

Единый подход к расчету электронной структуры в ВТСП и манганитных материалах. Сходство и различия в спектрах квазичастиц

В.А. Гавричков, С.Г. Овчинников, Л.Е. Якимов
Институт Физики им.Л.В.Киренского, 660036 Красноярск, Россия

Представлена единая схема расчета зонной структуры оксидов марганца и меди с учетом сильных электронных корреляций и реальной орбитальной структуры материалов. Исследованы конфигурационное пространство системы, а также дисперсия и спектральная интенсивность квазичастичных состояний в обоих материалах. Расчет воспроизводит различия в поведении псевдощели и присутствие внутрищелевых состояний в этих оксидах.

Новая схема расчета электронной структуры с учетом сильных электронных корреляций - обобщенный метод сильной связи (ОМСС) впервые был применен к высокотемпературным сверхпроводящим (ВТСП) материалам [1]. Несмотря на то, что результаты вычислений хорошо соответствовали данным фотоэмиссионных исследований на этих материалах [2], оставались вопросы к методу, использующему эмпирические параметры, к нахождению которых был привлечен эксперимент. Ответ мог быть получен при исследовании совершенно иных материалов, но где бы сильные электронные корреляции играли такую же важную роль в формировании основного состояния, как и в ВТСП соединениях. Хорошим объектом являются оксиды марганца $LaMnO_3$, для которых имеется большой объем экспериментального материала. Действительно расчеты в рамках функционала плотности (LSDA) [3], также как и для ВТСП материалов [4], воспроизводят типичную ошибку и дают основное металлическое состояние в кубической структуре $LaMnO_3$. Очевидно, что различия в физике этих двух групп соединений настолько велики, что простые изменения в параметрах модели их не воспроизводят. Для того чтобы распространить ОМСС расчеты на манганитные материалы необходимо учесть специфику конфигурационного пространства носителей в них. На Рис.1 приведены два конфигурационных пространства в ВТСП и $LaMnO_3$.

Конфигурационное пространство системы в $(La, Sr)MnO_3$ на Рис.1b имеет существенные отличия от пространства ВТСП материалов Рис.1a. Во-первых, в тетрагональном CuO_6 кластере ВТСП материалов e_g подуровни сильно расщеплены и, как следствие, не имеется орбитальных дублетов в качестве основного состояния в однодырочном секторе. Во-вторых, из-за наличия большого спина половину заполненной t_{2g} оболочки в двухдырочном секторе соединения $(La, Sr)MnO_3$ отсутствует конкуренция между различными спиновыми мульти-

плетами за основное состояние, как это имело место в ВТСП материалах.

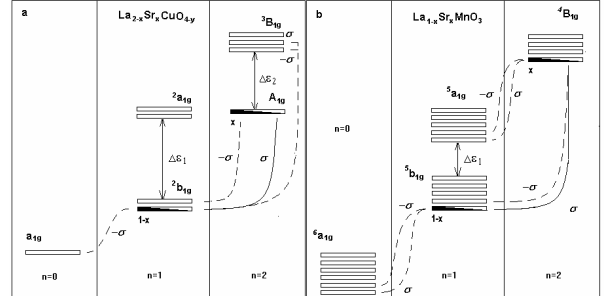


Рис.1. Конфигурационное пространство системы в ВТСП материалах (a) и в $(La, Sr)MnO_3$ (b). Указаны спиновые индексы для квазичастиц в переходе, где σ - проекция спина носителя по намагниченности соответствующей подрешетки (A или B).

Точная диагонализация одноячеечной части гамильтониана проводится отдельно в каждом секторе конфигурационного пространства с числом дырок $n_h = 0, 1, 2$. Здесь за вакуумное состояние с числом дырок $n_h = 0$ выбираем $d^5 p^6$ конфигурацию. Наличие двух конкурирующих по энергии состояний в одночастичном и двухчастичном секторах манганитных и ВТСП материалов соответственно приводит к необходимости одновременного их учета в качестве базисных состояний и невозможности дальнейшей редукции гамильтониана к эффективной однозонной модели Хаббарда. В результате точной диагонализации одноячеечная часть гамильтониана H_c приобретает вид:

$$H_c = \sum_{p\sigma} (\epsilon_{1pG} - \mu) X_{f\sigma}^{pp} + \sum_{q\sigma} (\epsilon_{2qG} - 2\mu) X_{f\sigma}^{qq} \quad \text{где} \quad (1)$$

$$f_G = \begin{cases} f_A, f \in A \\ f_B, f \in B \end{cases}$$

Здесь p и q нумеруют термы в однодырочном и двухдырочном секторах гильбертова пространства. $X_f^{pq} = |p\rangle\langle q|$ - операторы Хаббарда сконструированные на собственных состояниях H_c . В новом базисе одноэлектронные операторы имеют вид:

$$c_{j\lambda\sigma} = \sum_m \gamma_{\lambda\sigma}(m) X_{f\sigma}^m \quad (2)$$

где $c_{j\lambda\sigma} = d_{j\lambda\sigma}, d_{j\lambda\sigma}, a_{j\sigma}, b_{j\sigma}, p_{j\sigma}$ и m - указывает на корневой вектор $\vec{\alpha}_m(pq)$. Матричные элементы $\gamma_{\lambda\sigma}(m)$, соответствующие этим корневым векторам вычисляются непосредственно и показывают долю

базисных состояний в данном спиновом мультиплете.

Для вычислений с частью гамильтониана, соответствующей межячеечным переходам, использован метод функции Грина $D_{k\sigma}^{mn}$, построенной на операторах Хаббарда. Уравнения движения решены в приближении Хаббард 1.

