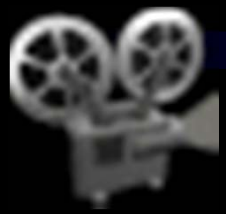
Парамагноны в ВТСП купратах

Ларионов И.А.

НИТУ «МИСиС», г. Москва, Россия

Казанский Федеральный Университет, г. Казань, Россия



References:

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); and to be published

И.А. Ларионов и А.Ф. Барабанов, to be published .

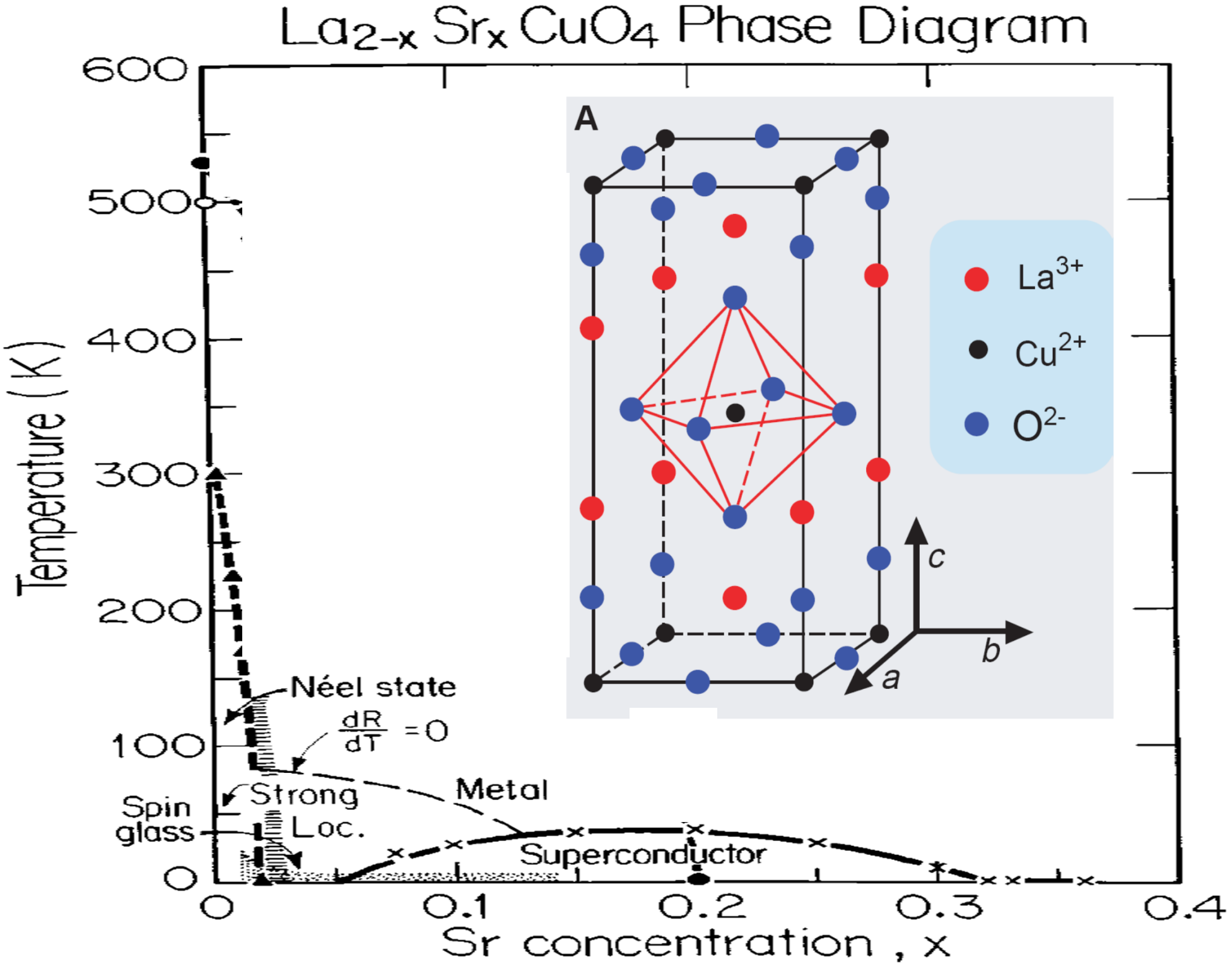
XIII Конференция молодых ученых "Буревестник"-2014

Motivation:

- Медноокисдные сверхпроводники - допированные двумерные Гейзенберговские антиферромагнетики со спином S=1/2.
- Это происходит со спиновыми волнами при введении небольшого количества носителей заряда ?
  Элементарные возбуждения – парамагноны ?
- Каково время жизни парамагнонов при введении небольшого количества носителей заряда ?
- Численно точные методы применимы только к относительно 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?

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
- Заключение


La2-x Srx CuO4 Phase Diagram
600
500
400
300
200
100
0
Temperature (K)
A
La3+
Cu2+
O2-
c
b
a
Néel state
dR/dT =0
Metal
Strong
Loc.
Spin
glass
Superconductor
0
0.1
0.2
0.3
0.4
Sr concentration , x

Гамильтониан $t - J$ модели:

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

$\mathbf{S}_i$ – 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_{eff} .

Операторы спина и плотности:

$$S_i^{\sigma} = X_i^{\sigma\tilde{\sigma}}, \quad S_i^z = \tfrac{1}{2} \sum_{\sigma} \sigma X_i^{\sigma\sigma}, \quad n_i = \sum_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma},$$

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

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

Эволюция динамической переменной, $S^z_{\mathbf{k}}(\tau)$ например,

$$\dot{S}^z_{\mathbf{k}}(\tau) \equiv \frac{dS^z_{\mathbf{k}}(\tau)}{d\tau} = iLS^z_{\mathbf{k}}(\tau)$$

.

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

$$\wp_0 S^z_{\mathbf{k}}(\tau) = R(\mathbf{k},\tau)\cdot S^z_{\mathbf{k}}$$

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

где $\wp_0$ – линейный эрмитовый оператор проектирования,

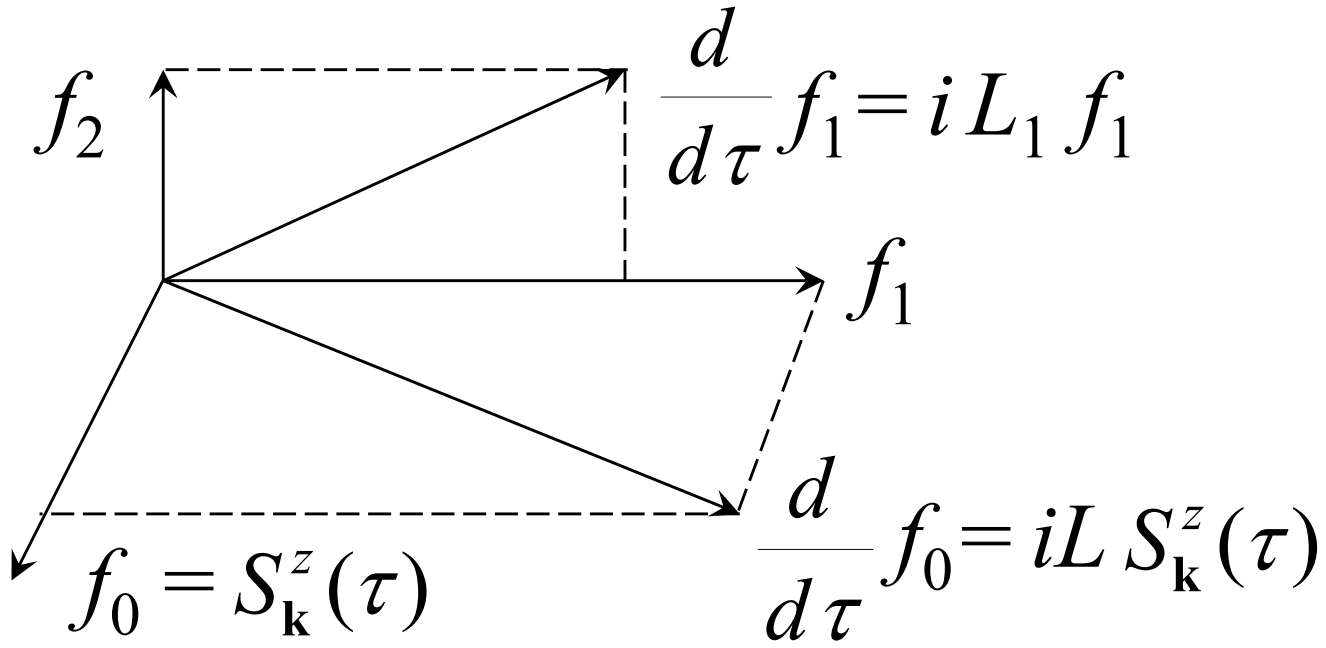
$R(\mathbf{k},\tau) \equiv (S^z_{\mathbf{k}}(\tau),(S^z_{-\mathbf{k}})^*)\cdot(S^z_{\mathbf{k}},(S^z_{-\mathbf{k}})^*)^{-1}$ - релаксационная функция,

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

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

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

Удобно ввести набор величин, $f_0(\tau)$, $f_1(\tau),\ldots,f_j(\tau),\ldots$, определяющий флуктуации $S^z_{\mathbf{k}}(\tau)$ следующим образом: $f_j(\tau)\equiv exp(iL_j\tau)f_j \equiv exp(iL_j\tau)iL_j\ f_{j-1}$, $f_0(\tau) \equiv S^z_{\mathbf{k}}(\tau)$, $L_0=L$, $L_j \equiv(1-\wp_{j-1})L_{j-1}$, ($j\geq1$). Использование б*о*льшего числа $\{f_j\}$ дает более точное описание флуктуаций. Подействовав оператором эволюции $exp(iL_n\tau)$ на последнюю величину из этого набора, f_n , получаем $f_n(\tau)$, называемую «случайной силой n-го порядка», действующей на переменную $S^z_{\mathbf{k}}(\tau)$, и отвечающей за ее флуктуации.



Схематичное соотношение между f_0, f_1 and f_2.

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

A) при пренебрежении затуханием:

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

B) 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:

$$\frac{\xi}{a} = \frac{1}{2\sqrt{g_+ - 1}},$$

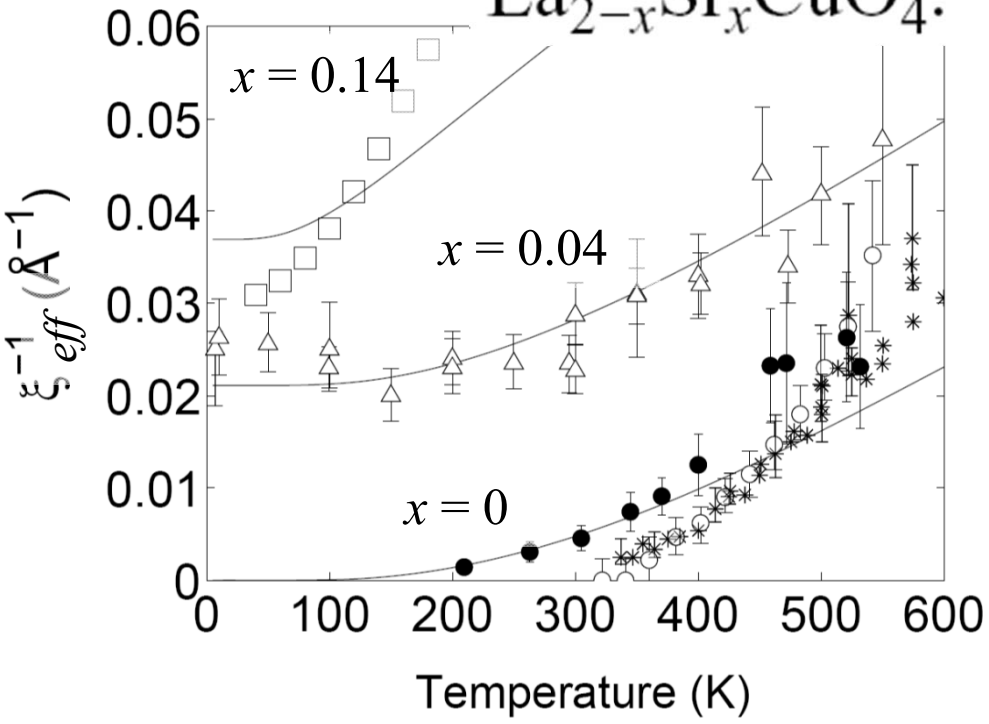
Zavidonov, IAL and Brinkmann, Phys. Rev . B **61**, 15462 (2000):

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

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

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

$La_{2-x}Sr_xCuO_4$:



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

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

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:

