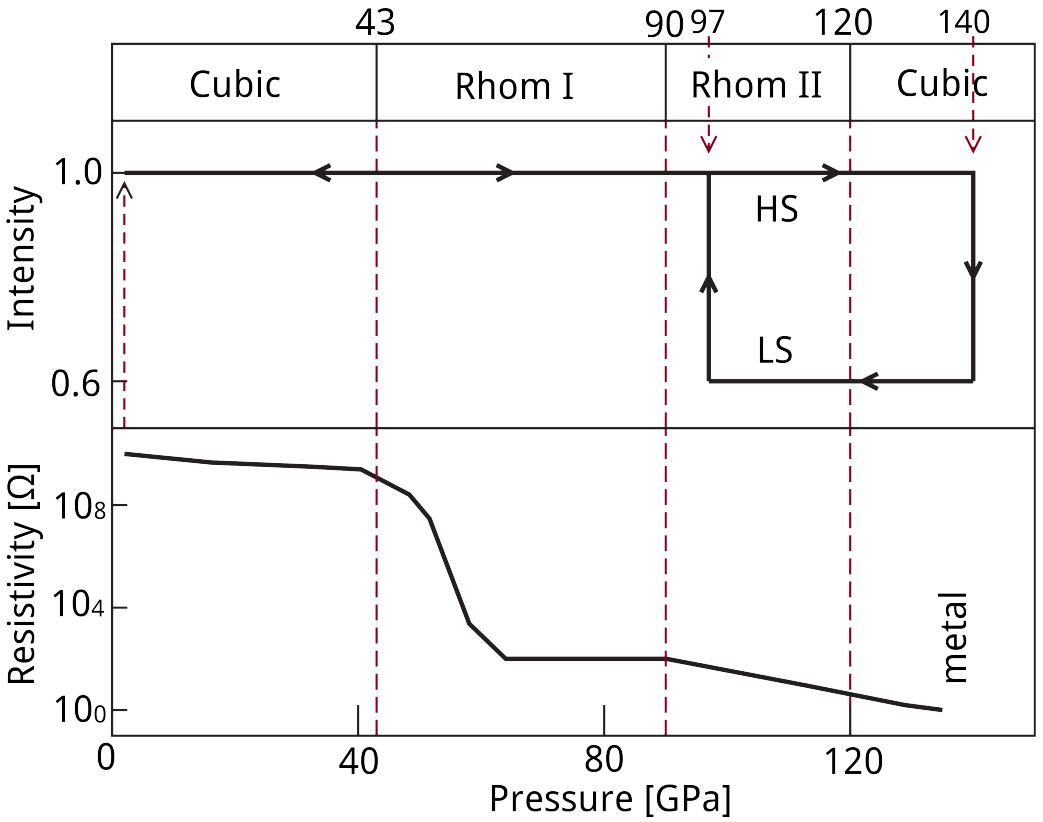
Институт физики металлов
Уральское отделение РАН

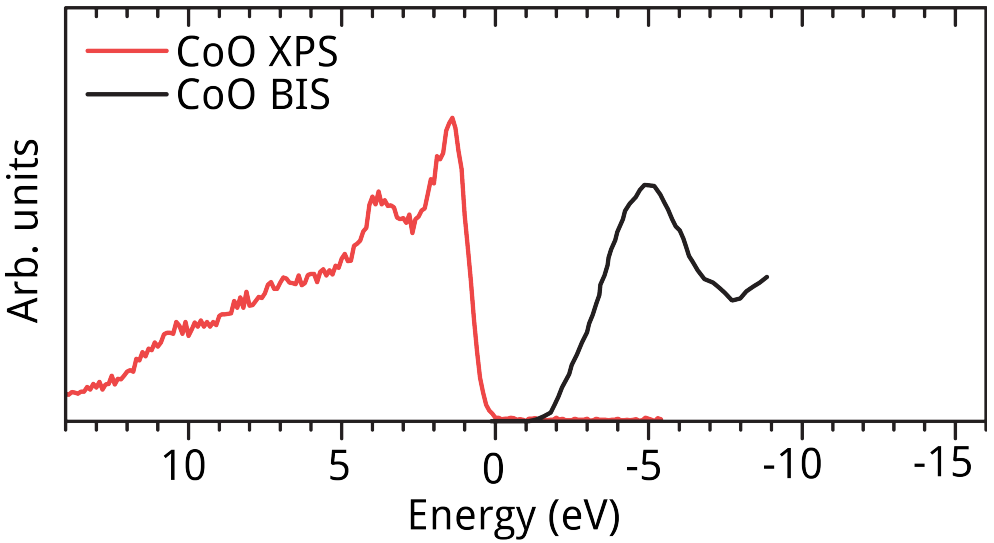
Первопринципное исследование вызванного давлением перехода диэлектрик-металл в CoO

А.А. Дьяченко
А.О. Шориков, А.В. Лукоянов, В.И. Анисимов

XII Конференция молодых ученых “Проблемы физики твердого тела и высоких давлений"
7-16 сентября 2012г.

