



ІНСТИТУТ  
ФІЗИКИ  
КОНДЕНСОВАНИХ  
СИСТЕМ

ICMP-03-31U

Л. Дідух, Ю. Скоренький, О. Крамар, Ю. Довгоп'ятий \*

Вплив легування, зміни температури та деформації на  
електронну провідність матеріалу з сильними електронними  
кореляціями

\*Тернопільський державний технічний університет ім. І. Пулюя,  
46001, Тернопіль, вул. Руська, 56

УДК: 538.9, 537.31

PACS: 72.15 -v, 72.80.Ga

**Вплив легування, зміни температури та деформації на електронну провідність матеріалу з сильними електронними кореляціями**

Л. Дідух, Ю. Скоренький, О. Крамар, Ю. Довгоп'ятий

**Анотація.** Розраховано електронну провідність в матеріалах з вузькими зонами провідності в узагальненій моделі Габбарда з корельованим переносом при довільній температурі. Досліджено залежності провідності від змін температури, тиску та легування. Вирази для розрахунку провідності знайдено з використанням енергетичного спектру електронів у вузькій зоні для випадку сильних кореляцій, отриманого в методі типу узагальненого наближення середнього поля. Результати числових розрахунків провідності дозволяють інтерпретувати експериментальні дані для вузькозонних сполук, в яких спостерігається електрон-діркова асиметрія.

**The influence of doping, temperature change and deformation on the electronic conductivity of a material with strong electron correlations**

L. Didukh, Yu.Skorenkyu, O.Kramar, Yu.Dovhopyaty

**Abstract.** The electronic conductivity in materials with narrow energy bands in generalized Hubbard model with correlated hopping of electrons at arbitrary temperature is calculated. The dependences of conductivity on doping, temperature change and deformation are investigated. The expressions for conductivity are found with use of the energy spectrum of strongly correlated electrons in a narrow band obtained by means of the method of generalized mean-field. The results of numerical calculation of the conductivity allow to interpret the experimental data for narrow-band systems with electron-hole asymmetry.



## 1. Вступ. Провідність у вузьких енергетичних зонах

Інтенсивні дослідження, як теоретичні, так і експериментальні, матеріалів з вузькими зонами провідності, які проводяться в останні 25-30 років, викликані унікальними фізичними властивостями цих матеріалів. Спостережувані у багатьох сполуках цього класу переходи діелектрик-метал, різноманітність магнітних властивостей, взаємозв'язок електричних і магнітних характеристик, наявність немагнітних типів електронного впорядкування - властивості матеріалів з вузькими зонами провідності, які викликають великий науковий і практичний інтерес. Відкриття високотемпературної надпровідності в міднооксидних сполуках є новим яскравим підтвердженням перспективності вузькозонних матеріалів.

На даний час немає сумнівів, що унікальні властивості вузькозонних систем викликані міжелектронними взаємодіями, які кардинально модифікують [1] результати класичної зонної теорії. Такі взаємодії можна описати в рамках моделі Габбарда з нееквівалентними підзонами.

Особливістю моделі Габбарда [2] і вузькозонних моделей, генетично пов'язаних з нею (наприклад  $t - J$  моделі), є електронно-діркова симетрія. Одним із проявів цієї симетрії є еквівалентність нижньої і верхньої квазічастинкових підзон в моделі Габбарда, що в свою чергу є наслідком рівності інтегралів переносу, які описують як "трансляційні" переходи дірок і двійок, так і процеси їх парного народження і знищення ("активаційні" процеси). Рівність вказаних інтегралів зумовлена нехтуванням матричних елементів електронно-електронної взаємодії

$$J(ikjk) = \int \int \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |\phi(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_k)|^2 d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \quad (1.1)$$

які описують переходи електронів між  $i$  та  $j$  вузлами ( $\phi$ -функції – функції Ваньє). В роботах [3]- [5] була обґрунтована принципова необхідність узагальнення моделі Габбарда врахуванням корельованого переносу електронів (1.1) і запропонована вузькозонна модель з нееквівалентними габбардівськими підзонами. В такій моделі інтеграли переносу, які описують трансляційний перенос дірок і двійок, відрізняються як між собою, так і від інтегралу переносу, пов'язаного з активаційними процесами. Подібні моделі в останній час інтенсивно досліджуються [6]- [8].

Досягнення останніх років у галузі сильно корельованих елект-

ронних систем дають можливість глибше зрозуміти поведінку фізичних характеристик вузькозонних матеріалів, зокрема тих, в яких спостерігається перехід метал-діелектрик під дією зовнішніх впливів (тиску, легування, температури) [9]. Сильно корельовані електронні системи володіють незвичайними транспортними властивостями [10]. Для розуміння фізичних механізмів, котрі зумовлюють ці особливості, необхідними є експериментальні та теоретичні дослідження температурно залежної динамічної провідності  $\sigma(\omega, T)$ . Особливо важливими є результати, що стосуються низькочастотної поведінки провідності, оскільки вона дає інформацію про процеси розсіяння поблизу поверхні Фермі. Теоретичні дослідження  $\sigma(\omega, T)$  головним чином зосереджені в границі  $T = 0$ . Поведінка статичної провідності

$$\sigma(T) = \sigma(\omega = 0, T), \quad (1.2)$$

при  $T > 0$  недостатньо теоретично вивчена і в останні роки інтенсивно досліджується.

Теоретичні дослідження оптичної провідності в моделі Габбарда [2] в рамках теорії лінійного відгуку Кубо [11] тривають вже багато десятиліть, відмітимо тут дослідження аналітичними методами: в методі моментів [12], з застосуванням техніки рівнянь руху для функцій Гріна [13], в методі композитних операторів [14], в методі середнього поля [15, 16], в методі теорії збурень [17, 18] в границі слабкого зв'язку ( $t \gg U$ ), в методі функції пам'яті [19, 20] в протилежній границі ( $U \gg t$ ). Провідність інтенсивно досліджувалася в рамках одновимірної моделі Габбарда [21]- [23], де результати числових розрахунків можуть бути порівняні з точними результатами, отриманими із застосуванням анзацу Бете.

Для числових досліджень провідності в моделі Габбарда використовувалися метод точної діагоналізації малих кластерів [25] для кластера  $4 \times 4$  вузла, квантовий метод Монте-Карло для кластерів  $8, 10$  вузлів [26],  $3 \times 3$  вузла [23],  $8 \times 8$  вузлів [27],  $12 \times 12$  вузлів [28]. Дослідження числовими методами в основному проводилися для двовимірної ґратки (це, насамперед, зумовлено значним інтересом до явища високотемпературної надпровідності [29] в сполуках з площинами  $CuO$ ), провідність у тривимірній системі досліджувалась лише у вузькому інтервалі поблизу половинного заповнення при слабких та проміжних взаємодіях [30].

Оптична провідність досліджувалася також методом динамічного середнього поля DMFT в границі нескінченної вимірності простору [31]. Застосовувалися різні способи розв'язку рівнянь динамічної теорії середнього поля: ітерована теорія збурень IPT [32], наближен-

ня без перетинів NCA [33], теорія збурень другого порядку 2OPT [34]. Автори розглядали симетричну модель Габбарда при половинному заповненні поблизу переходу метал-діелектрик ( $U \simeq 2w$ , де  $2w$  є ширина зони) і отримали добре узгодження з даними експериментів для деяких мотт-габбардівських систем. Проте для реалістичних моделей важливими є нелокальні (залежні від хвильового вектора) внески у власно-енергетичну частину та транспортні характеристики. Крім того, дослідження в рамках DMFT стосуються, переважно, випадку половинного заповнення зони. Для узагальненої моделі, що враховувала б нееквівалентність габбардівських підзон, на даний час в рамках DMFT немає надійних результатів для провідності.

Таким чином, необхідними є аналітичні дослідження провідності в рамках реалістичних моделей електронної підсистеми вузькозонних матеріалів в границі сильної кулонівської кореляції.

## 2. Гамільтоніан моделі

Запишемо гамільтоніан системи у представленні  $X_i^{kl}$  - операторів [5]:

$$H = H_0 + H_1 + H_1', \quad (2.1)$$

де

$$\begin{aligned} H_0 &= -\mu \sum_i (X_i^\uparrow + X_i^\downarrow + 2X_i^2) + U \sum_i X_i^2, \\ H_1 &= \sum_{ij\sigma}' t_{ij}(n) X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \sum_{ij\sigma} \tilde{t}_{ij}(n) X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2}, \\ H_1' &= \sum_{ij\sigma}' (t'_{ij}(n) \eta_\sigma X_i^{\sigma 0} X_j^{\sigma 2} + e.c.), \end{aligned}$$

$X_i^k = X_i^{kl} X_i^{lk}$  – оператор числа  $|k\rangle$ -станів на вузлі  $i$ ,  $\eta_\uparrow = -1$ ,  $\eta_\downarrow = 1$ , тут  $X_i^{kl}$  – оператори переходу вузла із стану  $|l\rangle$  в стан  $|k\rangle$ ; стан  $|0\rangle$  відповідає вузлу, не зайнятому електроном (дірка),  $|\sigma\rangle$  – одноразово зайнятий (електроном зі спіном  $\sigma$ ) стан,  $|2\rangle$  – дворазово зайнятий (двома електронами з протилежними спінами) стан на вузлі  $i$  (двійка);  $\mu$  – хімічний потенціал,  $U$  – енергія кулонівського відштовхування двох електронів на одному вузлі;

$$t_{ij}(n) = t(ij) + T_1(ij)$$

– ефективний концентраційно залежний інтеграл переносу;

$$T_1(ij) = n \sum_{\substack{k \neq i \\ k \neq j}} J(ikjk),$$

– ефективний інтеграл переносу електронів, який корельований заселеністю інших вузлів,  $n = \langle n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \rangle = \frac{N_e}{N}$  – середнє число електронів на вузол ( $N_e$  – число електронів в зоні,  $N$  – число вузлів).

$$\tilde{t}_{ij}(n) = t_{ij}(n) + 2T(ij), \quad (2.2)$$

$$t'_{ij}(n) = t_{ij}(n) + T(ij), \quad (2.3)$$

$T(ij) = J(iij)$  – ефективний інтеграл переносу електрона між вузлами, корельований заселеністю цих вузлів. Штрихи біля сум у виразі (2.1) означають, що  $i \neq j$ .

$H_0$  описує атомну границю вузькозонних моделей.