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

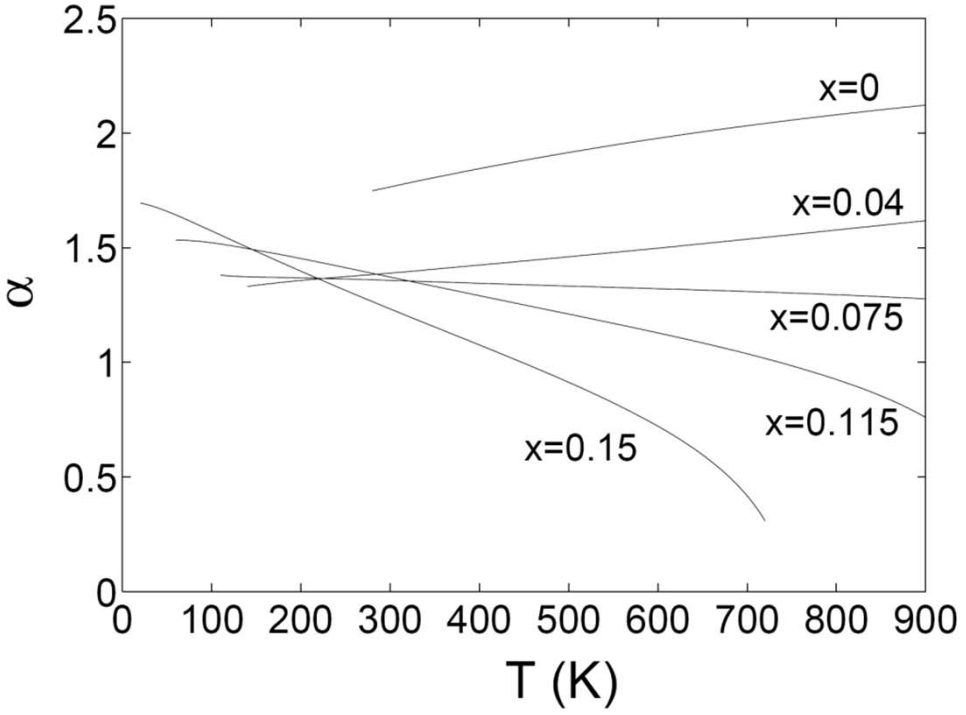
Самосогласованный расчет спин-спиновых корреляционных функций

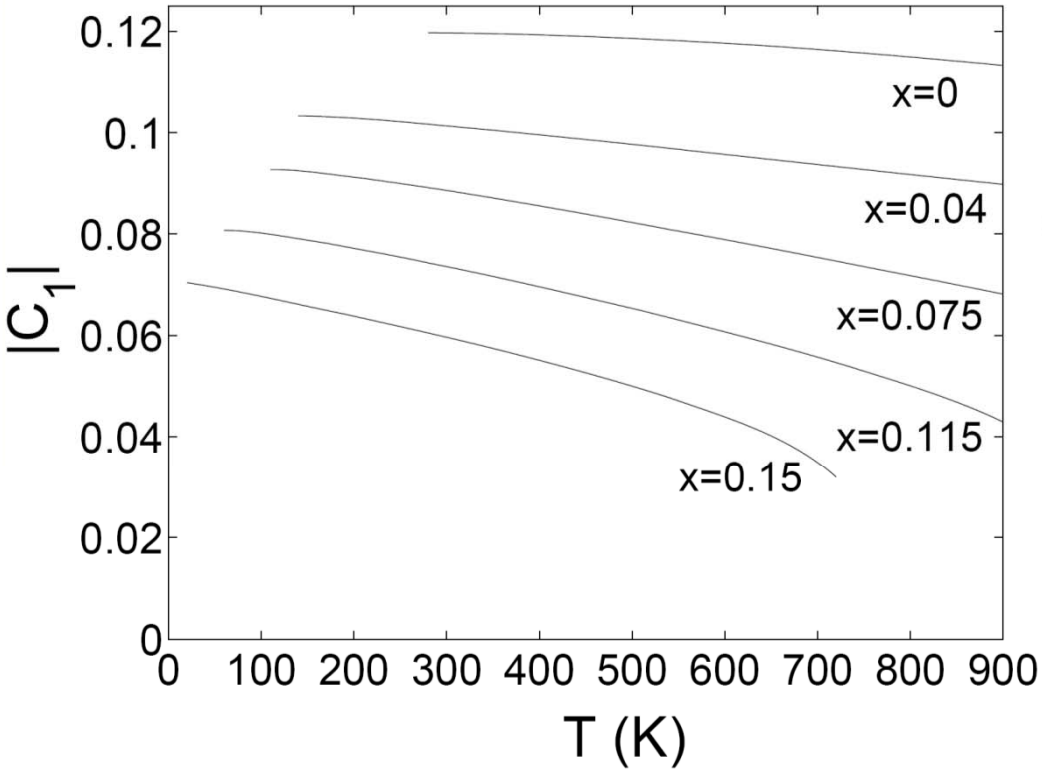
$$c_0 = \frac{1-\delta}{2} = \frac{1}{\pi}\sum_{\mathbf{k}}\int_0^\infty d\omega \coth\left(\frac{\omega}{2k_BT}\right)\chi_F''(\mathbf{k},\omega)$$

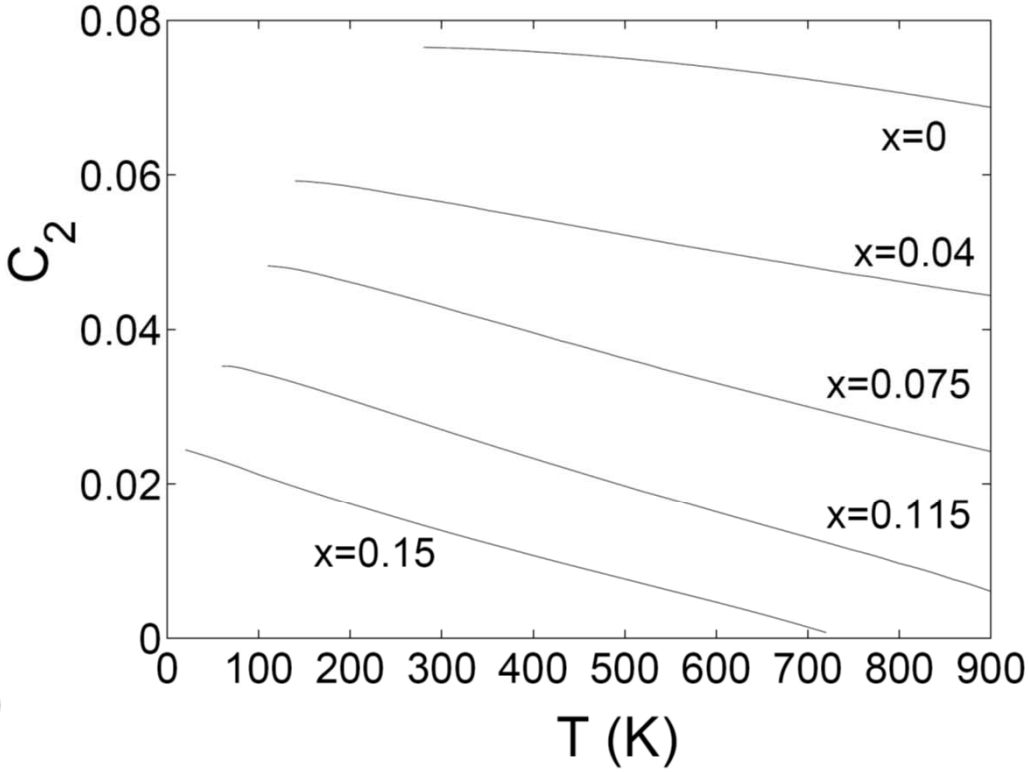
$$c_1 = \frac{1}{2\pi}\sum_{\mathbf{k}}\int_0^\infty d\omega \coth\left(\frac{\omega}{2k_BT}\right)\gamma_k\chi_F''(\mathbf{k},\omega)$$

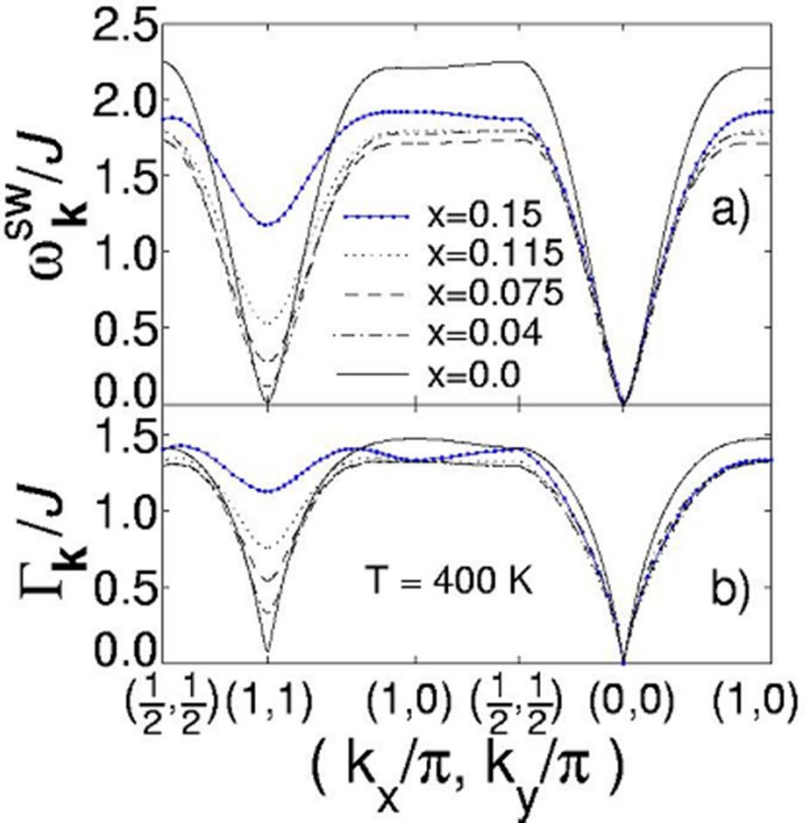
$$c_2 = \frac{1}{6\pi}\sum_{\mathbf{k}}\int_0^\infty d\omega \coth\left(\frac{\omega}{2k_BT}\right)(4\gamma_k^2-1)\chi_F''(\mathbf{k},\omega)$$

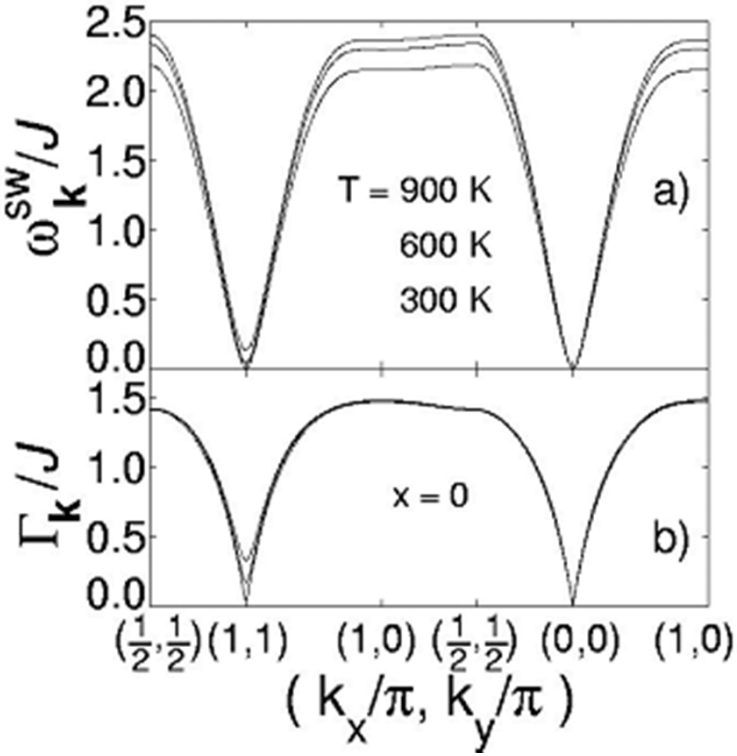
$$\chi_F''(\mathbf{k},\omega) = \omega\chi(\mathbf{k})F(\mathbf{k},\omega).$$









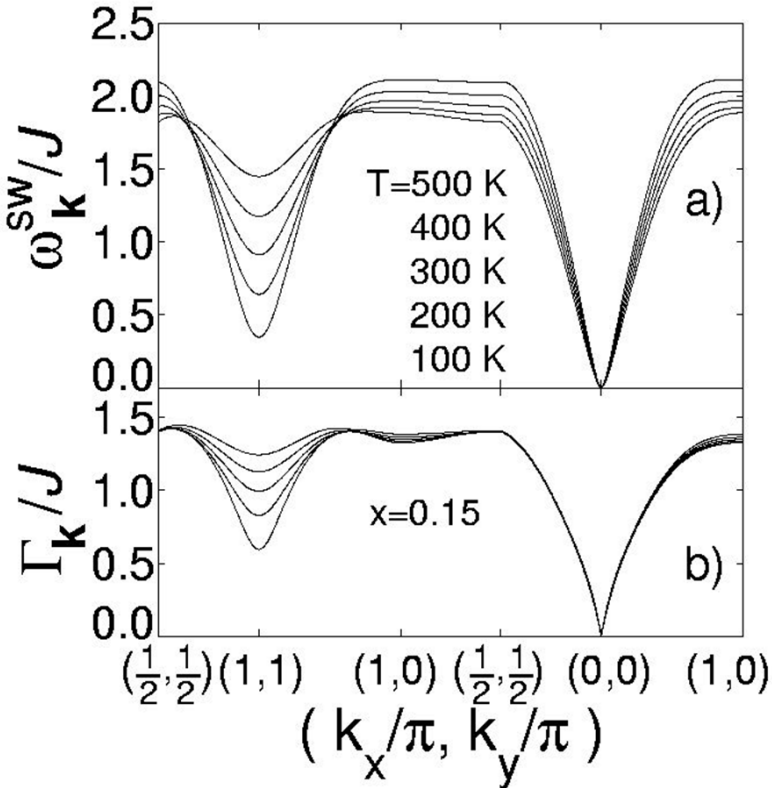


Дисперсия:

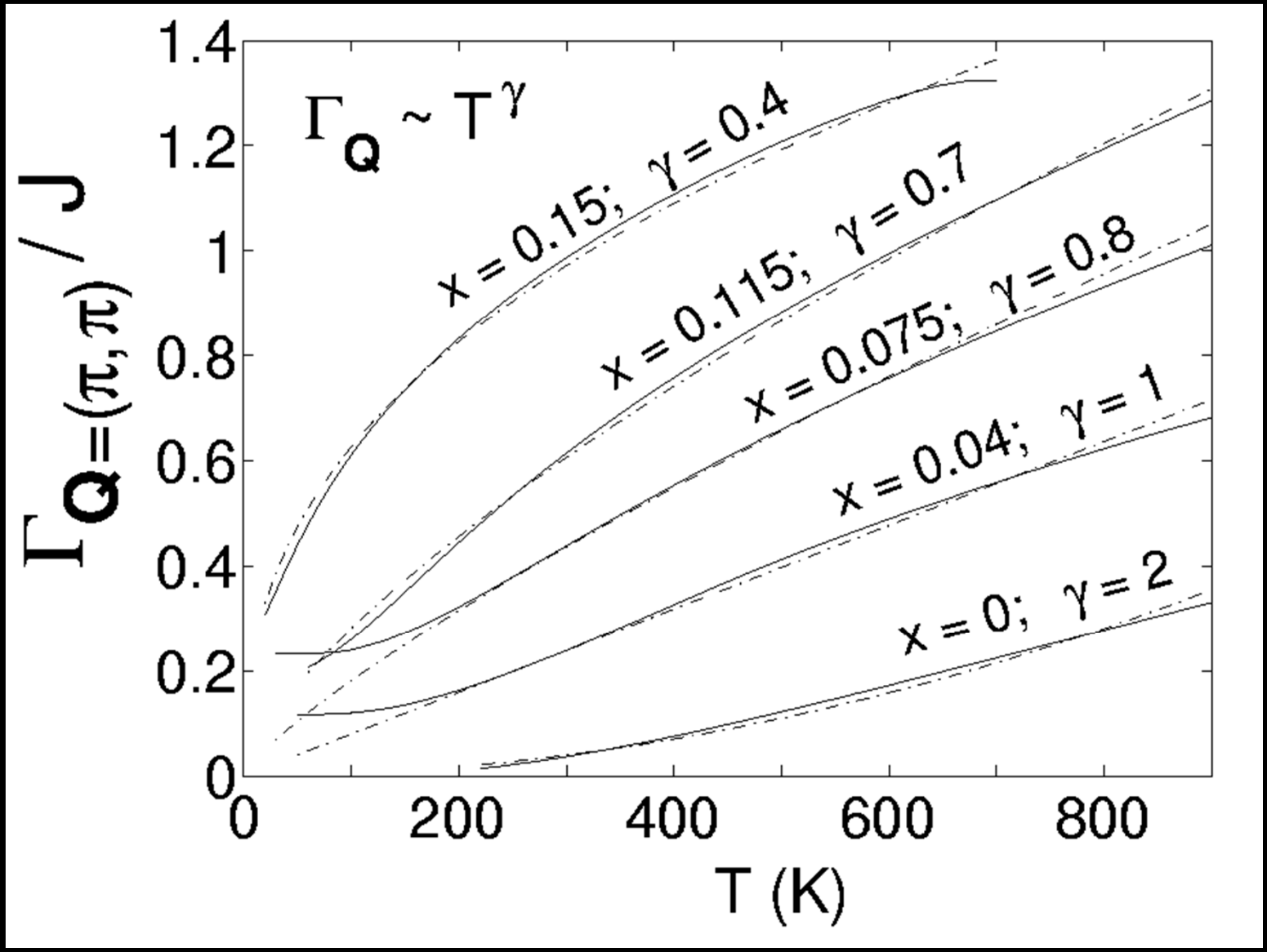
$$\omega_{\mathbf{k}}^{\mathrm{sw}} = 2\int_0^{\infty} d\omega\ \omega\ F(\mathbf{k},\omega),$$

Затухание:

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



Затухание парамагнонов

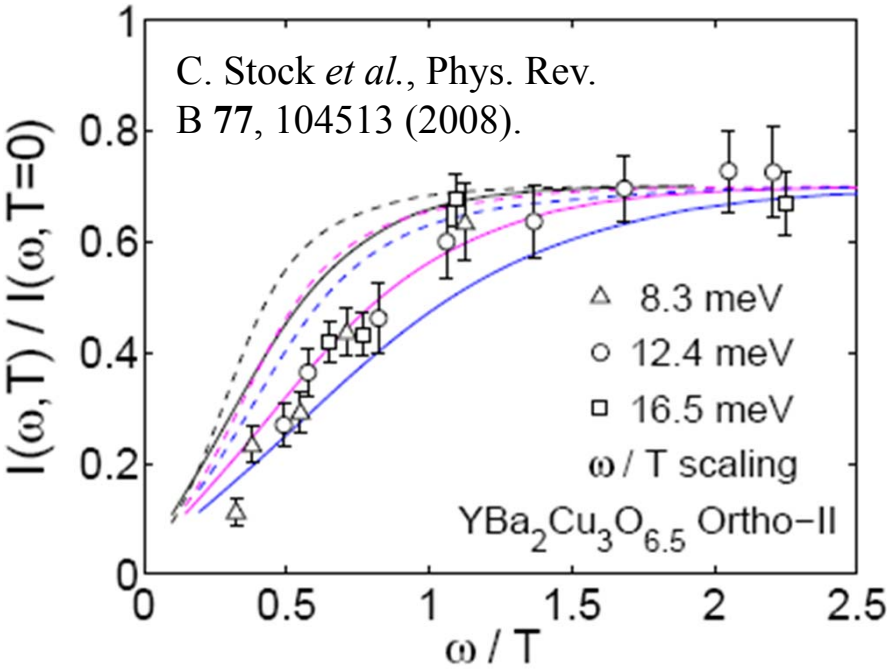


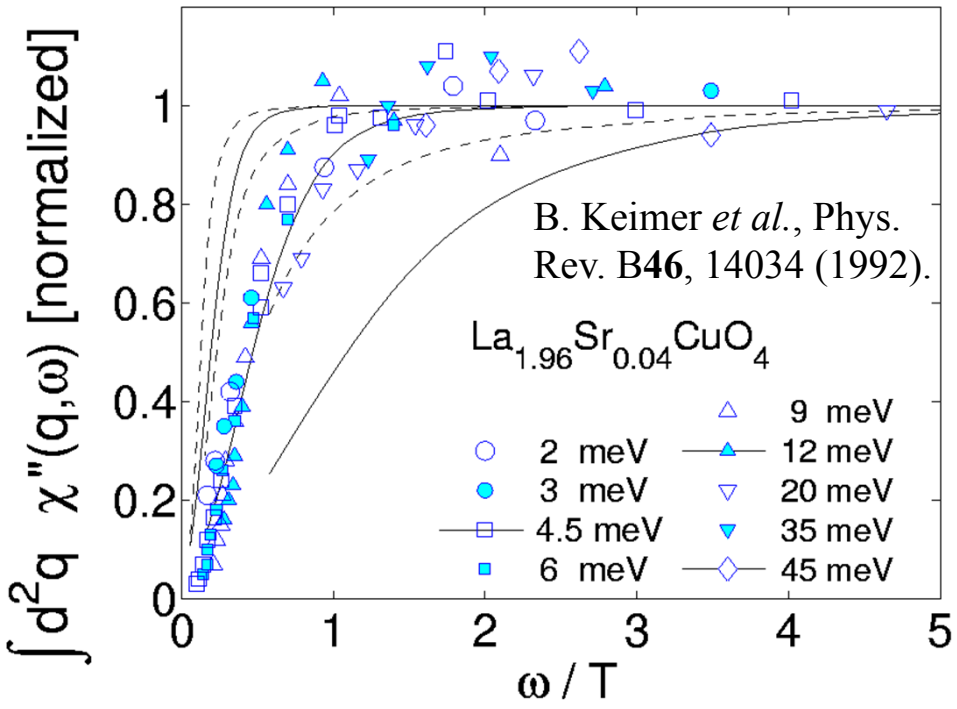
Неупругое рассеяние нейтронов

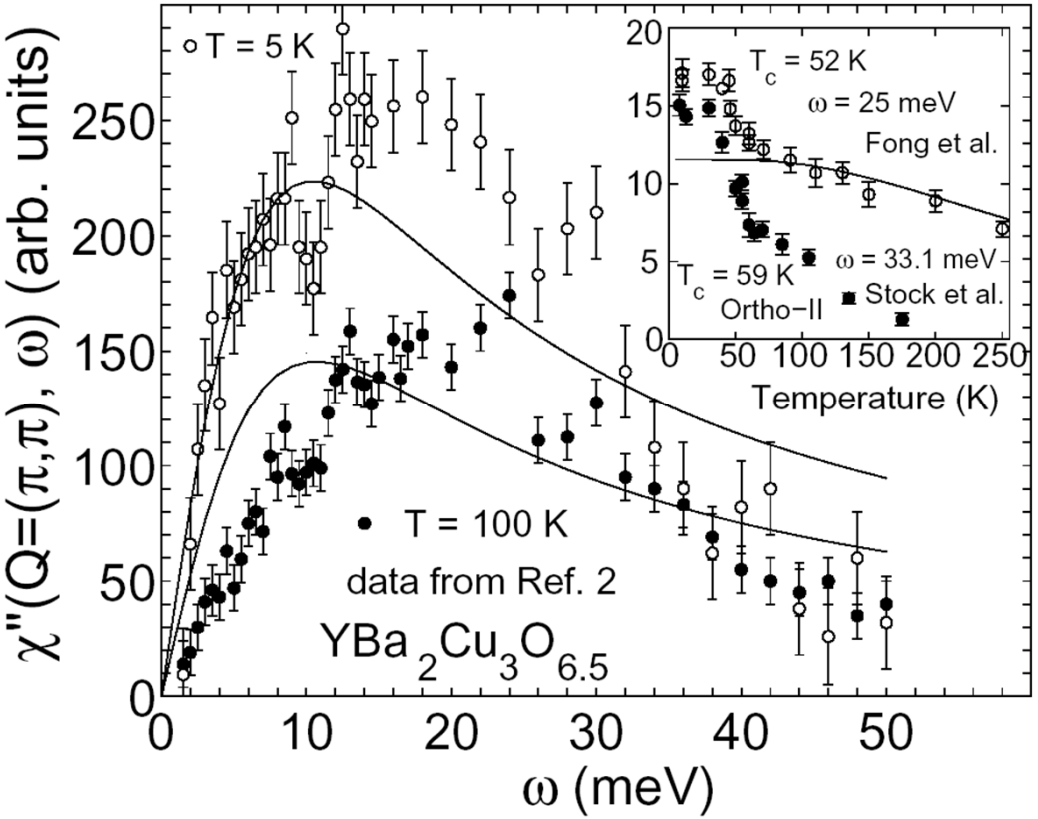
- - - - - (A)

——— (B)

