Магнитные свойства, кинетические явления и волны зарядовой плотности в ВТСП купратах

Ларионов И.А.

Казанский Федеральный Университет, г. Казань, Россия

НИТУ «МИСиС», г. Москва, Россия

I.A.Larionov, Phys. Rev. B **69**, 214525 (2004);
Phys. Rev. B **72**, 094505 (2005); ЖЭТФ **127**, 1123 (2005);
Phys. Rev. B **76**, 224503 (2007); Solid State Comm. **208**, 29 (2015);

И.А. Ларионов и А.Ф. Барабанов, Письма в ЖЭТФ, **100**, 811 (2014)

I.A.Larionov and M.V. Eremin, J. Supercond. **15**, 389 (2002);
Journal of Magnetism and Magnetic Materials **272–276**, 181 (2004)

XIV школа-конференция “Проблемы физики твердого тела и высоких давлений“,
“Идеи и методы физики конденсированного состояния”, г.Сочи, 11-20 сентября 2015

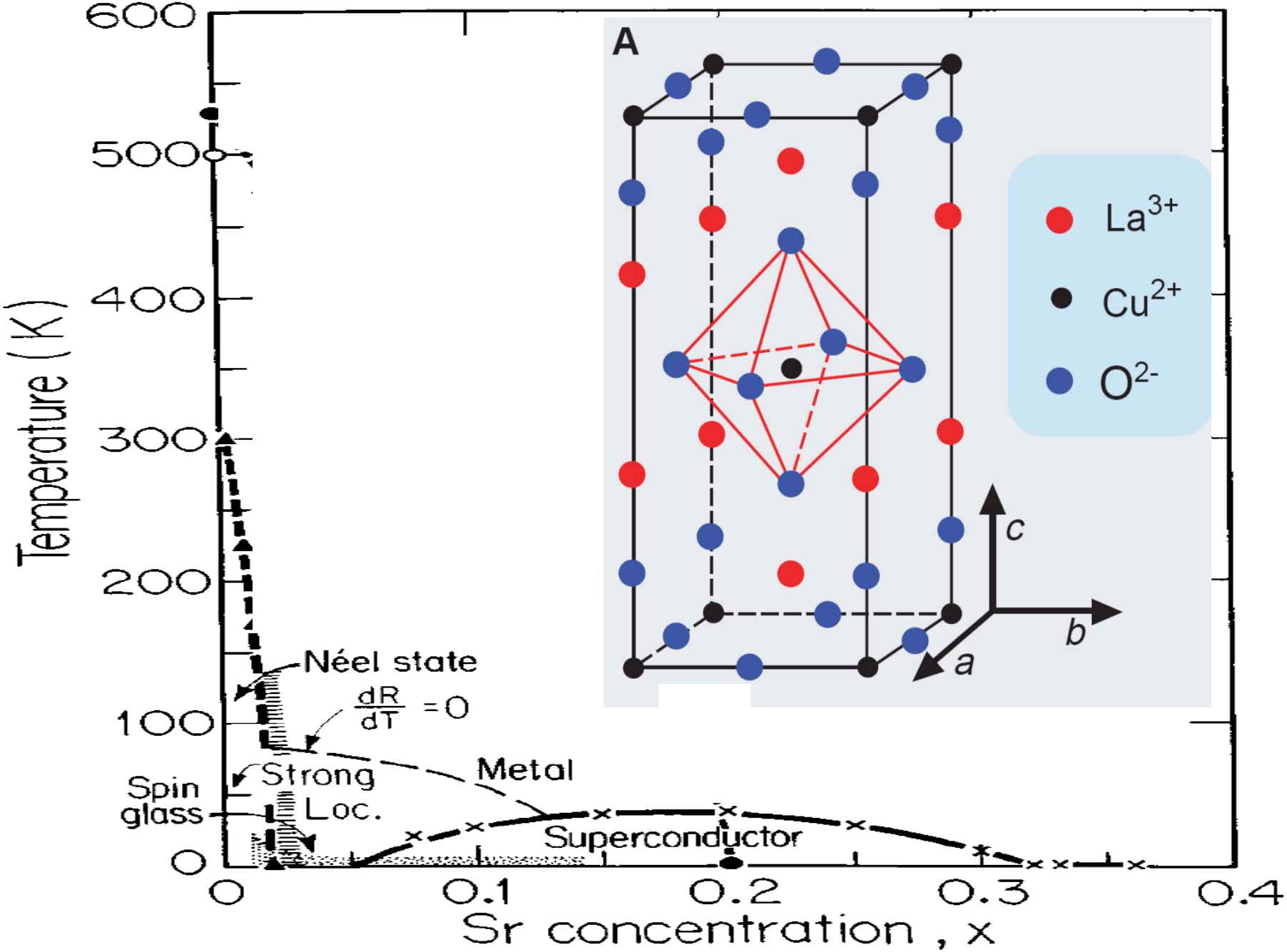
Motivation:

- Медноокcидные сверхпроводники - допированные двумерные Гейзенберговские антиферромагнетики со спином S=1/2.
- Это происходит со спиновыми волнами при введении небольшого количества носителей заряда ? Элементарные возбуждения – парамагноны ? и каково время их жизни при введении небольшого количества носителей заряда ?
- Численно точные методы применимы только к малым кластерам и трудно применимы для расчета динамических величин
- Метод релаксационных функций является непредвзятым для волновых векторов q~0 и Q=(π,π) в зоне Бриллюэна при расчете динамической спиновой восприимчивости $\chi''(\mathbf{q},\omega)$
- “By itself the Markovian situation can be valid even in the absence of any picture of the system in terms of well-defined excitations” U.Balucani, M.H. Lee and V.Tognetti, Phys. Rep. 373 (2003) 409
- Как объяснить поведение термо-ЭДС как функцию температуры?
- Волны зарядовой плотности (ВЗП корреляции) выше T_c и около x≈1/8

Outline

- Введение
- Основные соотношения и метод релаксационных функций
- A) Динамическая спиновая восприимчивость в приближении незатухающих элементарных возбуждений парамагнонного вида
- B) Лорентцева форма для динамической спиновой восприимчивости с затуханием элементарных возбуждений парамагнонного вида
- Сравнение с экспериментальными данными: неупругого рассеяния нейтронов, Ядерного Магнитного Резонанса (ЯМР) и резонансного неупругого рассеяния рентгеновских лучей (RIXS)
- Электросопротивление, коэффициент Холла и термо-ЭДС
- Волны зарядовой плотности около $x \approx 1/8$
- Заключение

$La_{2-x}Sr_xCuO_4$ Phase Diagram



Гамильтониан $t - J$ модели:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + J \sum_{i>j} \left(\boldsymbol{S}_i \boldsymbol{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right)$$

$\mathbf{S}_{\boldsymbol{i}}$ – операторы спина 1/2 на узле ***i,***

$X_i^{\sigma 0}$ - операторы рождения Хаббарда со спином σ.

$$X_i^{\sigma 0} = c_{i\sigma}^{\dagger}(1 - n_{i\bar{\sigma}});$$

$J = 0.12$ эВ – константа антиферромагнитного обменного взаимодействия. Интеграл перескока t (=J/0.2) между первыми соседями, перенормируется электронными и антиферромагнитными корреляциями => $t_{\boldsymbol{eff}}$.

Операторы спина и плотности:

$$S_i^{\sigma} = X_i^{\sigma\tilde{\sigma}}, \qquad S_i^z = \tfrac{1}{2} \sum\nolimits_{\sigma} \sigma X_i^{\sigma\sigma}, \qquad n_i = \sum\nolimits_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma},$$

со стандартной нормировкой: $X_i^{00} + X_i^{++} + X_i^{--} = 1$

H. Mori [Prog. Theor. Phys. **34**, 399 (1965)]:

Эволюция динамической переменной, $S_{\mathbf{k}}^{z}(\tau)$ например,

$$\dot{S}_{\mathbf{k}}^{z}(\tau) \equiv \frac{dS_{\mathbf{k}}^{z}(\tau)}{d\tau} = iLS_{\mathbf{k}}^{z}(\tau)$$

.

где $iL...\rightarrow[H,...]$. Можно разделить $S_{\mathbf{k}}^{z}(\tau)$ на компоненты по отношению к $S_{\mathbf{k}}^{z} = S_{\mathbf{k}}^{z}(\tau = 0)$:

$$\wp_0 S_{\mathbf{k}}^{z}(\tau) = R(\mathbf{k},\tau)\cdot S_{\mathbf{k}}^{z}$$

$$S_{\mathbf{k}}^{z}(\tau) = R(\mathbf{k},\tau)\cdot S_{\mathbf{k}}^{z} + (1-\wp_0)S_{\mathbf{k}}^{z}(\tau)$$

где $\wp_0$ – линейный эрмитовый оператор проектирования,

$$R(\mathbf{k},\tau) \equiv (S_{\mathbf{k}}^{z}(\tau),(S_{-\mathbf{k}}^{z})^{*})\cdot(S_{\mathbf{k}}^{z},(S_{-\mathbf{k}}^{z})^{*})^{-1}$$

- релаксационная функция,

$$(S_{\mathbf{k}}^{z}(\tau);(S_{-\mathbf{k}}^{z})^{*}) \equiv k_B T\int_0^{1/k_B T} d\varrho\,\langle \exp(\varrho H)S_{\mathbf{k}}^{z}(\tau)\exp(-\varrho H)(S_{-\mathbf{k}}^{z})^{*}\rangle$$

Связь функции Грина: $\langle\langle A\,;A^{\dagger}\rangle\rangle_E \equiv G_{AA^{\dagger}}(E) = (1/2\pi)\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\,\exp[\mathrm{i}(E/\hbar)t]G_{AA^{\dagger}}(t)$

и релаксационной функции: $G_{AA^{\dagger}}(E = -\hbar\omega + \mathrm{i}0^{+}) = (1/2\pi)[\mathrm{i}\omega R_{AA^{\dagger}}(z = \mathrm{i}\omega + 0^{+}) - R_{AA^{\dagger}}(t = 0)]$

Применив преобразование Лапласа к релаксационной функции можно сконструировать представление для $R^L(\mathbf{k},s)$ в виде бесконечной дроби [В.И. Арнольд, Цепные дроби, 2001], которую Lovesey and Meserve, J.Phys.C **6**, 79 (1973) оборвали на 3-м шаге:

$$R^L(\mathbf{k},s)=\int_0^\infty d\tau e^{-s\tau}R(\mathbf{k},\tau)\approx 1/\{s+\Delta_{1\mathbf{k}}^2/[s+\Delta_{2\mathbf{k}}^2/(s+1/\tau_{\mathbf{k}})]\}$$

и ввели характерное время $\tau_{\mathbf{k}}=[2/(\pi\Delta_{2\mathbf{k}}^2)]^{1/2}$, аргументировав приближение слабой чувствительностью флуктуаций $S_{\mathbf{k}}^z(\tau)$ к характеру случайных сил более высоких порядков

$$\langle\omega_{\mathbf{k}}^n\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\,\omega^n F(\mathbf{k},\omega)=\frac{1}{i^n}\left[\frac{d^nR(\mathbf{k},\tau)}{d\tau^n}\right]_{\tau=0}$$

- моменты релаксационной функции

$$\Delta_{1\mathbf{k}}^2=\langle\omega_{\mathbf{k}}^2\rangle,\quad \Delta_{2\mathbf{k}}^2=\frac{\langle\omega_{\mathbf{k}}^4\rangle}{\langle\omega_{\mathbf{k}}^2\rangle}-\langle\omega_{\mathbf{k}}^2\rangle,\qquad F(\mathbf{k},\omega)=\frac{1}{\pi}\mathrm{Re}[R^L(\mathbf{k},i\omega)]$$

$$F(\mathbf{k},\omega)=\frac{\tau_{\mathbf{k}}\Delta_{1\mathbf{k}}^2\Delta_{2\mathbf{k}}^2/\pi}{[\omega\tau_{\mathbf{k}}(\omega^2-\Delta_{1\mathbf{k}}^2-\Delta_{2\mathbf{k}}^2)]^2+(\omega^2-\Delta_{1\mathbf{k}}^2)^2},$$

- действительная часть релаксационной функции

Детали расчета

$$\langle\omega_{\mathbf{k}}^2\rangle=i\langle[\dot{S}_{\mathbf{k}}^z,S_{-\mathbf{k}}^z]\rangle/\chi(\mathbf{k}),\quad \langle\omega_{\mathbf{k}}^4\rangle=i\langle[\ddot{S}_{\mathbf{k}}^z,\dot{S}_{-\mathbf{k}}^z]\rangle/\chi(\mathbf{k})$$

приведены в: I.A. Larionov, PRB **69**, 214525 (2004)

$\chi''(\mathbf{k},\omega)$ – мнимая часть динамической спиновой восприимчивости

$$F(\mathbf{k},\omega) = \frac{\tau_{\mathbf{k}}\Delta_{1\mathbf{k}}^2\Delta_{2\mathbf{k}}^2/\pi}{[\omega\tau_{\mathbf{k}}(\omega^2-\Delta_{1\mathbf{k}}^2-\Delta_{2\mathbf{k}}^2)]^2+(\omega^2-\Delta_{1\mathbf{k}}^2)^2},$$

