ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 2, № 3 (1998) с. 362–370

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 2, No. 3 (1998) p. 362–370

ПЕРЕХІД МЕТАЛ–ДІЕЛЕКТРИК У ВУЗЬКОЗОННІЙ МОДЕЛІ З НЕЕКВІВАЛЕНТНИМИ ГАББАРДІВСЬКИМИ ПІДЗОНАМИ

Л. Дідух, В. Ганкевич, Ю. Довгоп'ятий
Тернопільський державний технічний університет імені І. Пулюя, кафедра фізики,
вул. Руська, 56, Тернопіль, 282001, Україна
E–mail: didukh@tu.edu.te.ua

(Отримано 9 жовтня 1997 р.)

Досліджено перехід метал–діелектрик у моделі вузькозонного матеріялу з нееквівалентними габбардівськими підзонами при половинному заповненні зони та нульовій температурі. Знайдено умови, за яких реалізується діелектричний і металічний стани. Отримано одночастинковий електронний спектр, залежності ширини енерґетичної щілини, концентрації носіїв струму та хемічного потенціялу від параметрів системи.

Ключові слова: вузькі зони провідности, перехід метал–діелектрик, нееквівалентні габбардівські підзони, одночастинковий енерґетичний спектр.

PACS number(s): 71.10.Fd, 71.30.+h

I. ВСТУП

Особливістю моделі Габбарда [1] і вузькозонних моделей, генетично пов'язаних з нею (наприклад, $t-J$ моделі), є електронно–діркова симетрія. Одним із проявів цієї симетрії є еквівалентність нижньої й верхньої квазічастинкових габбардівських підзон у моделі Габбарда, що своєю чергою є наслідком рівности інтеґралів переносу, які описують як "трансляційні" переходи дірок і двійок, так і процеси їх парного народження та знищення ("активаційні" процеси). Рівність указаних інтеґралів зумовлена нехтуванням матричними елементами міжелектронної взаємодії

$$J(ikjk) = \int\int \varphi^*(\mathbf{r}-\mathbf{R_i})\varphi(\mathbf{r}-\mathbf{R_j})$$

$$\times \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}|\varphi(\mathbf{r}'-\mathbf{R_k})|^2 \mathbf{dr}\mathbf{dr}', \tag{1.1}$$

які описують переходи електронів між вузлами i та j (φ–функції — функції Ваньє). У роботах [2–4] обґрунтована принципова необхідність узагальнення моделі Габбарда врахуванням кореляційного переносу електронів (1.1) і запропонована вузькозонна модель з нееквівалентними габбардівськими підзонами. У такій моделі інтеґрали переносу, які описують трансляційний перенос дірок і двійок, відрізняються як між собою, так і від інтеґрала переносу, пов'язаного з активаційними процесами. Подібні моделі в останній час інтенсивно досліджують [5–7].

Важливою проблемою, що виникає тут, є проблема переходу діелектрик–метал при зміні параметрів системи, яка є однією з центральних у фізиці вузькозонних систем (див. огляд [8]).

У роботах [3, 4] запропонований новий підхід до розгляду одночастинкового енерґетичного спектра вузькозонних систем, який приводить до коректного опису фазового переходу метал–діелектрик. Підхід ґрунтується на використанні варіянта методу наближеного вторинного квантування в узагальненому наближенні Гартрі–Фока [9]. При цьому для моделі Габбарда ширина енерґетичної щілини

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

концентрація полярних станів

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

де w — півширина зони провідности, U — значення кулонівського відштовхування двох електронів з протилежними спінами на одному й тому ж вузлі.

У нашій роботі досліджено фазовий перехід метал–діелектрик у моделі вузькозонного матеріялу з нееквівалентними габбардівськими підзонами. Знайдено умови, за яких реалізується діелектричний і металічний стани. Отримано одночастинковий електронний спектр, залежності ширини енерґетичної щілини, концентрації носіїв струму та хемічного потенціялу від параметрів системи для випадку напівзаповненої зони при нульовій температурі.

