УДК. 538.1, 539.2
Ю. Довгоп'ятий

ВПЛИВ "СПОНТАННОЇ" ДЕФОРМАЦІЇ ГРАТКИ НА ПЕРЕХІД ІЗ ДІЕЛЕКТРИЧНОГО СТАНУ В МЕТАЛІЧНИЙ МАТЕРІАЛІВ ІЗ ВУЗЬКИМИ ЕНЕРГЕТИЧНИМИ ЗОНАМИ

У роботі вивчається перехід метал-діелектрик в узагальненій моделі Габбарда, доповненій врахуванням електрон-деформаційного ефекту, при половинному заповнені зони та температурі 0 К. Досліджено залежності концентрації носіїв струму та відносної зміни об'єму від параметрів моделі. Отримані результати застосовуються для пояснення зв'язку між переходом метал-діелектрик та зміною характеристик гратки у деяких вузькозонних матеріалах.

Умовні позначення:

$\vec{k}$ - хвильовий вектор електрона;
U - внутрішньоатомне кулонівське відштовхування двох електронів із протилежними спінами на одному вузлі;
u - відносна зміна об'єму гратки;
n - середнє число електронів на вузлі гратки;
c - середнє число пустих вузлів гратки;
$a^{+}_{i\sigma}, a_{i\sigma}$ - оператори народження і знищення електронів зі спіном σ ($\sigma=\uparrow,\downarrow$) на вузлі i;
t_{ef} - ефективний інтеграл переносу електронів;
A_{iqf} - матричний елемент, що описує електрон-фононну взаємодію;
$2W$ - ширина енергетичної зони.

Особливості переходу діелектрик - метал (ПДМ) в багатьох матеріалах із вузькими зонами провідності задовільно описуються при врахуванні лише міжелектронних взаємодій. Основним типом таких кореляцій є внутрішньоатомне кулонівське відштовхування [1], яке модифікує зонний енергетичний спектр системи електронів і визначає унікальні фізичні властивості сполук перехідних металів. У роботі [2] запропонований метод, який дозволяє провести класифікацію діелектричного і металічного станів вузькозонної системи і описати переходи діелектрик - метал при зовнішніх впливах (нагрівання, стискання, дія зовнішніх електричного і магнітного поля, легування). Вказана модель сформульована для випадку "жорсткого" кристалу, без врахування взаємодії електронної підсистеми з іонною підсистемою.

Проте експериментальні дані свідчать про тісний зв'язок між зміною електричних властивостей і зміною характеристик гратки деяких матеріалів. Наприклад, у стехіометричному оксиді V_2O_3 фазовий ПДМ при 150 К супроводжується зміною симетрії гратки і суттєвим зменшенням об'єму елементарної комірки [3]. Подібний зв'язок між зміною типу провідності і параметрами гратки спостерігається і при легуванні (наприклад, при введенні в Ti_2O_3 домішок V, Sc, Al [3]). Тому для модельного гамільтоніану доцільним було б перенормування електрон-електронних взаємодій, враховуючи "самостискання" гратки при ПДМ.

У представленій роботі проведено поглиблений аналіз положень, викладених в роботі [4], і наслідків, які випливають з моделі Габбарда без врахування і з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії. Методика розрахунку енергетичного спектра у вузьких енергетичних зонах, що грунтується на узагальненому наближенні середнього поля [2] (і яка приводить до ПДМ на відміну від широко вживаного наближення Габбард-I [1]), доповнена врахуванням самоузгодженого зв'язку між середньою трансляційною енергією системи і "спонтанною" деформацією гратки (електрон-

деформаційний ефект [5]). У відповідності з цим ефективний інтеграл переносу є залежним від енергії трансляційного руху дірок і двійок, і, таким чином, при половинному заповненні зони перехід із діелектричного стану в металічний може супроводжуватися "самостисканням" гратки. Ініціювання переходу діелектрик-метал може відбутися за рахунок зовнішніх факторів, зокрема, зовнішнього тиску.

Розгляд ведеться на основі узагальненої однозонної моделі Габбарда, в якій враховується залежність інтеграла переносу від концентрації полярних станів. Ця залежність є наслідком врахування електрон-деформаційної взаємодії.

Гамільтоніан електронної підсистеми з врахуванням електрон-фононної взаємодії

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a^{+}_{i\sigma} a_{j\sigma} + \sum_{ij\sigma}\sum_{q\Gamma} A_{iq\Gamma}(q)(b_{q\Gamma} + b^{+}_{-q\Gamma}) a^{+}_{i\sigma} a_{j\sigma} + U\sum_{i} a^{+}_{i\uparrow} a_{i\uparrow} a^{+}_{i\downarrow} a_{i\downarrow} \qquad (1)$$

в наближенні середнього поля спрощується:

$$H = t_{e\Gamma}\sum_{ij\sigma} a^{+}_{i\sigma} a_{j\sigma} + U\sum_{i} a^{+}_{i\uparrow} a_{i\uparrow} a^{+}_{i\downarrow} a_{i\downarrow}, \qquad (2)$$

де $a^{+}_{i\sigma}, a_{i\sigma}$ - оператори народження і знищення електронів зі спіном σ (σ=↑,↓) на вузлі i, $t_{e\Gamma}$ - ефективний інтеграл переносу електронів, U - величина кулонівського відштовхування двох електронів на одному вузлі, $A_{iq\Gamma}$ - матричний елемент, що описує електрон-фононну взаємодію, $b^{+}_{q\Gamma}$, $b_{q\Gamma}$ - оператор народження і знищення фонона з хвильовим вектором q.

Ефективний інтеграл переносу залежить від відносної деформації:

$$t_{e\Gamma} = t_0(1+\alpha u), \qquad (3)$$

де u=ΔV/V - відносна зміна об'єму, параметр α<0.

Тоді ширина енергетичної зони записується як

$$2W = 2W_0(1+\alpha u). \qquad (4)$$

У роботі чисельними методами розраховані залежності концентрації носіїв струму і відносної зміни об'єму від параметра моделі $U/2W_0$ при середньому числі електронів на вузлі n=1 та температурі T=0 K.

Щоб отримати ці залежності, ми використовуємо вирази для параметра "самостискання" [5] і концентрації носіїв струму [2]:

$$\alpha u = \frac{\alpha_1 V_0}{WN}\sum_{k\sigma} t_k \left\langle a^{+}_{k\sigma} a_{k\sigma} \right\rangle, \qquad (5)$$

$$c = 0.25 + U\ln(1-4c)/(32Wc), \ (2W>U); \qquad (6)$$

де c - середнє число дірок на вузлі; α_1 - параметр, що визначає $\partial W/\partial V$, $\alpha_1 V_0/W \approx 0.1$ [5], k - хвильовий вектор електрона, N - кількість вузлів гратки. Розрахунок суми в (5) проводиться за методикою роботи [1]. Маємо два нелінійних рівняння з незалежними змінними u, c, U/2W . Ця система розв'язується чисельними методами, знаходиться функції c(U/(2W)), u(U/(2W)).

Отримані результати порівнюються із залежністю c(U/(2W)), обчисленою без врахування "самостискання" гратки (рис. 1). На рис. 2 показана функція u(U/(2W)) при різних значеннях параметра α. Врахування "самостискання" гратки приводить до незначного зростання концентрації носіїв струму (2-4%) і до більшого перекриття

підзон у металічній фазі (U<2W). Критерій ПДМ (U=2W) не змінюється, але в даній моделі ширина зони є перенормованою. Залежності при U/(2W)≈1 виявляють фазовий ПДМ другого роду. Для моделювання фазового переходу першого роду доцільним було б враховувати орбітальне виродження електронів.

Автор висловлює вдячність проф. Дідуху Л.Д. за формулювання проблеми, дослідженню якої присвячена дана робота, і керівництво роботою.

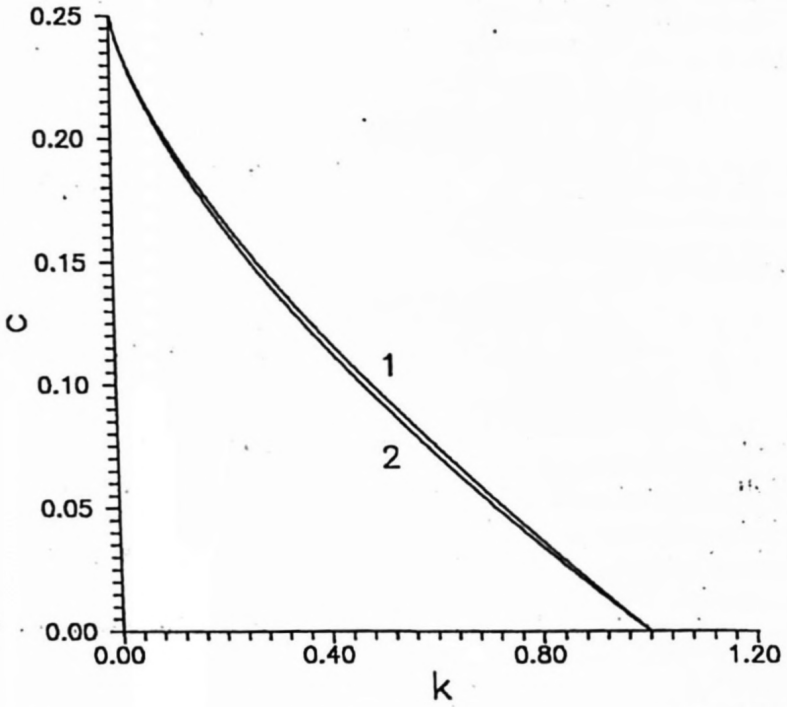

Рис.1. Залежність концентрації дірок c від параметра моделі k=U/(2W): 1 - з врахуванням самостискання гратки, 2 - без врахування самостискання

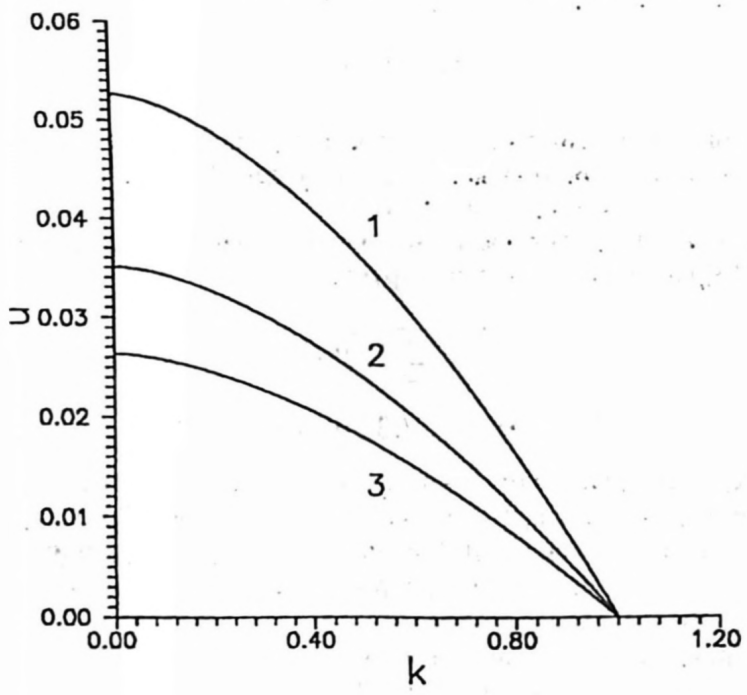

Рис.2. Залежність відносної зміни об'єму u=ΔV/V від параметра моделі k=U/(2W): 1 - α=-1, 2 - α=-1.5, 3 - α=-2

Summary. Metal-insulator transition in the consideration of the "spontaneous" lattice deformation in narrow-band model is studied at half-filling of band. The dependences of lattice "self-compression" and concentration of polar states on the parameters of model are investigated. The obtained results are applied to the interpretation of metal-insulator transitions in narrow-band materials.

Література

1. Hubbard J. Proc.Roy.Soc.-1963.- A276. -P.238.
2. Л. Дідух. Журнал фізичних досліджень. - 1997. - Т.1. - С.241.
3. Бугаев А.А., Захарченя Б.П., Чудновский Ф.А. Фазовый переход металл-полупроводник и его применение. - Ленинград: Наука, 1979. - 183 с.
4. L.Didukh, V.Didukh, Y.Dovhopyaty. Abstracts of Int. Workshop on Stat. Physics. - Lviv. 1995. P. 99.
5. Стасюк Є.В., Григорчук Р.О. - Укр.фіз.ж.- 1980. - Т.25. - С.404.