- действительная часть релаксационной функции

А) при пренебрежении затуханием:

$$\chi_F''(\mathbf{k},\omega) = \omega\chi(\mathbf{k})F(\mathbf{k},\omega).$$

В) взаимодействие → затухание возбуждений

$$\omega_{\mathbf{q}}^{sw} = 2\int_0^\infty d\omega\ \omega\ F(\mathbf{q},\omega), \qquad \Gamma_{\mathbf{q}} = \sqrt{\langle\omega_{\mathbf{q}}^2\rangle-(\omega_{\mathbf{q}}^{sw})^2},$$

$$\chi_L''(\mathbf{q},\omega) = \chi(\mathbf{q})\left(\frac{\omega\Gamma_{\mathbf{q}}}{[\omega-\omega_{\mathbf{q}}^{sw}]^2+\Gamma_{\mathbf{q}}^2}+\frac{\omega\Gamma_{\mathbf{q}}}{[\omega+\omega_{\mathbf{q}}^{sw}]^2+\Gamma_{\mathbf{q}}^2}\right),$$

при $|\mathbf{q}| > 1/\xi_{eff}$

Статическая спиновая восприимчивость:

$$\chi(\mathbf{k}) = \frac{1}{4J\alpha(g_+ + \gamma_{\mathbf{k}})},$$

Zavidonov and Brinkmann, Phys. Rev . B **58**, 12486 (1998):

$$c_1 = \frac{1}{4}\sum_{\rho} \langle S_i^z S_{i+\rho}^z \rangle,$$

Корреляционная длина ξ: $\frac{\xi}{a} = \frac{1}{2\sqrt{g_+ - 1}},$

Zavidonov, IAL and Brinkmann, Phys. Rev . B **61**, 15462 (2000):

$$p = \frac{1+x}{2},$$

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z}\sum_{\rho} \exp(i\mathbf{k}\rho) = \frac{1}{2}(\cos k_x a + \cos k_y a),$$

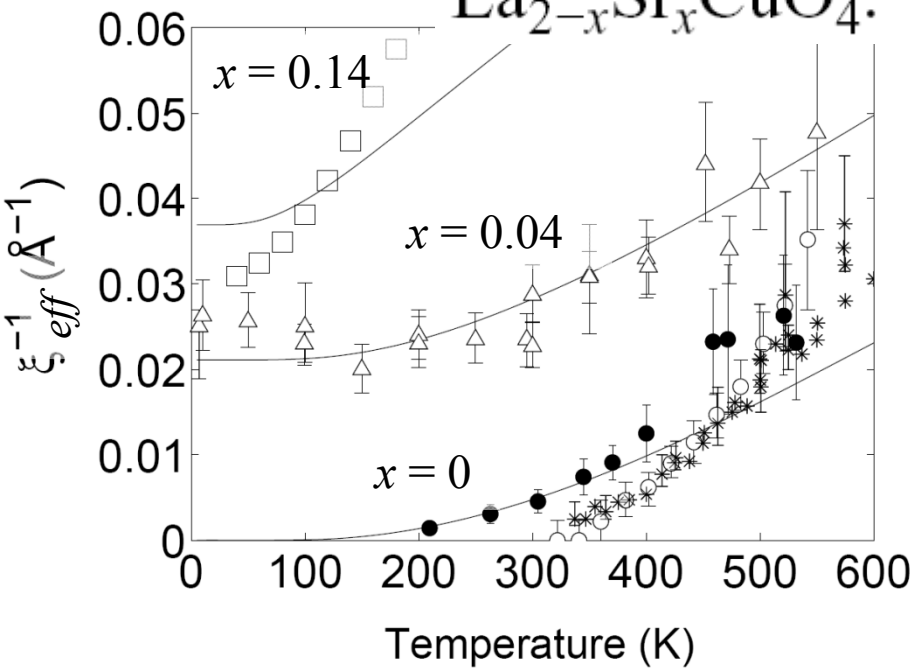
$$t_{\text{eff}} = t\left(p + \frac{2c_1}{p} - \frac{p^2}{2p-1}I^2 + \frac{J}{2t}I\right)$$

$I \approx 2x$

$x = 0$: $c_1 = -0.1196$, $\alpha = 1.76$

$x = 0.15$: $c_1 = -0.0596$, $\alpha = 1.23$

$La_{2-x}Sr_xCuO_4$:



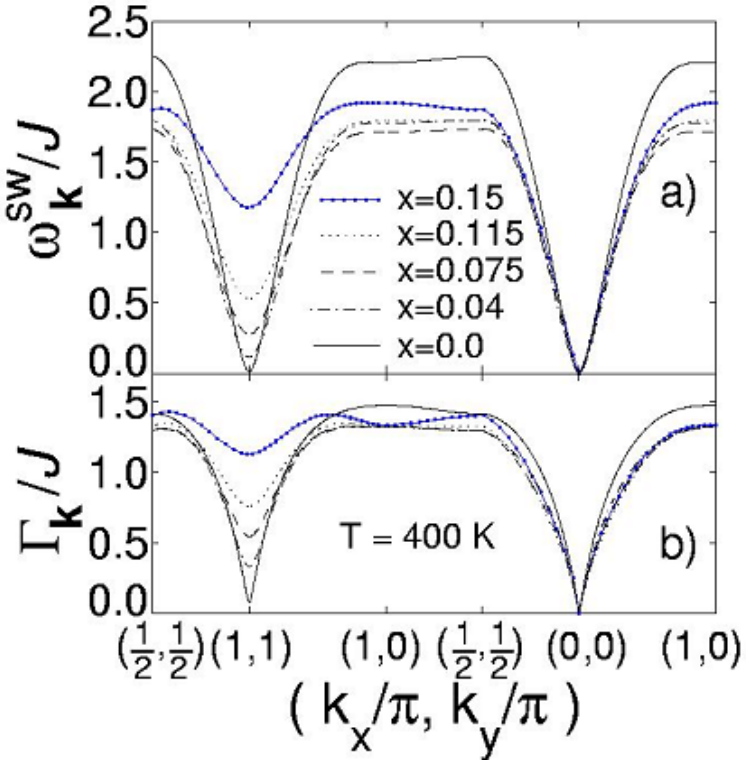
Малое допирование (x<0.04):

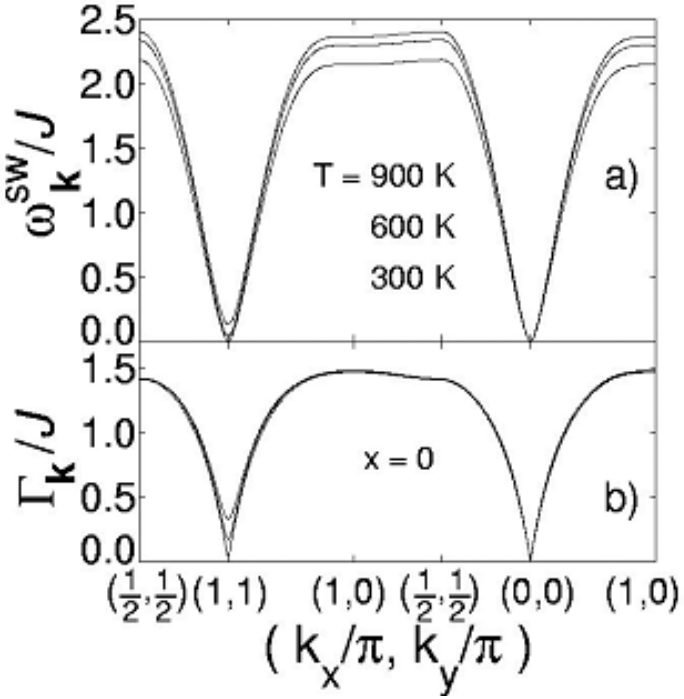
$g_ = 16\,\alpha\, c_1$

$$\frac{\xi}{a} = \frac{J\sqrt{g_-}}{k_B T}\exp(2\pi\rho_S/k_B T)$$

эффективная корреляционная длина:

$$\xi_{\text{eff}}^{-1} = \xi_0^{-1} + \xi^{-1}. \quad \xi_0^{-1} = nx/a$$



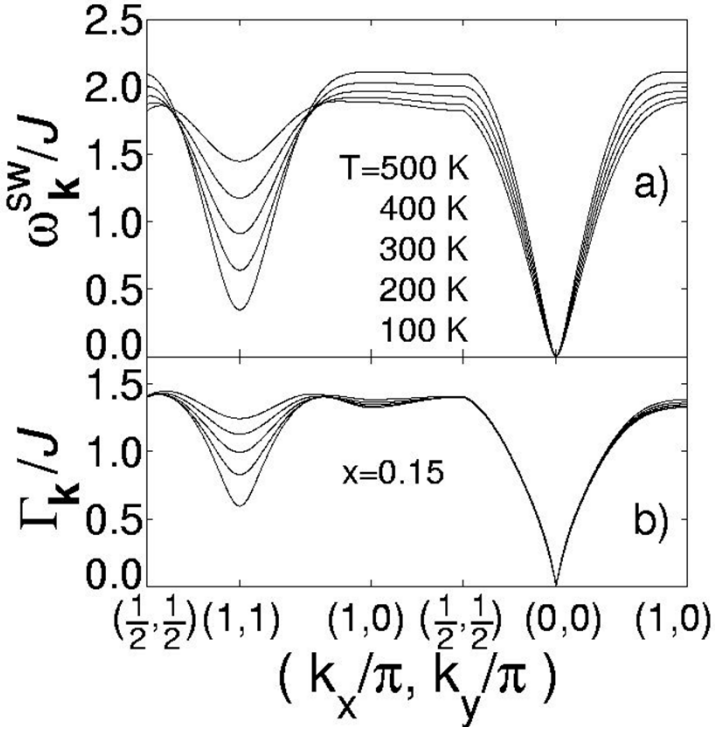


Дисперсия:

$$\omega_{\mathbf{k}}^{\mathrm{sw}} = 2\int_0^{\infty} d\omega\ \omega\ F(\mathbf{k},\omega),$$

Затухание:

$$\Gamma_{\mathbf{k}} = \sqrt{\langle \omega_{\mathbf{k}}^2 \rangle - (\omega_{\mathbf{k}}^{\mathrm{sw}})^2},$$

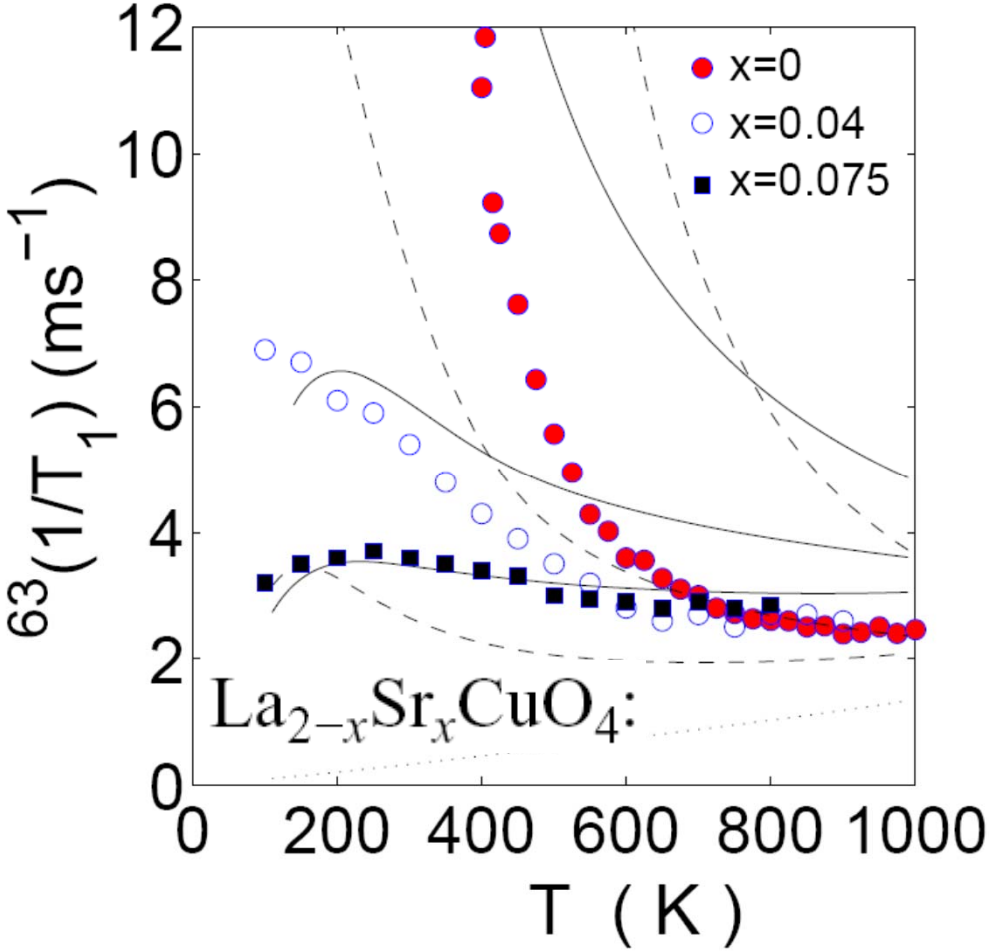


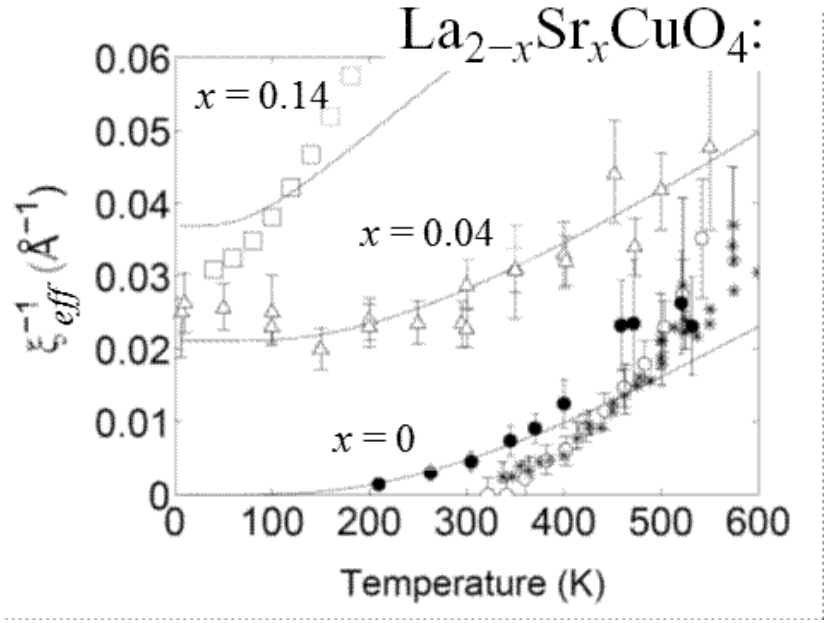
$$2W = {}^{63}(1/T_1) = \frac{2k_B T}{\omega_0}\sum_{\mathbf{k}} {}^{63}F(\mathbf{k})^2 \chi''(\mathbf{k},\omega_0),$$