Введение

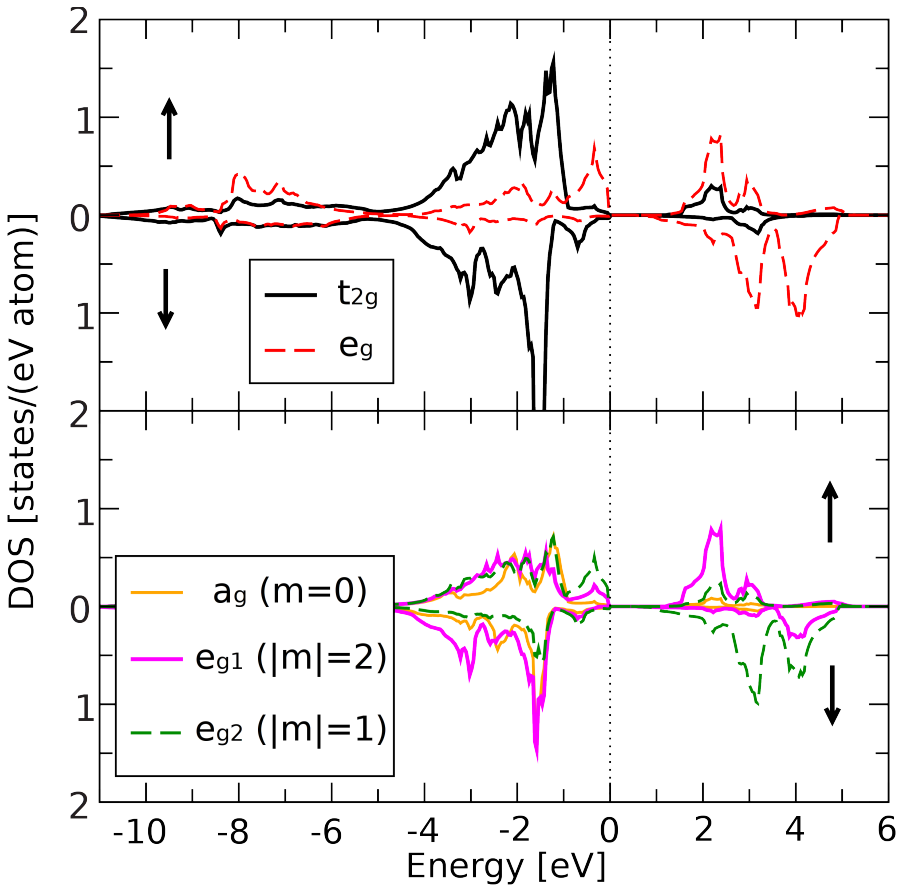




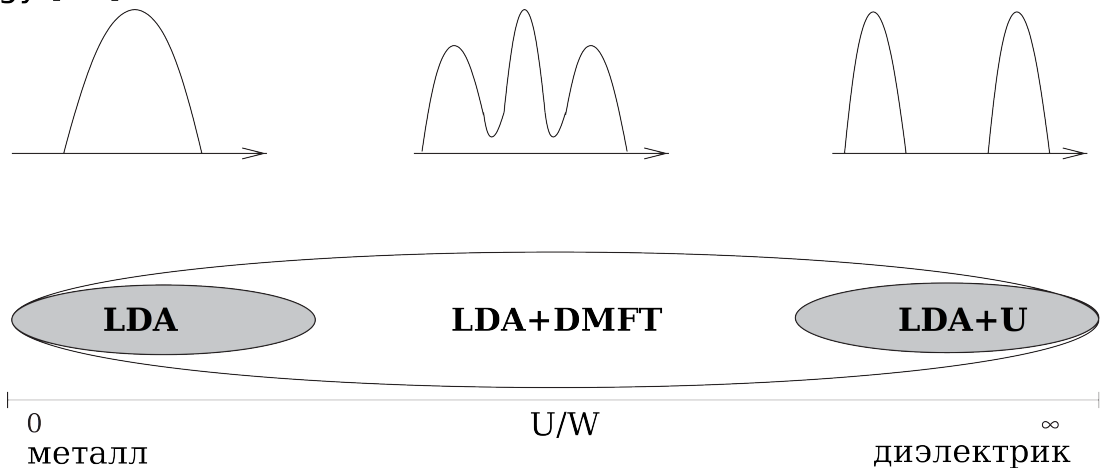
- Zhang & Koepernik, 2009
- Rueff & Mattila, 2005
- Atou & Kawasaki, 2004
- Guo & Mao, 2002

