

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-97-26U

Л. Дідух*, В.Ганкевич*, Ю.Довгоп'ятий*

ПЕРЕХІД МЕТАЛ-ДІЕЛЕКТРИК У ВУЗЬКОЗОННІЙ
МОДЕЛІ З НЕЕКВІВАЛЕНТНИМИ ГАББАРДІВСЬКИМИ
ПІДЗОНАМИ

*Тернопільський державний технічний університет ім. І. Пулюя,
282001, Тернопіль, вул. Руська, 56

УДК: 538.1

PACS: 71.10.Fd, 71.30.+h

Перехід метал-діелектрик у вузькозонній моделі з нееквівалентними габбардівськими підзонами.

Л. Дідух, В.Ганкевич, Ю.Довгоп'ятий

Анотація. В роботі досліджено перехід метал-діелектрик в моделі вузькозонного матеріалу з нееквівалентними габбардівськими підзонами при половинному заповненні зони та нульових температурах. Знайдено умови, при яких реалізується діелектричний і металічний стани. Отримано одночастинковий електронний спектр, залежності ширини енергетичної щільності, концентрації носіїв струму і хімічного потенціалу від параметрів системи.

Metal-insulator transition in narrow-band model with non-equivalent Hubbard subbands

L. Didukh, V.Hankevych, Yu.Dovhopyaty

Abstract. The transition from an insulating to a metallic state is studied in a model of narrow-band material with non-equivalent Hubbard subbands at half filling and zero temperature. Single-particle Green function is obtained by the variant of method of an approximate second quantization in a generalize Hartree-Fock approximation. The conditions for a metallic and an insulating states are determined. The concentration of polar states c , chemical potential of the electrons is found. We obtain an energy-gap as the function of c , on-site interaction U , half-width of "hole" band w and half-width of "twice" band \tilde{w} .

Подається в Журнал фізичних досліджень
Submitted to Journal of Physical Studies

1. Вступ

Особливістю моделі Габбарда [1] і вузькозонних моделей генетично пов'язаних з нею (наприклад $t - J$ моделі) є електрон-діркова симетрія. Одним із проявів цієї симетрії є еквівалентність нижньої і верхньої квазічастинкових габбардівських 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 електрон-електронної взаємодії

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

$$\times \phi(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_k) |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 d\mathbf{r} d\mathbf{r}',$$

які описують переходи електронів між i та j вузлами (ϕ -функції – функції Ваньє). В роботах [2, 3] була обґрунтована принципова необхідність узагальнення моделі Габбарда врахуванням двох типів кореляційного 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 [4, 5, 6].

Важливою проблемою, що виникає тут, є проблема переходу діелектрик-метал при зміні параметрів системи, яка є однією з центральних у фізиці вузькозонних систем (див. напр. огляд [7]).

В роботі [3] був запропонований новий підхід до розгляду одночастинкового енергетичного спектру вузькозонних систем, який приводить до коректного опису фазового переходу метал-діелектрик. Підхід ґрунтується на використанні варіанту методу наближеного вторинного квантування в узагальненому наближенні Гартрі-Фока [8]. При цьому для моделі Габбарда ширина енергетичної щільності

$$\Delta E = -2w(1 - 2c) + \sqrt{U^2 + (4cw)^2}, \quad (1.2)$$

концентрація полярних станів

$$c = \frac{1}{4} + \frac{U}{32wc} \ln(1 - 4c) \quad (2w > U), \quad (1.3)$$

w – напівширина зони провідності, U – значення кулонівського відштовхування двох електронів з протилежними спінами на одному й тому ж вузлі.

В даній роботі досліджено фазовий перехід метал-діелектрик в моделі вузькозонного матеріалу з нееквівалентними габбардівськими підзонами. Знайдено умови при яких реалізується діелектричний і металічний стани. Отримано одночастинковий електронний спектр, залежності ширини енергетичної щільності, концентрації носіїв струму і хімічного потенціалу від параметрів системи для випадку напівзаповненої зони при нульових температурах.

2. Гамільтоніан моделі

Запишемо гамільтоніан системи s -електронів зони провідності, представлений через функції Ваньє, у вигляді [3]:

$$H = -\mu \sum_{i\sigma} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} + \sum'_{ij\sigma} t_{ij}(n) a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + \quad (2.1)$$

$$+ \sum'_{ij\sigma} (T(ij) a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} n_{i\bar{\sigma}} + e.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum'_{ij\sigma\sigma'} J(ij) a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma'}^{\dagger} a_{i\sigma'} a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum'_{ij\sigma\sigma'} V(ij) n_{i\sigma} n_{j\sigma'},$$

де $a_{i\sigma}^{\dagger}, a_{i\sigma}$ – оператори народження і знищення електрона зі спіном σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) на вузлі i ; μ – хімічний потенціал;

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

– ефективний концентраційно залежний інтеграл переносу; $t(ij)$ відповідає електрон-іонній взаємодії; $T(ij) = J(iijj)$, $J(ij) = J(ijji)$, $V(ij) = J(ijij)$ – матричні елементи, які описують електронні переходи між вузлами кристалічної ґратки за рахунок електрон-електронної взаємодії (вузли i та j найближчі);

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

– ефективний інтеграл переносу електронів, який корельований за населеністю інших вузлів; $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma}$. $n = \langle n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \rangle = \frac{N_e}{N}$ – середнє число електронів на вузол (N_e – число електронів в зоні, N – число вузлів). Штрихи біля сум у виразі (2.1) означають, що $i \neq j$.