- скорость спин-решеточной релаксации на ядрах меди

Штриховые линии (A) - - - - - - - - $\chi''_F(\mathbf{k},\omega) = \omega\chi(\mathbf{k})F(\mathbf{k},\omega).$

Сплошные линии (B) ——— $\chi''_L(\mathbf{k},\omega) = \chi(\mathbf{k})\left(\frac{\omega\Gamma_{\mathbf{k}}}{[\omega-\omega^{sw}_{\mathbf{k}}]^2+\Gamma^2_{\mathbf{k}}} + \frac{\omega\Gamma_{\mathbf{k}}}{[\omega+\omega^{sw}_{\mathbf{k}}]^2+\Gamma^2_{\mathbf{k}}}\right)$





$$\xi^{-1}_{eff} = \xi^{-1}_0 + \xi^{-1}$$

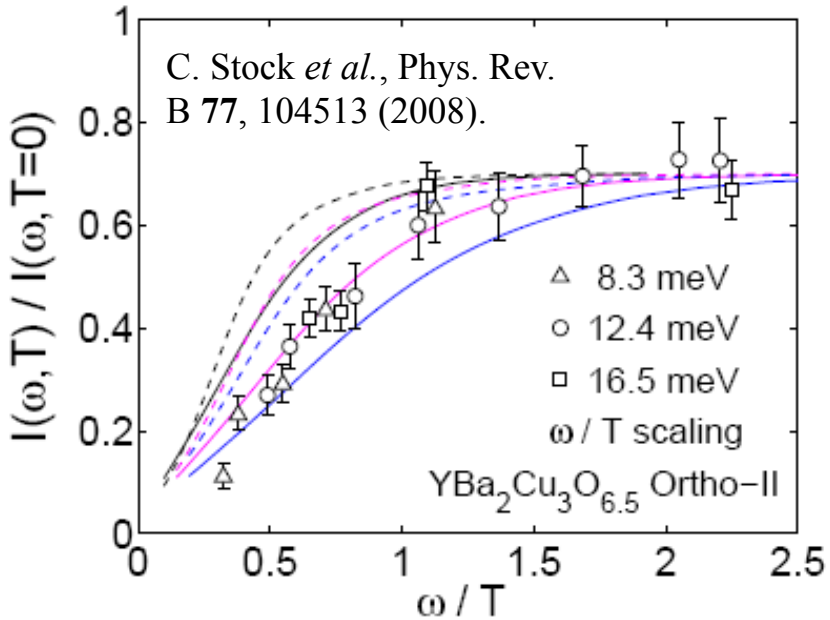
Данные ЯКР: Imai *et al.*, PRL **70**, 1002 (1993)

Неупругое рассеяние нейтронов

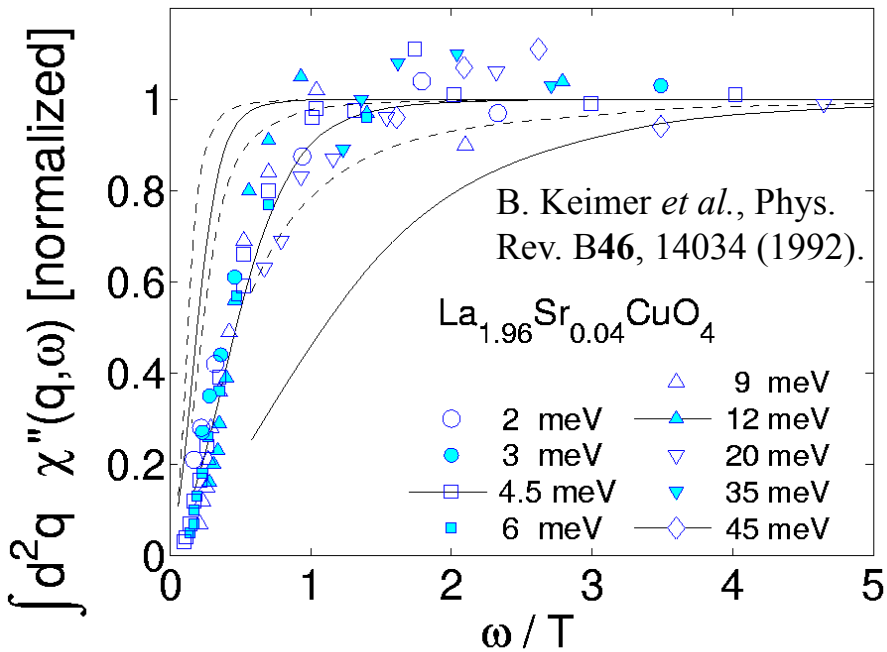
- - - - - (A)

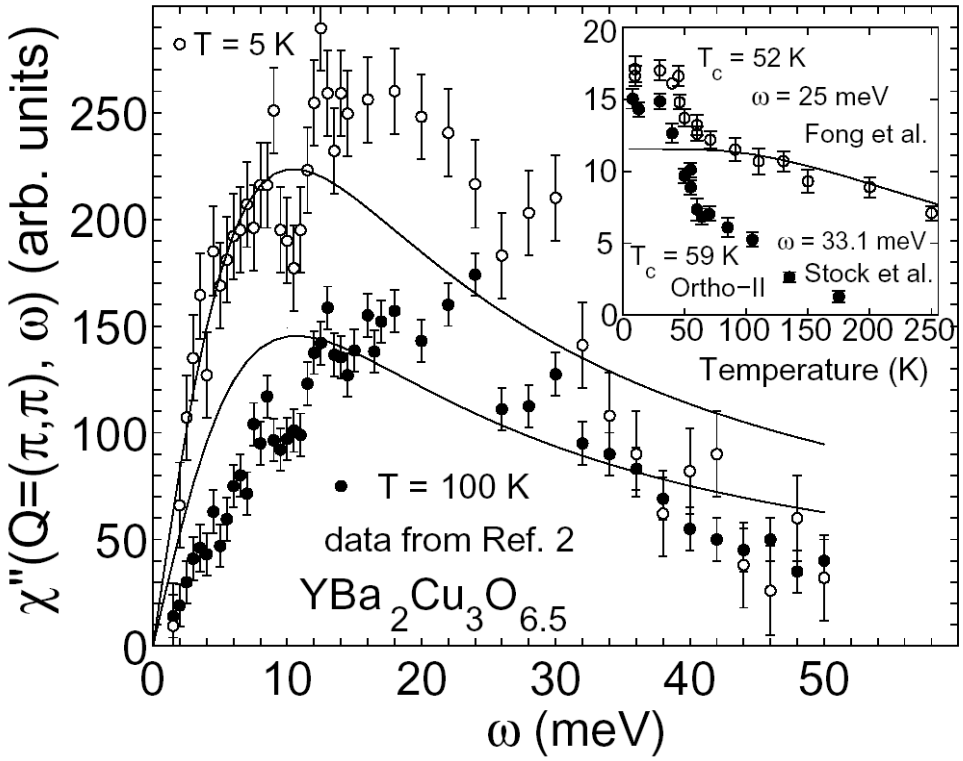
——— (B)

ω / **T** скейлинг: $\chi''(\omega,T) = \int \chi''(\mathbf{q},\omega,T)\, d^2\mathbf{q} \approx \chi''(\omega,T\to 0) f(\omega/T)$



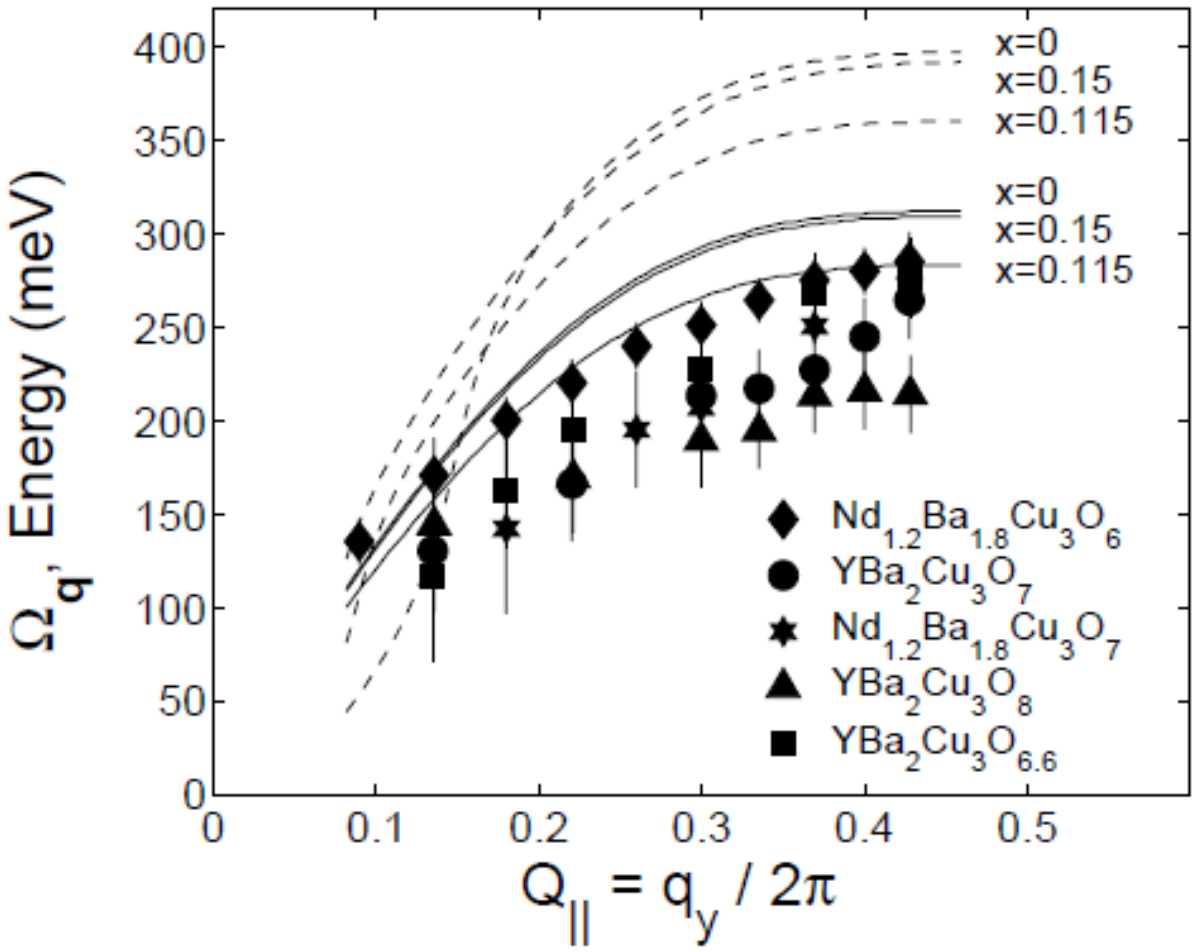
IAL, Phys. Rev. B **72**, 094505 (2005):



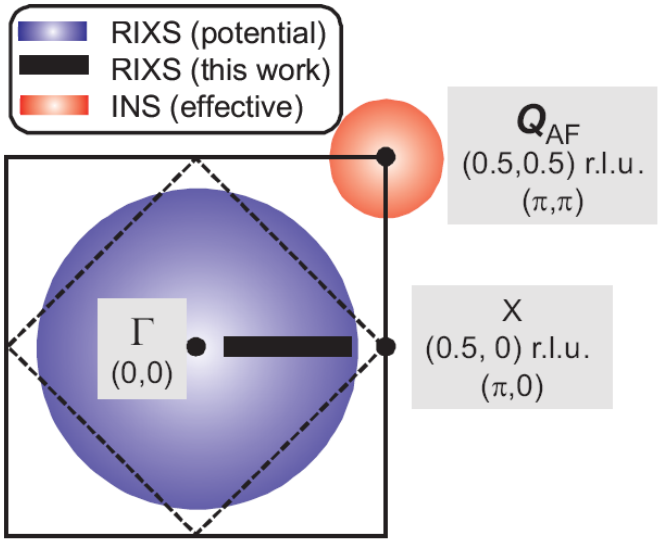


RIXS - resonant inelastic X-ray scattering
(Резонансное неупругое рассеяние рентгеновских лучей)
Le Tacon, M. *et al. Nature Phys.* ***7,*** 725–730 (2011):

