

ЕНЕРГІЯ ОСНОВНОГО СТАНУ Й ПЕРЕХІД МЕТАЛ-ДІЕЛЕКТРИК У МОДЕЛІ ВУЗЬКОЗОННОГО ПАРАМАГНЕТИКА

Л. Д. Дідух, Ю. Л. Скоренький

Тернопільський державний технічний університет імені І. Пулюя, кафедра фізики
бул. Руська, 56, Тернопіль, 46001, Україна
E-mail: didukh@tu.edu.te.ua

(Отримано 30 серпня 2000 р.; в остаточному вигляді — 30 березня 2001 р.)

Досліджено енергію основного стану та переход метал-діелектрик у моделі вузькоzonного парамагнетика з нееквівалентними габбардівськими підзонами при половинному заповненні зони та нульовій температурі. Отримано одночастинковий енергетичний спектр, критерій переходу з металічного в діелектричний стан, залежності концентрації носіїв струму та енергії системи від параметрів системи.

Ключові слова: вузькі зони провідності, нееквівалентні габбардівські підзони, енергія основного стану, переход метал-діелектрик.

PACS number(s): 71.10.Fd, 71.30.+h, 71.27.+a

I. ВСТУП

Значна увага, що її приділяють в останні 25–30 роках дослідженням матеріалів з вузькими енергетичними зонами (прикладом яких є оксиди, сульфіди та селеніди переходних металів), зумовлена їхніми унікальними фізичними властивостями. Відкриття високотемпературної надпровідності ще більше підсилило інтерес до цього класу сполук.

Тепер загальноприйнято, що властивості цих матеріалів (такі, наприклад, як переход діелектрик-метал) зумовлені міжелектронними кореляціями. Базовими тут є модель Габбарда [1] (див. огляди [2,3]) та її узагальнення.

Узагальнення моделі Габбарда врахуванням матричних елементів кулонівської взаємодії, недіагональних за вузлами ґратки, запропоноване в працях [4–6], дозволяє вивчати ефекти міжелектронних кореляцій, які залишалися за межами застосовності моделі Габбарда, зокрема ефекти електрон-діркової асиметрії, зумовленої врахуванням корельованого переносу електронів [7–14].

Уперше на важливість урахування корельованого переносу електронів при описі вузькоzonних матеріалів було вказано в праці [4], зокрема було показано, що у випадку сильних і помірних внутрішньоатомних взаємодій корельований перенос приводить до електрон-діркової асиметрії [6,15] (у цьому зв’язку див. також праці [4,5,8,14]) та перенормування ширин енергетичних зон. Дослідження вузькоzonної моделі, що враховує корельований перенос електронів, була присвячена низка праць [6,15–19], де, зокрема, було вивчено переход метал-діелектрик (ПМД), поведінку концентрації полярних станів (дірок чи двійок), хемічного потенціалу, енергетичної щіlinи в одноелектронному енергетичному спектрі. Це дозволило якісно пояснити механізм переходу з металічного в діелектричний стан при зростанні температури та з діелектричного в металічний стан при прикла-

данні зовнішнього тиску, особливості поведінки енергії зв’язку, концентраційну залежність енергії активації, спостережувані в деяких вузькоzonних матеріалах. При цьому для знаходження одноелектронної функції Гріна та енергетичного спектра застосовували узагальнене наближення Гартрі–Фока [20] у формі, запропонованій для моделі Габбарда в працях [6,21]. Поліпшене наближення, запропоноване в праці [22], дозволяє повніше описати електронні кореляції для сильних та помірних внутрішньоатомних взаємодій (зокрема в ділянці ПМД).

Ця праця присвячена застосуванню наближення [22] для дослідження основного стану моделі вузькоzonного матеріалу з електрон-дірковою асиметрією. У розділі 2 знайдено одноелектронну функцію Гріна та енергетичний спектр моделі. У розділі 3 обчислена концентрація полярних станів. Розділ 4 присвячений вивчення ПМД в моделі. Дослідження енергії основного стану моделі проведено в розділі 5. У розділі 6 обговорено отримані результати та подано висновки.

II. ФУНКЦІЯ ГРІНА ТА ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР МОДЕЛІ

Розглянемо модель вузькоzonного парамагнетика, що описується гамільтоніаном, який ураховує корельований перенос електронів [6]:

$$H = H_0 + H_1 + H'_1; \quad (2.1)$$

$$H_0 = -\mu \sum_{i\sigma} (X_i^\sigma + X_i^2) + U \sum_i X_i^2,$$

$$H_1 = \sum_{ij\sigma, i \neq j} t_{ij}(n) X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \sum_{ij\sigma, i \neq j} \tilde{t}_{ij}(n) X_i^{2\bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma} 2},$$

$$H'_1 = \sum_{ij\sigma, i \neq j} t'_{ij}(n) (X_i^{\bar{\sigma}0} X_j^{\sigma 2} - X_i^{\sigma 0} X_j^{\bar{\sigma}2} + \text{e.c.}),$$

тут X_i^{kl} — оператори Габбарда [23] переходу вузла i зі стану $|l\rangle$ у стан $|k\rangle$, X_i^k — оператор числа $|k\rangle$ -станів на вузлі i , σ позначає спін електрона ($\sigma = \downarrow, \uparrow$), а $\bar{\sigma}$ — проекцію спіну, протилежну до σ ; μ — хемічний потенціяль моделі, U — енергія кулонівського відштовхування двох електронів з протилежними спінами на одному вузлі, $t_{ij}(n)$ — ефективний концентраційно-залежний [6] інтеграл переносу електрона з вузла j на вузол i ($t_{ij}(n) < 0$),