Гамільтоніан (2.1) враховує основні типи взаємодій у вузькій орбітально невідродженій зоні: міжвузловий перенос електронів – друга, третя сума в (2.1), кулонівське відштовхування на одному вузлі – четверта сума, міжатомну обмінну взаємодію – п'ята сума, міжатомну кулонівську взаємодію – шоста сума. Відзначимо також, що третя сума описує кореляційні переходи, для яких характерним є те, що вони відбуваються за участю двократно зайнятих вузлів.

Перейдемо в (2.1) від електронних операторів до X_i^{kl} -операторів Габбарда [9] за допомогою співвідношень [10, 11]:

$$\begin{aligned} a_{i\uparrow}^{\dagger} &= X_i^{2\downarrow} - X_i^{\uparrow 0}, & a_{i\uparrow} &= X_i^{\downarrow 2} - X_i^{0\uparrow} \\ a_{i\downarrow}^{\dagger} &= X_i^{2\uparrow} + X_i^{\downarrow 0}, & a_{i\downarrow} &= X_i^{\uparrow 2} + X_i^{0\downarrow}, \end{aligned}$$

де X_i^{kl} – оператори переходу вузла із стану $|l\rangle$ в стан $|k\rangle$; стан $|0\rangle$ відповідає вузлу, не зайнятому електроном (дірка), $|\sigma\rangle \equiv a_{i\sigma}^{\dagger}|0\rangle$ – однократно зайнятий (електрон зі спіном σ) стан, $|2\rangle \equiv a_{i\uparrow}^{\dagger}a_{i\downarrow}^{\dagger}|0\rangle$ – двократно зайнятий (двома електронами з протилежними спінами) стан на вузлі i (двійка).

В X_i^{kl} -операторах гамільтоніан (2.1) запишеться таким чином:

$$H = H_0 + H_1 + H_1' + H_2, \quad (2.2)$$

де

$$\begin{aligned} H_0 &= -\mu \sum_i (X_i^{\uparrow} + X_i^{\downarrow} + 2X_i^2) + U \sum_i X_i^2, \\ H_1 &= \sum'_{ij\sigma} t_{ij}(n) X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \sum'_{ij\sigma} \tilde{t}_{ij}(n) X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2}, \\ H_1' &= \sum'_{ij\sigma} (t'_{ij}(n) \eta_{\sigma} X_i^{\sigma 0} X_j^{\sigma 2} + e.c.), \\ H_2 &= -\frac{1}{2} \sum'_{ij\sigma} J(ij) ((X_i^{\sigma} + X_i^2)(X_j^{\sigma} + X_j^2) + X_i^{\sigma\bar{\sigma}} X_j^{\sigma\bar{\sigma}}) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum'_{ij} V(ij) (1 - X_i^0 + X_i^2) (1 - X_j^0 + X_j^2); \end{aligned}$$

$X_i^k = X_i^{kl} X_i^{lk}$ – оператор числа $|k\rangle$ -станів на вузлі, $\eta_{\uparrow} = -1$, $\eta_{\downarrow} = 1$,

$$\tilde{t}_{ij}(n) = t_{ij}(n) + 2T(ij), \quad (2.3)$$

$$t'_{ij}(n) = t_{ij}(n) + T(ij). \quad (2.4)$$

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) інтегралі переходу дірок і двійок відрізняються між собою.

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

Для подальших викладок нам будуть потрібні наступні співвідношення:

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

де t, \tilde{t}, t' – відповідні інтеграли переносу між найближчими сусідами: $t \equiv t_{ij}$, $\tilde{t} \equiv \tilde{t}_{ij}$, $t' \equiv t'_{ij}$;

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

Параметри τ_1, τ_2 ($0 \leq \tau_1, \tau_2 \leq 1$) характеризують нееквівалентність підзон. Для моделі Габбарда $\tau_1 = \tau_2 = 0$. Коли $\tau_1 = 0, \tau_2 = 0,5$, то $\tilde{t} = 0, t = 0,5t'$; це відповідає моделі вузькозонного матеріалу з нульовою шириною "двійкової" підзони. Відзначимо також, що врахування параметрів нееквівалентності приводить до суттєвої відмінності запропонованої моделі від моделі Габбарда.

3. Одночастинковий енергетичний спектр вузькозонної моделі

1. Перейдемо до визначення квазічастинкового енергетичного спектру в моделі, описуваній гамільтоніаном (2.1). Для цього введемо двочасові запізнюючі функції Гріна [12, 13]

$$\begin{aligned} G_{pp'}^{(1)}(E) &= \ll X_p^{0\uparrow} | X_{p'}^{\uparrow 0} \gg, & G_{pp'}^{(2)}(E) &= \ll X_p^{\downarrow 2} | X_{p'}^{\downarrow 0} \gg, \\ G_{pp'}^{(3)}(E) &= \ll X_p^{0\uparrow} | X_{p'}^{2\downarrow} \gg, & G_{pp'}^{(4)}(E) &= \ll X_p^{\downarrow 2} | X_{p'}^{2\downarrow} \gg, \end{aligned} \quad (3.1)$$

