

Модели с сильными электронными корреляциями

В. Юшанхай (ЛТФ, ОИЯИ)

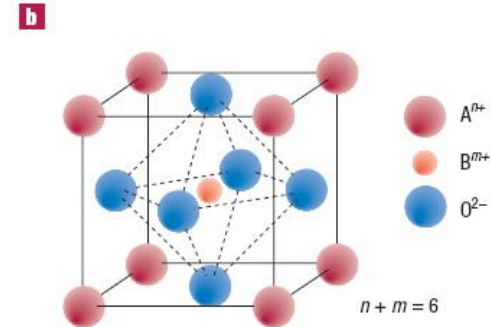
План лекций

1. Введение.
2. Электронный спектр в периодической решетке (зонный диэлектрик) и эффекты сильного внутриатомного кулоновского взаимодействия (модель Хаббарда, переход Мотта и моттовский диэлектрик).
3. Редукция модели Хаббарда к t – J модели. Дырочный носитель как спиновый полярон.
4. Переходные элементы группы железа (3d-металлы) и их оксиды. Ион 3d-металла в кристаллическом поле (энергетический спектр и спиновые состояния). Много-орбитальная решеточная модель Хаббарда.
5. Кооперативный эффект Яна – Теллера и сверхобмен -- два источника орбитального упорядочения электронной системы. Модель Кугеля – Хомского.
6. Вариация физических свойств при допировании системы; двойной обмен и магнитосопротивление.
7. Некоторые практические примеры.

1. Введение.

- модели с сильными электронными корреляциями:
модель Хаббарда, t – J модель, модель Кугеля - Хомского (спин – орбитального сверхобмена) и *т. д.*
- *оксиды переходных металлов (ПМ):*
- наноструктурированные системы на основе ПМ и их оксидов:
 - (i) металлические кластеры и мелкопористые системы
 - (ii) композитные магнетики
 - (iii) слоистые гетероструктуры

Перовскиты ABO_3
 $A = \text{La, Sr, Ca};$
 $B = \text{Co, Fe, Mn, etc.}$



PERIODIC TABLE

Atomic Properties of the Elements

Frequently used fundamental physical constants

For the most accurate values of these and other constants, visit physics.nist.gov/constants
 1 second = 9 192 631 770 periods of radiation corresponding to the transition between the two hyperfine levels of the ground state of ¹³³Cs

speed of light in vacuum	<i>c</i>	299 792 458 m s ⁻¹	(exact)
Planck constant	<i>h</i>	6.6261 × 10 ⁻³⁴ J s	($\hbar = h/2\pi$)
elementary charge	<i>e</i>	1.6022 × 10 ⁻¹⁹ C	
electron mass	<i>m_e</i>	9.1094 × 10 ⁻³¹ kg	
	<i>m_ec²</i>	0.5110 MeV	
proton mass	<i>m_p</i>	1.6726 × 10 ⁻²⁷ kg	
fine-structure constant	α	1/137.036	
Rydberg constant	<i>R_∞</i>	10 973 732 m ⁻¹	
	<i>R_∞c</i>	3.289 842 × 10 ¹⁵ Hz	
	<i>R_∞hc</i>	13.6057 eV	
Boltzmann constant	<i>k</i>	1.3807 × 10 ⁻²³ J K ⁻¹	

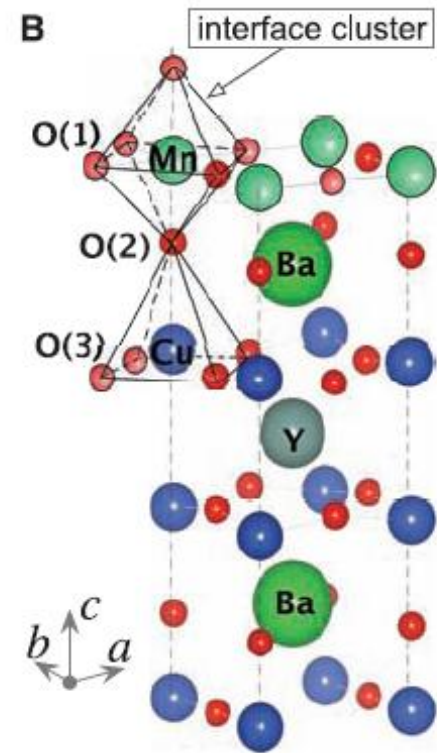
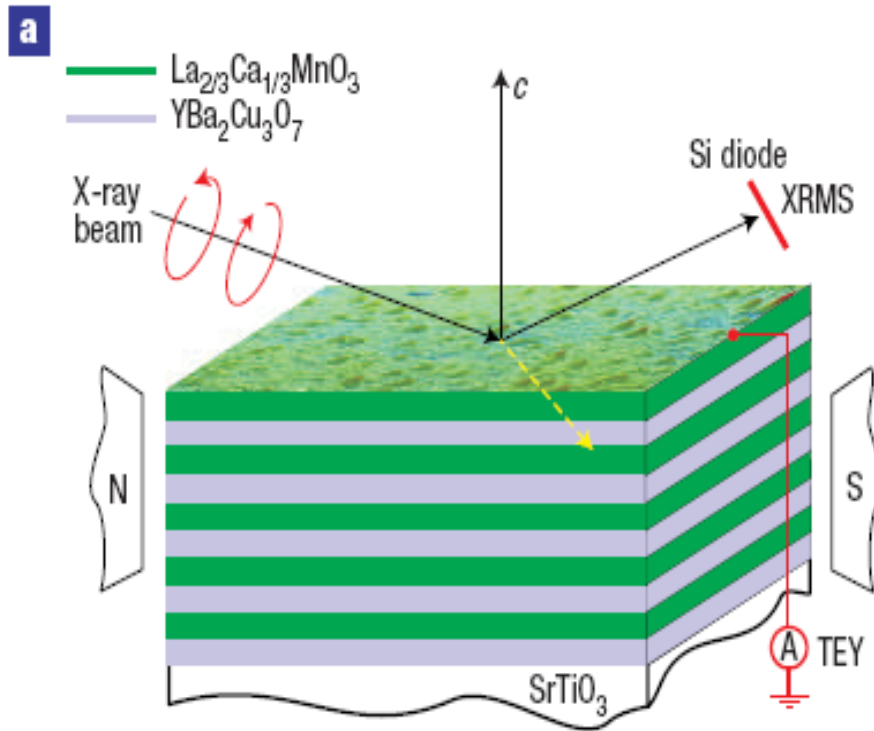
- Solids
- Liquids
- Gases
- Artificially Prepared

	Group 1 IA	Group 2 IIA	Group 3 IIIB	Group 4 IVB	Group 5 VB	Group 6 VIB	Group 7 VIIB	Group 8 VIII	Group 9 VIII	Group 10 VIII	Group 11 IB	Group 12 IIB
1	1 ² S _{1/2} H Hydrogen 1.00794 1s 13.5984											
2	3 ² S _{1/2} Li Lithium 6.941 1s ² 2s 5.3917	4 ¹ S ₀ Be Beryllium 9.012182 1s ² 2s ² 9.3227										
3	11 ² S _{1/2} Na Sodium 22.989770 [Ne]3s 5.1391	12 ¹ S ₀ Mg Magnesium 24.3050 [Ne]3s ² 7.6462										
4	19 ² S _{1/2} K Potassium 39.0983 [Ar]4s 4.3407	20 ¹ S ₀ Ca Calcium 40.078 [Ar]4s ² 6.1132	21 ² D _{3/2} Sc Scandium 44.955910 [Ar]3d4s ² 6.5615	22 ³ F ₂ Ti Titanium 47.867 [Ar]3d ² 4s ² 6.8281	23 ⁴ F _{3/2} V Vanadium 50.9415 [Ar]3d ³ 4s ² 6.7462	24 ⁷ S ₃ Cr Chromium 51.9961 [Ar]3d ⁵ 4s 6.7665	25 ⁶ S _{5/2} Mn Manganese 54.938049 [Ar]3d ⁵ 4s ² 7.4340	26 ⁵ D ₄ Fe Iron 55.845 [Ar]3d ⁶ 4s ² 7.9024	27 ⁴ F _{9/2} Co Cobalt 58.933200 [Ar]3d ⁷ 4s ² 7.8810	28 ³ F ₄ Ni Nickel 58.6934 [Ar]3d ⁸ 4s ² 7.6398	29 ² S _{1/2} Cu Copper 63.546 [Ar]3d ¹⁰ 4s 7.7264	30 ¹ S ₀ Zn Zinc 65.409 [Ar]3d ¹⁰ 4s ² 9.3942
5	37 ² S _{1/2} Rb Rubidium 85.4678 [Kr]5s 4.1771	38 ¹ S ₀ Sr Strontium 87.62 [Kr]5s ² 5.6949	39 ² D _{3/2} Y Yttrium 88.90585 [Kr]4d5s ² 6.2173	40 ³ F ₂ Zr Zirconium 91.224 [Kr]4d ² 5s ² 6.6339	41 ⁶ D _{1/2} Nb Niobium 92.90638 [Kr]4d ⁴ 5s 6.7589	42 ⁷ S ₃ Mo Molybdenum 95.94 [Kr]4d ⁵ 5s 7.0924	43 ⁶ S _{5/2} Tc Technetium (98) [Kr]4d ⁵ 5s ² 7.28	44 ⁵ F ₅ Ru Ruthenium 101.07 [Kr]4d ⁷ 5s 7.3605	45 ⁴ F _{9/2} Rh Rhodium 102.90550 [Kr]4d ⁸ 5s 7.4589	46 ¹ S ₀ Pd Palladium 106.42 [Kr]4d ¹⁰ 8.3369	47 ² S _{1/2} Ag Silver 107.8682 [Kr]4d ¹⁰ 5s 7.5762	48 ¹ S ₀ Cd Cadmium 112.411 [Kr]4d ¹⁰ 5s ² 8.9938

Period

Гетероструктуры для новых устройств в микроэлектронике

SCIENCE VOL 318 16 NOVEMBER 2007



Electronic reconstruction at an interface between a Mott insulator and a band insulator

Satoshi Okamoto & Andrew J. Millis

Department of Physics, Columbia University 538 West 120th Street, New York 10027, USA

Surface science is an important and well-established branch of materials science involving the study of changes in material properties near a surface or interface. A fundamental issue has been atomic reconstruction: how the surface lattice symmetry differs from the bulk. ‘Correlated-electron compounds’ are materials in which strong electron–electron and electron–lattice interactions produce new electronic phases, including interaction-induced (Mott) insulators, many forms of spin, charge and orbital ordering, and (presumably) high-temperature superconductivity^{1,2}. Here we propose that the fundamental issue for the new field of correlated-electron surface/interface science is ‘electronic reconstruction’: how does the surface/interface electronic phase differ from that in the bulk? As a step towards a general understanding of such phenomena, we present a theoretical study of an interface between a strongly correlated Mott insulator and a band insulator. We find dramatic interface-induced electronic reconstructions: in wide parameter ranges, the near-interface region is metallic and ferromagnetic, whereas the bulk phase on either side is insulating and antiferromagnetic. Extending the analysis to a wider range of interfaces and surfaces is a fundamental scientific challenge and may lead to new applications for correlated electron materials.