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

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

$$t_{ij}(n) = t_{ij} + nT'_{ij}, \quad (2.4)$$

де t_{ij} — “зонний” інтеграл переходу електрона з вузла j на вузол i ($t_{ij} < 0$), T_{ij} — матричний елемент переходу електрона з вузла j на вузол i за умови, що на вузлі j чи вузлі i є електрон із протилежним спіном ($T_{ij} > 0$), T'_{ij} описує перенос з урахуванням заселеності сусідніх вузлів, що не беруть участі в процесі перестрибування ($T'_{ij} > 0$); за класифікацією, прийнятою в праці [6], T'_{ij} описує корельований перенос першого роду, T_{ij} — корельований перенос другого роду. Якісний ефект включення в гамільтоніян корельованого переносу полягає в перенормуванні інтеграла переносу, який стає спін- та концентраційно залежним. Оскільки величини $|t_{ij}|$, T_{ij} та T'_{ij} одного порядку, всі вказані матричні елементи описують процеси переносу електрона, то для коректного опису спостережуваних особливостей фізичних властивостей вузькозонних матеріалів урахування T_{ij} та T'_{ij} є принципово необхідним (див у цьому зв’язку працю [6]). Уведемо безрозмірний параметр $\tau = T_{ij}/|t_{ij}(n)|$, що характеризує відносну величину корельованого переносу.

Одноелектронну функцію Гріна можна подати у вигляді

$$G_{ps} = \langle\langle a_{p\uparrow} | a_{s\uparrow}^+ \rangle\rangle = G_{ps}^1 - G_{ps}^2 - G_{ps}^3 + G_{ps}^4, \quad (2.5)$$

де

$$G_{ps}^1 = \langle\langle X_p^{0\uparrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle, \quad (2.6)$$

$$G_{ps}^2 = \langle\langle X_p^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle, \quad (2.7)$$

$$G_{ps}^3 = \langle\langle X_p^{0\uparrow} | X_s^{2\downarrow} \rangle\rangle, \quad (2.8)$$

$$G_{ps}^4 = \langle\langle X_p^{\downarrow 2} | X_s^{2\downarrow} \rangle\rangle. \quad (2.9)$$

Для знаходження функцій (2.6–2.9) застосуймо процедуру, запропоновану в праці [22].

У рівнянні для функції (2.6)

$$\begin{aligned} (E + \mu) \langle\langle X_p^{0\uparrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle &= \frac{\delta_{ps}}{2\pi} \langle X_p^\uparrow + X_p^0 \rangle \\ &+ \sum_{i, i \neq p} t_{pi} \langle\langle (X_p^0 + X_p^\uparrow) X_i^{0\uparrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle \\ &+ \sum_{i, i \neq p} t_{pi} \langle\langle X_p^{\downarrow\uparrow} X_i^{0\downarrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle \\ &- \sum_{i, i \neq p} \tilde{t}_{pi} \langle\langle X_p^{02} X_i^{2\uparrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle \\ &- \sum_{i, i \neq p} t'_{pi} \langle\langle (X_p^0 + X_p^\uparrow) X_i^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle \\ &- \sum_{i, i \neq p} t'_{pi} \langle\langle X_p^{02} X_i^{\downarrow 0} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle \\ &+ \sum_{i, i \neq p} t'_{pi} \langle\langle X_p^{\downarrow\uparrow} X_i^{\uparrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle \quad (2.10) \end{aligned}$$

перші три суми, що отримані внаслідок комутування $[X_p^{0\uparrow}, H_1]$, ураховуємо методом узагальненого наближення Гартрі–Фока [21]:

$$[X_p^{0\uparrow}, H_1] = \sum_i \epsilon(pi) X_i^{0\uparrow}. \quad (2.11)$$

Останні три суми в рівнянні (2.10) ураховуємо в наближенні середнього поля

$$[X_p^{0\uparrow}, H'_1] = -\langle X_p^\uparrow + X_p^0 \rangle \sum_i t'_{pi} \langle\langle X_i^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle. \quad (2.12)$$

Доцільність використання різних наближень у рівняннях (2.11) та (2.12) зумовлена відмінностями в операторній структурі членів гамільтоніана H_1 та H'_1 ; це відповідає енергетичній нееквівалентності процесів, що описуються H_1 та H'_1 .

Для функції (2.7) відповідна процедура має вигляд

$$[X_p^{\downarrow 2}, H_1] = \sum_i \tilde{\epsilon}(pi) X_i^{\downarrow 2}, \quad (2.13)$$

$$[X_p^{\downarrow 2}, H'_1] = -\langle X_p^\downarrow + X_p^2 \rangle \sum_i t'_{pi} \langle\langle X_i^{0\uparrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle. \quad (2.14)$$

Для неоператорних коефіцієнтів $\epsilon(pi)$ та $\tilde{\epsilon}(pi)$, згідно з методом праці [6], у парамагнетному стані при концентрації електронів $n = 1$ отримуємо

$$\begin{aligned} \epsilon(pi) &= (1 - 2d + 2d^2) t_{pi} - 2d^2 \tilde{t}_{pi}, \\ \tilde{\epsilon}(pi) &= (1 - 2d + 2d^2) \tilde{t}_{pi} - 2d^2 t_{pi}, \quad (2.15) \end{aligned}$$

де $d \equiv \langle X_p^2 \rangle$ — концентрація подвійно зайнятих вуз-

лів (двійок), для $n = 1$ рівна концентрації $c \equiv \langle X_p^0 \rangle$ незайнятих вузлів (дірок).