а також

$$\begin{aligned} H_{pp'}^{(1)}(E) &= \ll X_p^{0\downarrow} | X_{p'}^{\downarrow 0} \gg, & H_{pp'}^{(2)}(E) &= \ll X_p^{\uparrow 2} | X_{p'}^{\downarrow 0} \gg, \\ H_{pp'}^{(3)}(E) &= \ll X_p^{0\downarrow} | X_{p'}^{\uparrow 2} \gg, & H_{pp'}^{(4)}(E) &= \ll X_p^{\uparrow 2} | X_{p'}^{\uparrow 2} \gg. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Функції Гріна (3.1) і (3.2) пов'язані з електронними функціями Гріна

$$G_{pp'}^\sigma(E) = \ll a_{p\sigma} | a_{p'\sigma}^+ \gg \quad (3.3)$$

співвідношеннями

$$G_{pp'}^\uparrow(E) = G_{pp'}^{(1)}(E) - G_{pp'}^{(2)}(E) - G_{pp'}^{(3)}(E) + G_{pp'}^{(4)}(E), \quad (3.4)$$

$$G_{pp'}^\downarrow(E) = H_{pp'}^{(1)}(E) + H_{pp'}^{(2)}(E) + H_{pp'}^{(3)}(E) + H_{pp'}^{(4)}(E). \quad (3.5)$$

Прийmemo тут, що будь-який тип електронного впорядкування відсутній (в цьому випадку врахування міжатомних взаємодій в наближенні середнього поля приводить до перенормування хімпотенціалу).

Використовуючи методику, запропоновану в роботі [3], отримуємо наступні вирази для фур'є-образів функцій Гріна (3.1):

$$G_{\mathbf{k}}^{(1)}(E) = \frac{1-n/2}{2\pi} \frac{E + \mu - U - \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})}{(E - E(\mathbf{k}))(E - \tilde{E}(\mathbf{k}))}, \quad (3.6)$$

$$G_{\mathbf{k}}^{(2)}(E) = \frac{1-n/2}{2\pi} \frac{\epsilon_2(\mathbf{k})}{(E - E(\mathbf{k}))(E - \tilde{E}(\mathbf{k}))}, \quad (3.7)$$

$$G_{\mathbf{k}}^{(3)}(E) = \frac{n/2}{2\pi} \frac{\epsilon_1(\mathbf{k})}{(E - E(\mathbf{k}))(E - \tilde{E}(\mathbf{k}))}, \quad (3.8)$$

$$G_{\mathbf{k}}^{(4)}(E) = \frac{n/2}{2\pi} \frac{E + \mu - \epsilon(\mathbf{k})}{(E - E(\mathbf{k}))(E - \tilde{E}(\mathbf{k}))}, \quad (3.9)$$

де

$$E(\mathbf{k}) = -\mu + \frac{\epsilon(\mathbf{k}) + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) + U}{2} - \frac{1}{2} \left\{ [\epsilon(\mathbf{k}) + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) + U]^2 - 4\epsilon(\mathbf{k})U + 4[\epsilon_1(\mathbf{k})\epsilon_2(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k})\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})] \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (3.10)$$

$$\tilde{E}(\mathbf{k}) = -\mu + \frac{\epsilon(\mathbf{k}) + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) + U}{2} + \frac{1}{2} \left\{ [\epsilon(\mathbf{k}) + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) + U]^2 - 4\epsilon(\mathbf{k})U + 4[\epsilon_1(\mathbf{k})\epsilon_2(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k})\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3.11)$$

задають квазічастинковий енергетичний спектр системи, описуваної гамільтоніаном (2.1). Для фур'є-компонент величин, що визначають квазічастинкові спектри (3.10) і (3.11), маємо:

$$\begin{aligned} \epsilon(\mathbf{k}) &= \alpha t_{\mathbf{k}}(n), & \epsilon_1(\mathbf{k}) &= \alpha_1 t'_{\mathbf{k}}(n), \\ \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) &= \tilde{\alpha} \tilde{t}_{\mathbf{k}}(n), & \epsilon_2(\mathbf{k}) &= \alpha_2 t'_{\mathbf{k}}(n), \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{2-n}{2} + \frac{(n-2d)^2}{2(2-n)} - \frac{2cd}{2-n} \frac{\tilde{t}(n)}{t(n)}, \\ \alpha_1 &= -\frac{2-n}{2} + \frac{(n-2d)^2}{2n} - \frac{2cd}{n}, \\ \tilde{\alpha} &= \frac{n}{2} + \frac{(n-2d)^2}{2n} - \frac{2cd}{n} \frac{t(n)}{\tilde{t}(n)}, \\ \alpha_2 &= -\frac{n}{2} + \frac{(n-2d)^2}{2(2-n)} - \frac{2cd}{2-n}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

В цих співвідношеннях c -концентрація дірок ($\langle X_i^0 \rangle = c$), d -концентрація двійок ($\langle X_i^2 \rangle = d$). При цьому використано, що

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

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

Одноелектронна функція Гріна (3.3) отримується за допомогою квазічастинкових функцій Гріна $G_{\mathbf{k}}^{(i)}(E)$ через співвідношення (3.4).

2. Особливістю енергетичного спектру, заданого виразами (3.10) і (3.11) є його залежність від концентрацій полярних станів. Наведемо тут деякі загальні формули для розрахунку цих величин.