II. ГАМІЛЬТОНІЯН МОДЕЛІ

Запишемо гамільтоніян системи s–електронів зони провідности, виражений через функції Ваньє, у вигляді [4]:

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

$$+\sum_{ij\sigma}{}' \left(T(ij)a^{+}_{i\sigma}a_{j\sigma}n_{i\bar{\sigma}} + e.c.\right) + U\sum_{i} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \qquad (2.1)$$

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

де $a^{+}_{i\sigma}, a_{i\sigma}$ — оператори народження і знищення електрона зі спіном σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) на вузлі i; μ — хемічний потенціял; $n_{i\sigma} = a^{+}_{i\sigma}a_{i\sigma}$,

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

— ефективний концентраційно залежний інтеґрал переносу; $t(ij)$ відповідає електронно–йонній взаємодії; $T(ij) = J(iiij)$, $J(ij) = J(ijji)$, $V(ij) = J(ijij)$ — матричні елементи, які описують електронні переходи між вузлами кристалічної ґратки за рахунок міжелектронної взаємодії (вузли i та j найближчі);

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

— ефективний інтеґрал 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 у зоні, N — число вузлів). Штрихи біля сум у виразі (2.1) означають, що $i \neq j$.

Гамільтоніян (2.1) враховує основні типи взаємодій у вузькій невиродженій зоні: міжвузловий перенос електронів — друга, третя суми 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 дворазово зайнятих вузлів.

Перейдемо у (2.1) від електронних операторів до X^{kl}_i–операторів Габбарда [10] за допомогою співвідношень [11, 12]:

$$a^{+}_{i\uparrow} = X^{2\downarrow}_i - X^{\uparrow 0}_i, \quad a_{i\uparrow} = X^{\downarrow 2}_i - X^{0\uparrow}_i,$$

$$a^{+}_{i\downarrow} = X^{2\uparrow}_i + X^{\downarrow 0}_i, \quad a_{i\downarrow} = X^{\uparrow 2}_i + X^{0\downarrow}_i,$$

де X^{kl}_i — оператори переходу вузла із стану $|l\rangle$ в стан $|k\rangle$; стан $|0\rangle$ відповідає вузлові, не зайнятому електроном (дірка), $|\sigma\rangle \equiv a^{+}_{i\sigma}|0\rangle$ — одноразово зайнятий (електрон зі спіном σ) стан, $|2\rangle \equiv a^{+}_{i\uparrow}a^{+}_{i\downarrow}|0\rangle$ — дворазово зайнятий (двома електронами з протилежними спінами) стан на вузлі i (двійка).

В X^{kl}_i–операторах гамільтоніян (2.1) запишеться таким чином:

$$H = H_0 + H_1 + H'_1 + H_2, \qquad (2.2)$$

де

$$H_0 = -\mu\sum_i \left(X^{\uparrow}_i + X^{\downarrow}_i + 2X^{2}_i\right) + U\sum_i X^2_i,$$

$$H_1 = \sum_{ij\sigma}{}' t_{ij}(n)X^{\sigma 0}_i X^{0\sigma}_j + \sum_{ij\sigma}{}' \tilde{t}_{ij}(n)X^{2\sigma}_i X^{\sigma 2}_j,$$

$$H'_1 = \sum_{ij\sigma}{}' \left(t'_{ij}(n)\eta_\sigma X^{\sigma 0}_i X^{\bar{\sigma}2}_j + \text{e.c.}\right),$$

$$H_2 = -\frac{1}{2}\sum_{ij\sigma}{}' J(ij)\left((X^{\sigma}_i + X^2_i)(X^{\sigma}_j + X^2_j) + X^{\sigma\bar{\sigma}}_i X^{\sigma\bar{\sigma}}_j\right)$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{ij}{}' V(ij)\left(1 - X^0_i + X^2_i\right)\left(1 - X^0_j + X^2_j\right),$$

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

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

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

H_0 описує атомну границю вузькозонних моделей. H_1 описує трансляційний рух дірок і двійок. Суттєвим є те, що в цій моделі (на відміну від вузькозонних моделей типу Габбарда) інтеґрали 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 такі співвідношення:

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

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

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

Для моделі Габбарда $\tau_1 = \tau_2 = 0$.

