФ*. - 2004. - Т. 126. - С. 642-649.
17. Ovchinnikov S.G., Borisov A.A., Gavrichkov V.A., Korshunov M.M. Prediction of the in-gap states above the top of the valence band in undoped insulating cuprates due

to the spin-polaron effect // J. Phys.: Condens. Matter. - 2004. - Vol. 16. - P. L93-L100.

18. Janowitz C., Seidel U., Unger R.-S.T., Krapf A., Manzke R., Gavrichkov V.A., Ovchinnikov S.G. Strong spin triplet contribution of the first removal state in the insulating regime of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x\text{Cu}_2\text{O}_{8+y}$. // Письма в ЖЭТФ. - 2004. - Т. 80(11-12). - С. 819.

19. Гавричков В.А., Овчинников С.Г. Зонная структура купратных сверхпроводников n -типа с $T'(T)$ – структурой при учете сильных электронных корреляций // ЖЭТФ. - 2004. - Т. 125(3). - С. 630-639.

20. Gavrichkov V.A., Korshunov M.M., Ovchinnikov S.G. Doping dependent electronic structure of cuprates and effective low energy Hamiltonian for the magnetic pairing // Journ. of Modern Physics. B. - 2005. - Vol. 19(1-3). - P. 247-250.

21. Korshunov M.M., Gavrichkov V.A., Ovchinnikov S.G., Nekrasov I.A., Pchelkina Z.V., and Anisimov V.I. Hybrid LDA and generalized tight-binding method for electronic structure calculations of strongly correlated electron systems // Phys. Rev. B. - 2005. - Vol. 72. - P. 165104(1-13).

22. Ovchinnikov S.G., Gavrichkov V.A., Korshunov M.M. Electronic structure and its evolution with doping in cuprates with account for strong electron correlations // Physica B. - 2005. - Vol. 359-361. - P. 1168-1170.

23. Korshunov M.M., Ovchinnikov S.G., Gavrichkov V.A., Nekrasov I.A., Pchelkina Z.V., Anisimov V.I. Application of the new LDA+GTB method for the band structure calculations of n -type cuprates // Physica. B. - 2006. - Vol. 378-380. P. 459-460.

24. Гавричков В.А., Овчинников С.Г., Якимов Л.Е. Роль орбитального упорядочения в формировании недопированных манганитов LaMnO_3 в режиме сильных электронных корреляций // ЖЭТФ. - 2006. - Т. 129. - С. 1103-1117.

25. Гавричков В.А., Овчинников С.Г., Некрасов И.А., Кокорина Е.Е. Пчелкина З.В. Сравнение одноэлектронного и многоэлектронного механизмов

концентрационной зависимости зонной структуры *ВТСП*-купратов // ФТТ. - 2007. - Т. 49(11). - С. 1958-1963.

26. Гавричков В.А., Овчинников С.Г., Ульм Г.В. Влияние давления на электронную структуру купратов с сильными электронными корреляциями // ФТТ. - 2007. - Т. 49(4). - С. 580-583.

27. Korshunov M.M., Gavrichkov V.A., Ovchinnikov S.G., Nekrasov I.A., Kokorina E.E., Pchelkina Z.V. Dominance of many-body effects over one-electron mechanism for band structure doping dependence in $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$: *LDA+GTB* approach // J. Phys.: Condens. Matter. - 2007. - Vol. 19. - P. 486203.

28. Гавричков В.А., Овчинников С.Г. Влияние возбужденных двухчастичных состояний на межатомное обменное взаимодействие в La_2CuO_4 // ФТТ. - 2008. - Т. 50(6). - С. 1037-1041.

29. Ovchinnikov S.G., Gavrichkov V.A., Korshunov M.M., Shneyder E.I., Nekrasov I.A., Kokorina E.E., Pchelkina Z.V. Ambrosch-Draxl C., Spitaler J. Multielectron approach to the electronic structure and mechanisms of superconductivity in high- T_C cuprates // JMMM. - 2009. - Vol. 321. - P. 917-919.

30. Gavrichkov V.A., Ovchinnikov S.G., Pchelkina Z.V., Nekrasov I.A. Quasiparticle in CMR oxides in para- and ferromagnetic phases // J. Phys.: Conf. Ser. - 2010. - Vol. 200. - P. 012046.

31. Гавричков В.А., Овчинников С.Г., Некрасов И.А., Пчелкина З.В. Сравнение электронных структур манганитов $La_{1-x}M_x^{2+}MnO_3$ *p* типа в ферромагнитной и парамагнитной фазах в рамках *LDA+GTB* подхода // ЖЭТФ. - 2011. - Т. 139(5). - С. 983-1001.