Зобразимо вираз (3.9) 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

$$A_{\mathbf{k}} = \frac{\tilde{E}(\mathbf{k}) + \mu - \epsilon(\mathbf{k})}{\tilde{E}(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k})}, \quad B_{\mathbf{k}} = -\frac{E(\mathbf{k}) + \mu - \epsilon(\mathbf{k})}{\tilde{E}(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k})}. \quad (3.14)$$

Для спектральної інтенсивності функції Гріна (3.9) маємо:

$$J_{\mathbf{k}}(E) = \frac{n/2}{\exp \frac{E}{\theta} + 1} \left(A_{\mathbf{k}} \delta(E - \tilde{E}(\mathbf{k})) + B_{\mathbf{k}} \delta(E - E(\mathbf{k})) \right),$$

де $\theta = k_B T$ (k_B - стала Больцмана). Концентрація двійок визначається виразом

$$d = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} J_{\mathbf{k}}(E) dE = \quad (3.15)$$

$$= \frac{n/2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{A_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{\tilde{E}(\mathbf{k})}{\theta} + 1} + \frac{B_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{E(\mathbf{k})}{\theta} + 1} \right).$$

Аналогічно для концентрації дірок отримуємо формулу

$$c = \frac{1-n/2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{C_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{-\tilde{E}(\mathbf{k})}{\theta} + 1} + \frac{D_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{-E(\mathbf{k})}{\theta} + 1} \right), \quad (3.16)$$

де

$$\begin{aligned} C_{\mathbf{k}} &= \frac{\tilde{E}(\mathbf{k}) + \mu - U - \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})}{\tilde{E}(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k})}, \\ D_{\mathbf{k}} &= -\frac{E(\mathbf{k}) + \mu - U - \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})}{\tilde{E}(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k})}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

3. Маючи на увазі дослідження переходу метал-діелектрик розглянемо принципово важливий випадок напівзаповненої вихідної зони, коли $c = d$.

Перепишемо вирази (3.12) і (3.13) у вигляді:

$$\begin{aligned} \epsilon(\mathbf{k}) &= (1 - 2c + 2c^2)t_{\mathbf{k}} - 2c^2\tilde{t}_{\mathbf{k}}, \\ \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) &= (1 - 2c + 2c^2)\tilde{t}_{\mathbf{k}} - 2c^2t_{\mathbf{k}}, \\ \epsilon_1(\mathbf{k}) &= \epsilon_2(\mathbf{k}) = -2ct'_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Підстановка (3.18) в (3.10) і (3.11), дає одночастинковий енергетичний спектр:

$$\begin{aligned} E_1(\mathbf{k}) &= -\mu + \frac{(1-2c)(t_{\mathbf{k}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}}) + U}{2} - \frac{1}{2} \left\{ A(t_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}})^2 - \right. \\ &\quad \left. - 2UB(t_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}}) + U^2 + (4ct'_{\mathbf{k}})^2 \right\}^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} E_2(\mathbf{k}) &= -\mu + \frac{(1-2c)(t_{\mathbf{k}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}}) + U}{2} + \frac{1}{2} \left\{ A(t_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}})^2 - \right. \\ &\quad \left. - 2UB(t_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}}) + U^2 + (4ct'_{\mathbf{k}})^2 \right\}^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

де

$$A = (1-2c)^2 + 8c^2(1-2c+2c^2), \quad B = 1-2c+4c^2. \quad (3.21)$$

Отриманий квазічастинковий енергетичний спектр дозволяє вивчити особливості моделі вузькозонного матеріалу з нееквівалентними габбардівськими підзонами, зокрема, дослідити перехід метал-діелектрик в запропонованій моделі.

4. Перехід метал-діелектрик для випадку напівзаповненої зони

1. Знайдемо вирази для хімпотенціалу μ і концентрації полярних станів для випадку половинного заповнення зони при $T = 0$. Коefіцієнти (3.14) (3.17), визначатимуться тут співвідношеннями:

$$B_{\mathbf{k}} = C_{\mathbf{k}} = -\frac{1-2c+4c^2}{2Q}(\tilde{t}_{\mathbf{k}} - t_{\mathbf{k}}) - \frac{U}{2Q} + \frac{1}{2}, \quad (4.1)$$

$$A_{\mathbf{k}} = D_{\mathbf{k}} = \frac{1-2c+4c^2}{2Q}(\tilde{t}_{\mathbf{k}} - t_{\mathbf{k}}) + \frac{U}{2Q} + \frac{1}{2}, \quad (4.2)$$

$$Q = [A(t_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}})^2 - 2BU(t_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}}) + U^2 + (4ct'_{\mathbf{k}})^2]^{\frac{1}{2}}.$$

З (4.1) і (4.2) видно, що

$$A_{\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}} = C_{\mathbf{k}} + D_{\mathbf{k}} = 1. \quad (4.3)$$

Запишемо умову для визначення хімпотенціалу

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{A_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{E_2(\mathbf{k})}{\theta} + 1} + \frac{B_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{E_1(\mathbf{k})}{\theta} + 1} \right) &= \\ = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{C_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{-E_2(\mathbf{k})}{\theta} + 1} + \frac{D_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{-E_1(\mathbf{k})}{\theta} + 1} \right), \end{aligned} \quad (4.4)$$

де $E_1(\mathbf{k})$ та $E_2(\mathbf{k})$ задаються виразами (3.19) і (3.20). Співвідношення (4.4) перепишемо у вигляді:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} [A_{\mathbf{k}}\theta(-E_2(\mathbf{k})) + B_{\mathbf{k}}\theta(-E_1(\mathbf{k}))] &= \\ = \sum_{\mathbf{k}} [C_{\mathbf{k}}\theta(E_2(\mathbf{k})) + D_{\mathbf{k}}\theta(E_1(\mathbf{k}))], \end{aligned} \quad (4.5)$$

де $\theta(x)$ – тета-функція.