Magnon dispersion



"As a major result, we demonstrate the existence of spin-wave-like dispersive magnetic excitations (paramagnons) …"



Штриховые линии:

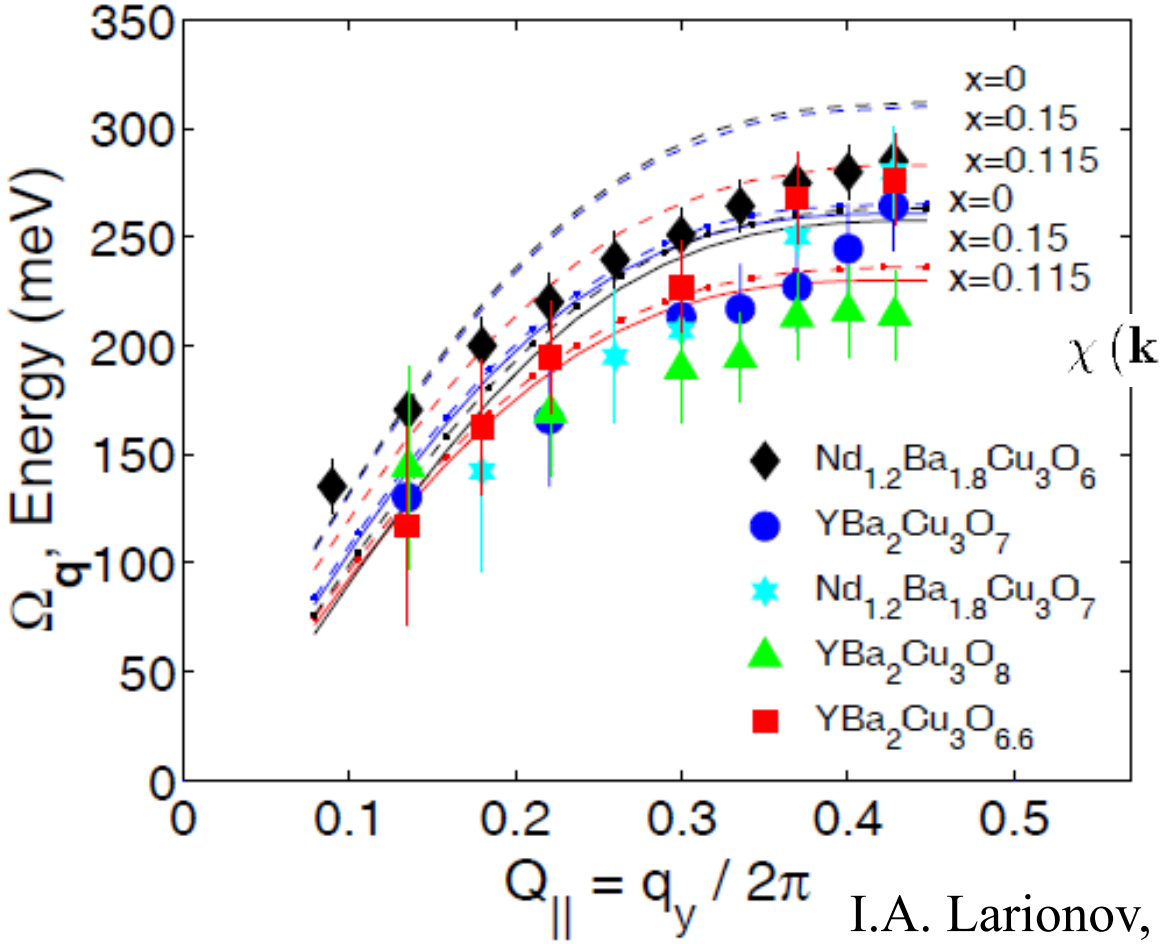
$$\chi''_{L1}(\mathbf{k},\omega) = \frac{\chi(\mathbf{k})\,\omega\Gamma_{\mathbf{k}}}{(\omega-\omega^{sw}_{\mathbf{k}})^2+\Gamma^2_{\mathbf{k}}} + \frac{\chi(\mathbf{k})\,\omega\Gamma_{\mathbf{k}}}{(\omega+\omega^{sw}_{\mathbf{k}})^2+\Gamma^2_{\mathbf{k}}},$$

$$\Omega_{\mathbf{k}} = \omega_{Res} = \sqrt{(\omega^{sw}_{\mathbf{k}})^2+\Gamma^2_{\mathbf{k}}},$$

Штрих-пунктирные линии:

$$\chi''_{AL}(\mathbf{k},\omega) \propto \frac{\Gamma_{\mathbf{k}}}{(\omega-\omega^{sw}_{\mathbf{k}})^2+\Gamma^2_{\mathbf{k}}} - \frac{\Gamma_{\mathbf{k}}}{(\omega+\omega^{sw}_{\mathbf{k}})^2+\Gamma^2_{\mathbf{k}}}$$

$$\omega_{AL,Res} \approx \omega^{sw}_{\mathbf{k}}\left[1+\frac{\Gamma^4_{\mathbf{k}}}{6(\omega^{sw}_{\mathbf{k}})^4}\right]$$



Сплошные линии: $\omega^{sw}_{\mathbf{k}}$

$$\chi(\mathbf{k},\omega) = \eta_{\mathbf{k}}/[(\omega^{sw}_{\mathbf{k}})^2-\omega^2+i\Gamma_{\mathbf{k}}\omega]$$

$$\omega_{S,Res} \approx \omega^{sw}_{\mathbf{k}}\left[1-\frac{\Gamma^2_{\mathbf{k}}}{8(\omega^{sw}_{\mathbf{k}})^2}\right]$$

Magnon dispersion

RIXS - resonant inelastic X-ray scattering

Le Tacon, M. *et al. Nature Phys.* ***7,*** 725–730 (2011):

I.A. Larionov, Solid State Comm. **208**, 29 (2015)

И. А. Ларионов, НИТУ «МИСиС» , КФУ
А. Ф. Барабанов, Институт физики высоких давлений

Нормальное состояние ВТСП купратов существенно отличается от свойств обычных металлов из-за сильных электронных корреляций.
Необычными являются и транспортные свойства, линейная зависимость электросопротивления ρ(T), сильная зависимость от температуры коэффициентов Холла $R_H(T)$ и термо-ЭДС $Q(T)$.

В рамках многомоментного приближении для неравновесной функции распределения с анизотропией рассеяния носителей удаётся качественно объяснить поведение электросопротивления, коэффициента Холла и термо-ЭДС как функции температуры в оптимально легированных слоистых сверхпроводящих купратах.

Макроскопические кинетические коэффициенты

$$\mathbf{J} = L_{EE}\mathbf{E} + L_{ET}\nabla T \ ,$$
$$\mathbf{U} = L_{TE}\mathbf{E} + L_{TT}\nabla T \ .$$

Электропроводность σ: $\mathbf{J} = \sigma\,\mathbf{E}$, $\sigma = L_{EE}$

Теплопроводность κ: $\mathbf{U} = -\,\kappa\,\nabla T$

Образец электрически изолирован: $\mathbf{J} = 0$

$$\mathbf{E} = \frac{-L_{ET}}{L_{EE}}\nabla T \qquad \kappa = -\left(L_{TT} - \frac{L_{TE}L_{ET}}{L_{EE}}\right)$$

Термо - ЭДС Q : $\mathbf{E} = Q\nabla T$

$Q = \dfrac{-L_{ET}}{L_{EE}}$ - дифференциальная термо-ЭДС

Гамильтониан

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad \hat{H}_0 = \hat{H}_h + \hat{I}, \quad \hat{H}_1 = \hat{J} + \hat{H}_f$$

$$\hat{H}_h = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma}, \qquad \hat{J} = \frac{J}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\gamma_1,\gamma_2} a^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\gamma_1} S^{\alpha}_{\mathbf{q}} \hat{\sigma}^{\alpha}_{\gamma_1\gamma_2} a_{\mathbf{k}\gamma_2},$$

$$\hat{I} = \frac{1}{2} I_1 \sum_{\mathbf{R},\mathbf{g}} S^{\alpha}_{\mathbf{R}+\mathbf{g}} S^{\alpha}_{\mathbf{R}} + \frac{1}{2} I_2 \sum_{\mathbf{R},\mathbf{d}} S^{\alpha}_{\mathbf{R}+\mathbf{d}} S^{\alpha}_{\mathbf{R}},$$

$\hat{\sigma}^{\alpha}$ — матрицы Паули,

А.М. Белемук, А.Ф. Барабанов,
Л.А. Максимов,
ЖЭТФ 129, 493 (2006)

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \tau \left[a_1 \gamma_g(\mathbf{k}) + a_2 \gamma_g^2(\mathbf{k}) + a_3 \gamma_d(\mathbf{k}) + \right.$$
$$\left. + a_4 \gamma_d^2(\mathbf{k}) + a_5 \gamma_g(\mathbf{k}) \gamma_d(\mathbf{k}) \right] - \mu$$

$$\gamma_g(\mathbf{k}) = \left[\cos(k_x a) + \cos(k_y a) \right] / 2,$$

$$\gamma_d(\mathbf{k}) = \cos(k_x a) \cos(k_y a),$$

- гармоники квадратной симметрии

$$\tau = 0.2 \text{ эВ}, \; a_1 = 1.5, \; a_2 = 3.0, \quad a_3 = -1.25, \; a_4 = 0.0, \; a_5 = 0.1$$

$I_1 = (1-p)I$ и $I_2 = pI$ — константы обменного взаимодействия

J — константа спин-фермионного обмена

p – параметр фрустрации (легирование (допирование))

Формализм матрицы плотности

Отклонение от равновесия:

$$\hat{\rho}' = \hat{\rho}^{00}\hat{F}, \quad \hat{\rho}^{00} = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{\hat{H}_0}{T}\right), \quad Z = \mathrm{Sp}\{\hat{H}_0\} \qquad \hat{F} = \sum_l \eta_l \hat{F}_l$$

$$\hat{F}_l = \sum_{\mathbf{k},\sigma} F_l(\mathbf{k}) a^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma}, \qquad [\hat{F}_l, \hat{H}_0] = 0, \quad \langle \hat{F}_l \rangle \equiv \mathrm{Sp}\{\hat{\rho}^{00}\hat{F}_l\} = 0$$

$$g_{\mathbf{k}} = -\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}\Phi_{\mathbf{k}}, \quad \Phi_{\mathbf{k}} = \sum_l \eta_l F_l(\mathbf{k}) \qquad F^E(\mathbf{k}) = \sum_l \eta_l^E F_l^E(\mathbf{k}),$$

$$F(\mathbf{k}) = F^E(\mathbf{k}) + F^H(\mathbf{k}), \quad F^H(\mathbf{k}) = \sum_l \eta_l^H F_l^H(\mathbf{k})$$

Необходим учет анизотропии рассеяния:

$$F_l^E(\mathbf{k}) = \left\{ v^x_{\mathbf{k}},\ (v^y_{\mathbf{k}})^2 v^x_{\mathbf{k}},\ \frac{\partial v^x_{\mathbf{k}}}{\partial y} v^y_{\mathbf{k}},\ \frac{\partial v^y_{\mathbf{k}}}{\partial y} v^x_{\mathbf{k}},\ \frac{\partial v^x_{\mathbf{k}}}{\partial x}\frac{\partial v^y_{\mathbf{k}}}{\partial y} v^x_{\mathbf{k}},\ (v^x_{\mathbf{k}})^3,\ \frac{\partial v^x_{\mathbf{k}}}{\partial x} v^x_{\mathbf{k}} \right\}$$

$$F_l^H(\mathbf{k}) = \left\{ v^y_{\mathbf{k}},\ (v^x_{\mathbf{k}})^2 v^y_{\mathbf{k}},\ \frac{\partial v^x_{\mathbf{k}}}{\partial y} v^x_{\mathbf{k}},\ \frac{\partial v^x_{\mathbf{k}}}{\partial x} v^y_{\mathbf{k}},\ \frac{\partial v^x_{\mathbf{k}}}{\partial x}\frac{\partial v^y_{\mathbf{k}}}{\partial y} v^y_{\mathbf{k}},\ (v^y_{\mathbf{k}})^3,\ \frac{\partial v^y_{\mathbf{k}}}{\partial y} v^y_{\mathbf{k}} \right\}$$

Для свободных электронов: $R_H = \frac{1}{nec}$

Проводимость σ (электросопротивление ρ):

$$j^x = \sigma E^x = \frac{1}{a^2 a_z} \sum_{\mathbf{k},\sigma} e v^x_{\mathbf{k}} g^E_{\mathbf{k}} =$$

$$= \frac{2eZ}{a^2 a_z} \sum_l \eta^E_l \sum_{\mathbf{k}} v^x_{\mathbf{k}} \left(-\frac{\partial f^0_{\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) T F^E_l(\mathbf{k}),$$

Коэфф. Холла R_H:

$$E^y = R_{\mathrm{H}} j^x H^z.$$

Точная функция Грина $G^z(\mathbf{q},\omega) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega^2_{\mathbf{q}} - M(\mathbf{q},\omega)}$; $\quad M \approx -i\omega\gamma$

$$G^z(\mathbf{q},\omega) = \frac{F_{\mathbf{q}}}{\omega^2 - \omega^2_{\mathbf{q}} + i\omega\gamma} \Rightarrow Im\,\chi(\mathbf{q},\omega) = \frac{\gamma\omega F_{\mathbf{q}}}{(\omega^2 - \omega^2_{\mathbf{q}})^2 + \gamma^2\omega^2}$$