- Kurmaev & Wilks, 2008
- Elp & Wieland, 1991

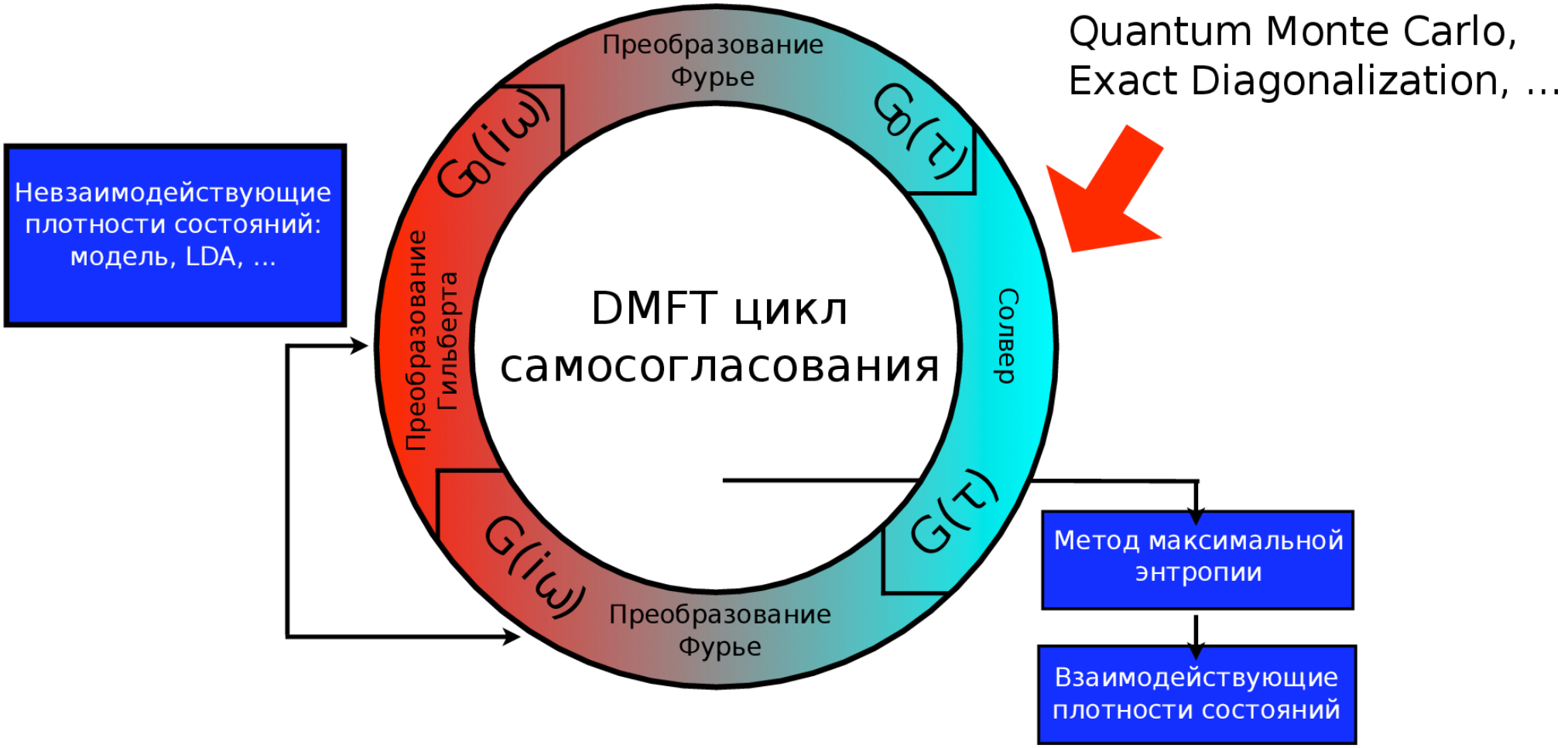
Методы



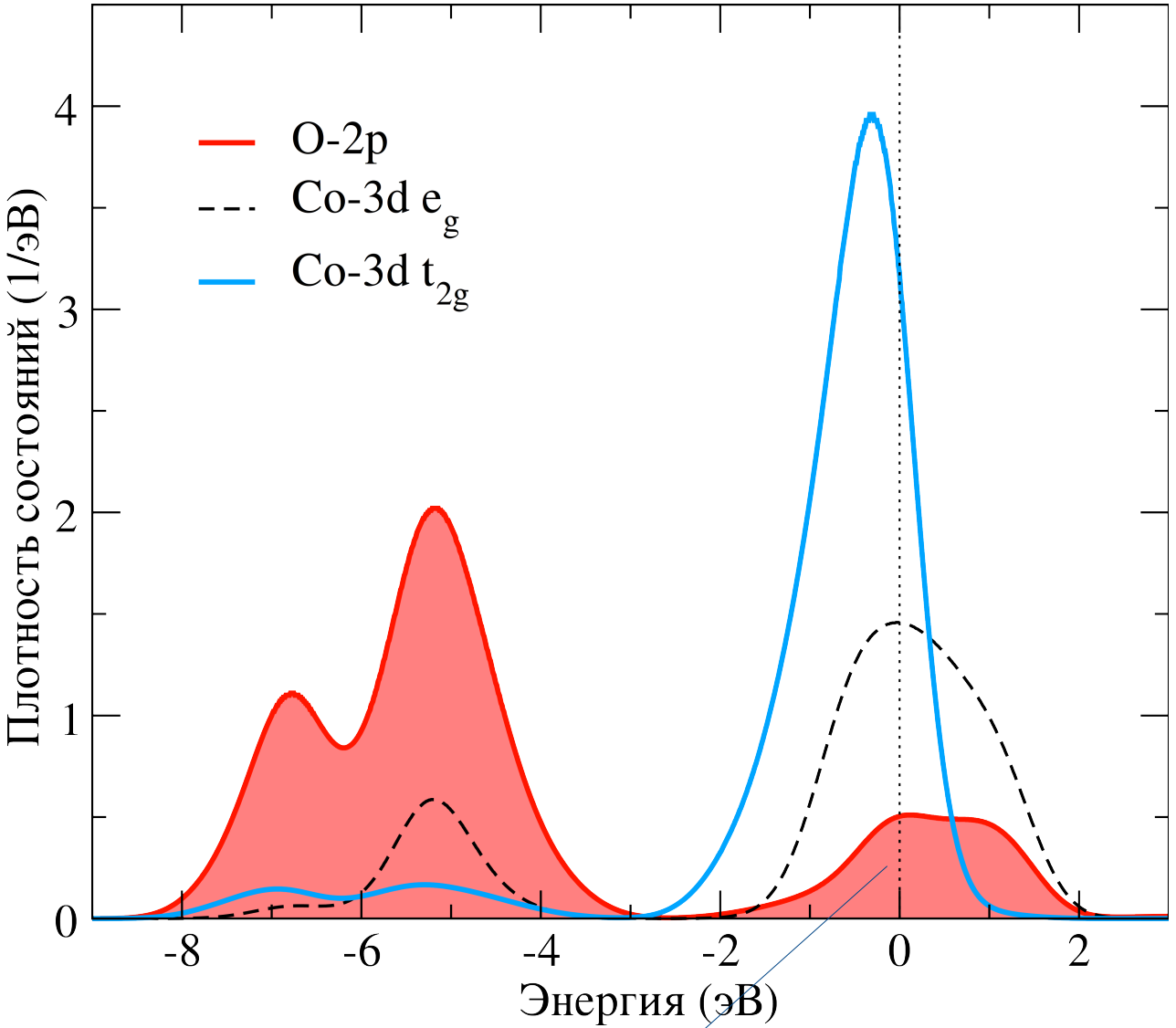
- L(S)DA
  (Terakura & Oguchi, 1984;
  Zhang & Koepernik, 2009)
- L(S)DA+U
  (Anisimov & Zaanen, 1991)
- **LDA+DMFT**



LDA+DMFT


Quantum Monte Carlo,
Exact Diagonalization, ...
Невзаимодействующие плотности состояний: модель, LDA, ...
