

Влияние механических микросмещений в SiO_2 слоях на электронную структуру купратов

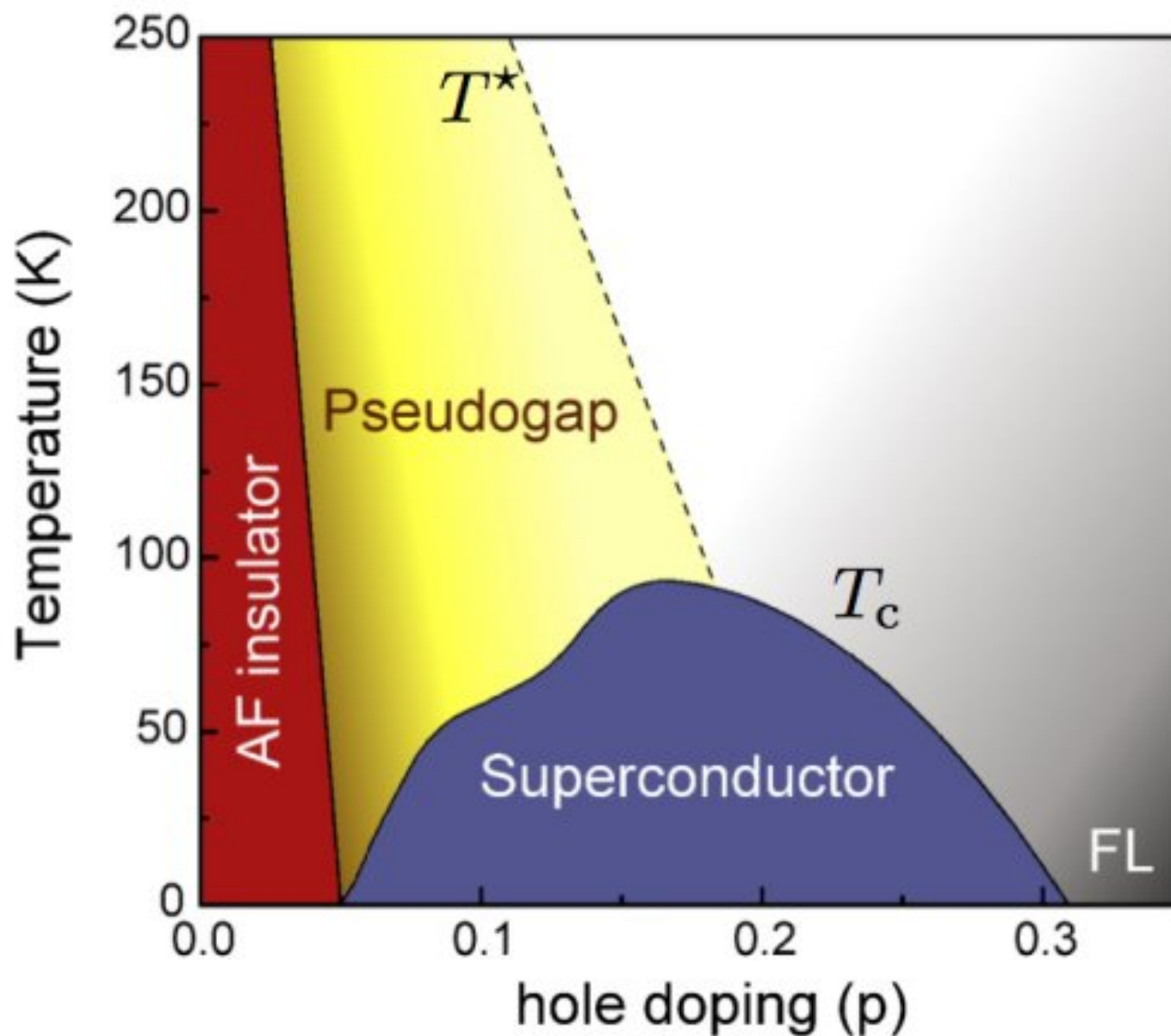
Анатолий Слободчиков, аспирант 4 года, ЛТФ

И.А. Макаров, В.А. Гавричков, Е.И. Шнейдер, И.А. Некрасов, Н.С.