III. ОДНОЧАСТИНКОВИЙ ЕНЕРҐЕТИЧНИЙ СПЕКТР ВУЗЬКОЗОННОЇ МОДЕЛІ

1. Перейдемо до визначення квазічастинкового енерґетичного спектра в моделі, яку описує гамільтоніян (2.1). Для цього введемо двочасові запізнюючі функції Ґріна [13, 14]

$$G^{(1)}_{pp'}(E) = \langle\langle X^{0\uparrow}_p | X^{\uparrow 0}_{p'}\rangle\rangle,$$

$$G^{(2)}_{pp'}(E) = \langle\langle X_p^{\downarrow 2} | X_{p'}^{\uparrow 0}\rangle\rangle,$$

$$G^{(3)}_{pp'}(E) = \langle\langle X_p^{0\uparrow} | X_{p'}^{2\downarrow}\rangle\rangle, \tag{3.1}$$

$$G^{(4)}_{pp'}(E) = \langle\langle X_p^{\downarrow 2} | X_{p'}^{2\downarrow}\rangle\rangle,$$

а також

$$H^{(1)}_{pp'}(E) = \langle\langle X_p^{0\downarrow} | X_{p'}^{\downarrow 0}\rangle\rangle,$$

$$H^{(2)}_{pp'}(E) = \langle\langle X_p^{\uparrow 2} | X_{p'}^{\downarrow 0}\rangle\rangle,$$

$$H^{(3)}_{pp'}(E) = \langle\langle X_p^{0\downarrow} | X_{p'}^{2\uparrow}\rangle\rangle,$$

$$H^{(4)}_{pp'}(E) = \langle\langle X_p^{\uparrow 2} | X_{p'}^{2\uparrow}\rangle\rangle. \tag{3.2}$$

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

$$G^{\sigma}_{pp'}(E) = \langle\langle a_{p\sigma} | a^{+}_{p'\sigma}\rangle\rangle \tag{3.3}$$

співвідношеннями

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

$$G^{\downarrow}_{pp'}(E) = H^{(1)}_{pp'}(E) + H^{(2)}_{pp'}(E) + H^{(3)}_{pp'}(E) + H^{(4)}_{pp'}(E). \tag{3.5}$$

Приймемо тут, що будь–який тип електронного впорядкування відсутній (у цьому випадку врахування міжатомних взаємодій у наближенні середнього поля приводить до перенормування хемічного потенціялу).

Використовуючи методику, запропоновану в роботі [4], отримуємо такі вирази для фур'є–образів функцій Ґріна (3.1):

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

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

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

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

де

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

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

задають квазічастинковий енерґетичний спектр системи, яку описує гамільтоніян (2.1). Для фур'є–компонент величин, що визначають квазічастинкові спектри (3.10) і (3.11), маємо:

$$\begin{aligned} &\epsilon(\mathbf{k}) = \alpha t_{\mathbf{k}}(n), \qquad \epsilon_1(\mathbf{k}) = \alpha_1 t'_{\mathbf{k}}(n),\\ &\tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) = \tilde{\alpha}\tilde{t}_{\mathbf{k}}(n), \qquad \epsilon_2(\mathbf{k}) = \alpha_2 t'_{\mathbf{k}}(n),\\ &\alpha = \frac{2-n}{2} + \frac{(n-2d)^2}{2(2-n)} - \frac{2cd}{2-n}\frac{\tilde{t}(n)}{t(n)},\\ &\alpha_1 = -\frac{2-n}{2} + \frac{(n-2d)^2}{2n} - \frac{2cd}{n},\\ &\tilde{\alpha} = \frac{n}{2} + \frac{(n-2d)^2}{2n} - \frac{2cd}{n}\frac{t(n)}{\tilde{t}(n)},\\ &\alpha_2 = -\frac{n}{2} + \frac{(n-2d)^2}{2(2-n)} - \frac{2cd}{2-n}. \end{aligned} \tag{3.12–3.13}$$

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

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

$$t(n) \equiv t_{ij}(n),\ \gamma(\mathbf{k}) = \sum_{\rho}\exp(i\mathbf{k}\rho)$$

(підсумовування ведемо по найближчих сусідах), а також аналогічні співвідношення для інтеґралів переносу $\tilde{t}_{\mathbf{k}}(n)$ і $t'_{\mathbf{k}}(n)$.

Одноелектронну функцію Ґріна (3.3) отримуємо за допомогою квазічастинкових функцій Ґріна $G^{(i)}_{\mathbf{k}}(E)$ через співвідношення (3.4).

