

УДК 538.1; 539.2

Л. Дідух

(Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя)

КВАЗІКЛАСИЧНЕ НАБЛИЖЕННЯ В ПОЛЯРНІЙ МОДЕЛІ МЕТАЛУ: ЗАСТОСУВАННЯ ДО ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ У СИЛЬНОКОРЕЛЬОВАНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СИСТЕМАХ

Вихідним у пропонованому підході до опису фазових переходів у сильнокорельованих електронних системах (ССЕС) є представлення відповідного гамільтоніана модифікованої форми полярної моделі металу [1] у представленні оператора Хаббарда з наступним переходом до представлення Шубіна-Вонсовського (ШВ) з використанням квазікласичного наближення, яке полягає в заміні операторів ШВ s -числами. У такий спосіб розглядаються переходи діелектрик-метал, фазові переходи в антиферромагнітних та зарядовпорядкованих системах (спостережувани, зокрема, в оксидах, сульфідах і селенідах перехідних металів).

Проілюструємо пропонований підхід на прикладі опису переходу метал-діелектрик в парамагнітному стані. У цьому випадку можна обмежитися наступним гамільтоніаном –

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij\sigma} \alpha_{i\sigma}^+ h_i h_j^+ \alpha_{i\sigma} + d_i \alpha_{i\sigma} \alpha_{j\sigma}^+ d_j + U \sum_i d_i^+ d_i + H', \quad (1)$$

де $t_{ij\sigma}$ – інтеграл переносу електронів між вузлами j і i , U – величина внутрішньоатомного відштовхування двох електронів з протилежними спінами на вузлі, $\alpha_{i\sigma}^+$, $\alpha_{i\sigma}$ – оператори народження і знищення електрона на вузлі у стані $|i\sigma\rangle$, h_i^+ , h_i – оператори народження і знищення стану вузла з незайнятим електроном, d_i^+ , d_i – оператори народження і знищення стану вузла з двома електронами. H' описує переходи електронів, пов'язані із парним народженням і знищенням діркових і двійкових станів. Гамільтоніан (1) записаний для принципово важливого (для встановлення критерію переходу метал-діелектрик) випадку напівзаповненої s -зони (n – середнє число електронів на вузол, дорівнює одиниці).

Заміна α , h , d – операторів s -числами [1] приводить до наступного виразу для середньої енергії системи в розрахунку на вузол

$$\frac{\langle H \rangle}{N} = 8d - 2d \sum_k \varepsilon_{\bar{k}} + Ud; \quad (2)$$

$\sum_k \varepsilon_{\bar{k}} < 0$ – середня кінетична енергія не взаємодіючих електронів (сумування по $k < k_F$).

Мінімізація (2) по d дає вираз для середнього числа двійок (і дірок) на вузол:

$$d = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{U}{U_c} \right),$$

де $U_c = 8 \left| \sum_k \varepsilon_{\bar{k}} \right|$. Звідси отримується умова існування металічної фази: $U < U_c$ у згоді з

теорією сильнокорельованого газу Гутцвіллера-Брінкмана-Райса (і теорією середнього динамічного поля).

Перелік посилань

1. Didukh L. Acta Physica Polonica B. – 2000. – Vol. 31. – № 12. – P.1–36.