

# ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ $\text{La}_2\text{CuO}_4$ В МНОГОЭЛЕКТРОННОМ ПОДХОДЕ LDA+GTV

И. А. Макаров\*, С. Г. Овчинников\*\*

Институт физики Сибирского отделения Российской академии наук  
660036, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 22 ноября 2014 г.

В рамках многоэлектронного метода LDA+GTV рассчитана зонная структура  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  при конечных температурах в антиферромагнитной и парамагнитной фазах. Температурная зависимость зонного спектра и спектрального веса хаббардовских фермионов обусловлена изменением чисел заполнения локальных многоэлектронных термов, расщепленных по спину в антиферромагнитной фазе. Уменьшение намагниченности подрешетки с температурой приводит к появлению новых зон вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны. Показано, что диэлектрическая щель уменьшается с ростом температуры, но  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  остается диэлектриком и в парамагнитной фазе. Эти результаты соответствуют экспериментам по красному сдвигу края поглощения в  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  с ростом температуры.

DOI

## 1. ВВЕДЕНИЕ

$t J$

$p d$

*ab initio*

$2-x$   $x$   $4$

$x$

$x$

$(\pi/2, \pi/2)$

$x_{c1} = 0.15$

$x > x_{c1}$

$(\pi, \pi)$

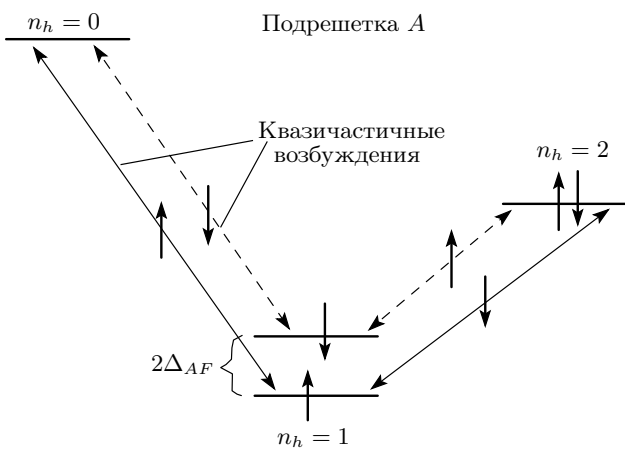
$x_{c2} = 0.24$

$x > x_{c2}$

\*E-mail: macplay@mail.ru

\*\*E-mail: sgo@iph.krasn.ru





$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \text{th} \frac{ZJ \langle S^z \rangle}{2k_B T}$$

$$J \quad J_{\perp} \ll J \quad T_N \sim J_{\perp} \rightarrow$$

$$\sim J / \ln(J/J_{\perp}) \quad J_{\perp} \rightarrow$$

$$\rightarrow 0$$

**Рис. 1.** Собственные состояния  $\text{CuO}_4$ -кластера для  $n_h = 0, 1, 2$  (горизонтальные линии) подрешетки  $A$  в низкоэнергетической области. Основные состояния сектора Гильбертова пространства с  $n_h = 1$  в двух магнитных подрешетках  $A$  и  $B$  характеризуются противоположными проекциями спинового момента. Сплошные линии, проведенные между собственными состояниями, изображают квазичастичные возбуждения с ненулевым спектральным весом. Штриховые линии изображают квазичастичные возбуждения с нулевым спектральным весом при  $T = 0$  К

$J_{\perp}$

$$T_N \sim (4J + 2J_{\perp})$$

$J$

$$T_N = 325$$

2 4

$$n_h = 0, 1, 2$$

$$x = 0 \quad T = 0$$

2

$$|1\downarrow, i\rangle \quad |1\uparrow, i\rangle$$

$$n_h = 1$$

$$2\Delta_{AF}$$

$$\Delta_{AF} = ZJ \langle S^z \rangle \quad Z$$

$$Z = 4 \quad 2$$

$G$   
 $B \quad \sigma$

$A$

$$4 \quad |p\rangle \quad |q\rangle \quad \Delta n_h = 1$$

$$p \quad d$$

$$t_{pd}/U$$

$$X_f^{pq}$$

$$n_h = 0$$

$$n_h = 1$$

$$z \langle S^z \rangle$$

$$n_h = 1 \quad n_h = 2$$

3. ЗОННАЯ СТРУКТУРА  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  ПРИ  
КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

