

УДК 537.311

Юрій Скоренький**ЛОКАЛІЗАЦІЯ ЕЛЕКТРОНІВ У МАТЕРІАЛАХ ІЗ
АНДЕРСОН-ГАББАРДІВСЬКИМИ ЦЕНТРАМИ**

В роботі досліджено поведінку хімічного потенціалу та ефективної маси носіїв струму в моделі електронної підсистеми матеріалу із періодично розташованими андерсон-габбардівськими центрами. Ефект прикладання зовнішнього тиску враховано шляхом включення в гамільтоніан доданків, які описують фононну підсистему та пружну енергію кристалічної ґратки. Встановлено області значень концентрації електронів, яким характерні різні типи провідності.

Ключові слова: андерсон-габбардівські центри, хімічний потенціал, ефективні маси носіїв струму

Досягнутий в останні роки рівень розвитку нанотехнологій дозволяє виготовляти електронні прилади на основі низькорозмірних систем із наперед заданими властивостями. Теоретичний опис та прогнозування властивостей таких систем проводиться, насамперед, на основі квантово-механічних моделей, які є розвиненнями та узагальненнями моделі Андерсона [1]. На сьогодні надзвичайною увагою користується періодична модель Андерсона [2,3], котра разом із моделлю Габбарда становлять основу для опису властивостей вузькозонних матеріалів. У роботах [4,5] на основі одно- та дводомішкової моделей Андерсона досліджувалася електропровідність систем з квантовими точками. При цьому у гамільтоніані в роботі [5] враховувалися процеси кулонівської взаємодії та гібридизації «зонних» та «локалізованих» рівнів і досліджувалася залежність провідності від величини кулонівської взаємодії між локалізованими електронами.

Модель андерсон-габбардівського матеріалу, яка узагальнює моделі, запропоновані у роботах [2,3], врахуванням особливостей

кореляційних ефектів у вузьких зонах, зокрема корельованого переносу електронів, електрон-фононної взаємодії, була запропонована у роботі [6]. Із застосуванням формалізму функцій Гріна було розраховано квазічастинковий енергетичний спектр як функцію модельних параметрів, температури та зовнішнього тиску. Було показано, що існує граничне значення прикладеного тиску, вище якого ширина енергетичної щілини у квазічастинковому спектрі швидко зменшується при підвищенні температури й система переходить у стан сильно скорельованого металу. У цій роботі досліджено поведінку хімічного потенціалу та локалізацію електронів у моделі [6] матеріалу із андерсон-габбардівськими центрами.

Температурна залежність хімічного потенціалу.

На основі гамільтоніана, який описує локалізовану та зонну підсистему матеріалу із андерсон-габбардівськими центрами а також їх гібридизацію, у роботі [6] було розраховано квазічастинковий спектр локалізованих електронів:

$$E_{1,2} = -\mu + \frac{E_d + E_b(u)}{2} + \frac{U\langle n_\downarrow \rangle}{2} + \frac{t_k(u)}{2} \mp \frac{1}{2} \sqrt{(E_d - E_b(u) + U\langle n_\downarrow \rangle - t_k(u))^2 + 4(V(u))^2}, \quad (1)$$

де μ — хімічний потенціал системи, E_d — глибина залягання локалізованих рівнів, $E_b(u)$ — положення центру зони, U — параметр внутрішньоатомного кулонівського відштовхування, n_σ — концентрація електронів зі спіном σ , $t_k(u)$ — зонний інтеграл переносу електронів, $V(u)$ — параметр гібридизації локалізованих та зонних станів. Спектр (1), розрахований із застосуванням процедури проектування, еквівалентний до відповідних результатів [7, 8], отриманих у варіаційному підході. Відмінною рисою виразу (1) та результатів [7, 8] від результатів наближення спектральної густини та модифікованої сплавної аналогії [9] є наявність гібридизаційної щілини у спектрі навіть у границі $U=0$.