Мнимая часть динамической спиновой восприимчивости:

$$\mathrm{Im}\,\chi(\mathbf{q}, \omega = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{F_{\mathbf{q}}(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})\gamma}{\left[(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})^2 (1 - e_w) - \omega^2_{\mathbf{q}}\right]^2 + (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})^2 \gamma^2}$$

$\gamma = 0.2 -$ затухание парамагнонов

$\omega_{\mathbf{q}} -$ дисперсия парамагнонов

$$F_{\mathbf{q}} = -8\left\{ I_1 c_g \left[1 - \gamma_g(\mathbf{q})\right] + I_2 c_d \left[1 - \gamma_d(\mathbf{q})\right] \right\}$$

$e_w -$ *параметр*

Термо-ЭДС $Q = E/\nabla T$

Следует выбрать функцию распределения более общего вида, чем раньше, чтобы получить одновременно электрический ток и поток тепла.

$$X_l^E = \sum_{l'} P_{ll'} \eta_{l'}^E ,$$

$$X_l^E = \sum_{\mathbf{k}} Z_{\mathbf{k}} F_l(\mathbf{k}) e E^x v_{\mathbf{k}}^x \left(\frac{-\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right),$$

$$U_j = Z \sum_{\mathbf{k}} F_j(\mathbf{k})(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) e E^x v_{\mathbf{k}}^x \left(-\frac{\partial f_{\mathbf{k}}^0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right)$$

Поскольку есть поток тепла

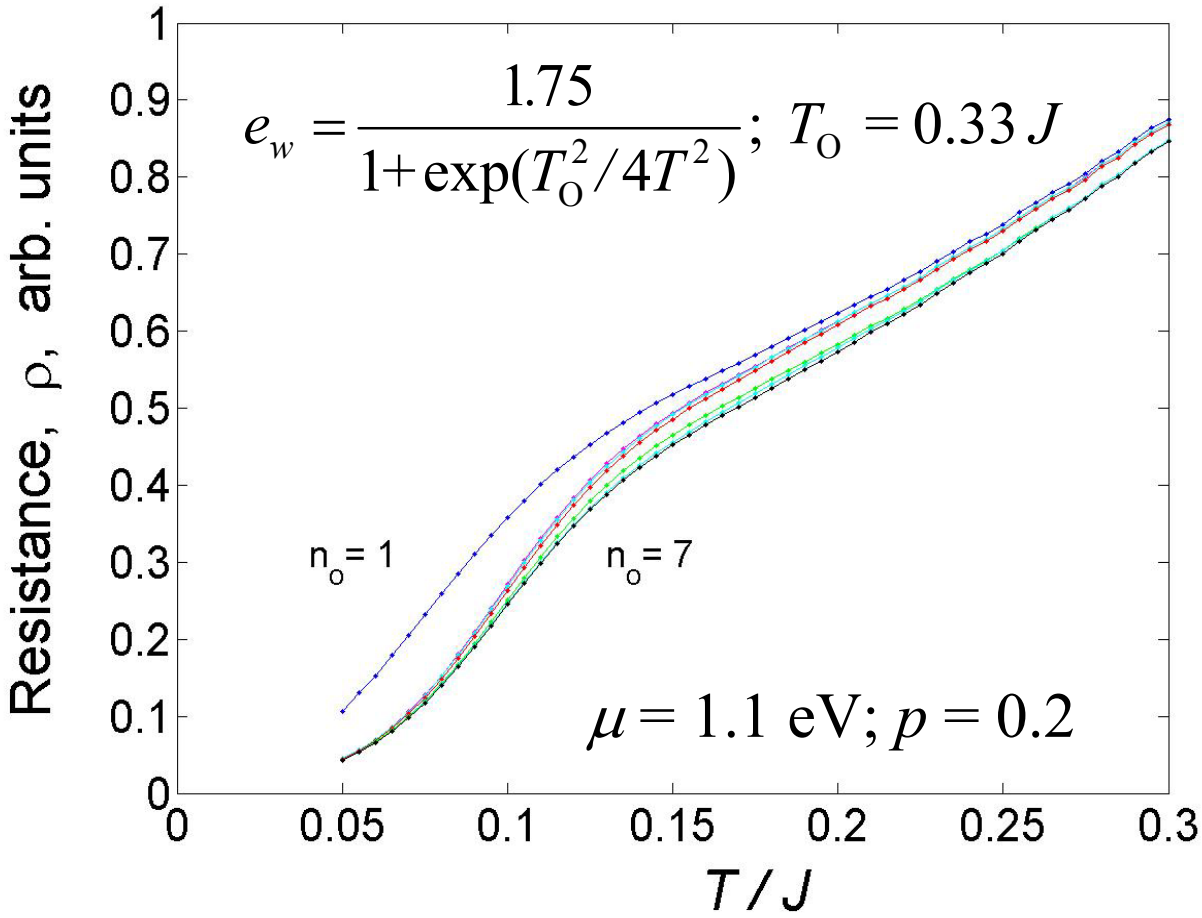
$$\{A_l^x(\mathbf{k})\} = \{F_l(\mathbf{k}), F_l(\mathbf{k})\varepsilon_{\mathbf{k}}\}$$

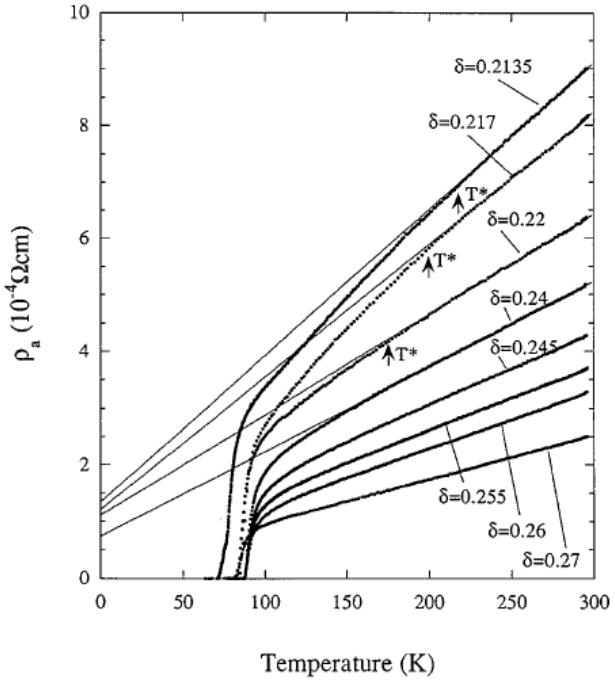
$$Q = -\frac{\sum_{ij} X_i^E (P^{-1})_{ij} U_j}{T \sum_{ij} X_i^E (P^{-1})_{ij} X_j^E},$$

Дж. Займан, Электроны и фононы, Теория явлений переноса в твёрдых телах, М. 1962

$$P_{ll'} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} F_l(\mathbf{k}) C_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}} [F_{l'}(\mathbf{k}) - F_{l'}(\mathbf{k}+\mathbf{q})]$$

$$C_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}} = 2J^2 Z^2 f_{\mathbf{k}}^0 (1 - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0) n_B(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \operatorname{Im} \chi(\mathbf{q}, \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}).$$





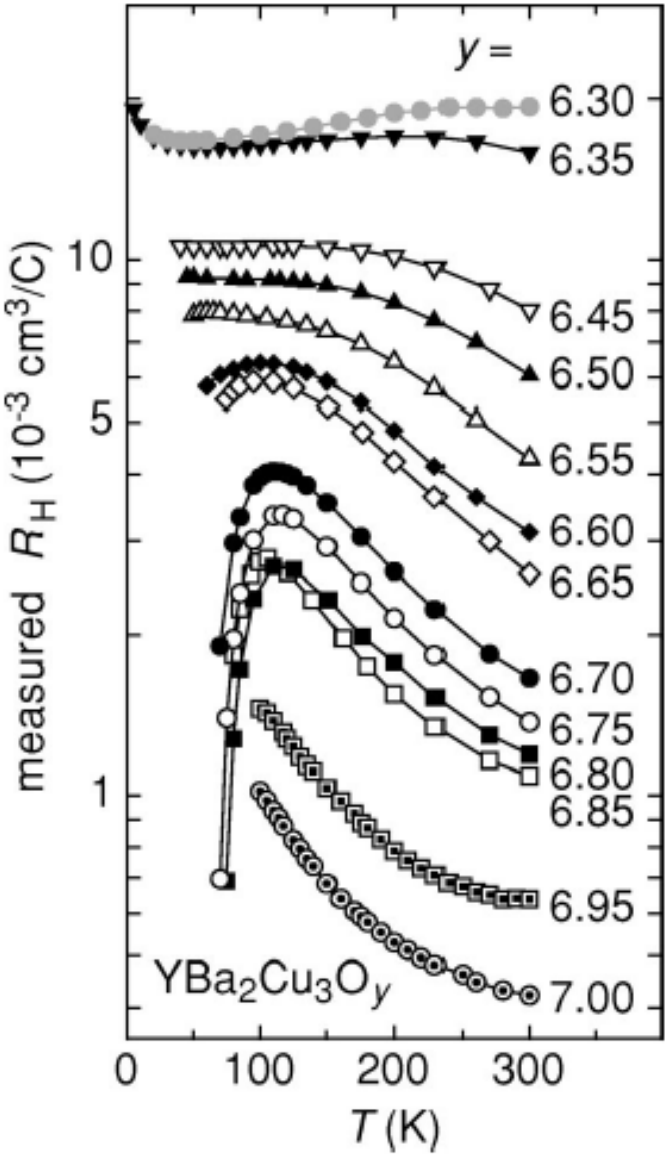
T. Watanabe, T.Fujii,
A. Matsuda, PRL 1997

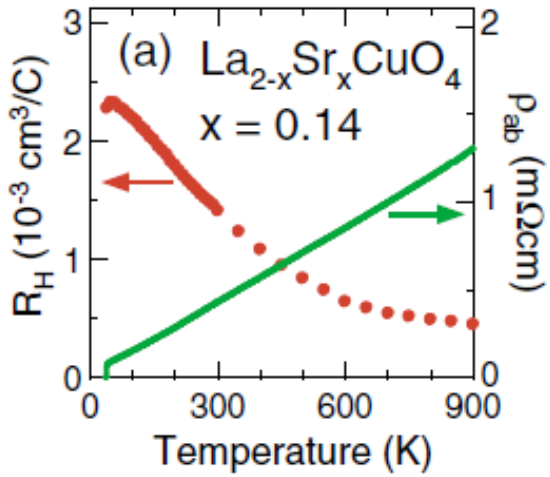
FIG. 2. In-plane resistivities ρ_a of $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ single crystals versus temperature for various oxygen contents (δ).

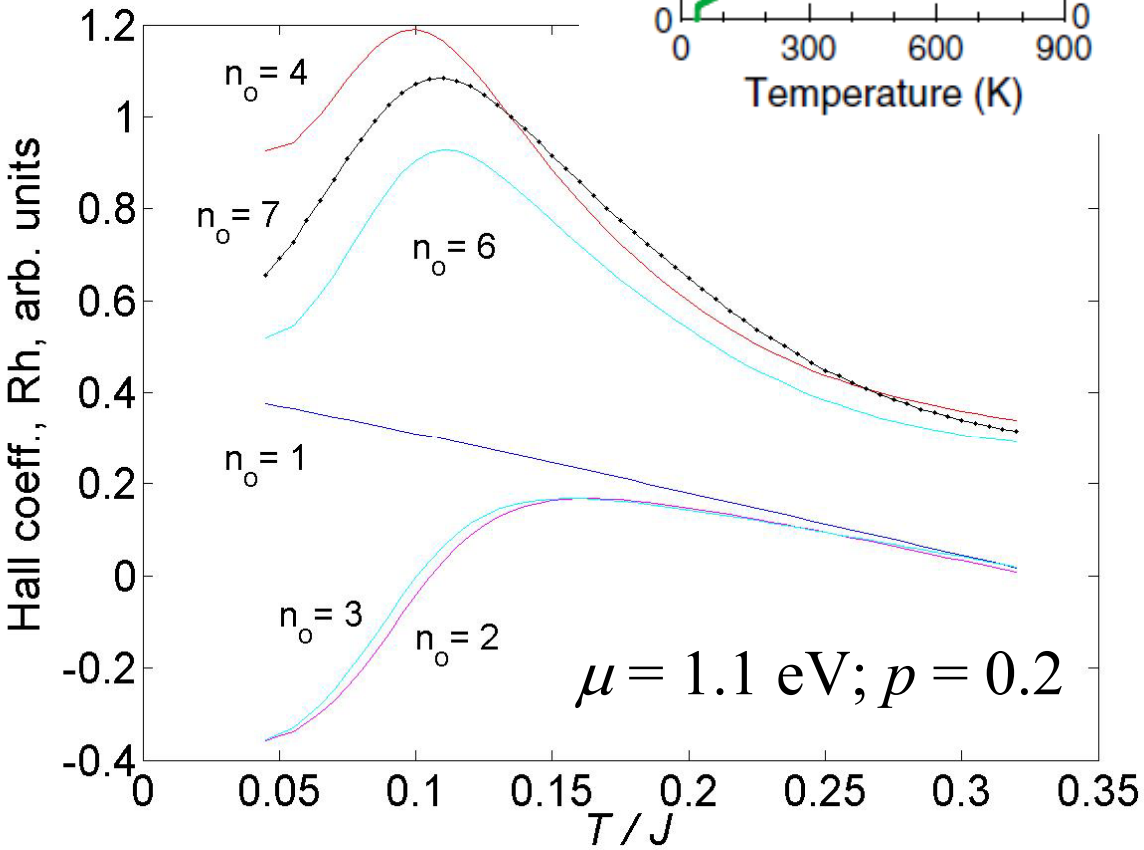
PHYSICAL REVIEW B **69**, 104521 (2004)