DMFT цикл самосогласования
Преобразование Фурье
G0(iω)
G0(τ)
Преобразование Гильберта
Солвер
G(iω)
G(τ)
Преобразование Фурье
Метод максимальной энтропии
Взаимодействующие плотности состояний

Параметры расчета



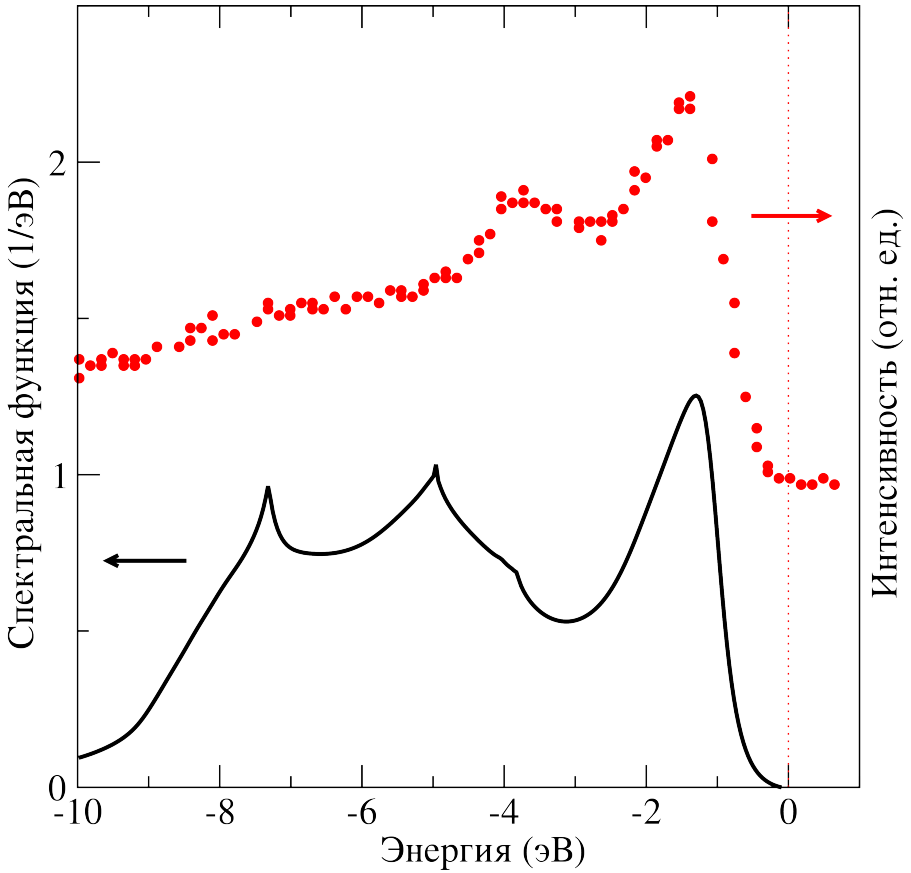
- Кристаллическая структура: кубическая B1
- Температура Нееля: T_N=289 K