LaTiO₃ embedded in SrTiO₃

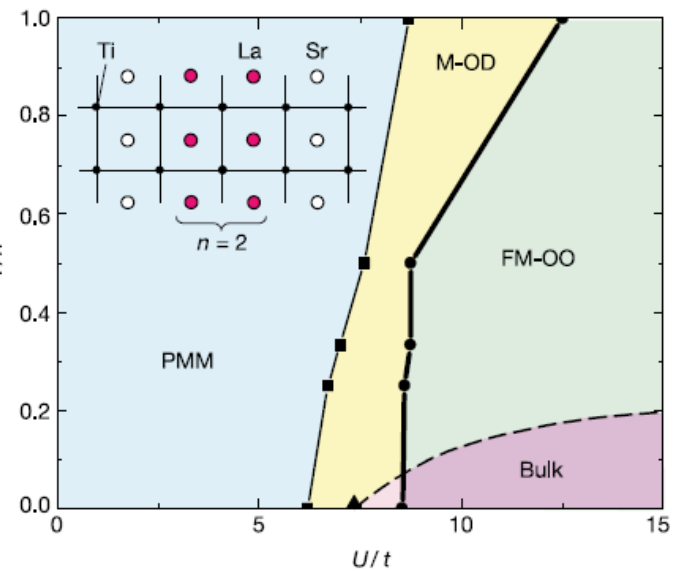
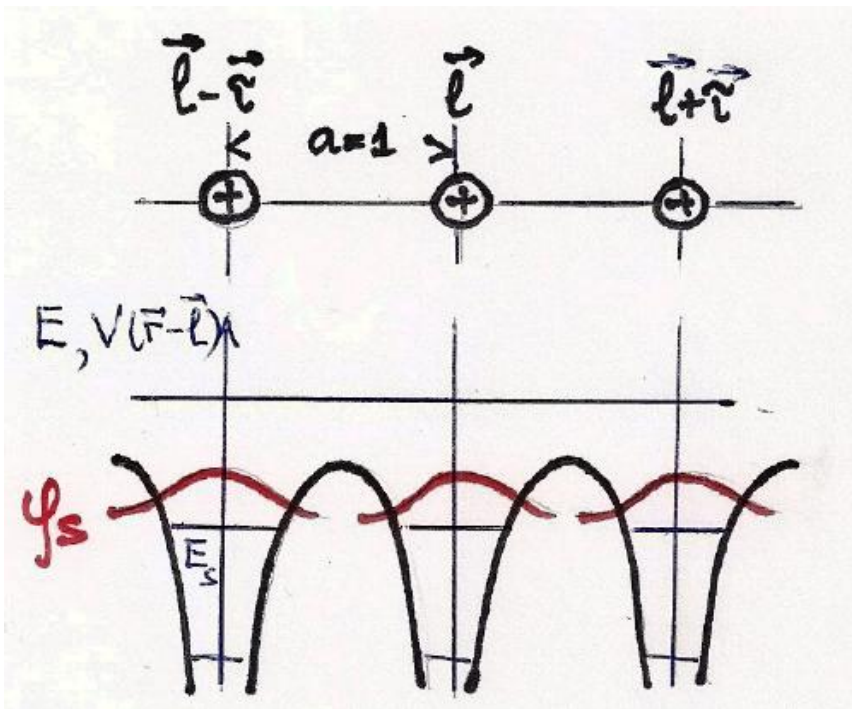


Figure 1 Ground-state phase diagram as a function of the on-site Coulomb interaction U and the inverse of the La layer number n .

Спектр электронов в периодической решетке и эффекты сильных электронных корреляций



$$(1) N_e = N_L; \quad (2) N_e = 2N_L$$

$$H_{el} = \sum_i^{N_e} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_i^2 + \sum_{\vec{l}} V(\vec{r}_i - \vec{l}) \right]$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r} - \vec{l}) \right] \varphi_s(\vec{r} - \vec{l}) = E_s \varphi_s(\vec{r} - \vec{l})$$

Базис $\{ \varphi_s(\vec{r} - \vec{l}) \}$ из N_L в. ф-ий:
$$\int d\vec{r} \varphi_s^*(\vec{r} - \vec{l}) \varphi_s(\vec{r} - \vec{l}') = \delta_{\vec{l}\vec{l}'} = \begin{cases} 1, & \vec{l} = \vec{l}' \\ 0, & \vec{l} \neq \vec{l}' \end{cases}$$

Полевые операторы:
$$\begin{cases} \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) = \sum_{\vec{l}}^{N_L} \varphi_s^*(\vec{r} - \vec{l}) c_{\vec{l}\sigma}^\dagger \\ \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}) = \sum_{\vec{l}}^{N_L} \varphi_s(\vec{r} - \vec{l}) c_{\vec{l}\sigma} \end{cases} \quad \{ c_{\vec{l}\sigma}, c_{\vec{l}'\sigma}^\dagger \} = \delta_{\vec{l}\vec{l}'} \delta_{\sigma\sigma'}$$

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int d\vec{r} \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + \sum_{\vec{l}} V(\vec{r} - \vec{l}) \right] \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}) =$$

$$= \epsilon_s \sum_{l\sigma} c_{l\sigma}^{\dagger} c_{l\sigma} - t \sum_{\vec{l}, \vec{r}} (c_{\vec{l}+\tau\sigma}^{\dagger} c_{l\sigma} + h.c.)$$

$$\epsilon_s = E_s + \Delta E_s$$

$$\Delta E_s = \int d\vec{r} \varphi_s^*(\vec{r} - \vec{l}) \sum_{\vec{l}' \neq \vec{l}} V(\vec{r} - \vec{l}') \varphi_s(\vec{r} - \vec{l}')$$

$$-t = \int d\vec{r} \varphi_s^*(\vec{r} - \vec{l}) V(\vec{r} - \vec{l}) \varphi_s(\vec{r} - \vec{l} - \tau)$$

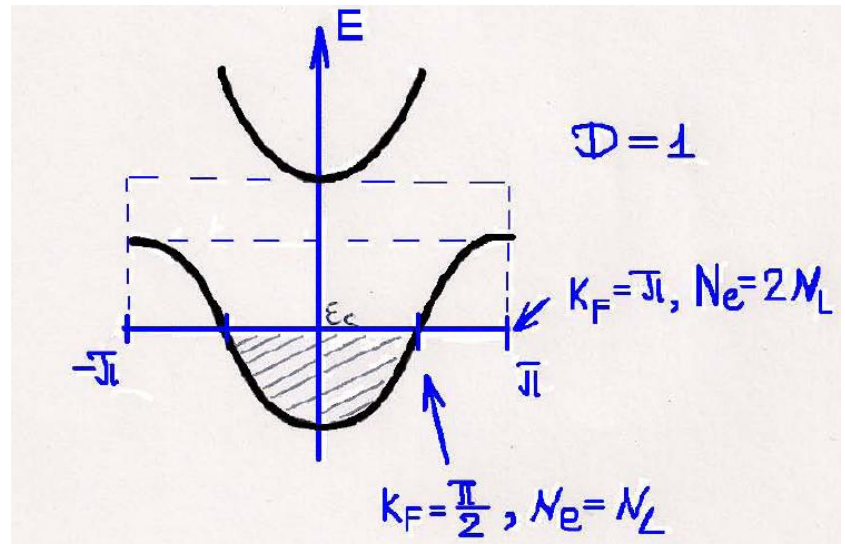
$$c_{\vec{l}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_L}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{l}} c_{\vec{k}\sigma};$$

$$k_{\alpha} = \frac{2\pi}{L_{\alpha}} n_{\alpha}; \quad -\frac{L_{\alpha}}{2} \leq n_{\alpha} < \frac{L_{\alpha}}{2}; \quad \left(N_L = \prod_{\alpha} L_{\alpha} \right)$$

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma};$$

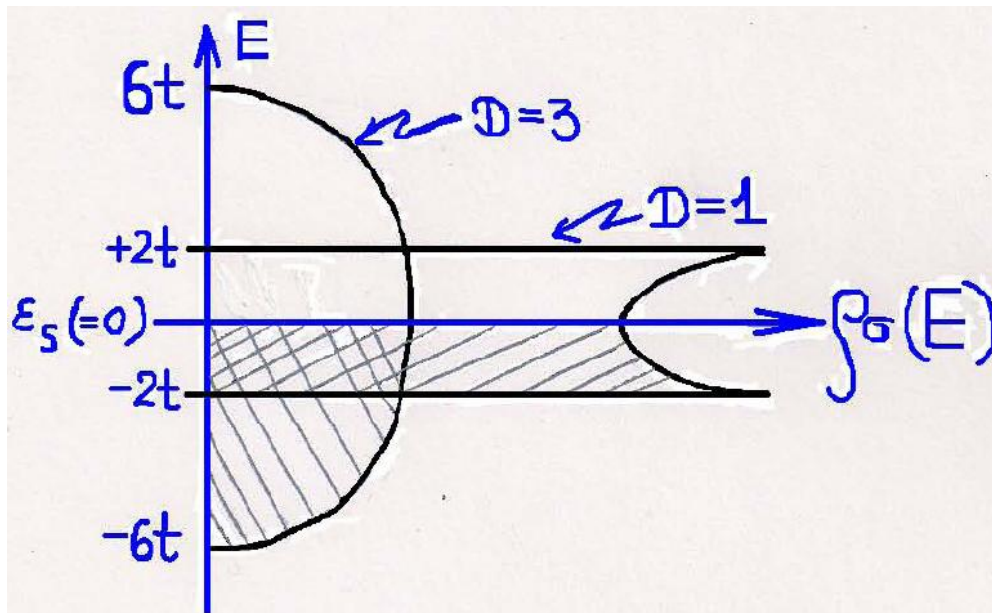
$$\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_s - 2t \sum_{\alpha} \cos k_{\alpha};$$

$$(D = 1, 2, 3)$$



Плотность электронных состояний:

$$\rho_{\sigma}(E) = \frac{1}{N_L} \sum_{\vec{k}} \delta(E - \epsilon(\vec{k}));$$



$$|FS\rangle = \prod_{\vec{k}}^{\epsilon(\vec{k}) < \epsilon_F} c_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\vec{k}\downarrow}^{\dagger} |0\rangle;$$

$$(N_e/N_L = 1, \epsilon_F = \epsilon_s)$$

Учтем эффекты кулоновского взаимодействия

$$V = \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}_1) \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \hat{\Psi}_{\sigma'}(\vec{r}_2) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}_1) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} U_{l_1 l_2 l_3 l_4} c_{l_1 \sigma}^\dagger c_{l_2 \sigma'}^\dagger c_{l_3 \sigma'} c_{l_4 \sigma} \end{aligned}$$

