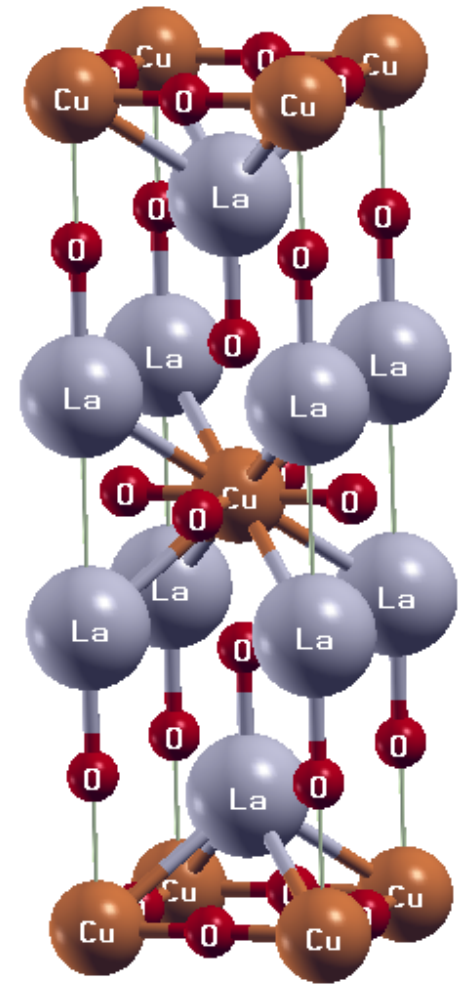
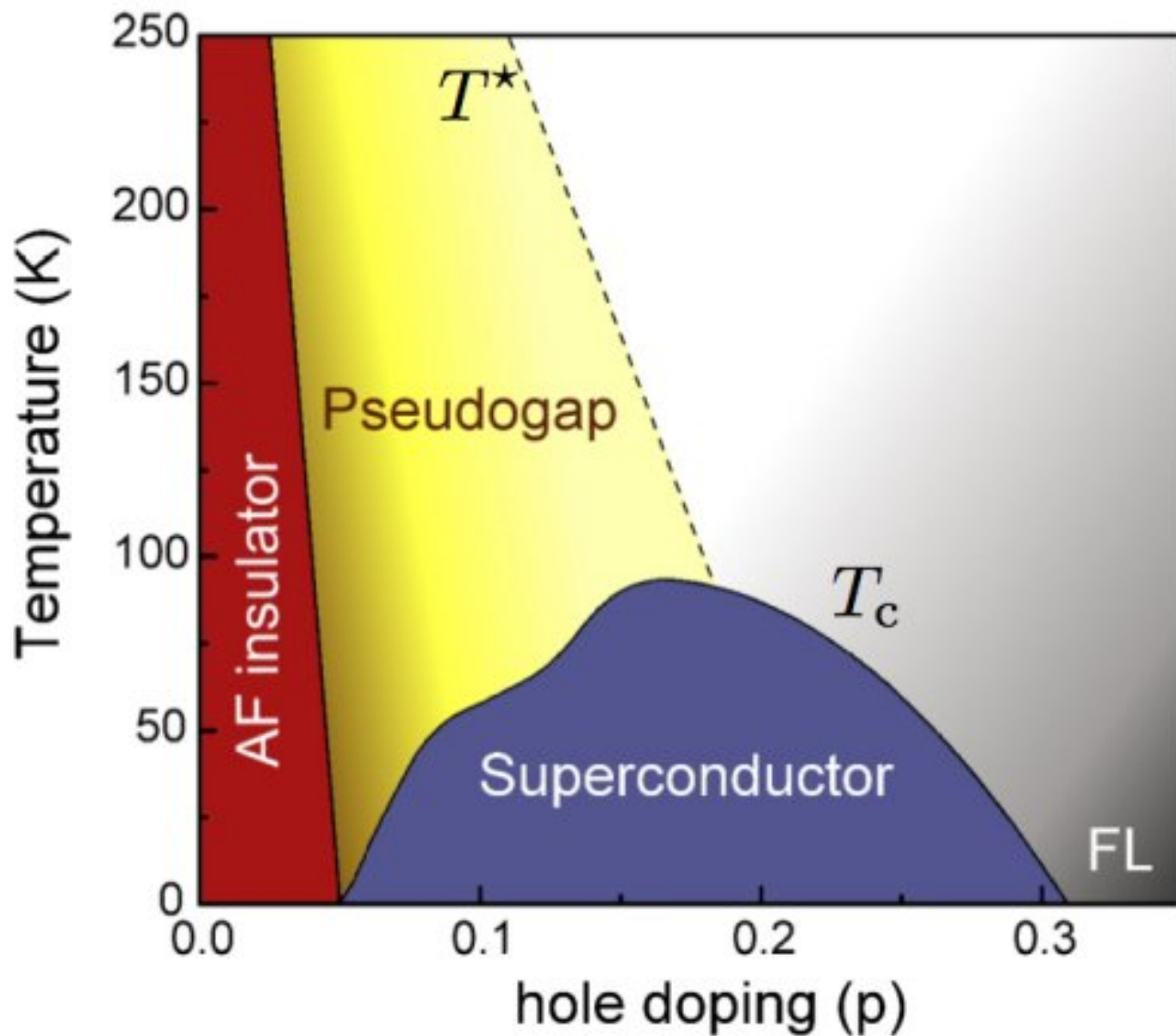