2. Особливістю енерґетичного спектра, 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

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

Для спектральної інтенсивности функції Ґріна (3.9) маємо:

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

де $\theta = k_B T$ (k_B — стала Больцмана). Концентрацію двійок визначаємо виразом

$$d = \langle X_i^2\rangle = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} J_{\mathbf{k}}(E)dE \tag{3.15}$$

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

Аналогічно для концентрації дірок отримуємо формулу

$$c = \langle X_i^0\rangle \tag{3.16}$$
$$= \frac{1-n/2}{N}\sum_{\mathbf{k}}\left(\frac{C_{\mathbf{k}}}{\exp\frac{-\tilde{E}(\mathbf{k})}{\theta}+1} + \frac{D_{\mathbf{k}}}{\exp\frac{-E(\mathbf{k})}{\theta}+1}\right),$$

де

$$C_{\mathbf{k}} = \frac{\tilde{E}(\mathbf{k})+\mu-U-\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})}{\tilde{E}(\mathbf{k})-E(\mathbf{k})}, \tag{3.17}$$
$$D_{\mathbf{k}} = -\frac{E_(\mathbf{k})+\mu-U-\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})}{\tilde{E}(\mathbf{k})-E(\mathbf{k})}.$$

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:

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

Підстановка (3.18) у (3.10) і (3.11) дає одночастинковий енерґетичний спектр:

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

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

де

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

Отриманий квазічастинковий енерґетичний спектр дає змогу вивчати особливості моделі вузькозонного матеріялу з нееквівалентними габбардівськими підзонами, зокрема дослідити перехід метал–діелектрик у запропонованій моделі.

IV. ПЕРЕХІД МЕТАЛ–ДІЕЛЕКТРИК ДЛЯ ВИПАДКУ НАПІВЗАПОВНЕНОЇ ЗОНИ

1. Знайдемо вирази для хемічного потенціялу μ і концентрації полярних станів у випадку половинного заповнення зони при $T=0$. Коефіцієнти (3.14) і (3.17) визначатимуться тут співвідношеннями:

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

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

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

Із формул (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 хемічного потенціялу:

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

де $E_1(\mathbf{k})$ та $E_2(\mathbf{k})$ задаються виразами (3.19) і (3.20). Співвідношення (4.4) при $T=0$ перепишемо у вигляді:

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

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:

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

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 рівнянні (4.6) від підсумовування за $\mathbf{k}$ до інтеґрування за енерґією і розв'яжемо його. У підсумку для металічного стану ($U \le w + \tilde{w}$) маємо

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

де w та $\tilde{w}$ — півширини нижньої підзони ("діркова" підзона) та верхньої підзони (підзона "двійок") відповідно; $w = z|t|$, $\tilde{w} = z|\tilde{t}|$ (z — число найближчих сусідів). Таким чином, виявляється, що нееквівалентність габбардівських підзон приводить до залежности хемічного потенціялу від концентрації носіїв струму c та півширин підзон w і $\tilde{w}$ (на відміну від моделі Габбарда, де $\mu = U/2$).

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 співвідношення (4.9) у вигляді ($T=0$):

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

Перейдемо у виразі (4.10) від підсумовування за $\mathbf{k}$ до інтеґрування за енерґією:

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

У рівнянні (4.11) C_ϵ, D_ϵ, $E_1(\epsilon)$, $E_2(\epsilon)$ отримуємо з 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 $t_{\mathbf{k}} \to \epsilon$, $\tilde{t}_{\mathbf{k}} \to \frac{\tilde{t}}{t}\epsilon$, $t'_{\mathbf{k}} \to \frac{t'}{t}\epsilon$. Використання виразу (4.7) приводить до рівняння

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

де

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

— додатній 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 формулою (4.8); A та B — коефіцієнти, задані співвідношенням (3.21).

У підсумку отримуємо таке рівняння для концентрації полярних станів c:

$$\frac{Bt}{w}\frac{\tilde{t}-t}{\lambda}\left[\varphi\left(-\frac{\epsilon_0}{t}\right) - \varphi\left(\frac{\epsilon_0}{t}\right)\right] + \frac{U}{\sqrt{\lambda}}\frac{|t|}{w}\left(1 - \frac{B^2(\tilde{t}-t)^2}{\lambda}\right)$$

$$\times \ln\frac{\sqrt{\lambda}\varphi\left(-\frac{\epsilon_0}{t}\right) - \lambda\left(-\frac{\epsilon_0}{t}\right) - BU(\tilde{t}-t)}{\sqrt{\lambda}\varphi\left(\frac{\epsilon_0}{t}\right) - \lambda\left(\frac{\epsilon_0}{t}\right) - BU(\tilde{t}-t)} = 8c - 2, \quad (4.14)$$