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



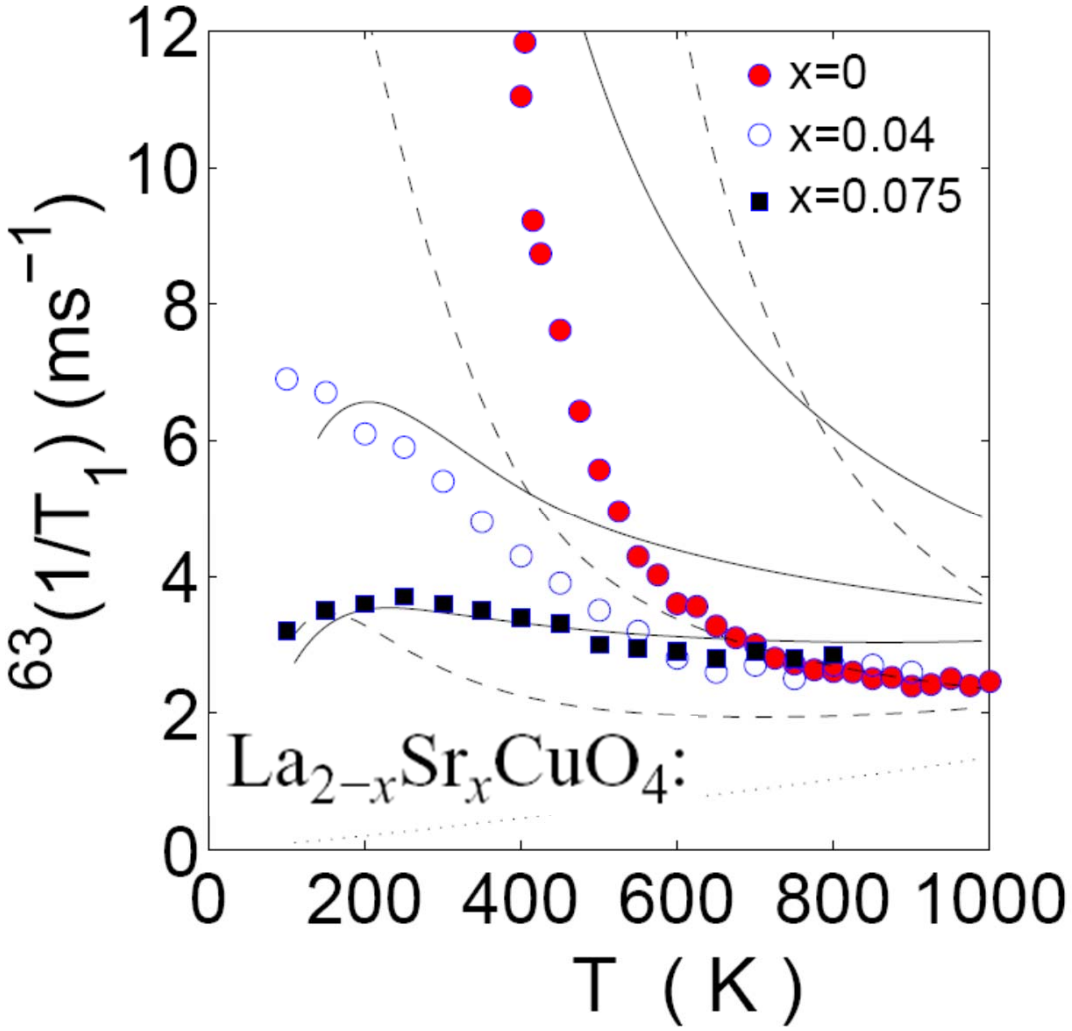


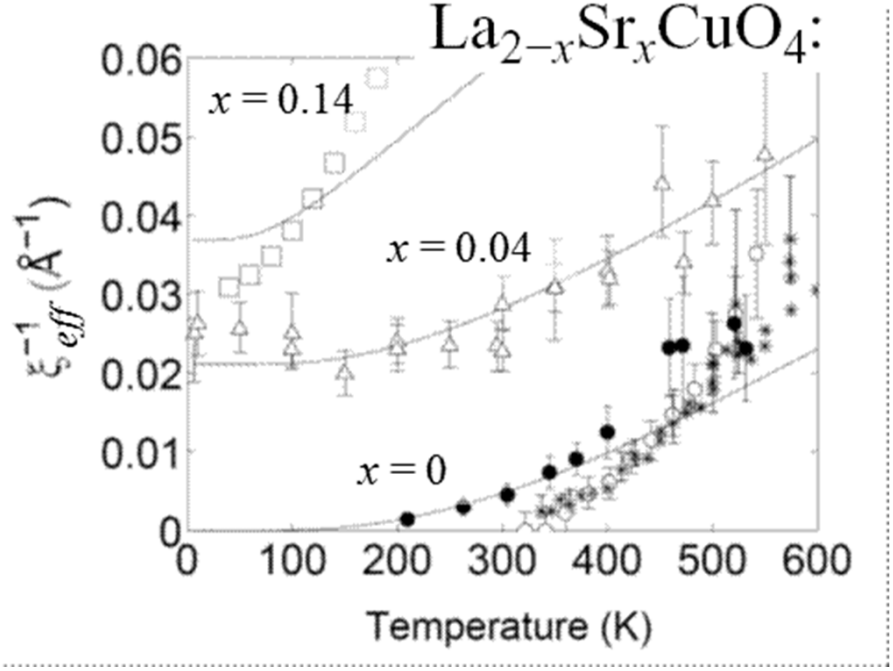


2W= $^{63}(1/T_1) = \frac{2k_BT}{\omega_0}\sum_{\mathbf{k}} {}^{63}F(\mathbf{k})^2\chi''(\mathbf{k},\omega_0)$, - скорость спин-решеточной релаксации на ядрах меди

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

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



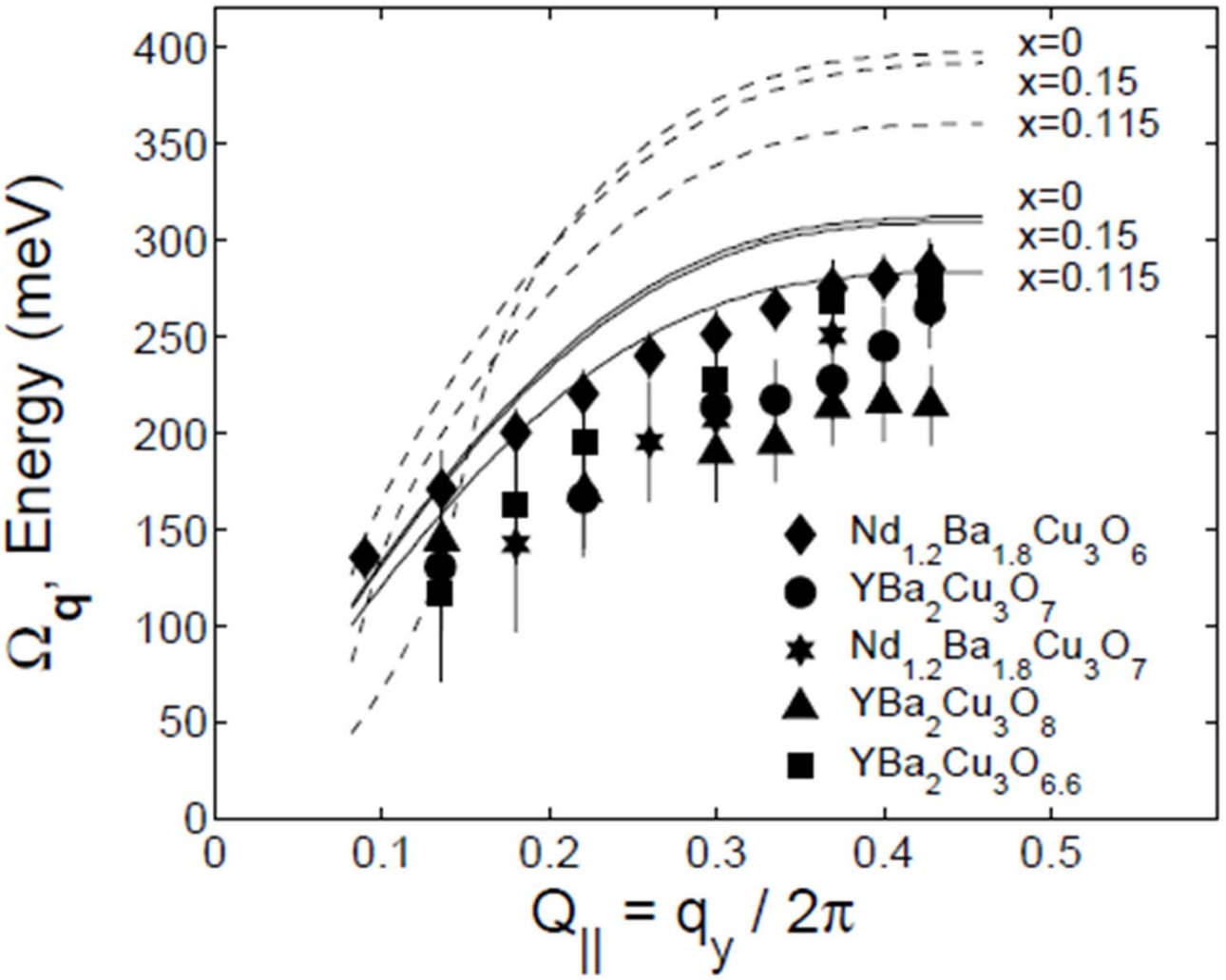


$$\xi^{-1}_{eff} = \xi^{-1}_{0} + \xi^{-1}$$

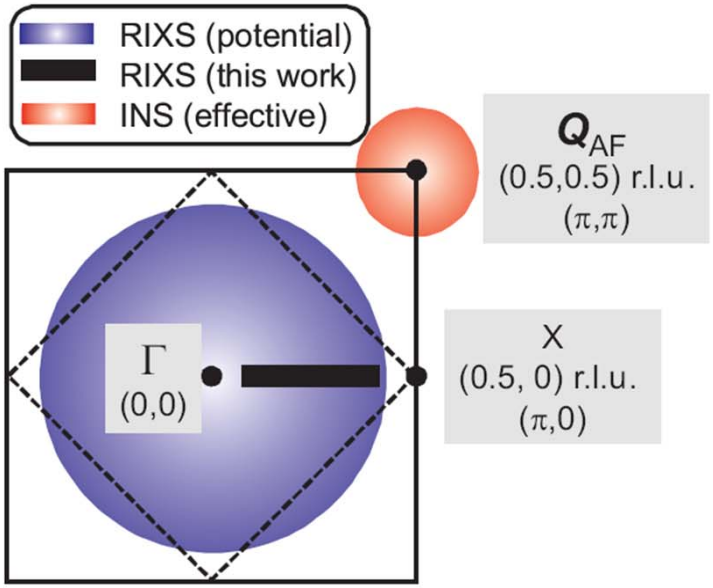
Данные ЯКР: Imai *et al.*, PRL **70**, 1002 (1993)

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) …"

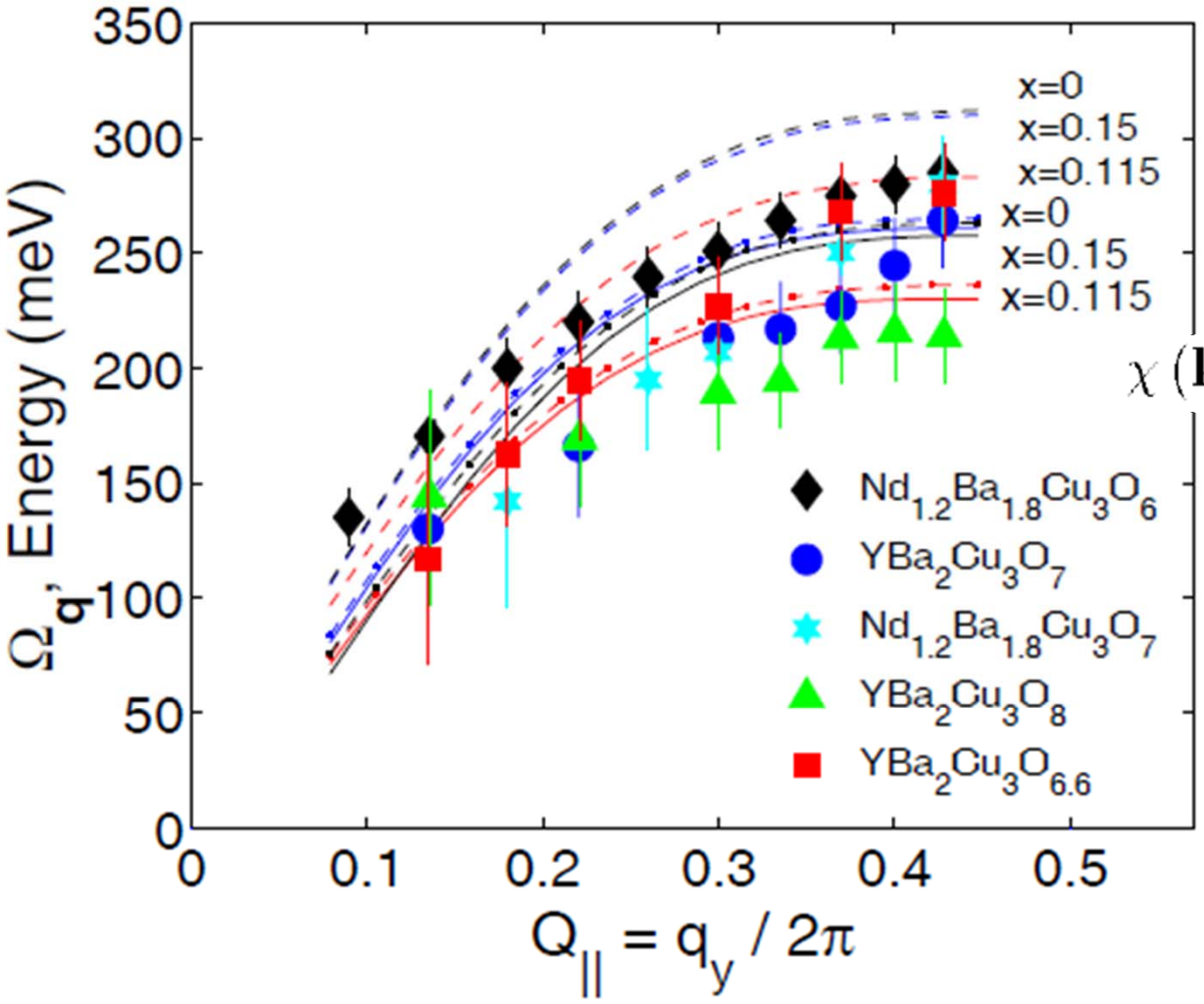


Dashed lines: $$\chi''_{L1}(\mathbf{k},\omega) = \frac{\chi(\mathbf{k})\,\omega\,\Gamma_{\mathbf{k}}}{(\omega-\omega^{sw}_{\mathbf{k}})^2+\Gamma^2_{\mathbf{k}}} + \frac{\chi(\mathbf{k})\,\omega\,\Gamma_{\mathbf{k}}}{(\omega+\omega^{sw}_{\mathbf{k}})^2+\Gamma^2_{\mathbf{k}}},$$

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

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

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



Solid lines: $\omega^{sw}_{\mathbf{k}}$

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

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

Magnon dispersion

RIXS - resonant inelastic X-ray scattering

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

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.