# Электронная структура $\text{La}_2\text{CuO}_4$ в зависимости от механических микросмещений

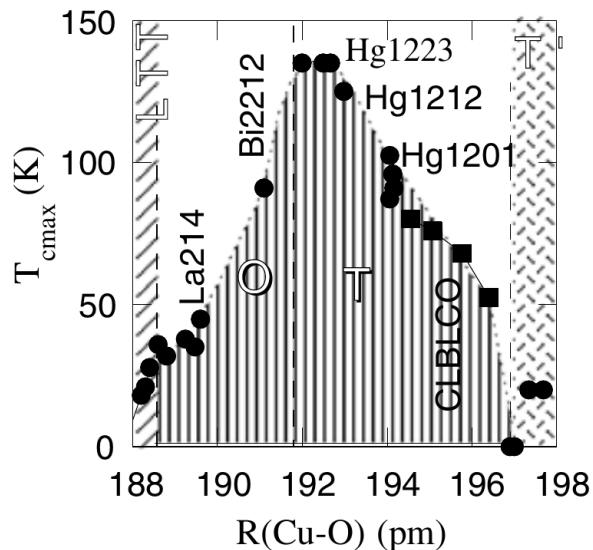
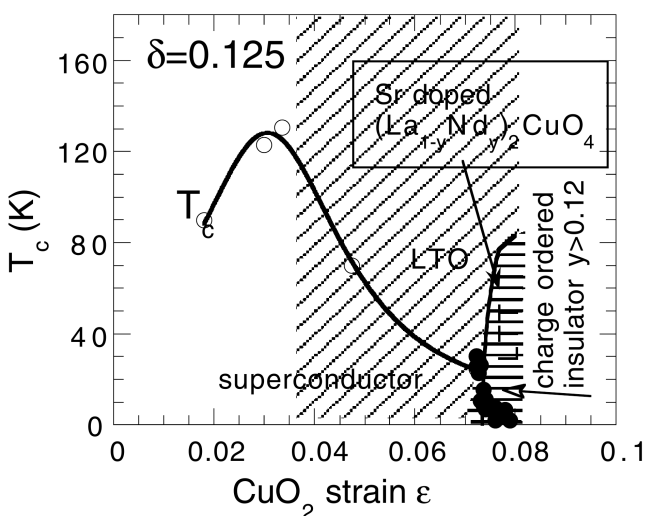
И.А. Некрасов, А.А. Слободчиков