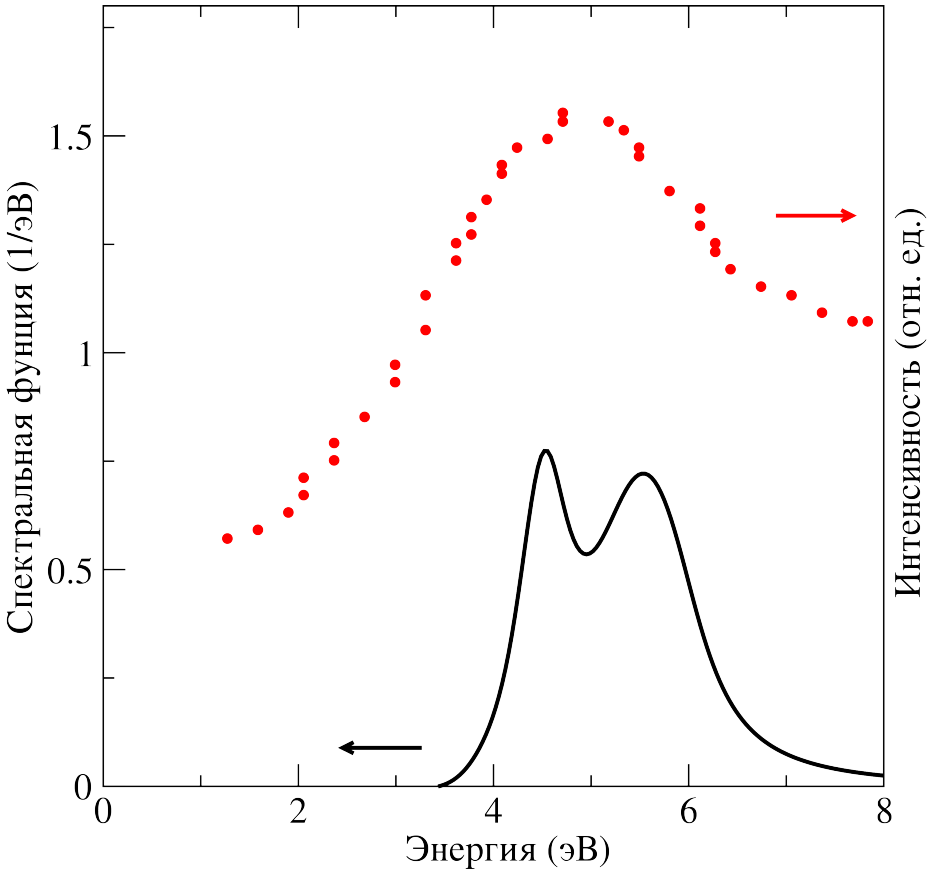
Температура расчета: T=1160 K (β=10 эВ$^{-1}$)

Полученные параметры взаимодействия (constrain-LDA): U=6.0 эВ J_H=1.0 эВ

$$\hat{H} = \hat{H}_{LDA} - \hat{H}_{dc} + \frac{1}{2}\sum_{i,\alpha,\beta,\sigma,\sigma'} U^{\sigma\sigma'}_{\alpha\beta}\,\hat{n}^{d}_{i\alpha\sigma}\hat{n}^{d}_{i\beta\sigma'}$$