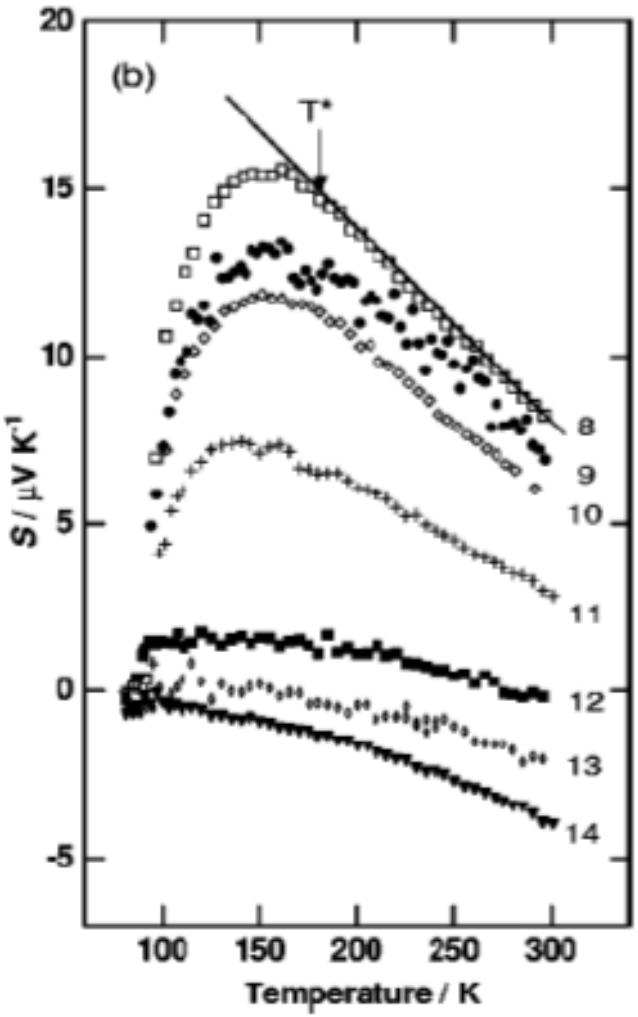
Intrinsic Hall response of the CuO_2 planes in a chain-plane composite system of $YBa_2Cu_3O_y$

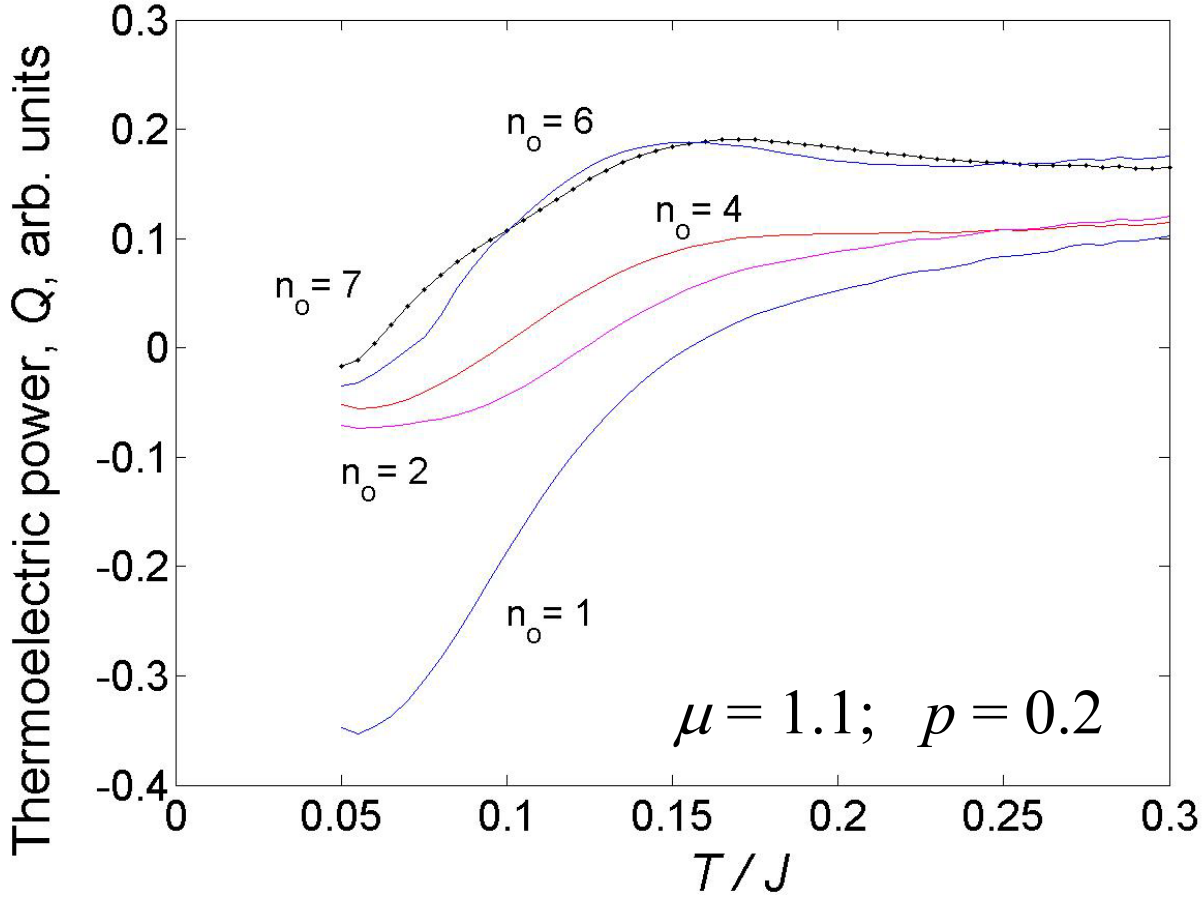
Kouji Segawa and Yoichi Ando





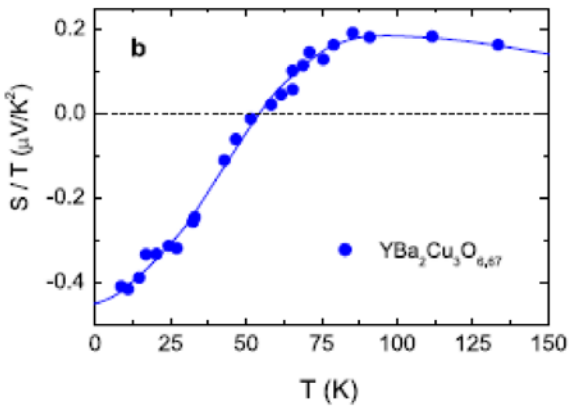


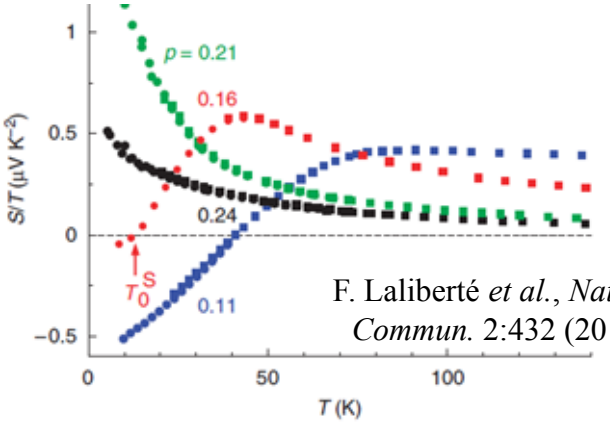




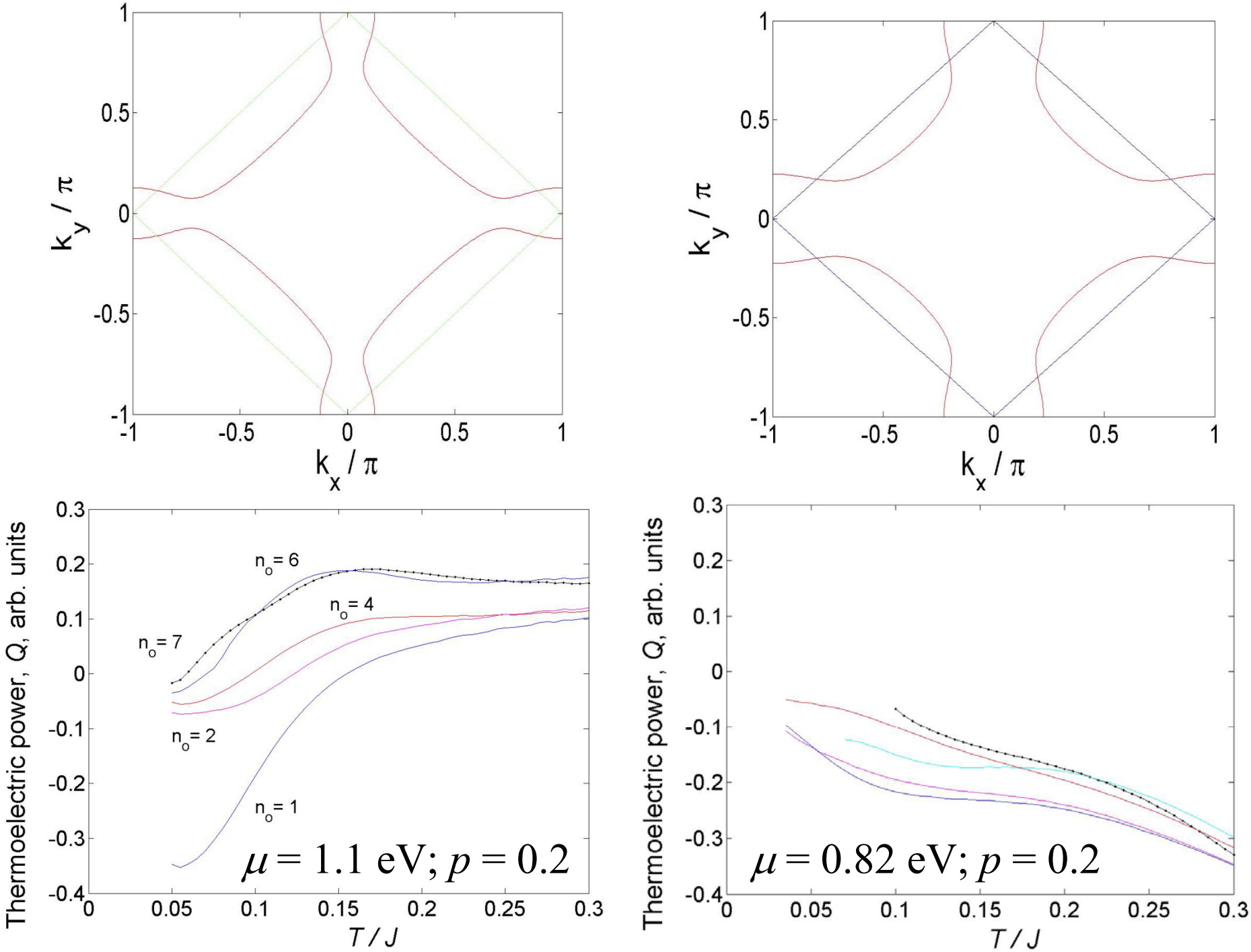
Seebeck coefficient of Eu-LSCO at high doping.