32. Sergey G. Ovchinnikov, Vladimir A. Gavrichkov, Maxim M. Korshunov and Elena I. Shneyder, *LDA+GTB* method for band structure calculations in the strongly correlated materials, in book: Theoretical Methods for Strongly Correlated Systems,

Series: Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 171, Avella, Adolfo; Mancini, Ferdinando (Eds.), 1st Edition., 2011, X, 505 p. 147 illus., 82 in color.

Цитированная литература

1. Jones R.O., and Gunnarsson O. The density functional formalism, its applications and prospects // *Rev. Mod. Phys.* - 1989. - Vol. 61. - P. 689-746.
2. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands // *Proc. Roy. Soc.* - 1963. Vol. A271. - P. 238-257; Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. III. An improved solution // *Proc. Roy. Soc. A.* - 1964. - Vol. 281. - P. 401-419.
3. Anisimov V.I., Zaanen J., and Andersen O.K. Band theory and Mott insulators: Hubbard U instead of Stoner I // *Phys. Rev. B.* - 1991. - Vol. 44. - P. 943-954.
4. Svane A., and Gunnarsson O. Transition-metal oxides in the self-interaction-corrected density-functional formalism // *Phys. Rev. Lett.* - 1990. - Vol. 65. - P.1148-1151.
5. Anisimov V.I., Poteryaev A.I., Korotin M.A., Anokhin A.O., and Kotliar G. First-principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: dynamical mean-field theory // *J. Phys. Cond. Matter.* - 1997. - Vol. 9. - P. 7359- 7369.
6. Lichtenstein A.I., and Katsnelson M.I. Ab initio calculations of quasiparticle band structure in correlated systems: LDA++ approach // *Phys. Rev. B.* - 1998. - Vol. 57. - P. 6884-6895.
7. Held K., Nekrasov I.A., Blumer N., Anisimov V.I., and Vollhardt D. Realistic modeling of strongly correlated electron systems: an introduction to the LDA+DMFT approach // *Int. J. Mod. Phys. B.* - 2001. - Vol. 15. - P. 2611-2625.
8. Kotliar G., Savrasov S.Y., Haule K., Oudovenko V.S., Parcollet O., and Marianetti C.A. Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory // *Rev. Mod. Phys.* - 2006. - Vol. 78. - P. 865-951.

9. Metzner W., Vollhardt D. Correlated Lattice fermions in $d=\infty$ dimensions // Phys. Rev. Lett. - 1989. - Vol. 62. - P. 324-327.
10. Vollhardt D. in Correlated Electron Systems. - edited by V.J. Emery. - World Scientific. - Singapore. - 1993. - P. 57
11. Georges A., Kotliar G., Krauth W., and Rozenberg M. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions // Rev. Mod. Phys. - 1996. - Vol. 68. - P. 13-125.
12. Hettler M.H., Tahvildar-Zadeh A.N., Jarrell M., Pruschke T., and Krishnamurthy H.R. Nonlocal dynamical correlations of strongly interacting electron systems // Phys. Rev. B. - 1998. - Vol. 58. - R7475-R7479.
13. Kotliar G., Savrasov S.Y., Palsson G., and Biroli G. Cellular Dynamical Mean Field Approach to Strongly Correlated Systems // Phys. Rev. Lett. - 2001. - Vol. 87. - P. 186401-186402.
14. Potthov M. Self-energy-functional approach to systems of correlated electrons // Eur. Phys. J. B. - 2003. - Vol. 32. - P. 429-436.
15. Maier T., Jarrell M., Pruschke T., and Hettler M.H. Quantum cluster theories // Rev. Mod. Phys. - 2005. - Vol. 77. - P. 1027-1080.
16. Savrasov S.Yu. and Kotliar G. Spectral density functionals for electronic structure calculations // Phys. Rev. B. - 2004. - Vol. 69. - P. 245101(1-24); Del Sole R., Reining Lucia, and Godby R. W. GW approximation for electron self-energies in semiconductors and insulators // Phys. Rev. B. - 1994. - Vol. 49. - P. 8024-8028; Godby R.W., Schlüter M., and Sham L.J. Accurate Exchange-Correlation Potential for Silicon and Its Discontinuity on Addition of an Electron // Phys. Rev. Lett. - 1986. - Vol. 56. - P. 2415-2418; Aryasetiawan F., and Gunnarsson O. Electronic Structure of NiO in the GW Approximation // Phys. Rev. Lett. - 1995. - Vol. 74., P. 3221-3224; Faleev Sergey V., van Schilfgaarde Mark., and Kotani Takao. All-Electron Self-

Consistent GW Approximation: Application to Si, MnO, and NiO // *Phys. Rev. Lett.* - 2004. - Vol. 93. - P. 126406(1-4).