Результаты





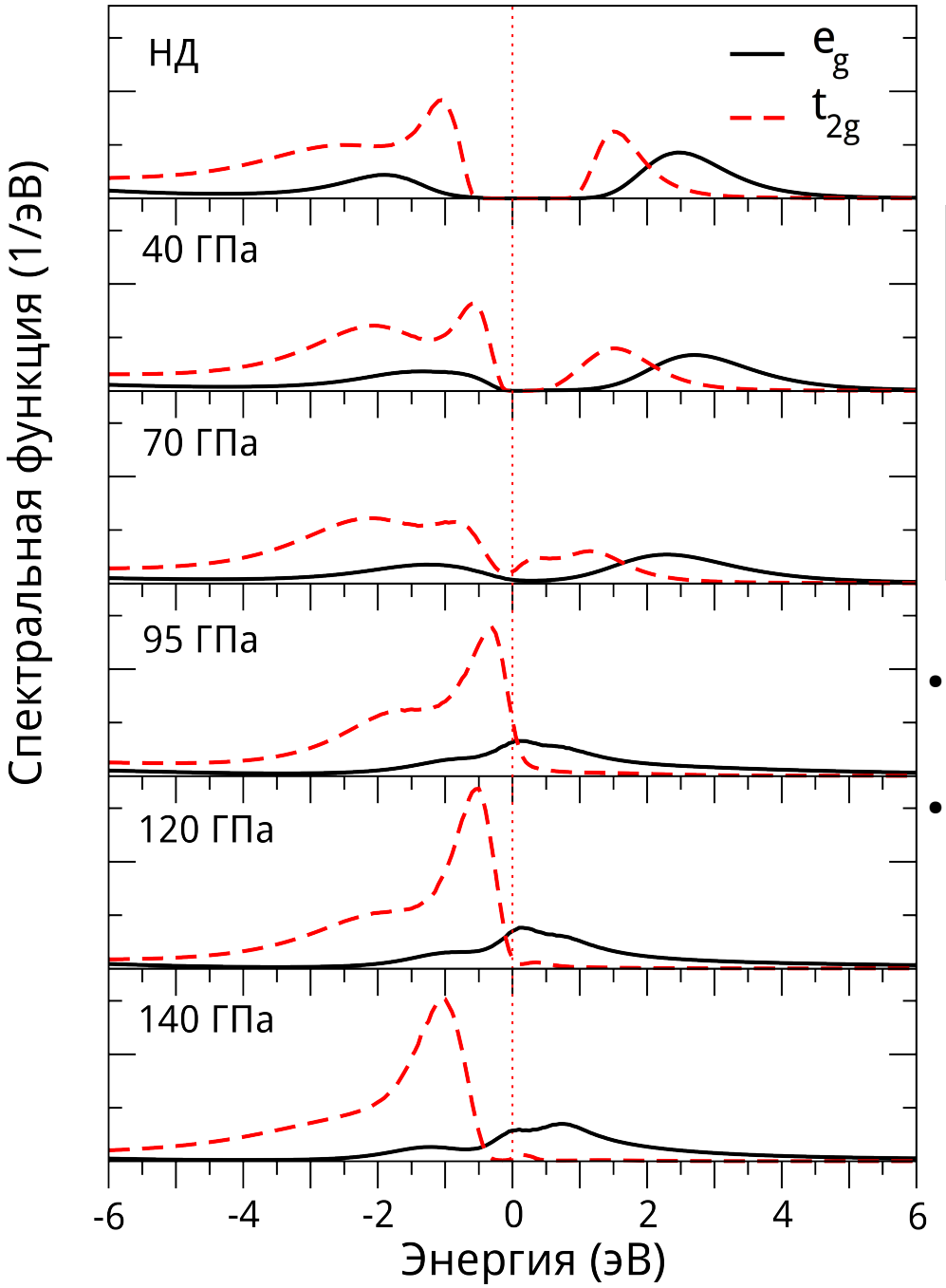
- Величина оптической щели – 2 эВ
- Заселенности орбиталей: $n(e_g)$=0.55 $n(t_{2g})$=0.83
- Величина локального магнитного момента – 2.81 μ_B