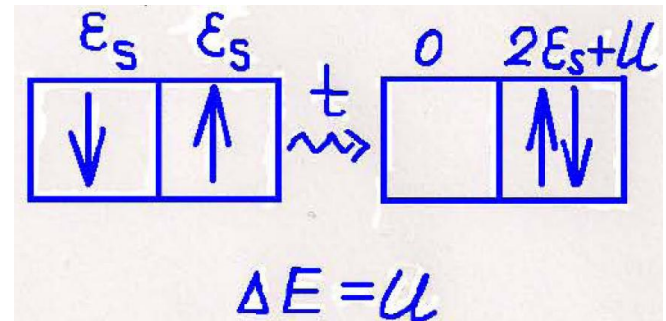
$$\vec{l}_1 = \vec{l}_2 = \vec{l}_3 = \vec{l}_4 = \vec{l}: U_{llll} = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 |\varphi_s(\vec{r}_1 - \vec{l})|^2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} |\varphi_s(\vec{r}_2 - \vec{l})|^2 \equiv U$$

$$\sum_{\sigma\sigma'} c_{l\sigma}^\dagger c_{l\sigma'}^\dagger c_{l\sigma'} c_{l\sigma} = \sum_{\sigma} n_{l\sigma} n_{l\bar{\sigma}} = 2n_{l\uparrow} n_{l\downarrow}; \quad (\bar{\sigma} = -\sigma)$$

Гамильтониан Хаббарда: $H = H_{band} + H_U$

$$H_{band} = \epsilon_s \sum_{l,\sigma} n_{l\sigma} - t \sum_{l,\tau,\sigma} (c_{l+\tau\sigma}^\dagger c_{l\sigma} + h.c.)$$

$$H_U = U \sum_l n_{l\uparrow} n_{l\downarrow}$$



Исследуем нестабильность Ферми-жидкости :

$$|FS\rangle = \prod_{\vec{k}}^{\epsilon(k) < \epsilon_F} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle ;$$

$$E_0/N_L = \langle FS | H_{band} + H_U | FS \rangle / N_L$$

$$\langle FS | H_{band} | FS \rangle / N_L = \epsilon_s - \alpha t, \quad (\alpha \sim 1)$$

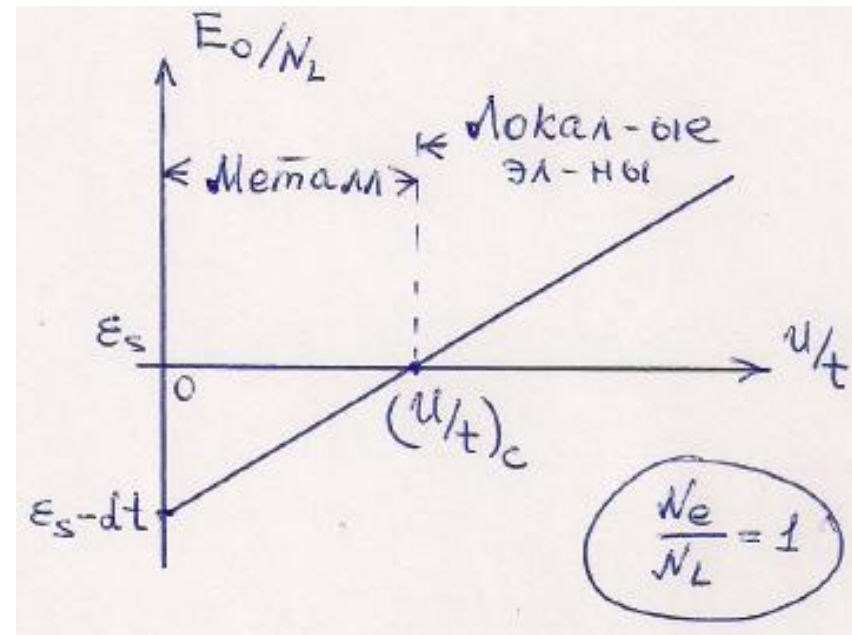
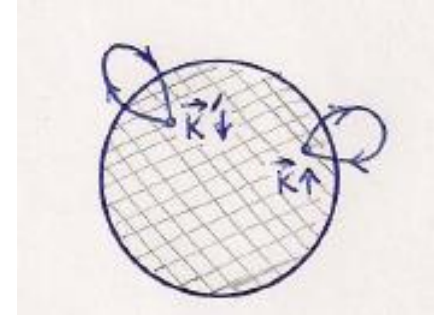
$$\langle FS | H_U | FS \rangle / N_L = \frac{U}{N_L^2} \sum_{kk'q} \langle FS | c_{k+q\uparrow}^\dagger c_{k'-q\downarrow}^\dagger c_{k'\downarrow} c_{k\uparrow} | FS \rangle$$

$$= \frac{U}{N_L^2} \sum_{kk'} \langle FS | c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} | FS \rangle \langle FS | c_{k'\downarrow}^\dagger c_{k'\downarrow} | FS \rangle$$

$$= \frac{U}{N_L^2} \left(\sum_k \langle n_{k\uparrow} \rangle \right) \left(\sum_{k'} \langle n_{k'\downarrow} \rangle \right)$$

$$= U (N_e/2N_L)^2 = U/4$$

$$E_0/N_L = \epsilon_s - \alpha t + U/4$$

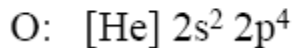
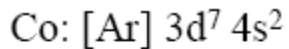
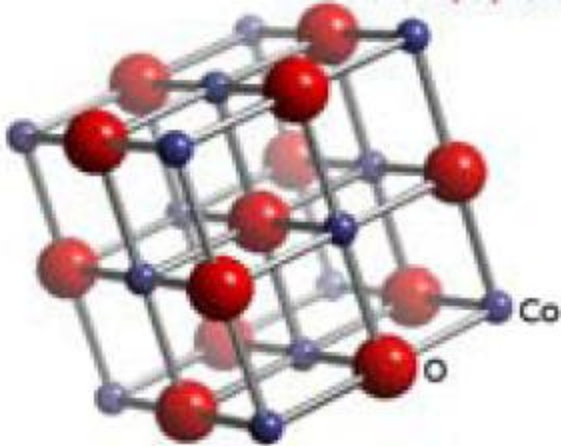


Переход Мотта

- индуцированная кулоновским взаимодействием коллективная локализация электронов в системе с наполовину заполненной зоной;
- переход из металлического (проводящего) состояния в диэлектрическое состояние, сопровождаемое возникновением щели в спектре электронов.

Основное состояние моттовского диэлектрика, $U/t > (U/t)_c$, характеризуется дальним магнитным порядком;

- 2^{N_L} - кратное ($s=1/2$) спиновое вырождение снимается за счет квантовых флуктуационных эффектов (механизм кинетического обмена Андерсона).



$$9 + 6 = 15$$

$$\rho \approx 10^8 \Omega \text{ cm}$$

$$\text{Fe} \rightarrow \rho \approx 10^{-7} \Omega \text{ cm}$$

★ Основное состояние одномерной, $D=1$, системы электронов с $N_e/N_L = 1$ щелевое, т.е. диэлектрическое, для $U > 0$ и немагнитное вследствие сильных квантовых флуктуаций.

Исследуем спектр одночастичных электронных возбуждений в модели Хаббарда в пределе $U/t \gg 1$, ($N_e/N_L = 1$)

Введем запаздывающую ф-ию Грина: $\ll c_{l\sigma}(t) | c_{l'\sigma}^\dagger \gg = -i\theta(t) \langle \{c_{l\sigma}(t), c_{l'\sigma}^\dagger\} \rangle$

$$c_{l\sigma}(t) = e^{iHt} c_{l\sigma} e^{-iHt}; \quad \langle \dots \rangle = \frac{1}{Z} Sp \dots e^{-\beta H};$$

$$\xrightarrow{\mathcal{FT}} G_\sigma(\vec{k}, \omega) \simeq \sum_n \frac{a^{(n)}(\vec{k})}{\omega - \epsilon^{(n)}(\vec{k}) + i\gamma^{(n)}(\vec{k})}; \quad G_\sigma^{(0)}(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon(\vec{k})};$$

$$i \frac{d}{dt} \ll c_{l\sigma}(t) | c_{l'\sigma}^\dagger \gg = \delta(t) \langle \{c_{l\sigma}, c_{l'\sigma}^\dagger\} \rangle + \ll [c_{l\sigma}, H](t) | c_{l'\sigma}^\dagger \gg$$

$$\ll c_{l\sigma} | c_{l'\sigma}^\dagger \gg_\omega = \int dt e^{i\omega t} \ll c_{l\sigma}(t) | c_{l'\sigma}^\dagger \gg$$

$$\omega \ll c_{l\sigma} | c_{l'\sigma}^\dagger \gg_\omega = \delta_{ll'} + \ll [c_{l\sigma}, H] | c_{l'\sigma}^\dagger \gg_\omega$$

$$(1) : (\omega - \epsilon_s) \ll c_{l\sigma} | c_{l'\sigma}^\dagger \gg_\omega = \delta_{ll'} - t \sum_\tau \ll c_{l+\tau\sigma} | c_{l'\sigma}^\dagger \gg_\omega + U F_\sigma(\vec{l} - \vec{l}', \omega)$$

$$F_\sigma(\vec{l} - \vec{l}', \omega) = \ll c_{l\sigma} n_{l\bar{\sigma}} | c_{l'\sigma}^\dagger \gg_\omega; \quad (\bar{\sigma} = -\sigma)$$

$$c_{l\uparrow} n_{l\downarrow} \begin{Bmatrix} |0\rangle \\ |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \end{Bmatrix}_l = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ |\uparrow\rangle \end{Bmatrix}_l \quad c_{l\uparrow}^\dagger n_{l\downarrow} \begin{Bmatrix} |0\rangle \\ |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \end{Bmatrix}_l = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ |\uparrow\downarrow\rangle \\ 0 \end{Bmatrix}_l$$

$$(2) : (\omega - \epsilon_s - U) F_\sigma(\vec{l} - \vec{l}', \omega) = \delta_{ll'} \langle n_{l\bar{\sigma}} \rangle - t \sum_\tau \ll n_{l\bar{\sigma}} c_{l+\tau\sigma} | c_{l'\sigma}^\dagger \gg_\omega + \\ \ll c_{l\bar{\sigma}}^\dagger c_{l+\tau\bar{\sigma}} c_{l\sigma} | c_{l'\sigma}^\dagger \gg_\omega - \ll c_{l+\tau\bar{\sigma}}^\dagger c_{l\bar{\sigma}} c_{l\sigma} | c_{l'\sigma}^\dagger \gg_\omega$$

$$\ll n_{l\bar{\sigma}} c_{l+\tau\sigma} | c_{l'\sigma}^\dagger \gg_\omega \approx \langle n_{l\bar{\sigma}} \rangle \ll c_{l+\tau\sigma} | c_{l'\sigma}^\dagger \gg_\omega$$

$$G_\sigma(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{N_L} \sum_{l-l'} e^{-i\vec{k}(\vec{l}-\vec{l}')} \ll c_{l\sigma} | c_{l'\sigma}^\dagger \gg_\omega; \quad F_\sigma(\vec{k}, \omega) = \dots$$

$$\begin{cases} (\omega - \epsilon(\vec{k})) G_\sigma(\vec{k}, \omega) = 1 + U F_\sigma(\vec{k}, \omega); \\ (\omega - \epsilon_s - U) F_\sigma(\vec{k}, \omega) = \langle n_{l\bar{\sigma}} \rangle + \epsilon(\vec{k}) \langle n_{l\bar{\sigma}} \rangle G_\sigma(\vec{k}, \omega); \end{cases}$$

$$G_\sigma(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{B(\omega) - \epsilon(\vec{k})} \quad B^{-1}(\omega) = \frac{1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{\omega} + \frac{\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{\omega - U}$$

$$U = 0: \quad G_\sigma(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon(\vec{k})}$$

$$U \gg t: \quad G_\sigma(\vec{k}, \omega) = \frac{1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{\omega - (1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle) \epsilon(\vec{k})} + \frac{\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{\omega - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle \epsilon(\vec{k}) - U}$$