Розв'язок системи рівнянь для фур'є-компонент функцій (2.6), (2.7) з урахуванням (2.15) дає

$$G_{\mathbf{k}}^1 = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{A_{\mathbf{k}}^1}{E - E_1(\mathbf{k})} + \frac{B_{\mathbf{k}}^1}{E - E_2(\mathbf{k})} \right), \quad (2.16)$$

$$A_{\mathbf{k}}^1 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{U - (t(\mathbf{k}) - \tilde{t}(\mathbf{k}))(1 - 2d - 2d^2)}{E_2(\mathbf{k}) - E_1(\mathbf{k})} \right), \quad B_{\mathbf{k}}^1 = 1 - A_{\mathbf{k}}^1,$$

$$G_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{8\pi} \frac{t'(\mathbf{k})}{E_2(\mathbf{k}) - E_1(\mathbf{k})} \left(\frac{1}{E - E_1(\mathbf{k})} - \frac{1}{E - E_2(\mathbf{k})} \right). \quad (2.17)$$

Тут $t(\mathbf{k})$, $t'(\mathbf{k})$ та $\tilde{t}(\mathbf{k})$ є фур'є-компонентами інтегралів переносу t_{ij} , t'_{ij} та \tilde{t}_{ij} відповідно,

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = -\mu + \frac{U}{2} + (1 - 2d) \frac{t(\mathbf{k}) + \tilde{t}(\mathbf{k})}{2} \mp \frac{1}{2} \sqrt{[U - (t(\mathbf{k}) - \tilde{t}(\mathbf{k}))(1 - 2d + 4d^2)]^2 + (t'(\mathbf{k}))^2} \quad (2.18)$$

є енергетичний спектр системи.

Аналогічно отримаємо для фур'є-компонент функцій (2.8), (2.9):

$$G_{\mathbf{k}}^3 = \frac{1}{8\pi} \frac{t'(\mathbf{k})}{E_2(\mathbf{k}) - E_1(\mathbf{k})} \left(\frac{1}{E - E_1(\mathbf{k})} - \frac{1}{E - E_2(\mathbf{k})} \right), \quad (2.19)$$

$$G_{\mathbf{k}}^4 = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{A_{\mathbf{k}}^4}{E - E_1(\mathbf{k})} + \frac{B_{\mathbf{k}}^4}{E - E_2(\mathbf{k})} \right), \quad A_{\mathbf{k}}^4 = B_{\mathbf{k}}^1, \quad B_{\mathbf{k}}^4 = A_{\mathbf{k}}^1. \quad (2.20)$$

Вираз для одноелектронної функції Гріна (2.5) матиме вигляд

$$G_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{A_{\mathbf{k}}}{E - E_1(\mathbf{k})} + \frac{B_{\mathbf{k}}}{E - E_2(\mathbf{k})} \right), \quad A_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{t'(\mathbf{k})}{E_2(\mathbf{k}) - E_1(\mathbf{k})} \right), \quad B_{\mathbf{k}} = 1 - A_{\mathbf{k}}. \quad (2.21)$$

Функція Гріна (2.21) та енергетичний спектр системи (2.18) є точними в граничних випадках $t_{\mathbf{k}} = 0$ та $U = 0$ (атомна та зонна границі відповідно). При $\tilde{t}(\mathbf{k}) = t'(\mathbf{k}) = t(\mathbf{k})$ вирази (2.18) та (2.21) переходят відповідно у вирази для спектра та одночастинкової функції Гріна, отримані в праці [22].

III. ПЕРЕХІД МЕТАЛ-ДІЕЛЕКТРИК

З енергетичного спектра (2.18) знайдімо енергетичну щілину як різницю енергій між найнижчим дозволеним рівнем верхньої зони та найвищим дозволеним рівнем нижньої зони:

$$\Delta E = -2w(1 - 2d)(1 - \tau) + \frac{Q_1 + Q_2}{2}, \quad (3.1)$$

тут

$$Q_{1,2} = ((U \mp 2\tau Cw)^2 + (1 - 2\tau)^2 w^2)^{\frac{1}{2}},$$

$$C = 1 - 2d + 4d^2,$$

$w = z|t_{ij}|$, z — кількість найближчих до вузла сусідів. Залежність $\Delta E/U$ від параметра U/w при різних значеннях параметра корельованого переносу τ показана на рис. 1.

При певному критичному значенні $(\frac{U}{w})_c$ щілина зникає — в системі відбувається перехід діелектрик-метал. Нижня крива на рис. 1 відтворює залежність $\Delta E/U$ від U/w , знайдену в праці [22] для моделі Габбарда. Видно, що корельований перенос зменшує значення $(U/w)_c$. Зміна критичного значення $(U/w)_c$ з ростом τ показана на рис. 2.

Величини $(U/w)_c$, які ми знайшли, при фіксованих значеннях параметра корельованого переносу є меншими, ніж відповідні критичні значення, одержані в праці [24]. На рис. 3 енергетична щілина, отримана з формули (3.1) при певному зна-

ченні параметра корельованого переносу, порівнюється з відповідним результатом праць [16–19]. Застосоване тут наближення дає дещо менше значення $(U/w)_c$, ніж отримане у вказаних працях.