$H_1$  описує трансляційний рух дірок і двійок. Суттєвим є те, що у розглядуваній моделі (на відміну від вузькозонних моделей типу Габбарда) інтеграли переходу дірок і двійок відрізняються між собою за рахунок врахування в інтегралах переносу величин  $T(ij)$  та  $T_1(ij)$ , які описують вплив заселеності вузлів ґратки.

$H_1'$  описує процеси парного народження і знищення дірок та двійок ("активаційні" переходи).

Величину корельованого переносу будемо характеризувати безрозмірними параметрами

$$\tau_1 = \frac{T_1(ij)}{|t(ij)|}, \quad \tau_2 = \frac{T(ij)}{|t(ij)|},$$

( $0 \leq \tau_1, \tau_2 \leq 1$ ), які характеризують нееквівалентність підзон. При ненульових значеннях  $\tau_1, \tau_2$  підзони є нееквівалентними, переходам в різних підзонах відповідають різні інтеграли перестрибування електронів між найближчими вузлами  $t \equiv t_{ij}$ ,  $\tilde{t} \equiv \tilde{t}_{ij}$ ,  $t' \equiv t'_{ij}$ , пов'язані наступними співвідношеннями:

$$\frac{\tilde{t}}{t} = 1 - \frac{2\tau_2}{1 - \tau_1}, \quad \frac{t'}{t} = 1 - \frac{\tau_2}{1 - \tau_1}.$$

Для моделі Габбарда  $\tau_1 = \tau_2 = 0$ . Врахування нееквівалентності підзон приводить до суттєвої відмінності даної моделі від моделі Габбарда.

## 3. Одночастинковий енергетичний спектр вузькозонної моделі

Ефективними методами розрахунку квазічастинкового енергетичного спектру в моделі, описуваній гамільтоніаном (2.1) є двополосні

наближення в методі розчеплення ланцюжків рівнянь для функцій Гріна [13]. В представленні  $X$ -операторів Габбарда функції Гріна електронів зі спінами  $\uparrow$  та  $\downarrow$  можна подати у вигляді:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{p\sigma} | a_{s\sigma}^+ \rangle\rangle &= \langle\langle X_p^{0\sigma} | X_s^{\sigma 0} \rangle\rangle - \eta_\sigma \langle\langle X_p^{\bar{\sigma} 2} | X_s^{\sigma 0} \rangle\rangle \\ &\quad - \eta_\sigma \langle\langle X_p^{0\sigma} | X_s^{2\bar{\sigma}} \rangle\rangle + \langle\langle X_p^{\bar{\sigma} 2} | X_s^{2\bar{\sigma}} \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Використовуючи методику, запропоновану в роботі [5], фур'є-образи функцій  $\langle\langle X_p^{0\sigma} | X_s^{\sigma 0} \rangle\rangle$ ,  $\langle\langle X_p^{\bar{\sigma} 2} | X_s^{\sigma 0} \rangle\rangle$ ,  $\langle\langle X_p^{0\sigma} | X_s^{2\bar{\sigma}} \rangle\rangle$  та  $\langle\langle X_p^{\bar{\sigma} 2} | X_s^{2\bar{\sigma}} \rangle\rangle$  отримаємо у вигляді:

$$\langle\langle X_p^{0\sigma} | X_s^{\sigma 0} \rangle\rangle_{\mathbf{k}} = \frac{(2-n)}{4\pi} \left( \frac{A_{\mathbf{k}}^1}{E - E_1^\sigma(\mathbf{k})} + \frac{B_{\mathbf{k}}^1}{E - E_2(\mathbf{k})} \right), \quad (3.2)$$

$$A_{\mathbf{k}}^1 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{U - (\epsilon - \tilde{\epsilon})t_{\mathbf{k}}(n)}{E_2(\mathbf{k}) - E_1(\mathbf{k})} \right),$$

$$B_{\mathbf{k}}^1 = 1 - A_{\mathbf{k}}^1,$$

$$\begin{aligned} \langle\langle X_p^{\bar{\sigma} 2} | X_s^{\sigma 0} \rangle\rangle_{\mathbf{k}} &= -\frac{(2-n)}{4\pi} \frac{\epsilon_2 t_{\mathbf{k}}(n)}{E_2(\mathbf{k}) - E_1(\mathbf{k})} \\ &\quad \times \left( \frac{1}{E - E_1(\mathbf{k})} - \frac{1}{E - E_2(\mathbf{k})} \right), \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} \langle\langle X_p^{0\sigma} | X_s^{2\bar{\sigma}} \rangle\rangle_{\mathbf{k}} &= -\frac{n}{4\pi} \frac{\epsilon_1 t_{\mathbf{k}}(n)}{E_2(\mathbf{k}) - E_1(\mathbf{k})} \\ &\quad \times \left( \frac{1}{E - E_1(\mathbf{k})} - \frac{1}{E - E_2(\mathbf{k})} \right), \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} \langle\langle X_p^{\bar{\sigma} 2} | X_s^{2\bar{\sigma}} \rangle\rangle &= \frac{n}{4\pi} \left( \frac{A_{\mathbf{k}}^4}{E - E_1(\mathbf{k})} + \frac{B_{\mathbf{k}}^4}{E - E_2(\mathbf{k})} \right), \quad (3.5) \\ A_{\mathbf{k}}^4 &= B_{\mathbf{k}}^1, \quad B_{\mathbf{k}}^4 = A_{\mathbf{k}}^1. \end{aligned}$$

Тут вираз

$$\begin{aligned} E_{1,2}(\mathbf{k}) &= -\mu + \frac{U}{2} + \frac{(\epsilon + \tilde{\epsilon})}{2} t_{\mathbf{k}}(n) \\ &\quad \mp \frac{1}{2} \sqrt{[U - ((\epsilon - \tilde{\epsilon})t_{\mathbf{k}}(n))]^2 + 4\epsilon_1 \epsilon_2 t_{\mathbf{k}}(n)^2}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

визначає квазічастинковий енергетичний спектр системи, описуваної гамільтоніаном (2.1).

Фур'є-образ концентраційно-залежного інтеграла переносу  $\epsilon$

$$t_{\mathbf{k}}(n) = \frac{1}{N} \sum_{ij} t_{ij}(n) \exp i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \equiv t(n)\gamma(\mathbf{k})$$

$t(n) \equiv t_{ij}(n)$ ,  $\gamma(\mathbf{k}) = \sum_{\rho} \exp(i\mathbf{k}\rho)$  (сумування ведеться по найближчих сусідах), аналогічні співвідношення визначають інтеграли переносу  $\tilde{t}_{\mathbf{k}}(n)$  і  $t'_{\mathbf{k}}(n)$ .

Неоператорні коефіцієнти  $\epsilon$ ,  $\tilde{\epsilon}$ ,  $\epsilon_1$  та  $\epsilon_2$ , знайдені у згоді з методом роботи [5] ("наближення D-I"), мають вигляд

$$\begin{aligned} \epsilon &= (1 - n\tau_1)(1 - \frac{n}{2}) + \frac{(1 - n\tau_1)(n - 2d)^2}{2(2 - n)} \\ &\quad - (1 - n\tau_1 - 2\tau_2) \frac{2d(1 - n + d)}{2 - n}, \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon} &= (1 - n\tau_1 - 2\tau) \frac{n}{2} + \frac{1 - n\tau_1 - 2\tau_2}{2} \frac{(n - 2d)^2}{n} \\ &\quad - (1 - n\tau_1) \frac{2d(1 - n + d)}{n}, \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\epsilon_1 = -(1 - n\tau_1 - \tau_2) \left( \frac{2 - n}{2} + \frac{(n - 2d)^2}{2n} - \frac{2cd}{n} \right), \quad (3.9)$$

$$\epsilon_2 = -(1 - n\tau_1 - \tau_2) \left( \frac{n}{2} + \frac{(n - 2d)^2}{2(2 - n)} - \frac{2cd}{2 - n} \frac{n}{2} \right), \quad (3.10)$$

В цих співвідношеннях  $c$  – концентрація дірок ( $\langle X_i^0 \rangle = c$ ),  $d$  – концентрація двійок ( $\langle X_i^2 \rangle = d$ ), пов'язані співвідношенням  $c - d = 1 - n$ .

Концентрація двійок визначається виразом

$$d = \langle X_i^2 \rangle = \frac{n/2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{A_{\mathbf{k}}^4}{\exp \frac{E_1(\mathbf{k})}{\theta} + 1} + \frac{B_{\mathbf{k}}^4}{\exp \frac{E_2(\mathbf{k})}{\theta} + 1} \right), \quad (3.11)$$

де  $\theta = k_B T$  ( $k_B$  – стала Больцмана).

Аналогічно для концентрації дірок отримуємо формулу

$$c = \langle X_i^0 \rangle = \frac{1 - n/2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{A_{\mathbf{k}}^1}{\exp \frac{-E_1(\mathbf{k})}{\theta} + 1} + \frac{B_{\mathbf{k}}^1}{\exp \frac{-E_2(\mathbf{k})}{\theta} + 1} \right). \quad (3.12)$$

Застосування наближення, запропонованого в роботі [35] ("наближення D-II"), приводить до декількох відмінних виразів для неоператорних коефіцієнтів, що описують гібридизацію габбардівських підзон [36]:

$$\epsilon_1 = -(1 - n\tau_1 - \tau_2) \left( 1 - \frac{n}{2} \right), \quad (3.13)$$

$$\epsilon_2 = -(1 - n\tau_1 - \tau_2) \frac{n}{2}, \quad (3.14)$$

Вираз (3.1) для одноелектронної функції Гріна можна подати у формі:

$$G_{\mathbf{k}}(E) = \frac{n/2}{2\pi} \left( \frac{A_{\mathbf{k}}}{E - \tilde{E}(\mathbf{k})} + \frac{B_{\mathbf{k}}}{E - E(\mathbf{k})} \right),$$

де

$$A_{\mathbf{k}} = \frac{E_2(\mathbf{k}) + \mu - \epsilon(\mathbf{k})}{E_2(\mathbf{k}) - E_1(\mathbf{k})}, \quad B_{\mathbf{k}} = -\frac{E_1(\mathbf{k}) + \mu - \epsilon(\mathbf{k})}{E_2(\mathbf{k}) - E_1(\mathbf{k})}. \quad (3.15)$$

Для спектральної інтенсивності функції Гріна (3.1) маємо:

$$J_{\mathbf{k}}(E) = \frac{n/2}{\exp \frac{E}{\theta} + 1} (A_{\mathbf{k}} \delta(E - E_1(\mathbf{k})) + B_{\mathbf{k}} \delta(E - E_2(\mathbf{k}))).$$

Розглянемо принципово важливий випадок напівзаповненої відхідної зони, коли  $c = d$  (в цьому випадку в моделі при певному співвідношенні між енергією кулонівської кореляції та шириною енергетичної зони відбувається перехід з металічного в діелектричний стан).