Екатеринбург, 2018

# Фазовая диаграмма купратов в координатах $T_c$ - $\delta$

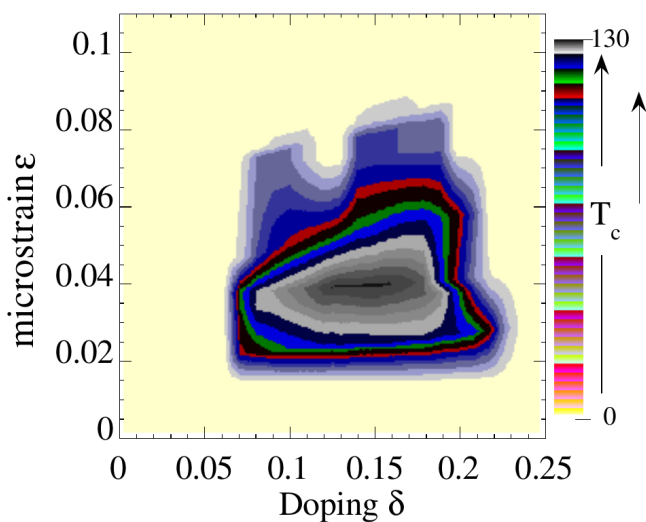


# Фазовая диаграмма купратов в координатах $T_c$ - $\varepsilon$

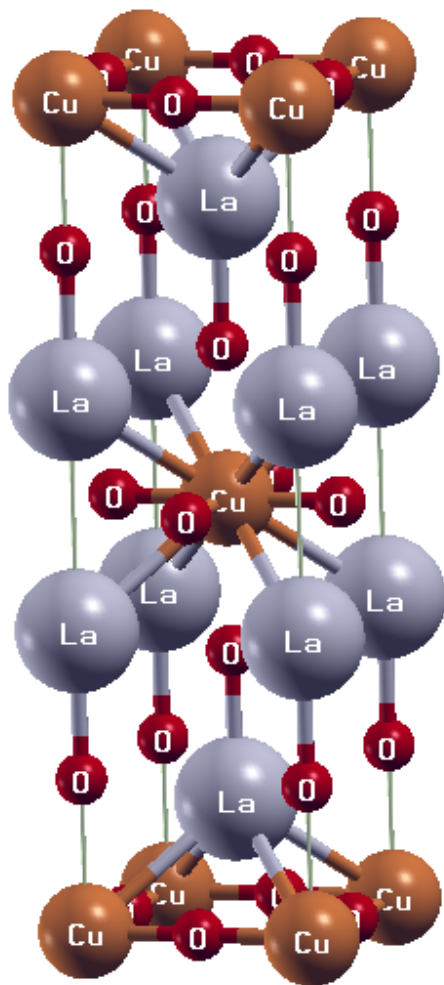


$$\varepsilon = 2(d_0 - \langle R_{\text{Cu-O}} \rangle) / d_0$$

- $R_{\text{Cu-O}}$  – расстояние Cu-O когда есть напряжения
- $d_0 = 1.97 \text{ \AA}$ , расстояние Cu-O в ненапряженной решетке

