

## ПЕРЕХІД МЕТАЛ–ДІЕЛЕКТРИК У ВУЗЬКОЗОННІЙ МОДЕЛІ З НЕЕКВІВАЛЕНТНИМИ ГАББАРДІВСЬКИМИ ПІДЗОНАМИ

Л. Дідух, В. Ганкевич, Ю. Довгоп'ятий

Тернопільський державний технічний університет імені І. Пулюя, кафедра фізики,  
вул. Руська, 56, Тернопіль, 282001, Україна

E-mail: didukh@tu.edu.te.ua

(Отримано 9 жовтня 1997 р.)

Досліджено перехід метал–діелектрик у моделі вузькозонного матеріалу з нееквівалентними габбардівськими підзонами при половинному заповненні зони та нульовій температурі. Знайдено умови, за яких реалізується діелектричний і металічний стани. Отримано одночастинковий електронний спектр, залежності ширини енергетичної щілини, концентрації носіїв струму та хемічного потенціалу від параметрів системи.

**Ключові слова:** вузькі зони провідності, перехід метал–діелектрик, нееквівалентні габбардівські підзони, одночастинковий енергетичний спектр.

PACS number(s): 71.10.Fd, 71.30.+h

### I. ВСТУП

Особливістю моделі Габбарда [1] і вузькозонних моделей, генетично пов'язаних з нею (наприклад,  $t - J$  моделі), є електронно–діркова симетрія. Одним із проявів цієї симетрії є еквівалентність нижньої й верхньої квазічастинкових габбардівських підзон у моделі Габбарда, що своєю чергою є наслідком рівності інтегралів переносу, які описують як “трансляційні” переходи дірок і двійок, так і процеси їх парного народження та знищення (“активаційні” процеси). Рівність указаних інтегралів зумовлена нехтуванням матричними елементами міжелектронної взаємодії

$$J(ikjk) = \int \int \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \times \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |\varphi(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_k)|^2 d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \quad (1.1)$$

які описують переходи електронів між вузлами  $i$  та  $j$  ( $\varphi$ -функції — функції Ваньє). У роботах [2–4] обґрунтована принципова необхідність узагальнення моделі Габбарда врахуванням кореляційного переносу електронів (1.1) і запропонована вузькозонна модель з нееквівалентними габбардівськими підзонами. У такій моделі інтеграли переносу, які описують трансляційний перенос дірок і двійок, відрізняються як між собою, так і від інтеграла переносу, пов'язаного з активаційними процесами. Подібні моделі в останній час інтенсивно досліджують [5–7].

Важливою проблемою, що виникає тут, є проблема переходу діелектрик–метал при зміні параметрів системи, яка є однією з центральних у фізиці вузькозонних систем (див. огляд [8]).

У роботах [3, 4] запропонований новий підхід до розгляду одночастинкового енергетичного спектра

вузькозонних систем, який приводить до коректного опису фазового переходу метал–діелектрик. Підхід ґрунтується на використанні варіанта методу наближеного вторинного квантування в узагальненому наближенні Гартрі–Фока [9]. При цьому для моделі Габбарда ширина енергетичної щілини

$$\Delta E = -2w(1 - 2c) + \sqrt{U^2 + (4cw)^2}, \quad (1.2)$$

концентрація полярних станів

$$c = \frac{1}{4} + \frac{U}{32wc} \ln(1 - 4c), \quad (2w > U), \quad (1.3)$$

де  $w$  — півширина зони провідності,  $U$  — значення кулонівського відштовхування двох електронів з протилежними спінами на одному й тому ж вузлі.

У нашій роботі досліджено фазовий перехід метал–діелектрик у моделі вузькозонного матеріалу з нееквівалентними габбардівськими підзонами. Знайдено умови, за яких реалізується діелектричний і металічний стани. Отримано одночастинковий електронний спектр, залежності ширини енергетичної щілини, концентрації носіїв струму та хемічного потенціалу від параметрів системи для випадку напівзаповненої зони при нульовій температурі.

### II. ГАМІЛЬТОНІЯН МОДЕЛІ

Запишемо гамільтоніян системи  $s$ -електронів зони провідності, виражений через функції Ваньє, у вигляді [4]:

$$H = -\mu \sum_{i\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} + \sum'_{ij\sigma} t_{ij}(n) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}$$

$$\begin{aligned}
 & + \sum'_{ij\sigma} (T(ij)a_{i\sigma}^{\dagger}a_{j\sigma}n_{i\bar{\sigma}} + e.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \quad (2.1) \\
 & + \frac{1}{2} \sum'_{ij\sigma\sigma'} J(ij)a_{i\sigma}^{\dagger}a_{j\sigma'}^{\dagger}a_{i\sigma'}a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum'_{ij\sigma\sigma'} V(ij)n_{i\sigma}n_{j\sigma'},
 \end{aligned}$$

де  $a_{i\sigma}^{\dagger}, a_{i\sigma}$  — оператори народження і знищення електрона зі спіном  $\sigma$  ( $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ) на вузлі  $i$ ;  $\mu$  — хемічний потенціал;  $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^{\dagger}a_{i\sigma}$ ,

$$t_{ij}(n) = t(ij) + T_1(ij)$$

— ефективний концентраційно залежний інтеграл переносу;  $t(ij)$  відповідає електронно-йонній взаємодії;  $T(ij) = J(iijj)$ ,  $J(ij) = J(ijji)$ ,  $V(ij) = J(ijjj)$  — матричні елементи, які описують електронні переходи між вузлами кристалічної ґратки за рахунок міжелектронної взаємодії (вузли  $i$  та  $j$  найближчі);

$$T_1(ij) = n \sum_{\substack{k \neq i \\ k \neq j}} J(ikjk)$$

— ефективний інтеграл переносу електронів, який корельований заселеністю інших вузлів;  $n = \langle n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \rangle = \frac{N_e}{N}$  — середнє число електронів на вузол ( $N_e$  — число електронів у зоні,  $N$  — число вузлів). Штрихи біля сум у виразі (2.1) означають, що  $i \neq j$ .

Гамільтоніян (2.1) враховує основні типи взаємодій у вузькій невиродженій зоні: міжвузловий перенос електронів — друга, третя суми в (2.1), кулонівське відштовхування на одному вузлі — четверта сума, міжатомну обмінну взаємодію — п'ята сума, міжатомну кулонівську взаємодію — шоста сума. Відзначимо також, що третя сума описує кореляційні переходи, для яких характерним є те, що вони відбуваються за участю дворазово зайнятих вузлів.

Перейдемо у (2.1) від електронних операторів до  $X_i^{kl}$ -операторів Габбарда [10] за допомогою співвідношень [11, 12]:

$$\begin{aligned}
 a_{i\uparrow}^{\dagger} &= X_i^{2\downarrow} - X_i^{\uparrow 0}, & a_{i\uparrow} &= X_i^{\downarrow 2} - X_i^{0\uparrow}, \\
 a_{i\downarrow}^{\dagger} &= X_i^{2\uparrow} + X_i^{\downarrow 0}, & a_{i\downarrow} &= X_i^{\uparrow 2} + X_i^{0\downarrow},
 \end{aligned}$$

де  $X_i^{kl}$  — оператори переходу вузла із стану  $|l\rangle$  в стан  $|k\rangle$ ; стан  $|0\rangle$  відповідає вузлові, не зайнятому електронем (дірка),  $|\sigma\rangle \equiv a_{i\sigma}^{\dagger}|0\rangle$  — одноразово зайнятий (електрон зі спіном  $\sigma$ ) стан,  $|2\rangle \equiv a_{i\uparrow}^{\dagger}a_{i\downarrow}^{\dagger}|0\rangle$  — дворазово зайнятий (двома електронами з протилежними спінами) стан на вузлі  $i$  (двійка).

В  $X_i^{kl}$ -операторах гамільтоніян (2.1) запишеться таким чином:

$$H = H_0 + H_1 + H_1' + H_2, \quad (2.2)$$

де

$$H_0 = -\mu \sum_i (X_i^{\uparrow} + X_i^{\downarrow} + 2X_i^2) + U \sum_i X_i^2,$$

$$H_1 = \sum'_{ij\sigma} t_{ij}(n) X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \sum'_{ij\sigma} \tilde{t}_{ij}(n) X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2},$$

$$H_1' = \sum'_{ij\sigma} (t'_{ij}(n) \eta_{\sigma} X_i^{\sigma 0} X_j^{\bar{\sigma} 2} + e.c.),$$

$$\begin{aligned}
 H_2 &= -\frac{1}{2} \sum'_{ij\sigma} J(ij) ((X_i^{\sigma} + X_i^2)(X_j^{\sigma} + X_j^2) + X_i^{\sigma\bar{\sigma}} X_j^{\sigma\bar{\sigma}}) \\
 &+ \frac{1}{2} \sum'_{ij} V(ij) (1 - X_i^0 + X_i^2) (1 - X_j^0 + X_j^2),
 \end{aligned}$$

$X_i^k = X_i^{kl} X_i^{lk}$  — оператор числа  $|k\rangle$ -станів на вузлі,  $\eta_{\uparrow} = -1$ ,  $\eta_{\downarrow} = 1$ ,

$$\tilde{t}_{ij}(n) = t_{ij}(n) + 2T(ij), \quad (2.3)$$

$$t'_{ij}(n) = t_{ij}(n) + T(ij). \quad (2.4)$$

$H_0$  описує атомну границю вузькозонних моделей.

$H_1$  описує трансляційний рух дірок і двійок. Суттєвим є те, що в цій моделі (на відміну від вузькозонних моделей типу Габбарда) інтеграли переходу дірок і двійок відрізняються між собою.

$H_1'$  описує процеси парного народження і знищення дірок та двійок ("активаційні" переходи).

Для подальших викладок нам будуть потрібні такі співвідношення:

$$\frac{\tilde{t}}{t} = 1 - \frac{2\tau_2}{1 - \tau_1}, \quad \frac{t'}{t} = 1 - \frac{\tau_2}{1 - \tau_1},$$

де  $t, \tilde{t}, t'$  — відповідні інтеграли переносу між найближчими сусідами:  $t \equiv t_{ij}$ ,  $\tilde{t} \equiv \tilde{t}_{ij}$ ,  $t' \equiv t'_{ij}$ ;

$$\tau_1 = \frac{T_1(ij)}{|t(ij)|}, \quad \tau_2 = \frac{T(ij)}{|t(ij)|}.$$

Для моделі Габбарда  $\tau_1 = \tau_2 = 0$ .

### III. ОДНОЧАСТИНКОВИЙ ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ВУЗЬКОЗОННОЇ МОДЕЛІ

1. Перейдемо до визначення квазічастинкового енергетичного спектра в моделі, яку описує гамільтоніян (2.1). Для цього введемо двочасові запізнюючі функції Гріна [13, 14]

$$G_{pp'}^{(1)}(E) = \langle\langle X_p^{0\uparrow} | X_{p'}^{\uparrow 0} \rangle\rangle,$$

$$\begin{aligned}
 G_{pp'}^{(2)}(E) &= \langle\langle X_p^{\downarrow 2} | X_{p'}^{\uparrow 0} \rangle\rangle, & G_{pp'}^{\downarrow}(E) &= H_{pp'}^{(1)}(E) + H_{pp'}^{(2)}(E) \\
 G_{pp'}^{(3)}(E) &= \langle\langle X_p^{0\uparrow} | X_{p'}^{2\downarrow} \rangle\rangle, & &+ H_{pp'}^{(3)}(E) + H_{pp'}^{(4)}(E). \quad (3.5) \\
 G_{pp'}^{(4)}(E) &= \langle\langle X_p^{\downarrow 2} | X_{p'}^{2\downarrow} \rangle\rangle,
 \end{aligned} \quad (3.1)$$

а також

$$\begin{aligned}
 H_{pp'}^{(1)}(E) &= \langle\langle X_p^{0\downarrow} | X_{p'}^{\downarrow 0} \rangle\rangle, \\
 H_{pp'}^{(2)}(E) &= \langle\langle X_p^{\uparrow 2} | X_{p'}^{\downarrow 0} \rangle\rangle, \\
 H_{pp'}^{(3)}(E) &= \langle\langle X_p^{0\downarrow} | X_{p'}^{2\uparrow} \rangle\rangle, \\
 H_{pp'}^{(4)}(E) &= \langle\langle X_p^{\uparrow 2} | X_{p'}^{2\uparrow} \rangle\rangle. \quad (3.2)
 \end{aligned}$$

Функції Гріна (3.1) і (3.2) пов'язані з електронними функціями Гріна

$$G_{pp'}^{\sigma}(E) = \langle\langle a_{p\sigma} | a_{p'\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle \quad (3.3)$$

співвідношеннями

$$\begin{aligned}
 G_{pp'}^{\uparrow}(E) &= G_{pp'}^{(1)}(E) - G_{pp'}^{(2)}(E) \\
 &- G_{pp'}^{(3)}(E) + G_{pp'}^{(4)}(E), \quad (3.4) \quad \text{де}
 \end{aligned}$$

Прийmemo тут, що будь-який тип електронного впорядкування відсутній (у цьому випадку врахування міжатомних взаємодій у наближенні середнього поля приводить до перенормування хемічного потенціалу).

Використовуючи методику, запропоновану в роботі [4], отримуємо такі вирази для фур'є-образів функцій Гріна (3.1):

$$G_{\mathbf{k}}^{(1)}(E) = \frac{1-n/2}{2\pi} \frac{E + \mu - U - \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})}{(E - E(\mathbf{k}))(E - \tilde{E}(\mathbf{k}))}, \quad (3.6)$$

$$G_{\mathbf{k}}^{(2)}(E) = \frac{1-n/2}{2\pi} \frac{\epsilon_2(\mathbf{k})}{(E - E(\mathbf{k}))(E - \tilde{E}(\mathbf{k}))}, \quad (3.7)$$

$$G_{\mathbf{k}}^{(3)}(E) = \frac{n/2}{2\pi} \frac{\epsilon_1(\mathbf{k})}{(E - E(\mathbf{k}))(E - \tilde{E}(\mathbf{k}))}, \quad (3.8)$$

$$G_{\mathbf{k}}^{(4)}(E) = \frac{n/2}{2\pi} \frac{E + \mu - \epsilon(\mathbf{k})}{(E - E(\mathbf{k}))(E - \tilde{E}(\mathbf{k}))}, \quad (3.9)$$

$$E(\mathbf{k}) = -\mu + \frac{\epsilon(\mathbf{k}) + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) + U}{2} - \frac{1}{2} \left\{ [\epsilon(\mathbf{k}) + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) + U]^2 - 4\epsilon(\mathbf{k})U + 4[\epsilon_1(\mathbf{k})\epsilon_2(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k})\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})] \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (3.10)$$

$$\tilde{E}(\mathbf{k}) = -\mu + \frac{\epsilon(\mathbf{k}) + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) + U}{2} + \frac{1}{2} \left\{ [\epsilon(\mathbf{k}) + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) + U]^2 - 4\epsilon(\mathbf{k})U + 4[\epsilon_1(\mathbf{k})\epsilon_2(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k})\tilde{\epsilon}(\mathbf{k})] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3.11)$$

задають квазічастинковий енергетичний спектр системи, яку описує гамільтоніян (2.1). Для фур'є-компонент величин, що визначають квазічастинкові спектри (3.10) і (3.11), маємо:

$$\begin{aligned}
 \epsilon(\mathbf{k}) &= \alpha t_{\mathbf{k}}(n), & \epsilon_1(\mathbf{k}) &= \alpha_1 t'_{\mathbf{k}}(n), \\
 \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) &= \tilde{\alpha} \tilde{t}_{\mathbf{k}}(n), & \epsilon_2(\mathbf{k}) &= \alpha_2 t'_{\mathbf{k}}(n), \quad (3.12) \\
 \alpha &= \frac{2-n}{2} + \frac{(n-2d)^2}{2(2-n)} - \frac{2cd}{2-n} \frac{\tilde{t}(n)}{t(n)}, \\
 \alpha_1 &= -\frac{2-n}{2} + \frac{(n-2d)^2}{2n} - \frac{2cd}{n}, \\
 \tilde{\alpha} &= \frac{n}{2} + \frac{(n-2d)^2}{2n} - \frac{2cd}{n} \frac{t(n)}{\tilde{t}(n)},
 \end{aligned}$$

$$\alpha_2 = -\frac{n}{2} + \frac{(n-2d)^2}{2(2-n)} - \frac{2cd}{2-n}. \quad (3.13)$$

У цих співвідношеннях  $c$  — концентрація дірок ( $\langle X_i^0 \rangle = c$ ),  $d$  — концентрація двійок ( $\langle X_i^2 \rangle = d$ ). При цьому використано, що

$$t_{\mathbf{k}}(n) = \frac{1}{N} \sum_{ij} t_{ij}(n) \exp i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \equiv t(n)\gamma(\mathbf{k}),$$

$$t(n) \equiv t_{ij}(n), \quad \gamma(\mathbf{k}) = \sum_{\rho} \exp(i\mathbf{k}\rho)$$

(підсумовування ведемо по найближчих сусідах), а також аналогічні співвідношення для інтегралів переносу  $\tilde{t}_{\mathbf{k}}(n)$  і  $t'_{\mathbf{k}}(n)$ .

Одноелектронну функцію Гріна (3.3) отримуємо за допомогою квазічастинкових функцій Гріна  $G_{\mathbf{k}}^{(i)}(E)$  через співвідношення (3.4).

2. Особливістю енергетичного спектра, заданого виразами (3.10) і (3.11), є його залежність від концентрацій полярних станів. Наведемо тут деякі загальні формули для розрахунку цих величин.

Зобразимо вираз (3.9) у формі:

$$G_{\mathbf{k}}(E) = \frac{n/2}{2\pi} \left( \frac{A_{\mathbf{k}}}{E - \tilde{E}(\mathbf{k})} + \frac{B_{\mathbf{k}}}{E - E(\mathbf{k})} \right),$$

де

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}} &= \frac{\tilde{E}(\mathbf{k}) + \mu - \epsilon(\mathbf{k})}{\tilde{E}(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k})}, \\ B_{\mathbf{k}} &= -\frac{E(\mathbf{k}) + \mu - \epsilon(\mathbf{k})}{\tilde{E}(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k})}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Для спектральної інтенсивності функції Гріна (3.9) маємо:

$$\begin{aligned} J_{\mathbf{k}}(E) &= \frac{n/2}{\exp \frac{E}{\theta} + 1} \left( A_{\mathbf{k}} \delta(E - \tilde{E}(\mathbf{k})) \right. \\ &\quad \left. + B_{\mathbf{k}} \delta(E - E(\mathbf{k})) \right), \end{aligned}$$

де  $\theta = k_B T$  ( $k_B$  — стала Больцмана). Концентрацію двійок визначаємо виразом

$$d = \langle X_i^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} J_{\mathbf{k}}(E) dE \quad (3.15)$$

$$= \frac{n/2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{A_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{\tilde{E}(\mathbf{k})}{\theta} + 1} + \frac{B_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{E(\mathbf{k})}{\theta} + 1} \right).$$

Аналогічно для концентрації дірок отримуємо формулу

$$\begin{aligned} c &= \langle X_i^0 \rangle \\ &= \frac{1 - n/2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{C_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{-\tilde{E}(\mathbf{k})}{\theta} + 1} + \frac{D_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{-E(\mathbf{k})}{\theta} + 1} \right), \end{aligned} \quad (3.16)$$

де

$$\begin{aligned} C_{\mathbf{k}} &= \frac{\tilde{E}(\mathbf{k}) + \mu - U - \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})}{\tilde{E}(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k})}, \\ D_{\mathbf{k}} &= -\frac{E(\mathbf{k}) + \mu - U - \tilde{\epsilon}(\mathbf{k})}{\tilde{E}(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k})}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

3. Маючи на увазі дослідження переходу метал-діелектрик, розглянемо принципово важливий випадок напівзаповненої вихідної зони, коли  $c = d$ .

Перепишемо вирази (3.12) і (3.13) у вигляді:

$$\begin{aligned} \epsilon(\mathbf{k}) &= (1 - 2c + 2c^2)t_{\mathbf{k}} - 2c^2\tilde{t}_{\mathbf{k}}, \\ \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) &= (1 - 2c + 2c^2)\tilde{t}_{\mathbf{k}} - 2c^2t_{\mathbf{k}}, \\ \epsilon_1(\mathbf{k}) &= \epsilon_2(\mathbf{k}) = -2ct'_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Підстановка (3.18) у (3.10) і (3.11) дає одночастинковий енергетичний спектр:

$$E_1(\mathbf{k}) = -\mu + \frac{(1 - 2c)(t_{\mathbf{k}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}}) + U}{2} - \frac{1}{2} \{ A(t_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}})^2 - 2UB(t_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}}) + U^2 + (4ct'_{\mathbf{k}})^2 \}^{\frac{1}{2}}, \quad (3.19)$$

$$E_2(\mathbf{k}) = -\mu + \frac{(1 - 2c)(t_{\mathbf{k}} + \tilde{t}_{\mathbf{k}}) + U}{2} + \frac{1}{2} \{ A(t_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}})^2 - 2UB(t_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}}) + U^2 + (4ct'_{\mathbf{k}})^2 \}^{\frac{1}{2}}, \quad (3.20)$$

де

$$\begin{aligned} A &= (1 - 2c)^2 + 8c^2(1 - 2c + 2c^2), \\ B &= 1 - 2c + 4c^2. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Отриманий квазічастинковий енергетичний спектр дає змогу вивчати особливості моделі вузькозонного матеріалу з нееквівалентними габбардівськими підзонами, зокрема дослідити перехід метал-діелектрик у запропонованій моделі.

**IV. ПЕРЕХІД МЕТАЛ–ДИЕЛЕКТРИК ДЛЯ ВИПАДКУ НАПІВЗАПОВНЕНОЇ ЗОНИ**

1. Знайдемо вирази для хемічного потенціалу  $\mu$  і концентрації полярних станів у випадку половинного заповнення зони при  $T = 0$ . Коефіцієнти (3.14) і (3.17) визначатимуться тут співвідношеннями:

$$B_{\mathbf{k}} = C_{\mathbf{k}} = -\frac{1-2c+4c^2}{2Q}(\tilde{t}_{\mathbf{k}} - t_{\mathbf{k}}) - \frac{U}{2Q} + \frac{1}{2}, \quad (4.1)$$

$$A_{\mathbf{k}} = D_{\mathbf{k}} = \frac{1-2c+4c^2}{2Q}(\tilde{t}_{\mathbf{k}} - t_{\mathbf{k}}) + \frac{U}{2Q} + \frac{1}{2}, \quad (4.2)$$

$$Q = [A(t_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}})^2 - 2BU(t_{\mathbf{k}} - \tilde{t}_{\mathbf{k}}) + U^2 + (4ct'_{\mathbf{k}})^2]^{\frac{1}{2}}.$$

Із формул (4.1) і (4.2) видно, що

$$A_{\mathbf{k}} + B_{\mathbf{k}} = C_{\mathbf{k}} + D_{\mathbf{k}} = 1. \quad (4.3)$$

Запишемо умову для визначення хемічного потенціалу:

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{A_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{E_2(\mathbf{k})}{\theta} + 1} + \frac{B_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{E_1(\mathbf{k})}{\theta} + 1} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{C_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{-E_2(\mathbf{k})}{\theta} + 1} + \frac{D_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{-E_1(\mathbf{k})}{\theta} + 1} \right), \end{aligned} \quad (4.4)$$

де  $E_1(\mathbf{k})$  та  $E_2(\mathbf{k})$  задаються виразами (3.19) і (3.20). Співвідношення (4.4) при  $T = 0$  перепишемо у вигляді:

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}} [A_{\mathbf{k}}\theta(-E_2(\mathbf{k})) + B_{\mathbf{k}}\theta(-E_1(\mathbf{k}))] \\ &= \sum_{\mathbf{k}} [C_{\mathbf{k}}\theta(E_2(\mathbf{k})) + D_{\mathbf{k}}\theta(E_1(\mathbf{k}))], \end{aligned} \quad (4.5)$$

де  $\theta(x)$  — тета-функція.

Використовуючи формули для коефіцієнтів (4.1), (4.2) і (4.3) та властивості тета-функції, для рівняння (4.5) маємо:

$$\sum_{\mathbf{k}} [\theta(E_2(\mathbf{k})) + \theta(E_1(\mathbf{k}))] = 1. \quad (4.6)$$

Прийmemo прямокутну густину станів:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - t(\mathbf{k})) = \frac{1}{2w} \theta(w^2 - E^2). \quad (4.7)$$

Перейдемо в рівнянні (4.6) від підсумовування за  $\mathbf{k}$  до інтегрування за енергією і розв'яжемо його. У підсумку для металічного стану ( $U \leq w + \tilde{w}$ ) маємо

$$\mu = \frac{(1-2c+2c^2)w - 2c^2\tilde{w}}{(1-2c)(w+\tilde{w})}U, \quad (4.8)$$

де  $w$  та  $\tilde{w}$  — півширини нижньої підзони (“діркова” підзона) та верхньої підзони (підзона “двійок”) відповідно;  $w = z|t|$ ,  $\tilde{w} = z|\tilde{t}|$  ( $z$  — число найближчих сусідів). Таким чином, виявляється, що нееквівалентність габбардівських підзон приводить до залежності хемічного потенціалу від концентрації носіїв струму  $c$  та півширин підзон  $w$  і  $\tilde{w}$  (на відміну від моделі Габбарда, де  $\mu = U/2$ ).

Знайдемо тепер концентрацію полярних станів. Для цього запишемо рівняння для  $c$ :

$$c = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left[ \frac{C_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{-E_2(\mathbf{k})}{\theta} + 1} + \frac{D_{\mathbf{k}}}{\exp \frac{-E_1(\mathbf{k})}{\theta} + 1} \right]. \quad (4.9)$$

Перепишемо співвідношення (4.9) у вигляді ( $T = 0$ ):

$$c = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} [C_{\mathbf{k}}\theta(+E_2(\mathbf{k})) + D_{\mathbf{k}}\theta(+E_1(\mathbf{k}))]. \quad (4.10)$$

Перейдемо у виразі (4.10) від підсумовування за  $\mathbf{k}$  до інтегрування за енергією:

$$\begin{aligned} 2c &= \int_{-w}^w C_{\epsilon}\theta(+E_2(\epsilon)) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - t_{\mathbf{k}}) d\epsilon \\ &+ \int_{-w}^w D_{\epsilon}\theta(+E_1(\epsilon)) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - t_{\mathbf{k}}) d\epsilon. \end{aligned} \quad (4.11)$$

У рівнянні (4.11)  $C_{\epsilon}$ ,  $D_{\epsilon}$ ,  $E_1(\epsilon)$ ,  $E_2(\epsilon)$  отримуємо з відповідних формул (3.19), (3.20), (4.1) і (4.2) для  $C_{\mathbf{k}}$ ,  $D_{\mathbf{k}}$ ,  $E_1(\mathbf{k})$ ,  $E_2(\mathbf{k})$  заміною  $t_{\mathbf{k}} \rightarrow \epsilon$ ,  $\tilde{t}_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{\tilde{t}}{t}\epsilon$ ,  $t'_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{t'}{t}\epsilon$ . Використання виразу (4.7) приводить до рівняння

$$2c = \frac{1}{2w} \int_{-\epsilon_0}^w C_{\epsilon} d\epsilon + \frac{1}{2w} \int_{\epsilon_0}^w D_{\epsilon} d\epsilon, \quad (4.12)$$

де

$$\epsilon_0 = \frac{|(2\mu - U)(1 - 2c)(t + \tilde{t}) - BU(t - \tilde{t}) - \frac{\sqrt{D}}{2}|}{|(1 - 2c)^2(t + \tilde{t})^2 - A(t - \tilde{t})^2 - (4ct')^2|} |t| \quad (4.13)$$

— додатній корінь рівняння

$$-\mu + \frac{U}{2} + \frac{(1-2c)(t+\tilde{t})}{2} \frac{\epsilon}{t} - \frac{1}{2} \left\{ A(t-\tilde{t})^2 \frac{\epsilon^2}{t^2} - 2BU(t-\tilde{t}) \frac{\epsilon}{t} + U^2 + (4ct')^2 \frac{\epsilon^2}{t^2} \right\}^{\frac{1}{2}} = 0;$$

$$D = 4U^2(1-2c)^2(t+\tilde{t})^2 + 8BU(1-2c)(-2\mu+U)(t^2-\tilde{t}^2) + [4B^2U^2 + 16A(\mu^2 - \mu U)](t-\tilde{t})^2 + 16(\mu^2 - \mu U)(4ct')^2;$$

$\mu$  визначається формулою (4.8);  $A$  та  $B$  — коефіцієнти, задані співвідношенням (3.21).

У підсумку отримуємо таке рівняння для концентрації полярних станів  $c$ :

$$\frac{Bt\tilde{t}-t}{w} \frac{1}{\lambda} \left[ \varphi\left(-\frac{\epsilon_0}{t}\right) - \varphi\left(\frac{\epsilon_0}{t}\right) \right] + \frac{U}{\sqrt{\lambda}} \frac{|t|}{w} \left( 1 - \frac{B^2(\tilde{t}-t)^2}{\lambda} \right) \times \ln \frac{\sqrt{\lambda}\varphi\left(-\frac{\epsilon_0}{t}\right) - \lambda\left(-\frac{\epsilon_0}{t}\right) - BU(\tilde{t}-t)}{\sqrt{\lambda}\varphi\left(\frac{\epsilon_0}{t}\right) - \lambda\left(\frac{\epsilon_0}{t}\right) - BU(\tilde{t}-t)} = 8c - 2, \quad (4.14)$$

де

$$\lambda = A(\tilde{t}-t)^2 + (4ct')^2,$$

$$\varphi\left(\frac{\epsilon}{t}\right) = \left\{ \lambda \left(\frac{\epsilon}{t}\right)^2 + 2BU(\tilde{t}-t) \frac{\epsilon}{t} + U^2 \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (4.15)$$

Із рівняння (4.14) чисельними методами отримані залежності для концентрації носіїв струму  $c$  від параметрів  $U/w$  та  $\tilde{w}/w$  (рис. 2, 3). При зменшенні  $\tilde{w}/w$  ( $0 \leq \tilde{w}/w \leq 1$ ) маємо зменшення концентрації носіїв струму. З рис. 2 видно також, що при  $U/w$ , достатньо близьких до нуля, значення  $c$  мало залежить від відношення  $\tilde{w}/w$ , але при збільшенні  $U/w$  концентрація носіїв струму починає суттєво залежати від  $\tilde{w}/w$ .

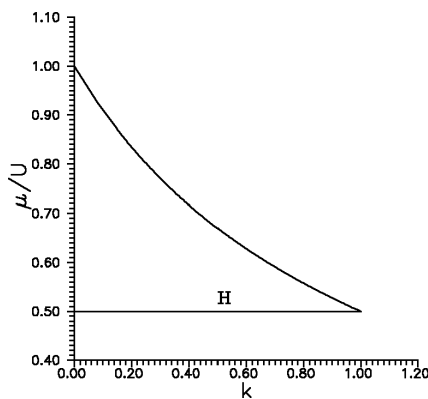


Рис. 1. Залежність хемічного потенціалу  $\mu$  від  $k = \tilde{w}/w$ ; пряма  $H$  відповідає значенню хемічного потенціалу в моделі Габбарда.

Якщо  $t = \tilde{t} = t'$  (модель Габбарда), то

$$\epsilon_0 = \frac{U}{2\sqrt{1-4c}}$$

і рівняння (4.14) переходить у вираз для концентрації полярних станів (1.3).

2. Енергетична щілина.

Вираз для ширини енергетичної щілини в даній моделі означимо як різницю нижньої межі верхньої підзони та верхньої межі нижньої підзони:

$$\Delta E = -(1-2c)(w + \tilde{w}) + \frac{1}{2}(Q_1 + Q_2), \quad (4.16)$$

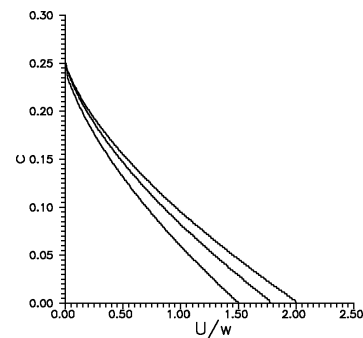


Рис. 2. Залежність концентрації полярних станів  $c$  від  $U/w$ : верхня крива —  $\tau_1 = \tau_2 = 0$ ; середня крива —  $\tau_1 = \tau_2 = 0.1$ ; нижня крива —  $\tau_1 = \tau_2 = 0.2$ .

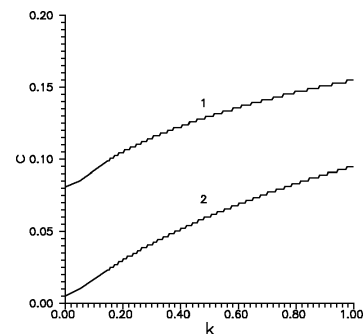


Рис. 3. Залежність концентрації полярних станів  $c$  від  $k = \tilde{w}/w$ : крива 1 відповідає значенню  $U/w = 0.5$ ; крива 2 —  $U/w = 1$ .

$$Q_1 = \left\{ A(w - \tilde{w})^2 - 2BU(w - \tilde{w}) + U^2 + \left(\frac{t'}{t}\right)^2 (4cw)^2 \right\}^{\frac{1}{2}},$$

$$Q_2 = \left\{ A(w - \tilde{w})^2 + 2BU(w - \tilde{w}) + U^2 + \left(\frac{t'}{t}\right)^2 (4c\tilde{w})^2 \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (4.17)$$

Для симетричної моделі співвідношення (4.16) переходить в (1.2); у цьому випадку щілина зникає за умови  $2w \geq U$ . Для моделі з нееквівалентними габбардівськими підзонами енергетична щілина зникає, якщо виконується умова

$$w + \tilde{w} \geq U. \quad (4.18)$$

При заданих  $U$ ,  $w$  і  $\tilde{w}$  щілина зникає за умови  $c < c_0$ , де  $c_0$  — корінь рівняння

$$-(1 - 2c)(w + \tilde{w}) + \frac{1}{2}(Q_1 + Q_2) = 0. \quad (4.19)$$

( $0 \leq c_0 \leq 1/4$ ;  $Q_1$  і  $Q_2$  задаються виразами (4.17)). Отже, металічному стану відповідає умова  $c < c_0$ , а діелектричному —  $c > c_0$ .

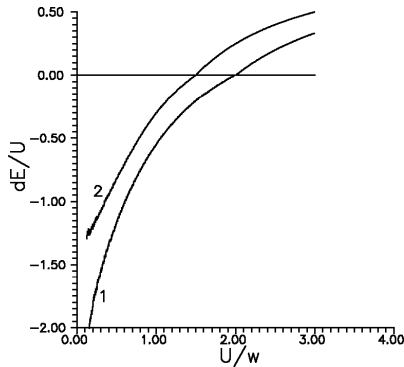


Рис. 4. Залежність енергетичної щілини від  $U/w$ : 1 —  $\tau_1 = \tau_2 = 0$ ; 2 —  $\tau_1 = \tau_2 = 0.2$ .

З рис. 4, отриманого за формулою (4.16), видно, що в металічному стані перекриття енергетичних підзон зменшується, а в діелектричному — ширина енергетичної щілини збільшується при зменшенні параметра  $\tilde{w}/w$ . Рис. 5 ілюструє перехід метал-діелектрик для вузькозонної системи з нееквівалентними габбардівськими підзонами ( $\tau_1 = \tau_2 = 0, 2$ ). Фазова діаграма (рис. 6), отримана за допомогою рівняння (4.19), указує на розширення області, де вузькозонний матеріал перебуває в металічному стані, із збільшенням  $\tilde{w}/w$ .

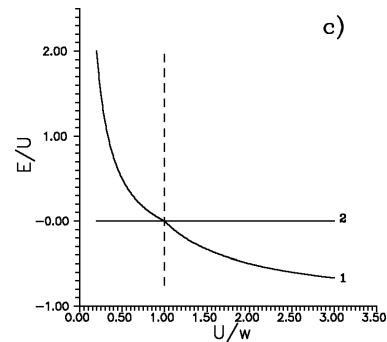
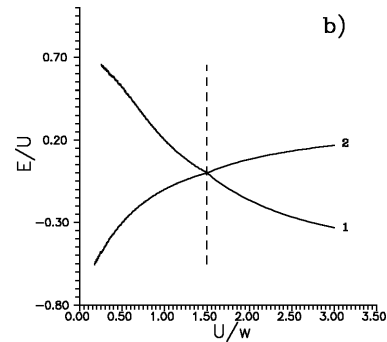
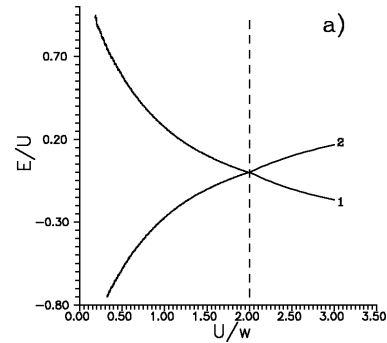


Рис. 5. Ілюстрація переходу метал-діелектрик для вузькозонного матеріалу: а)  $\tau_1 = \tau_2 = 0$  (модель Габбарда); б)  $\tau_1 = \tau_2 = 0.2$ ; в)  $\tau_1 = 0, \tau_2 = 0.5$  ( $\tilde{w} = 0$ ). Крива 1 відповідає верхній межі нижньої підзони, крива 2 — нижній межі верхньої підзони; область, розміщена зліва від штрихованої лінії між кривими 1 і 2 — перекриття нижньої і верхньої підзон.

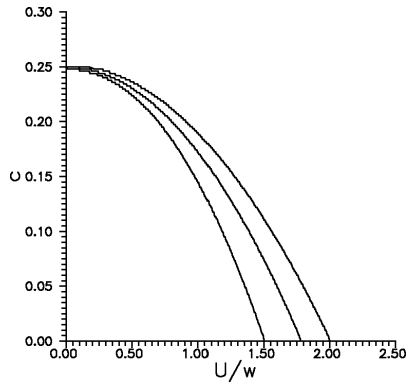


Рис. 6. Залежність  $c_0$  від  $U/w$ : верхня крива —  $\tau_1 = \tau_2 = 0$ ; середня крива —  $\tau_1 = \tau_2 = 0.1$ ; нижня крива —  $\tau_1 = \tau_2 = 0.2$ . Зліва від відповідної кривої — металічна область, справа — діелектрична.

3. Для ілюстрації особливостей моделі розглянемо випадок слабкого перекриття підзон (вузькозонний напівметал). Оскільки в області переходу  $c \ll 1$ , то одночастинковий енергетичний спектр матиме вигляд (нехтуємо виразами, які містять  $c^2$ ):

$$E_1(\mathbf{k}) = -\mu + (1 - 2c)t_{\mathbf{k}}, \quad (4.20)$$

$$E_2(\mathbf{k}) = -\mu + U + (1 - 2c)\tilde{t}_{\mathbf{k}}. \quad (4.21)$$

Із виразів (4.20) і (4.21) видно, що одночастинковий енергетичний спектр стає незалежним від інтеграла переносу  $t'$ , який описує процеси парного народження і знищення дірок та двійок. Хемічний потенціал вузькозонного напівметалу задається формулою

$$\mu = \frac{w}{w + \tilde{w}}U \quad (4.22)$$

і не залежить від концентрації полярних станів та “активаційного” інтеграла переносу. Для  $\tilde{w} = 0$  хемічний потенціал вузькозонного напівметалу вдвічі більший, ніж у моделі Габбарда.

Для малих концентрацій носіїв струму маємо:

$$c = \frac{1}{4} \left( 1 - \frac{U}{w + \tilde{w}} \right). \quad (4.23)$$

Звідси видно, що умова “металічності” збігається з умовою (4.18).

## V. ВИСНОВКИ

У роботі досліджено модель вузькозонного матеріалу з нееквівалентними габбардівськими підзонами при  $T = 0$  на основі методу, запропонованого в роботах [2 – 4].

Знайдено хемічний потенціал  $\mu$  як функцію внутрішньоатомного кулонівського відштовхування двох електронів з протилежними спінами  $U$ , півширин діркової і двійкової підзон  $w, \tilde{w}$  та концентрації полярних станів  $c$ . Для малих  $c$  (вузькозонний напівметал) хемічний потенціал не залежить від концентрації носіїв струму.

Отримано вираз для визначення концентрації полярних станів. При зростанні параметра  $\tilde{w}/w$  ( $0 \leq \tilde{w}/w \leq 1$ ) концентрація полярних станів  $c$  збільшується.

Знайдено квазічастинковий енергетичний спектр, особливістю якого є залежність від концентрації полярних станів та нееквівалентність верхньої й нижньої габбардівських підзон, зумовлена відмінністю відповідних інтегралів переносу. Для вузькозонного напівметалу ( $c \ll 1$ ) квазічастинковий енергетичний спектр стає мало залежним від інтеграла переносу  $t'$ , який описує процеси парного народження і знищення дірок та двійок.

За допомогою квазічастинкового енергетичного спектра отримано вираз для ширини енергетичної щільності  $\Delta E$ , що дозволяє описати перехід метал–діелектрик. Особливістю цього виразу (на відміну від моделі Габбарда) є те, що ширина енергетичної щільності залежить від концентрації полярних станів і відношення ширин “діркової” та “двійкової” підзон. Зростання параметра  $\tilde{w}/w$  (при заданому значенні  $U$ ) приводить до зменшення енергетичної щільності. Наслідком цього є, зокрема, те, що перехід метал–діелектрик здійснюється за умови  $U/w = 1 + \tilde{w}/w$  (у моделі Габбарда перехід відбувається, коли  $U = 2w$ ).

Більшість результатів, наведених у цій роботі, відповідають вузькозонній системі з половинним заповненням зони при  $T = 0$ . Випадки з  $n \neq 1$  і  $T \neq 0$ , застосування отриманих результатів до інтерпретації експериментальних даних будуть розглянуті в наступних роботах.

Автори висловлюють подяку проф. І. В. Стасюкові та учасникам семінару відділу квантової статистики ІФКС НАН України, а також своїм колегам з кафедри фізики Тернопільського державного технічного університету за обговорення проблем, що тут розглядалися.

[1] J. Hubbard, Proc. R. Soc., Ser. A **271**, 238 (1963); J. Hubbard, Proc. R. Soc., Ser. A **281**, 401 (1964).  
 [2] L. Didukh, in *Ukrainian–French Symposium Condensed Matter: Science and Industry. Lviv, February, 20–27, 1993. Abstracts, Information & Participants* (Lviv,

1993), p. 275.  
 [3] Л. Д. Дідух, препринт ICMP–96–20U (1996).  
 [4] Л. Д. Дідух, Журн. фіз. досл. **1**, 241 (1997).  
 [5] A. A. Aligia, L. Arrachea, and E. R. Gagliano, Phys. Rev. B **51**, 13774 (1995).



- [6] H. Q. Lin and J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **52**, 16155 (1995).  
 [7] E. R. Gagliano, A. A. Aligia, and L. Arrachea, M. Avignon, Phys. Rev. B **51**, 14012 (1995).  
 [8] Ю. А. Изюмов, Усп. физ. наук **165**, 403 (1995).  
 [9] Д. Н. Зубарев, Ю. Г. Рудой, Усп. физ. наук **163**, 103 (1993).  
 [10] J. Hubbard, Proc. R. Soc., Ser A **285**, 542 (1965).  
 [11] Л. Д. Дидух, И. В. Стасюк, Укр. физ. журн. **13**, 899 (1968).  
 [12] Л. Д. Дидух, Л. Ф. Прядко, И. В. Стасюк, *Корреляционные эффекты в материалах с узкими зонами проводимости* (Вища школа, Львів, 1978).  
 [13] С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма* (Наука, Москва, 1975).  
 [14] Д. Н. Зубарев, Усп. физ. наук **71**, 71 (1960).

## METAL-INSULATOR TRANSITION IN A NARROW-BAND MODEL WITH NON-EQUIVALENT HUBBARD SUB-BANDS

L. Didukh, V. Hankevych, Yu. Dovhopyaty  
 Ivan Puluj Ternopil State Technical University, Chair of Physics,  
 56 Rus'ka Str., Ternopil, UA-282001, Ukraine  
 E-mail: didukh@tu.edu.te.ua

The transition from an insulating to a metallic state is studied in a model of narrow-band material with non-equivalent Hubbard sub bands at half filling and zero temperature. The model is defined by the on-site interaction  $U$  and hopping integrals  $t_{ij} = t(ij) + T_1(ij)$ ,  $\tilde{t}_{ij} = t_{ij} + 2T(ij)$  and  $t'_{ij} = t_{ij} + T(ij)$ , where

$$T_1(ij) = \sum_{\substack{k \neq i \\ k \neq j}} J(ikjk), \quad T(ij) = J(iijj),$$

$t(ij)$ ,  $J(ijkl)$  are the matrix elements of electron-ion and electron-electron interactions.

Single-particle Green's function is obtained by a variant of the method of an approximate second quantization in the generalized Hartree-Fock approximation. This quasiparticle Green's function depends on the concentration of the polar states  $c$ . Chemical potential of the electron system being

$$\mu = \frac{(1 - 2c + 2c^2)w - 2c^2\tilde{w}}{(1 - 2c)(w + \tilde{w})}U,$$

where  $w$  — half-width of "hole" band,  $\tilde{w}$  — half-width of doublon band. A dependence of the concentration of polar states  $c$  on  $U$ ,  $t$ ,  $\tilde{t}$ ,  $t'$  is found. We obtain an energy gap as the function of  $U$ ,  $w$ ,  $\tilde{w}$ ,  $c$ , and the hopping integral  $t'$ :

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

$$Q_1 = \left\{ A(w - \tilde{w})^2 - 2BU(w - \tilde{w}) + U^2 + \left(\frac{t'}{t}\right)^2 (4cw)^2 \right\}^{\frac{1}{2}},$$

$$Q_2 = \left\{ A(w - \tilde{w})^2 + 2BU(w - \tilde{w}) + U^2 + \left(\frac{t'}{\tilde{t}}\right)^2 (4c\tilde{w})^2 \right\}^{\frac{1}{2}},$$

$$A = (1 - 2c)^2 + 8c^2(1 - 2c + 2c^2), \quad B = 1 - 2c + 4c^2.$$

The condition for a metallic state is determined:

$$w + \tilde{w} \geq U.$$