Для неоператорних коефіцієнтів  $\epsilon$  та  $\tilde{\epsilon}$  в парамагнітному стані при концентрації електронів  $n = 1$  отримуємо

$$\begin{aligned} \epsilon &= (1 - 2d + 2d^2)t_{\mathbf{k}} - 2d^2\tilde{t}_{\mathbf{k}}, \\ \tilde{\epsilon} &= (1 - 2d + 2d^2)\tilde{t}_{\mathbf{k}} - 2d^2t_{\mathbf{k}}, \\ \epsilon_1 = \epsilon_2 &= -2dt'_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Енергетичний спектр (3.6) набуває вигляду [37]:

$$\begin{aligned} E_{1,2}(\mathbf{k}) &= -\mu + \frac{U}{2} + (1 - 2d) \frac{t_{\mathbf{k}}(n) + \tilde{t}(\mathbf{k})}{2} \\ &\mp \frac{1}{2} \sqrt{[U - (t_{\mathbf{k}}(n) - \tilde{t}(\mathbf{k}))(1 - 2d + 4d^2)]^2 + (4dt'(\mathbf{k}))^2}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Для моделі Габбарда у випадку  $n=1$  та парамагнітного стану відповідні вирази мають вигляд

$$\begin{aligned} \epsilon &= \tilde{\epsilon} = (1 - 2d)t_{\mathbf{k}}, \\ \epsilon_1 = \epsilon_2 &= -2dt_{\mathbf{k}}, \\ \epsilon_1 = \epsilon_2 &= -2dt_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

для енергетичного спектру в цьому випадку отримуємо вираз:

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = -\mu + \frac{U}{2} + (1 - 2d)t_{\mathbf{k}} \mp \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + (4dt_{\mathbf{k}})^2}. \quad (3.19)$$

Отриманий квазічастинковий енергетичний спектр дозволяє вивчати особливості моделі вузькозонного матеріалу з нееквівалентними габбардівськими підзонами, зокрема, дослідити перехід метал-діелектрик в запропонованій моделі. Варто відзначити, що, на відміну від результатів двополюсних наближень Габбарда [2] та Ікеди, Ларсена, Маттука [38], енергетичний спектр (3.19) залежить від концентрації полярних станів (таким чином, від температури). На відміну від наближень, що базуються на ідеології Рот [39] (в цьому зв'язку див. також роботи [40–44]), енергетичний спектр (3.19) здатний описати перехід метал-діелектрик. На відміну від наближення "D-I", де всі комутатори в рівняннях руху для функцій Гріна враховані в узагальненому наближенні Гартрі-Фока, в наближенні "D-II" цю процедуру застосовано лише до комутаторів електронних операторів з "діагональними" у конфігураційному представленні членами гамільтоніана, що описують переходи всередині габбардівських підзон. Інші процеси враховуємо в наближенні Гартрі-Фока. Як наслідок, енергетичний спектр (3.19) моделі в парамагнітному стані, знайдений в наближенні "D-II" відрізняється від відповідного виразу в наближенні "D-I" наявністю члена  $\sqrt{U^2 + t^2(\mathbf{k})}$  замість  $\sqrt{U^2 + 16d^2t^2(\mathbf{k})}$ . Це приводить до ряду відмінностей результатів вказаних наближень в області переходу метал-діелектрик, зокрема, в поведінці енергії основного стану системи, концентрації полярних станів.

Як видно з виразів для одноелектронної функції Гріна, енергетичного спектру та енергетичної щільності, концентрації полярних станів є важливими характеристиками стану системи. Вони, зокрема, визначають залежність спектра та щільності від зовнішніх впливів: зміни температури, легування, впливу світла. Для знаходження концентрації двійок  $d$  при  $T = 0$  прийемо прямокутну густину станів:

$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon(\mathbf{k})) = \frac{1}{2w} \theta(\epsilon^2 - w^2), \quad (3.20)$$

тут  $w = z|t|$  є напівширина незбуреної (за відсутності кореляції між електронами) енергетичної зони,  $z$  є число найближчих до вузла сусідів. Тоді

$$\begin{aligned} d &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{A_{\mathbf{k}}^4}{e^{\frac{E_1(\mathbf{k})}{k_B T}} + 1} + \frac{B_{\mathbf{k}}^4}{e^{\frac{E_2(\mathbf{k})}{k_B T}} + 1} \right) \\ &= \frac{1}{4w} \int_{-w}^w (A^4(\epsilon)\Theta(-E_1(\epsilon)) + B^4(\epsilon)\Theta(-E_2(\epsilon))) d\epsilon. \end{aligned} \quad (3.21)$$

#### 4. Розрахунок ефективної маси носіїв струму

В рамках розглядуваної моделі природним чином вводяться поняття "широкої" (нижньої) і вузької (верхньої) підзон і у відповідності з цим представлення про "легкі" і "важкі" носії струму з ефективними масами

$$m^* = \left( \frac{\partial^2 E_1(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}^2} \right)^{-1}, \quad (4.1)$$

$$\tilde{m}^* = \left( \frac{\partial^2 E_2(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}^2} \right)^{-1}, \quad (4.2)$$

де  $E_1(\mathbf{k})$  є енергетичний спектр носіїв у нижній ( $\sigma - 0$ ) підзоні,  $E_2(\mathbf{k})$  є енергетичний спектр носіїв у верхній ( $\sigma - \uparrow\downarrow$ ) підзоні.

Видно, що ефективна маса важких носіїв може суттєво зростати із збільшенням концентрації електронів у зоні. Зрозуміло, що за рахунок кореляційного переносу важкі носії можуть реалізуватися і у нижній, ( $\sigma - 0$ ) підзоні.

Варто зауважити, що термін "ефективна маса носія струму" має до певної міри умовний зміст, відмінний від використовуваного у стандартній зонній теорії. Означення (4.1) і (4.2) пов'язані із виразами для зонного спектру, які описують переходи між  $|\sigma\rangle$ - і  $|0\rangle$ -станами та  $|\uparrow\downarrow\rangle$ - і  $|\sigma\rangle$ -станами. Тому  $m^*$  і  $\tilde{m}^*$  – ефективні маси відповідних переходів; для випадків, коли підзони заповнені мало, або майже повністю заповнені,  $m^*$  і  $\tilde{m}^*$  можна тлумачити як ефективні маси електронних та діркових станів.

Так, для випадку  $n \ll 1$

$$m_1^* = \frac{\hbar}{2a^2|t(n)|} \simeq \frac{\hbar}{2a^2|t|} \quad (4.3)$$

може бути співставлена з ефективною масою  $|\sigma\rangle$ -станів - електронів, для випадку  $n = 1 - \varepsilon$  ( $\varepsilon \ll 1$ ) ефективна маса

$$m_2^* = \frac{\hbar}{2a^2|t(n)|} \Big|_{n=1} \quad (4.4)$$

може бути ототожнена з ефективною масою дірки. Якщо  $n > 1$ , то для  $n = 1 + \varepsilon$  маємо перенос двійок ("зайвих електронів")

$$\tilde{m}_1^* = \frac{\hbar}{2a^2|\tilde{t}(n)|} \Big|_{n=1}, \quad (4.5)$$

а для  $n = 2 - \varepsilon$  маємо ефективну масу дірок

$$\tilde{m}_2^* = \frac{\hbar}{2a^2|\tilde{t}(n)|} \Big|_{n=2}. \quad (4.6)$$

З виразів (4.3)-(4.6) видно, що ефективна маса носіїв у верхній підзоні може суттєво відрізнитися від ефективних мас носіїв у випадку, коли провідність зумовлена  $\sigma - 0$ -переходами.

Важливо відмітити, що при переході від режиму провідності в нижній зоні до стану системи, коли провідність зумовлена  $\sigma - \uparrow\downarrow$ -переходами, ефективна маса стрибком зростає при переході через точку  $n = 1$  (якісний вигляд залежності ефективної маси носіїв від ступеня заповнення підзон можна бачити з рис. 1). Класом речовин,

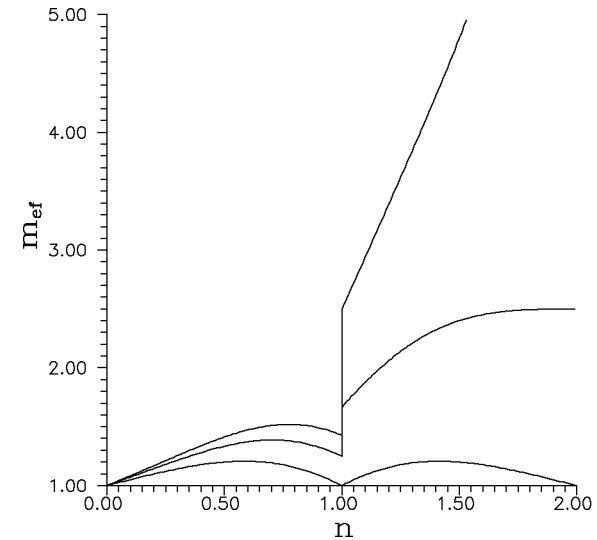


Рис. 1. Залежність ефективної маси носіїв струму  $m_{ef}/m_0$  від концентрації електронів: верхні криві –  $\tau_1 = \tau_2 = 0.3$ ; середні криві –  $\tau_1 = \tau_2 = 0.2$ ; нижні криві –  $\tau_1 = \tau_2 = 0$ .

у яких можна чекати формування достатньо вузьких зон провідності відповідно до розглядуваної моделі, є фази Магнелі  $V_nO_{2n-1}$  [45], де (найімовірніше у  $V_3O_5$  і  $V_4O_7$ ) реалізується зарядовпорядкований стан в діелектричній фазі. У роботі [46] показано, що спостережувані температури фазових переходів у цих сполуках можна пояснити, якщо припустити, що ширина підзон, в яких реалізується зарядове впорядкування, досить вузька ( $< 1eB$ ). Додатковим аргументом на

користь такої точки зору є спостережуване в фазах Магнелі ванадію антиферромагнітне впорядкування у широкому інтервалі зміни концентрації електронів в підзонах.