Задача нахождения коэффициентов электропроводности, Холла и термо-ЭДС решается с применением формализма матрицы плотности. Наиболее общий путь построения оператора заключается в использовании метода неравновесного статистического оператора. Мы используем многомоментный метод, ранее использовавшийся для описания низкотемпературного поведения электросопротивления и коэффициента Холла в поливалентных металлах
[А.Ф. Барабанов, Л.А. Максимов, ФММ 29, 471 (1970);
J. Black, D. L. Mills, Phys. Rev. B 9, 1458 (1974)]

A priori угадать наилучший вид функции распределения нелегко. Следует учесть и анизотропию скорости носителей заряда в различных точках поверхности Ферми

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

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

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

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

$$\hat{I} = \frac{1}{2} I_1 \sum_{\mathbf{R},\mathbf{g}} S^{\alpha}_{\mathbf{R}+\mathbf{g}} S^{\alpha}_{\mathbf{R}} + \frac{1}{2} I_2 \sum_{\mathbf{R},\mathbf{d}} S^{\alpha}_{\mathbf{R}+\mathbf{d}} S^{\alpha}_{\mathbf{R}}, \qquad \hat{\sigma}^{\alpha} \text{ — матрицы Паули,}$$

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

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

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

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

- 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: $R_H = \frac{1}{nec}$

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

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

Мнимая часть динамической спиновой восприимчивости:

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

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

$\gamma = 0.2$ – затухание 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*

T. Valla, *et al. Science* **314**, 1914 (2006);
LBCO (x = 0.125) (solid line)
and LSCO (x = 0.07) (dashed line).

$T = 0.1\,J$; $\mu = 1.1$ eV; $p = 0.2$;

Матрица рассеяния:

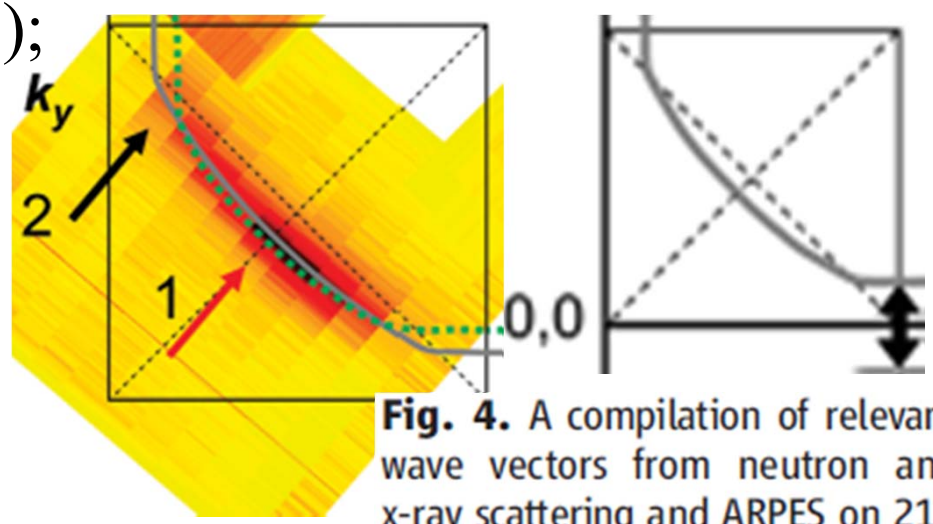
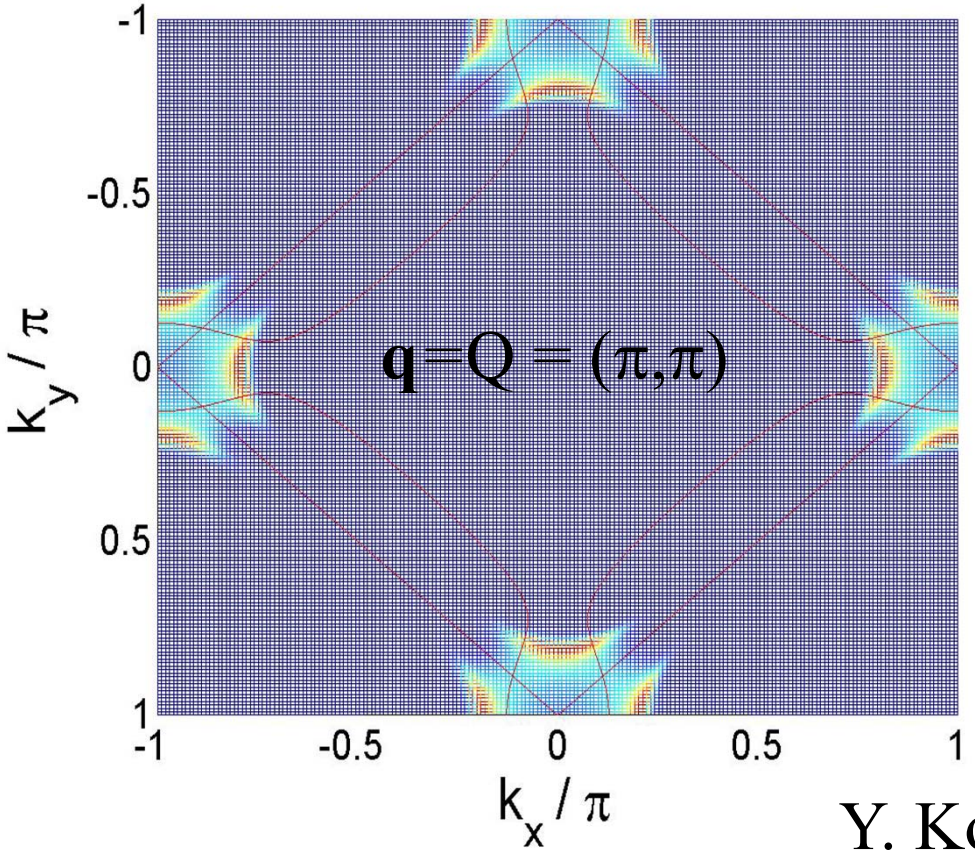
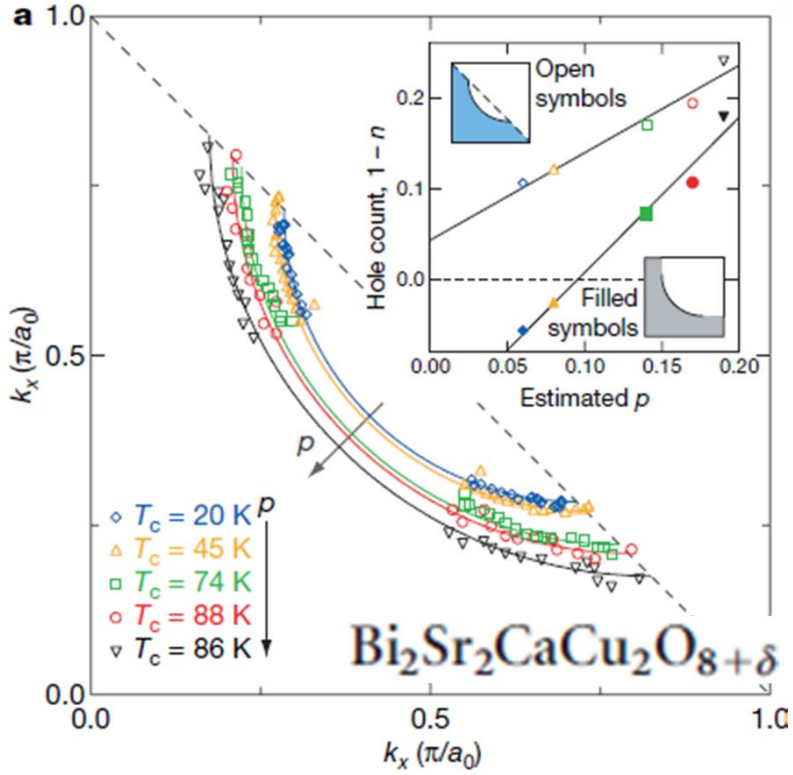


Fig. 4. A compilation of relevant wave vectors from neutron and x-ray scattering and ARPES on 214 materials. (**A**) A sketch of relevant vectors in the *k*-space. (**B**) Doping

$$C_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}} = J^2 f^0_{\mathbf{k}}\left(1 - f^0_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}\right)\int d\omega\; n_B(\omega)\,\mathrm{Im}\,\chi(\mathbf{q},\omega)\,\delta\left(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \omega\right)$$





Y. Kohsaka *et al.*, Nature **454**, 1072 (2008)

Термо-ЭДС $Q = E/\nabla T$

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

$$\Phi^x_{\mathbf{k}} = \sum_l a_l A^x_l(\mathbf{k})$$

$$J = e\sum_{\mathbf{k}} v^x_{\mathbf{k}} \Phi^x_{\mathbf{k}} \left(\frac{-\partial f^0_{\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}\right) = \sum_l a_l \left\{ e\sum_{\mathbf{k}} v^x_{\mathbf{k}} A^x_l(\mathbf{k}) \left(\frac{-\partial f^0_{\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}\right)\right\} = \sum_l a_l J_l = 0$$

$$U = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} v^x_{\mathbf{k}} \Phi^x_{\mathbf{k}} \left(\frac{-\partial f^0_{\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}\right) = \sum_l a_l \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} v^x_{\mathbf{k}} A^x_l(\mathbf{k}) \left(\frac{-\partial f^0_{\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}\right)\right\}$$

$$U_l = \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} v^x_{\mathbf{k}} A^x_l(\mathbf{k}) \left(\frac{-\partial f^0_{\mathbf{k}}}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}\right)\right\}$$

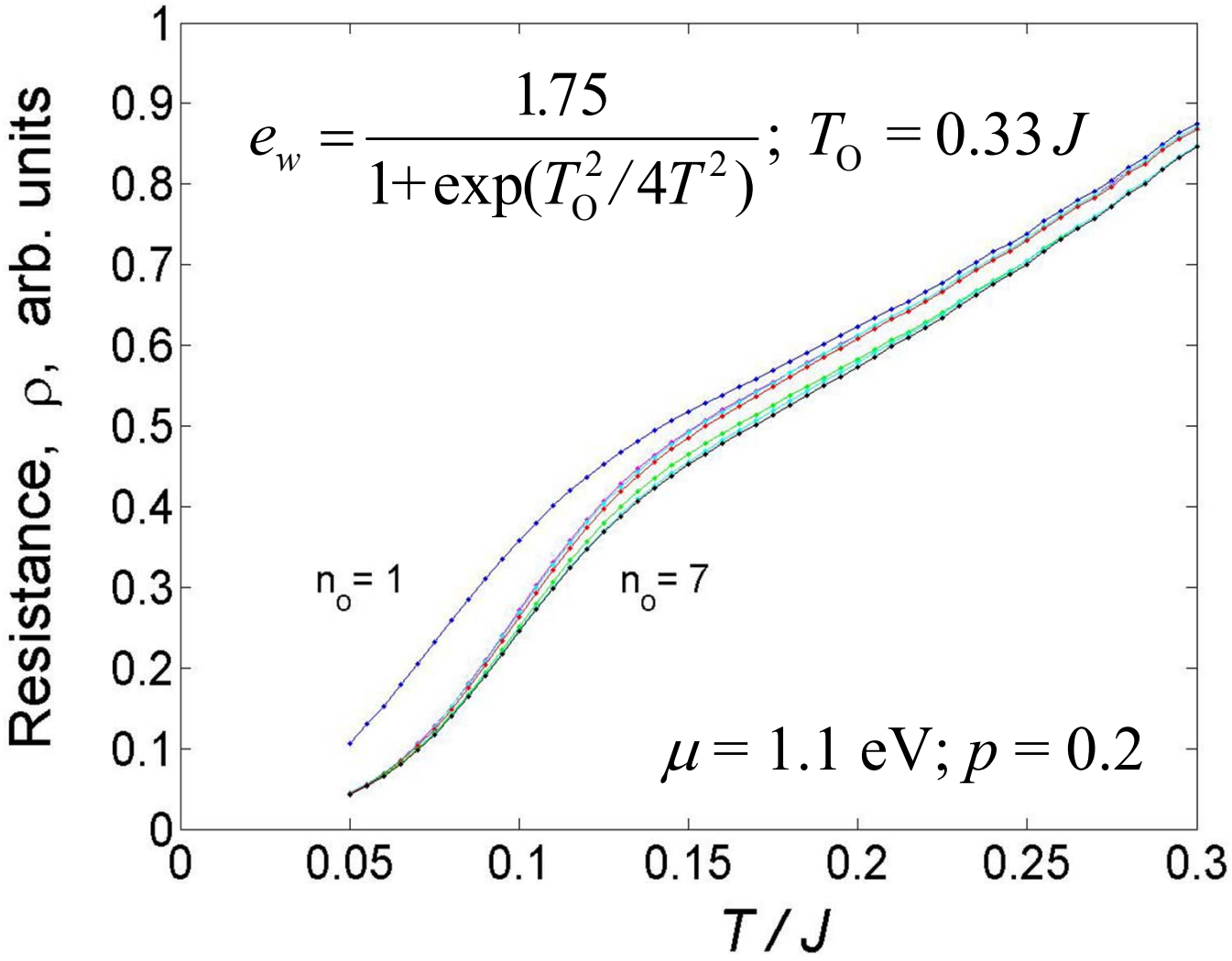
$$\boxed{E J_l - \nabla T T^{-1} U_l = \sum_j P_{lj} a_j;}$$

Поскольку есть поток тепла

$$\{A^x_l(\mathbf{k})\} = \{F_l(\mathbf{k}), F_l(\mathbf{k})\varepsilon_{\mathbf{k}}\}$$

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

$$\boxed{Q = \frac{\sum_{lq} J_l \, (P^{-1})_{lq} U_q}{\mathrm{T} \sum_{lq} J_l \, (P^{-1})_{lq} J_q}}$$