Корреляционные эффекты

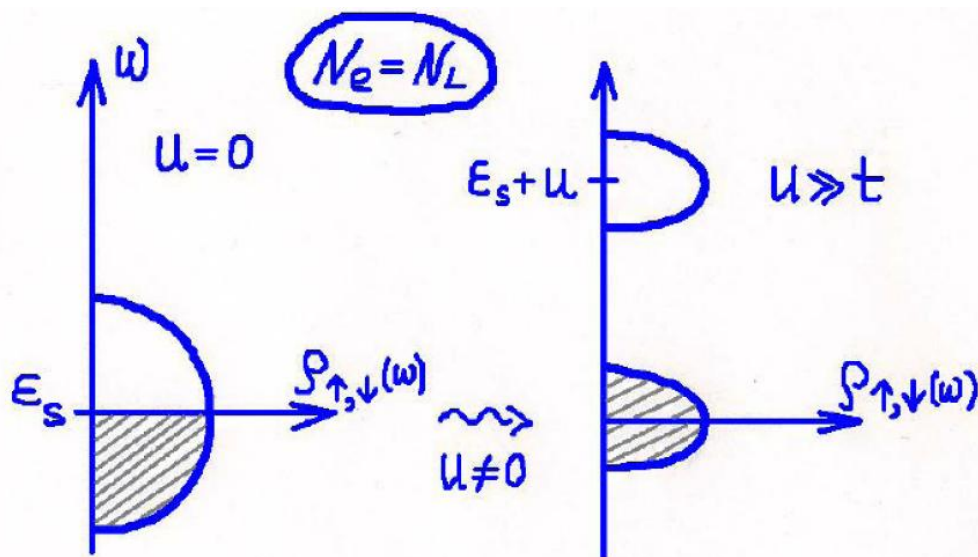
- расщепление электронной зоны на две (хаббардовские) подзоны;
- сужение хаббардовских подзон и перераспределение спектрального веса в зависимости от концентрации электронов.

$$(N_e/N_L = 1, \quad \langle n_{\uparrow} \rangle = \langle n_{\downarrow} \rangle = 1/2)$$

$$G_{\sigma}(\vec{k}, \omega) = \frac{1/2}{\omega - \frac{1}{2}\epsilon(\vec{k})} + \frac{1/2}{\omega - \frac{1}{2}\epsilon(\vec{k}) - U}$$

$$\rho_{\uparrow, \downarrow}^{(U=0)}(\omega) = \frac{1}{N_L} \sum_k \delta(\omega - \epsilon(\vec{k}))$$

$$\rho_{\uparrow, \downarrow}^{(U \gg t)}(\omega) = \frac{1}{2N_L} \sum_k \delta\left(\omega - \frac{1}{2}\epsilon(\vec{k})\right) + \frac{1}{2N_L} \sum_k \delta\left(\omega - \frac{1}{2}\epsilon(\vec{k}) - U\right)$$



Спектр моттовского диэлектрика

t-J модель – низкоэнергетический предел модели Хаббарда

при $N_e/N_L \leq 1$

Локальный базис и операторы Хаббарда:

$$X_i^{pq} = |\vec{i}, p\rangle \langle \vec{i}, q| \left\{ \begin{array}{l} |\vec{i}, 0\rangle \\ |\vec{i}, \uparrow\rangle \\ |\vec{i}, \downarrow\rangle \\ |\vec{i}, 2\rangle \end{array} \right\}$$

Бозе-подобные: $X_i^{00}, X_i^{\sigma\sigma}, X_i^{22}$

$$X_i^{\uparrow\downarrow} = S_i^+, X_i^{\downarrow\uparrow} = S_i^-, \quad (s = 1/2)$$

$$S_i^z = \frac{1}{2}(X_i^{\uparrow\uparrow} - X_i^{\downarrow\downarrow});$$

Ферми-подобные: $X_i^{\sigma 0}, X_i^{2\sigma}, \dots$

$$c_{i\sigma}^\dagger = X_i^{\sigma 0} + \sigma X_i^{2\bar{\sigma}};$$

$$c_{i\sigma} = X_i^{0\sigma} + \sigma X_i^{\bar{\sigma} 2};$$

$$\sigma = +(\uparrow), -(\downarrow)$$

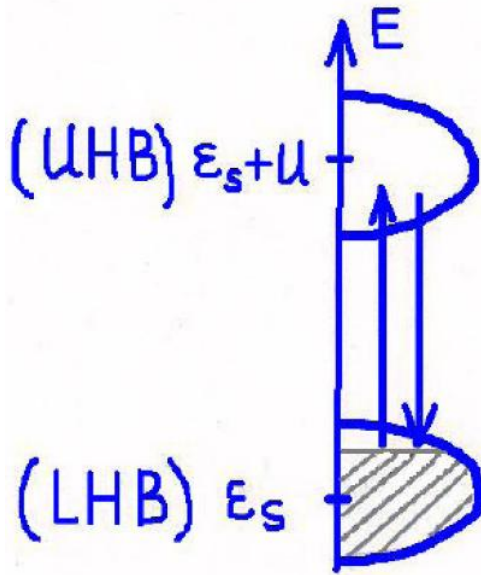
$$[X_i^{pq}, X_j^{rs}]_{\mp} =$$

$$= \delta_{ij} (\delta_{qr} X_i^{ps} \mp \delta_{ps} X_i^{rq});$$

$$\epsilon_s = 0; \quad H_{band} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} =$$

$$c_{i\sigma}^{\dagger} = X_i^{\sigma 0} + \sigma X_i^{2\bar{\sigma}}; \quad = H_t^{(1)} + H_t^{(2)} + (H_t^{(2\leftarrow 1)} + H_t^{(1\leftarrow 2)})$$

$$c_{i\sigma} = X_i^{0\sigma} + \sigma X_i^{\bar{\sigma} 2};$$



$$H_t^{(2)} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2};$$

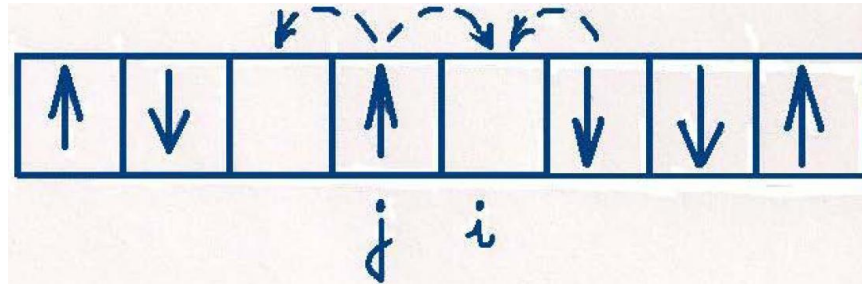
$$(H_t^{(2\leftarrow 1)} + H_t^{(1\leftarrow 2)}) = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} \sigma (X_i^{2\bar{\sigma}} X_j^{0\sigma} + X_i^{\sigma 0} X_j^{\bar{\sigma} 2});$$

$$H_t^{(1)} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma};$$

$\{|\Psi_\lambda^{(N_e)}\rangle\}$ - подпространство электронных конфигураций ($N_e/N_L \leq 1$) без “двоек”

Проектор на “нижнее” подпространство: $P^{(1)} = \prod_i^{N_L} P_i^{(1)}$; $P_i^{(1)} = X_i^{00} + \sum_\sigma X_i^{\sigma\sigma}$

$P^{(1)} H P^{(1)} = H_t^{(1)} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_\sigma X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma}$ - движение эл-ов (дырок) в LHB



$$H_t^{(1)} \{|\Psi_\lambda^{(N_e=N_L)}\rangle\} = E_0; \quad (E_0 = \epsilon_s N_L = 0, \quad \epsilon_s = 0)$$

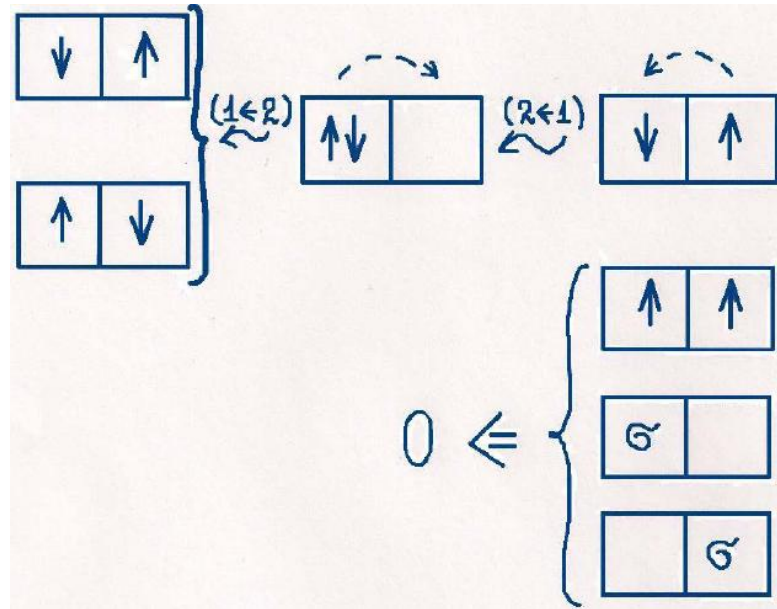
Операторная форма теории возмущения для эффективного гамильтониана