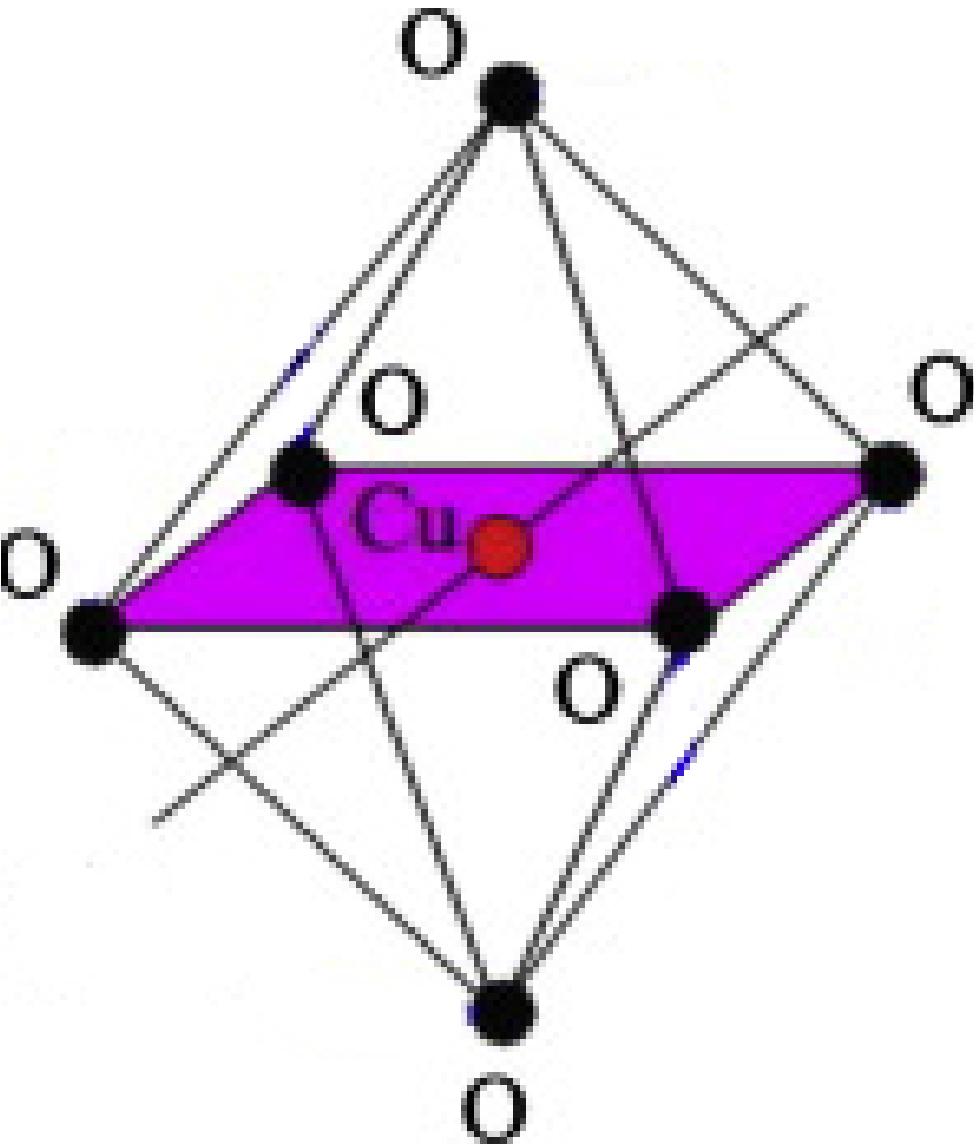


# Кристаллическая структура $\text{La}_2\text{CuO}_4$ (НТТ)



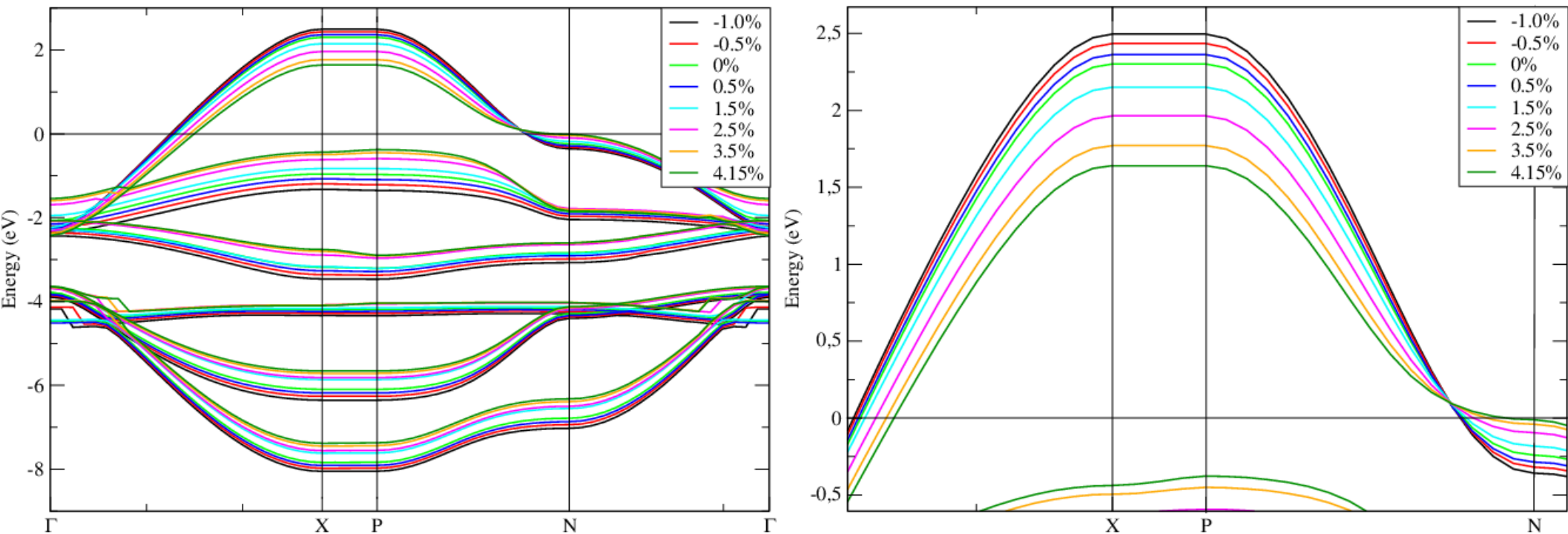
- Тетрагональная структура
- Наиболее важная составная единица — октаэдр  $\text{CuO}_4$
- В различных купратах параметр решетки  $a$  может варьироваться в диапазоне  $3.74\sim 3.94 \text{ \AA}$   
 $d(\text{Cu-O}) = 1.87\sim 1.97 \text{ \AA}$