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

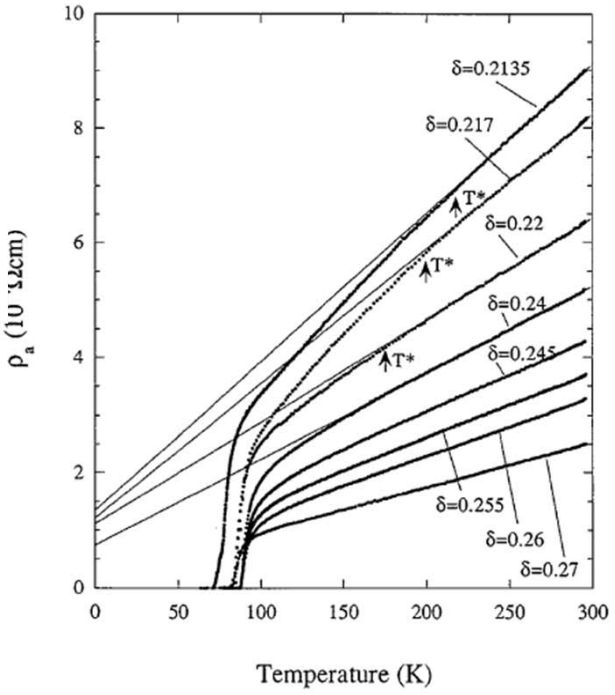
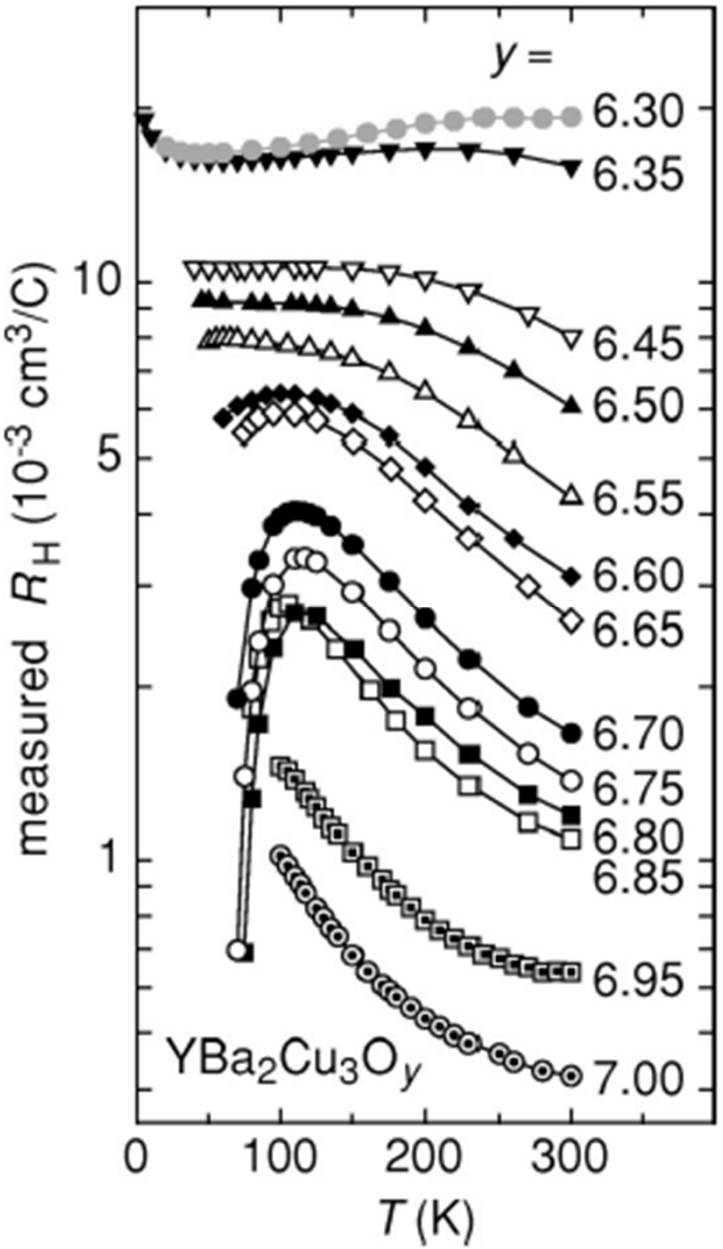


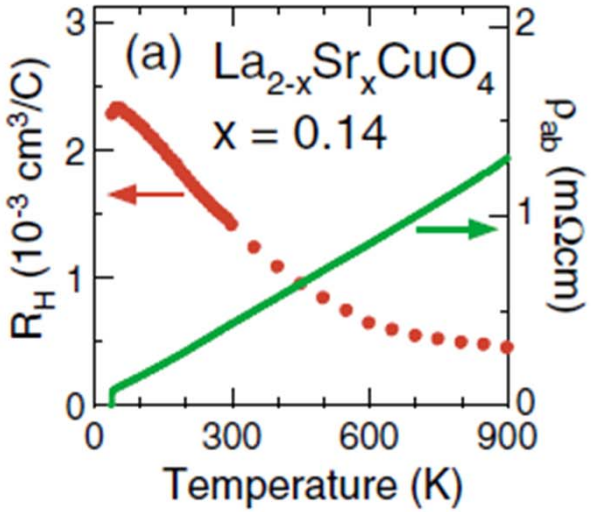
FIG. 2. In-plane resistivities ρ_a of $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ single crystals versus temperature for various oxygen contents (δ).

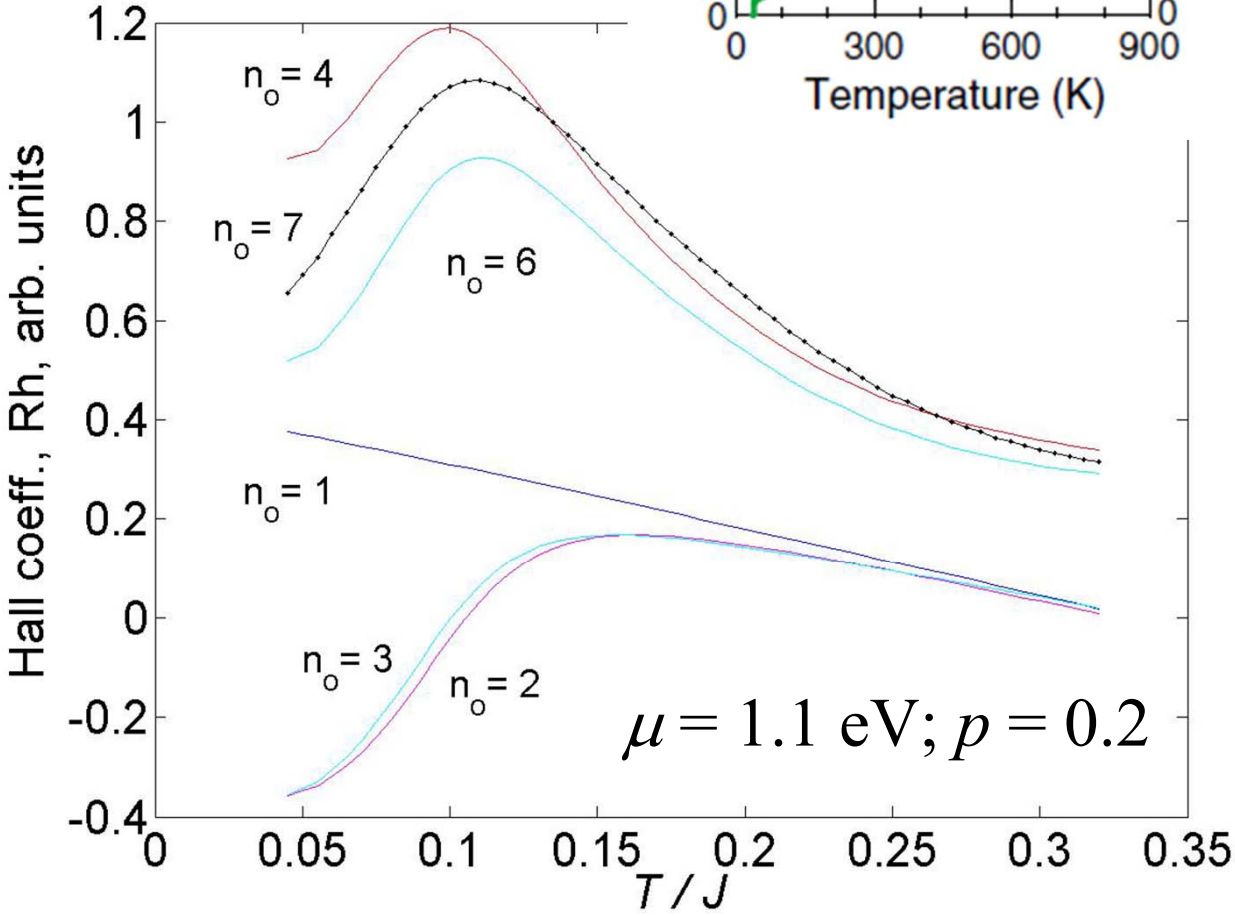
PHYSICAL REVIEW B **69**, 104521 (2004)

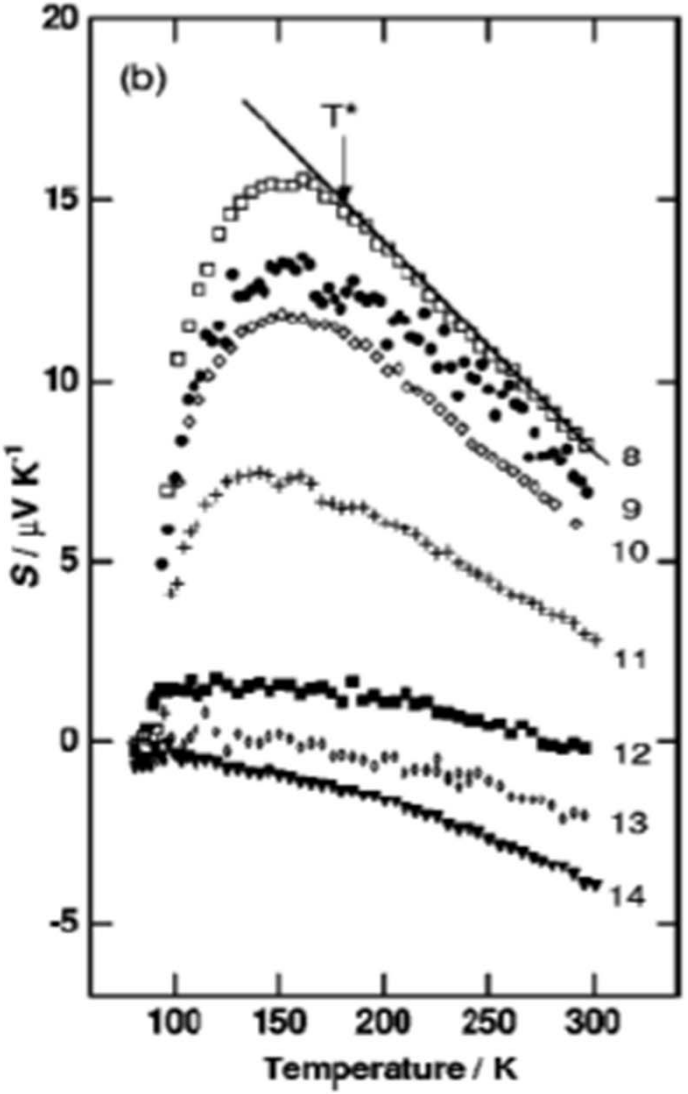
Intrinsic Hall response of the CuO_2 planes in a chain-plane composite system of $YBa_2Cu_3O_y$