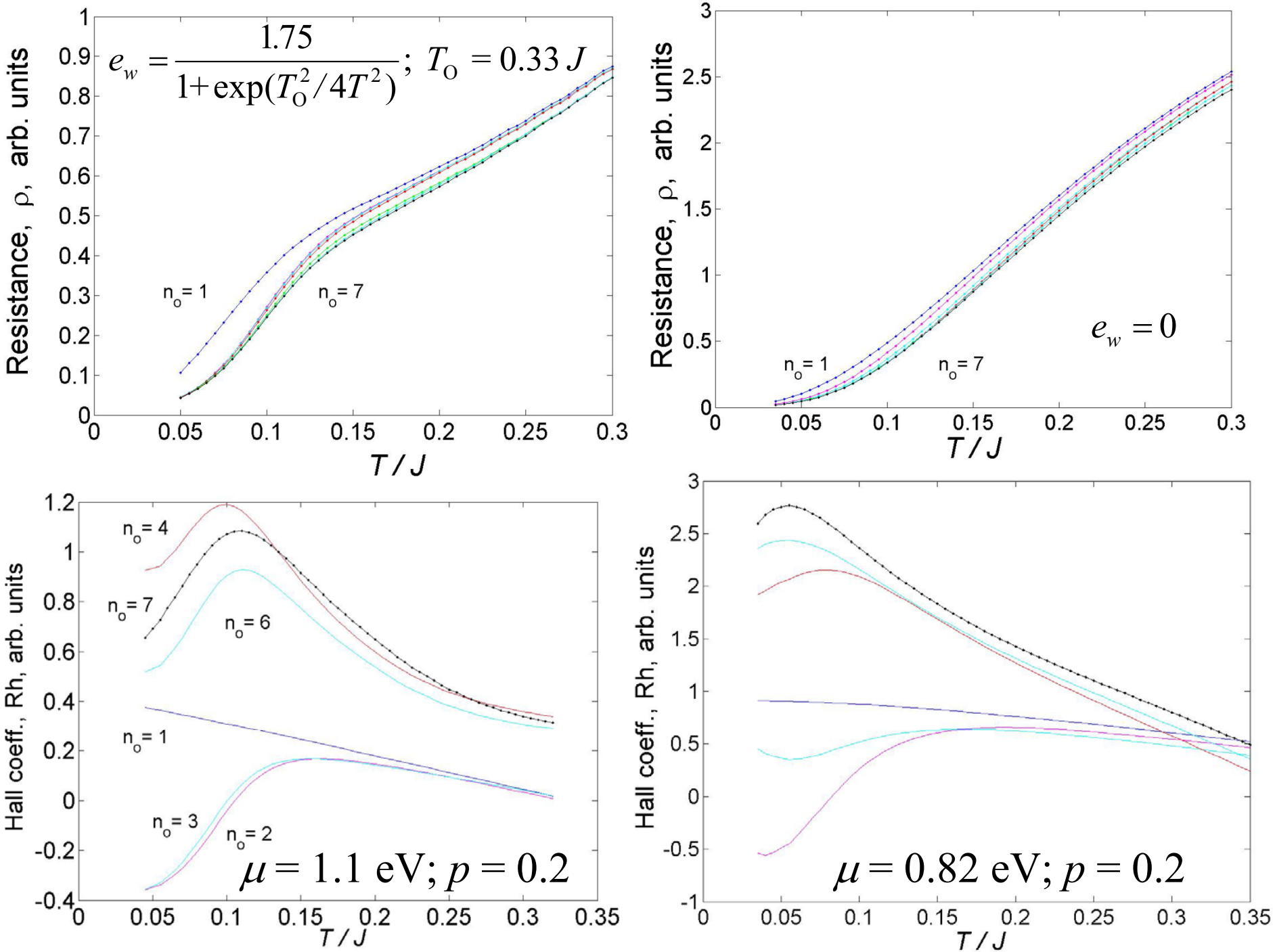
Термо-ЭДС, когда сверхпроводимость подавлена сильным магнитным полем:





F. Laliberté *et al.*, *Nature Commun.* 2:432 (2011).


k_y / π
k_x / π
Thermoelectric power, Q, arb. units
T / J
n_o = 6
n_o = 4
n_o = 7
n_o = 2
n_o = 1
μ = 1.1 eV; p = 0.2
μ = 0.82 eV; p = 0.2


$e_w = \frac{1.75}{1+\exp(T_O^2/4T^2)}$; $T_O = 0.33\,J$
Resistance, ρ, arb. units
T / J
n_o = 1
n_o = 7
$e_w = 0$
Hall coeff., Rh, arb. units
n_o = 4
n_o = 7
n_o = 6
n_o = 1
n_o = 3
n_o = 2
$\mu = 1.1$ eV; $p = 0.2$
$\mu = 0.82$ eV; $p = 0.2$

Волны зарядовой плотности (CDW): аномалия x≈1/8 в слоистых купратах

RXS: S. Blanco-Canosa *et al.*, Phys. Rev. **B 90**, 054513 (2014)

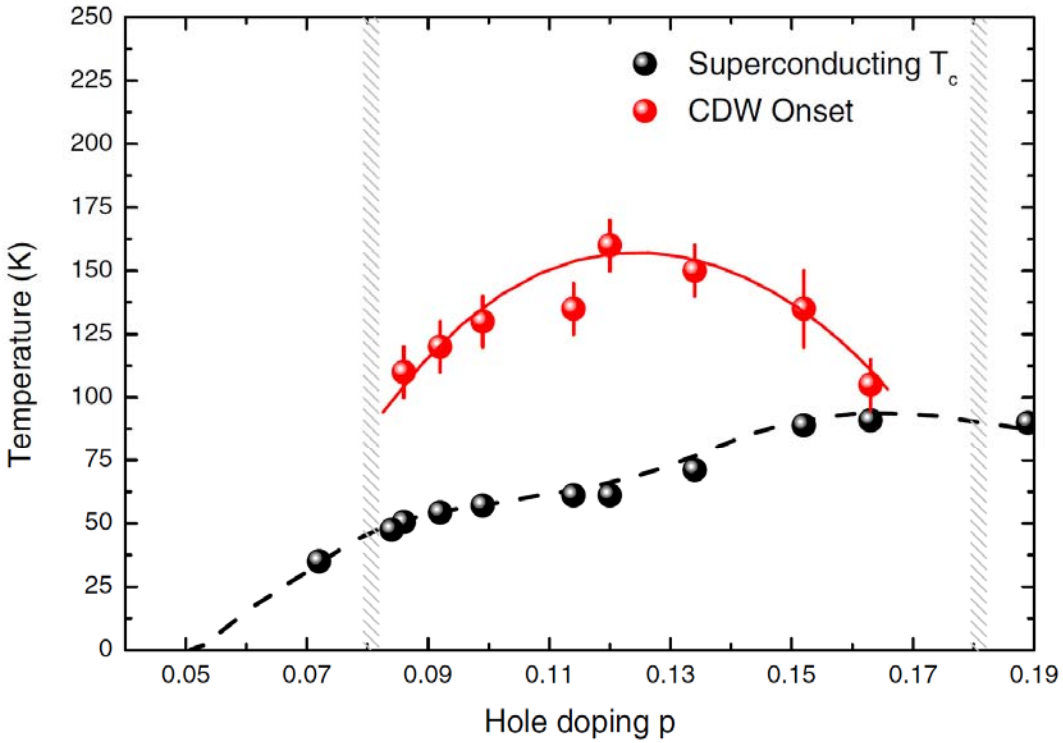


FIG. 10. (Color online) Doping dependence of the onset temperature of the CDW in $YBa_2Cu_3O_{6+x}$. The point at $p \sim 0.13$ has been taken from Ref. [23].

K. Kumagai *et al.*, Physica C **235-240**, 1715 (1994)

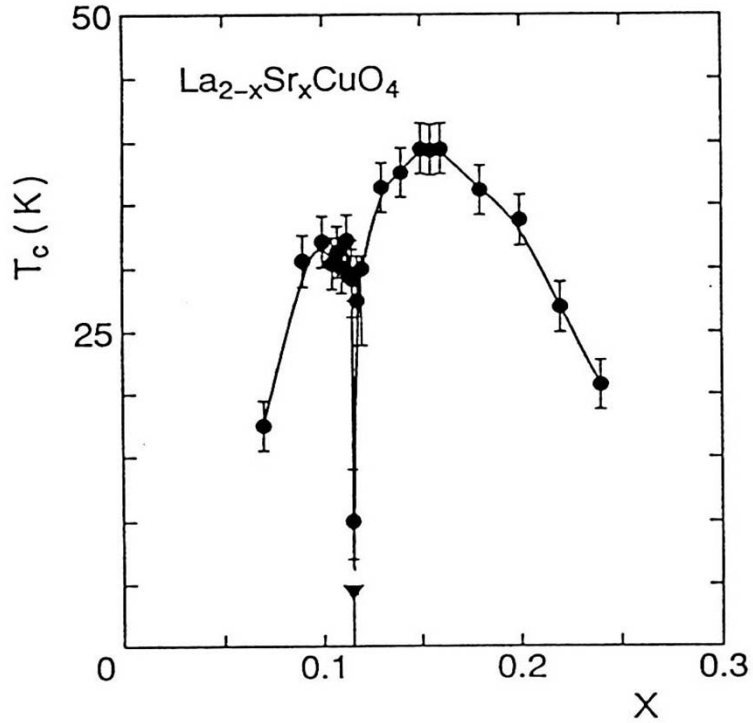
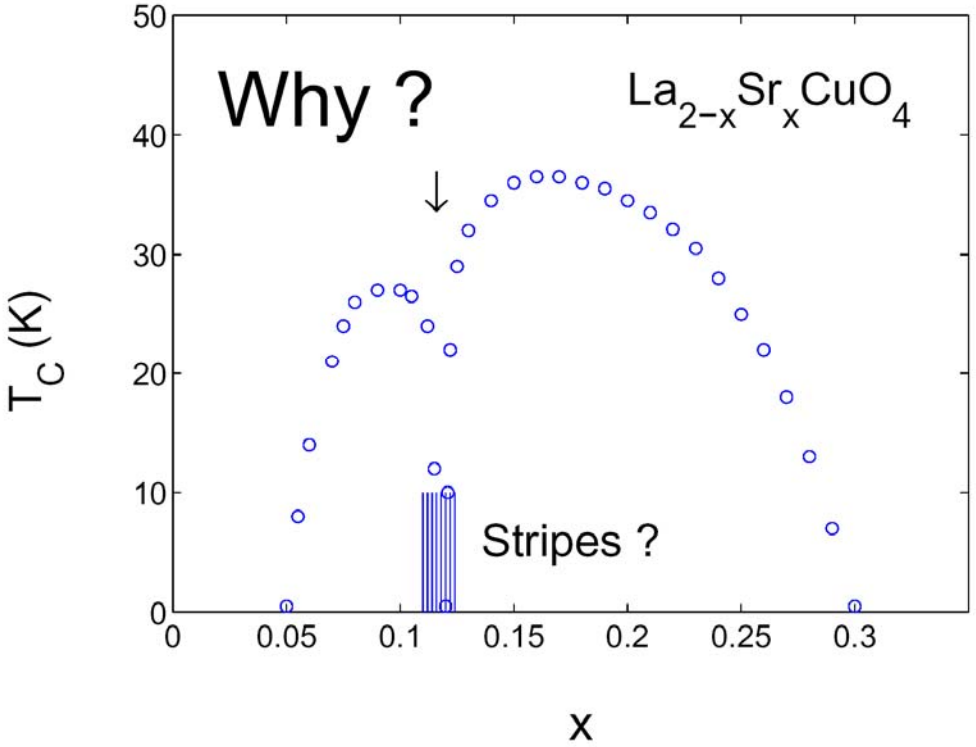


Fig.1. X-dependence of superconducting transition temperature, T_c, of $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. ▼ for x=0.115 shows no indication of SC down to 4.2K.

A.R. Moodenbaugh *et al.,* Phys. Rev. B **38** (1988) 4596.
K. Kumagai *et al.,* J. Magn.Magn. Mater **76-77** (1988) 601;
K. Kumagai *et al.,* Physica C **235-240** (1994) 1715.
J.M. Tranquada *et al.,* Nature **375** (1995) 561;
J.M. Tranquada *et al.,* Phys. Rev B **54** (1996) 7489;
J.M. Tranquada *et al.,* Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 338.

$La_{2-x-y}(Nd,Eu)_y(Ba,Sr)_xCuO_4$



для $La_{2-x-y}(Nd,Eu)_y(Ba,Sr)_xCuO_4$
и других ВТСП купратов.

Висмутовые ВТСП купраты !

M.Akoshima *et al.*,
Phys. Rev. B **57** (1998) 7491
W.L. Yang *et al.*,
Phys. Rev. B **62** (2000) 1361
I.Watanabe *et al.*,
Phys. Rev. B **62** (2000) 14524

I.A.Larionov and M.V. Eremin, J. Supercond. **15**, 389 (2002);
Journal of Magnetism and Magnetic Materials **272–276**, 181 (2004)

Модельный Гамильтониан:

$$H = \sum_{i,j} t_{ij} \Psi_i^{pd,\sigma} \Psi_j^{\sigma,dp} + \sum_{l>m} J_{lm} \left[(\mathbf{S}_l \mathbf{S}_m) - \frac{n_l n_m}{4} \right] +$$

$$+ \sum_{l>m} G_{lm} \delta_l \delta_m ,$$

$\delta_l = 1 - n_l$ - число допированных дырок на ячейку,

$\Psi_i^{pd,\sigma} (\Psi_j^{\sigma,dp})$ - операторы рождения (уничтожения) на основе состояний меди (d) и кислорода (p).

M.V. Eremin *et al.*, Solid State Comm. **88** (1993) 15; M.V. Eremin *et al.*, JETP Lett. **60** (1994) 125;
M.V. Eremin *et al.*, JETP **85** (1997) 963; F.C. Zhang and T.M. Rice, Phys. Rev. B **37** (1988) 3759.

$$t_n^{eff} = t_n P_{pd}\left[1 + \frac{\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle_n}{P_{pd}^2} + \frac{1}{8}\langle \mathrm{e}_i \mathrm{e}_j \rangle_n\right], \quad P_{pd}=(1+x)/2,$$

$$x \approx 1/8: \quad \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle_1 \approx -P_{pd}^2 \approx -0.31, \quad \rightarrow \quad t_1^{eff} = 0$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{eff} = 4t_2^{eff}\cos k_x \cos k_y + 2t_3^{eff}(\cos 2k_x + \cos 2k_y)$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\sigma} = P_{pd}\sum_{i,j} t_{ij}\left[1 + \frac{\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle_n}{P_{pd}^2}\right] e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{ij}} -$$

$$\frac{1}{2NP_{pd}}\sum_{\mathbf{k}'}\left[\left(J_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} - 2t_{\mathbf{k}'}\right)\langle X_{\mathbf{k}'}^{2\bar{\sigma}} X_{\mathbf{k}'}^{\bar{\sigma}2}\rangle + 2G_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}\langle X_{\mathbf{k}'}^{2\sigma} X_{\mathbf{k}'}^{\sigma 2}\rangle\right]$$

I.A.Larionov and M.V. Eremin, J. Supercond. 15 (2002) 389

$$\eta^{\sigma}_{\mathbf{k},\mathbf{Q}} = \left[t_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \frac{\sum \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle t_{ij} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{ij}}}{P_{pd}^2} + \frac{\left(\sum \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle J_{ij} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{ij}} \right)_{\mathbf{k}=0}}{2P_{pd}^2} - \frac{1}{2} J_{\mathbf{Q}} \right] \left\langle \frac{1}{2} e_{\mathbf{Q}} + \sigma s^z_{\mathbf{Q}} \right\rangle +$$

$$+ \frac{1}{2NP_{pd}^2} \sum_{\mathbf{k}'} \left[(J_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} - 2t_{\mathbf{k}'}) \left\langle X^{2\tilde{\sigma}}_{\mathbf{k}'} X^{\tilde{\sigma}2}_{\mathbf{k}'} \right\rangle + 2G_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} \left\langle X^{2\sigma}_{\mathbf{k}'} X^{\sigma 2}_{\mathbf{k}'} \right\rangle \right] \left\langle \frac{1}{2} e_{\mathbf{Q}} + \sigma s^z_{\mathbf{Q}} \right\rangle -$$

$$- \frac{1}{2NP_{pd}} \sum_{\mathbf{k}'} \left[(J_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} - 2t_{\mathbf{k}'}) \left\langle X^{2\tilde{\sigma}}_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}} X^{\tilde{\sigma}2}_{\mathbf{k}'} \right\rangle + 2G_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} \left\langle X^{2\sigma}_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}} X^{\sigma 2}_{\mathbf{k}'} \right\rangle \right] + G_{\mathbf{Q}} e_{\mathbf{Q}},$$

При $t_{\cdot 1}^{eff} = 0$, $\mathbf{Q} = (\pi,\pi)$: $\eta^{\sigma}_{\mathbf{k},\mathbf{Q}} = \eta^{\sigma}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},-\mathbf{Q}}$ - нет затухания !