на подпр - ве $\{|\Psi_\lambda^{(N_e)}\rangle\}$

$$H_{eff} = P^{(1)} \left(H_t^{(1)} + H_t^{(1 \leftarrow 2)} \frac{1 - P^{(1)}}{E_0 - H_0} H_t^{(2 \leftarrow 1)} \right) P^{(1)};$$

$$H_0 = H_U = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \equiv U \sum_i X_i^{22};$$

$$\begin{aligned} \Delta H_t^{(1)} &= \sum_{\langle ij \rangle, \sigma'} \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (\sigma' t) X_i^{\sigma'0} X_j^{\bar{\sigma}'2} \frac{1}{E_0 - H_0} (\sigma t) X_j^{2\bar{\sigma}} X_i^{0\sigma} = \\ &= -\frac{t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma' \sigma} [(\sigma' \sigma) X_i^{\sigma'0} X_j^{\bar{\sigma}'2} X_j^{2\bar{\sigma}} X_i^{0\sigma} + (i \leftrightarrow j)] = \end{aligned}$$



$$= -\frac{2t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma' \sigma} (\sigma' \sigma) X_i^{\sigma' \sigma} X_j^{\bar{\sigma}' \bar{\sigma}} =$$

$$= -\frac{2t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle} (X_i^{\sigma \sigma} X_j^{\bar{\sigma} \bar{\sigma}} - X_i^{\bar{\sigma} \sigma} X_j^{\sigma \bar{\sigma}}) =$$

$$= -\frac{2t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle} \left(X_i^{\uparrow\uparrow} X_j^{\downarrow\downarrow} + X_i^{\downarrow\downarrow} X_j^{\uparrow\uparrow} - \underbrace{X_i^{\downarrow\uparrow} X_j^{\uparrow\downarrow} - X_i^{\uparrow\downarrow} X_j^{\downarrow\uparrow}}_{-S_i^- S_j^+ - S_i^+ S_j^-} \right) =$$

$$\begin{cases} S_i^z = \frac{1}{2}(X_i^{\uparrow\uparrow} - X_i^{\downarrow\downarrow}); \\ N_i = X_i^{\uparrow\uparrow} + X_i^{\downarrow\downarrow} \end{cases}$$

$$= -\frac{2t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle} \left\{ \frac{N_i N_j}{2} - 2 \left[S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^- S_j^+ + S_i^+ S_j^-) \right] \right\} =$$

$$= J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\vec{S}_i \vec{S}_j - \frac{1}{4} N_i N_j \right); \quad J = \frac{4t^2}{U}; \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Кинетичекий механизм спинового} \\ \text{обмена (сверхобмен Андерсона)} \end{array} \right\}$$

$$H_{t-J} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\vec{S}_i \vec{S}_j - \frac{1}{4} N_i N_j \right)$$

$$N_e = N_L: \quad H_{t-J} \implies H_J = J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{- гамильтониан Гайзенберга} \\ \text{с АФМ обменом;} \end{array} \right\}$$

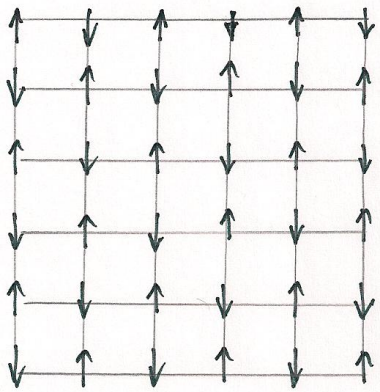
$$N_e = N_L(1 - \delta n): \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{при малом дырочном допировании } (\delta n \ll 1) \text{ t-J модель} \\ \text{описывает “дырочные” квазичастицы в “разбавленном” АФМ.} \end{array} \right\}$$

Спиновый полярон в $t-J$ модели

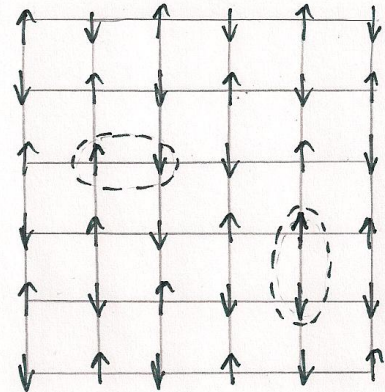
$$H_{t-J} = t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} X_i^{0\sigma} X_j^{\sigma 0} + J \sum_{\langle ij \rangle} \left[S_i^z S_j^z + \frac{\eta}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right]$$

$\eta = 0$: 'Изинг' $\eta = 1$: 'Гайзенберг'

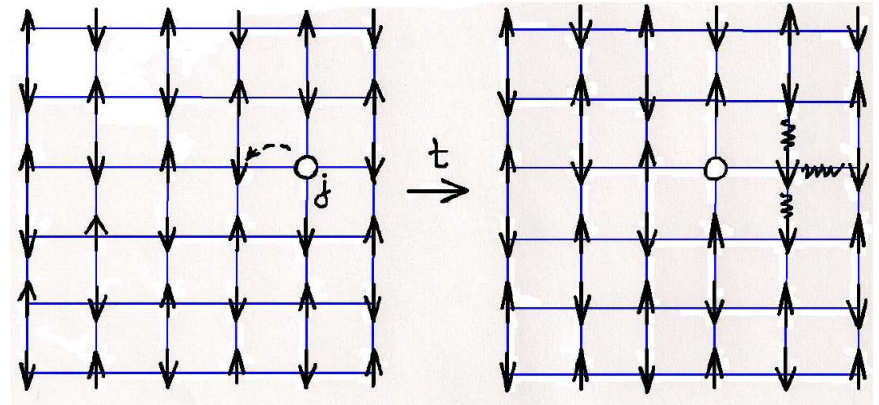
$$H_J \left| \Psi_{AFM}^{(\eta)} \right\rangle = E_0^{(\eta)} \left| \Psi_{AFM}^{(\eta)} \right\rangle; \quad N_e = N_L \quad (N_h = 0)$$



$\eta = 0$

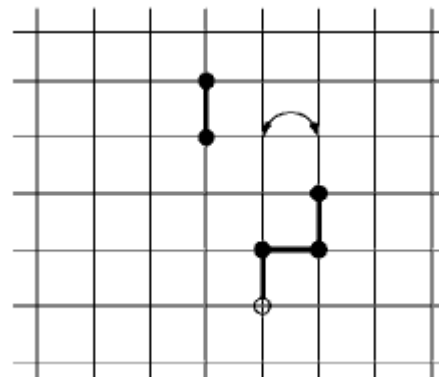
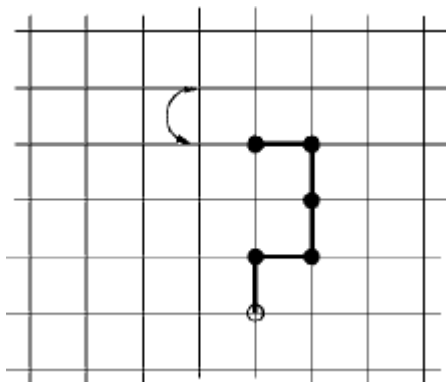
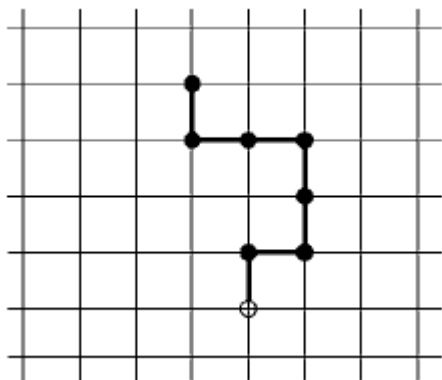


$0 < \eta < 1$



$$\left| \Phi^{(0)}(j) \right\rangle = X_j^{0\uparrow} \left| \Psi_{AFM}^{(\eta)} \right\rangle \rightarrow \left| \Phi^{(1)}(j) \right\rangle = \sum_{\tau} X_{j+\tau}^{0\downarrow} S_j^- \left| \Psi_{AFM}^{(\eta)} \right\rangle$$

$$\begin{aligned}
|\Phi^{(0)}(j)\rangle &= X_j^{0\uparrow} |\Psi_{AFM}^{(\eta)}\rangle \rightarrow |\Phi^{(1)}(j)\rangle = \sum_{\tau} X_{j+\tau}^{0\downarrow} S_j^{-} |\Psi_{AFM}^{(\eta)}\rangle \\
&\rightarrow |\Phi^{(2)}(j)\rangle = \sum_{\tau_2, \tau_1} X_{j+\tau_2+\tau_1}^{0\uparrow} S_{j+\tau_1}^{+} S_j^{-} |\Psi_{AFM}^{(\eta)}\rangle \\
\dots &\rightarrow |\Phi^{(l)}(j)\rangle \qquad \Delta E_J^{(l)} \sim J l
\end{aligned}$$



В изинговом АФМ, $\eta = 0$, ‘дырка’ заперта и совершает осцилляторное движение возле начального положения .

В квантовом АФМ, $0 < \eta$, спиновые флуктуации позволяют ‘дырке’ двигаться по решетке когерентно; дырочная квазичастица как спиновый полярон характеризуется законом дисперсии $\tilde{\epsilon}(\vec{k})$ существенно отличным от свободной (‘затравочной’) дисперсии $\epsilon(\vec{k})$.

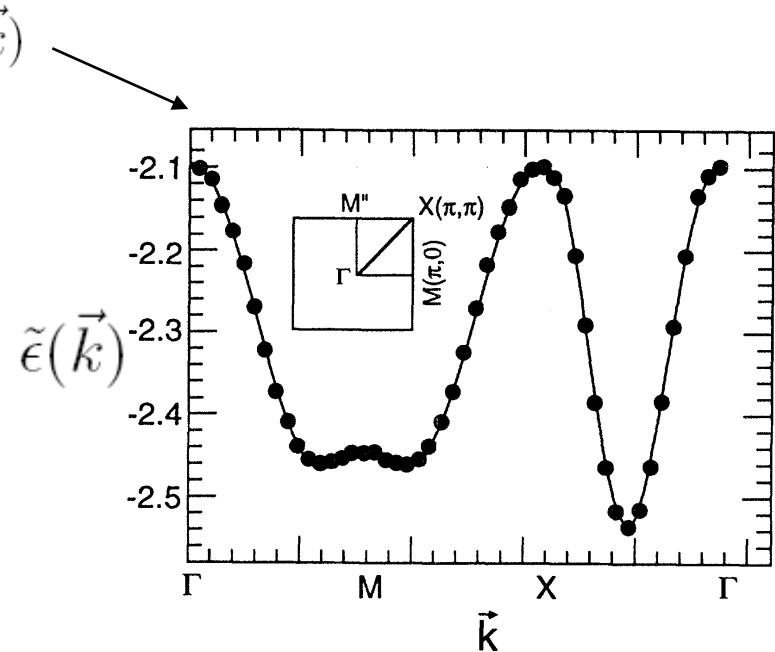
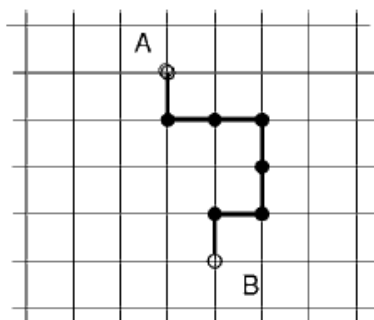
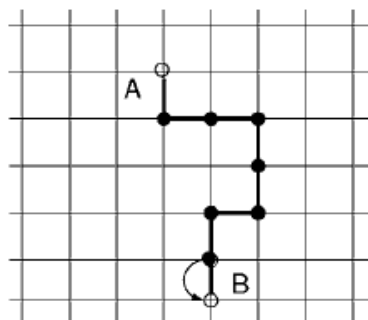


FIG. 19. Hole dispersion curve plotted along the direction $\Gamma M X \Gamma$ in the Brillouin zone (see inset), for a 32^2 lattice, for $J = 0.2$ (taken from Liu and Manousakis, 1991, 1992).