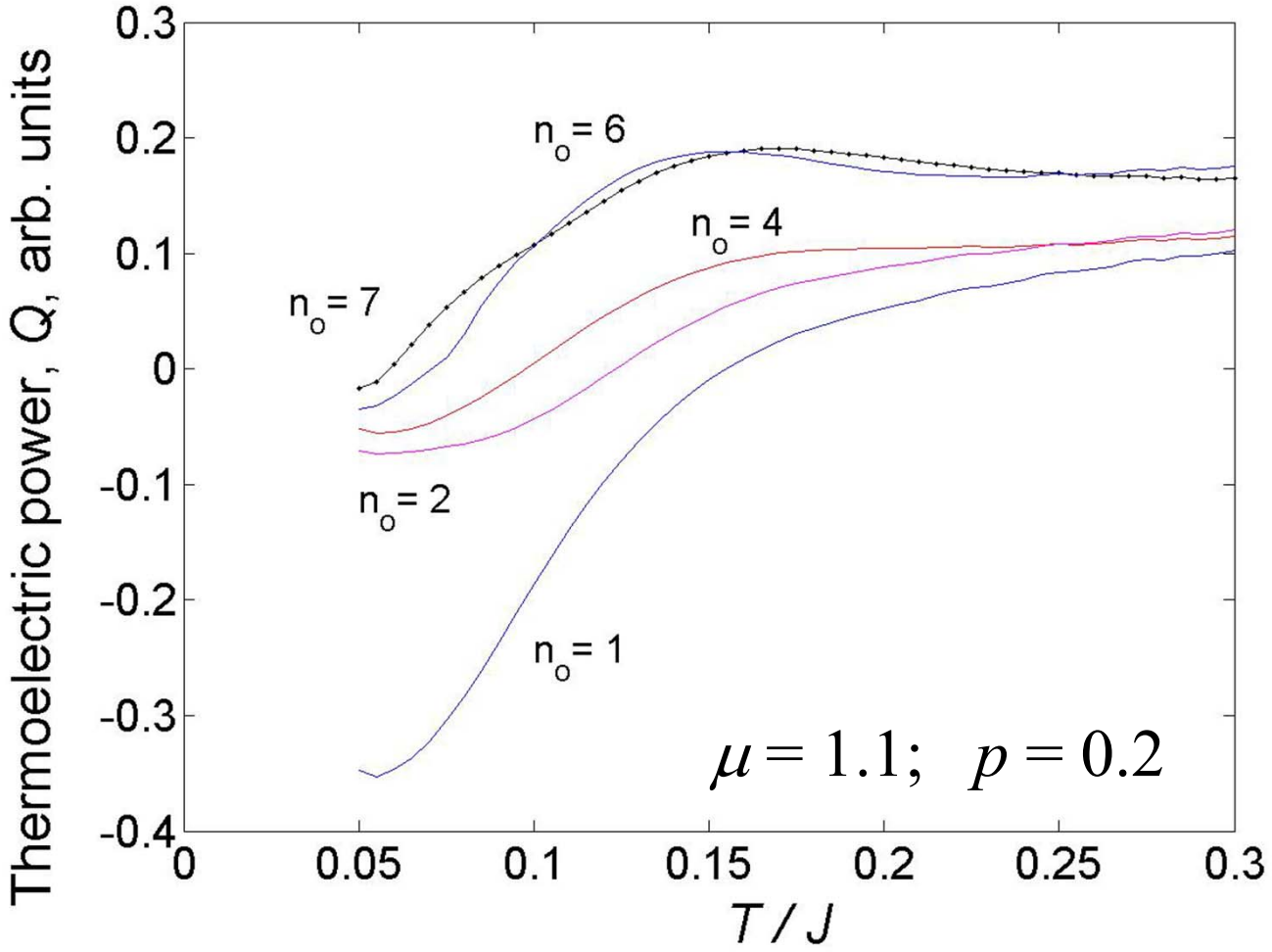
Kouji Segawa and Yoichi Ando





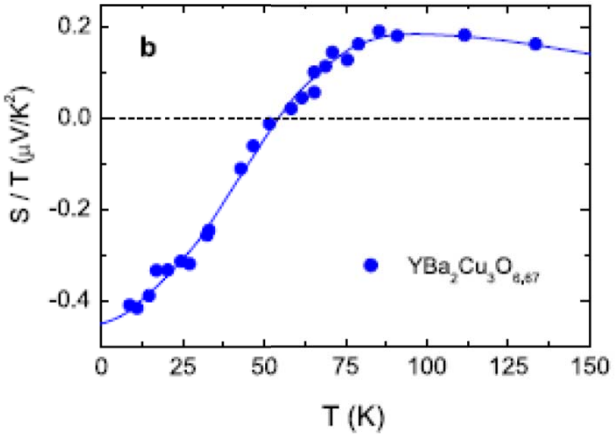


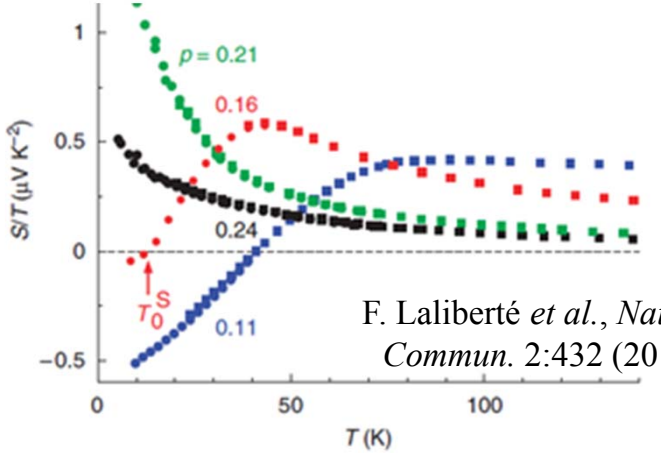




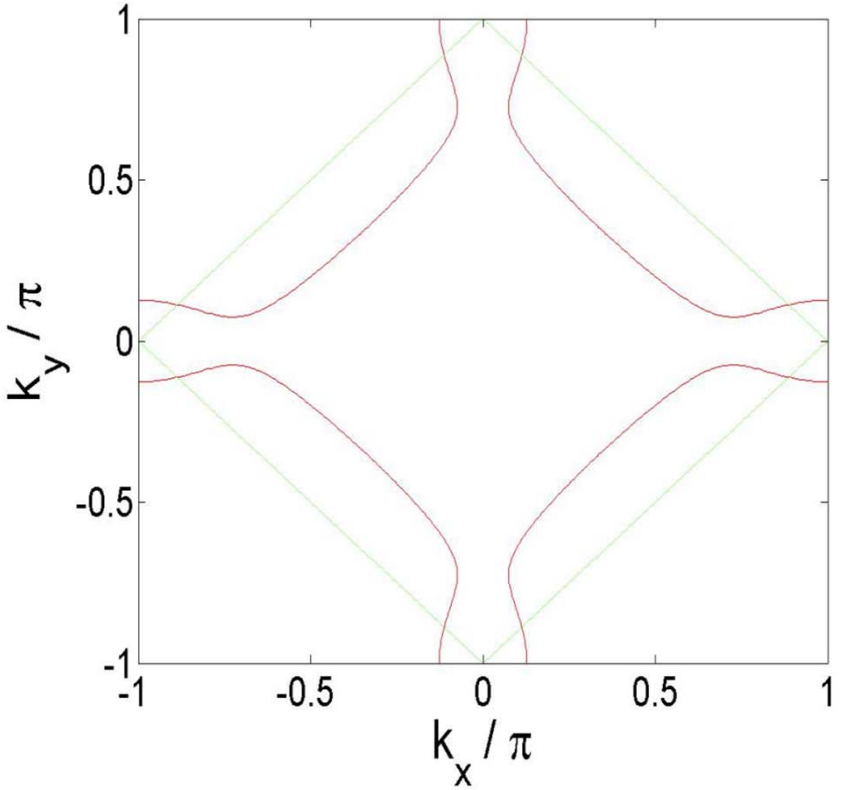
Seebeck coefficient of Eu-LSCO at high doping.

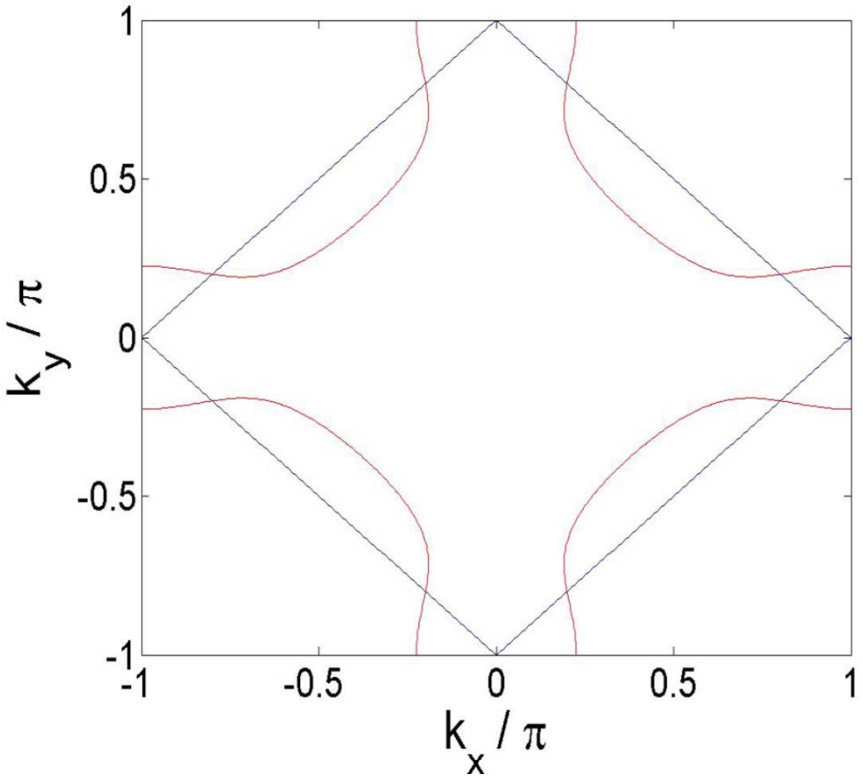
Термо-ЭДС, когда сверхпроводимость подавлена сильным магнитным полем:

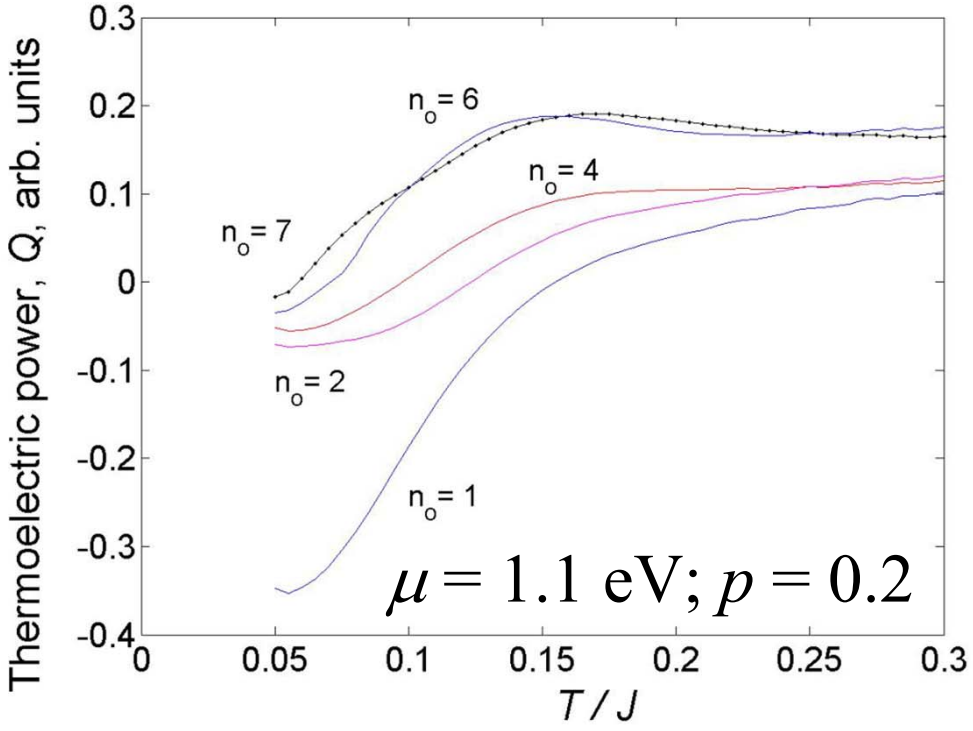


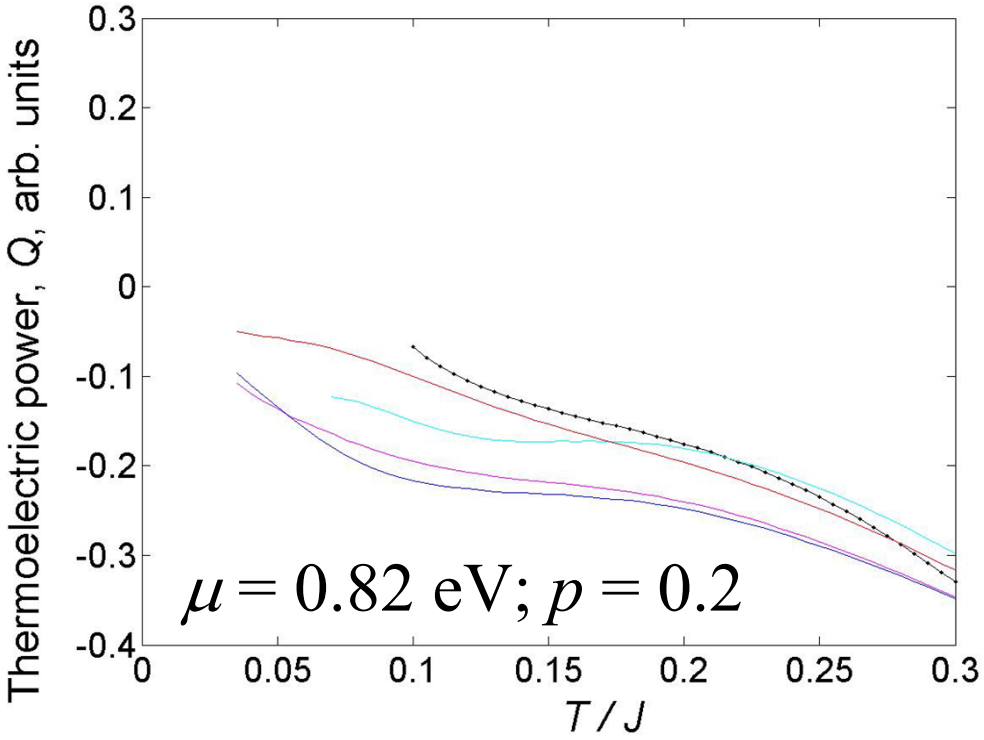


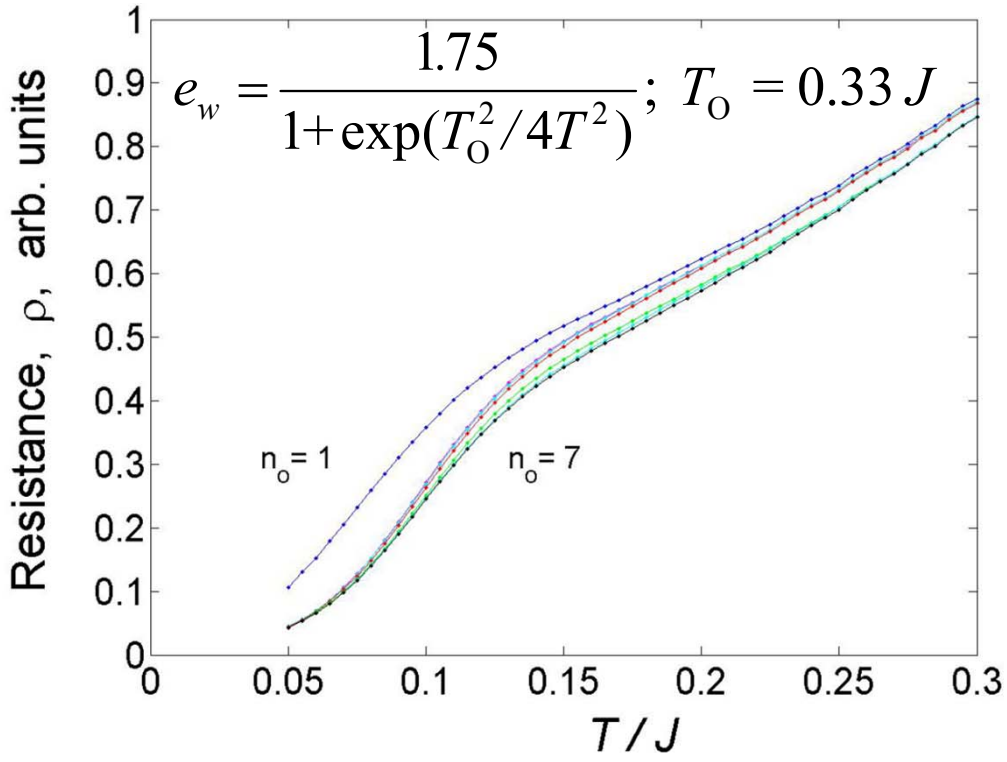
F. Laliberté *et al.*, *Nature Commun.* 2:432 (2011).