## 5. Розрахунок електронної провідності

Вперше провідність у вузькозонному матеріалі (на прикладі системи NiO, легованій Li) була розглянута в роботі [47], де була запропонована формула для провідності, яка узагальнювала зонний варіант формули Друде-Лоренца на випадок легованого мотт-габбардівського діелектрика. Особливістю такого підходу є сильна концентраційна залежність ефективної маси  $m$ , яка входить у вираз для електропровідності;  $m \rightarrow m_0^*$ , де  $m_0^*$  - ефективна маса електрона, у випадку слабого заповнення зони і  $m \rightarrow \infty$  для випадку  $n \rightarrow 1$ .

Нижче пропонується підхід [48] до розгляду електропровідності вузькозонних матеріалів як в режимі легованих мотт-габбардівських діелектриків, так і мотт-габбардівських систем, в яких можливий фазовий перехід діелектрик-метал під дією зовнішніх впливів (легкування, зміна температури, тиск, вплив зовнішнього електричного або магнітного поля).

Використаємо методику розгляду електропровідності в моделі Габбарда, запропоновану в роботах [47, 48], вихідною в яких є формула Кубо для тензора електропровідності, залежного від частоти:

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \frac{i}{V} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_0^\infty \langle [J_\mu(t), P_\nu] \rangle \exp(-i\omega t - \epsilon t) dt, \quad (5.1)$$

де  $\mu, \nu - x, y, z$  - компоненти тензора,  $V$  - об'єм системи,  $\langle \dots \rangle$  - термодинамічне середнє,  $P_\nu$  -  $\nu$ -компонента оператора поляризації,  $J_\mu$  -  $\mu$ -компонента оператора струму, які означаються так:

$$P_\nu = e \sum_{i\sigma} R_i^\nu n_{i\sigma}, \quad (5.2)$$

$$J_\mu = i[P_\mu, H]. \quad (5.3)$$

У вузькозонній моделі (2.1) вирази (5.2) і (5.3) дають

$$P_\nu = e \sum_i (X_i^\uparrow + X_i^\downarrow + 2X_i^2) R_i^\nu, \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned} J_\mu &= ie \sum_{ij\sigma} (R_i^\mu - R_j^\mu) t_{ij}(n) X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} \\ &+ ie \sum_{ij\sigma} (R_i^\mu - R_j^\mu) \tilde{t}_{ij}(n) X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2} \\ &+ ie \sum_{ij\sigma} (R_i^\mu - R_j^\mu) t'_{ij}(n) \eta_\sigma (X_i^{2\sigma} X_j^{0\bar{\sigma}} + \text{e.c.}). \end{aligned} \quad (5.5)$$

З формули (5.1) отримуємо

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\mu}(\omega) &= \frac{e^2}{V} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{ij\sigma} (\mathbf{R}_i^\mu - \mathbf{R}_j^\mu)^2 t_{ij} \int_0^\infty \langle X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2} \\ &+ \eta_\sigma (X_i^{2\sigma} X_j^{0\bar{\sigma}} + \text{e.c.}) \rangle \exp(-i\omega t - \epsilon t) dt. \end{aligned} \quad (5.6)$$

В режимі легованого мотт-габбардівського діелектрика ( $U \gg w$ ), коли систему можна описати ефективним гамільтоніаном

$$H = t(n) \sum_{ij\sigma} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \tilde{t}(n) \sum_{ij\sigma} X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2} \quad (5.7)$$

вирази (5.2) і (5.3) набувають вигляду

$$P_\nu = e \sum_i (X_i^\uparrow + X_i^\downarrow + 2X_i^2) R_i^\nu, \quad (5.8)$$

$$\begin{aligned} J_\mu &= ie \sum_{ij\sigma} (R_i^\mu - R_j^\mu) t_{ij}(n) X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} \\ &+ ie \sum_{ij\sigma} (R_i^\mu - R_j^\mu) \tilde{t}_{ij}(n) X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Використовуючи методику робіт [47, 48], отримуємо для  $xx$ -компоненти тензора електропровідності

$$\sigma_{xx} = \sigma + \tilde{\sigma}, \quad (5.10)$$

де

$$\sigma = -\frac{e^2 \tau z}{2Na} \sum_{ij\sigma} \langle X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} \rangle t_{ij}(n), \quad (5.11)$$

провідність у нижній  $(0 - \sigma)$ -підзоні,

$$\tilde{\sigma} = -\frac{e^2 \tau z}{2Na} \sum_{ij\sigma} \langle X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2} \rangle \tilde{t}_{ij}(n), \quad (5.12)$$



- провідність у верхній ( $\uparrow\downarrow -\sigma$ )-підзоні,  $a$  - стала ґратки,  $\tau$  визначається певним механізмом розсіяння,  $z$  - число найближчих сусідів. Вираз (5.10) можна розглядати як узагальнення зонного варіанту класичного результату Друде-Лоренца; дійсно, як буде показано далі, для випадків слабкого, або майже повного заповнення підзон, формула (5.10) переходить у відомі вирази зонної теорії.

Розглянемо деякі наслідки, які виходять із формул (5.11) і (5.12), для моделі, описуваної ефективним гамільтоніаном (5.7).

Якщо скористатися прямокутною густиною станів, то у двополосному наближенні для одноелектронної функції Гріна (однополосному наближенні для одночастинкових спектрів у нижній і верхній підзонах) провідності  $\sigma$  і  $\tilde{\sigma}$  не залежать від конкретизації одночастинкового спектру в підзонах (величини  $\alpha_\sigma$ ,  $\tilde{\alpha}_\sigma$ ,  $\beta$ ,  $\tilde{\beta}$  у формулах для спектрів можуть бути довільні). Тоді для розрахунку середніх у формулах (5.11) і (5.12) можна скористатися виразами, отриманими при розрахунку енергії основного стану. Залежність провідності від ступеня заповнення підзон для випадку, коли відсутнє впорядкування по спіну, дається виразом

$$\sigma = \frac{e^2 \tau z}{a} (n - 2d) \left( \frac{c w(n)}{2 - n} + \frac{d \tilde{w}(n)}{n} \right), \quad (5.13)$$

де  $\langle X_i^0 \rangle = c$ ,  $\langle X_i^2 \rangle = d$  - середні числа (на вузол) дірок і двійок.

Із виразу (5.13) виходить, що провідність  $\sigma(n)$  у вузькій зоні монотонно зростає (від нуля) з ростом концентрації електронів  $n$ , досягає максимуму в точці  $n = 0.6$ , а потім спадає до нуля при  $n = 1$  (значення  $n \simeq 0.6$  і  $n = 1$  отримуються лише за умови нехтування ефектом звуження зони, викликаного кореляційним переносом). Провідність у  $\uparrow\downarrow -\sigma$ -підзоні веде себе аналогічно (з максимумом  $n \simeq 1.4$ , якщо  $\tau_1 = \tau_2 = 0$ ), з тією відмінністю, що максимум провідності тут лежить нижче, ніж у  $(\sigma - 0)$  підзоні (так як  $\tilde{w} < w$ ).

Типові залежності  $\sigma(n)$  показані на рис.2. Зауважимо, що використання більш реалістичних виразів для незбуреної густини станів не змінює якісного характеру отриманих залежностей провідності від ступеня заповнення зони (проте може змінити положення максимумів на кривих  $\sigma(n)$ ).

Природно вважати, що в області параметрів, для яких  $\partial\sigma/\partial n > 1$  - провідність  $n$ - типу, якщо ж  $\partial\sigma/\partial n < 1$ , то провідність - діркового типу; таке визначення типу провідності, зокрема, знімає відоме протиріччя між визначенням типу провідності у вузькій зоні в наближенні Габбарда [2] і результатом "зонного" розгляду вузькозонного матеріалу [49]. При заданій концентрації електронів тип провідно-

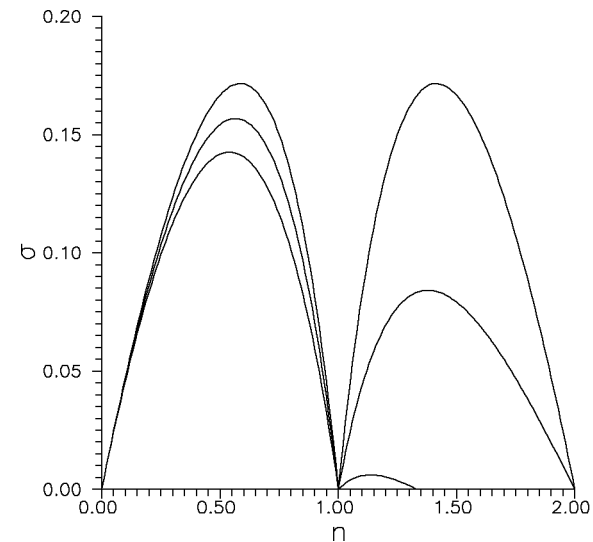


Рис. 2. Залежність провідності  $\sigma/\sigma_0$  легованого мотт-габбардівського діелектрика від концентрації електронів  $n$ : верхні криві -  $\tau_1 = \tau_2 = 0$ ; середні криві -  $\tau_1 = \tau_2 = 0.15$ ; нижні криві -  $\tau_1 = \tau_2 = 0.3$ .

сті може змінюватися за рахунок зміни параметрів  $w$ ,  $\tilde{w}$ , а також внаслідок переходів між підзонами при зовнішніх впливах. Такі переходи під дією сильного електричного поля можуть привести і до від'ємної диференціальної провідності, спостережуваної в багатьох матеріалах, через можливу суттєву відмінність рухливостей носіїв у підзонах (ефективні маси у підзонах можуть сильно відрізнятися). Таким чином, тип  $(n - p)$  провідності у вузькій зоні провідності описуваної ефективним гамільтоніаном (5.7), змінюється (при зміні концентрації електронів від 0 до 2) тричі - в області першого та другого максимумів та біля  $n = 1$  (режим легованого МХД).

Можна бачити, що в області певного типу провідності загальна формула для провідності (5.13) може бути представлена у вигляді формули Друде-Лоренца.

Розглянемо стан кристалу в режимі легованого МХД. Тоді при  $0 < n \leq 1$  - відсутні  $|\uparrow\downarrow\rangle$ -стани, а при  $1 \leq n \leq 2$  -  $|0\rangle$ -стани. Із (5.13) видно, що в області концентрацій  $0 < n < n_c$ , де  $n_c$  відповідає першому максимуму на кривих, показаних на рис. 2 провідність може

бути представлена як

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m_\sigma}, \quad (5.14)$$

де

$$m_\sigma = \frac{z}{4} \frac{(2-n)}{a^2 w(n)(1-n)} \quad (5.15)$$

можна інтерпретувати як ефективну масу носіїв ( $\sigma$ -станів) струму з концентрацією  $n$ . При слабкому заповненні зони ( $n \ll 1$ )

$$m_\sigma \simeq \frac{z}{2a^2 w_0} \quad (5.16)$$

є ефективна маса носія біля дна зони провідності, тобто приходимо до "зонної" формули Друде-Лоренца.