Kurmaev & Wilks, 2008

↓

Высокоспиновое состояние с конфигурацией $t_{2g}^{5} e_g^{2}$

MIT

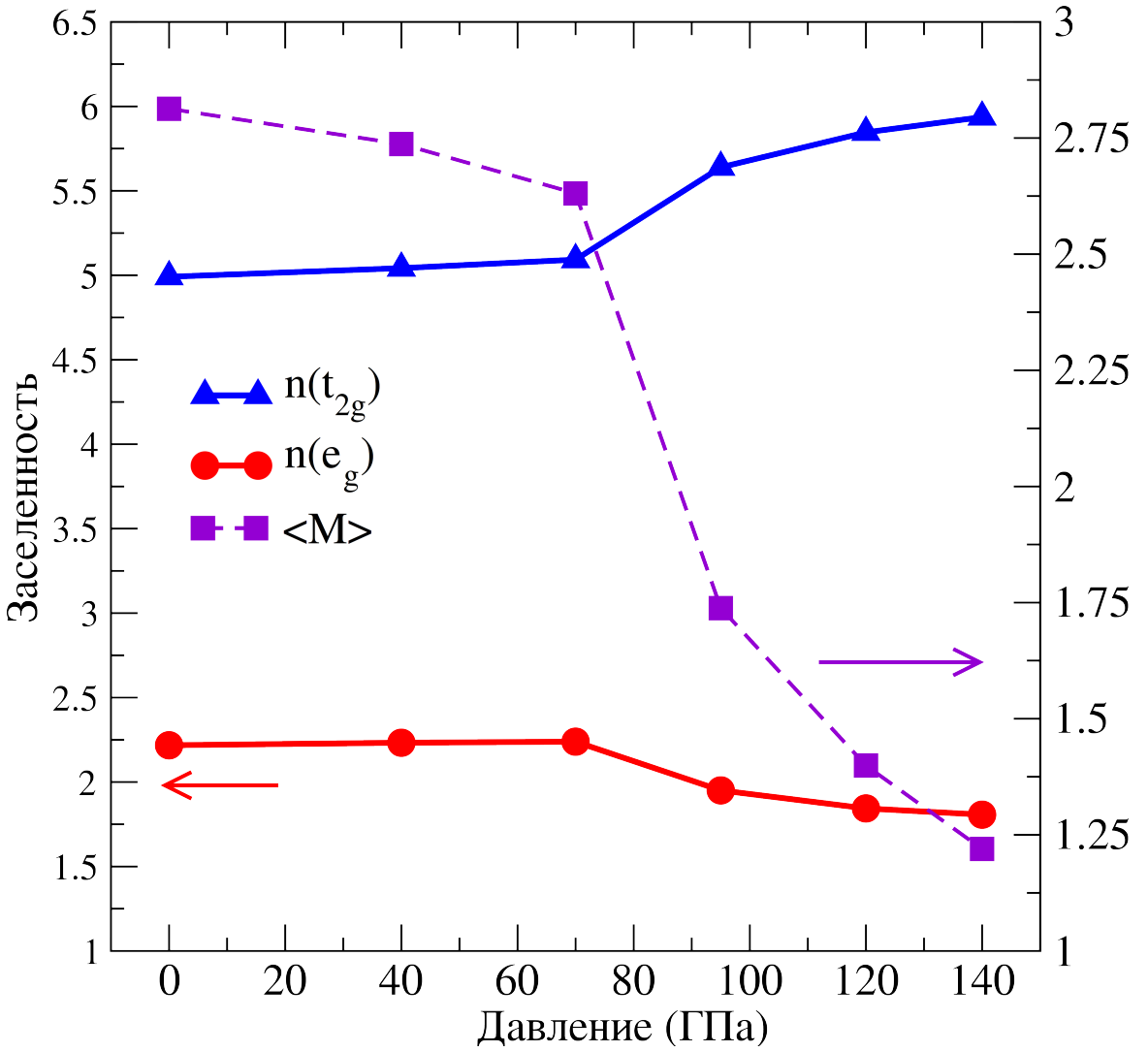


Переход диэлектрик-металл в диапазоне давлений 40-70 ГПа

- Величина оптической щели e_g орбиталей в 1.5 раза больше чем t_{2g}
- С увеличением давления t_{2g} орбитали становятся металлическими при 70 ГПа, e_g при этом сохраняют щель порядка 0.5 эВ

Orbital selective metal insulator transition (OSMT)