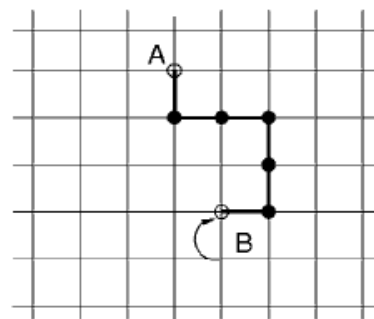
Два спиновых полярона образуют связанное состояние ?



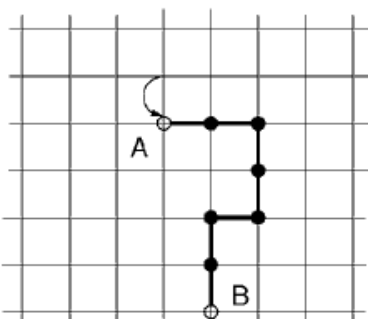
(a)



(b)



(c)



(d)

PHYSICAL REVIEW B 75, 035106 (2007)

Efstratios Manousakis

Элементы переходных металлов (3d - металлы).

3d – ион в кристаллическом поле.

l	0	1	2	3
	s	p	d	f

Атомные орбитали: $\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$;

$$n = 0, 1, 2, \dots; \quad l \leq n - 1; \quad -l < m < l;$$

Вещественный базис для угловой волн. ф-ии электронов 3d - оболочки ($n = 3, \quad l = 2$)

$$d_{3z^2-r^2} = Y_{20} \cong \frac{1}{2} \frac{3z^2 - r^2}{r^2};$$

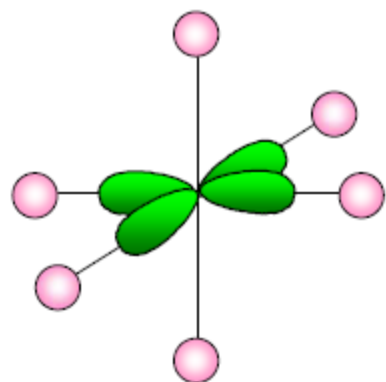
$$d_{x^2-y^2} = \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{22} + Y_{2-2}) \cong \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{x^2 - y^2}{r^2};$$

$$d_{xy} = \frac{-i}{\sqrt{2}} (Y_{22} - Y_{2-2}) \cong \frac{xy}{r^2};$$

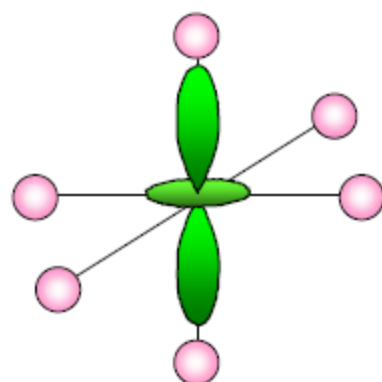
$$d_{xz} = \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{21} + Y_{2-1}) \cong \frac{xz}{r^2};$$

$$d_{yz} = \frac{-i}{\sqrt{2}} (Y_{21} - Y_{2-1}) \cong \frac{yz}{r^2};$$

Orbital degree of freedom



$d(x^2-y^2)$

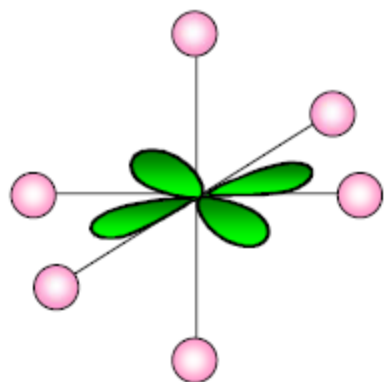


$d(3z^2-r^2)$

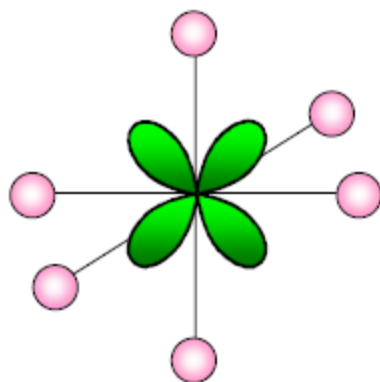
d orbital

$$l=2$$

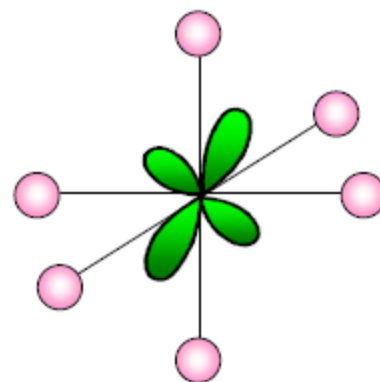
$$2l+1=5$$



$d(xy)$

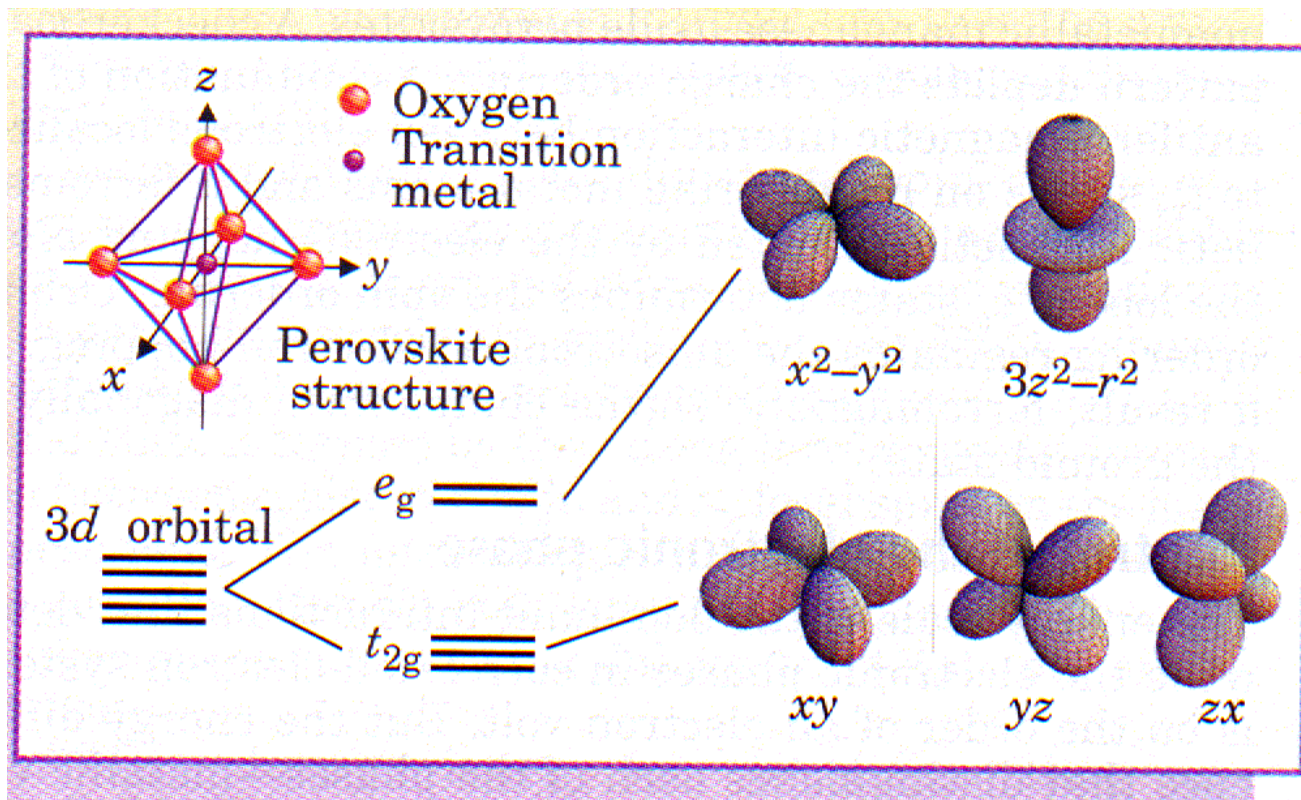


$d(yz)$



$d(zx)$

3-d ион в кристаллическом поле кубической решетки



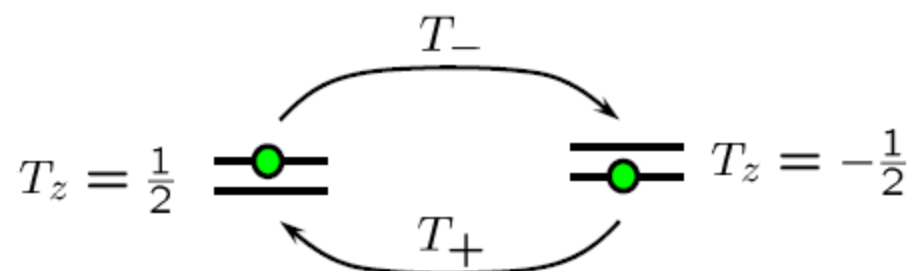
Pseudo-spin operator for e_g orbital

Wave function

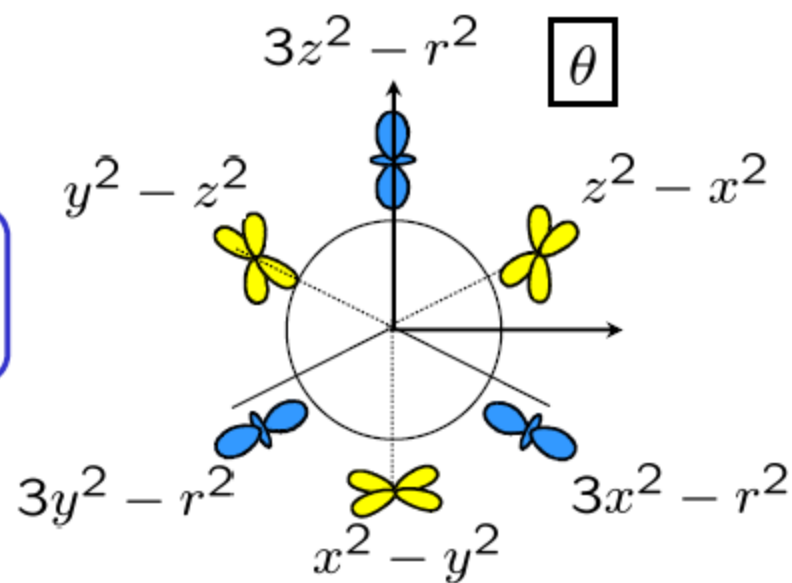


$$|\theta\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |d_{3z^2-r^2}\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |d_{x^2-y^2}\rangle$$

Pseudo-spin operator \vec{T}



$$T_z(\theta) = \cos\theta T_z + \sin\theta T_x$$



$$T_z |d_{3z^2-r^2}\rangle = \frac{1}{2} |d_{3z^2-r^2}\rangle$$

$$T_z |d_{x^2-y^2}\rangle = -\frac{1}{2} |d_{x^2-y^2}\rangle$$

Теорема Яна – Теллера:

Геометрическая конфигурация атомов, которой соответствует (орбитально) вырожденное электронное состояние, не может быть устойчивой.