Суттєвою є залежність спектра від температури та параметра деформації ґратки u , рівноважне значення якого визначається з

умови мінімуму термодинамічного потенціалу Гіббса. Дослідимо поведінку хімічного потенціалу μ в парамагнітному стані, використовуючи рівняння для визначення концентрації електронів:

$$\langle n \rangle = -\frac{1}{aw} \ln \left| \frac{e^{-b-aw} + 1}{e^{-b+aw} + 1} \right| + 2 \left[\left(e^{\frac{-\mu}{\theta}} + 1 \right) \left(1 + \frac{1}{e^{\frac{-\mu}{\theta}} + 1} - \frac{1}{e^{\frac{-\mu+u}{\theta}} + 1} \right) \right]^{-1}, \quad (2)$$

де $a = \frac{1}{\theta} \left(1 + \frac{BV_0}{2w} \bar{u} \right)$; $b = \frac{1}{\theta} (-\mu + E_b(\bar{u}))$, $\theta = kT$. На рисунку 1 наведено результати чисельного розрахунку хімічного потенціалу моделі у випадку напівзаповненої зони, коли можливий перехід метал-діелектрик.

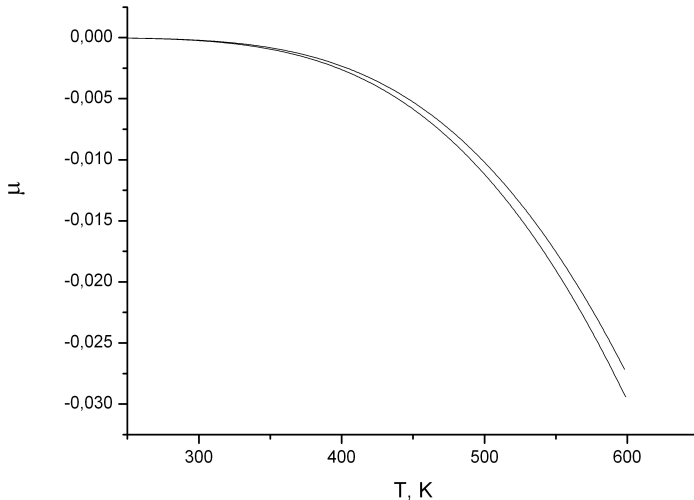


Рисунок 1. Залежність хімічного потенціалу системи від температури. Верхня крива відповідає значенню параметра $\frac{pV_0}{w} = 0$, нижня крива — $\frac{pV_0}{w} = 2$.

Зміна хімічного потенціалу стає доволі різкою для того, щоб матеріал проявляв значні термо-ерс лише в області високих температур. При низьких та помірних температурах виправданим є за-

стосування значення хімпотенціалу для основного стану. Концентрація подвійно зайнятих вузлів у моделі різко зменшується лише у точці переходу з металічного у діелектричний стан [6]. У режимі сильної внутрішньоатомної кореляції ця величина слабо залежить від електрон-фононої взаємодії [10], але є дуже чутливою до відношення параметра кулонівської кореляції до ширини зони [11,12].

Ефективні маси носіїв струму в моделі андерсон-габбардівського матеріалу в режимі сильних кореляцій

Розглянемо андерсон-габбардівську систему, яка описується ефективним гамільтоніаном, отриманим у статті [13]. У цьому випадку рівняння руху для функції Гріна $\langle\langle X_i^{0\uparrow} | X_j^{\uparrow 0} \rangle\rangle$ має вигляд:

$$E \langle\langle X_i^{0\uparrow} | X_j^{\uparrow 0} \rangle\rangle = \frac{\langle X_i^0 + X_i^\uparrow \rangle}{2\pi} + E_d \langle\langle X_i^{0\uparrow} | X_j^{\uparrow 0} \rangle\rangle + \sum_p \varepsilon_p \langle\langle X_p^{0\uparrow} | X_j^{\uparrow 0} \rangle\rangle + \sum_p \tilde{\varepsilon}_p \langle\langle X_p^{\downarrow 2} | X_j^{\uparrow 0} \rangle\rangle - \left\langle \sum_{kk'} I_1 (ikk'i) c_{k\downarrow}^+ c_{k'\downarrow} \right\rangle \langle\langle X_i^{0\uparrow} | X_j^{\uparrow 0} \rangle\rangle + \left\langle \sum_{kk'} I_2 (ikk'i) c_{k\downarrow}^+ c_{k'\downarrow} \right\rangle \langle\langle X_i^{0\uparrow} | X_j^{\uparrow 0} \rangle\rangle. \quad (3)$$

Тут до трансляційної частини гамільтоніана застосовано наближення типу проектування, а до обмінної частини — наближення середнього поля. Такий підхід виявився плідним у низці робіт (див. [14]) для дослідження особливостей провідності мотт-габбардівських систем. Подібним чином записуємо рівняння руху для функції Гріна $\langle\langle X_p^{\downarrow 2} | X_j^{\uparrow 0} \rangle\rangle$. Таким чином, у границі сильної внутрішньоатомної кулонівської взаємодії енергетичний спектр нижньої підзони матиме вигляд:

$$E_\sigma(\vec{k}) = E_d + \alpha_\sigma t(\vec{k}) + \beta_\sigma + \beta_\sigma^J, \quad (4)$$

де α_σ — спін-залежний коефіцієнт звуження зони; β_σ — спін-залежний зсув центра підзони, обумовлений трансляційними процесами; β_σ^J — спін-залежний обмінний зсув.

Для ефективної маси у парамагнітному випадку отримуємо вираз $m_{eff} = m_0/\alpha$, де m_0 — маса невзаємодіючих носіїв, коефіцієнт кореляційного звуження зони

$$\alpha = 1 - \frac{n^d}{2} \left(1 - \frac{n^d}{2 - n^d} \right), \quad (5)$$

причому n^d — концентрація електронів у локалізованій підсистемі. Будемо вважати, що частина електронів колективізована, тобто ступінь колективізації $x = \frac{2n^d}{n} > 0$. Тоді:

$$\alpha = 1 - \frac{x \cdot n}{2} + \frac{x^2 \cdot n^2}{2(2 - xn)}. \quad (6)$$

Вираз (6) може досягати максимуму в області дозволених концентрацій або монотонно зростати, залежно від легування.

У випадку, коли система знаходиться під впливом зовнішнього тиску або концентрацію електронів у локалізованій підсистемі можна змінювати шляхом легування, від концентраційної залежності ефективної маси локалізованих електронів може суттєво змінюватися (див. рис. 2). Справа у тому, що у випадку, коли всі електрони провідності знаходяться у d -зоні (при $x=1$), отримується залежність, характерна для легованого мотт-габбардівського діелектрика, із концентраційними інтервалами провідності електронного та діркового типів, а коли всі електрони знаходяться у s -зоні ($x=0$), ефективна маса носіїв є чисто зонного типу.

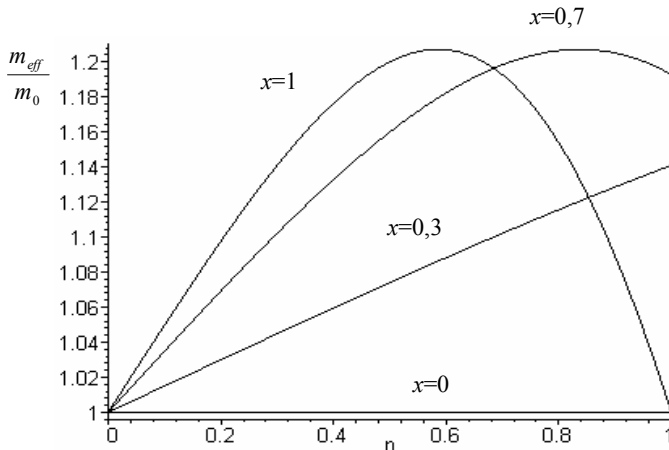


Рисунок 2. Концентраційна залежність ефективної маси при різних ступенях колективізації електронів.

В проміжних випадках, коли електрони розподілені певним чином між d - і s -зонами, в моделі можна досягти як зсуву області максимуму концентраційної залежності ефективної маси до більших значень n , так і повного вилучення інтервалу з дірковим типом провідності.

Висновки.

У моделі матеріалу з андерсон-габбардівськими центрами, яка враховує особливості кореляційних ефектів у вузьких зонах, зокрема корельованого переносу електронів, електрон-фононної взаємодії та в конфігураційному представленні дозволяє явно виділити процеси, які формують квазічастинкові підзони та гібридизаційні процеси, локалізація електронів є наслідком непрямих взаємодій між зонними електронами через локалізовані стани та може домінувати у широкому температурному інтервалі. Значне зростання ефективної маси та її сильна залежність від легування вказує на здатність моделі описувати широкий клас сполук із важкими ферміонами. На відміну від результатів підходу нескінченної вимірності простору, метод проектування в рівняннях руху для функцій Гріна не призводить до наявності квазічастинкового піку на рівні Фермі, проте якісна картина переходу метал-діелектрик залишається вірною.

Література

1. Anderson P. W. Localized magnetic states in metals / P. W. Anderson // *Phys. Rev.* — 1961. — vol. 124. — pp. 41–53.
2. Дидух Л. Д. Эффективный гамильтониан в модели Андерсона / Л. Д. Дидух, И. В. Стасюк // *Физика металлов и металловедение.* — 1968. — Т. 26, № 4. — С. 582–588.
3. Дидух Л. Д. К теории ферромагнетизма с учетом s - d -переходов / Л. Д. Дидух, И. В. Стасюк // *Укр. физ. журн.* — 1968. — Т. 13. — С. 1774–1780.
4. Ping Zhang. Spin-dependent transport through an interacting quantum dot / Ping Zhang, Qi-Kun Xue, Yupeng Wang, and Xie X.C. // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — vol. 89. — 286803 [4 pages].
5. Dias da Silva L. Finite-temperature conductance signatures of

- quantum criticality in double quantum dots / L. Dias da Silva, K. Ingersent, N. Sandler, and S. E. Ulloa // *Phys. Rev. B.* — 2008. — vol. 78. — 153304 [4 pages].
6. Skorenkyy Yu. Phase diagram of metal-insulator transition in systems with Anderson-Hubbard centers / Yu. Skorenkyy, L. Didukh, O. Kramar, Yu. Dovhopyaty // *Acta Physica Polonica B.* — 2012. — vol. 112. — pp. 532–534.
 7. Itai K. Interaction effect in the Kondo energy of the periodic Anderson-Hubbard model / K. Itai, P. Fazekas // *Phys. Rev. B.* — 1996. — vol. 54. — pp. R752-R755.
 8. Hagymasi I. Periodic Anderson model with correlated conduction electrons: Variational and exact diagonalization study / I. Hagymasi, K. Itai, J. Soloyom // *Phys. Rev. B.* — 2012. — vol. 85. — 235116 [13 pages].
 9. Meyer D. Ferromagnetism in the periodic Anderson model: a comparison of spectral density approximation, modified alloy analogy and modified perturbation theory / D. Meyer, W. Nolting. // *Eur. Phys. Journ.* — 2000. vol. 18. — pp.385–395..
 10. Bauer J. Competition between antiferromagnetic and charge order in the Hubbard-Holstein model // J. Bauer, A. C. Hewson // *Phys. Rev. B.* — 2010. — vol. 81. — 235113 [17 pages].
 11. Kotliar G. Landau Theory of the Finite Temperature Mott Transition / G. Kotliar, E. Lange, M. Rozenberg // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — vol. 84. — pp. 5180–5183.
 12. Skorenkyy Yu. Mott transition, ferromagnetism and conductivity in the generalized Hubbard model / Yu. Skorenkyy, L. Didukh, O. Kramar, Yu. Dovhopyaty // *Acta Physica Polonica A.* — 2007. — vol. 111, № 4. — pp. 635–644.
 13. Дідух Л. Д. Ефективний гамільтоніан періодичної моделі Андерсона для опису систем з квантовими точками / Л. Д. Дідух, О. І. Крамар, Ю. Л. Скоренький, Ю. М. Довгоп'ятий, Ю. В. Дрогобицький // *Вісник Тернопільського національного технічного університету.* — 2010. — Т.15, № 4. — С. 168–177.
 14. Didukh L. Metallic ferromagnetism in a generalized Hubbard model / L. Didukh, O. Kramar and Yu. Skorenkyy. — *New Developments*

in Ferromagnetism Research. Ed.: V. N. Murray. — Nova Science Publishers, Inc. — 2005. — pp. 39–80.

Yuriy Skorenkyy

**LOCALIZATION OF ELECTRONS IN MATERIALS WITH
ANDERSON-HUBBARD CENTERS**

Behavior of chemical potential and effective masses of current carriers in the model of a strongly correlated system with periodically spaced Anderson-Hubbard centers has been studied. Effect of the external pressure has been taken into account in the Hamiltonian terms which describe phonon subsystem and elastic energy of crystal lattice. The concentration regions with different types of conductivity have been identified.

Keywords: *Anderson-Hubbard centers, chemical potential, effective masses of current carriers*