Використовуючи формули для коефіцієнтів (4.1), (4.2) і (4.3) та властивості тета-функції, для рівняння (4.5) маємо:

$$\sum_{\mathbf{k}} [\theta(E_2(\mathbf{k})) + \theta(E_1(\mathbf{k}))] = 1. \quad (4.6)$$

Приймемо прямокутну густину станів:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - t(\mathbf{k})) = \frac{1}{2w} \theta(w^2 - E^2). \quad (4.7)$$

Перейдемо в (4.6) від сумування по \mathbf{k} до інтегрування по енергії і розв'яжемо його. В підсумку, для металічного стану ($U \leq w + \tilde{w}$) маємо

$$\mu = \frac{(1 - 2c + 2c^2)w - 2c^2\tilde{w}}{(1 - 2c)(w + \tilde{w})}U, \quad (4.8)$$

де w та \tilde{w} —напівширини нижньої підзони ("діркова" підзона) та верхньої підзони (підзона "двійок") відповідно; $w = z|t|$, $\tilde{w} = z|\tilde{t}|$ (z — число найближчих сусідів). Виявляється, таким чином, що нееквівалентність габбардівських підзон приводить до залежності хімпотенціалу від концентрації носіїв струму c та напівширин підзон w і \tilde{w} (на відміну від моделі Габбарда, де $\mu = U/2$). З рис.1, отриманого за формулою (4.8), видно, що хімічний потенціал зменшується при зростанні \tilde{w} .

Знайдемо тепер концентрацію полярних станів. Для цього запишемо рівняння для c

$$c = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{C_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{-E_2(\mathbf{k})}{\theta} + 1} + \frac{D_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{-E_1(\mathbf{k})}{\theta} + 1} \right]. \quad (4.9)$$

Перепишемо (4.9) у вигляді ($T = 0$):

$$c = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} [C_{\mathbf{k}}\theta(-E_2(\mathbf{k})) + D_{\mathbf{k}}\theta(-E_1(\mathbf{k}))]. \quad (4.10)$$

Перейдемо в (4.10) від сумування по \mathbf{k} до інтегрування по енергії:

$$2c = \int_{-w}^w C_{\epsilon}\theta(-E_2(\epsilon)) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - t_{\mathbf{k}}) d\epsilon + \int_{-w}^w D_{\epsilon}\theta(-E_1(\epsilon)) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - t_{\mathbf{k}}) d\epsilon. \quad (4.11)$$

В рівнянні (4.11) C_{ϵ} , D_{ϵ} , $E_1(\epsilon)$, $E_2(\epsilon)$ отримуються із відповідних формул (3.19), (3.20), (4.1) і (4.2) для $C_{\mathbf{k}}$, $D_{\mathbf{k}}$, $E_1(\mathbf{k})$, $E_2(\mathbf{k})$ заміною $t_{\mathbf{k}} \rightarrow \epsilon$, $\tilde{t}_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{\epsilon}{t}$, $t'_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{\epsilon}{t}$. Використання (4.7), приводить до рівняння

$$2c = \frac{1}{2w} \int_{-w}^{\epsilon_0} C_{\epsilon} d\epsilon + \frac{1}{2w} \int_{-w}^{-\epsilon_0} D_{\epsilon} d\epsilon, \quad (4.12)$$

де

$$\epsilon_0 = \frac{|(2\mu - U)(1 - 2c)(t + \tilde{t}) - BU(t - \tilde{t}) - \frac{\sqrt{D}}{2}|}{|(1 - 2c)^2(t + \tilde{t})^2 - A(t - \tilde{t})^2 - (4ct')^2|} |t| \quad (4.13)$$

— додатний корінь рівняння

$$-\mu + \frac{U}{2} + \frac{(1 - 2c)(t + \tilde{t})}{2} \frac{\epsilon}{t} - \frac{1}{2} \left\{ A(t - \tilde{t})^2 \frac{\epsilon^2}{t^2} - 2BU(t - \tilde{t}) \frac{\epsilon}{t} + U^2 + (4ct')^2 \frac{\epsilon^2}{t^2} \right\}^{\frac{1}{2}} = 0;$$

$$D = 4U^2(1 - 2c)^2(t + \tilde{t})^2 + 8BU(1 - 2c)(-2\mu + U)(t^2 - \tilde{t}^2) + [4B^2U^2 + 16A(\mu^2 - \mu U)](t - \tilde{t})^2 + 16(\mu^2 - \mu U)(4ct')^2,$$

μ визначається рівнянням (4.8); A та B — коефіцієнти задані формулою (3.21). В підсумку отримуємо наступне рівняння для концентрації полярних станів c :

$$\frac{Bt\tilde{t} - t}{w} \frac{1}{\lambda} \left[\varphi\left(-\frac{\epsilon_0}{t}\right) - \varphi\left(\frac{\epsilon_0}{t}\right) \right] + \frac{U}{\sqrt{\lambda}} \frac{|t|}{w} \left(1 - \frac{B^2(\tilde{t} - t)^2}{\lambda} \right) \times \\ \times \ln \frac{\sqrt{\lambda}\varphi\left(-\frac{\epsilon_0}{t}\right) - \lambda\left(-\frac{\epsilon_0}{t}\right) - BU(\tilde{t} - t)}{\sqrt{\lambda}\varphi\left(\frac{\epsilon_0}{t}\right) - \lambda\left(\frac{\epsilon_0}{t}\right) - BU(\tilde{t} - t)} = 8c - 2, \quad (4.14)$$

де

$$\lambda = A(\tilde{t} - t)^2 + (4ct')^2, \\ \varphi\left(\frac{\epsilon}{t}\right) = \left\{ \lambda \left(\frac{\epsilon}{t}\right)^2 + 2BU(\tilde{t} - t) \frac{\epsilon}{t} + U^2 \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (4.15)$$

З рівняння (4.14) чисельними методами отримані залежності для концентрації носіїв струму c від параметрів U/w та \tilde{w}/w (рис. 1, 2). При зменшенні \tilde{w}/w ($0 \leq \tilde{w}/w \leq 1$) маємо зменшення концентрації носіїв струму. З рис.1 видно також, що при U/w достатньо близьких до нуля значення c мало залежить від відношення \tilde{w}/w , але при збільшенні U/w концентрація носіїв струму починає суттєво залежати від \tilde{w}/w . Якщо $t = \tilde{t} = t'$ (модель Габбарда), то

$$\epsilon_0 = \frac{U}{2\sqrt{1 - 4c}},$$

і рівняння (4.14) переходить у вираз для концентрації полярних станів (1.3).

