

УДК 537.311.3, 538.67

Олександр Крамар

ПРОВІДНІСТЬ ДВОКРАТНО ОРБІТАЛЬНО ВИРОДЖЕНОГО МОТТ-ГАББАРДІВСЬКОГО ФЕРОМАГНЕТИКА

В роботі досліджено особливості статичної провідності матеріалу з двократно орбітально виродженою енергетичною зоною. При довільних температурах з використанням різних форм незбуреної густини електронних станів одержано температурні та концентраційні залежності провідності для заповнення зони $n < 1$. Показано, що феромагнітне впорядкування, обумовлене трансляційним механізмом, якісно змінює поведінку транспортних характеристик мотт-габбардівських систем.

Ключові слова: модель Габбарда, двократне орбітальне виродження, феромагнетизм, статична провідність, ефективна маса носіїв

В останні десятиліття отримано великий обсяг експериментальних даних [1,2], що стосуються транспортних властивостей вузькозонних сполук перехідних металів. Для коректного пояснення особливостей провідності таких матеріалів необхідно разом з трансляцією електронів між вузлами ґратки також враховувати кулонівську взаємодію електронів на вузлі [3,4], яку описує енергетичний параметр U . Якісне пояснення особливостей транспортних характеристик таких систем можливе уже в рамках невиродженої узагальненої моделі вузькозонного матеріалу (див., наприклад, роботи [5,6]). Однак урахування орбітального виродження зони провідності, яке притаманне реальним вузькозонним сполукам перехідних металів, зумовлює певні особливості [7] порівняно із моделлю невиродженої зони. Співіснування переходу Мотта (переходу діелектрик-метал) та феромагнетизму у виродженій моделі при цілому заповненні зони детально розглянуто у роботі [8]. Спроба дослідження особливостей провідності у випадку сильної

кулонівської взаємодії та при врахуванні двократного орбітально-го виродження зони провідності була зроблена у роботах [9,10], однак автори обмежилися розглядом особливих випадків або певних конкретних заповнень зони. У роботах [11–13] було показано, що форма незбуреної густини станів (ГС) визначає критичну концентрацію, при якій виникає спонтанне феромагнітне впорядкування. Разом з тим існує необхідність розширити такий підхід на випадок розрахунку транспортних характеристик вузькозонних систем за наявності феромагнітного впорядкування при ненульових температурах та у зовнішньому магнітному полі.

На основі моделі мотт-габбардівського феромагнетика з двократно орбітально виродженою зоною провідності у роботах [13,14] в режимі сильної кулонівської кореляції та сильного гундівського зв'язку було отримано квазічастинкові енергетичні спектри. У випадку заповнення зони $n < 1$:

$$E_k^{\gamma s} = -\mu + \alpha_{\gamma s} t_k(n) + \beta_{\gamma s} - z J_{eff} n_s - \eta_s h. \quad (1)$$

Тут коефіцієнт кореляційного звуження підзони

$$\alpha_{\gamma s} = 1 - n + n_s + \frac{2n_{\bar{s}} n_s + n_s n_s}{1 - n + n_s}, \quad (2)$$

та кореляційний зсув центра підзони

$$\beta_{\gamma s} = -\frac{1}{1 - n + n_s} \sum_{\bar{k}} t_{\bar{k}}(n) \left(\langle X_i^{\bar{s}0} X_j^{0,\bar{s}} \rangle_{\bar{k}} + \langle X_i^{\bar{s}0} X_j^{0,\bar{s}} \rangle_{\bar{k}} + \langle X_i^{\bar{s}0} X_j^{0,\bar{s}} \rangle_{\bar{k}} \right), \quad (3)$$

де $t_{\bar{k}}(n) = t_{\bar{k}}(1 - \tau_1 n)$ — концентраційно-залежний інтеграл переносу; τ_1 — безрозмірний параметр корельованого переносу [7]; J_{eff} — ефективний параметр міжатомного обміну, який включає в себе пряму і непряму взаємодію феромагнітного типу (див. [13]); z — число найближчих сусідів; n_s — концентрація електронів зі спіном s на орбіталі γ ; магнітне поле позначене параметром h ; $\eta_s = 1$, якщо $s = \uparrow$, і -1 у протилежному випадку. Оскільки орбіталі рівноправні, то

$$n_{\uparrow} = \frac{n + m}{4}; \quad n_{\downarrow} = \frac{n - m}{4}. \quad (4)$$

Концентрація електронів зі спіном \uparrow та \downarrow при довільній формі ГС $\rho(\varepsilon)$ та температурі $\Theta = k_B T$ визначається виразами:

$$n_{\uparrow} = (1 - n + n_{\uparrow}) \int_{-w(n)}^{w(n)} \frac{\rho(\varepsilon) d\varepsilon}{\exp\left(\frac{E_{\uparrow}}{\Theta}\right) + 1}, \quad n_{\downarrow} = (1 - n + n_{\downarrow}) \int_{-w(n)}^{w(n)} \frac{\rho(\varepsilon) d\varepsilon}{\exp\left(\frac{E_{\downarrow}}{\Theta}\right) + 1}. \quad (5)$$

У записаних вище рівностях напівширина незбуреної зони $w(n) = z|t|$ перенормована процесами корельованого переносу.

Узагальнивши підхід до розрахунку провідності, розроблений у роботах [5,6], на випадок моделі з двократним орбітальним виродженням енергетичної зони, отримуємо:

$$\sigma = -\frac{\sigma_0}{3} \sum_{\gamma_s} \beta_{\gamma_s} (1 - n + n_s), \quad (6)$$

де σ_0 є комбінацією констант та має розмірність провідності,

$$\beta_{\gamma_s} = \frac{2(1 - n + n_{\bar{s}})}{(1 - n + n_s)} \int_{-w(n)}^{w(n)} \frac{\rho(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon}{\exp\left(\frac{E_{\bar{s}}}{\Theta}\right) + 1} + \int_{-w(n)}^{w(n)} \frac{\rho(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon}{\exp\left(\frac{E_s}{\Theta}\right) + 1}.$$

Чисельно розв'язавши рівняння (5) для знаходження намагніченості системи, з виразу (6) можемо розрахувати залежність провідності від ступеня заповнення енергетичної зони та дослідити вплив магнітного поля на провідність системи з орбітальним виродженням. Рисунки 1–6 ілюструють особливості поведінки провідності у зовнішньому полі, характерні для різних форм ГС.

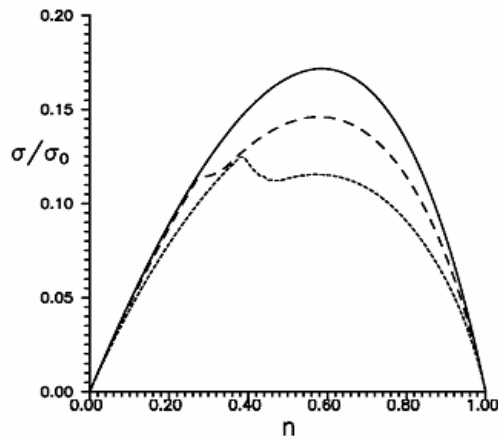


Рисунок 1. Вплив форми густини електронних станів на величину статичної провідності в основному стані при зміні заповнення зони. Суцільна крива: прямокутна ГС; крива з довгим штрихом: напівеліптична ГС; крива з коротким штрихом: ГС, яка відповідає *sc*-ґратці.

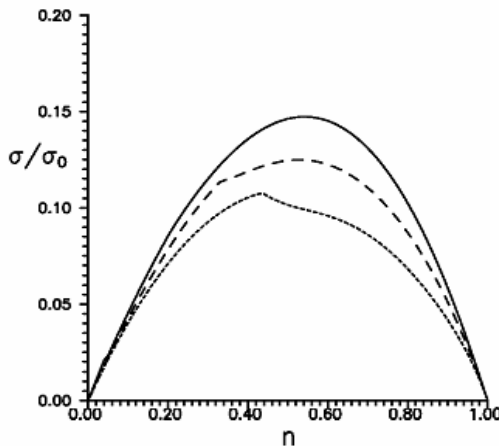


Рисунок 2. Вплив форми густини електронних станів на величину статичної провідності при зміні заповнення зони та температурі $\Theta/w = 0,05$. Суцільна крива: прямокутна ГС; крива з довгим штрихом: напівеліптична ГС; крива з коротким штрихом: ГС, яка відповідає *sc*-ґратці.

Існує суттєва відмінність між концентраційними залежностями провідності для різних типів ґраток (див. рис. 1). Для прямокутної ґС у виродженому випадку реалізується лише насичений феромагнітний стан і концентраційна залежність, зображена суцільною лінією на рис. 1, повністю узгоджується з невиродженим випадком [6]. Для напівеліптичної ґС, яка відповідає гіперкубічній ґратці, при певному критичному значенні концентрації n_1 реалізується феромагнітний перехід другого роду і зростання $\sigma(n)$ сповільнюється аж до концентрації n_2 , при якій феромагнетизм стає насиченим. Ще сильніше цей ефект виражений для простої кубічної ґратки — у концентраційному діапазоні від n_1 до n_2 провідність зменшується при зростанні n , що зумовлено конкуренцією між електричним полем, яке збільшує кінетичну енергію електронів, і процесами феромагнітного впорядкування, яке призводить до локалізації електронів. Подібний результат було отримано у роботі [10] із використанням методу точної діагоналізації. У випадку ненульових температур феромагнітне впорядкування руйнується для деяких концентрацій і тому провідність дещо змінюється (див. рис. 3). В додаток до цього, критична концентрація виникнення впорядкування при $\Theta > 0$ дещо більша, ніж для основного стану. Чим вищою є температура, тим слабшим є вплив магнітного впорядкування на концентраційну залежність σ (як бачимо з порівняння рисунків 1 та 2). Температурні залежності провідності є металічного типу (див. рис. 3). З найнижчої кривої рис. 3, яка відповідає простій кубічній ґратці, чітко видно точку переходу феромагнетик-парамагнетик. З рис. 4 можна бачити, що прикладання магнітного поля згладжує залежності $\sigma(n)$. Проте характерні величини магнітного поля у порівнянні з невиродженим випадком є дещо меншими, що вказує на більшу ефективність трансляційного механізму феромагнітного впорядкування у моделі з двократним орбітальним виродженням.