$$T = 0$$

a

$$T = 0$$

$$k = (\pi/2, \pi/2)$$

$$H = \sum_f \left[ \sum_{q\sigma} \varepsilon_{1q\sigma} X_f^{q\sigma} + \sum_p \varepsilon_{2p} X_f^{pp} - \sum_{g \neq f} \sum_{pqmn} 2t_{pd} \mu_{fg} \gamma_{d_x}^*(pq) \gamma_b(mn) X_f^{\dagger pq} X_g^{mn} - \sum_{g \neq f} \sum_{pqmn} 2t_{pp} \nu_{fg} \gamma_b^*(pq) \gamma_b(mn) X_f^{\dagger pq} X_g^{mn} \right],$$

$\varepsilon_{1q\sigma}$

$|q\rangle$

$$\begin{matrix} \sigma & \varepsilon_{2p} \\ |p\rangle & \gamma_\lambda(pq) = \langle p | \lambda | q \rangle \quad \lambda \\ d_x & \\ & b_{1g} \\ & \mu_{fg} \quad \nu_{fg} \end{matrix}$$

$$D_{fg}^{GG'}(pq; mn) =$$

$$= \left\langle \left\langle X_{fS}^{pq} | X_{gS'}^{mn} \right\rangle \right\rangle \quad \begin{matrix} f & g \\ G & G' \end{matrix}$$

$$A(k, E) = \sum_\sigma A_\sigma(k, E),$$

$$A_\sigma(k, E) = \sum_{\lambda mn} \gamma_{\lambda\sigma}^*(m) \gamma_{\lambda\sigma}(n) \times \\ \times D^{mn}(k, E + i\delta).$$

$A_\sigma$

$$\hat{D}_{fg} = \begin{pmatrix} D_{fg}^{AA} & D_{fg}^{AB} \\ D_{fg}^{BA} & D_{fg}^{BB} \end{pmatrix}.$$

$$T = 0 \quad A_\uparrow(k, E) \quad A_\downarrow(k, E)$$

$$\hat{D}(\mathbf{k}) = \left( \hat{D}_0^{-1} - \hat{t}(\mathbf{k}) \right)^{-1},$$

$$D_0^{pq} = F(pq) / (E - \Omega(pq))$$

$$\Omega(pq)$$

$$F_f(pq) =$$

$$= \left\langle X_f^{pp} \right\rangle + \left\langle X_f^{qq} \right\rangle \hat{t}(k) \\ t_{pq, mn}(k) = \sum_{\lambda\lambda'} \gamma_\lambda^*(pq) t_{\lambda\lambda'}(k) \gamma_{\lambda'}(mn) \\ p \quad d$$

p p

$$\det \left\| \delta_{pq; mn} \frac{(E - \hat{\Omega})}{\hat{F}} - \hat{t}(\mathbf{k}) \right\| = 0.$$