# Шестизонная модель



- Cu- $3d_{x^2-y^2}$ , Cu- $3d_{z^2}$
- O- $2p_x$ , O- $2p_y$  (в плоскости  $xy$ )
- 2 O- $2p_z$  (на оси  $z$ )

# Зонная структура при разных значениях микросмещения $\varepsilon$



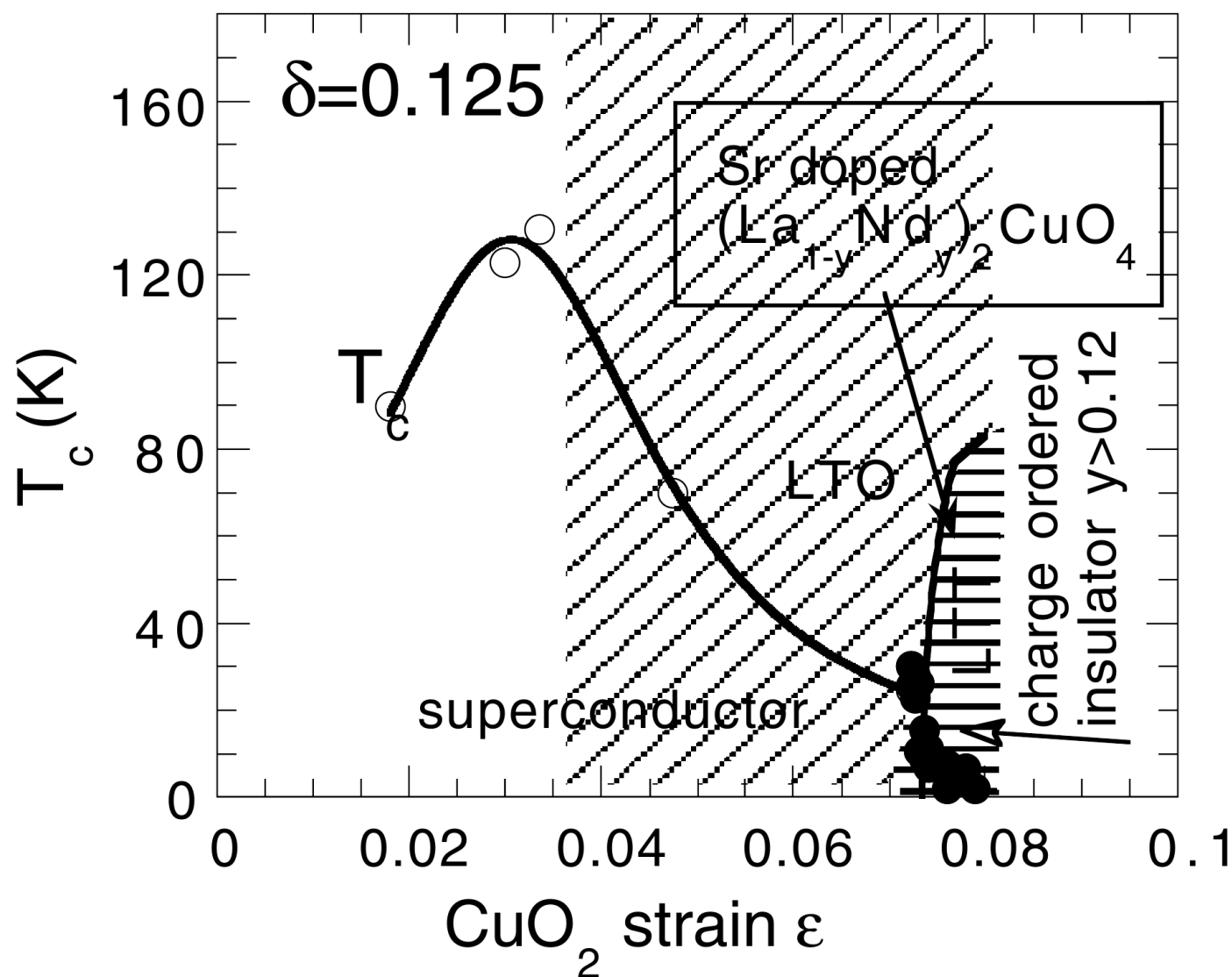
Представлены данные для изменения микросмещения  $\varepsilon$  на  $-1.0\%$ ,  $-0.5\%$ ,  $0\%$ ,  $0.5\%$ ,  $1.0\%$ ,  $1.5\%$ ,  $2.5\%$ ,  $3.5\%$ ,  $4.15\%$  (соответствует  $3.74\sim 3.94$  Å) при сохранении объема октаэдра CuO<sub>4</sub>.