17. Ovchinnikov S. G., Sandalov I. S. The band structure of strong-correlated electrons in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ and $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$ // *Physica C.* - 1989. - Vol. 161. - P. 607-617.

18. Гавричков В.А., Борисов А., Овчинников С.Г., Горячев Е.Г. Эволюция зонной структуры квазичастиц с допированием в оксидах меди в рамках обобщенного метода сильной связи // *ЖЭТФ.* - 2000. - Т. 91(2). - С. 369-383.

19. Gaididei Yu.B., Loktev V.M. On a Theory of the Electronic Spectrum and Magnetic Properties of High-Tc Superconductors // *Phys. Stat. Sol. B.* - 1988. - Vol. 147. - P. 307-319.

20. Korshunov M.M., Gavrichkov V.A., Ovchinnikov S.G., Nekrasov I.A., Pchelkina Z.V., Anisimov V.I. Hybrid LDA and generalized tight-binding method for electronic structure calculations of strongly correlated electron systems // *Phys. Rev. B.* - 2005. - Vol. 72. - P. 165104(1-13).

21. Гавричков В.А., Овчинников С.Г., Якимов Л.Е. Роль орбитального упорядочения в формировании недопированных манганитов LaMnO_3 в режиме сильных электронных корреляций // *ЖЭТФ.* - 2006. - Т. 129. - С. 1103-1117; Гавричков В.А., Овчинников С.Г., Некрасов И.А., Пчелкина З.В. Сравнение электронных структур манганитов $\text{La}_{1-x}\text{M}_x^{2+}\text{MnO}_3$ p типа в ферромагнитной и парамагнитной фазах в рамках $\text{LDA}+\text{GTB}$ подхода // *ЖЭТФ.* - 2011. - Т. 139(5). - С. 983-1001.

22. Овчинников С.Г., Орлов Ю.С., Некрасов И.А., Пчелкина З.В., Электронная структура, магнитные свойства, и механизм перехода, металл-диэлектрик в LaCoO_3 с учетом электронных корреляций // *ЖЭТФ.* - 2011. - Vol. 139(1). - P. 162-168.

23. Ovchinnikov S.G., and Val'kov V.V. Hubbard Operators in the Theory of Strongly Correlated Electrons. - Imperial College Press. - London-Singapore. - 2004. - P. 241.
24. Шварц А.С. Математические основы квантовой теории поля. - М.: Атомиздат. - 1975. - 368 С.
25. Еременко В.Л., Беляева А.И. Поглощение света в антиферромагнитных диэлектриках // УФН. - 1969. - Т. 98. - С. 27-70.
26. Кринчик Г.С., Четкин М.В. Прозрачные ферромагнетики // УФН. - 1969. - Т. 98. - С. 3-25.
27. Harima N., Matsuno J., Fujimori A., Onose Y., Taguchi Y., and Tokura Y. Chemical potential shift in $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$: Contrasting behavior between the electron- and hole-doped cuprates // Phys. Rev. B. - 2001. - Vol. 64. - P. 220507(1-4).
28. Anderson P.W., and Hasegawa H. Considerations on Double Exchange // Phys. Rev. - 1955. - Vol. 100. - P. 675-681; Kubo K., and Ohata N. A Quantum Theory of Double Exchange. I // J. Phys. Soc. Japan. - 1972. - Vol. 33. - P. 21-32.
29. Shi M., Falub M.C., Willmott P.R., Krempansky J., Herger R., Hricovini K., and Patthey L. k-dependent electronic structure of the colossal magnetoresistive perovskite $\text{La}_{0.66}\text{Sr}_{0.34}\text{MnO}_3$ // Phys. Rev. B. - 2004. - Vol. 70. - P. 140407-140411; Falub M.C., Shi M., Willmott P.R., Krempansky J., Chiuzbaian S.G., Hricovini K., and Patthey L. Polarization-dependent angle-resolved photoemission spectroscopy study of $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ // Phys. Rev. B. - 2005. - Vol. 72. - P. 054444-054448.
30. Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. // Методы квантовой теории поля в статистической физике. - М.: Гостехиздат. - 1962. - 350 С.
31. Selmi A., Mauger A., and Heritier M. Anomalous transport properties in n-type HgCr_2Se_4 // J. Appl. Phys. - 1985. - Vol. 57(1). - P. 3216-3216; Selmi A., Mauger A. and Heritier M. // J. Magn. Magn. Mater. - 1988. - Vol. 66(3). - P. 295-299.