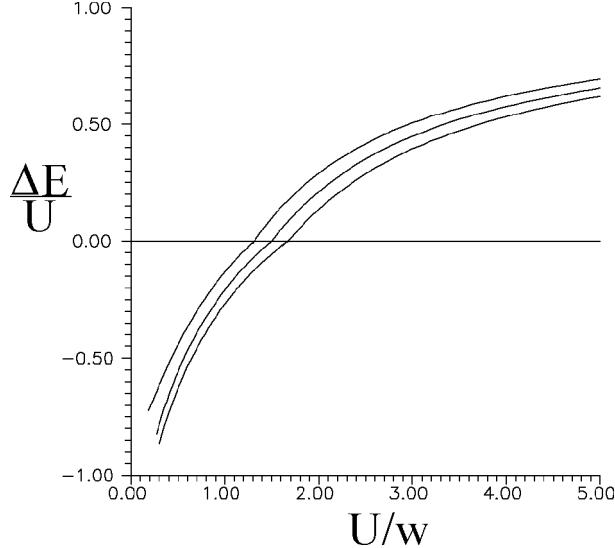


Рис. 1. Енергетична щілина як функція параметра U/w : нижній графік відповідає значенню $\tau = 0$, середній — $\tau = 0.1$, верхній — $\tau = 0.2$

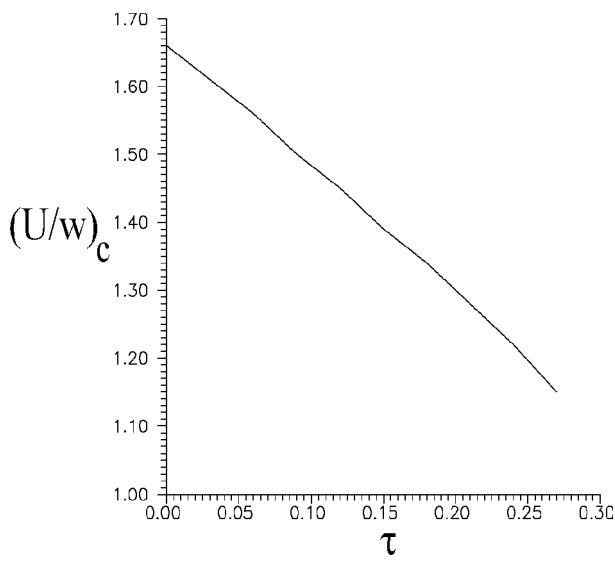


Рис. 2. Зміна критичного значення $(U/w)_c$ при збільшенні параметра корельованого переносу τ ($\tau=0$ відповідає моделі Габбарда).

На відміну від результата праць [16–19], розклад спектра (3.1) при великих U/w містить коректний доданок, пропорційний до w^2/U . Важливо відзначити, що наш підхід до розгляду ПМД в моделі з нееквівалентними підзонами відтворює точний результат

праць [25–28]. При $t'_k = 0$ отримуємо з (3.1)

$$U_c = w + \tilde{w}, \quad (3.2)$$

де w — напівширина нижньої габбардівської підзони, $\tilde{w} = z|\tilde{t}_{ij}|$ — напівширина верхньої габбардівської підзони.

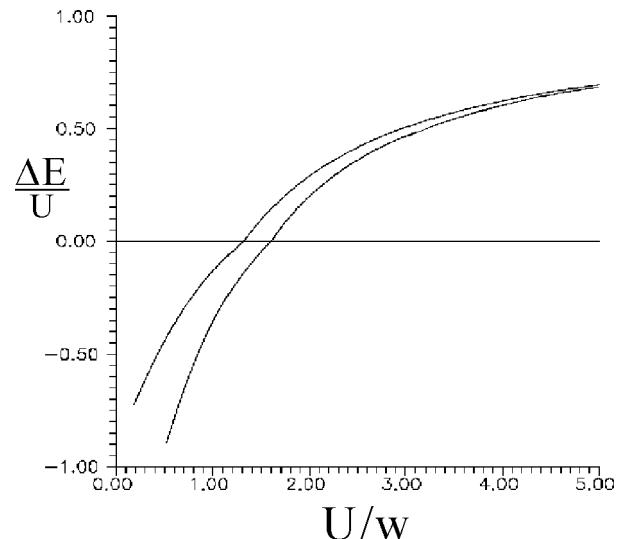


Рис. 3. Енергетична щілина, знайдена в цій праці (верхня крива), та відповідний результат праць [16–19] (нижня крива). Параметр корельованого переносу $\tau = 0.1$.

IV. КОНЦЕНТРАЦІЯ ПОЛЯРНИХ СТАНІВ

Для знаходження концентрації двійок d з функції (2.20) при $T = 0$ приймемо прямокутну густину станів. Тоді

$$\begin{aligned} d &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{A_{\mathbf{k}}^4}{e^{\frac{E_1(\mathbf{k})}{k_B T}} + 1} + \frac{B_{\mathbf{k}}^4}{e^{\frac{E_2(\mathbf{k})}{k_B T}} + 1} \right) \\ &= \frac{1}{4w} \int_{-w}^w (A^4(\epsilon)\Theta(-E_1(\epsilon)) + B^4(\epsilon)\Theta(-E_2(\epsilon))) d\epsilon. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Значення цього інтеграла залежить від співвідношення між $|\varepsilon_{1,2}|$ та w , де $\varepsilon_{1,2}$ є розв'язками рівнянь $E_{1,2} = 0$. З виразу (4.1) при $|\varepsilon_{1,2}| < w$ отримуємо для d самоузгоджене рівняння

$$d = \frac{1}{4} - \frac{U}{2w} \frac{\tau^2 C^2}{(1-\tau)(1-2d)D} - \frac{U}{8w} \frac{(1-\tau)^2}{D^{3/2}} \ln \frac{L_1}{L_2}, \quad (4.2)$$