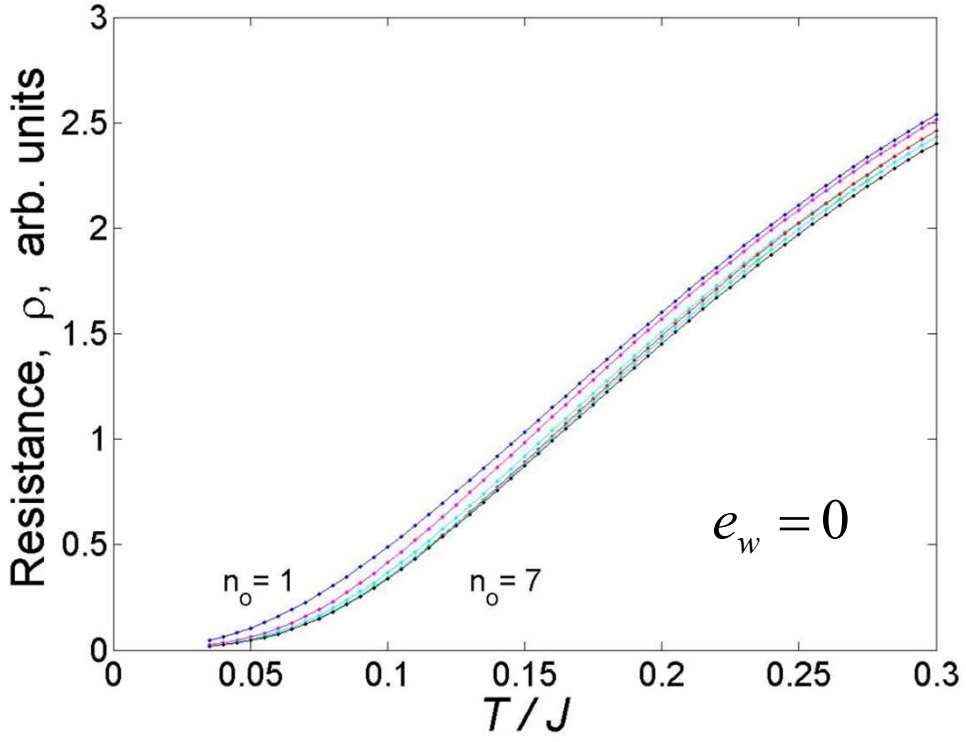

k_y / π
k_x / π
1
0.5
0
-0.5
-1

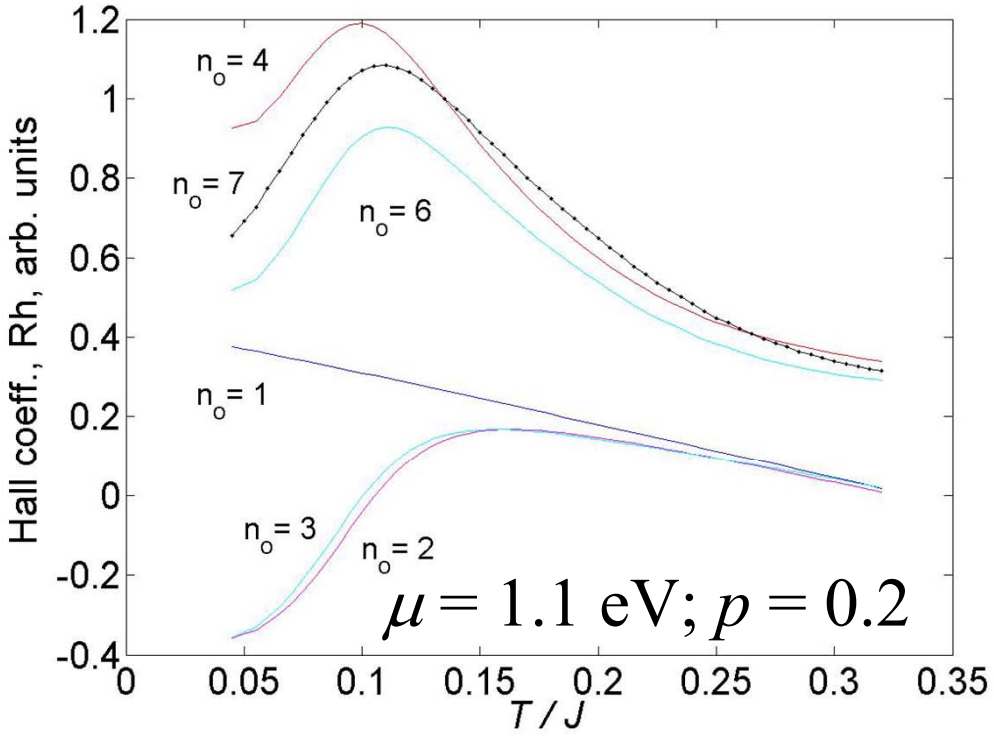

k_y / π
k_x / π
1
0.5
0
-0.5
-1

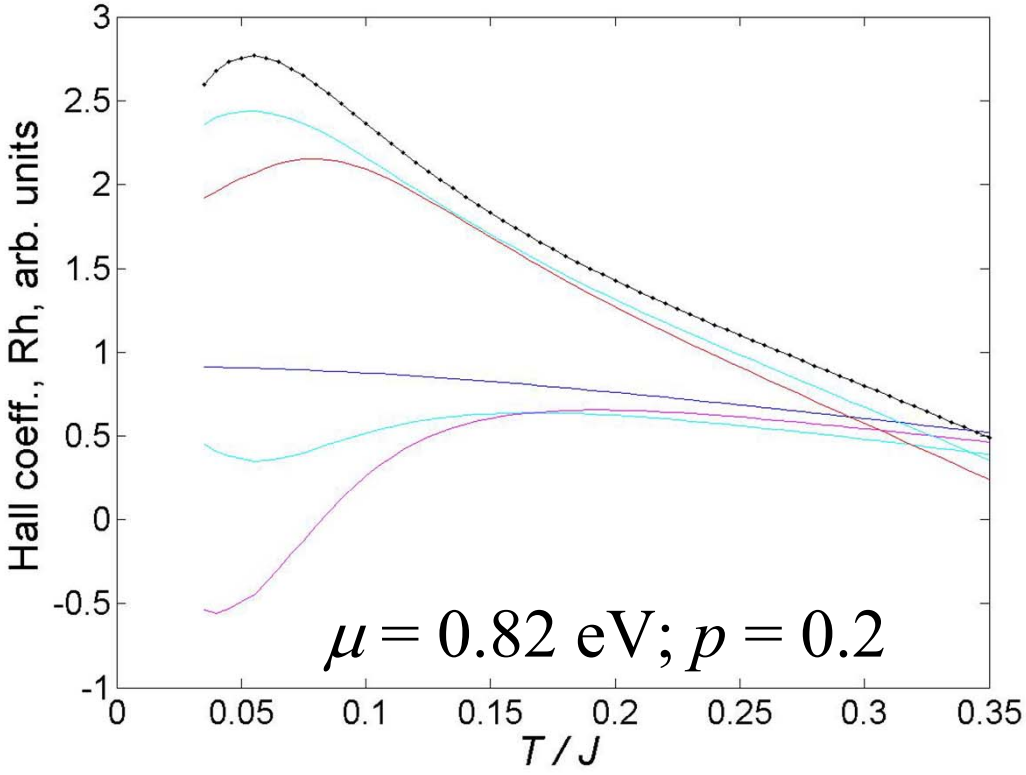

Thermoelectric power, Q, arb. units
T / J
n_o = 6
n_o = 4
n_o = 7
n_o = 2
n_o = 1
μ = 1.1 eV; p = 0.2


Thermoelectric power, Q, arb. units
T / J
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
$n_o = 1$
$n_o = 7$
T / J


Resistance, ρ, arb. units
$e_w = 0$
$n_o = 1$
$n_o = 7$
T / J

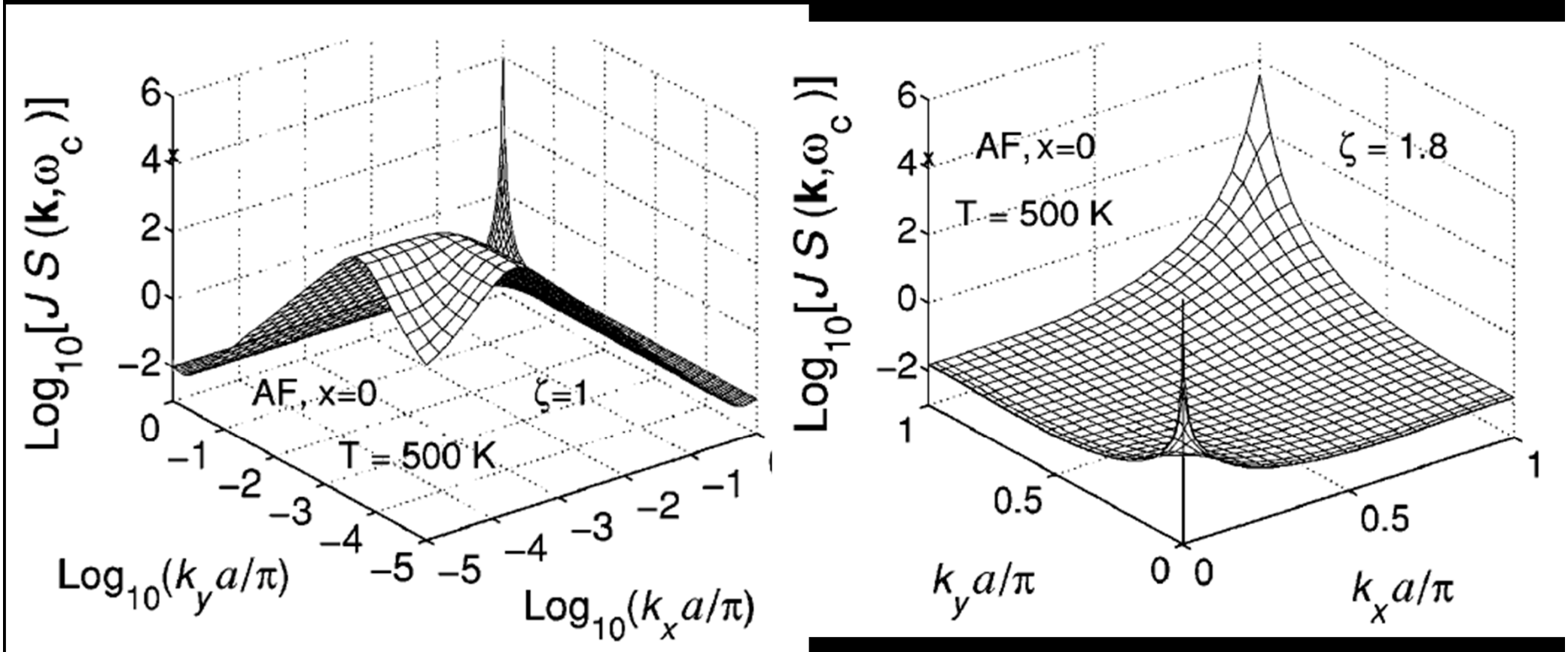

Hall coeff., Rh, arb. units
$n_o = 4$
$n_o = 7$
$n_o = 6$
$n_o = 1$
$n_o = 3$
$n_o = 2$
$\mu = 1.1$ eV; $p = 0.2$
T / J


Hall coeff., Rh, arb. units
$\mu = 0.82$ eV; $p = 0.2$
T / J

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

Спасибо за внимание


Log10[J S (k,ωc)]
6
4
2
0
−2
AF, x=0
ζ=1
T = 500 K
0
−1
−2
−3
−4
−5
Log10(ky a/π)
−5
−4
−3
−2
−1
Log10(kx a/π)
Log10[J S (k,ωc)]
6
4
2
0
−2
AF, x=0
ζ = 1.8
T = 500 K
1
0.5
0
ky a/π
0
0.5
1
kx a/π