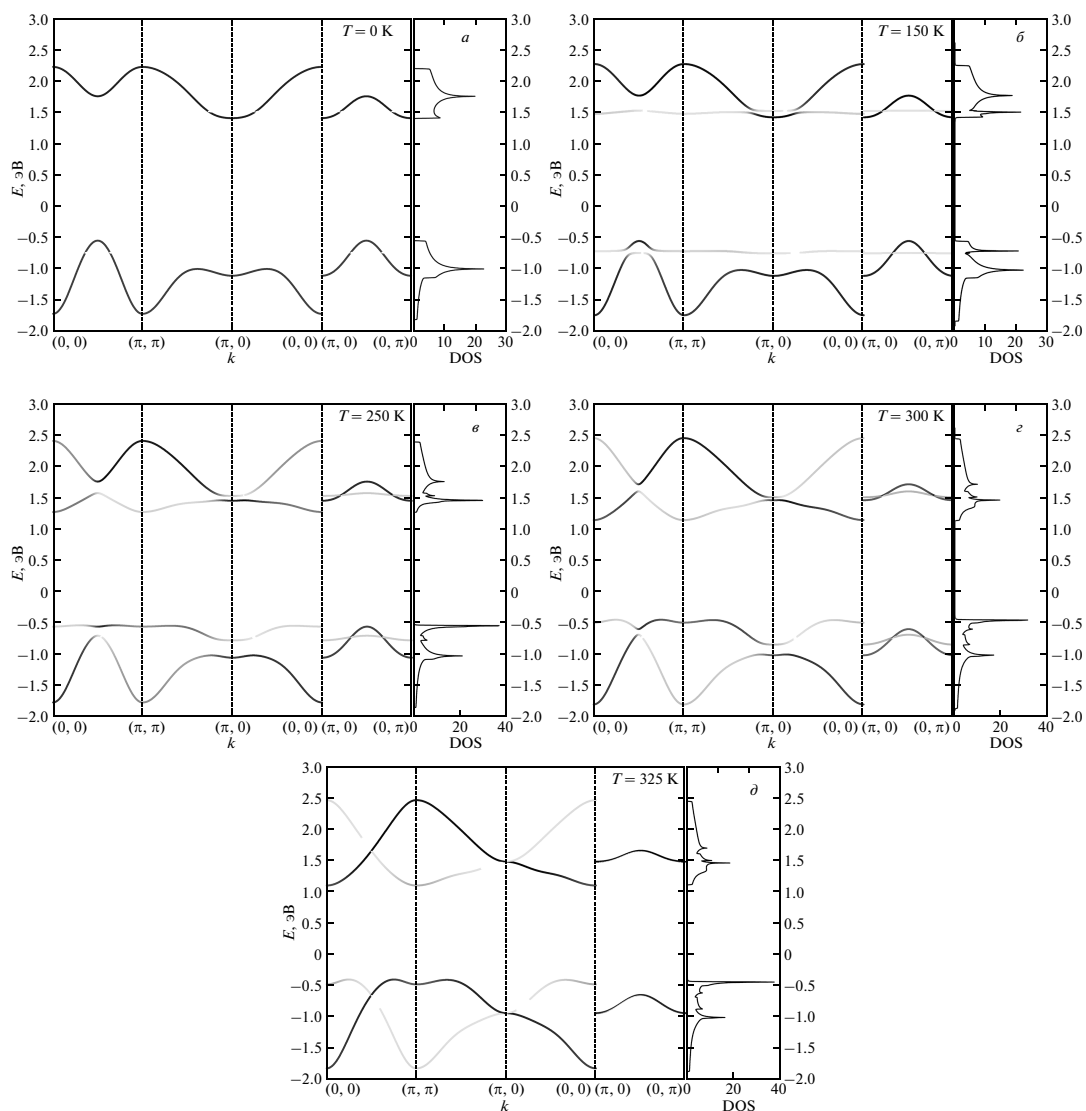
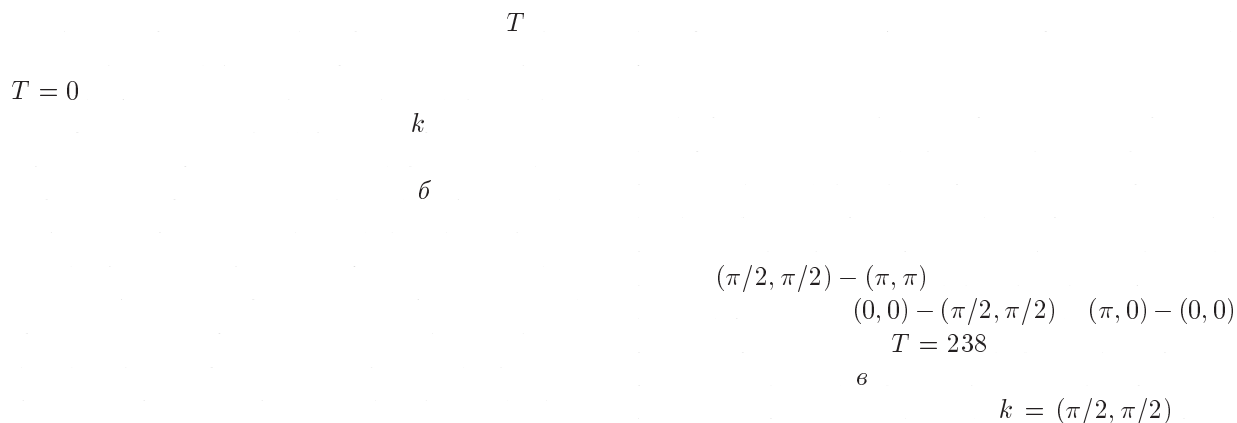