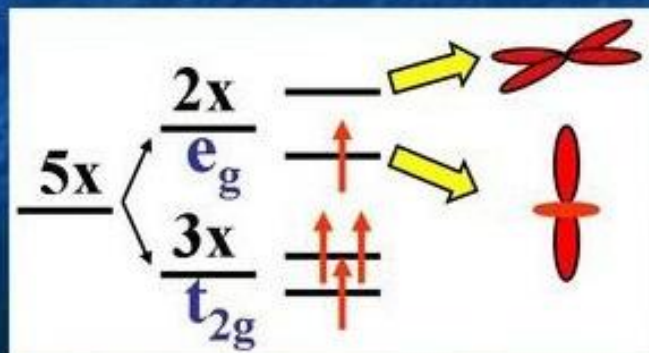
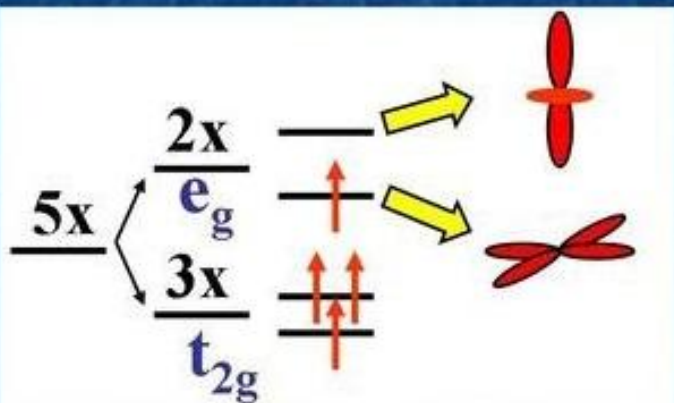
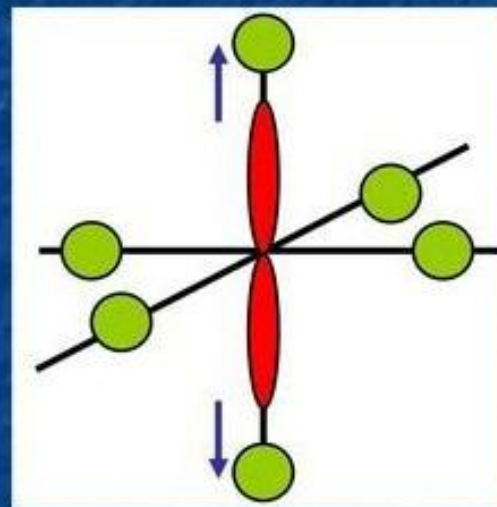
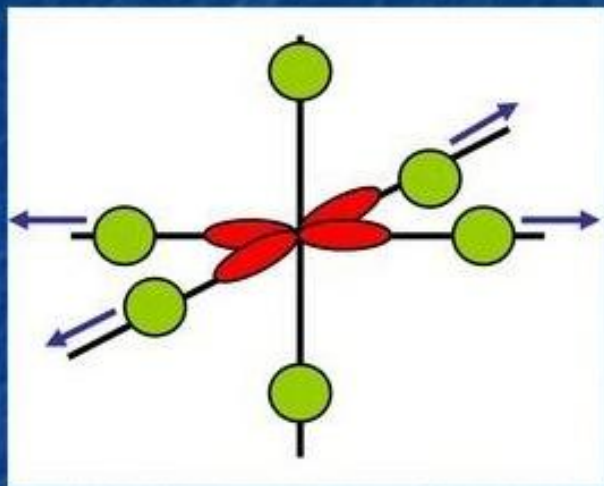
Если симметрия кристаллического поля настолько высока, что основное состояние ионов орбитально вырождено, энергетически предпочтительным будет кристаллическая структура с более низкой симметрией.

Lifting of degeneracy: lattice

Crystal field splitting of e_g levels



Jahn-Teller distortion

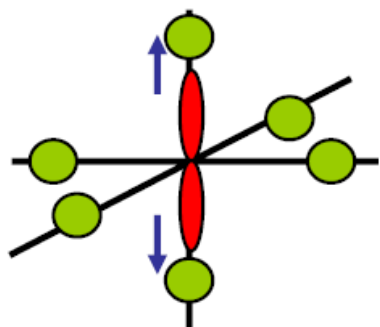
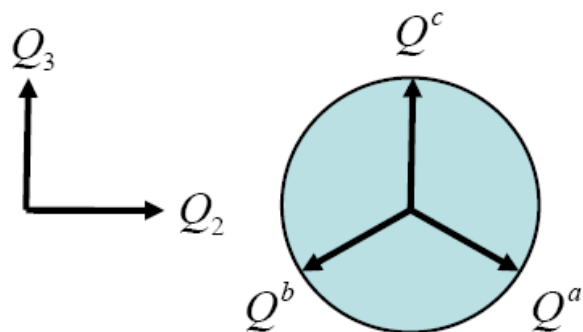
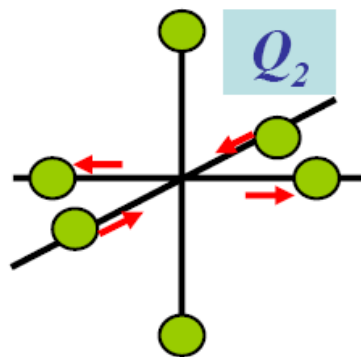
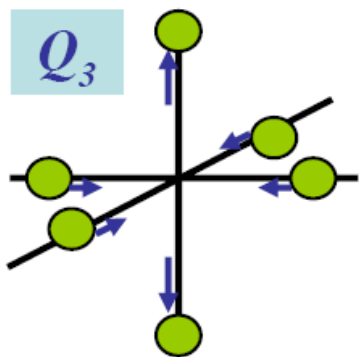


Локальные ян – теллеровские искажения

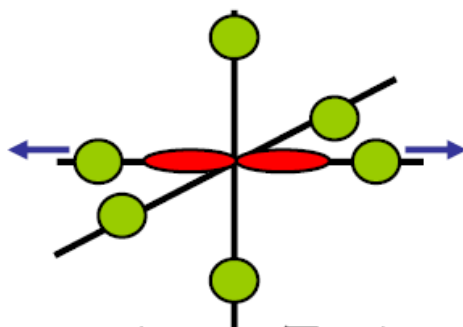
Local e_g Jahn-Teller distortions

$$\vec{Q} = \begin{bmatrix} Q_2 \\ Q_3 \end{bmatrix} = Q \begin{bmatrix} \sin \varphi \\ \cos \varphi \end{bmatrix}$$

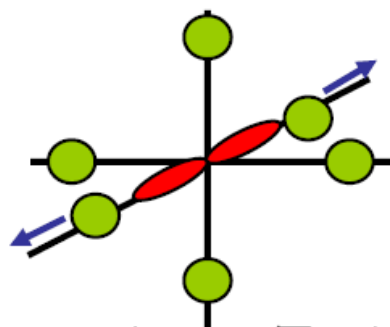
$$|Q_2|^2 + |Q_3|^2 = |\vec{Q}|^2 = const$$



$$Q^c = Q_3$$

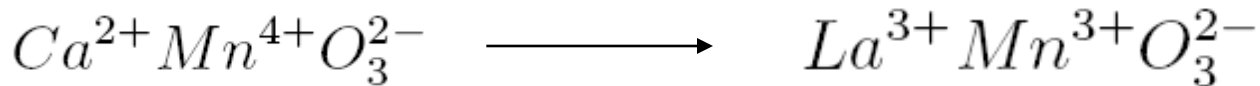


$$Q^b = (Q_3 + \sqrt{3}Q_2)/2$$



$$Q^a = (Q_3 - \sqrt{3}Q_2)/2$$

Активные / неактивные ян – теллеровские 3d ионы



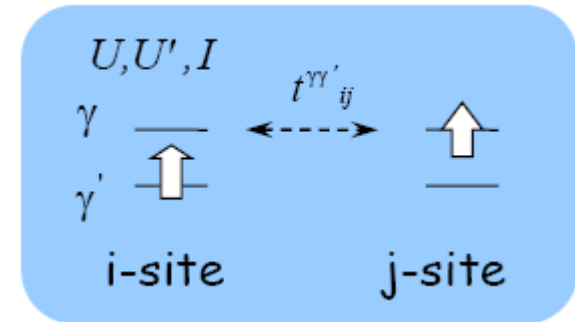
Нет орб-ой степени свободы

Орб-ая степень свободы
взаимодействует с ЯТ
искажением

Спин ионов максимален вследствие внутриатомного ФМ хундовского обмена.

Много – орбитальная модель Хаббарда

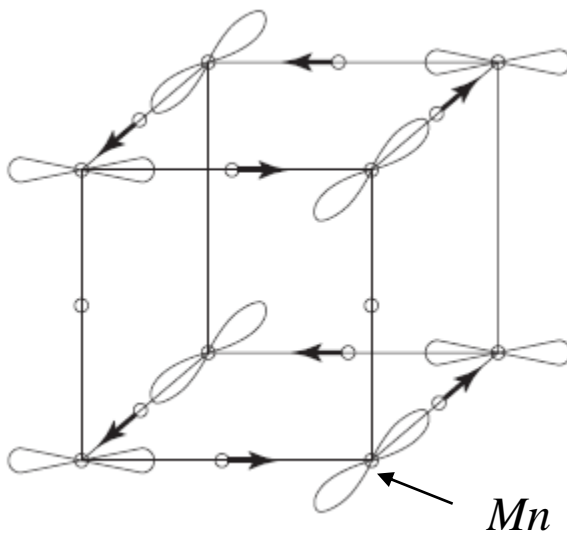
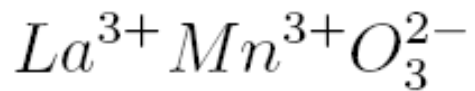
$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & \sum_{\langle ij \rangle \sigma \gamma \gamma'} \left(t_{ij}^{\gamma \gamma'} d_{i\gamma\sigma}^\dagger d_{j\gamma'\sigma} + H.c. \right) \\
 & + U \sum_{i\gamma} n_{i\gamma\uparrow} n_{i\gamma\downarrow} + U' \sum_i n_{ia} n_{ib} \\
 & + J \underbrace{\sum_{i\sigma\sigma'} d_{ia\sigma}^\dagger d_{ib\sigma'}^\dagger d_{ia\sigma'} d_{ib\sigma}}_{-2J \sum_{a \neq b} \left(\vec{S}_a \vec{S}_b - \frac{1}{4} n_a n_b \right)} \quad - \text{ФМ внутриатомный хундовский обмен}
 \end{aligned}$$