де

$$\lambda = A(\tilde{t}-t)^2 + (4ct')^2,$$

$$\varphi\left(\frac{\epsilon}{t}\right) = \left\{\lambda\left(\frac{\epsilon}{t}\right)^2 + 2BU(\tilde{t}-t)\frac{\epsilon}{t} + U^2\right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (4.15)$$

Із рівняння (4.14) чисельними методами отримані залежності для концентрації носіїв струму c від параметрів U/w та $\tilde{w}/w$ (рис. 2, 3). При зменшенні $\tilde{w}/w$ $(0 \le \tilde{w}/w \le 1)$ маємо зменшення концентрації носіїв струму. З рис. 2 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 $\tilde{w}/w$.

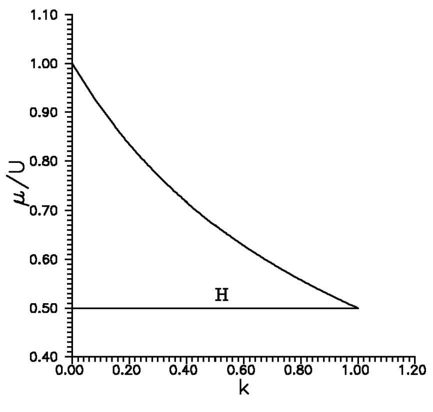

Рис. 1. Залежність хемічного потенціялу μ від $k = \tilde{w}/w$; пряма H відповідає значенню хемічного потенціялу в моделі Габбарда.

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. Енерґетична щілина.

Вираз для ширини енерґетичної щілини в даній моделі означимо як різницю нижньої межі верхньої підзони та верхньої межі нижньої підзони:

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

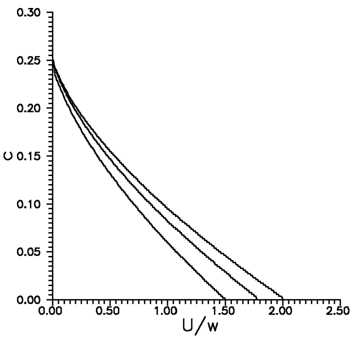

Рис. 2. Залежність концентрації полярних станів c від U/w: верхня крива — $\tau_1 = \tau_2 = 0$; середня крива — $\tau_1 = \tau_2 = 0.1$; нижня крива — $\tau_1 = \tau_2 = 0.2$.

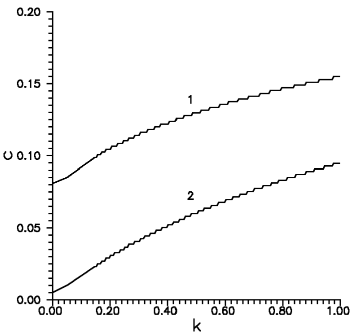

Рис. 3. Залежність концентрації полярних станів c від $k = \tilde{w}/w$: крива 1 відповідає значенню $U/w = 0.5$; крива 2 — $U/w = 1$.

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

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

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 енерґетична щілина зникає, якщо виконується умова

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

При заданих U, w і $\tilde{w}$ щілина зникає за умови $c < c_0$, де c_0 — корінь рівняння

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

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

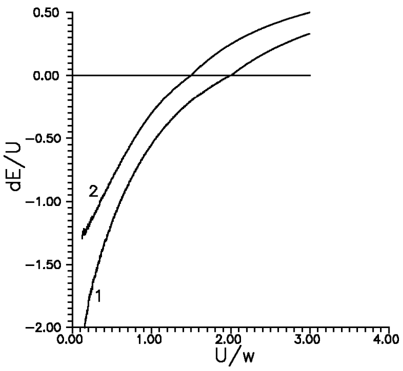

Рис. 4. Залежність енерґетичної щілини від U/w: 1 — $\tau_1 = \tau_2 = 0$; 2 — $\tau_1 = \tau_2 = 0.2$.

