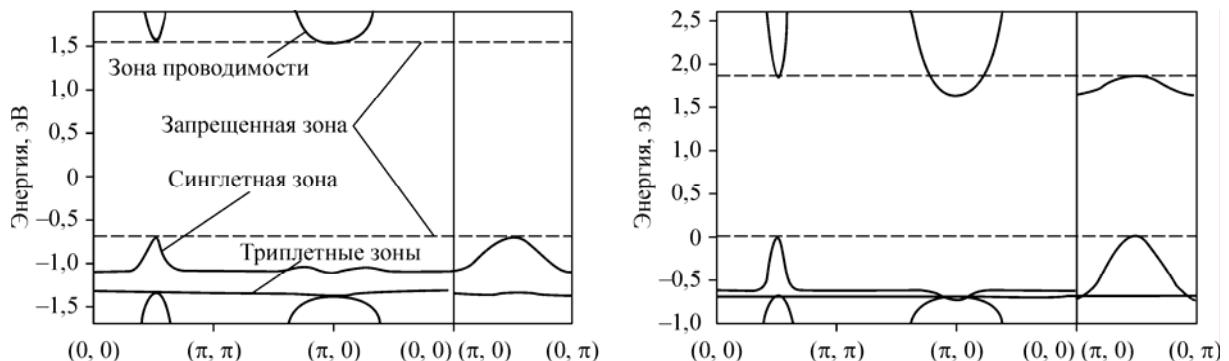


**ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЙ ПЕРЕХОДНЫХ  
МЕТАЛЛОВ С СИЛЬНЫМИ КУЛОНОВСКИМИ ЭЛЕКТРОН-ЭЛЕКТРОННЫМИ  
КОРРЕЛЯЦИЯМИ ЧИСЛЕННЫМИ МЕТОДАМИ.  
ПРОЕКТ № 9**

**Координаторы:** канд. физ.-мат. наук Гавричков В. А., д-р физ.-мат. наук Анисимов В. И.  
**Исполнители:** ИФ, ИК, ИФП СО РАН, ИФМ УрО РАН

Предложен новый так называемый LDA + GTB подход к исследованию электронной структуры материалов с сильными электронными корреляциями (СЭК). В этом подходе часть LDA предназначена для конструирования ванье-функций и получения одноэлектронных и кулоновских параметров, используемых в дальнейшем по схеме GTB. В основе части GTB лежит комбинация метода точной диагонализации реалистичного гамильтониана малого кластера (например, элементарной ячейки) с теорией возмущения для гамильтониана с взаимодействием между кластерами в представлении операторов Хаббарда. Для недопированных  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  и  $\text{Nd}_2\text{CuO}_4$  этот подход приводит, например, к диэлектрической щели с переносом заряда (charge transfer gap) по величине и дисперсии в ее окрестности, согласующейся с фотоэмиссионными данными ARPES (рис. 1).

Для проведения аналогичных совместных исследований недопированных и слабодопированных манганитов  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ , обладающих колоссальным магнеторезистивным эффектом, в ИФ СО РАН были проведены также предварительные расчеты электронной структуры этих материалов с учетом сильных внутриатомных корреляций в рамках GTB-подхода. Как следует из расчета, в орбитально упорядоченном недопированном антиферромагнетике  $\text{LaMnO}_3$  основное состояние было бы металлическим, несмотря на мотт-хаббардовскую корреляционную щель в спектре квазичастиц. Благодаря орбитальному упорядочению стабилизируется диэлектрическое состояние, как в АФМ-, так и в ПМ-фазе. Вблизи потолка валентной зоны обнаружены необычные внутрищелевые состояния со спектральным весом, пропорциональным концентрации до-



*Рис. 1.* Квазичастичная дисперсия для  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , вычисленная в АФМ-фазе, с набором феноменологических параметров и дисперсия, полученная в АФМ-регионе в новом подходе LDA + GTB с независимым расчетом параметров гамильтониана.

*Fig. 1.* Quasi-particle state dispersion in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , calculated for AFM phase, with phenomenological parameters set and the dispersion that was found in AFM region using new LDA + GTB approach with independent calculating the Hamiltonian parameters.