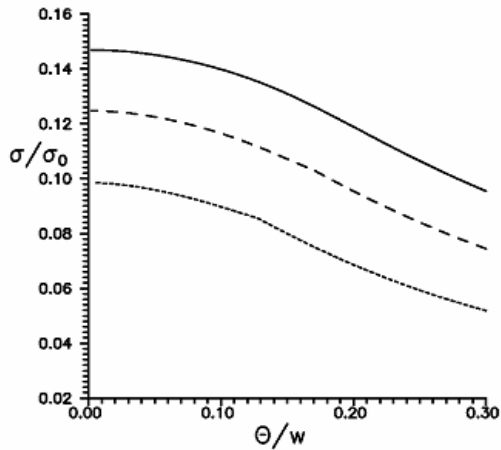


Рисунок 3. Вплив форми густини електронних станів на температурну залежність статичної провідності при $n=0,5$. Суцільна крива: прямокутна ГС; крива з довгим штрихом: напівеліптична ГС; крива з коротким штрихом: ГС, яка відповідає sc -ґратці.

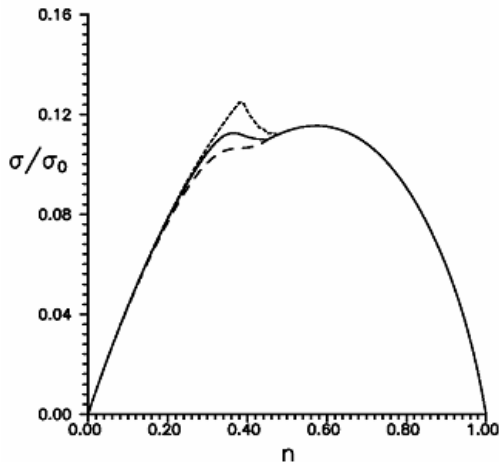


Рисунок 4. Вплив магнітного поля на концентраційну залежність провідності для ГС, яка відповідає sc -ґратці. Крива з коротким штрихом: $h/w=0$; суцільна крива: $h/w=0,03$; крива з довгим штрихом: $h/w=0,06$.

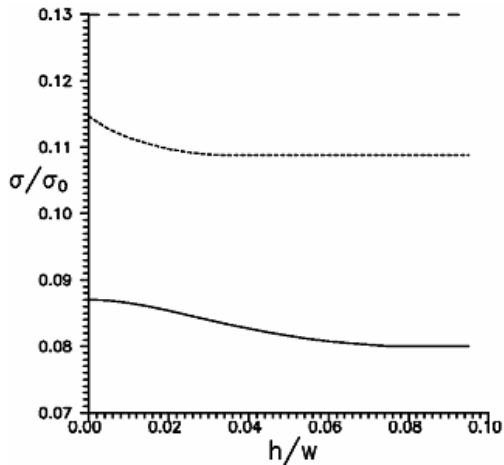


Рисунок 5. Залежність статичної провідності в основному стані від величини магнітного поля (напівеліптична ГС). Верхня крива: $n=0,4$; середня крива: $n=0,3$; нижня крива: $n=0,2$.

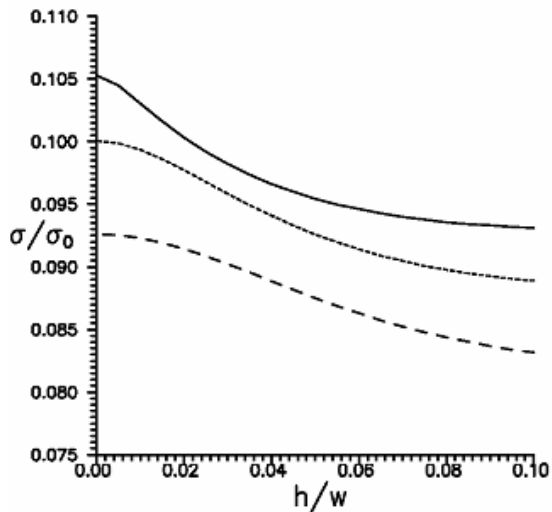


Рисунок 6. Залежність провідності (ГС sc-ґратки) від величини магнітного поля при температурі $\Theta/w = 0,05$. Верхня крива: $n=0,4$; середня крива: $n=0,35$; нижня крива: $n=0,3$.