З рис. 4, отриманого за формулою (4.16), видно, що в металічному стані перекриття енерґетичних підзон зменшується, а в діелектричному — ширина енерґетичної щілини збільшується при зменшенні параметра $\tilde{w}/w$. Рис. 5 ілюструє перехід метал–діелектрик для вузькозонної системи з нееквівалентними габбардівськими підзонами ($\tau_1 = \tau_2 = 0,2$). Фазова діяграма (рис. 6), отримана за допомогою рівняння (4.19), указує на розширення області, де вузькозонний матеріял перебуває в металічному стані, із збільшенням $\tilde{w}/w$.

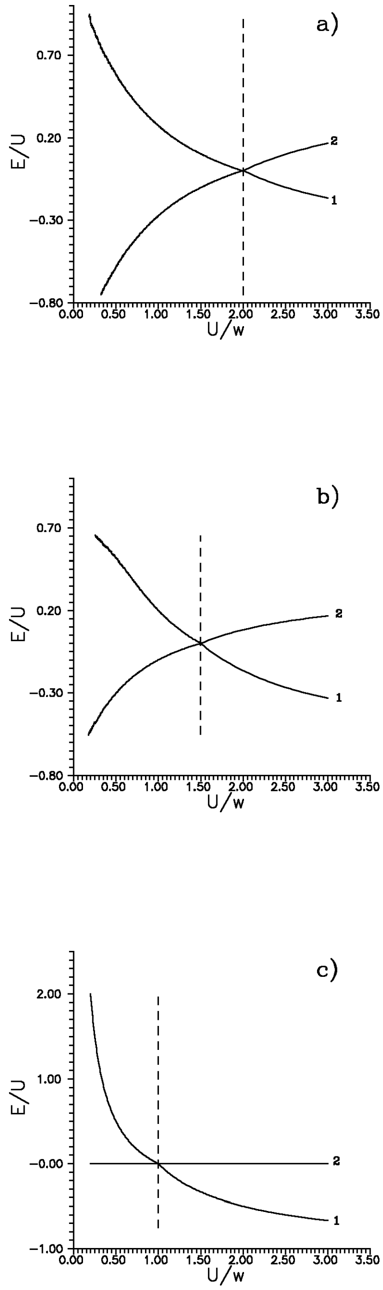

Рис. 5. Ілюстрація переходу метал–діелектрик для вузькозонного матеріялу: a) $\tau_1 = \tau_2 = 0$ (модель Габбарда); b) $\tau_1 = \tau_2 = 0.2$; c) $\tau_1 = 0, \tau_2 = 0.5$ ($\tilde{w} = 0$). Крива 1 відповідає верхній межі нижньої підзони, крива 2 — нижній межі верхньої підзони; область, розміщена зліва від штрихованої лінії між кривими 1 і 2 — перекриття нижньої і верхньої підзон.

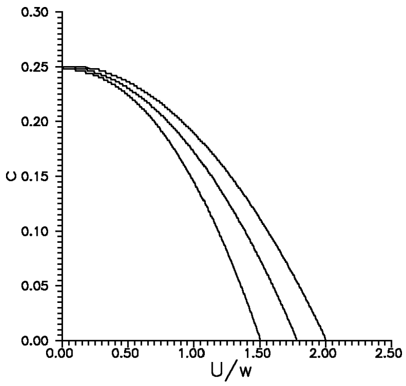

Рис. 6. Залежність c_0 від U/w: верхня крива — $\tau_1 = \tau_2 = 0$; середня крива — $\tau_1 = \tau_2 = 0.1$; нижня крива — $\tau_1 = \tau_2 = 0.2$. Зліва від відповідної кривої — металічна область, справа — діелектрична.

3. Для ілюстрації особливостей моделі розглянемо випадок слабкого перекриття підзон (вузькозонний напівметал). Оскільки в області переходу $c \ll 1$, то одночастинковий енерґетичний спектр матиме вигляд (нехтуємо виразами, які містять c^2):

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

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

Із виразів (4.20) і (4.21) видно, що одночастинковий енерґетичний спектр стає незалежним від інтеґрала переносу t', який описує процеси парного народження і знищення дірок та двійок. Хемічний потенціял вузькозонного напівметалу задається формулою

$$\mu = \frac{w}{w+\tilde{w}}U \tag{4.22}$$

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

Для малих концентрацій носіїв струму маємо:

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

Звідси видно, що умова "металічности" збігається з умовою (4.18).

