

ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ–ДИЭЛЕКТРИК В ПЕРИОДИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА – ХАББАРДА В СЛУЧАЕ 3-КРАТНОГО ВЫРОЖДЕНИЯ

Аннотация. Предложен гамильтониан трехзонной периодической модели Андерсона – Хаббарда и должным образом симметризованный базис волновых функций. На симметричной части этого базиса в соответствии с правилом Хунда и принципом электронейтральности Полинга построены хаббардовские подзоны за счет трансляционного движения электронов по решетке и по одной из орбиталей. В отсутствие магнитного поля получен критерий перехода металл–диэлектрик.

Ключевые слова: электросопротивление, электронные корреляции, эффективная масса, спиновая волна, время релаксации.

Abstract. The authors suggest a hamiltonian to the Anderson-Hubbard three-band periodic model and a properly symmetrized basis of wave functions. According to the Hund's rule and the Polinger's principle of electroneutrality, the researchers have constructed habbard subzones on a symmetric part of this basis through transmitting movement electrons on a lattice and on one of the orbitals. In absence magnetic fields the criterion of transition isolator-metal is received.

Key words: electroresistance, electronic correlations, effective weight, spin wave, time of relaxation.

Введение

В соединениях переходных металлов (окислах, сульфидах и т.д.) с узкой полузаполненной зоной в определенной области изменения температуры, давления и поля может возникнуть диэлектрическая щель. Во многих веществах природа щели остается неясной (NiS, NiS₂, VO₂ [1]). Для объяснения наличия щели применяются два возможных варианта. В изоляторах Мотта – Хаббарда щель связана с сильным взаимодействием электронов, а антиферромагнитный (АФМ) порядок рассматривается как следствие диэлектрического состояния, когда на узел решетки приходится один электрон (NiS). В изоляторах Слэтера АФМ состояние является причиной диэлектрической щели. Разрушение АФМ порядка полем, температурой, давлением должно приводить к переходу в металлическое состояние. Остается спорным и вопрос о параметре порядка вблизи линии перехода металл–диэлектрик [2], который бы служил надежным критерием такого перехода. Однако экспериментально обнаружен ряд особенностей в кинетике электронов в узких *d*-зонах, которые целиком обусловлены вырождением. Принципиальное отличие вырожденных состояний от невырожденных состоит в том, что при наличии вырождения по орбитальному квантовому числу на одном узле кристаллической решетки могут размещаться два электрона с параллельными спинами. При этом состояния с параллельными спинами энергетически выгоднее, чем с противоположно направленными спинами, как это следует из правил Хунда. В узких вырожденных *d*-зонах важными становятся хундовский обмен между электронами различных орбиталей и межэлектронные корреляции. Вырождение по орбитальному квантовому числу снимается кристаллическим полем

лишь частично. С этой точки зрения важными являются двуокись ванадия (VO_2) и дисульфид никеля (NiS_2) [3]. В образовании связи между V и O участвует 24 из 26 электронов. Оставшиеся два валентных электрона обеспечивают проводимость и обуславливают переход. Если n_d -электронная плотность d -типа в элементарной ячейке, объем которой равен 400,53 а.е., критерий Мотта перехода металл–диэлектрик (МД) ($M = n_d^{1/3} r_d = 0,25$) близок к критическому. Это указывает на возможность перехода металл–диэлектрик в VO_2 . Подобная ситуация имеет место и в NiS_2 . При всех давлениях и температуре выше 100 К это соединение имеет структуру типа перовскита. Два d -электрона точно наполовину заполняют e_g -полосу и в этом соединении происходит переход Мотта по механизму Хаббарда. Кроме того, вблизи линии перехода производная давления по объему положительна, что указывает на изоструктурный фазовый переход первого рода. Данные по оптическому поглощению в двуокиси ванадия VO_2 [4, 5] указывают на то, что вблизи уровня Ферми сосредоточены узкая невырожденная a_g -зона и двукратно вырожденная e_g -зона, отстоящие друг от друга на расстоянии $\sim 0,05$ эВ.

Применительно к VO_2 и NiS_2 ниже рассматривается двухзонная трехорбитальная периодическая модель Андерсона – Хаббарда, учитывающая указанные выше особенности зонного строения этих соединений. Впервые межэлектронное взаимодействие при расчете спектра оптического поглощения VO_2 учтено в [6], где отмечается, что полоса 1,6 эВ связана с d - d -переходом и обусловлена корреляционными эффектами.

В рамках рассматриваемой модели установлена роль гибридизации в формировании электронного энергетического спектра одноузельной части гамильтониана и получен критерий перехода металл–диэлектрик. Причиной перехода, как отмечалось Хаббардом [7], является рассеяние электронных возбуждений на флуктуациях локализованных спинов и орбитальных моментов.

1. Модельный гамильтониан. Электронный энергетический спектр

Гамильтониан задачи запишем в виде

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= H_1 + H_2 + H_3 + H_4 + H_5 + H_6; \\ H_1 &= \sum_{i,\sigma,m=a,b,c} \frac{I_m}{2} n_{i\sigma}^m n_{i\bar{\sigma}}^m, \quad H_2 = \frac{U}{2} \sum_{\substack{i,\sigma,\sigma' \\ m,n=a,b \\ m \neq n}} n_{i\sigma}^m n_{i\sigma'}^n, \quad H_3 = J \sum_i S_i^a S_i^b, \\ H_4 &= \sum_{\substack{i,\sigma,m \\ (m=a,b,c)}} (E^m + \sigma H) d_{i\sigma m}^+ d_{i\sigma m}, \quad H_5 = \frac{V_0}{2} \sum_{i,\sigma} \left[(a_{i\sigma}^+ + b_{i\sigma}^+) c_{i\sigma} + \text{э.с.} \right], \\ H_6 &= \sum_{\substack{i,j,\sigma \\ m=a,b,c}} t_{ij}^{mm} d_{i\sigma m}^+ d_{j\sigma m} + \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}^{ab} (a_{i\sigma}^+ b_{j,\sigma} + \text{э.с.}), \end{aligned} \quad (1)$$

где I_m – кулоновское расталкивание электронов на орбиталях, $m = a, b, c$; U – межорбитальное кулоновское взаимодействие электронов a и b ; J – обменное (хундовское) взаимодействие a - и b -электронов; E_m – одночастичные

энергии a -, b -, c -электронов, отсчитанные от уровня химического потенциала; H – внешнее магнитное поле; V_0 – энергия андерсоновской гибридизации; t_{ij} – энергия туннелирования; $n_{i\sigma}^m = \{n_{i\sigma}^a, n_{i\sigma}^b\}$, где $n_{i\sigma}^a = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$, $n_{i\sigma}^b = b_{i\sigma}^+ b_{i\sigma}$ – число частиц на орбитах типа « a » и « b »; $d_{i\sigma m} = \{a_{i\sigma}, b_{i\sigma}, c_{i\sigma}\}$ – операторы уничтожения электронов на орбиталях a, b, c соответственно.

Далее считаем $I_a = I_b = I_1$, $I_c = I_2$, $I_2 \leq I_1$, $I_1 > U > J > V_0$. В качестве базиса для приведения одноузельной части гамильтониана к диагональному виду можно использовать операторы Хаббарда или эквивалентные им (но с лексикографическим упорядочением корней) тензор-инвариантные операторы Окубо [8]. Полный базис состоит из 64 волновых функций, разбитых по числу электронов на орбитах $1 \leq n \leq 6$, по спинам $S = 1/2, 1, 3/2$ и по их проекциям. Нормировка и ортогонализация вырожденных по проекции спина волновых функций проводилась путем использования проекционных операторов группы перестановок S_3 . Принцип построения такого базиса изложен в работе [8]. В случае, когда среднее число электронов на атом равно n , согласно принципу электронейтральности Полинга [6] можно ограничиться рассмотрением трех термов E_n, E_{n-1}, E_{n+1} , соответствующих основным состояниям конфигураций: d_n, d_{n-1}, d_{n+1} . В атомном пределе спектр одночастичных возбуждений состоит из двух резонансов. По идеологии Хаббарда, каждый переход между образовавшимися подуровнями размывается в подзону за счет межатомного туннелирования.

Для сравнения с результатами работы [9] и учета влияния андерсоновской гибридизации рассмотрим переходы при $n = 3$. Волновые функции и соответствующие им собственные значения энергии приведены далее. По полученному в одноузельном приближении спектру видно, что за счет андерсоновской гибридизации многократно вырожденное исходное состояние частично снято.

Переход от одноэлектронных операторов к операторам Хаббарда осуществляется, как в работах [8, 9]:

$$a_{\sigma} = \sum_{p,k} \langle p | a_{\sigma} | k \rangle X_p^k, \quad (X_p^k)^+ = X_k^p.$$

В случае переходов с четырехэлектронных на трехэлектронные и с трехэлектронных на двухэлектронные состояния $p, k = |2aT_{bc}^{\sigma\sigma}\rangle, |2aT_{bc}^{\sigma\bar{\sigma}}\rangle, |\sigma\sigma\sigma\rangle, |T^{\sigma}\rangle, |L^{\sigma}\rangle, |L^{\sigma\bar{\sigma}}\rangle$ по орбиталям типа « a » было получено следующее представление одноэлектронных операторов через хаббардовские:

$$a_{\sigma}^+ = \alpha\sigma \left(X_{2aT_{bc}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}} + \frac{1}{\sqrt{3}} X_{2aT_{bc}^{\sigma}}^{T^{\sigma}} + \sqrt{\frac{2}{3}} X_{2aT_{bc}^{\sigma\bar{\sigma}}}^{T^{\bar{\sigma}}} \right) + \delta \left(X_{\sigma\sigma\sigma}^{L^{\sigma}} + \frac{1}{\sqrt{3}} X_{T^{\bar{\sigma}}}^{L^{\bar{\sigma}}} + \sqrt{\frac{2}{3}} X_{T^{\sigma}}^{L^{\sigma\bar{\sigma}}} \right).$$

Аналогичным образом определяются операторы на орбиталях типа « b »:

$$b_{\sigma}^+ = \alpha\sigma \left(X_{2aT_{ac}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}} + \frac{1}{\sqrt{3}} X_{2aT_{ac}^{\sigma}}^{T^{\sigma}} + \sqrt{\frac{2}{3}} X_{2aT_{ac}^{\sigma\bar{\sigma}}}^{T^{\bar{\sigma}}} \right) + \delta \left(X_{\sigma\sigma\sigma}^{L^{\sigma}} + \frac{1}{\sqrt{3}} X_{T^{\bar{\sigma}}}^{L^{\bar{\sigma}}} + \sqrt{\frac{2}{3}} X_{T^{\sigma}}^{L^{\sigma\bar{\sigma}}} \right),$$

где $g_{\alpha\beta}^{ab}$ – множители перед X -операторами задают генеалогические коэффициенты. Остальные операторы получаются путем циклической перестановки орбиталей и их сопряжением.

2. Переход металл–диэлектрик

В соответствии с принципом электронейтральности и в отсутствие магнитного поля основное состояние электронов описывается волновыми функциями и соответствующим им энергетическим спектром:

$$\begin{aligned}
 |2aT_{bc}^{\sigma}\rangle &= \alpha\sigma\left(a_{\sigma}^{+}a_{\bar{\sigma}}^{+}b_{\sigma}^{+}c_{\sigma}^{+}|0\rangle + a_{\sigma}^{+}b_{\sigma}^{+}b_{\bar{\sigma}}^{+}c_{\sigma}^{+}|0\rangle\right) + \beta\sigma\left(a_{\sigma}^{+}b_{\sigma}^{+}c_{\sigma}^{+}c_{\bar{\sigma}}^{+}|0\rangle\right); \\
 E\left(2aT_{bc}^{\sigma}\right) &= \varepsilon_1 + \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon_2^2 + 2V_0^2}; \\
 |2aT_{bc}^{\sigma\bar{\sigma}}\rangle &= \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(a_{\sigma}^{+}a_{\bar{\sigma}}^{+}\left(b_{\sigma}^{+}c_{\bar{\sigma}}^{+} + b_{\bar{\sigma}}^{+}c_{\sigma}^{+}\right)|0\rangle + b_{\sigma}^{+}b_{\bar{\sigma}}^{+}\left(a_{\sigma}^{+}c_{\bar{\sigma}}^{+} + a_{\bar{\sigma}}^{+}c_{\sigma}^{+}\right)|0\rangle\right) + \\
 &\quad + \frac{\beta}{\sqrt{2}}\left(c_{\sigma}^{+}c_{\bar{\sigma}}^{+}\left(a_{\sigma}^{+}b_{\bar{\sigma}}^{+} + a_{\bar{\sigma}}^{+}b_{\sigma}^{+}\right)|0\rangle\right); \\
 E\left(2aT_{bc}^{\sigma\bar{\sigma}}\right) &= \varepsilon_1 + \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon_2^2 + 2V_0^2}; \\
 |\sigma\sigma\sigma\rangle &= a_{\sigma}^{+}b_{\sigma}^{+}c_{\sigma}^{+}|0\rangle, \quad E(\sigma\sigma\sigma) = \varepsilon_3; \\
 |T^{\sigma}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(a_{\bar{\sigma}}^{+}b_{\sigma}^{+}c_{\sigma}^{+} + a_{\sigma}^{+}b_{\bar{\sigma}}^{+}c_{\sigma}^{+} + a_{\sigma}^{+}b_{\sigma}^{+}c_{\bar{\sigma}}^{+}\right)|0\rangle; \\
 E\left(T^{\sigma}\right) &= \varepsilon_3; \\
 |L^{\sigma}\rangle &= \gamma\left(a_{\sigma}^{+}b_{\sigma}^{+}|0\rangle\right) + \delta\left(a_{\sigma}^{+}c_{\sigma}^{+}|0\rangle + b_{\sigma}^{+}c_{\sigma}^{+}|0\rangle\right); \\
 E\left(L^{\sigma}\right) &= \varepsilon_4 + \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon_2^2 + 2V_0^2}; \\
 |L^{\sigma\bar{\sigma}}\rangle &= \frac{\gamma}{\sqrt{2}}\left(\left(a_{\sigma}^{+}b_{\bar{\sigma}}^{+} + a_{\bar{\sigma}}^{+}b_{\sigma}^{+}\right)|0\rangle\right) + \frac{\delta}{\sqrt{2}}\left(\left(b_{\sigma}^{+}c_{\bar{\sigma}}^{+} + a_{\bar{\sigma}}^{+}c_{\sigma}^{+}\right)|0\rangle + \left(b_{\bar{\sigma}}^{+}c_{\sigma}^{+} + b_{\sigma}^{+}c_{\bar{\sigma}}^{+}\right)|0\rangle\right); \\
 E\left(L^{\sigma\bar{\sigma}}\right) &= \varepsilon_4 + \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon_2^2 + 2V_0^2},
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

где

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_1 &= \frac{I_1 + I_2 + 3U + 5E^a + 3E^c - J/2}{2}, \quad \varepsilon_2 = I_1 - I_2 + E^a - E^c + J/2, \\
 \varepsilon_3 &= U - J/2 + 2E^a + E^c, \quad \varepsilon_4 = \frac{U - J/2 + 3E^a + E^c}{2}, \quad \varepsilon_5 = U - J/2 + E^a - E^c;
 \end{aligned}$$

$$\alpha = \frac{b-a}{\sqrt{2(b-a)^2 + V_0^2}}, \beta = \frac{V_0}{\sqrt{2(b-a)^2 + V_0^2}}, \gamma = \frac{V_0}{\sqrt{2(d-c)^2 + V_0^2}},$$

$$\delta = \frac{d-c}{\sqrt{2(d-c)^2 + V_0^2}}, b-a = \frac{1}{2}\sqrt{(\varepsilon_2 + U)^2 + V_0^2} - \frac{\varepsilon_2}{2}, d-c = \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon_5^2 + V_0^2} - \frac{\varepsilon_5}{2}.$$

На приведенных уровнях и орбитах типа «а» сформированы две подзоны: верхняя, порожденная переходами с «четверок» на «тройки», и нижняя – из переходов с «троек» на «двойки»:

$$\begin{array}{cccccc} |2aT_{bc}^{\sigma\sigma}\rangle & |2aT_{bc}^{\sigma\bar{\sigma}}\rangle & |2aT^{\sigma\sigma}\rangle & |\sigma\sigma\sigma\rangle & |T^{\sigma}\rangle & |T^{\bar{\sigma}}\rangle \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \text{и} \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ |T^{\sigma}\rangle & |T^{\bar{\sigma}}\rangle & |\sigma\sigma\sigma\rangle & |L^{\sigma}\rangle & |L^{\sigma\bar{\sigma}}\rangle & |L^{\bar{\sigma}}\rangle \end{array}$$

Ниже рассмотрен случай спина по намагниченности $\sigma = +$. Считая экспоненциально малой заселенность возбужденных состояний «двоек» и «четверок» и равновероятным заполнения «троек», получим

$$n_{+++} = n_{---} = n_{T^+} = n_{T^-} = 1/4, \quad (3)$$

где $n = \sum_P \langle X_P^P \rangle = 1$.

Для определения точки перехода достаточно определить собственное значение системы уравнений, линейризованных по флуктуационной собственно энергетической части в пределе частоты $\omega \rightarrow 0$. Или, что эквивалентно, найти условия появления сингулярного решения для электронной вершинной части при нулевом передаваемом импульсе и в пределе $\omega \rightarrow 0$ (5). В трехмерном случае достаточно ограничиться лестничным суммированием и найти условия ненулевого решения, соответствующего однородной системе:

$$F_{\alpha\beta} = \sum_{P,\gamma,\nu} K_{\alpha\beta}^{(1)} t_{-\alpha\beta}(p) G_{\gamma} F_{\gamma\nu} t_{-\nu\beta}(p) G_{\beta} +$$

$$+ \sum_{P,\tilde{\gamma},\tilde{\nu}} K_{\alpha\beta}^{(2)} t_{-\tilde{\alpha}\tilde{\beta}}(p) G_{\tilde{\gamma}} F_{\tilde{\gamma}\tilde{\nu}} t_{-\tilde{\nu}\tilde{\beta}}(p) G_{\tilde{\beta}}. \quad (4)$$

Введем следующие обозначения:

$$D_{\alpha\beta}^{-1}(k, i\omega_n) = \left\{ \left[-i\omega_n + \bar{\lambda}\bar{\alpha}(p, q) \right] \delta_{\alpha\beta} - \right.$$

$$\left. -t(k) \Lambda_{-\alpha\beta} F(\alpha) - \Sigma_{\alpha\beta}(k, i\omega_n) \right\} F^{-1}(\bar{\alpha});$$

$$D_{\omega}^{\alpha\beta}(p) = G_{\omega}^{\alpha\alpha} K_{\omega}^{\alpha\beta}(p). \quad (5)$$

В отсутствие перескоков функция Грина для перехода $p \rightarrow q$ вычисляется непосредственно:

$$D_{\alpha\beta}^0(i\omega_n) = \frac{n_p \pm n_q}{-i\omega_n + \varepsilon_{qp}}, G_{\alpha\beta}^0(i\omega_n) = \frac{1}{F(\alpha)} D_{\alpha\beta}^0(i\omega_n) = G_{\omega}^{\alpha\beta},$$

где $\varepsilon_{qp} = \varepsilon_p - \varepsilon_q = \vec{\lambda} \vec{\alpha}(p, q)$, $F(\alpha(p, q)) = n_p \pm n_q$ – концевой множитель для операторов Ферми (+) и Бозе (–), $n_p = e^{-\varepsilon_p/T} / \left(\sum_k e^{-\varepsilon_k/T} \right)$; $\alpha(p, q)$ – корневой вектор, соответствующий алгебре Ли [8];

$$K_{\omega}^{\alpha'\alpha}(p) \delta_{\beta'\beta} = -\frac{\delta}{\delta t_p^{\alpha\beta}} \left[G_{\omega}^{-1}(p) \right]^{\alpha'\beta'}$$

концевой множитель, который не зависит от перескока $t^{\alpha\beta}(p) = g_{\alpha} t(p) g_{\beta}$.
Туннельная часть гамильтониана определяется матрицей

$$H_{\text{int}} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}^{ab} a_{i\sigma}^{\dagger} b_{j\sigma} = \sum_{\alpha,\beta,r,r'} V_{\alpha\beta}^{ab} (|r-r'|) X_{\alpha r} X_{\beta r'}$$

перескоков $t^{ab}(p) = \sum_r t^{ab}(r) \cdot e^{ipr}$ по орбитам «a», «b», сосредоточенным на узлах решетки r , и известными генеалогическими коэффициентами $V_{\alpha\beta}^{ab} = g_{\alpha}^a t^{ab} g_{\beta}^b = t_{\alpha\beta}(p)$. Матричные элементы статических спиновых и орбитальных флуктуаций $K_{\alpha\beta}^{(1,2)}$ определялись следующим образом:

$$K_{\alpha\beta}^{(1)} = \langle \{X_{\alpha}, X_{-\alpha}\} \{X_{\beta}, X_{-\beta}\} \rangle - \langle \{X_{\alpha}, X_{-\alpha}\} \rangle \langle \{X_{\beta}, X_{-\beta}\} \rangle;$$

$$K_{\alpha\beta}^{(2)} = \langle \{X_{\alpha}, X_{-\tilde{\beta}}\} \{X_{\tilde{\beta}}, X_{-\alpha}\} \rangle - \langle \{X_{\alpha}, X_{-\tilde{\beta}}\} \rangle \langle \{X_{\tilde{\beta}}, X_{-\alpha}\} \rangle.$$

Здесь корневые векторы с тильдой отличаются изменением спина электрона.

В принятом приближении полную функцию Грина необходимо заменить на затравочную. После чего решение однородной системы уравнений для вершинной части сводится к условию разрешимости (4):

$$F_{ab} = g \sum_p t^{\alpha\alpha'}(p) F_{ab} t^{bb'}(p), \quad (6)$$

где

$$g = \sum_{\alpha\beta} g_{\alpha} G_{\alpha}^{(0)} g_{-\alpha} K_{\alpha\beta}^{(1)} g_{\beta} G_{\beta}^{(0)} g_{-\beta} + \sum_{\alpha\tilde{\beta}} g_{\alpha} G_{\alpha}^{(0)} g_{-\tilde{\alpha}} K_{\alpha\tilde{\beta}}^{(2)} g_{\tilde{\beta}} G_{\tilde{\beta}}^{(0)} g_{-\tilde{\beta}}.$$

Выберем химический потенциал таким образом, чтобы верхняя и нижняя подзоны располагались симметрично относительно основного состояния. Решение интегрального уравнения для вершинной части требует провести суммирование по импульсам в пределах первой зоны Бриллюэна от квадрата

интеграла перескока. Матричные элементы интеграла перескока в силу трансляционной инвариантности можно записать в виде

$$\langle n | m \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{kR}_{ij}} \int \psi_{ni}^* H \psi_{mj} d^3r.$$

В случае d -зон и гранецентрированной кубической (ГЦК) решетки, учитывая орбитали (d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}) , можно записать

$$\begin{aligned} \langle d_{xy} | d_{xy} \rangle &= \langle d_{xz} | d_{xz} \rangle = \langle d_{yz} | d_{yz} \rangle = \\ &= 4H(110)_{xy,xy} \cos k_x a \cos k_y a + 4H(011)_{xy,xy} (\cos k_x a + \cos k_y a) \cos k_z a, \end{aligned}$$

где $H(LMN)_{m,n} = \int \psi_m^*(r + a(LMN)) H \psi_n(r) d^3r$, $L, M, N = 1, 2, \dots$; ψ_m, ψ_n – d -функции.

Выбирая нормировку интеграла переноса таким образом, чтобы в центре зоны при $k_x = k_y = k_z = 0$ энергия всех взаимодействующих электронов была равна произведению энергии перескока на число ближайших соседей, получаем с учетом конкретных значений $K_{\alpha\beta}^{(1,2)}$:

$$g = \frac{1}{9 \cdot 8} (31\delta^4 + 30\alpha^4 + 59\alpha^2\delta^2). \quad (7)$$

В случае ГЦК-решетки, учитывая переходы только по орбиталям типа «а», условие разрешимости уравнения (7) принимает вид

$$4\sqrt{2}\Delta = t(31\delta^4 + 30\alpha^4 + 59\alpha^2\delta^2)^{1/2}. \quad (8)$$

Выражение (8), связывающее ширину диэлектрической щели Δ с перескоком электронов по узлам кристаллической решетки t , определяет точку перехода в металлическую фазу и является основным результатом настоящей работы. Если считать орбитали «а», «b», «с» эквивалентными (что позволяет исходный базис) и опустить андерсоновскую гибридизацию, получим значение, приведенное в [9, 10].

Заключение

Установлено, что сильные одноузельные электронные корреляции приводят к расщеплению каждой подзоны. Причиной «схлопывания» корреляционной щели и перехода в металлическое состояние является рассеяние электронов на спиновых и орбитальных флуктуациях в высокотемпературной однородной фазе.

Гибридизация Андерсона изменяет энергетический спектр сильно коррелированных электронов. Та ее часть, которая связана с максимальной мультиплетностью и спином по направлению поля, не приводит к дополнительному расщеплению подзон. Из сравнения полученных критериев перехода металл–диэлектрик следует, что гибридизация смещает точку перехода в металлическое состояние.

Точная диагонализация одноузельной части и полученный энергетический спектр позволяют исследовать термодинамические и кинетические явления в системах с $d(f)$ -электронами, содержащими не только число $n = 3$ в основном состоянии, но и иное число в ряду переходных элементов, а также и их магнитные свойства. Основным результатом работы следует считать доказательство наличия перехода металл–диэлектрик типа Мотта – Хаббарда, который определяется трансляционным движением, гибридизацией Андерсона, спиновыми и орбитальными флуктуациями.

Список литературы

1. **Мотт, Н. Ф.** Переходы металл–изолятор / Н. Ф. Мотт. – М. : Наука, 1978. – С. 344.
2. **Зайцев, Р. О.** Моттовский переход в многомерной модели Хаббарда / Р. О. Зайцев // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1978. – Т. 75, № 6 (12). – С. 2362–2374.
3. **Вонсовский, С. В.** Локализованное и делокализованное поведение электронов в металлах / С. В. Вонсовский, М. И. Кацнельсон, А. В. Трефилов // Физика металлов и металловедение. – 1993. – Т. 76, № 4. – С. 3–94.
4. **Кожевников, А. В.** Расчет электронной структуры диоксида ванадия VO_2 в моноклинной низкотемпературной фазе $M1$ методом обобщенного переходного состояния / А. В. Кожевников, В. И. Анисимов, В. И. Коротин // Физика металлов и металловедение. – 2007. – Т. 104, № 3. – С. 229–234.
5. **Николаев, А. В.** Электронная структура металлической фазы и переход металл – изолятор в VO_2 / А. В. Николаев, Ю. Н. Косторубов, Б. В. Андреев // Физика твердого тела. – 1992. – Т. 34, № 10. – С. 3011–3018.
6. **Sadakata, I.** Optical absorption in a half-filled narrow band / I. Sadakata, J. Hanamura // Phys. Soc. Japan. – 1973. – V. 34. – P. 882–887.
7. **Hubbard, Y.** Electron Correlations in Narrow Energy Bands / J. Hubbard // Proc. Roy. Soc. – 1963. – A276. – P. 238–257.
8. **Ведяев, А. В.** Об одной возможности использования операторов Окубо для учета корреляций в модели Хаббарда с вырождением / А. В. Ведяев, В. А. Иванов, В. Е. Шилов // Теоретическая и математическая физика. – 1985. – Т. 64, № 1. – С. 407–412.
9. **Зайцев, Р. О.** Переход Мотта в системе d -электронов с наполовину заполненной зоной / Р. О. Зайцев, В. А. Иванов // Физика твердого тела. – 1985. – Т. 27, № 12. – С. 3561–3570.
10. **Shilov, V. E.** Influence of electron correlations of magnetic properties in transition metals in view of degeneration / V. E. Shilov, E. B. Shilova // Magnetism and Magnetic Materials. – 2009. – V. 152–153. – P. 555–558.

Шилов Владимир Егорович

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра общей физики,
Марийский государственный
университет (г. Йошкар-Ола)

E-mail: crabflo@mail.ru

Shilov Vladimir Egorovich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of general physics,
Mari State University (Yoshkar Ola)

Шилова Елена Владимировна

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра общей физики,
Марийский государственный
университет (г. Йошкар-Ола)

E-mail: crabflo@mail.ru

Shilova Elena Vladimirovna

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of general physics,
Mari State University (Yoshkar Ola)

УДК 538.1; 539.213

Шилов, В. Е.

Переход металл–диэлектрик в периодической модели Андерсона – Хаббарда в случае 3-кратного вырождения / В. Е. Шилов, Е. В. Шилова //
Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – № 4 (20). – С. 101–109.