

УДК 538.9

Леонід Дідух, Юрій Довгоп’ятий, Олександр Крамар, Юрій Скоренький
Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя,
м. Тернопіль, Україна

МОДИФІКОВАНА ФОРМА ПОЛЯРНОЇ МОДЕЛІ: ЕФЕКТИ МІЖЕЛЕКТРОННИХ ВЗАЄМОДІЙ

Загальні теоретичні міркування та спостережувані особливості фізичних властивостей матеріалів з вузькими зонами провідності (оксиди, сульфідиди та селеніди перехідних металів) вказують на необхідність узагальнення відомої моделі Габбарда. Така узагальнена модель вузькозонного матеріалу може бути зображена гамільтоніаном [1, 2]:

$$H = -\mu \sum_{i\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} - \mu_B h \sum_i (a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} - a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow}) + \sum_{ij\sigma} t_{ij}(n) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \sum_{ij\sigma} (J(iij) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} n_{i\bar{\sigma}} + e.c.) + \\ + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{ij\sigma\sigma'} J(ijji) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma'}^+ a_{i\sigma} a_{j\sigma'} + \frac{1}{2} \sum_{ij\sigma\sigma'} J(ijjj) n_{i\sigma} n_{j\sigma'}.$$

Тут введені наступні позначення: μ – хімічний потенціал, μ_B – магнетон Бора, h – напруженість магнітного поля, U – енергія кулонівського відштовхування двох електронів з протилежними спінами на одному і тому ж вузлі кристалічної ґратки ($U=J(iiii)$),

$$t_{ij}(n) = t(ij) + n \sum_{k \neq i, k \neq j} J(ikjk),$$

$t(ij)$ – “зонний” інтеграл переносу, n – середнє число електронів на вузол, $J(ijkl)$ – матричний елемент електрон-електронної взаємодії, побудований на функціях Ваньє, $a_{i\sigma}^+$ ($a_{i\sigma}$) – оператор народження (знищення) електрона із проекцією спіна σ (\uparrow, \downarrow) на i -тому вузлі кристалічної ґратки, $\bar{\sigma}$ означає проекцію спіна, протилежну до σ , $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$.

Важливою особливістю модельного гамільтоніана (1), яка відрізняє його від генетично пов’язаних з ним аналогів (полярна модель, модель Габбарда, модель Гірша, модель Ірхіна) є наявність в ньому ефективного інтеграла переносу, описуваного виразом (2), залежного від концентрації електронів. Врахування кореляційних інтегралів переносу $J(ikjk)$ приводить до наслідків, які дозволяють пояснювати низку особливостей фізичних властивостей матеріалів з вузькими енергетичними зонами.

В доповіді подані наступні результати досліджень моделі вузькозонного матеріалу, описуваного гамільтоніаном (1) (частково опубліковані в роботах [1-7]).

1. Отримані ефективні зображення гамільтоніана (1) для випадків слабкої та сильної внутрішньоатомних взаємодій. Якщо знехтувати міжатомними кулонівською та обмінною взаємодіями, то отримується своєрідна “несиметрична” модель Габбарда, особливістю якої є, зокрема, відсутність електронно-діркової симетрії. Проаналізовані наслідки, які впливають із відсутності електронно-діркової симетрії у вузьких енергетичних зонах,

залежності ширин зон від ступеня їх заповнення. Отримані модифіковані форми t - J -моделей в яких, зокрема, умови для реалізації високих температур надпровідного переходу є більш сприятливі, ніж у моделях, генетично пов'язаних із моделлю Габбарда.

2. На основі запропонованих методик отриманий енергетичний спектр електронів, який є точним у зонній та атомній границях, дозволяє описати перехід діелектрик-метал під дією зовнішнього тиску а також спостережуваний у вузькозонних матеріалах перехід парамагнітного металу у стан парамагнітного діелектрика при підвищенні температури (наприклад, у сполуках NiS_2 , $(\text{V}_{1-x}\text{Cr})_2\text{O}_3$). Особливістю спектру є його залежність від концентрації полярних станів (і від температури), що вказує на можливість специфічних “вузькозонних” ефектів, які дають змогу керувати переходом діелектрик-метал за допомогою легування, електричного та магнітного поля та через фотоэффект.

3. Показано, що тип провідності вузькозонної системи в режимі легуваного мотт-габбардівського діелектрика у випадку зміни концентрації електронів від 0 до 2 змінюється тричі. Отримана залежність провідності від ступеня заповнення зони. Отримані результати можуть пояснити зміну типу провідності, спостережувану у VO_x та $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_3$.