де

$$D = 4\tau^2 C^2 + (1 - \tau)^2,$$

$$L_{1,2} = 1 \mp \frac{D^{\frac{1}{2}}}{2(1 - \tau)(1 - 2d)}.$$

З рівняння (4.2) видно, що $d \rightarrow \frac{1}{4}$ при $U/w \rightarrow 0$. При $\tau = 0$ (модель Габбарда) отримуємо

$$d = \frac{1}{4} - \frac{U}{8w} \ln \left| \frac{1 - 4d}{3 - 4d} \right|, \quad (4.3)$$

що збігається з відповідним результатом праці [22] для концентрації полярних станів у металічній фазі.

При $|\varepsilon|_{1,2} > w$ з функції (2.20) одержуємо

$$d = \frac{1}{4} - \frac{1}{4w} \frac{\tau C}{D^{\frac{1}{2}}} (Q_1 - Q_2) \quad (4.4)$$

$$- \frac{U}{8w} \frac{(1 - \tau)^2}{D^{\frac{3}{2}}} \ln \left| \frac{D^{\frac{1}{2}} Q_1 - Dw - 2\tau U C}{D^{\frac{1}{2}} Q_1 + Dw - 2\tau U C} \right|.$$

При $\tau = 0$ (модель Габбарда) звідси отримуємо

$$d = \frac{1}{4} + \frac{U}{8w} \ln \left| \frac{\sqrt{1 + \frac{U^2}{w}} + 1}{\sqrt{1 + \frac{U^2}{w}} - 1} \right|, \quad (4.5)$$

що збігається з результатом праці [22] для концентрації полярних станів у діелектричній фазі.

На рис. 4 показана концентрація двійок d як функція параметра U/w при різних значеннях параметра корельованого переносу τ . З рисунка видно,

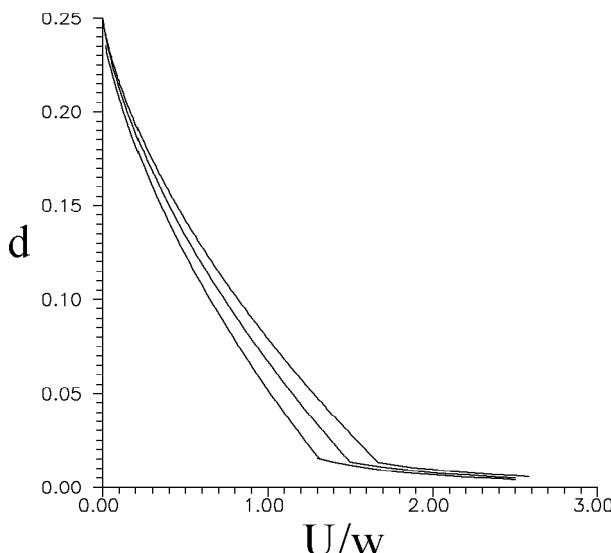


Рис. 4. Концентрація двійок як функція параметра U/w : нижній графік відповідає значенню $\tau = 0.2$, середній — $\tau = 0.1$, верхній — $\tau = 0$.

що збільшення параметра корельованого переносу приводить до зменшення концентрації полярних станів при фіксованих значеннях U/w . На рис. 5 концентрація двійок, отримана з формул (4.2–4.4), порівнюється з результатом праць [16–19]. На відміну від результату праць [16–19], знайдені тут значення d відмінні від нуля у всій ділянці значень U/w .

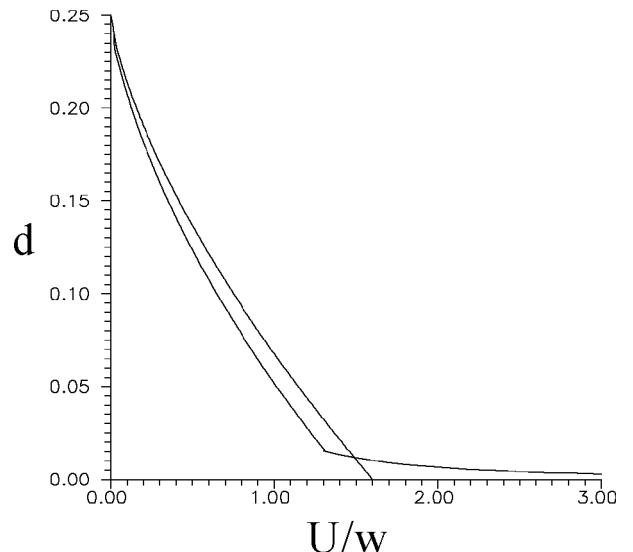


Рис. 5. Концентрація двійок, знайдена в цій праці, та відповідний результат праць [16–19]. Параметр корельованого переносу $\tau = 0.1$.

Важливо відзначити, що при зростанні параметра U/w вид залежності $d(U/w)$ змінюється. Як наслідок крива має злам у точці переходу метал-діелектрик. Отримана тут залежність $d(U/w)$ для випадку $\tau = 0$ (модель Габбарда) добре узгоджується з результатом праці [29], одержаним для моделі Габбарда в граници нескінченної розмірності простору (на рис. 6 порівняно концентрації двійок як функції U/ε_0 , де ε_0 є середня зонна енергія електронів).

V. ЕНЕРГІЯ ОСНОВНОГО СТАНУ

Енергію основного стану системи в розрахунку на вузол ґратки запишімо як суму кінетичної та потенціальної енергії електронів

$$\frac{E_0}{N} = \frac{E_k}{N} + Ud, \quad (5.1)$$

тут d задається виразом (4.2) в металічній фазі і виразом (4.4) в діелектричній фазі. Для знаходження кінетичної енергії електронів використовуємо формулу

$$\frac{E_k}{N} = \frac{1}{N} \left(\sum_{ij\sigma} t_{ij} \langle X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} \rangle + \sum_{ij\sigma} \tilde{t}_{ij} \langle X_i^{2\bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma}2} \rangle + \sum_{ij\sigma} \eta_\sigma t'_{ij} (\langle X_i^{\sigma 0} X_j^{\bar{\sigma}2} \rangle + e.c.) \right). \quad (5.2)$$

Середні у виразі (5.2) знайдімо за допомогою функцій (2.6)–(2.9):

$$\langle \sum_{ij} t_{ij} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} \rangle = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{A_{\mathbf{k}}^1}{e^{\frac{E_1(\mathbf{k})}{k_B T}} + 1} + \frac{B_{\mathbf{k}}^1}{e^{\frac{E_2(\mathbf{k})}{k_B T}} + 1} \right), \quad (5.3)$$

$$\langle \sum_{ij} \tilde{t}_{ij} X_i^{2\bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma}2} \rangle = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{A_{\mathbf{k}}^4}{e^{\frac{E_1(\mathbf{k})}{k_B T}} + 1} + \frac{B_{\mathbf{k}}^4}{e^{\frac{E_2(\mathbf{k})}{k_B T}} + 1} \right), \quad (5.4)$$

$$\langle \sum_{ij} t'_{ij} X_i^{\sigma 0} X_j^{\bar{\sigma}2} \rangle = \frac{\eta_\sigma}{4N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{t'(\mathbf{k})}{E_2(\mathbf{k}) - E_1(\mathbf{k})} \left(\frac{1}{e^{\frac{E_1(\mathbf{k})}{k_B T}} + 1} - \frac{1}{e^{\frac{E_2(\mathbf{k})}{k_B T}} + 1} \right). \quad (5.5)$$

Для розрахунку (5.3–5.5) при нульовій температурі перейдімо до інтегрування з прямокутною густиновою станів:

$$\langle \sum_{ij} t_{ij} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} \rangle = \frac{1}{4w} \int_{-w}^w (A^1(\epsilon) \Theta(-E_1(\epsilon)) + B^1(\epsilon) \Theta(-E_2(\epsilon))) d\epsilon, \quad (5.6)$$

$$\langle \sum_{ij} \tilde{t}_{ij} X_i^{2\bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma}2} \rangle = \frac{1}{4w} \int_{-w}^w (A^4(\epsilon) \Theta(-E_1(\epsilon)) + B^4(\epsilon) \Theta(-E_2(\epsilon))) d\epsilon, \quad (5.7)$$

$$\langle \sum_{ij} t'_{ij} X_i^{\sigma 0} X_j^{\bar{\sigma}2} \rangle = \frac{\eta_\sigma}{4w} \int_{-w}^w \frac{(1-\tau)\epsilon}{E_2(\epsilon) - E_1(\epsilon)} (\Theta(-E_1(\epsilon)) - \Theta(-E_2(\epsilon))) d\epsilon. \quad (5.8)$$

Таким чином, отримаємо для $|\varepsilon|_{1,2} < w$ (металічна фаза)

$$\begin{aligned} \frac{E_0}{N} = & U d - (1-\tau) \frac{w}{2} + \frac{U^2}{2wg} \left(\frac{1-\tau}{2g} + P \right) F - \frac{U^2}{w} \frac{\tau^2 C}{gD} (1 + 3CP) \\ & + \frac{U^2}{4w} (4\tau^2 C + P(12\tau^2 C^2 - D) D^{-\frac{3}{2}} \ln \frac{L_1}{L_2}), \end{aligned} \quad (5.9)$$

де

$$\begin{aligned} g &= (1-\tau)(1-2d), \\ P &= \frac{(2\tau^2 C - (1-\tau))}{D}, \\ F &= \left(1 - \frac{1}{4} \frac{(1-\tau)^2}{g^2 - \tau^2 C^2} \right)^{-1}. \end{aligned}$$

Для $|\varepsilon|_{1,2} > w$ (діелектрична фаза)

$$\begin{aligned} \frac{E_0}{N} = & U d + \tau \frac{U^2}{2w} \frac{(Q_1 - Q_2)}{D} (1 + 3CP) + \frac{Q_1 + Q_2}{4} P \\ & + \frac{U^2}{4w} (4\tau^2 C + P(12\tau^2 C^2 - D) D^{-\frac{3}{2}} \ln \left| \frac{C^{\frac{1}{2}} Q_1 - Cw - 2\tau C U}{C^{\frac{1}{2}} Q_1 + Cw - 2\tau C U} \right|). \end{aligned} \quad (5.10)$$