Зонная структура получена в приближении LDA при проектировании на функции Ванье<sup>1,2</sup> для шестизонной модели.

<sup>1</sup>Andersen O., Pawlowska Z., and Japsen O., Phys. Rev. B. 34, 8, 5253 (1986)

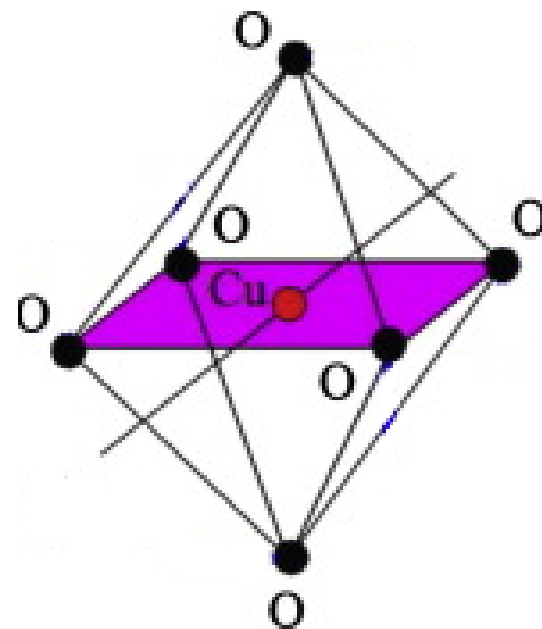
<sup>2</sup><http://amulet-code.org/>

# Фазовая диаграмма в координатах $T_c - \epsilon$



# Значения интегралов и одноэлектронной энергии, полученные в ходе проектирования на функции Ванье для шестизонной модели