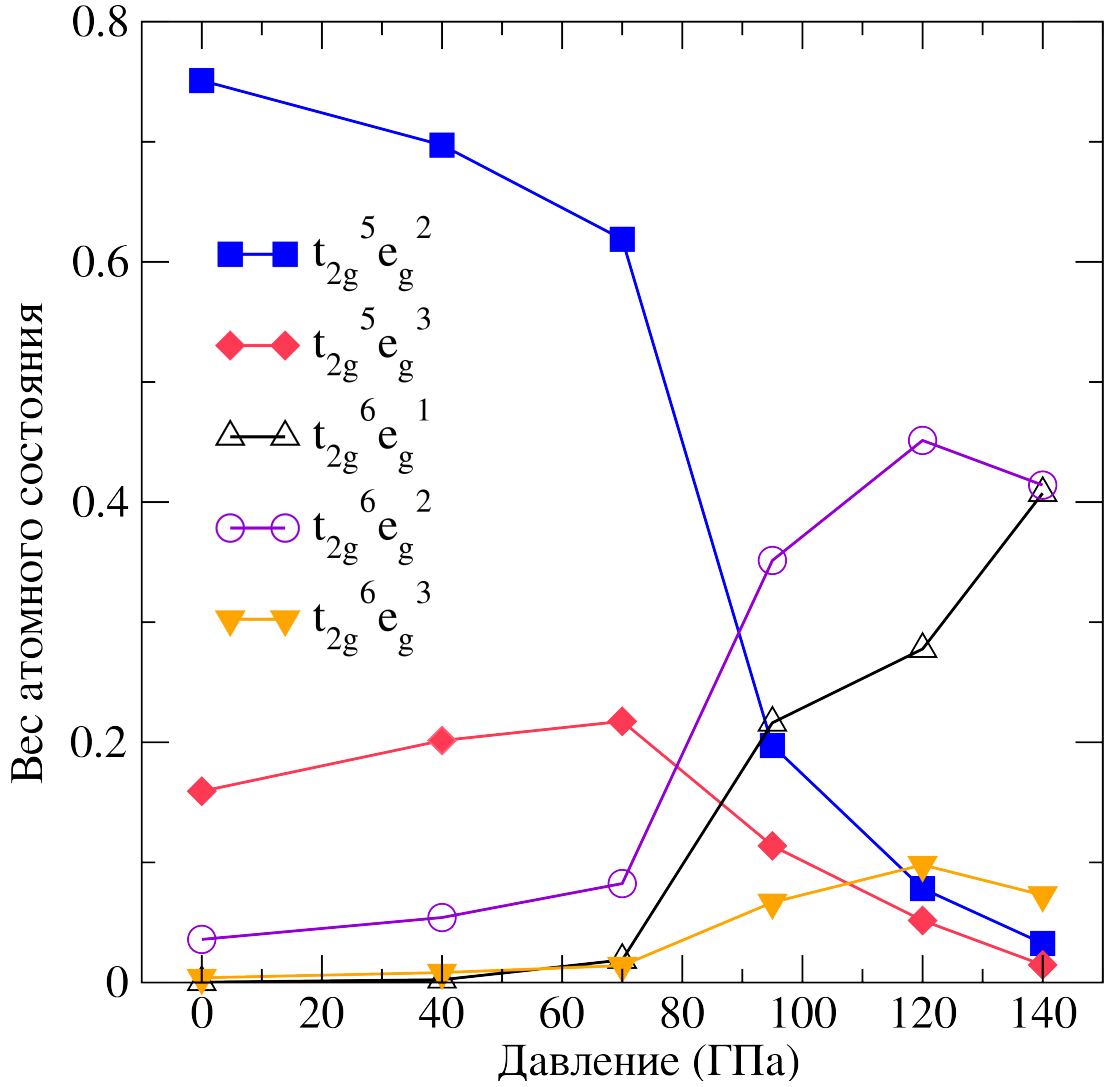
Спиновый переход



- Уменьшение величины локального магнитного момента с **2.63 μ_B при 70 ГПа** до **1.73 μ_B при 95 ГПа** и **1.21 μ_B при 140 ГПа**
- Перераспределение заселенностей t_{2g} и e_g орбиталей; наблюдается конфигурация $t_{2g}^6 e_g^1$ при 140 ГПа

Спиновый переход $t_{2g}^5 e_g^2 \rightarrow t_{2g}^6 e_g^1$ (HS-LS)

Электронные конфигурации



- Высокоспиновая конфигурация $t_{2g}^5e_g^2$ при нормальном давлении
- При высоких давлениях реализуется смесь конфигураций $t_{2g}^6e_g^1$ (LS) и $t_{2g}^6e_g^2$ (IS)

Спиновый переход характера $t_{2g}^5e_g^2 \rightarrow t_{2g}^6e_g^1$ (HS-LS)

Заключение

Проведенные нами LDA+DMFT расчеты показали:

- Широкая энергетическая щель при нормальном давлении
- Металлизация t_{2g} состояний при давлениях 40 ГПа и выше – OSMT
- Переход диэлектрик-металл сопровождается спиновым переходом при давлениях выше 70 ГПа
- Характер спинового перехода: $t_{2g}^{5}e_{g}^{2} \rightarrow t_{2g}^{6}e_{g}^{1}$
- Хороше согласие с данными рентгеновской спектроскопии и измерениями транспортных свойств

A.A. Dyachenko, A.O. Shorikov, A.V. Lukoyanov, and V.I. Anisimov, JETP Letters, 2012, Vol. 96, No. 1, pp. 56-60

Спасибо за внимание!

T. Atou, M. Kawasaki, and S. Nakajima, Jpn. J. Appl. Phys. **43**, L1281 (2004)
J.-P. Rueff, A. Mattila, J. Badro, G. Vanko, and A. Shukla, J. Phys.: Condens. Matter **17**, S717 (2005)
Q. Guo, H.-K. Mao, J. Hu, J. Shu, and R. J. Hemley, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 11369 (2002)
J. van Elp, J. L. Wieland, H. Eskes, P. Kuiper, and G. A. Sawatzky, Phys. Rev. B **44**, 6090 (1991)
K. Terakura, T. Oguchi, A. R. Williams, and J. Kubler, Phys. Rev. B **30**, 4734 (1984)
V. I. Anisimov, J. Zaanen, and O. K. Anderson, Phys. Rev. B **44**, 943 (1991)
W. Zhang, K. Koepernik, M. Richter, and H. Eschrig, Phys. Rev. B **79**, 155123 (2009)
E. Z. Kurmaev, R. G. Wilks, A. Moewes, L. D. Finkelstein, S. N. Shamin, and J. Kunes, Phys. Rev. B **77**, 165127 (2008)