Основные отличия нашего дисперсионного уравнения от соответствующего уравнения в методе сильной связи (МСС) касаются одночастичных энергий, определенных как резонансы между многоэлектронными состояниями с учетом сильных корреляций и факторов заполнения $F_{\sigma}^G(m) = \langle X_{J_{\sigma}\sigma}^{pp} \rangle + \langle X_{J_{\sigma}\sigma}^{qq} \rangle$, приводящих к концентрационной зависимости зонной структуры квазичастиц. В ОМСС число зон равно количеству всех возможных переходов между различными секторами конфигурационного пространства системы, а не количеству орбиталей на элементарную ячейку, как это имеет место в МСС.

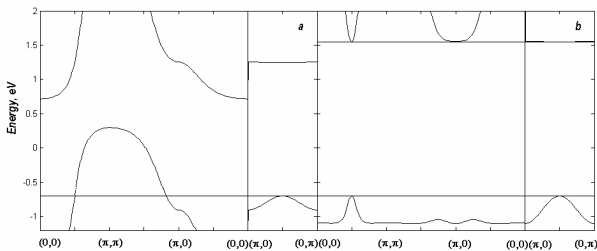


Рис.2 Дисперсия квазичастиц в CuO_2 плоскости в парафазе (a) и антиферрофазе (b)

Сравнивая спектры для ВТСП материалов и манганитов на Рис.2 и Рис.3, мы в обоих случаях обнаруживаем внутрищелевые состояния, спектральная интенсивность которых, развивается с допированием, а также энергетическую псевдощель между ними и потолком валентной зоны.

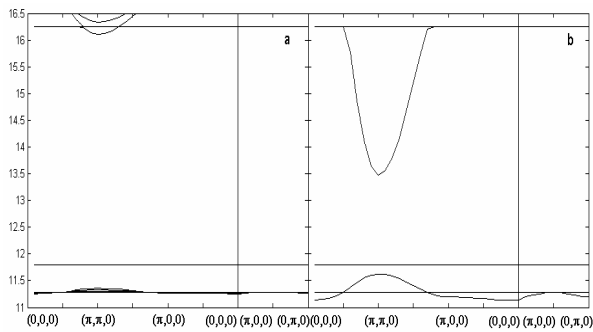


Рис.3 Дисперсия квазичастиц в недопированных манганитах в парафазе (PM) (a) и антиферрофазе (AFM) (b).

Если в ВТСП материалах эти состояния появляются благодаря переходам с участием только возбужденной компоненты спинового дублета, то в

манганитах еще и благодаря переходам с участием возбужденной компоненты орбитального дублета в однодырочном секторе конфигурационного пространства. Механизм формирования первых был исследован в [1], а последних в [5]. Соответственно и энергетическая псевдощель имеет различную природу. Действительно, согласно нашим результатам, если в ВТСП материалах псевдощель формируется в условиях АФМ упорядочения с понижением температуры, то в манганитных материалах щель появляется, наоборот, в PM фазе, причем только при наличии дисторсий. Таким образом, основной причиной ее появления в этих материалах является полный спиновый беспорядок при наличии структурного упорядочения дисторсий.

Вычисления спектральной интенсивности квазичастиц состояний по формуле:

$$A_{\sigma}(\vec{k}, E) = \left(-\frac{1}{\pi}\right) \sum_{\lambda} \text{Im}(G_{k\sigma}^{\lambda\lambda}) = \left(-\frac{1}{\pi}\right) \sum_{lmn} \gamma_{\lambda\sigma}(m) \gamma_{\lambda\sigma}^*(n) \text{Im}(D_{k\sigma}^{mm}(AA) + D_{k\sigma}^{nn}(BB))$$

показывает, что её величина зависит от уровня допирования и для состояний, которым соответствуют переходы, обозначенные пунктиром на Рис.1 равна нулю в недопированных материалах. Следовательно, такие состояния могут просто отсутствовать в ARPES спектрах таких материалов. Это хорошо видно на Рис.4, где отсутствует квазищелевой пик в спектральной интенсивности, соответствующий состоянию на самом потолке валентной зоны ВТСП материалов (Рис.2(b)).

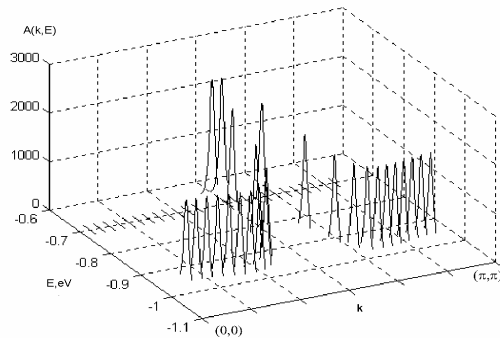


Рис.4 Спектральная интенсивность квазищелевого состояния на потолке валентной зоны CuO_2 слоя в АФМ – фазе.

Авторы благодарят ОФН “Сильные электронные корреляции” и РФФИ, грант 030216124.

1. V.A.Gavrichkov, S.G.Ovchinnikov, A.A.Borisov, and E.G.Goryachev, JETP, 91, 369 (2000).
2. V.A.Goryachev, A.A.Borisov, S.G.Ovchinnikov, Phys.Rev.B64, 235124 (2001).
3. W.E.Pickett and D.J.Singh, Phys.Rev.B53, 1146 (1996).
4. W.E.Pickett, H.Krakauer, R.E.Cohen, and D.Singh, Physica C.162-164, 1419 (1989).
5. С.Г.Овчинников, ЖЭТФ, 102, 534 (1992).