| Hopping                  | Connection vector  | −1%                | −0.5%  | 0%     | 0.5%   | 1.5%   | 2.5%   | 3.5%   | 4.15%  |
|--------------------------|--------------------|--------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
|                          |                    | $E_{x^2} = -1.79$  | -1.824 | -1.861 | -1.9   | -1.657 | -2.047 | -2.124 | -2.18  |
|                          |                    | $E_{z^2} = -2.056$ | -2.075 | -2.097 | -2.119 | -1.821 | -2.186 | -2.227 | -2.26  |
|                          |                    | $E_{p^x} = -2.724$ | -2.775 | -2.825 | -2.863 | -2.541 | -2.98  | -3.026 | -3.053 |
|                          |                    | $E_{p^y} = -2.724$ | -2.775 | -2.825 | -2.863 | -2.541 | -2.98  | -3.026 | -3.056 |
|                          |                    | $E_{p^z} = -1.741$ | -1.727 | -1.721 | -1.72  | -1.541 | -1.69  | -1.713 | -1.729 |
| $t(x^2, x^2)$            | (1.0, 0.0, 0.0)    | 0.204              | 0.195  | 0.187  | 0.179  | 0.173  | 0.149  | 0.135  | 0.127  |
| $t'(x^2, x^2)$           | (1.0, 1.0, 0.0)    | -0.001             | -0.001 | -0.002 | -0.002 | -0.002 | -0.002 | -0.002 | -0.002 |
| $t(z^2, z^2)$            | (1.0, 0.0, 0.0)    | 0.053              | 0.052  | 0.049  | 0.048  | 0.049  | 0.048  | 0.046  | 0.044  |
| $t'(z^2, z^2)$           | (1.0, 1.0, 0.0)    | 0.002              | 0.002  | 0.000  | 0.001  | 0.000  | 0.003  | 0.002  | 0.002  |
| $+t(x^2, p_x)$           | (0.5, 0.0, 0.0)    | 1.450              | 1.427  | 1.403  | 1.379  | 1.313  | 1.280  | 1.232  | 1.201  |
| $-t(x^2, p_x)$           | (-0.5, 0.0, 0.0)   | -1.450             | -1.427 | -1.403 | -1.379 | -1.313 | -1.280 | -1.232 | -1.201 |
| $+t'(x^2, p_x)$          | (0.5, -1.0, 0.0)   | 0.016              | 0.014  | 0.012  | 0.010  | 0.011  | 0.004  | 0.002  | 0.001  |
| $-t'(x^2, p_x)$          | (-0.5, 1.0, 0.0)   | -0.016             | -0.014 | -0.012 | -0.010 | -0.011 | -0.004 | -0.002 | -0.001 |
| $+t(z^2, p_x)$           | (-0.5, 0.0, 0.0)   | 0.517              | 0.520  | 0.523  | 0.526  | 0.534  | 0.549  | 0.562  | 0.570  |
| $-t(z^2, p_x)$           | (0.5, 0.0, 0.0)    | -0.517             | -0.520 | -0.523 | -0.526 | -0.534 | -0.549 | -0.562 | -0.570 |
| $+t'(z^2, p_x)$          | (0.5, -1.0, 0.0)   | 0.030              | 0.028  | 0.026  | 0.024  | 0.022  | 0.016  | 0.013  | 0.010  |
| $-t'(z^2, p_x)$          | (-0.5, 1.0, 0.0)   | -0.030             | -0.028 | -0.026 | -0.024 | -0.022 | -0.016 | -0.013 | -0.010 |
| $t(z^2, p_z)$            | (0.0, 0.0, 0.18)   | 0.779              | 0.798  | 0.820  | 0.838  | 0.860  | 0.880  | 0.905  | 0.918  |
| $t'(z^2, p_z)$           | (0.5, -0.5, -0.32) | -0.015             | -0.014 | -0.014 | -0.013 | -0.012 | -0.010 | -0.009 | -0.009 |
| $+t(p_x, p_y)$           | (0.5, 0.5, 0.0)    | 0.893              | 0.876  | 0.859  | 0.842  | 0.809  | 0.768  | 0.732  | 0.710  |
| $-t(p_x, p_y)$           | (0.5, -0.5, 0.0)   | -0.893             | -0.876 | -0.859 | -0.842 | -0.809 | -0.768 | -0.732 | -0.710 |
| $t'(p_x, p_y)(p_x p_x)$  | (1.0, 0.0, 0.0)    | -0.042             | -0.040 | -0.038 | -0.037 | -0.048 | -0.034 | -0.035 | -0.035 |
| $t''(p_x, p_y)(p_x p_x)$ | (0.0, 1.0, 0.0)    | -0.030             | -0.029 | -0.027 | -0.025 | -0.019 | -0.013 | -0.007 | -0.002 |
| $+t(p_x, p_z)$           | (0.5, 0.0, 0.18)   | 0.379              | 0.391  | 0.403  | 0.415  | 0.428  | 0.443  | 0.456  | 0.462  |
| $-t(p_x, p_z)$           | (-0.5, 0.0, 0.18)  | -0.379             | -0.391 | -0.403 | -0.415 | -0.428 | -0.443 | -0.456 | -0.462 |
| $+t'(p_x, p_z)$          | (0.5, -1.0, 0.18)  | 0.010              | 0.010  | 0.011  | 0.011  | 0.012  | 0.012  | 0.013  | 0.012  |
| $t'(p_x, p_z)$           | (-0.5, 1.0, 0.18)  | -0.010             | -0.010 | -0.011 | -0.011 | -0.012 | -0.012 | -0.013 | -0.012 |
| $-t''(p_x, p_z)$         | (1.0, 0.5, -0.32)  | -0.013             | -0.013 | -0.013 | -0.013 | -0.013 | -0.012 | -0.011 | -0.012 |
| $+t''(p_x, p_z)$         | (-1.0, 0.5, -0.32) | 0.013              | 0.013  | 0.013  | 0.013  | 0.013  | 0.012  | 0.011  | 0.012  |





# Выводы

- Зонная структура в приближении LDA, спроектированная на функции Ванье для шестизонной модели, испытывает равномерное смещение в зависимости от изменения механического микросмещения  $\varepsilon$ ;
- Для рассматриваемой модели получены значения интегралов перескока, на основе которых будет построена теоретическая модель для изучения зависимости  $T_c$  от микросмещений решетки.

# Текущая работа

- изучение электронных свойств орторомбического  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  в зависимости от изменения расстояния Cu-O

