УДК. 538.1, 539.2
В. Ганкевич

ДОСЛІДЖЕННЯ ПЕРЕХОДУ МЕТАЛ-ДІЕЛЕКТРИК ПІД ЗОВНІШНІМ ТИСКОМ У ВУЗЬКОЗОННІЙ МОДЕЛІ З КОРЕЛЬОВАНИМ ПЕРЕНОСОМ ЕЛЕКТРОНІВ

У роботі вивчається перехід метал-діелектрик під зовнішнім тиском у вузькозонній моделі з корельованим переносом електронів при половинному заповнені зони. Досліджено залежності концентрації носіїв струму та ширини енергетичної щілини від тиску. При збільшенні зовнішнього тиску концентрація носіїв струму збільшується, а ширина енергетичної щілини зменшується. Отримані результати застосовуються до інтерпретації переходу метал-діелектрик під зовнішнім тиском у деяких вузькозонних матеріалах.

Умовні позначення:

- $T(ij)$ - матричний елемент, що описує корельований перенос електронів;
- $\bar{k}$ - хвильовий вектор електрона;
- U - внутрішньоатомне кулонівське відштовхування двох електронів з протилежними спінами на одному вузлі;
- c - концентрація полярних станів (дірок і двійок);
- T - температура;
- ΔE - енергетична щілина в електронному спектрі;
- τ_1, τ_2 - параметри, які характеризують корельований перенос електронів;
- w_0 - напівширина незбуреної зони;
- u - відносна зміна об'єму гратки.

У роботі [1] був досліджений перехід метал-діелектрик в моделі вузькозонного матеріалу з корельованим переносом електронів при половинному заповненні зони. Особливістю даної моделі є врахування корельованого переносу електронів, що приводить до низки наслідків, які відмічалися у вищевказаній роботі. При цьому був отриманий вираз для ширини енергетичної щілини та концентрації полярних станів, використовуючи метод функцій Гріна в узагальненому наближенні середнього поля [2]. Залежність отриманого виразу для енергетичної щілини від ширин діркової та двійкової підзон вказує на можливість дослідження переходу метал-діелектрик під зовнішнім тиском в рамках запропонованої моделі.

У даній роботі вивчається перехід метал-діелектрик під зовнішнім тиском у вузькозонній моделі з корельованим переносом електронів при половинному заповненні зони. Досліджено залежності концентрації носіїв струму та ширини енергетичної щілини від тиску. Отримані результати застосовуються до інтерпретації переходу метал-діелектрик під зовнішнім тиском у деяких вузькозонних матеріалах.

У роботах [2-4] було показано, що ймовірна амплітуда переходу електрона з одного вузла на сусідній у вузьких енергетичних зонах залежить від заселеності цих

вузлів. Тому будемо виходити з наступного гамільтоніана, який визначається внутрішньоатомним кулонівським відштовхуванням двох електронів з протилежними спінами на одному й тому ж вузлі U, інтегралом переносу t_{ij} і корельованим переносом електронів $T(ij)$

$$H = -\mu\sum_{i\sigma} a^{+}_{i\sigma}a_{i\sigma} + \sum'_{ij\sigma} t_{ij}a^{+}_{i\sigma}a_{j\sigma} + \sum'_{ij\sigma}(T(ij)a^{+}_{i\sigma}a_{j\sigma}n_{i\bar{\sigma}} + \text{e.c.}) + U\sum_{i} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}, \qquad (1)$$

де $a^{+}_{i\sigma}$, $a_{i\sigma}$ - оператори народження і знищення електрона зі спіном σ ($\sigma=\uparrow,\downarrow$) на вузлі i; μ - хімічний потенціал;

$$t_{ij} = t(ij) + \sum_{k\neq i,k\neq j} J(ikjk) = t(ij) + T_1(ij),$$

$t(ij)$, $J(ijkl)$ - матричні елементи, які описують переходи електронів між вузлами гратки впаслідок електронно-іонної і електронно-електронної взаємодій. Штрихи біля сум у гамільтоніані (1), означають, що $i\neq j$.

Ширина енергетичної щілини системи електронів, яка описується гамільтоніаном (1) задається виразом [1]:

$$\Delta E = -(1-2c)(w+\tilde{w}) + \frac{1}{2}(Q_1+Q_2), \qquad (2)$$

$$Q_1 = \sqrt{\left[B(w-\tilde{w})-U\right]^2 + (4czt')^2},$$

$$Q_2 = \sqrt{\left[B(w-\tilde{w})+U\right]^2 + (4czt')^2},$$

$$B=1-2c+4c^2,$$

де w та $\tilde{w}$ - напівширини нижньої підзони (діркова підзона) та верхньої підзони (підзона двійок) відповідно: $w=z|t|$, $\tilde{w}=z|\tilde{t}|$ (z - число найближчих сусідів); t, $\tilde{t}$, t' - інтеграли переносу, що описують трансляційний рух дірок і двійок та процеси їх парного народження і знищення.