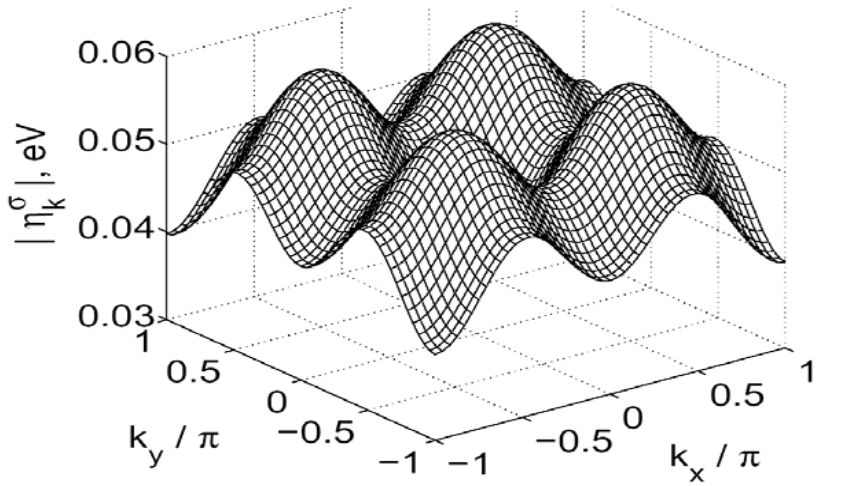
M. Eremin and A. Rigamonti, Phys. Rev. Lett. **88** (2002) 037002.

$J_{\mathbf{k}} = 2J(\cos k_x + \cos k_y)$,

$J = 135$ meV в La_2CuO_4,

$G_{\mathbf{k}} = 2G(\cos k_x + \cos k_y)$,

$G_{\mathbf{Q}}/G = -4$ при $\mathbf{Q} = (\pi,\pi)$.



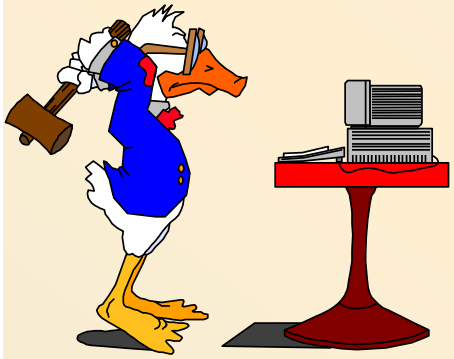
$$E^{\sigma}_{1\mathbf{k},2\mathbf{k}} = \tfrac{1}{2}\left(\varepsilon^{\sigma}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \varepsilon^{\sigma}_{\mathbf{k}}\right) - \mu \pm \tfrac{1}{2} E^{\sigma}_{12}$$

где $$E^{\sigma}_{12} = \sqrt{\left(\varepsilon^{\sigma}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - \varepsilon^{\sigma}_{\mathbf{k}}\right)^2 + 4\eta^{\sigma}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\mathbf{Q}}\eta^{\sigma}_{\mathbf{k},\mathbf{Q}}}\ .$$

CDW: $$\langle e_{\mathbf{Q}} \rangle = \tfrac{1}{2N}\sum_{\mathbf{k}} \langle X^{2\uparrow}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} X^{\uparrow 2}_{\mathbf{k}} + X^{2\downarrow}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} X^{\downarrow 2}_{\mathbf{k}} \rangle$$

SDW: $$\langle s^{z}_{\mathbf{Q}} \rangle = \tfrac{1}{2N}\sum_{\mathbf{k}} \langle X^{\uparrow 2}_{\mathbf{k}} X^{2\uparrow}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - X^{\downarrow 2}_{\mathbf{k}} X^{2\downarrow}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \rangle$$

$$\langle X^{2\sigma}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} X^{\sigma 2}_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{P_{pd}\eta^{\sigma}_{\mathbf{k},\mathbf{Q}}}{E^{\sigma}_{12}}\left[f(E^{\sigma}_{1\mathbf{k}}) - f(E^{\sigma}_{2\mathbf{k}})\right]$$



В пределе $t_{\cdot 2}^{eff}$, $t_{\cdot 3}^{eff} << G$, $t_{\cdot 1}^{eff} = 0$:

$$E_{12}^{\sigma} \approx 2\,|\,\eta_{\mathbf{k},\mathbf{Q}}^{\sigma}\,|$$

SDW $\langle s_{\mathbf{Q}}^{z} \rangle = 0$, CDW $e_{\mathbf{Q}} = 0.5\, P_{pd}$.

$La_{2-x}Sr_xCuO_4$ $x \approx 1/8$

$t_{\cdot 1}^{eff} = 0$, $|\,t_{\cdot 2}^{eff}\,|$=10 meV, $t_{\cdot 3}^{eff}$ = 20 meV, $G \approx 75$ meV,

$\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle_2 = 0.15$, $\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle_3 = 0$, $T_{CDW} = 350$ K.

Решение при T→0: $e_{\mathbf{Q}} = x$, x - концентрация атомов Sr.

S. Blanco-Canosa *et al.*, Phys. Rev. **B 90**, 054513 (2014)

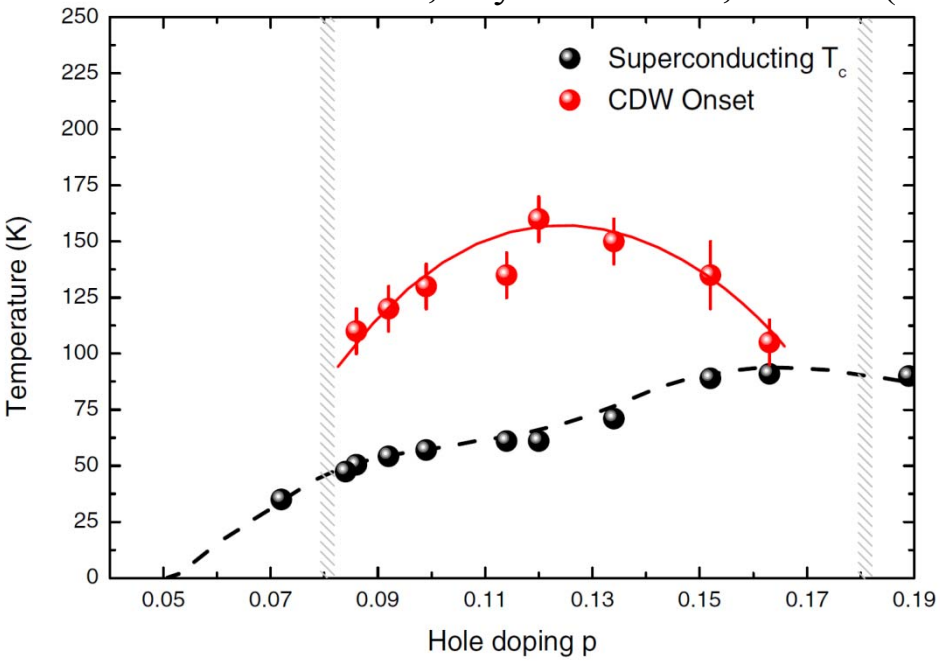


FIG. 10. (Color online) Doping dependence of the onset temperature of the CDW in $YBa_2Cu_3O_{6+x}$. The point at $p \sim 0.13$ has been taken from Ref. [23].

K. Kumagai *et al.*, Physica C **235-240**, 1715 (1994)

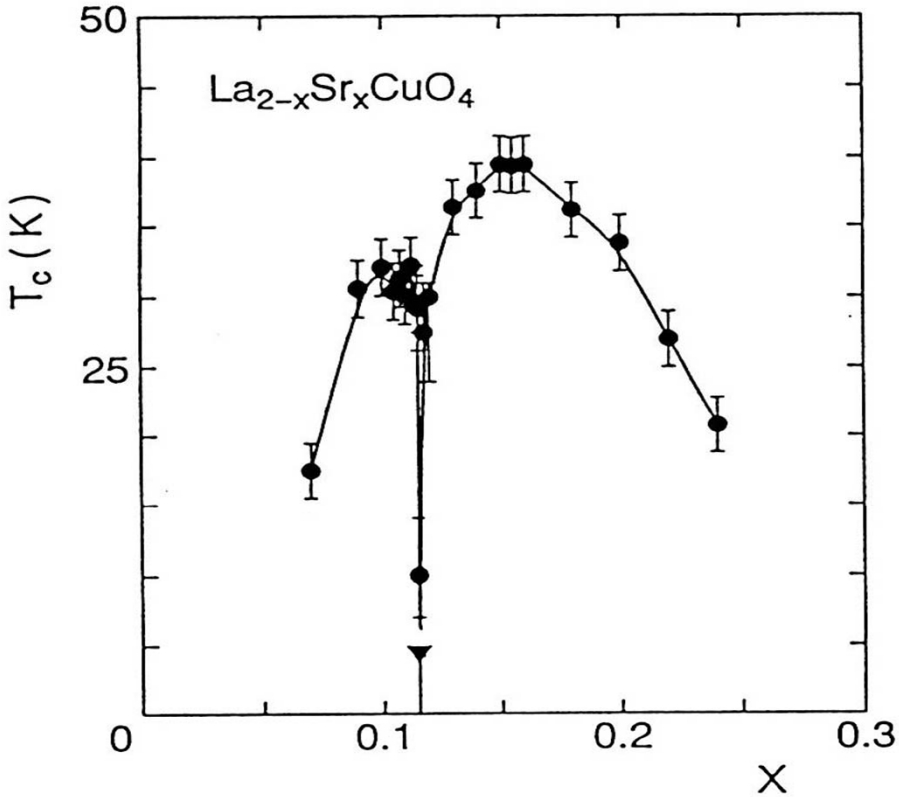
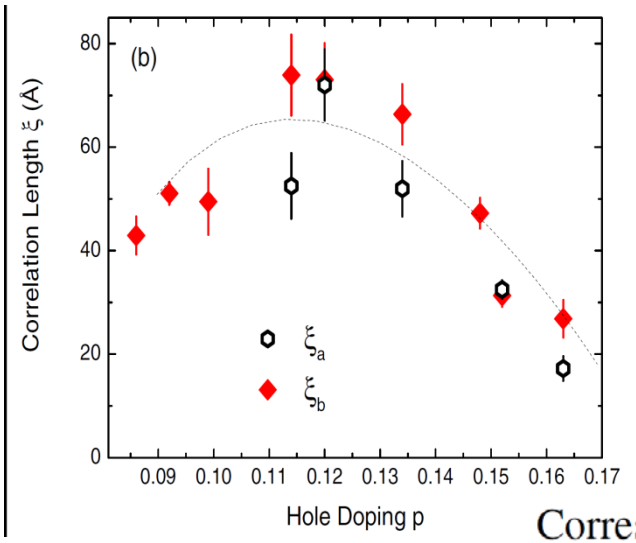


Fig.1. X-dependence of superconducting transition temperature, T_c, of $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. ▼ for x=0.115 shows no indication of SC down to 4.2K.

RXS:



Corresponding correlation length, defined as $\xi_{a,b} = \frac{a,b}{\pi \times \mathrm{FWHM}}$.

Заключение

- Метод релаксационных функций позволяет объяснить основные особенности поведения динамической спиновой восприимчивости в ВТСП купратах полученные методом неупругого рассеяния нейтронов и ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР)
- Затухание элементарных возбуждений парамагнонного вида значительно.
- Простейшая, лорентцева, форма с учетом затухания парамагнонов, для мнимой части динамической спиновой восприимчивости более точно воспроизводит данные неупругого рассеяния нейтронов, RIXS и ЯКР
- Результаты расчета демонстрируют разумное согласие с экспериментально наблюдаемыми зависимостями сопротивления, коэффициента Холла и термо-ЭДС для реалистичного набора параметров модели спиновой подсистемы и параметров зоны проводимости
- Около x =1/8 существуют волны зарядовой плотности (ВЗП корреляции) (желательны исследования под давлением)