В області електронних концентрацій, які задовільняють умові  $n_c < n < 1$ , - провідність діркового типу:

$$\sigma = \frac{e^2 p \tau}{m_0}, \quad (5.17)$$

де  $p = (1 - n)$  - концентрація дірок,

$$m_0 = \frac{z}{4} \frac{(2-n)}{n a^2 w(n)} \quad (5.18)$$

- ефективна маса дірки. Біля верхнього краю ( $\sigma - 0$ ) підзони

$$m_0 = \frac{z}{4} \frac{1}{a^2 w(n)}, \quad (5.19)$$

що вдвічі менше від ефективної маси електрона біля дна зони; наслідком цієї відмінності у масах провідність (діркова) поблизу  $n = 1$  росте швидше, ніж провідність ( $n$ -типу) на початку заповнення ( $\sigma - 0$ ) підзони.

Аналогічно до цього, в області  $1 < n < \tilde{n}_c$  (де  $\tilde{n}_c$  відповідає максимуму провідності у верхній підзоні) маємо для провідності

$$\tilde{\sigma} = \frac{e^2 d \tau}{m_0}, \quad (5.20)$$

де

$$m_2 = \frac{z}{4} \frac{n}{(2-n)a^2 \tilde{w}(n)} \quad (5.21)$$

-ефективна маса двійок,  $d$  - їх концентрація.

Якщо,  $n_c < n < 2$  то

$$\tilde{\sigma} = \frac{e^2 \tilde{p} \tau}{\tilde{m}_0}, \quad (5.22)$$

де  $p$  є концентрація дірок ( $p = \langle X^\uparrow + X^\downarrow \rangle$ ),

$$\tilde{m}_0 = \frac{z}{4} \frac{n}{(2-n)a^2 \tilde{w}(n)}, \quad (5.23)$$

є ефективна маса дірок; у випадку  $w = \tilde{w}$  ефективна маса електрона біля дна нижньої підзони рівна ефективній масі дірки біля верхнього краю верхньої підзони.

Отримані залежності провідності від концентрації полярних станів у ВЗП можуть пояснити, в принципі, спостережувану залежність провідності від складу в системі NiO-Li<sub>2</sub>O ([49]), де наявність іонів Li<sup>+</sup> приводить до появи дірок (іони Ni<sup>3+</sup>) і переносу їх у ( $\sigma - 0$ ) підзоні (стан легованого МХД).

Зміна типу провідності поблизу половинного заповнення вихідної зони узгоджується із спостережуваною для ряду сполук, як, наприклад, у VO<sub>x</sub> ([10]). В рамках розглядуваної моделі стан МХД в цій сполуці при  $x = 1$  моделюється концентрацією електронів  $n = 1$  (що відповідає наполовину заповненій  $t_{2g}$ -зоні). При  $x > 1$  в VO<sub>x</sub> з'являються "дірки"(V<sup>+</sup>), а при  $x < 1$  - "двійки"(V<sup>3+</sup>). У згоді із викладеним вище експеримент [10] вказує на перехід при  $n \simeq 1$  від провідності  $p$ -типу (при  $x > 1$ ) до провідності  $n$ -типу (при  $x < 1$ ). Аналогічна зміна типу провідності спостерігається і у сполуці Co<sub>x</sub>Fe<sub>3-x</sub>O<sub>4</sub> ([49]).

Електрон-діркова асиметрія (нееквівалентність випадків  $n > 1$  і  $n < 1$ ) в концентраційній залежності  $\sigma(n)$  підтверджується експериментально. В роботі [50] показано, що в металооксидах, в яких 3d-оболонка заповнена менше, ніж наполовину (наприклад, Mn<sub>2</sub>O) провідність набагато більша, ніж у сполуках, в яких 3d-оболонка заповнена наполовину і більше (MnO, NiO).

Більш складною виявляється залежність провідності від концентрації електронів для випадку, коли ( $\sigma - 0$ ) і ( $\uparrow - \sigma$ ) підзони перекриваються (стан мотт-габбардівського провідника). Тут, зокрема, провідність при  $n \simeq 1$  має більш складну залежність, причому в цій області знаки  $\frac{d\sigma}{dn}$  для  $n < 1$  і  $n > 1$  можуть бути протилежні випадку легованого МХД. В цьому випадку важливим може виявитися врахування самоузгодженого зв'язку між зміною концентрації електронів і деформацією кристалу, що ініціюватиме фазовий перехід діелектрик-метал I роду під дією зовнішніх впливів.

## 6. Гамільтоніан моделі з урахуванням зовнішнього тиску

При прикладанні зовнішнього тиску до вузькозонного матеріалу кореляційні ефекти можуть бути адекватно описані в моделі (2.1) за умови врахування перенормування параметрів переносу при деформації кристалічної ґратки.

Під дією зовнішнього тиску  $p$  залежність ширини зони від відносної зміни об'єму  $u = \Delta V/V_0 \sim p$  ( $V_0$  – об'єм елементарної комірки) можна записати у вигляді [51]:

$$w = w_0(1 + \alpha u) \quad (\alpha = \frac{V_0}{w_0} \frac{\partial w}{\partial V} < 0), \quad (6.1)$$

де  $w_0$  – напівширина незбуреної зони. Таким чином, будемо вважати, що інтеграли переносу в моделі з нееквівалентними підзонами [5] повинні бути перенормовані [52]:

$$t \rightarrow t(1 + \alpha u), \quad \tilde{t} \rightarrow \tilde{t}(1 + \beta u), \quad (6.2)$$

де  $\beta$  має зміст аналогічний до  $\alpha$ . Подібне перенормування потрібно провести і для інших матричних величин, що описують перекоки електрона між вузлами кристалічної ґратки. Для спрощення подальших викладок розглянемо випадок  $\beta = \alpha$ , тобто підзони розширюються однаково.

З урахуванням деформації ґратки гамільтоніан в  $X_i^{kl}$ -операторах запишеться таким чином:

$$H = H_0 + H_1 + H'_1, \quad (6.3)$$

де

$$\begin{aligned} H_0 &= -\mu \sum_i (X_i^\uparrow + X_i^\downarrow + 2X_i^2) + U \sum_i X_i^2 + \frac{1}{2} NV_0 \kappa u^2, \\ H_1 &= \sum'_{ij\sigma} (1 + \alpha u) t_{ij}(n) X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \sum'_{ij\sigma} (1 + \alpha u) \tilde{t}_{ij}(n) X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2}, \\ H'_1 &= \sum'_{ij\sigma} ((1 + \alpha u) t'_{ij}(n) \eta_\sigma X_i^{\sigma 0} X_j^{\sigma 2} + e.c.). \end{aligned}$$

Останній доданок в  $H_0$  описує енергію пружності однорідно здеформованого кристалу,  $\kappa$  – жорсткість ґратки кристалу,  $N$  – число вузлів ґратки.

Гамільтоніан (6.3) було використано в роботах [52]- [54] для дослідження переходу з металічної в діелектричну фазу у вузькозонному матеріалі з електрон-дірковою асиметрією. Отримані в роботах [52]- [54] результати дозволили пояснити той факт, що для деяких вузькозонних матеріалів збільшення зовнішнього тиску при заданій температурі викликає перехід метал-діелектрик [10]. Наприклад, для  $(V_{0.96}Cr_{0.04})_2O_3$  при кімнатній температурі перехід відбувається під тиском 13 кбар [55]. Для  $NiS_2$  перехід при цій же температурі із стану парамагнітного діелектрика в стан металічного парамагнетика відбувається при зовнішньому тиску 46 кбар [56, 57]. На цій основі можна також пояснити спостережувані переходи діелектрик-метал під дією зовнішнього тиску в  $NiO$  [58],  $Fe_3O_4$ ,  $Cr_2O_3$  та інших оксидах перехідних металів [59].

## 7. Залежність провідності від тиску в області переходу метал-діелектрик при половинному заповненні зони

Використовуючи викладений вище підхід до врахування зовнішнього тиску, розглянемо залежність провідності від тиску при проміжних значеннях кулонівської кореляції, при яких в системі відбувається перехід метал-діелектрик. Виведену в розділі 5 формулу для провідності, коли відсутнє впорядкування по спіну, в цьому випадку запишемо у вигляді:

$$\sigma = \sigma_0(1 - \tau_1 - \tau_2)(1 - 2d)d, \quad (7.4)$$

де  $d$  - концентрація подвійно зайнятих вузлів,

$$\sigma_0 = \frac{2e^2\tau z}{a} w \quad (7.5)$$

– константа, що має розмірність провідності. Залежність ширини нижньої зони від тиску буде визначатися формулою (6.1).

Рис. 3 ілюструє залежність провідності у нижній габбардівській підзоні, розрахованої за формулою (7.4), від  $\frac{U}{2w}$  при різних значеннях відносної деформації кристалу у випадку  $n = 1$ ,  $\tau_1 = \tau_2 = 0$ . У випадку прикладання зовнішнього тиску маємо збільшення області значень  $\frac{U}{2w}$ , при яких стан системи є металічним. Також з рисунка видно, що прикладання зовнішнього тиску не тільки розширює металічну область в моделі (на рис. - області де  $\sigma \neq 0$ ), а й суттєво збільшує величину провідності у металічній фазі.