Концентрація полярних станів, від якої залежить ширина енергетичної щілини, визначається з рівняння [1]:

$$c = \frac{1}{2N}\sum_{\vec{k}}\left[\frac{A_{\vec{k}}}{\exp\frac{-E_1(\vec{k})}{\theta}+1} + \frac{B_{\vec{k}}}{\exp\frac{-E_2(\vec{k})}{\theta}+1}\right], \qquad (3)$$

$$A_{\vec{k}} = \frac{B}{2Q}(\tilde{t}_{\vec{k}} - t_{\vec{k}}) + \frac{U}{2Q} + \frac{1}{2},\quad B_{\vec{k}} = \frac{B}{2Q}(\tilde{t}_{\vec{k}} - t_{\vec{k}}) - \frac{U}{2Q} + \frac{1}{2},$$

$$Q = \sqrt{\left[B(t_{\vec{k}} - \tilde{t}_{\vec{k}}) - U\right]^2 + (4ct'_{\vec{k}})^2},$$

де $t_{\vec{k}}$, $\tilde{t}_{\vec{k}}$, $t'_{\vec{k}}$ - фур'є компоненти інтегралів переносу t, $\tilde{t}$, t'; N - число вузлів, $\theta=k_BT$ (k_B - стала Больцмана); $E_1(\vec{k})$, $E_2(\vec{k})$ - квазічастинковий енергетичний спектр.

За допомогою формул для ширини енергетичної щілини (2) та концентрації полярних станів (3) дослідимо перехід метал-діелектрик під зовнішнім тиском для вузькозонної системи, описуваної гамільтоніаном (1).

Під зовнішнім тиском залежність ширини зони від відносної зміни об'єму $u=\Delta V/V\sim p$ можна записати у вигляді [5]:

$$w=w_0(1+\alpha u),$$

де $\alpha = \frac{V_0}{w_0}\cdot\frac{\partial w}{\partial V} < 0$, w_0 - напівширина незбуреної зони. Таким чином будемо вважати, що

$$t\to t(1+\alpha u),\quad \tilde{t}\to\tilde{t}(1+\beta u), \qquad (4)$$

де β має зміст аналогічний α. Подібне перенормування потрібно провести і для інших матричних величин.

Для спрощення подальших викладок розглянемо випадок $\beta=\alpha$, тобто підзони розширюються однаково. Тоді з рівняння (3), використовуючи (4), отримуємо, що із зростанням зовнішнього тиску концентрація полярних станів збільшується (рис. 1).

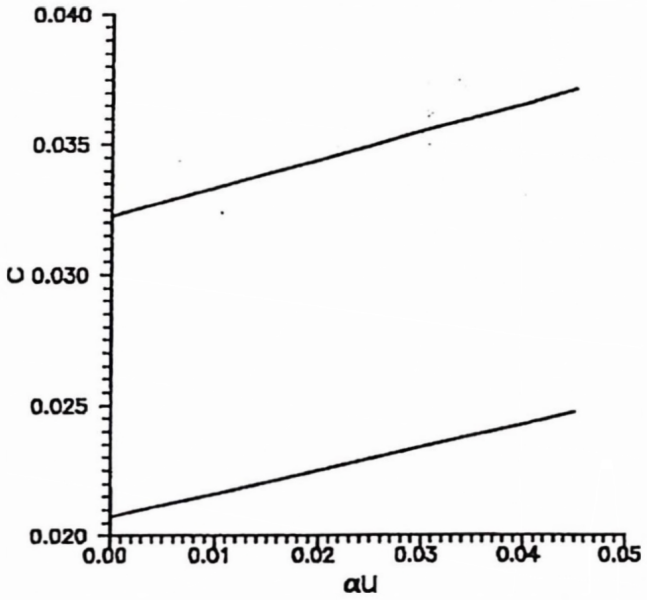

Рис. 1. Залежність концентрації полярних станів від тиску ($U/w_0=1,7$; $\theta/w_0=0,1$). Верхня крива: $\tau_1=\tau_2=0,1$, нижня - $\tau_1=\tau_2=0$

Параметри $\tau_1=\frac{T_1(ij)}{|t(ij)|}$, $\tau_2=\frac{T(ij)}{|t(ij)|}$ характеризують порядок корельованого переносу ($0\le\tau_1, \tau_2 \le 1$). Видно, що зростання корельованого переносу електронів приводить до збільшення концентрації полярних станів. Рис. 2 ілюструє залежність ширини енергетичної щілини від тиску: при збільшенні зовнішнього тиску ширина енергетичної щілини зменшується. Отримана залежність пояснює той факт, що у більшості вузькозонних матеріалів збільшення зовнішнього тиску при заданій температурі викликає перехід метал-діелектрик [6] (для сполук, представлених на рис. 2 - це перехід із стану парамагнітного діелектрика в стан металічного парамагнетика). Наприклад, для $(V_{0,96}Cr_{0,04})_2O_3$ при кімнатній температурі перехід відбувається під тиском 13 кбар; при цьому кристалічна структура не змінюється, хоча і спостерігається незначна зміна об'єму (~1%) [7]. Для NiS_2 перехід при цій же температурі із стану парамагнітного діелектрика в стан металічного парамагнетика відбувається при зовнішньому тиску 46 кбар; перехід супроводжується зменшенням об'єму приблизно на 0,4% без зміни кристалічної структури [8]. У сполуці $(V_{1-x}M_x)_2O_3$ (де M - Ti, Cr) добавка іонів Ti викликає перехід діелектрик-метал, а легування Cr сприяє протилежному переходу метал-діелектрик. Це пов'язано з тим, що введення домішок титану еквівалентне збільшенню зовнішнього тиску, а легування Cr аналогічне зменшенню зовнішнього тиску.

З рис. 2 видно, що коли при заданих U в моделі Габбарда ($\tau_1=\tau_2=0$, тобто при нехтуванні корельованим переносом) вузькозонний матеріал знаходиться лише в одному із станів, то врахування корельованого переносу електронів приводить до того, що в запропонованій моделі система може перебувати як в металічному так і в діелектричному стані в залежності від значень параметрів τ_1, τ_2. Це вказує на те, що врахування корельованого переносу електронів є важливим при розгляді проблеми переходу метал-діелектрик у вузьких енергетичних зонах.

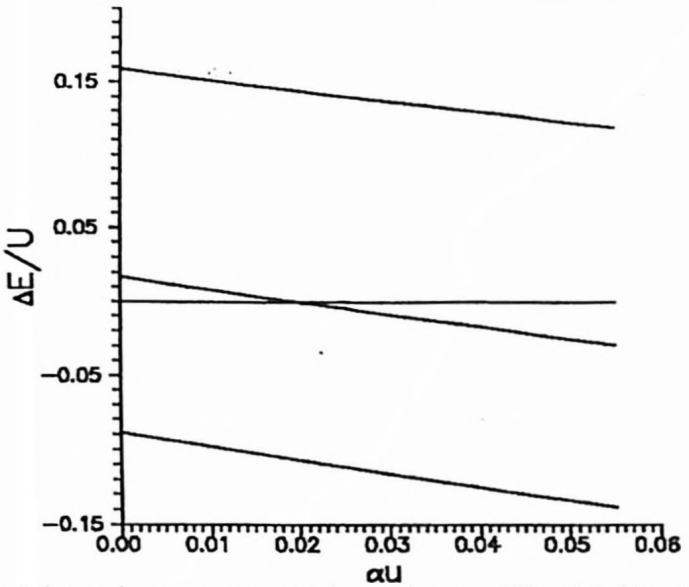

Рис. 2: Залежність енергетичної щілини від тиску (U/w_0=1,3; θ/w_0=0,5).
Верхня крива: $\tau_1=\tau_2$=0,2, середня $\tau_1=\tau_2$=0,1, нижня - $\tau_1=\tau_2$=0

Автор висловлює вдячність проф. Л. Дідуху, під керівництвом якого проводилася дана робота, за формулювання проблеми, що розглядалася тут.

Summary. Metal-insulator transition under exterior pressure in narrow-band model with the correlated hopping of electrons is studied at half-filling of band. The dependences of concentration of polar states and energy gap on exterior pressure are investigated. The obtained results are applied to the interpretation of metal-insulator transition under exterior pressure in some narrow-band materials.

Література

1. Л. Дідух, В. Ганкевич, Ю. Довгоп'ятий. Перехід метал-діелектрик у вузькозонній моделі з нееквівалентними габбардівськими підзонами. Препринт ІФКС НАНУ. Львів, ICMP-97-26U, 1997.- 18 с.
2. Л. Дідух. Журнал фізичних досліджень. - 1997.- Т.1.- С.241.
3. L. Didukh. Ukrainian-French Simposium "Condensed Matter: Science and Industry". Abstracts.- P. 275 (Lviv, 1993).
4. J. E. Hirsh. Physica B. - 1994.- M.199-200.- P.366.
5. Стасюк І.В., Григорчук Р.О. Укр. фіз. журнал. - 1980.- Т. 25.- С. 404.
6. Н. Ф. Мотт. Переходы метал-изолятор.- М.: Наука, 1979.- 344 с.
7. Mc Whan D. B., Remeika J. B.- Phys. Rev. B.- 1970.- V. 2.- P. 3734.
8. Wilson J. A., Pitt G. D.- Phil. Mag.- 1971.- V. 23.- P. 1275.