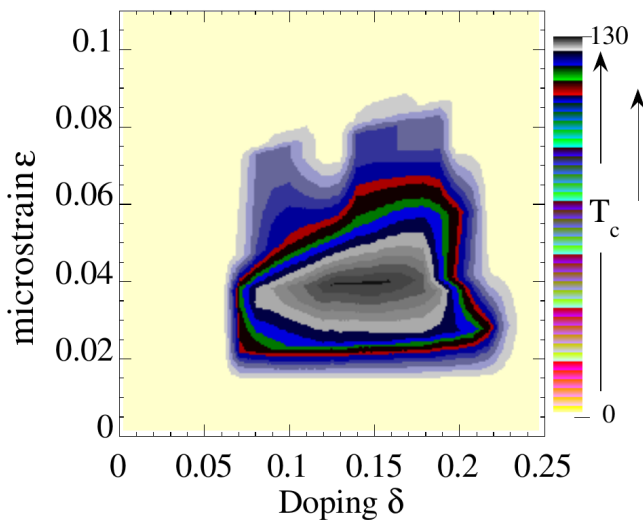
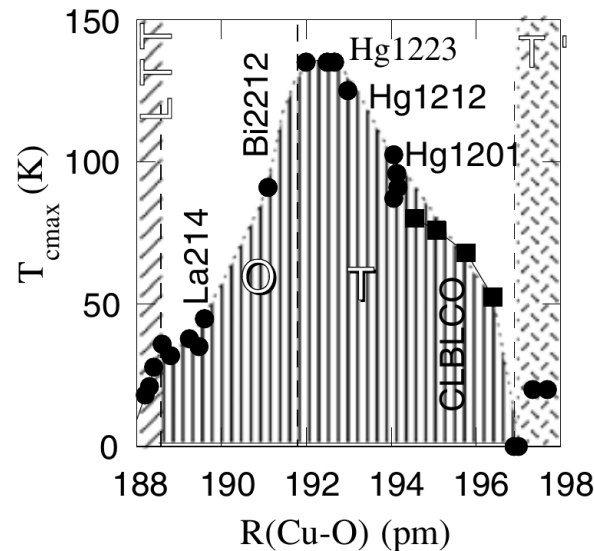
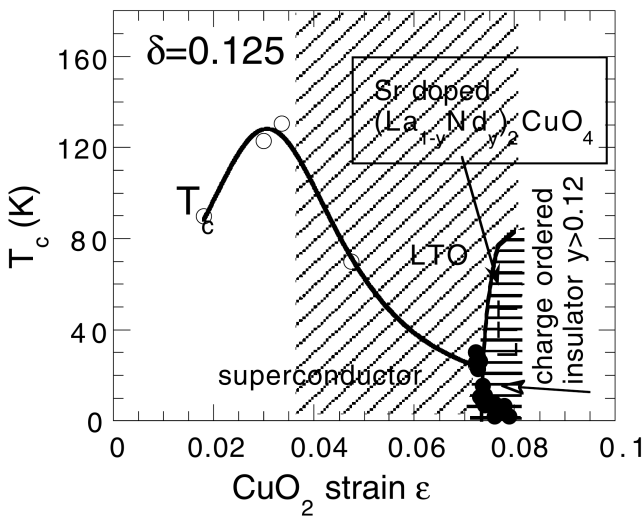
Павлов, С.Г. Овчинников, А. Bianconi