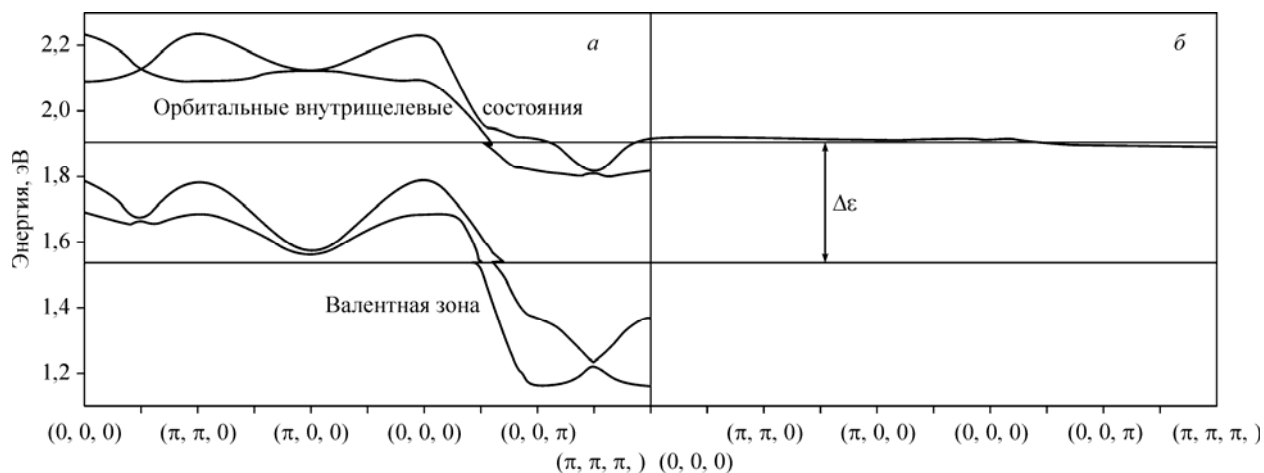


Рис. 2. Дисперсия квазичастичных состояний в орбитально упорядоченном  $\text{LaMnO}_3$  при ФМ-упорядочении ( $x = 0,3$ ) для проекции спина носителя  $\sigma = \uparrow$  (а) и  $\sigma = \downarrow$  (б).

Fig. 2. Quasi-particle state dispersion in orbital ordered  $\text{LaMnO}_3$  with FM ordering ( $x = 0.3$ ) for spin projection  $\sigma = \uparrow$  (a) and  $\sigma = \downarrow$  (b).

пирования в  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ . С ростом допирования в ферромагнитной фазе появляется состояние половинного металла с металлическим характером для одной спиновой подзоны и диэлектрического типа для другой спиновой подзоны (рис. 2).

Проведенные исследования являются абсолютно новыми в актуальной области изучения электронной структуры материалов с СЭК.

### Основные публикации

1. Korshunov M. M., Gavrichkov V. A., Ovchinnikov S. G., Pchelkina Z. V., Nekrasov I. A., Korotkin M. A., Anisimov V. I. Parameters of the effective singlet-triplet model for band structure of high-Tc cuprates by different approaches// *ЖЭТФ*. 2004. Т. 126, № 3(9). С. 642—650.
2. Гавричков В. А., Овчинников С. Г. Зонная структура купратных сверхпроводников  $n$ -типа с  $T(T)$ -структурой при учете сильных электронных корреляций// Там же. Т. 125. С. 630—639.
3. Korshunov M. M., Gavrichkov V. A., Ovchinnikov S. G., Nekrasov I. A., Pchelkina Z. V., Anisimov V. I. Hybrid LDA and generalized tight-binding method for structure calculations of strongly correlated electron systems// *Phys. Rev.* 2005. V. B72. P. 165104.
4. Ovchinnikov S. G., Anisimov V. I., Nekrasov I. A., Pchelkina Z. V. Magnetic collapse and the evolution of the electronic structure of the  $\text{FeBO}_3$  at the high pressure// *The Physics of Metals and Metallurgy*. 2005. V. 99. P. S93—S95.
5. Gavrichkov V. A., Ovchinnikov S. G., Yakimov L. E. Generalized tight-binding method for correlated electron structure in transition metal oxides// *Ibid.* V. 100. P. S63—S66.

В целом по проекту опубликовано 14 работ, из них пять совместных.