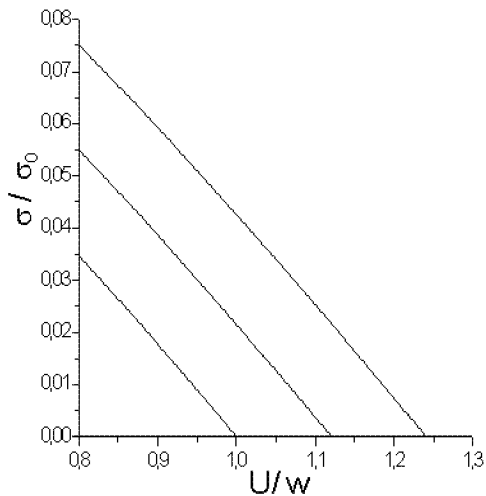


Рис. 3. Залежності провідності  $\sigma/\sigma_0$  легованого мотт-габбардівського діелектрика від  $\frac{U}{2w}$  при  $n = 1$  та різних відносних деформаціях кристалу  $\alpha_i$ . Нижня лінія -  $\alpha_i = 0$ , середня -  $\alpha_i = 0.06$ , верхня -  $\alpha_i = 0.12$

## 8. Залежність провідності від температури та тиску при $U \gg w$

В розглядуваному тут випадку сильної внутрішньоатомної кулонівської кореляції, при концентрації електронів  $n < 1$  функція (3.15) запишеться таким чином:

$$G_{\mathbf{k}}(E) = \frac{1}{2\pi} \frac{1 - \frac{n}{2}}{E - E(\mathbf{k})}, \quad (8.6)$$

де

$$E(\mathbf{k}) = -\mu + \alpha^* t_{\mathbf{k}}(n) + \beta^* \quad (8.7)$$

задає енергетичний спектр нижньої габбардівської підзони. Прийемо прямокутну густину станів:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - t(\mathbf{k})) = \frac{1}{2w} \theta(w^2 - E^2). \quad (8.8)$$

Для величин  $\alpha^*$  та  $\beta^*$  маємо:

$$\alpha^* = \frac{2-n}{2} + \frac{n^2}{2(2-n)},$$

$$\beta^* = \frac{2w(1-n)n}{(2-n)^2},$$

Величина  $\alpha^*$  описує кореляційне звуження зони,  $\beta^*$  – перенормування хімпотенціалу:

$$\mu^* = \mu - \beta^*. \quad (8.9)$$

Наведемо тут рівняння для знаходження хімічного потенціалу числовими методами. З умови

$$\frac{n}{2} = \frac{1 - \frac{n}{2}}{2w} \int_{-w}^w \frac{d\epsilon}{\exp\left(\frac{E(\epsilon)}{\theta}\right) + 1} \quad (8.10)$$

де  $\theta = k_B T$  ( $k_B$  – стала Больцмана), отримуємо, інтегруючи з використанням виразу (8.7), рівняння

$$\frac{n}{2} = \frac{1 - \frac{n}{2}}{2w} \left( 2w - \frac{\theta}{\alpha^*} \ln \frac{1 + \exp\left(-\frac{\mu^*}{\theta}\right) \exp\left(\frac{\alpha^* w}{\theta}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{\mu^*}{\theta}\right) \exp\left(-\frac{\alpha^* w}{\theta}\right)} \right)$$

яке зручно подати у вигляді

$$\frac{n}{2-n} = 1 - \frac{\theta}{2w\alpha^*} \ln \frac{1 + \exp\left(-\frac{\mu^*}{\theta}\right) \exp\left(\frac{\alpha^* w}{\theta}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{\mu^*}{\theta}\right) \exp\left(-\frac{\alpha^* w}{\theta}\right)}, \quad (8.11)$$

де  $w = w(n) = w_0(1 - \tau_1 n)$ ,  $w_0$  – ширина незбуреної зони.

У випадку, коли концентрація електронів  $n > 1$ , функція (3.15) набуде вигляду:

$$\tilde{G}_{\mathbf{k}}(E) = \frac{1}{2\pi} \frac{\frac{n}{2}}{E - \tilde{E}(\mathbf{k})}, \quad (8.12)$$

де

$$\tilde{E}(\mathbf{k}) = -\mu + U + \tilde{\alpha}^* \tilde{t}_{\mathbf{k}}(n) + \tilde{\beta}^* \quad (8.13)$$

задає енергетичний спектр верхньої габбардівської підзони. Для величин  $\tilde{\alpha}^*$  та  $\tilde{\beta}^*$  маємо:

$$\tilde{\alpha}^* = \frac{n}{2} + \frac{(2-n)^2}{2n},$$

$$\tilde{\beta}^* = \frac{2\tilde{w}(n-1)(2-n)}{n^2},$$

Величина  $\tilde{\alpha}^*$  описує кореляційне звуження зони,  $\tilde{\beta}^*$  – перенормування хімпотенціалу:

$$\mu^* = \mu - \tilde{\beta}^* - U. \quad (8.14)$$

Хімічний потенціал у цьому випадку знаходимо з умови

$$2d = \frac{n}{4\tilde{w}} \int_{-\tilde{w}}^{\tilde{w}} \frac{d\epsilon}{\exp\left(\frac{\tilde{E}(\epsilon)}{\theta}\right) + 1}. \quad (8.15)$$

При  $n > 1$  та  $U \rightarrow \infty$  маємо  $d = n - 1$ , тому після інтегрування отримуємо наступне рівняння для розрахунку хімпотенціалу

$$\frac{4(n-1)}{n} = 1 - \frac{\theta}{2\tilde{w}\tilde{\alpha}^*} \ln \frac{1 + \exp\left(-\frac{\mu^*}{\theta}\right) \exp\left(\frac{\tilde{\alpha}^*\tilde{w}}{\theta}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{\mu^*}{\theta}\right) \exp\left(-\frac{\tilde{\alpha}^*\tilde{w}}{\theta}\right)}, \quad (8.16)$$

де  $w = w(n) = w_0(1 - \tau_1 n)$ .

Розв'язавши рівняння (8.11) та (8.16) чисельно, отримаємо з виразу (5.11) провідність у нижній габбардівській підзоні, а з виразу (5.12) провідність у верхній габбардівській підзоні як функції температури, відносної деформації ґратки (залежної від тиску), концентрації електронів та параметрів корельованого переносу.

На рис. 4а показані залежності провідності у нижній підзоні від температури за відсутності корельованого переносу (цей випадок відповідає моделі Габбарда) при концентраціях електронів  $n = 0.3, 0.6, 0.9$ . При зростанні температури провідність у всіх трьох випадках монотонно спадає (металічний тип провідності), при цьому провідність є тим більшою, чим ближчим є заповнення підзони до половинного (зона заповнена на чверть). Подібна поведінка статичної провідності була отримана в роботах [15, 16, 34]. Залежність провідності від температури в системі із корельованим переносом показана на рис. 4б. При фіксованій концентрації електронів провідність є тим меншою, чим більшим є параметр корельованого переносу електронів, оскільки корельований перенос приводить до звуження зони [5]. Прикладання зовнішнього тиску має зворотній ефект (рис.4с, 4д) – стискання приводить до розширення зони, таким чином, до зростання провідності. Зауважимо тут, що для деяких сполук перехідних металів легування може бути еквівалентним до прикладання зовнішнього тиску: у сполуці  $(V_{1-x}M_x)_2O_3$  (де  $M=Cr, Ti$ ) заміна іонів ванадію на іони титану еквівалентна збільшенню зовнішнього тиску, а легування хромом аналогічне зменшенню зовнішнього тиску.

Подібно, для мотт-габбардівської сполуки  $NiS_{2-x}Se_x$  легування селеном еквівалентне збільшенню зовнішнього тиску. Зауважимо, що на рис. 4б крива, побудована для концентрації електронів  $n = 0.7$  співпадає із відповідною кривою для  $n = 1.3$  внаслідок електрон-діркової симетрії моделі за відсутності корельованого переносу.

Концентраційні залежності провідності при відмінній від нуля абсолютній температурі показані на рис. 5. Як видно з наведених графіків, провідність вузькозонної системи при відмінній від нуля температурі сильно залежить від легування та температури (рис. 5а). Корельований перенос, як і зростання температури, приводить до зменшення провідності (рис. 5б, 5с), причому при  $\tau_2 > 0$  з'являється асиметрія відносно половинного заповнення. Як і в основному стані, дослідженому в розділі 5, тип провідності змінюється (при зміні концентрації електронів від 0 до 2) тричі - в області першого та другого максимумів та біля  $n = 1$ . Відмінність від випадку нульової абсолютної температури полягає у тому, що положення максимуму повільно зсувається до половинного заповнення зони при зростанні температури. Прикладання зовнішнього тиску приводить до зростання провідності (рис. 5д), але для фізичних значень температури та відносної деформації кристалу зміна провідності є помітною лише в околі максимуму (в майже на чверть та майже на три чверті заповненій зоні).

Результат методу композитних операторів [14] є близьким до отриманого нами результату для випадку сильних міжелектронних взаємодій. У граничному випадку моделі Габбарда криві 1 на рис. 5а добре узгоджуються із числовими розрахунками [25].

## 9. Висновки

Отримані нами результати для провідності легуваного мотт-габбардівського матеріалу при відмінних від абсолютного нуля температурах дозволяють трактувати експериментальні дані для сполук перехідних металів: зміна типу провідності поблизу половинного заповнення вихідної зони узгоджується із спостережуваною для ряду сполук, як, наприклад, у  $VO_x$  ([10]). В рамках розглядуваної моделі стан МХД в цій сполуці при  $x = 1$  моделюється концентрацією електронів  $n = 1$  (що відповідає наполовину заповненій  $t_{2g}$ -зоні). При  $x > 1$  в  $VO_x$  з'являються "дірки" ( $V^+$ ), а при  $x < 1$  - "двійки" ( $V^{3+}$ ). У згоді із викладеним вище експеримент [10] вказує на перехід при  $n \simeq 1$  від провідності  $p$ -типу (при  $x > 1$ ) до провідності  $n$ -типу (при  $x < 1$ ). Аналогічна зміна типу провідності спостерігається і у сполуці