2. Енергетична щілина.

Вираз для енергетичної щілини в розглядуваній моделі означимо як різницю нижньої межі верхньої підзони та верхньої межі нижньої підзони:

$$\Delta E = -(1-2c)(w + \tilde{w}) + \frac{1}{2}(Q_1 + Q_2), \quad (4.16)$$

$$Q_1 = \left\{ A(w - \tilde{w})^2 - 2BU(w - \tilde{w}) + U^2 + \left(\frac{t'}{t}\right)^2 (4cw)^2 \right\}^{\frac{1}{2}},$$

$$Q_2 = \left\{ A(w - \tilde{w})^2 + 2BU(w - \tilde{w}) + U^2 + \left(\frac{t'}{t}\right)^2 (4c\tilde{w})^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (4.17)$$

Для симетричної моделі співвідношення (4.16) переходить в (1.2); у цьому випадку щілина зникає за умови $2w \geq U$.

Для моделі з нееквівалентними габбардівськими підзонами енергетична щілина зникає, коли виконується умова

$$w + \tilde{w} \geq U. \quad (4.18)$$

При заданих w , \tilde{w} і U щілина зникає при умові $c < c_0$, де c_0 – корінь рівняння

$$-(1-2c)(w + \tilde{w}) + \frac{1}{2}(Q_1 + Q_2) = 0. \quad (4.19)$$

($0 \leq c_0 \leq 1/4$; Q_1 і Q_2 задаються виразами (4.17)). Отже, металічному стану відповідає умова $c < c_0$, а діелектричному – $c > c_0$.

З рис.3, отриманого за формулою (4.16), видно що в металічному стані перекриття енергетичних підзон зменшується, а в діелектричному – ширина енергетичної щілини зростає при зменшенні параметра \tilde{w}/w . Рис.4 ілюструє перехід метал-діелектрик для вузькозонної системи з нееквівалентними габбардівськими підзонами ($\tau_1 = \tau_2 = 0, 2$). Фазова діаграма (рис.5), отримана за допомогою рівняння (4.19), вказує на розширення області, де вузькозонний матеріал перебуває в металічному стані, із збільшенням \tilde{w}/w .

3. Для ілюстрації особливостей моделі розглянемо випадок слабкого перекриття підзон (вузькозонний напівметал). Оскільки в області

переходу $c \ll 1$, то одночастинковий енергетичний спектр матиме вигляд (нехтуємо виразами, які містять c^2):

$$E_1(\mathbf{k}) = -\mu + (1-2c)t_{\mathbf{k}}, \quad (4.20)$$

$$E_2(\mathbf{k}) = -\mu + U + (1-2c)\tilde{t}_{\mathbf{k}}. \quad (4.21)$$

З виразів (4.20) і (4.21) видно, що одночастинковий енергетичний спектр стає незалежним від інтегралу переносу t'_k , який описує процеси парного народження і знищення дірок та двійок. Хімпотенціал вузькозонного напівметалу задається формулою

$$\mu = \frac{w}{w + \tilde{w}}U \quad (4.22)$$

і не залежить від концентрації полярних станів та "активаційного" інтегралу переносу. Для $\tilde{w} = 0$ хімпотенціал вузькозонного напівметалу вдвічі більший, ніж в моделі Габбарда.

Для малих концентрацій носіїв струму маємо:

$$c = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{U}{w + \tilde{w}} \right). \quad (4.23)$$

Звідси видно, що умова "металічності" співпадає з умовою (4.18).

5. Висновки

В роботі досліджено модель вузькозонного матеріалу з нееквівалентними габбардівськими підзонами при $T = 0$ на основі методу, запропонованого в роботах [2, 3].

Знайдено хімпотенціал μ як функцію внутрішньоатомного кулонівського відштовхування двох електронів з протилежними спінами U , напівширин діркової і двійкової підзон w , \tilde{w} та концентрації полярних станів c . Для малих c (вузькозонний напівметал) хімпотенціал не залежить від концентрації носіїв струму.

Отримано вираз для визначення концентрації полярних станів. При зростанні параметра \tilde{w}/w ($0 \leq \tilde{w}/w \leq 1$) концентрація полярних станів c збільшується.

Знайдено квазічастинковий енергетичний спектр, особливістю якого є залежність від концентрації полярних станів та нееквівалентність верхньої і нижньої габбардівських підзон, зумовлена відмінністю відповідних інтегралів переносу. Для вузькозонного напівметалу ($c \ll 1$) квазічастинковий енергетичний спектр стає мало залежним від інтегралу переносу t' , який описує процеси парного народження і знищення дірок та двійок.