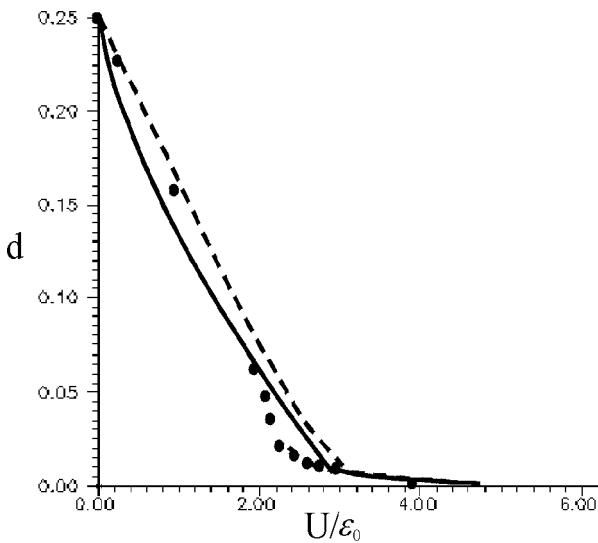


Рис. 6. Порівняння залежностей $d(U/\varepsilon_0)$: неперервна лінія — наш результат, штрихована лінія — результат ітерованої теорії збурень, точки — результат методу QMC.

За відсутності корельованого переносу ($\tau = 0$) звідси одержуємо відповідні формули праці [22].

Залежності енергії основного стану від U/w для певних значень τ показані на рис. 7. Видно, що E_0/N має злам у точці ПМД. Зростання параметра корельованого переносу τ приводить як до зменшення абсолютної величини кінетичної енергії електронів (звуження енергетичної зони), так і до зменшення потенційальної енергії електронів (зменшення концентрації подвійно зайнятих вузлів). Отже, корельований перенос електронів суттєво змінює енергію основного стану системи в ділянці поблизу ПМД.

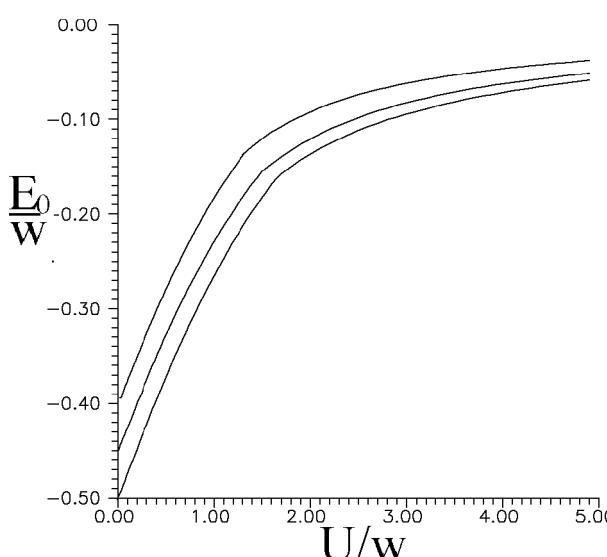


Рис. 7. Енергія основного стану як функція параметра U/w : нижній графік відповідає значенню $\tau = 0$, середній — $\tau = 0.1$, верхній — $\tau = 0.2$.

Подібний висновок зробили автори праць [24,30], які досліджували основний стан моделі Гартрі-Фока в одновимірному випадку та методом середнього поля в техніці допоміжних бозонів відповідно. Зауважмо, проте, що існує проблема визначення коректного критерію ПМД в методі допоміжних бозонів (див. у цьому зв'язку праці [18,31]).

При $\tau = 0$ (модель Габбарда) залежність енергії основного стану, яку ми отримали, добре узгоджується з межами на величину енергії основного стану, знайденими для тривимірного випадку в праці [32] (рис. 8)

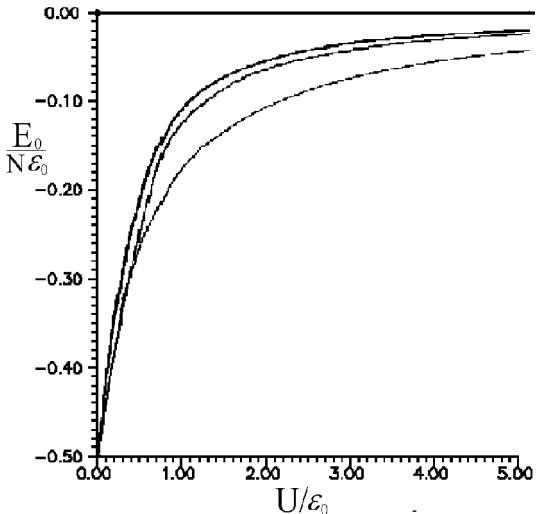


Рис. 8. Верхня (верхня крива) та нижня (нижня крива) межі на енергію основного стану у тривимірному випадку та енергія основного стану, знайдена в цій праці (середня крива).

VI. ВИСНОВКИ

У цій праці ми дослідили вплив корельованого переносу на перехід метал-діелектрик та середню енергію електронів у парамагнетному основному стані моделі з нееквівалентними габбардівськими підзонами при половинному заповненні. Для знаходження одноелектронної функції Гріна та енергетичного спектра використано нове двополюсне наближення, запропоноване в праці [22]. Знайдено квазічастинковий енергетичний спектр, залежний від величин енергії внутрішньоатомного кулонівського відштовхування U , напівширини енергетичної зони w , концентрації полярних станів (дірок та двійок) та параметра корельованого переносу τ . За допомогою виразу для енергетичної щіlinи описано ПМД в системі при половинному заповненні зони ($n = 1$). Критерій ПМД залежить від величини параметра корельованого переносу. Перехід з діелектричного в металічний стан відбувається при зменшенні параметра U/w (зі збільшенням w при прикладанні зовнішнього тиску чи легуванні). Отриманий критерій ПМД відтворює точ-

ний критерій, знайдений в окремому випадку моделі, коли нехтується гібридизацією між габбардівськими підзонами.

Обчислено концентрацію полярних станів у металічній та діелектричній фазах. У точці ПМД залежність $d(U/w)$ має злам (цей результат узгоджується з результатом праці [29]).

Отримано залежність енергії основного стану моделі від параметрів U/w та τ . Показано, що в точці ПМД залежність енергії основного стану моделі від

U/w має злам (подібну особливість енергії основного стану знайдено в праці [29]), пов'язаний зі зміною поведінки при переході з металічного в діелектричний стан. Величина енергії основного стану лежить у межах, установлених у праці [32].

Застосування використаного тут наближення для опису ПМД при ненульових температурах та узагальнення його для опису антиферомагнетного впорядкування в системі будуть проведені в наступних працях.

- [1] J. Hubbard, Proc. R. Soc., London, Ser. A **276**, No. 1369, 238 (1963).
- [2] ІО. А. Изюмов, Усп. физ. наук **165**, № 4, 403 (1995).
- [3] F. Gebhard, *The Mott metal-insulator transition: models and methods* (Springer, Berlin, 1997).
- [4] Л. Д. Дидух, Фіз. тверд. тела **13**, № 8, 1217 (1977).
- [5] J. E. Hirsch, Physica C **158**, 326 (1989); J. E. Hirsch, Physica B **199–200**, 366 (1994).
- [6] Л. Дидух, Журн. фіз. досл. 1, № 2, 241 (1997).
- [7] Л. Д. Дидух, В. Д. Дидух, *Упорядоченные состояния в материалах с узкими зонами проводимости* (Висша школа, Львов, 1980).
- [8] D. K. Campbell, J. T. Gammel, E. Y. Loh, Phys. Rev. B **42**, No. 1, 475 (1990).
- [9] J. E. Hirsch, Physica B **163**, 291 (1990).
- [10] F. Marsiglio, J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **41**, No. 10, 6435 (1990).
- [11] J. Appel, M. Grodzicki, F. Paulsen, Phys. Rev. B **47**, No. 5, 2812 (1993).
- [12] H. Q. Lin, J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **52**, No. 22, 16155 (1995).
- [13] Л. Д. Дидух, препрінт Ин-та теор. физ. АН УССР, № ИТР-89-22Р, Київ (1989).
- [14] J. C. Amadon, J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **54**, No 9, 6364 (1996).
- [15] L. A. Didukh, Cond. Matt. Phys. (Lviv) **1**, No. 1(13), 125 (1998).
- [16] Л. Дидух, В. Ганкевич, Ю. Довгоп'ятій, Журн. фіз. досл. **2**, № 3, 362 (1998).
- [17] L. Didukh, V. Hankevych, Yu. Dovhopaty, Physica B **259–261**, 719 (1999).
- [18] Л. Д. Дидух, В. В. Ганкевич, Фіз. низк. темп. **25**, № 5, 481 (1999).
- [19] L. Didukh, V. Hankevych, Phys. Status Solidi B **211**, No. 2, 703 (1999).
- [20] Д. Н. Зубарев, Ю. Г. Рудой, Усп. физ. наук **163**, № 3, 103 (1993).
- [21] L. Didukh, Phys. Status Solidi B **206**, R5 (1998).
- [22] L. Didukh, Acta. Phys. Pol. B **31**, 3097 (2000).
- [23] J. Hubbard, Proc. R. Soc., London, Ser. A **285**, No. 1403, 542 (1965).
- [24] B. Bulka, Phys. Rev. B **57**, No. 17, 10303 (1998).
- [25] R. Strack, D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett **70**, No. 17, 2637 (1993).
- [26] A. A. Ovchinnikov, J. Phys.: Cond. Matt. **6**, 11057 (1994).
- [27] J. de Boer, A. Schadschneider, Phys. Rev. Lett **75**, No. 23, 4298 (1995).
- [28] L. Arrachea, A. Aligia, Phys. Rev. Lett **73**, No. 16, 2240 (1994).
- [29] G. Kotliar, M. Rozenberg, *The Mott transition in infinite dimensions: old ideas and some surprises*. In: *The Hubbard Model* (edited by M. Baeriswyl, New-York and London, Plenum Press, 1995, p. 155–166).
- [30] L. Arrachea, E. R. Gagliano, A. A. Aligia, Phys. Rev. B **55**, No. 2, 1173 (1997).
- [31] M. Imada, A. Fujimori, Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70**, No. 4, 1039 (1998).
- [32] W. D. Langer, D. C. Mattis, Phys. Lett. A **36**, 139 (1971).

GROUND STATE ENERGY AND METAL-INSULATOR TRANSITION IN A MODEL OF NARROW-BAND PARAMAGNET

L. Didukh, Yu. Skorenkyy
*Ternopil State Technical University, Department of Physics,
 56 Rus'ka Str., Ternopil, UA-46001, Ukraine*
E-mail: didukh@tu.edu.te.ua

The ground state energy and metal-insulator transition in a model of a narrow-band paramagnet with non-equivalent Hubbard subbands at half-filling and zero temperature are investigated. The single-particle energy spectrum, the criterion of metal-insulator transition, as well as the dependence of current carrier concentration and energy of the system on model parameters are obtained.