$$J \ll U' < U;$$

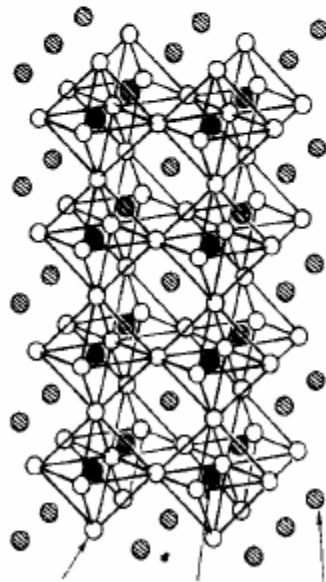
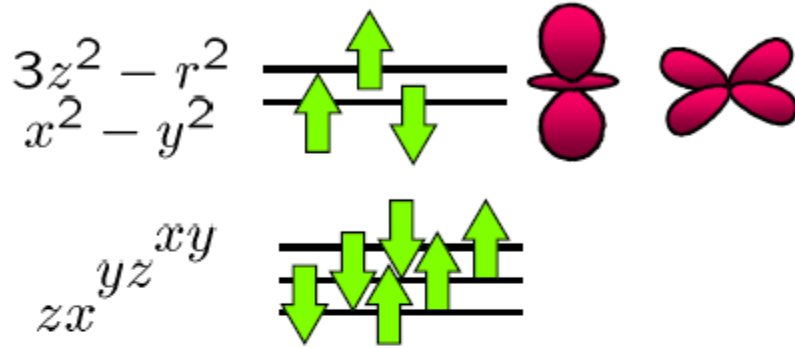
При $T_{JT} = 780\text{K}$, кооперативный ЯТ переход:

→ Орбитальное упорядочение



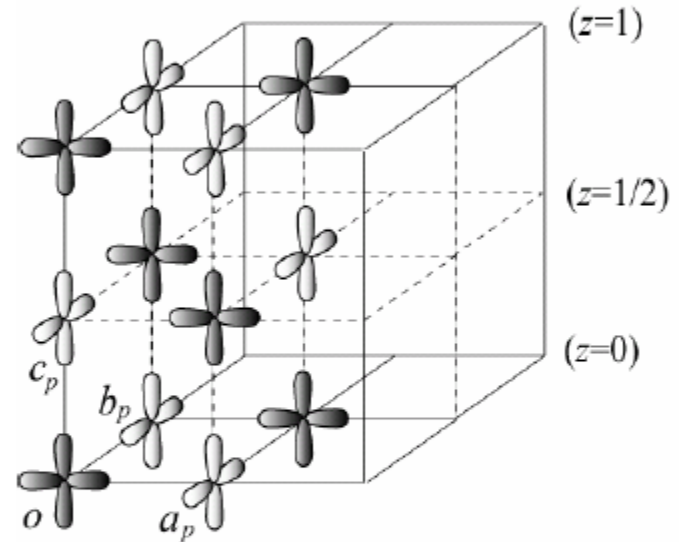
KCuF₃

Cu²⁺ (d⁹)



3-dim. Perovskite crystal

Orbital order with
Jahn-Teller distortion



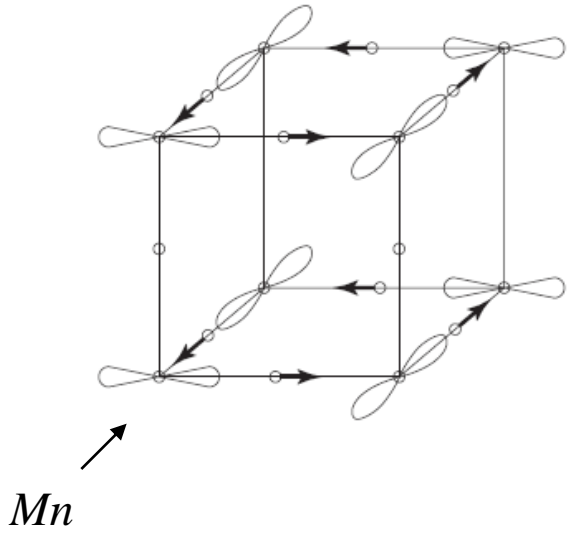
$$d(y^2 - z^2)/d(z^2 - x^2) \text{ type}$$

$$Q = (\pi, \pi, \pi)$$

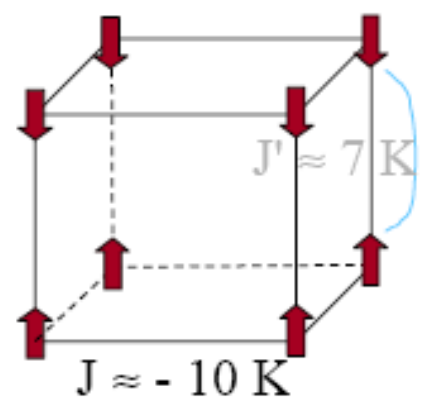
Resonant x-ray scattering

Paolasini et al., Sawa et al.,
Murakami et al

Орбитальный порядок ведет к *определеному* спиновому (магнитному) порядку



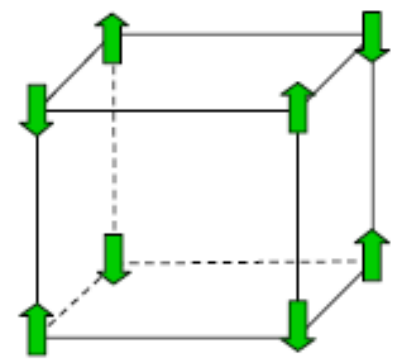
LaMnO₃:



‘A’-тип АФМ

CaMnO₃:

(only t_{2g} ⇒ AF exchange)



‘G’-тип АФМ

К. И. Кугель, Д. И. Хожский

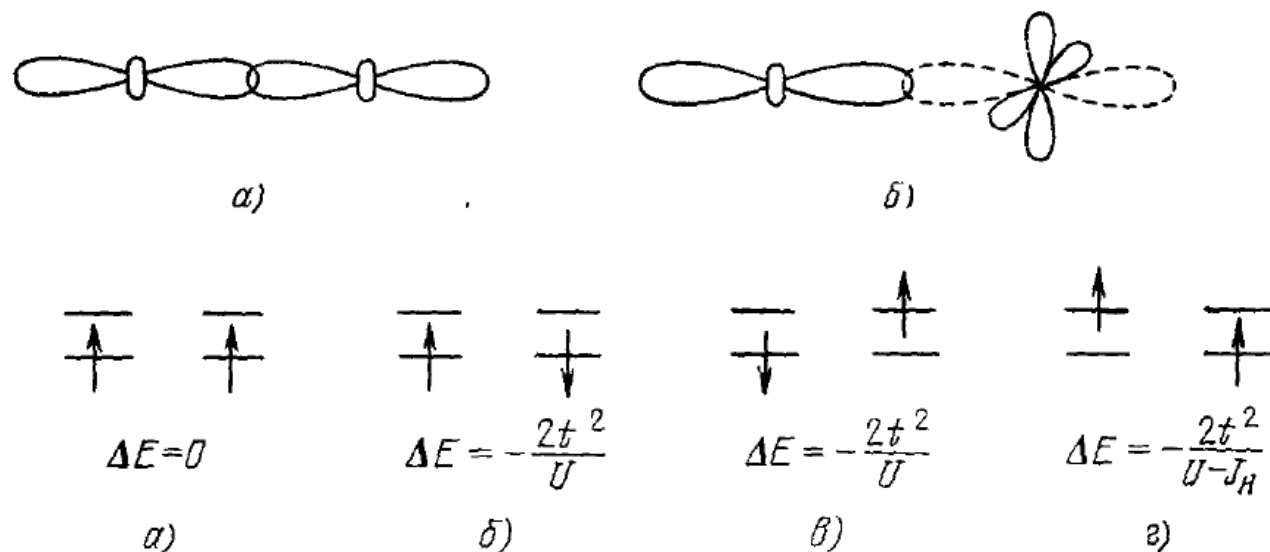
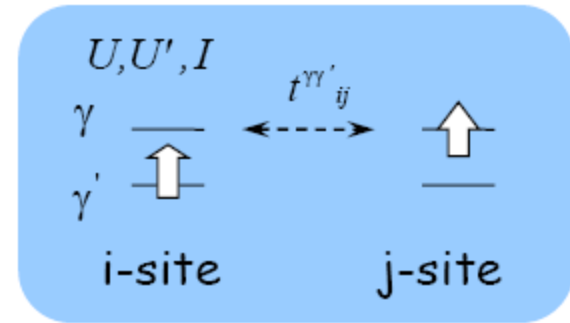


Рис. 11. Различные возможные типы перекрытия e_g -орбиталей на соседних центрах:
 а) Перекрытие однократно занятых орбиталей, приводящее к сильному антиферромагнитному обменно-му взаимодействию; б) перекрытие занятых орбиталей равно нулю; перекрываются занятая и пустая (штриховая линия) орбитали, в результате чего обмен оказывается ферромагнитным.

$$H = \sum_{\langle i, j \rangle} (J_1 \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j + J_2 \boldsymbol{\tau}_i \boldsymbol{\tau}_j + 4J_3 \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \boldsymbol{\tau}_i \boldsymbol{\tau}_j),$$

$$J_1 = \frac{2t^2}{U} \left(1 - \frac{J_H}{U} \right), \quad J_2 = J_3 = \frac{2t^2}{U} \left(1 + \frac{J_H}{U} \right).$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} = & \sum_{\langle ij \rangle \sigma \gamma \gamma'} \left(t_{ij}^{\gamma \gamma'} d_{i\gamma\sigma}^\dagger d_{j\gamma'\sigma} + H.c. \right) \\
& + U \sum_{i\gamma} n_{i\gamma\uparrow} n_{i\gamma\downarrow} + U' \sum_i n_{ia} n_{ib} \\
& + J \sum_{i\sigma\sigma'} d_{ia\sigma}^\dagger d_{ib\sigma'}^\dagger d_{ia\sigma'} d_{ib\sigma}
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{SE} = & - J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \overbrace{\left(\frac{3}{4} + \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right)}^{\text{blue}} \overbrace{\left(\frac{1}{4} - \tau_i^l \tau_j^l \right)}^{\text{red}} \quad l(= x, y, z): \\
& - J_2 \sum_{\langle ij \rangle} \left(\frac{1}{4} - \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right) \left(\frac{3}{4} + \tau_i^l \tau_j^l + \tau_i^l + \tau_j^l \right)
\end{aligned}$$

$$J_1 = \frac{t^2}{(U-3J)} \quad J_2 = \frac{t^2}{U}$$

$$\tau_i^l = \cos\left(\frac{2\pi}{3} n_l\right) T_{iz} + \sin\left(\frac{2\pi}{3} n_l\right) T_{ix}, \quad (n_x, n_y, n_z) = (1, 2, 3)$$