За допомогою квазічастинкового енергетичного спектру отримується вираз для ширини енергетичної щілини ΔE , що дозволяє описати перехід метал-діелектрик. Особливістю отриманого виразу (на відміну від моделі Габбарда) є те, що ширина енергетичної щілини залежить від концентрації полярних станів та відношення ширин "діркової" і "двійкової" підзон. Зростання параметра \tilde{w}/w (при заданому значенні U) приводить до зменшення енергетичної щілини. Наслідком цього є, зокрема, те, що перехід метал-діелектрик здійснюється при умові $U/w = 1 + \tilde{w}/w$ (в моделі Габбарда перехід відбувається, коли $U = 2w$).

Більшість результатів, приведених в цій роботі, відповідають вужькозонній системі з половинним заповненням зони при $T = 0$. Випадки з $n \neq 1$ і $T \neq 0$, застосування отриманих результатів до інтерпретації експериментальних даних будуть розглянуті в наступних роботах.

Література

1. J.Hubbard, Proc. Roy. Soc. **A281**, 238 (1963); J.Hubbard, Proc. Roy. Soc. **A281**, 401 (1964).
2. L.Didukh, Ukrainian-French Symposium "Condensed Matter: Science and Industry". Abstracts, p.275 (Lviv, 1993).
3. Л. Д. Дідух, Журнал фізичних досліджень. **1**, 241 (1997); Л. Д. Дідух, Препринт Инст. физ. конд. сист. АН України, Львів, ICMP-96-20U, 1996.
4. A.A.Aligia, L.Arrachea, and E.R.Gagliano, Phys. Rev. **B51**, 13774 (1995).
5. H.Q.Lin and J.E.Hirsch, Phys. Rev. **B52**, 16155 (1995).
6. E.R.Gagliano, A.A.Aligia, and L.Arrachea, M.Aignon, Phys. Rev. **B51**, 14012 (1995).
7. Ю. А. Изюмов, Успехи физ. наук. **165**, 403 (1995).
8. Д. Н. Зубарев, Ю. Г. Рудой, Успехи физ. наук. **163**, 103 (1993).
9. J.Hubbard, Proc. Roy. Soc. **A285**, 542 (1965).
10. Л. Д. Дідух, И. В. Стасюк, Укр.физ. журн. **13**, 899 (1968).
11. Л. Д. Дідух, Л. Ф. Прядко, И. В. Стасюк, *Корреляционные эффекты в материалах с узкими зонами проводимости* (Вища школа, Львів, 1978).
12. С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма* (Наука, Москва, 1975).
13. Д. Н. Зубарев, Успехи физ. наук. **71**, 71 (1960).

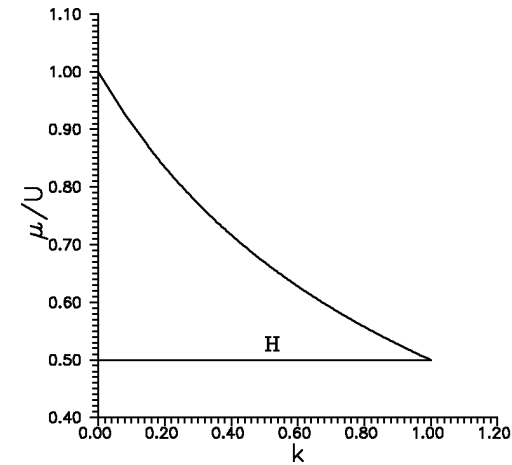


Рис. 1. Залежність хімпотенціалу μ від $k = \tilde{w}/w$; пряма H відповідає значенню хімпотенціалу в моделі Габбарда.

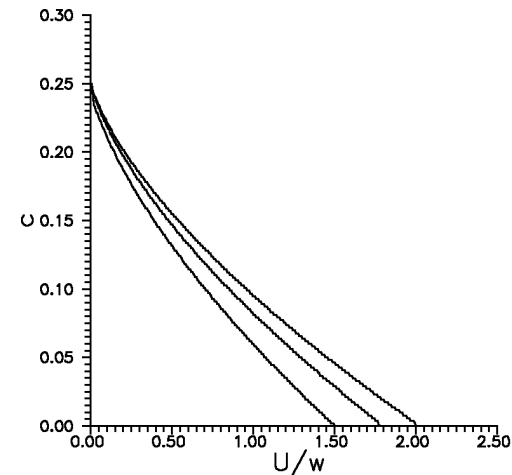


Рис. 2. Залежність концентрації полярних станів c від U/w : верхня крива - $\tau_1 = \tau_2 = 0$; середня крива - $\tau_1 = \tau_2 = 0, 1$; нижня крива - $\tau_1 = \tau_2 = 0, 2$.

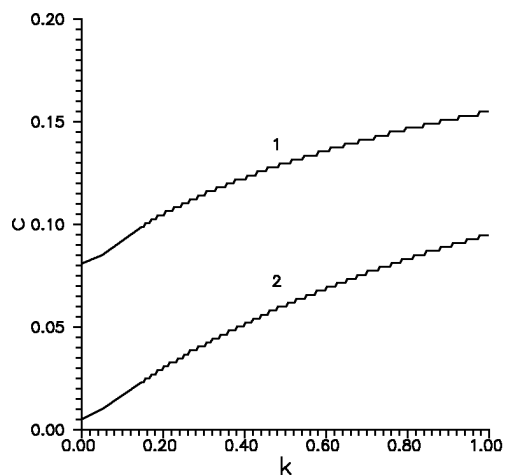


Рис. 3. Залежність концентрації поляризованих станів c від $k = \tilde{w}/w$: крива 1 відповідає значенню $U/w = 0,5$; крива 2 – $U/w = 1$.