4. Отримано, що в легуваних мотт-габбардівських сполуках енергія активації повинна різко змінюватися поблизу $n=1$ (за рахунок корельованого переносу). Така різка зміна енергії активації дійсно спостерігається у сполуках $\text{Mn}_x\text{Fe}_{2-x}\text{O}_4$, $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$.

5. Для випадку слабких та помірних внутрішньоатомних взаємодій розрахована залежність енергії зв'язку від ступеня заповнення зони. Отримана залежність пояснює особливості залежності енергії зв'язку від атомного номера в перехідних металах – мінімум для Mn і наявність двох нееквівалентних максимумів (V, Co), а також залежності від атомного номера в перехідних металах температури плавлення та температурного коефіцієнта лінійного розширення.

6. Розраховані на основі гамільтоніана (1) температури Кюрі і Нееля застосовані для пояснення спостережуваних концентраційних залежностей температури Кюрі в дисульфідах перехідних металів та температури Нееля у високотемпературних надпровідних матеріалах і фазах Магнелі.

7. Розраховані енергетичний спектр та температура Вервея для фаз Магнелі ванадію, які дозволяють пояснити спостережувані температури переходу в цих матеріалах із діелектричного стану у металічний.

8. Сформульований ефективний гамільтоніан електронної підсистеми фулеридів у конфігураційному представленні, який враховує конкретні типи обмінних взаємодій, важливих для стабілізації магнітних впорядкувань, та трикратне орбітальне виродження, характерні для цих сполук. Побудований гамільтоніан дозволяє класифікувати процеси локалізації та делокалізації електронів.

9. Сформульована теоретична модель андерсон-габбардівського матеріалу із врахуванням особливостей кореляційних ефектів у вузьких зонах має ширшу область застосовності, ніж стандартна $s-d$ модель; зокрема, модельний гамільтоніан не тільки враховує основні типи взаємодій у вузькій орбітально невірродженій зоні, але й коректно описує ефекти непрямого переносу та непрямого обміну і може бути застосований до розгляду властивостей систем з квантовими точками. Узагальнено метод канонічного перетворення на випадок періодичної моделі Андерсона. Отримано критерій переходу метал-діелектрик при цілому значенні концентрації електронів в системі.

10. На основі нового варіанту наближення середнього поля розрахований енергетичний спектр електронів в моделі Хаббарда у двополюсному наближенні. Отриманий спектр є температурно-залежним, точним в атомній і зонній границях, відтворює хартрі-фоківський спектр у випадку слабких внутрішньоатомних взаємодій та спектр електронів, розрахований за теорією збурень у випадку сильних внутрішньоатомних взаємодій, дозволяє описати перехід діелектрик-метал. Показано, що послідовне врахування переходів вузол \leftrightarrow хаббардівська зона приводить не лише до зсувів атомних рівнів, але і до їх розмиття; тут є певна аналогія з допоміжною одновузловою задачею в теорії динамічного середнього поля.

11. Запропонована спінон-діркова модель для опису електричних і магнітних властивостей антиферомагнетиків типу оксидів і селенідів перехідних металів. Отримано, що зростання температури приводить до зростання провідності з максимумом в точці Нееля. При фазовому переході антиферомагнетизм-парамагнетизм першого роду може відбутися різке зростання провідності. Саме така ситуація спостерігається в антиферомагнітних оксидах.

12. Як розвиток теорії металічного феромагнетизму в узагальненій моделі Габбарда при реалістичних формах незбуреної густини станів було узагальнено підхід для розрахунку статичної електропровідності та ефективних мас носіїв струму на випадок спінової поляризації системи та розраховано транспортні характеристики в моделі з двократним орбітальним виродженням та реалістичною густиною енергетичних станів.

1. Л.Д. Дідух, Журн. Фіз. досл. **1**, 241 (1997).
2. L. Didukh, Acta Phys. Pol. B **31**, 3097 (2000).
3. L. Didukh, Yu. Skorenky, V. Hankevych, O. Kramar, Phys. Rev. B **64**, 144428 (2001).
4. L. Didukh, O.Kramar and Yu.Skorenky, in: *New Developments in Ferromagnetism Research*. Ed.: V.N. Murray (Nova Science Publishers Inc., New York, 2005), pp. 39-80.
5. Didukh L., Skorenky Yu., Kramar O. Condens. Matter Phys. **11**, 443 (2008).
6. Yu. Dovhopyaty, L. Didukh, O. Kramar, Yu. Skorenky, Yu.Drohobitsky, Укр. фіз. журн. **57**, 920 (2012).
7. Yu. Skorenky, L. Didukh, O. Kramar, Yu. Dovhopyaty, E-print cond-mat/1112.6325 [прийнято до друку в Acta Physica Polonica B, 2012].