V. ВИСНОВКИ

У роботі досліджено модель вузькозонного матеріялу з нееквівалентними габбардівськими підзонами при $T = 0$ на основі методу, запропонованого в роботах [2 – 4].

Знайдено хемічний потенціял μ як функцію внутрішньоатомного кулонівського відштовхування двох електронів з протилежними спінами U, півширин діркової і двійкової підзон w, $\tilde{w}$ та концентрації полярних станів c. Для малих c (вузькозонний напівметал) хемічний потенціял 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 енерґетичний спектр, особливістю якого є залежність від концентрації полярних станів та нееквівалентність верхньої й нижньої габбардівських підзон, зумовлена відмінністю відповідних інтеґралів переносу. Для вузькозонного напівметалу ($c \ll 1$) квазічастинковий енерґетичний спектр стає мало залежним від інтеґрала переносу t', який описує процеси парного народження і знищення дірок та двійок.

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

Більшість результатів, наведених у цій роботі, відповідають вузькозонній 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.

Автори висловлюють подяку проф. І. В. Стасюкові та учасникам семінару відділу квантової статистики ІФКС НАН України, а також своїм колегам з кафедри фізики Тернопільського державного технічного університету за обговорення проблем, що тут розглядалися.

[1] J. Hubbard, Proc. R. Soc., Ser. A **271**, 238 (1963); J. Hubbard, Proc. R. Soc., Ser. A **281**, 401 (1964).
[2] L. Didukh, in *Ukrainian–French Simposium Condensed Matter: Science and Industry. Lviv, February, 20–27, 1993. Abstracts, Information & Participants* (Lviv, 1993), p. 275.
[3] Л. Д. Дідух, препринт ICMP–96–20U (1996).
[4] Л. Д. Дідух, Журн. фіз. досл. **1**, 241 (1997).
[5] A. A. Aligia, L. Arrachea, and E. R. Gagliano, Phys. Rev. B **51**, 13774 (1995).

[6] H. Q. Lin and J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **52**, 16155 (1995).
[7] E. R. Gagliano, A. A. Aligia, and L. Arrachea, M. Avignon, Phys. Rev. B **51**, 14012 (1995).
[8] Ю. А. Изюмов, Усп. физ. наук **165**, 403 (1995).
[9] Д. Н. Зубарев, Ю. Г. Рудой, Усп. физ. наук **163**, 103 (1993).
[10] J. Hubbard, Proc. R. Soc., Ser A **285**, 542 (1965).
[11] Л. Д. Дидух, И. В. Стасюк, Укр. физ. журн. **13**, 899 (1968).
[12] Л. Д. Дидух, Л. Ф. Прядко, И. В. Стасюк, *Корреляционные эффекты в материалах с узкими зонами проводимости* (Вища школа, Львів, 1978).
[13] С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма* (Наука, Москва, 1975).
[14] Д. Н. Зубарев, Усп. физ. наук **71**, 71 (1960).

METAL–INSULATOR TRANSITION IN A NARROW–BAND MODEL WITH NON–EQUIVALENT HUBBARD SUB–BANDS

L. Didukh, V. Hankevych, Yu. Dovhopyaty
Ivan Puluj Ternopil State Technical University, Chair of Physics,
56 Rus'ka Str., Ternopil, UA–282001, Ukraine
E–mail: didukh@tu.edu.te.ua

The transition from an insulating to a metallic state is studied in a model of narrow–band material with non–equivalent Hubbard sub bands at half filling and zero temperature. The model is defined by the on–site interaction U and hopping integrals $t_{ij} = t(ij) + T_1(ij)$, $\tilde{t}_{ij} = t_{ij} + 2T(ij)$ and $t'_{ij} = t_{ij} + T(ij)$, where

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

$t(ij)$, $J(ijkl)$ are the matrix elements of electron–ion and electron–electron interactions.

Single–particle Green's function is obtained by a variant of the method of an approximate second quantization in the generalized Hartree–Fock approximation. This quasiparticle Green's function depends on the concentration of the polar states c. Chemical potential of the electron system being

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

where w — half–width of "hole" band, $\tilde{w}$ — half–width of doublon band. A dependence of the concentration of polar states c on U, t, $\tilde{t}$, t' is found. We obtain an energy gap as the function of U, w, $\tilde{w}$, c, and the hopping integral t':

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

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

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

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

The condition for a metallic state is determined:

$$w + \tilde{w} \geq U.$$