Рис. 2. Зонная структура и плотность состояний электронов при различной температуре: а –  $T = 0$  К, б –  $T = 150$  К, в –  $T = 250$  К, г –  $T = 300$  К, д –  $T = 325$  К. Спектральный вес состояний с разными  $k$  пропорционален интенсивности линии



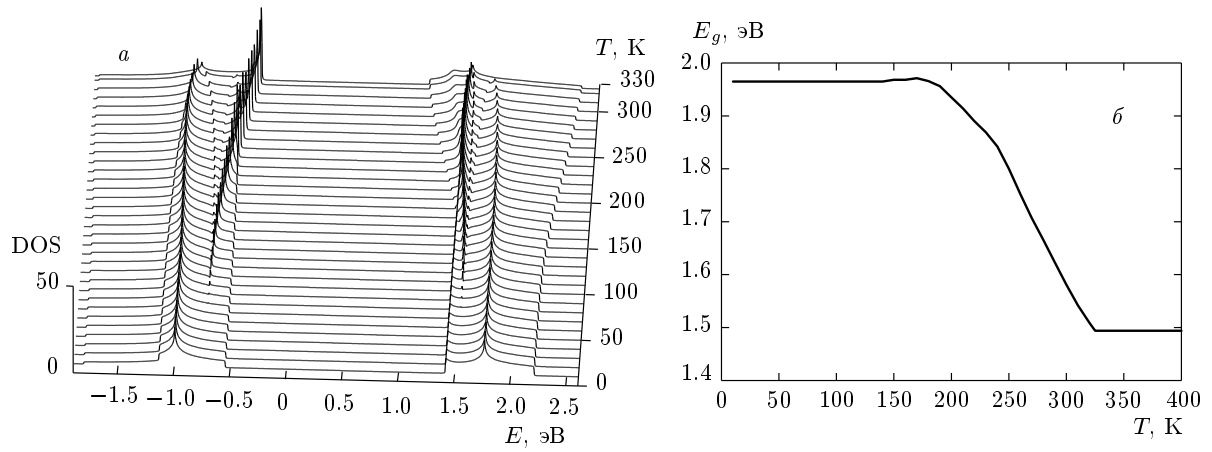


Рис. 3. Температурная зависимость плотности состояний (а), диэлектрической щели  $E_g$  (б)



4. ЭВОЛЮЦИЯ ИЗОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ КОНТУРОВ С РОСТОМ ТЕМПЕРАТУРЫ

$T = 0$   
 $E = -0.8$   
 $T = 260$   
 $k = (\pi/2, \pi/2)$   
 $p$   
 $T > 260$   
 $k = (\pi, 0) \quad k = (0, \pi)$   
 $T = T_N$   
 $k = (\pi, \pi)$   
 $k = (0, 0)$   
 $E = 1.6$   
 $T = 0$   
 $k = (\pi, 0) \quad k = (0, \pi)$   
 $n \quad 2-x \quad x \quad 4$   
 $k = (\pi/2, \pi/2)$   
 $T_N$   
 $k = (\pi/2, \pi/2)$

2-x x 4      2-x x 4

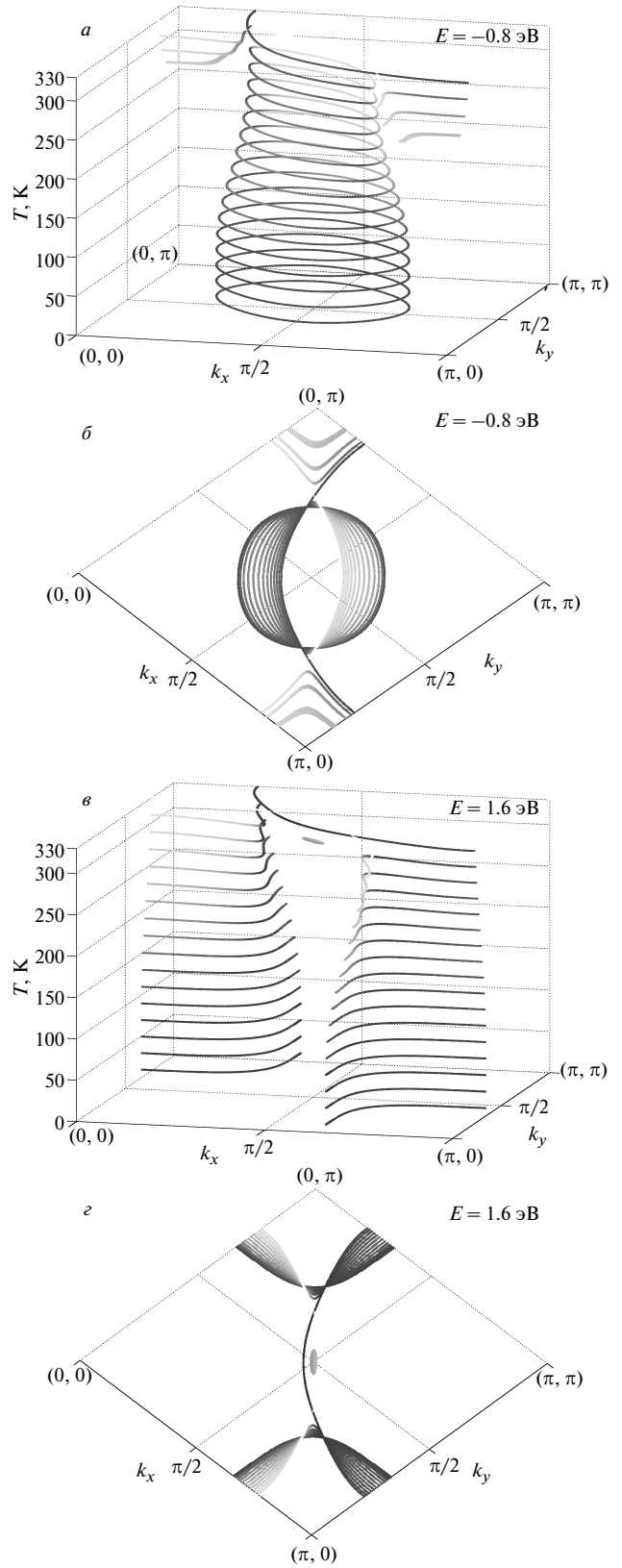


Рис. 4. Трансформация изоэнергетического контура в интервале (10–325) К для валентной зоны *a, б* и зоны проводимости *в, г; б, з* — вид сверху

$k = (\pi, \pi)$

$a, \delta$

$E = -0.56$

$T < 230$

$k = (\pi/2, \pi/2)$

$T = 230$

$240 < T < 250$

$(\pi/2, \pi/2) \quad (\pi, \pi)$

$k = (0, 0) \quad k = (\pi, \pi)$

$E = 1.44$

$\epsilon, \delta \quad T < 190$

$k = (\pi, 0)$

$k = (0, \pi)$

$k = (0, 0) \quad k = (\pi, \pi)$

$T = 230$

$T = 250$

$= (\pi/2, \pi/2)$

$T = 280$

$k = (0, 0) \quad k = (\pi, \pi)$

$k =$

**5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

2 4

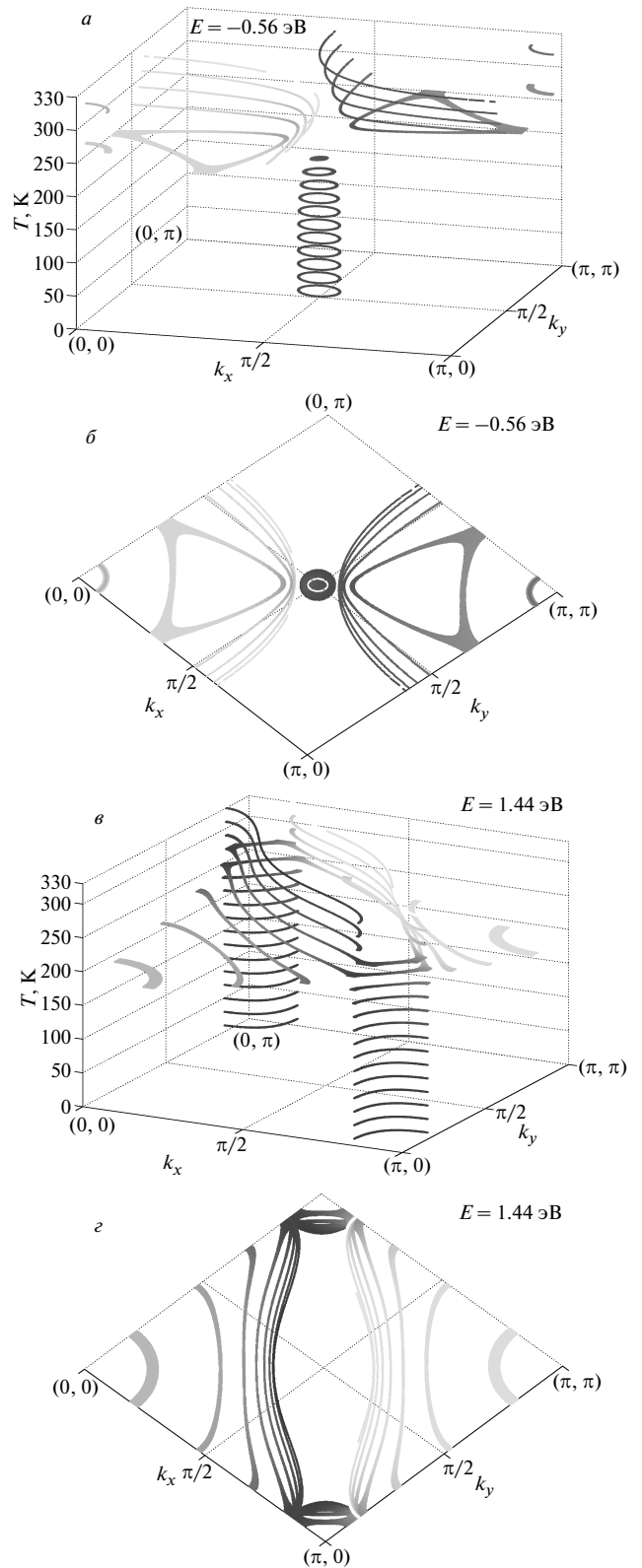


Рис. 5. Трансформация изоэнергетического контура при изменении температуры для энергии вблизи потолка валентной зоны ( $a; \delta$  — вид сверху) и дна зоны проводимости ( $\epsilon; \delta$  — вид сверху)



$$k = (\pi/2, \pi/2)$$

$$k = (\pi, \pi) \quad k = (0, 0)$$

 $T_N$ 

2 4

## ЛИТЕРАТУРА

1. М. В. Садовский, УФН **171**, 540 (2001).
2. J. Chang, E. Blackburn, A. T. Holmes et al., Nat. Phys. **8**, 871 (2012).
3. G. Ghiringhelli, M. Le Tacon, M. Minola et al., Science **337**, 821 (2012).
4. E. Blackburn, J. Chang, A. H. Said et al., Phys. Rev. B **88**, 054506 (2013).
5. R. Comin, A. Frano, M. M. Yee et al., Science **343**, 390 (2014).
6. С. М. Варма, Phys. Rev. B **55**, 14554 (1997); Nature **468**, 184 (2010).
7. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
8. А. Ф. Барабанов, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев и др., ЖЭТФ **119**, 777 (2001).
9. В. В. Вальков, Д. М. Дзэбисашвили, ЖЭТФ **127**, 686 (2005).
10. N. M. Plakida and V. S. Oudovenko, ЖЭТФ **131**, 259 (2007).
11. В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, А. А. Борисов и др., ЖЭТФ **118**, 422 (2000).
12. М. М. Korshunov, V. A. Gavrichkov, S. G. Ovchinnikov et al., ЖЭТФ **126**, 642 (2004).
13. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **38**, 1569 (1960).
14. М. М. Korshunov and S. G. Ovchinnikov, Eur. Phys. J. B **57**, 271 (2007).
15. С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов, Е. И. Шнейдер, ЖЭТФ **136**, 898 (2009).
16. S. G. Ovchinnikov, E. I. Shneyder, and M. M. Korshunov, J. Phys.: Condens. Matter **23**, 045701 (2011).
17. Е. И. Шнейдер, С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов и др., Письма в ЖЭТФ **96**, 381 (2012).
18. T. Yoshida, M. Hashimoto, and S. Ideta, Phys. Rev. Lett. **103**, 037004 (2009).
19. V. A. Gavrichkov, A. A. Borisov, and S. G. Ovchinnikov, Phys. Rev. B **64**, 235124 (2001).
20. М. М. Korshunov, V. A. Gavrichkov, S. G. Ovchinnikov et al., Phys. Rev. B **72**, 165104 (2005).
21. В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, ФТТ **50**, 1037 (2008).
22. Л. Н. Булаевский, Э. Л. Нагаев, Д. И. Хомский, ЖЭТФ **5**, 1562 (1968).
23. K. J. von Szczepanski, P. Horsch, W. Stephan et al., Phys. Rev. B **41**, 2017 (1990).
24. D. Poilblanc and E. Dagotto, Phys. Rev. B **42**, 4861 (1990).
25. A. F. Barabanov, R. O. Kuzian, and L. A. Maksimov, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 9129 (1991).
26. R. O. Kuzian, R. Hayn, A. F. Barabanov et al., Phys. Rev. B **58**, 6194 (1998).
27. J. P. Falck, A. Levy, M. A. Kastner et al., Phys. Rev. Lett. **69**, 1109 (1992).
28. M. A. Kastner, R. J. Birgeneau, G. Shirane et al., Rev. Mod. Phys. **70**, 897 (1998).
29. H. S. Choi, Y. S. Lee, T. W. Noh et al., Phys. Rev. B **60**, 4646 (1999).
30. L. Hozoi, M. S. Laad, and P. Fulde, Phys. Rev. B **78**, 165107 (2008).
31. J. Meng, G. Liu, W. Zhang et al., Nature **462**, 335 (2009).
32. N. Doiron-Leyraud, C. Proust, D. LeBoeuf et al., Nature **447**, 565 (2007).
33. E. A. Yelland, J. Singleton, C. H. Mielke et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 047003 (2008).
34. A. F. Bangura, J. D. Fletcher, A. Carrington et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 047004 (2008).
35. N. P. Armitage, F. Ronning, D. H. Lu et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 257001 (2002).
36. S. R. Park, Y. S. Roh, Y. K. Yoon et al., Phys. Rev. B **75**, 060501(R) (2007).
37. B. Valenzuela and E. Bascones, Phys. Rev. B **78**, 174522 (2008).