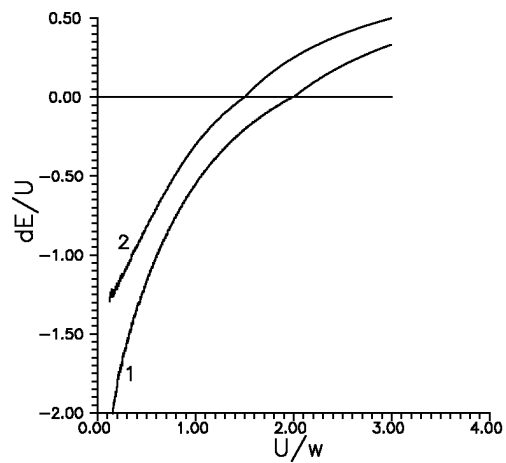
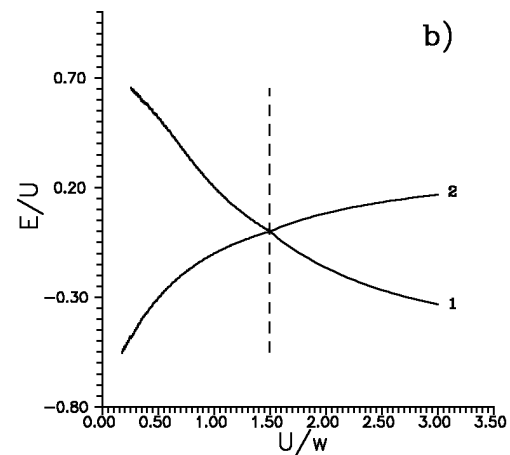
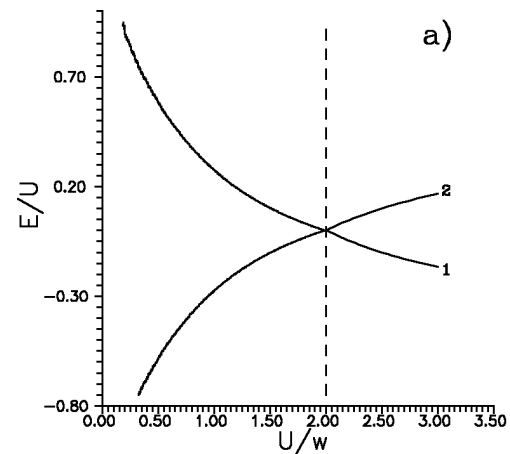


Рис. 4. Залежність енергетичної щілини від U/w : 1 – $\tau_1 = \tau_2 = 0$; 2 – $\tau_1 = \tau_2 = 0,2$.



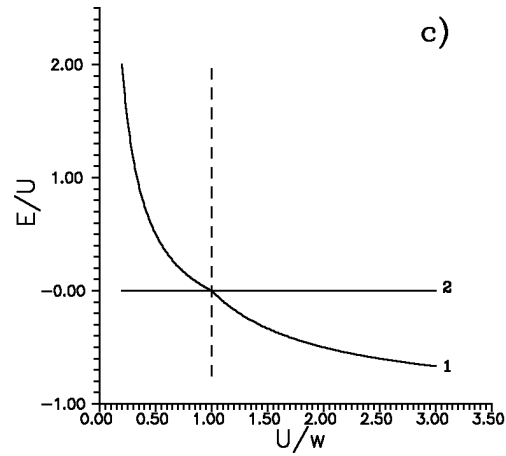


Рис. 5. Ілюстрація переходу метал-діелектрик для вузькозонного матеріалу: а) $\tau_1 = \tau_2 = 0$ (модель Габбарда); б) $\tau_1 = \tau_2 = 0, 2$; с) $\tau_1 = 0, \tau_2 = 0, 5$ ($\tilde{w} = 0$). Крива 1 відповідає верхній межі нижньої підзони, крива 2 – нижній межі верхньої підзони; область, розміщена зліва від штрихованої лінії між кривими 1 і 2 – перекриття нижньої і верхньої підзон.

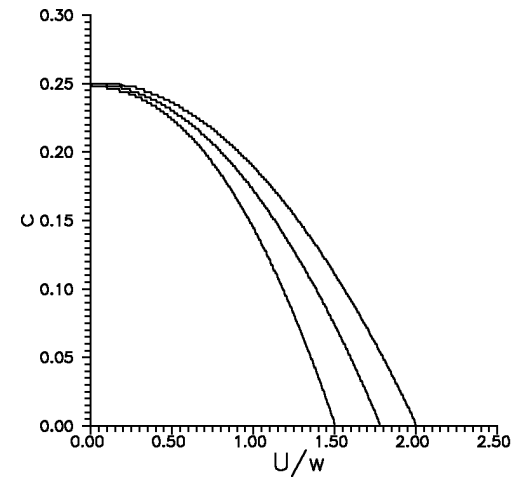


Рис. 6. Залежність c_0 від U/w : верхня крива – $\tau_1 = \tau_2 = 0$; середня крива – $\tau_1 = \tau_2 = 0, 1$; нижня крива – $\tau_1 = \tau_2 = 0, 2$. Зліва від відповідної кривої – металічна область, справа – діелектрична.

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
Василь Васильович Ганкевич
Юрій Миронович Довгоп'ятий

ПЕРЕХІД МЕТАЛ-ДИЕЛЕКТРИК У ВУЗЬКОЗОННІЙ МОДЕЛІ З
НЕЕКВІВАЛЕНТНИМИ ГАББАРДІВСЬКИМИ ПІДЗОНАМИ

Роботу отримано 17 листопада 1997 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені