

УДК 537.9, 538.956

О. Крамар, канд. фіз.-мат. наук, доц., Ю. Скоренький, канд. фіз.-мат. наук, доц.,
Ю. Довгоп'ятий

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

ПЕРЕХІД МЕТАЛ-ДІЕЛЕКТРИК У ДВОКРАТНО ОРБИТАЛЬНО ВИРОДЖЕНІЙ МОДЕЛІ У ВИПАДКУ ГУСТИНИ СТАНІВ З АСИМЕТРІЄЮ НА КРАЮ ЗОНИ

O. Kramar, Yu. Skorenkyu, Yu. Dovhopyaty

METAL-INSULATOR TRANSITION IN THE DOUBLY ORBITALLY DEGENERATED MODEL AT THE DENSITY OF STATES WITH ASYMMETRY AT THE BAND-EDGE

У роботах [1-3] було показано, що форма незбуреної густини електронних станів (ГС) визначає критичну концентрацію, при якій виникає спонтанне феромагнітне впорядкування. Разом з тим об'єктивно існує необхідність розширити такий підхід на випадок опису умов переходу метал-діелектрик, оскільки особливості ГС прямо впливатимуть на поведінку хімічного потенціалу та концентрації полярних станів.

У попередній роботі авторів [4] з використанням варіанту узагальненого наближення Гартрі-Фока в границі сильної кулонівської кореляції $U \gg t$ та сильної обмінної взаємодії $U \gg (U - J_H)$ (ці умови дозволяють знехтувати станами вузлів із заповненням, більшими за двійкові, та так-званими негундівськими двійковими станами) було знайдено одноелектронну запізнюючу функцію Гріна та енергетичний спектр системи. Концентрація двократно зайнятих електронами вузлів ґратки (двійок) визначається співвідношенням:

$$d = \frac{1}{8} \int_{-w}^w \rho(\varepsilon) \left\{ \frac{1 + A(\varepsilon)}{\exp\left(-\frac{E_1(\varepsilon)}{kT}\right) + 1} + \frac{1 - A(\varepsilon)}{\exp\left(-\frac{E_2(\varepsilon)}{kT}\right) + 1} \right\} d\varepsilon \quad A(\varepsilon) = \frac{U - J_H - \frac{\varepsilon}{2}}{\sqrt{(U - J_H)^2 - (U - J_H)\varepsilon + \varepsilon^2 \left(32d^2 + \frac{1}{4}\right)}} \quad (1)$$

де $\rho(\varepsilon)$ - незбурена густина електронних станів, k - стала Больцмана, T - абсолютна температура, $E_1(\varepsilon), E_2(\varepsilon)$ отримуються заміною $t(\vec{k}) \rightarrow \varepsilon$ у виразах [4] для спектрів підзон. Хімічний потенціал знаходився шляхом розв'язування рівняння $c = 2d$, де концентрація діркових станів c визначається з рівняння:

$$c = \left(\frac{c}{2} + \frac{1}{8}\right) \int_{-w}^w \rho(\varepsilon) \left\{ \frac{1 - A(\varepsilon)}{\exp\left(\frac{E_1(\varepsilon)}{kT}\right) + 1} + \frac{1 + A(\varepsilon)}{\exp\left(\frac{E_2(\varepsilon)}{kT}\right) + 1} \right\} d\varepsilon \quad (2)$$

У роботі розглянуто ГС з асиметрією (див., наприклад, [1], рис. 1) $\rho(\varepsilon) = c\sqrt{w^2 - \varepsilon^2} / (w + a\varepsilon)$, з вільним параметром $c = (1 + \sqrt{1 - a^2}) / (w\pi)$. Змінюючи параметр асиметрії a , можна плавно змінювати форму розподілу ГС від симетричної напівеліптичної ГС ґратки Бете ($a=0$) до ГС, що розходить на краю підзони ($a=1$).

З використанням методів числового розрахунку на основі взаємоузгодженого розв'язування рівнянь (1) та (2) отримано концентрації двійок d та розраховано ширини енергетичної щілини при різних значеннях енергетичних параметрів моделі та температурах для випадку асиметричної ГС.