Екатеринбург, 2019

Фазовая диаграмма купратов в координатах T_c - p

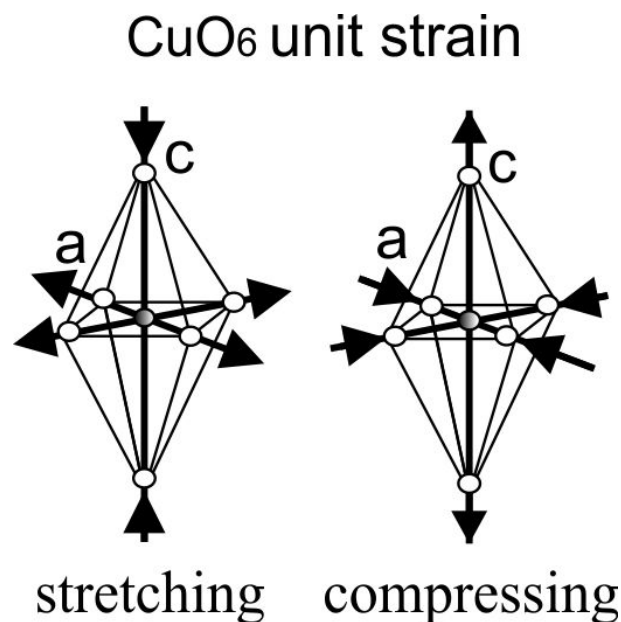
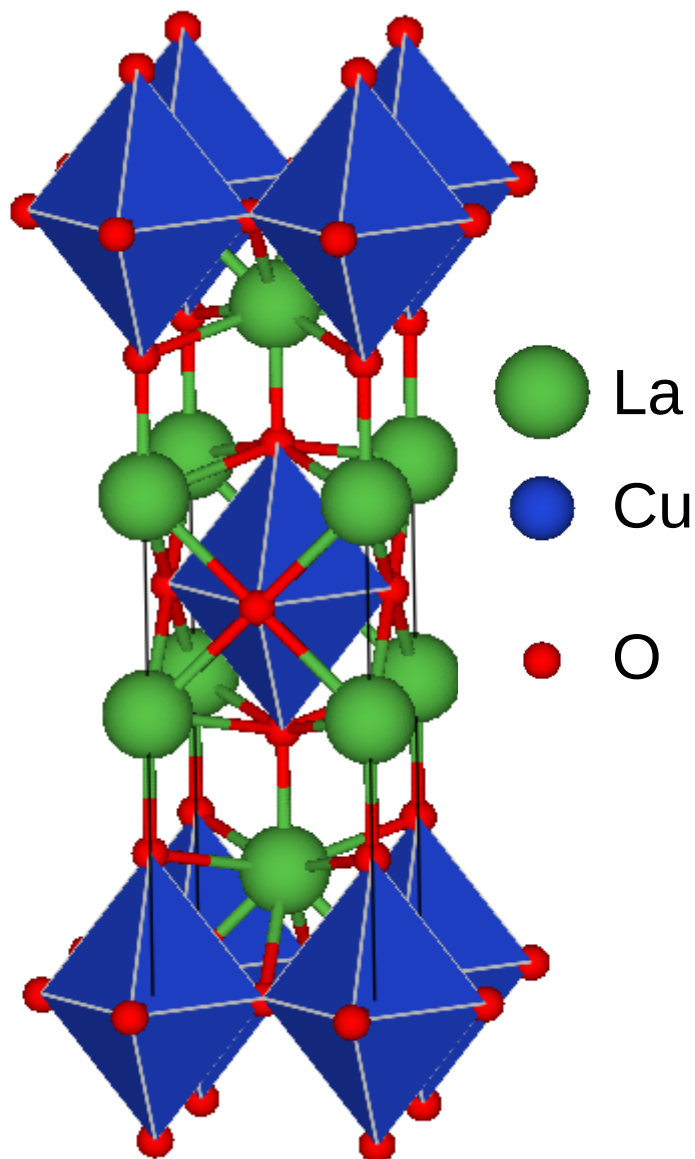


Фазовая диаграмма купратов в координатах T_c - ϵ



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

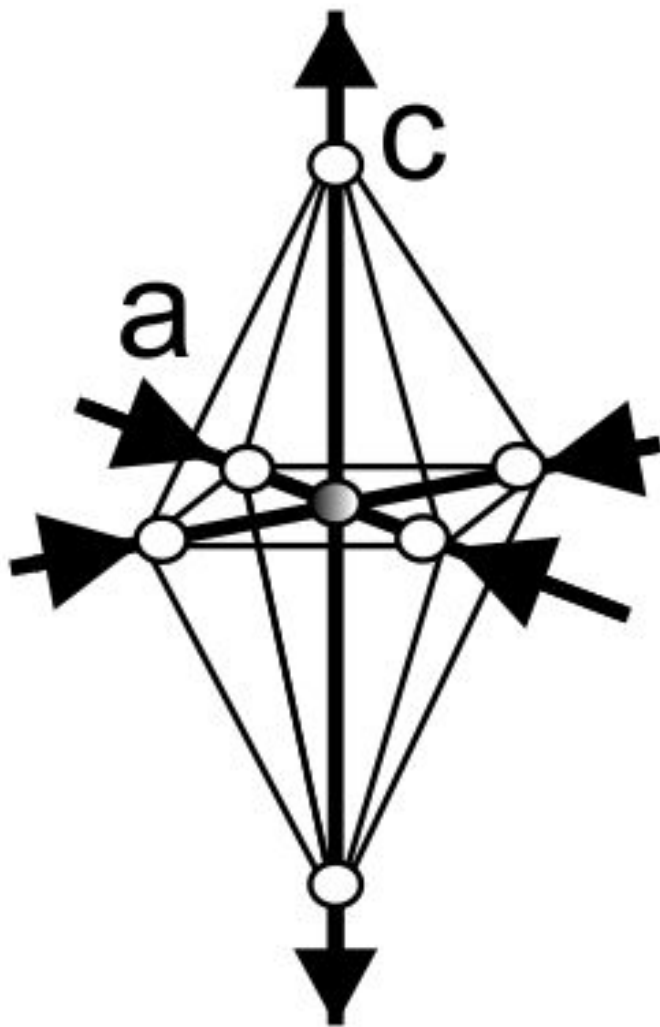
Кристаллическая структура La_2CuO_4 (НТТ)



Параметр решетки a :
 $3.74 \sim 3.94 \text{ \AA}$ (равновесный $3.78 \text{ \AA}$)

Микросмещение $\delta a/a_0 = (a - a_0)/a_0$:
 $-1\% \sim 4.15\%$

Рассматриваем шестизонную модель



- Cu-3d_{x²-y²}, Cu-3d_{z²}
- O-2p_x, O-2p_y (в плоскости xy)
- 2 O-2p_z (на оси z)

Интегралы перескока и одноэлектронные энергии при разных значениях микросмещения $\delta a/a_0$

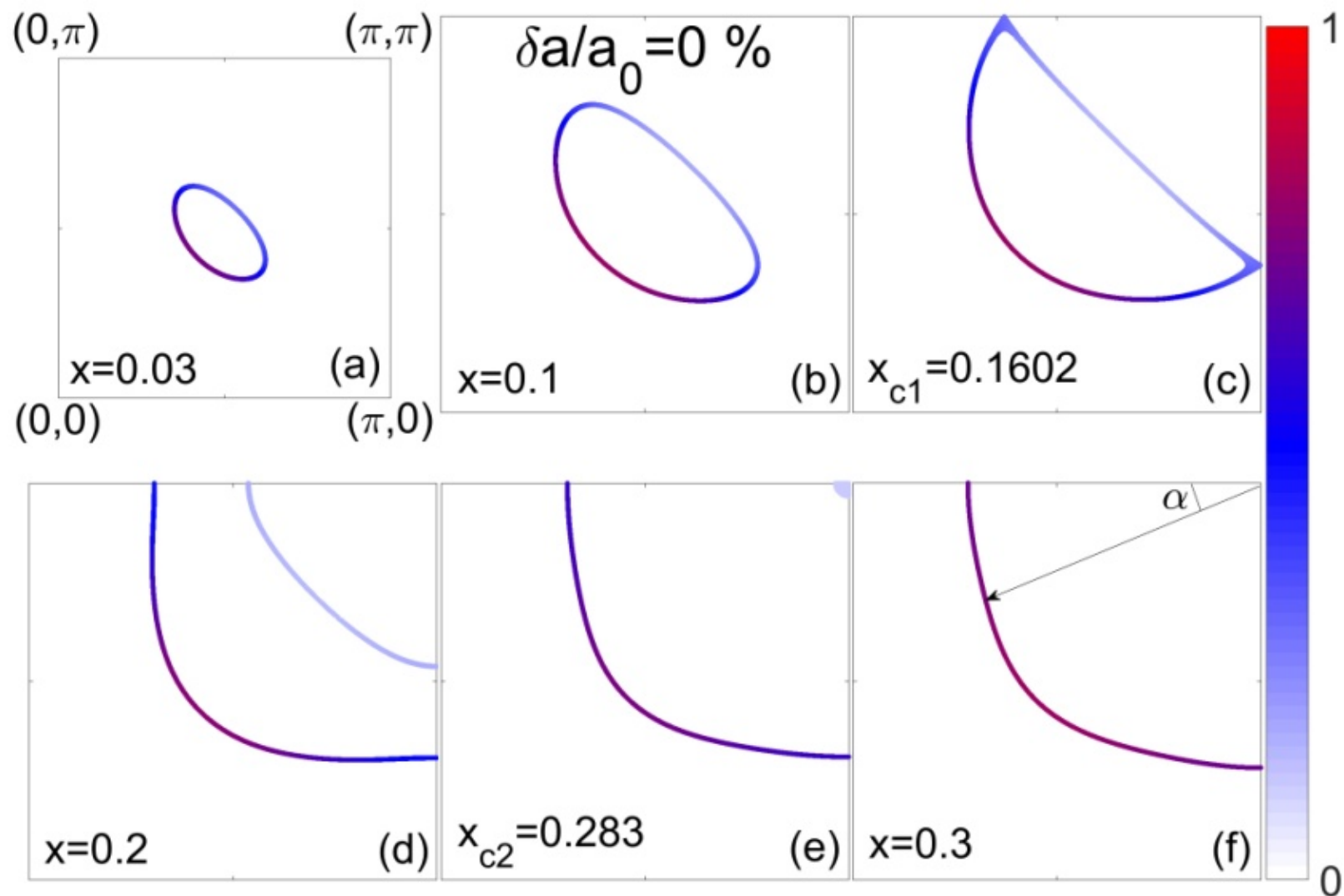
$\delta a/a_0$	−1%	−0.5%	0%	0.5%	1.5%	2.5%	3.5%	4.15%
E_{x^2}	−1.790	−1.824	−1.861	−1.900	−1.657	−2.047	−2.124	−2.180
E_{z^2}	−2.056	−2.075	−2.097	−2.119	−1.821	−2.186	−2.227	−2.260
E_{p_x}	−2.724	−2.775	−2.825	−2.863	−2.541	−2.980	−3.026	−3.053
E_{p_y}	−2.724	−2.775	−2.825	−2.863	−2.541	−2.980	−3.026	−3.056
E_{p_z}	−1.741	−1.727	−1.721	−1.720	−1.541	−1.690	−1.713	−1.729
$t(x^2, p_x(p_y))$	1.450	1.427	1.403	1.379	1.313	1.280	1.232	1.201
$t(z^2, p_x(p_y))$	0.517	0.520	0.523	0.526	0.534	0.549	0.562	0.570
$t(z^2, p_z)$	0.779	0.798	0.820	0.838	0.860	0.880	0.905	0.918
$t(p_x, p_y)$	0.893	0.876	0.859	0.842	0.809	0.768	0.732	0.710
$t(p_x(p_y), p_z)$	0.379	0.391	0.403	0.415	0.428	0.443	0.456	0.462

Интегралы перескока получены в приближении LDA при проектировании на функции Ванье^{1,2} для шестизонной модели.

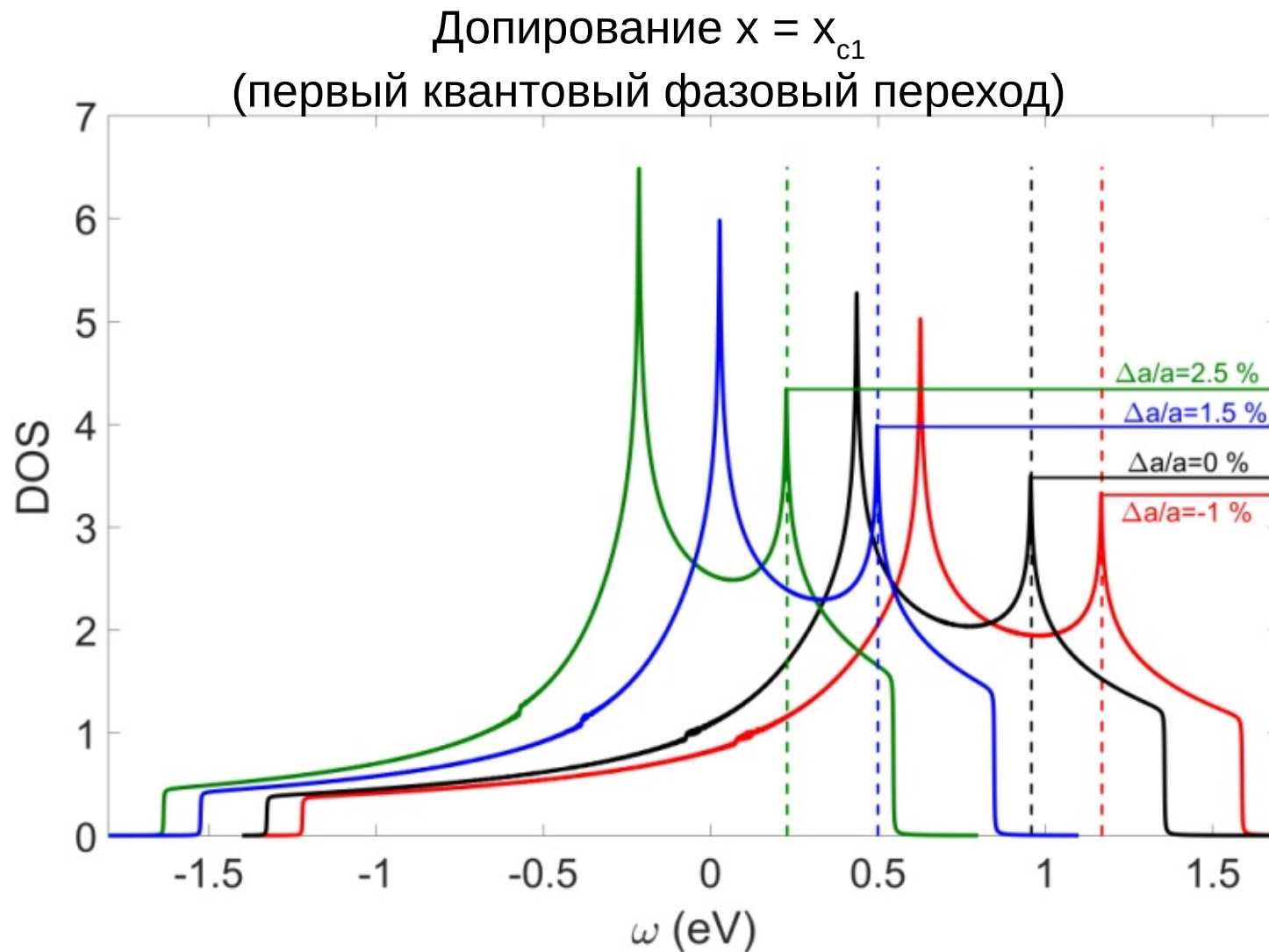
¹Andersen O., Pawlowska Z., and Japsen O., Phys. Rev. B. 34, 8, 5253 (1986)

²<http://amulet-code.org/>

Эволюция поверхности Ферми с допированием ($\delta a/a_0 = 0$)



Зависимость плотности состояний от микросмещения $\delta a/a_0$



Плотность состояний $N_{\max}(\mu_{c1})$, параметр
суперобменного взаимодействия J и их
произведение $JN_{\max}(\mu_{c1})$ при разных значениях
микросмещения $\delta a/a_0$

Compound	$T_{c\max}, K$	$\delta a/a_0$	x_{c1}	x_{c2}	$J(eV)$	$N_{\max}(\mu_{c1})$	$JN_{\max}(\mu_{c1})$
		-1 %	0.1604	0.285	0.168	3.32956	0.5594
$La_{2+x}Sr_xCuO_4$	40	0 %	0.1601	0.2828	0.156	3.499	0.5458
		0.5 %	0.16	0.2815	0.15	3.5862	0.5379
$Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$	82	1.5 %	0.1599	0.28	0.14	3.7355	0.5230
$HgBa_2Ca_2Cu_3O_{8+\delta}$	135	2.5 %	0.1594	0.277	0.127	3.9886	0.5066
$HgBa_2CaCu_2O_{6+\delta}$	127	2.7 %					
$HgBa_2CuO_{4+\delta}$	97	3.1 %					
		4.15 %	0.1589	0.2735	0.112	4.3413	0.4862

Выводы

- Получена зависимость электронной структуры слоев CuO_6 (октаэдров) от расстояния Cu-O с учетом допирования в рамках LDA+GTV
- Эффективная константа обменного взаимодействия $JN_{\text{max}}(\mu_{c1})$ (пропорциональна T_c) показывает монотонное поведение
- Недостающим звеном в получении немонотонной зависимости T_c может быть параметр орторомбического искажения

Текущая работа