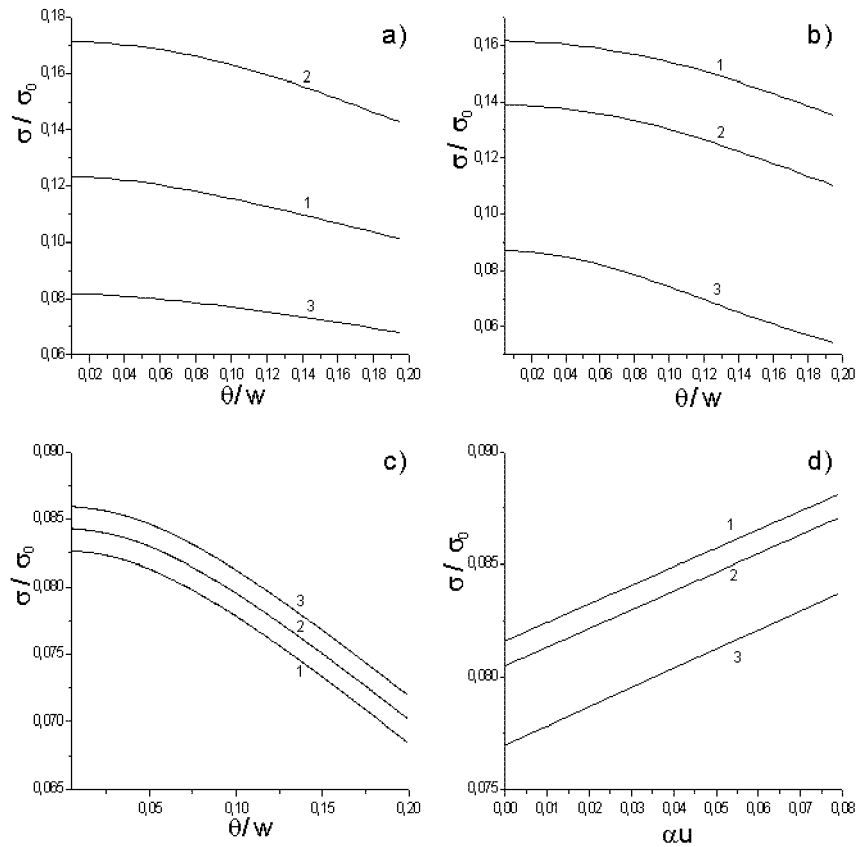


Рис. 4. Залежності провідності  $\sigma/\sigma_0$  легованого мотт-габбардівського діелектрика а) від температури за відсутності корельованого переносу: крива 1 відповідає концентрації електронів  $n = 0.3$ , крива 2 –  $n = 0.6$ , крива 3 –  $n = 0.9$ ; б) від температури при значеннях: крива 1 –  $\tau_1 = \tau_2 = 0$ ,  $n = 0.7$ , крива 2 –  $\tau_1 = \tau_2 = 0.2$ ,  $n = 0.7$ , крива 3 –  $\tau_1 = \tau_2 = 0.2$ ,  $n = 1.3$ ; в) від температури при прикладанні зовнішнього тиску:  $\tau_1 = \tau_2 = 0$ ,  $n = 0.9$ , крива 1 –  $\alpha u = 0.01$ , крива 2 –  $\alpha u = 0.03$ , крива 3 –  $\alpha u = 0.05$ ; д) від відносної деформації кристалу при різних температурах:  $\tau_1 = \tau_2 = 0$ ,  $n = 0.9$ , крива 1 –  $\theta/w = 0.02$ , крива 2 –  $\theta/w = 0.05$ , крива 3 –  $\theta/w = 0.1$ .

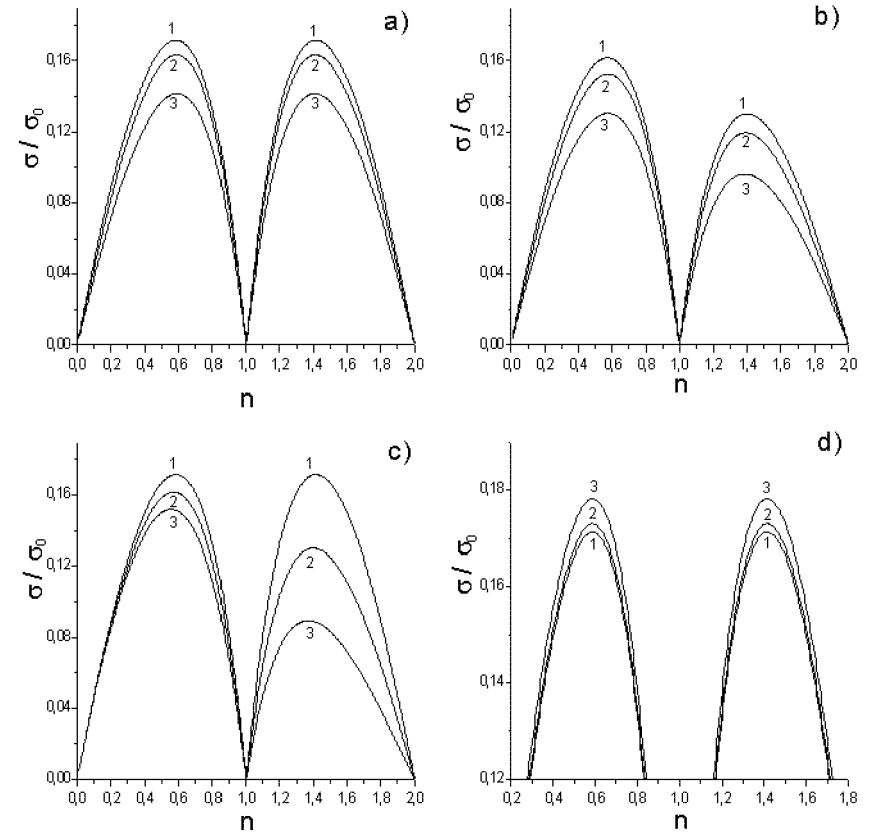


Рис. 5. Концентраційні залежності провідності  $\sigma/\sigma_0$  легованого мотт-габбардівського діелектрика а) за відсутності корельованого переносу: крива 1 відповідає температурі  $\theta/w = 0.01$ , крива 2 –  $\theta/w = 0.1$ , крива 3 –  $\theta/w = 0.2$ ; б) при значеннях параметрів корельованого переносу  $\tau_1 = \tau_2 = 0.1$ : крива 1 – відповідає температурі  $\theta/w = 0.01$ , крива 2 –  $\theta/w = 0.1$ , крива 3 –  $\theta/w = 0.2$ ; в) при температурі  $\theta/w = 0.1$ : крива 1 –  $\tau_1 = \tau_2 = 0$ , крива 2 –  $\tau_1 = \tau_2 = 0.1$ , крива 3 –  $\tau_1 = \tau_2 = 0.2$ ; д) при різних відносних деформаціях кристалу:  $\theta/w = 0.2$ ,  $\tau_1 = \tau_2 = 0$ , крива 1 –  $\alpha u = 0$ , крива 2 –  $\alpha u = 0.02$ , крива 3 –  $\alpha u = 0.04$ .

$\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$  [49]).

Електрон-діркова асиметрія (нееквівалентність випадків  $n > 1$  і  $n < 1$ ) в концентраційній залежності  $\sigma(n)$  підтверджується експериментально. В роботі [50] показано, що в металооксидах, в яких 3d-оболонка заповнена менше, ніж наполовину (наприклад,  $\text{Mn}_2\text{O}$ ) провідність набагато більша, ніж у сполуках, в яких 3d-оболонка заповнена наполовину і більше ( $\text{MnO}, \text{NiO}$ ).

Дослідження методом точної діагоналізації малих кластерів [25] для кластера 4 x 4 вузла приводять до подібної концентраційної залежності статичної провідності (в цитованій роботі розглянуто лише область  $0 < n < 1$ ), з максимумом поблизу половинного заповнення. Такий же результат отримано в квантовому методі Монте-Карло для кластера 8 x 8 вузлів [27]. При достатньо великому параметрі внутрішньоатомного кулонівського відштовхування ( $U/t = 100$ ) положення максимуму, знайдене з застосуванням методу точної діагоналізації, є близьким до 0.6, що теж добре узгоджується із нашими результатами. Недоліком методу точної діагоналізації в режимі великих значень  $U$  є нефізична поведінка концентраційної залежності провідності поблизу половинного заповнення: розраховане значення провідності може бути від'ємним при певних значеннях параметрів, що пов'язано із скінченними розмірами досліджуваних кластерів ("проблема знаку"). Отримані нами результати дозволяють побудувати графік температурної залежності питомого опору матеріалу із сильними електронними кореляціями (рис. 6). Ця залежність адекватно описує поведінку провідності, що спостерігається експериментально [9] та узгоджується із результатами DMFT [33, 60].

Нами також отримано добре узгодження з результатами теоретичних досліджень провідності в моделі Габбарда (що є частковим випадком розглянутої тут моделі (2.1)) як аналітичними [14–16], так і числовими [25] методами.

Отримані залежності якісно узгоджуються із наявними експериментальними даними для широкого класу систем із сильними електронними кореляціями. Це підтверджує висновок робіт [25, 48] про визначальну роль квазічастинкових збурень всередині підзон у статичну провідність у однорідному зовнішньому полі. Для отримання кількісного узгодження необхідно, крім міжзонних переходів, врахувати також матричні елементи корельованого переносу для конкретних сполук.

Таким чином, застосування підходу, розвиненого в роботах [47, 48] до моделі вузькозонного матеріалу з електрон-дірковою асиметрією дозволяє описати залежності провідності мотт-габбардівського ма-

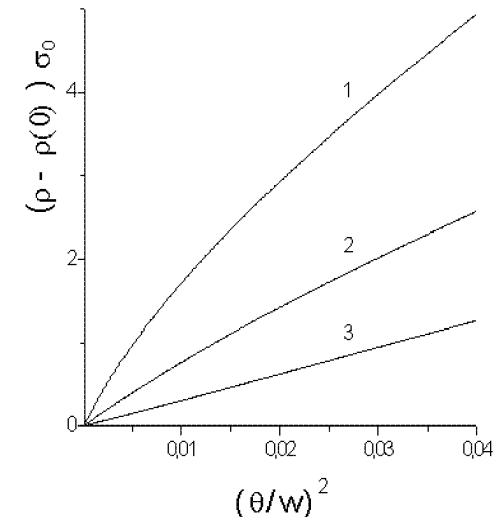


Рис. 6. Температурна залежність питомого опору при різних ступенях легування  $x = 1 - n$ , крива 1 –  $x = 0.05$ , крива 2 –  $x = 0.1$ , крива 3 –  $x = 0.3$

теріалу від температури, тиску та легування.

## 10. Подяки

Автори вдячні проф. Стасюку І.В. та Швайці А.М. за плідні обговорення. Робота виконувалася за фінансової підтримки Державного фонду фундаментальних досліджень (проект N 02.07/266).

## Література

1. Дидух Л. Д., Прядко Л. Ф., Стасюк І. В., *Корреляційні ефекти в матеріалах з узкими зонами провідності* (Вища школа, Львів, 1978).
2. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands // Proc. Roy. Soc.- 1963.- vol. A276, No. 1369.- p. 238-257;
3. Didukh L., Ukrainian–French Symposium "Condensed Matter: Science and Industry". Abstracts, p.275 (Lviv, 1993).
4. Дідух Л. Д., Препринт Інст. фіз. конд. сист. АН України, Львів, ICMP-96-20U, 1996.