Прикладене магнітне поле при довільних температурах спричиняє зменшення провідності (див. рис. 5 та 6), зумовлене ефектом магнітного впорядкування. Оскільки вираз для провідності за своєю структурою подібний до виразу для кінетичної енергії електронів, то характер залежності провідності від ступеня заповнення зони в основному визначається формою незбуреної ГС. Це доводить важливість використання реалістичних густин станів при дослідженні транспортних властивостей перспективних вузькозонних систем типу мотт-габбардівських матеріалів.

Література

1. Mott N. F. *Metal-insulator transition* / N.F. Mott. — Taylor & Francis, London, 1990. — 286 p.
2. Fazekas P. *Lecture notes on electron correlation and magnetism* / P. Fazekas. - Singapore: World Scientific Publishing, 1999. — 777 p.
3. Gebhard F. *The Mott metal-insulator transition: models and methods* / F. Gebhard. — Springer, Berlin 1997. — 317 p.
4. Изюмов Ю. А. Материалы с сильными электронными корреляциями / Ю. А. Изюмов, Э.З. Курмаев // УФН. — 2008. — Т. 178. — С. 25–60.
5. Дідух Л. Вплив легування, зміни температури та деформації на електронну провідність матеріалу з сильними електронними кореляціями / Л. Дідух, Ю. Скоренький, О. Крамар, Ю. Довгоп'ятий // Препринт Інституту фізики конденсованого стану НАН України. — 2003. — ІСМР-03-31U. — 30 с.
6. Didukh L. Magnetic field dependence of conductivity and effective mass of carriers in a model of Mott-Hubbard material / L. Didukh, O. Kramar, Yu. Skorenkyu, Yu. Dovhopyaty // *Condens. Matter Phys.* — 2005. — vol. 8, No. 4 (44). — pp. 825–834.
7. Didukh L. Metal-insulator transition in a doubly orbitally degenerate model with correlated hopping / L. Didukh, Yu. Skorenkyu, Yu. Dovhopyaty, and V. Hankevych // *Phys. Rev. B.* — 2000. — vol. 61, No. 12. — pp. 7893–7908.

8. Fresard R. Interplay of Mott transition and ferromagnetism in the orbitally degenerate Hubbard model // R. Fresard, G. Kotliar // *Phys. Rev. B.* — 1997. — vol. 56. — pp. 12909–12915.
9. Marsch E. Electrical conductivity of a doubly-degenerate Hubbard model / E. Marsch, W.-H. Steeb // *Physics Letters A.* — 1976. — vol. 59. — pp. 293–294.
10. Nakano H. Effects of Orbital Degeneracy and Electron Correlation on Charge Dynamics in Perovskite Manganese Oxides / H. Nakano, Y. Motome and M. Imada // *J. Phys. Soc. Jpn.* — 1999. — vol. 68. — pp. 2178–2181.
11. Wahle J. Microscopic conditions favoring itinerant ferromagnetism / J. Wahle, N. Blumer, J. Schlipf, K. Held, and D. Vollhardt // *Phys. Rev. B.* — 1998. — vol. 58, No. 19. — P. 12749–12757.
12. Meyer D. Influence of spin-flip scattering on the stability of ferromagnetism in a two-band Hubbard model / D. Meyer, W. Nolting // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 1999. — vol. 11. — pp. 5811–5828.
13. Didukh L. Metallic ferromagnetism in the systems with strongly correlated electrons / L. Didukh, O. Kramar // *Condens. Matter Phys.* — 2005. — vol. 8, No. 3 (43). — pp. 547–564.
14. Didukh L. Metallic ferromagnetism in an orbitally degenerate system of strongly correlated electrons / L. Didukh, O. Kramar and Yu. Skorenkyy // *Physica B: Condensed Matter.* — 2005. — vol. 359–361. — pp. 681–683.

Oleksandr Kramar

CONDUCTIVITY OF THE DOUBLY ORBITALLY DEGENERATE MOTT-HUBBARD FERROMAGNET

In this paper peculiarities of static electrical conductivity in the system with doubly orbitally degenerated energy band are studied. For arbitrary temperatures at different forms of unperturbed density of electronic states the temperature and concentration dependences of transport characteristics for less than half filled lower quasiparticle subband are calculated. The ferromagnetic ordering caused by translational mechanism is proven to change the behavior of transport characteristics qualitatively.

Keywords: *Hubbard model, double orbital degeneracy, ferromagnetism, static electrical conductivity, effective masses of current carriers*