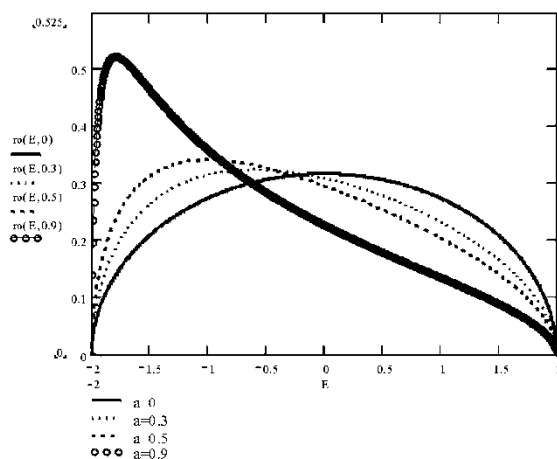


Рисунок 1 – ГС з асиметрією на краю зони.

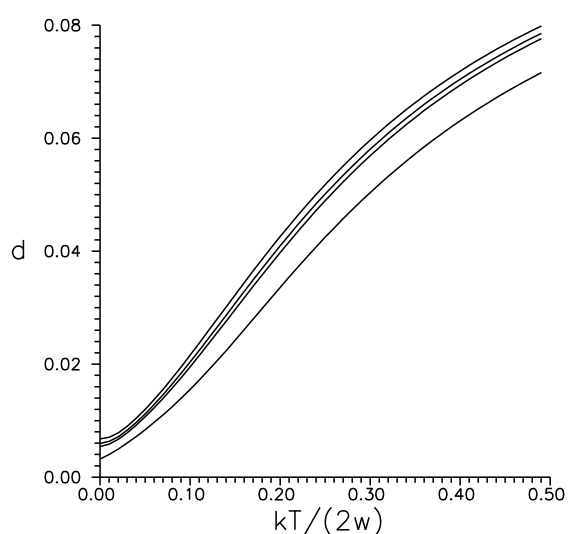


Рисунок 2 – Залежність концентрації двійкових станів від температури при $(U - J_H)/2w = 0,6$ для ГС з асиметрією на краю зони при різних значення параметра асиметрії a - криві зверху вниз: $a=0, 0,3, 0,5$ та $0,99$ відповідно.

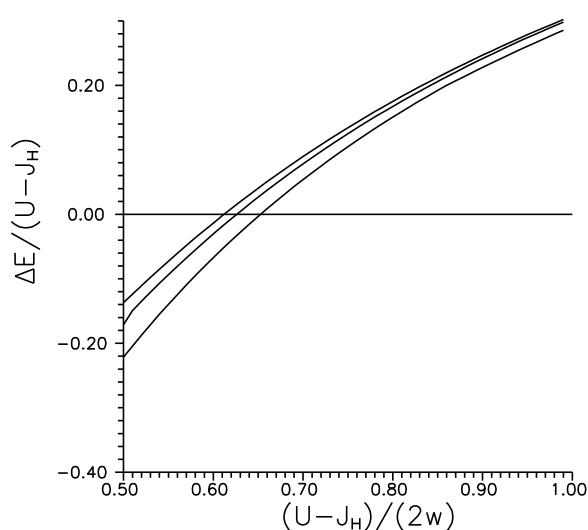


Рисунок 3 – Залежність нормованої ширини енергетичної щілини при температурі $k_B T / 2w = 0,2$ від енергетичного параметра $(U - J_H) / 2w$ для ГС з асиметрією на краю зони при різних значення параметра асиметрії a - криві зверху вниз: $a=0, 0,5$ та $0,99$ відповідно.

Наявність в ГС асиметрії на краю зони суттєво впливає (див. рис. 2) на кількість двійкових станів при зміні температури. У підсумку відзначимо, що лише при низьких температурах критерій переходу у двократно орбітально виродженій моделі Габбарда слабо залежить від форми незбуреної електронної ГС, тоді як при високих температурах вплив асиметрії у ГС є досить значним (див. рис. 3).

Література

1. Wahle J., Blumer N., Schlipf J., Held K., and Vollhardt D. // Phys. Rev. B.- 1998.- vol. 58.- p. 12749-12757.
2. Meyer D., Nolting W. // J. Phys.: Condens. Matter.- 1999.- vol. 11.- p. 5811-5828.
3. Didukh L., Kramar O. and Skorenkyu Yu. // Physica B:Condensed Matter.- 2005.- vol. 359-361.- p.681-683.
4. Didukh L., Dovyhopaty Yu., Skorenkyu Yu. // Укр. Фіз. Журн.- 2000.- Т. 45.- С. 1207-1210.