5. Дідух Л. Модель вузькозонного матеріалу з електронно-дірковою асиметрією // Журн. фіз. досл.- 1997.- Т. 1, No2.- С. 241-250.
6. Aligia A. A., Arrachea L., and Gagliano E. R. Phase diagram of extended Hubbard model with correlated hopping at half filling // Phys. Rev. B.- 1995.- vol. 51, No. 19.- p. 13774-13777.
7. Lin H. Q. and Hirsch J. E. Pairing in a tight-binding model with occupation-dependent hopping rate: exact diagonalization study // Phys. Rev. B.- 1995.- vol. 52, No. 22.- p. 16155-16164.
8. Gagliano E. R., Aligia A. A., Arrachea L., Avignon M. Single-particle spectral function of a generalized Hubbard model: Metal-insulator transition // Phys. Rev. B.- 1995.- vol. 51, No. 20.- p. 14012-14019.
9. Imada M., Fujimori A., and Tokura Y. Metal-insulator transitions // Rev. Mod. Phys.- 1998.- vol. 70, No. 4.- p. 1039-1264.
10. Mott N. F. Metal-insulator transition.- London: Taylor & Francis, 1990.- 286 p.
11. Kubo R. J. Phys. Soc. Jpn. **12** (1957) 570.
12. Ohata N. and Kubo R. J. Phys. Soc. Jpn. **28** (1970) 1402.
13. Зубарев Д. Н. Двухвременные функции Грина в статистической физике // Успехи физ. наук.- 1960.- Т. 71, №1.- С. 71-115.
14. Mancini W. and Villiani D. The conductivity tensor for the Hubbard model.- Los Alamos: 1999.- 16 p. (E-print / cond-mat/9910463).
15. Hirsch J. E. Metallic ferromagnetism without exchange splitting // Phys. Rev. B.-1999.- vol. 59, No. 9.- p. 6256-6265.
16. Hirsch J. E. Ferromagnetism from Undressing.- Los Alamos: 2000.- 11 p. (E-print / cond-mat/0007454).
17. Brenig W. Z. Phys.- 1992.- vol. 89.- p. 187.
18. Wernbter S. and Tewordt L. Physica C. - 1993.- vol. 211. - p. 132.
19. Goetze W., Woelfle P. Homogeneous dynamical conductivity of simple metals // Phys. Rev. B.-1972.- vol. 6, No. 4.- p. 1226-1238.
20. Plakida N. Optical conductivity in the Hubbard model // J. Phys. Soc. Jpn.-1996.- vol. 65, No. 12.- p. 3964-3972.
21. Fye R., Martins M. and Scalettar R. T. Binding of holes in one-dimensional Hubbard chains // Phys. Rev. B.- 1990.- vol. 42, No. 10.- p. 6809-6812.
22. Fye R., Martins M., Scalapino D., Wagner J., and Hanke W. Drude weight, optical conductivity, and flux properties of one-dimensional Hubbard rings // Phys. Rev. B.-1991.- vol. 44, No. 13.- p. 6909-6915.
23. Stephan W. and Horsh P. Optical properties of one- and two-dimensional Hubbard and  $t - J$  models // Phys. Rev. B.-1990.- vol. 42, No. 13.- p. 8736-8739.
24. Wagner J., Hanke W., and Scalapino D. Optical, magnetic and

- single-particle excitations in the multiband Hubbard model for cuprate superconductors // Phys. Rev. B.- 1991.- vol. 43, No. 13.- p. 10517-10529.
25. Dagotto E. Correlated electron in high-temperature superconductors // Rev. of Mod. Phys.-1994.- vol. 66, No. 3.- p. 763-841.
26. Moreo A. and Dagoto E. Optical conductivity of the Hubbard and  $t - J$  models // Phys. Rev. B.-1990.- vol. 42, No. 7.- p. 4786-4789.
27. Scalapino D. J., White S. R., Zhang S. C. Superfluid density and the Drude weight of the Hubbard model // Phys. Rev. Lett. - 1992.- vol. 68.- pp. 2830-2833.
28. Bulut N., Scalapino D. J., White S. R. Electronic properties of the insulating half-filled Hubbard model // Phys. Rev. Lett.-1994.- vol. 73, No. 5.- p. 748-751.
29. Plakida N. M. High-Temperature Superconductivity (Springer-Verlag, 1995).
30. L. Tan and J. Callaway Dynamic conductivity of strongly correlated electrons: The Hubbard model on a cubic lattice // Phys. Rev. B. - 1992.- vol. 46.- pp. 5499-5506.
31. Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and limit of infinite dimensions // Rev. Mod. Phys.- 1996.- vol. 68, No. 1.- p. 13-125.
32. Georges A., Krauth W. Physical properties of the half-filled Hubbard model in infinite dimensions // Phys. Rev. B.- 1993.- vol. 48, No. 10.- p. 7167-7182.
33. Pruschke Th., Cox D. L., Jarrel M. Transport properties of the infinite-dimensional Hubbard model // Europhys. Lett.- 1993.- vol. 21, No. 5.- p. 593-598.
34. Rozenberg M., Kotliar G., Kajueter H., Thomas G.A., Rapkine D.H., Honig J.M., Metcalf P. Optical conductivity of Mott-Hubbard systems // Phys. Rev. Lett.- 1995.- vol. 75, No. 1.- p. 105-108.
35. Didukh L. A modified form of the polar model of crystals // Acta Physica Polonica B.-2000.- vol.31, No. 12.- p.3097-3133.
36. Дідух Л. Д., Скоренький Ю. Л. Енергія основного стану і перехід метал-діелектрик у моделі вузькозонного парамагнетика // Журн. Фіз. Досл.- 2001.- Т. 5, No. 1.- p.31-38.
37. Didukh L., Hankevych V., Dovhopaty Yu. Metal-insulator transition: a new mean-field approximation // Physica B.- 1999.- vol. 259-261.- p. 719-720.
38. Ikeda M. A., Larsen U., Mattuck R. D. Another approach to localized magnetic moments in the Hubbard model // Phys. Lett.-1972.- vol. A39.- p. 55-56.



39. Roth L. M. New method for linearizing many-body equations of motion in statistical mechanics // Phys. Rev. Lett.- 1968.- vol. 20, No. 25.- p. 1431-1434.
40. Harris A. B. and Lange R. V. Single-particle excitations in narrow energy bands // Phys. Rev.- 1967.- vol. 157, No. 2.- p. 295-314.
41. Edwards D. M., Hewson A. C. Comment on Hubbard's theory of the Mott transition // Rev. Mod. Phys.- 1968.- vol. 40, No. 4.- p. 810-811.
42. Kawabata A. One electron Green's function in magnetic insulators // Prog. Theor. Phys.- 1972.- vol. 48.- p. 1793-1808.
43. B. Mehlig, H. Eskes, R. Hayn, Meinders M. B. J. Single-particle spectral density of the Hubbard model // Phys. Rev. B.- 1995.- vol. 52, No. 4.- p. 2463-2470.
44. Изюмов Ю. А., Чащин Н. И. Спектр квазичастиц в модели Хаббарда с сильным кулоновским взаимодействием // ФММ.- 1997.- Т. 84, №6.- С. 16-28.
45. Бугаев А. А., Захарченя Б. П., Чудновский Ф. А. *Фазовый переход металл-полупроводник и его применение*.- Л.: Наука, 1979.- 183 с.
46. Ирхин В. Ю., Кацнельсон М. И. Электрон-магнонное взаимодействие в коллективизированных ферромагнетиках // Физ. мет. и металловед.- 1988. Т. 60, вып. 1. -С. 41-52.
47. Bari R. H., Adler D., Lange R. V. Electrical conductivity in narrow energy bands // Phys. Rev. B.- 1970.- vol. 2, №8.- p. 2898-2905.
48. Дидух Л. Д. Корреляционные эффекты в материалах с неэквивалентными хаббардовскими подзонами.- Львов: 1992.- 32 с. (Препр./АН Украины. Ин-т физ. конденс. систем; ИФКС-92-9Р).
49. Крупичка С. *Физика ферритов и родственных им магнитных окислов*: Пер. с нем.- М.: Мир, 1976.- Т. 2.- 504 с.
50. Jonker G. H. // J. Phys. Chem. Solids.- 1959.- vol. 9.-p. 165.
51. Григорчук Р. А., Стасюк И. В. Электрон-деформационное взаимодействие и сжатие решетки в кристаллах, описываемых моделью Хаббарда // Укр. физ. журн.- 1980.- Т. 25, №3.- С. 404-410.
52. Didukh L., Hankevych V. Temperature-induced metal-insulator transition in a non-symmetric Hubbard model at half-filling // Condensed Matter Physics.- 1999.- vol. 2, No. 3 (19).- p. 447-452.
53. Дидух Л. Д., Ганкевич В. В. О корреляционных эффектах в узкозонной модели с электрон-дырочной асимметрией // Физика низких температур.- 1999.- Т. 25, №5.- С. 481-486.
54. Didukh L. and Hankevych V. Metal-insulator transition in a generalized Hubbard model with correlated hopping at half-filling // phys.

- stat. sol. (b).- 1999.- vol. 211, No. 2.- p. 703-712.
55. Mc Whan D. B., Remeika J. B. Metal-insulator transition in metaloxides // Phys. Rev. B.- 1970.- vol. 2.- p. 3734-3739.
56. Wilson J. A. and Pitt G. D. Metal-insulator transition in NiS<sub>2</sub> // Phil. Mag.- 1971.- vol. 23.- p. 1297-1310.
57. Wilson J.A. *The Metallic and Nonmetallic States of Matter*.- London: Taylor & Francis, 1985.
58. Kawai N., Mochisuki S. Insulator-metal transition in NiO // Solid State Commun.- 1971.- vol. 9, No. 16.- p. 1393-1395.
59. Kawai N., Mochisuki S. Metallic states in the 3d-transition metal oxides, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and TiO<sub>2</sub> under static high pressure // Phys. Lett. A.- 1971.- vol. 37, No. 1.- p. 54-55.
60. Uhrig G., Vollhardt D. Drude weight and dc-conductivity of correlated electrons.- Los Alamos: 1995.- 15 p. (E-print / cond-mat/9504017).

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Леонід Дмитрович Дідух  
Юрій Любомирович Скоренький  
Олександр Іванович Крамар  
Юрій Миронович Довгоп'ятий

ВПЛИВ ЛЕГУВАННЯ, ЗМІНИ ТЕМПЕРАТУРИ ТА ДЕФОРМАЦІЇ НА  
ЕЛЕКТРОННУ ПРОВІДНІСТЬ МАТЕРІАЛУ З СИЛЬНИМИ  
ЕЛЕКТРОННИМИ КОРЕЛЯЦІЯМИ

Роботу отримано 16 грудня 2003 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені