

УДК 538.915

ПРОСТОЙ МЕТОД ОЦЕНКИ КРИТЕРИЯ ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ- ДИЭЛЕКТРИК В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Овчинников С.Г., Сидоров К.А.

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия

E-mail: sgo@iph.krasn.ru

В работе рассчитаны энергии основного состояния парамагнитного металла в приближениях Хартри-

Фока и Хаббард-1 как функции параметра $\lambda = \frac{U}{2w}$. Определено пороговое значение параметра λ

как точка пересечения графиков зависимости энергии от параметра λ в указанных приближениях. Это пороговое значение можно рассматривать как точку перехода металл-диэлектрик.

Ключевые слова: электронные корреляции, переход металл-диэлектрик, приближение Хартри-Фока, модель Хаббарда.

ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа посвящена центральной проблеме в модели Хаббарда, которой Е.В.Кузьмин придавал большое значение. Она написана по материалам курсовой работы студента К.Сидорова 4 курса кафедры теоретической физики, основанной много лет назад Е.В.Кузьминым в Красноярском Госуниверситете. Уже почти полвека модель Хаббарда остается одной из самых популярных для исследования систем с сильными электронными корреляциями. Хорошо известны два предельных случая, которые используются при расчете параметров систем, приближенно описываемых гамильтонианом модели Хаббарда [1]

$$H - \mu N = \sum_{f,\sigma} \left\{ (\varepsilon - \mu) n_{f,\sigma} + \frac{1}{2} U n_{f,\sigma} n_{f,-\sigma} \right\} + \sum_{\bar{f},g,\sigma} (t_{f,g} a_{f,\sigma}^+ a_{g,\sigma} + \text{э.с.}). \quad (1)$$

Один из них соответствует случаю малых U . В этом случае при расцеплении бесконечной цепочки «зацепляющихся» уравнений движения для функций Грина используется приближение Хартри-Фока

$$U n_{f,\uparrow} n_{f,\downarrow} \rightarrow \frac{1}{2} (U n_{f,\uparrow} \langle n_{f,\downarrow} \rangle + U \langle n_{f,\uparrow} \rangle n_{f,\downarrow}). \quad (2)$$

В случае же когда кулоновское взаимодействие электронов на узле не является малым, часто используемым приближением является приближение Хаббард-1

$$\langle \langle a_{f+h,\sigma} n_{f,-\sigma} | a_{f,\sigma}^+ \rangle \rangle \rightarrow \langle n_{f,-\sigma} \rangle \langle \langle a_{f+h,\sigma} | a_{f,\sigma}^+ \rangle \rangle. \quad (3)$$

Интересную задачу представляет собой нахождение порогового значения параметра $\lambda = \frac{U}{2w}$ (w – полуширина зоны), при котором приближения Хартри-Фока и Хаббард-1 переходят друг в друга.

Поскольку приближение Хартри-Фока описывает металлическое решение, а приближение Хаббард-1 для наполовину заполненной зоны приводит к диэлектрику Мота-Хаббарда, то переход от одного решения к другому означает переход металл-диэлектрик. Математически это пороговое значение должно получиться в результате решения уравнения

$$\Sigma_1(\lambda) = \Sigma_2(\lambda). \quad (4)$$

где $\Sigma = \frac{\langle E \rangle}{w}$ - безразмерная энергия, индексы 1 и 2 относятся к приближениям Хартри-Фока и Хаббард-1 соответственно. В настоящей работе с использованием аппарата функций Грина рассчитаны энергия парамагнитного металла при $T=0$ в приближениях Хартри-Фока и Хаббард-1 и численно решено уравнение (4).

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Функция Грина в приближении Хартри-Фока равна [1,2]

$$G(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{E - \varepsilon(\mathbf{k}, \sigma)} \quad (5)$$

где

$$\varepsilon(\mathbf{k}, \sigma) = \varepsilon + t(\mathbf{k}) + U \langle n_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle. \quad (6)$$

Среднее количество электронов в состоянии $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$ можно найти с помощью спектральной теоремы. Энергия основного состояния

$$E_0 = 2 \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}, \sigma). \quad (7)$$

Заменяя в (7) суммирование интегрированием с использованием полуэллиптической модели плотности состояний

$$N(\varepsilon) = \frac{2}{\pi w} \sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{w}\right)^2}, \quad (8)$$

нами был получен следующий результат:

$$\Sigma_1(\lambda) = -\frac{8}{3\pi} + \lambda. \quad (9)$$

В приближении Хаббард-1 для наполовину заполненной зоны можно получить следующее выражение для электронной функции Грина [1]:

$$G_{\sigma}(\mathbf{k}, E) = \frac{E}{(E - E_1(\mathbf{k}))(E - E_2(\mathbf{k}))}. \quad (10)$$

Для энергии основного состояния с использованием спектральных теорем и полуэллиптической модели плотности состояний мы получили следующее выражение

$$\Sigma_2(\lambda) = -\frac{4}{3\pi} - \frac{\lambda}{4} - \frac{3}{\pi}\lambda^2 + \frac{3\lambda(1+4\lambda^2)}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{1}{2\lambda} +$$

$$+ \frac{2\lambda^2}{\pi} \sqrt{1+4\lambda^2} \left(F\left(\frac{\pi}{2}, \frac{1}{\sqrt{1+4\lambda^2}}\right) - E\left(\frac{\pi}{2}, \frac{1}{\sqrt{1+4\lambda^2}}\right) \right) + \frac{1}{\pi} \int_0^1 x^2 \sqrt{\frac{1-x^2}{x^2+4\lambda^2}} dx$$

(11)

где F и E – т.н. эллиптические интегралы

$$F(\varphi, k) = \int_0^\varphi \frac{d\xi}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \xi}},$$

$$E(\varphi, k) = \int_0^\varphi \sqrt{1-k^2 \sin^2 \xi} d\xi.$$

Графики функций $\Sigma_i(\lambda)$, $i=1, 2$ изображены на рис. 1. Решением уравнения (4) является точка $\lambda_0 \approx 0.6$.

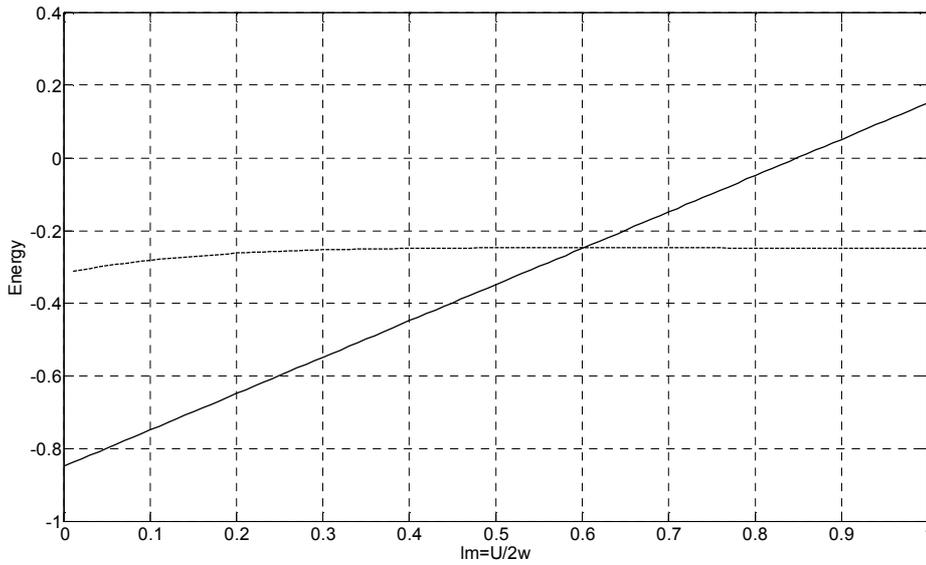


Рис. 1. Энергии основного состояния в модели Хаббарда в приближениях Хартри-Фока (сплошная линия) и Хаббард-1 (пунктир).

ВЫВОДЫ

В данной работе получена оценка порогового значения параметра $\lambda_0 = \frac{U}{2w} \approx 0.6$, ниже которого реализуется металлическое состояние, а выше – диэлектрическое. Это значение достаточно хорошо согласуется с полученными ранее посредством других методов. Так, в работе Хаббарда [3] посредством применения приближения Хаббард-3 для перехода металл-диэлектрик получена оценка $\lambda_0 \approx 0.87$. Наиболее полный обзор по рассмотренной здесь проблематике можно найти в работе [4]. Все приведенные там оценки отличаются от приведенного нами не более чем в 2 раза.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 09-02-00127 и Программы Президиума РАН 5.7.

Список литературы

1. Кузьмин Е.В. Физика магнитоупорядоченных веществ / Е.В. Кузьмин, Г.А. Петраковский, Э.А. Завадский. – Новосибирск: Наука, 1976.
2. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма / С.В. Тябликов. – М.: Наука, 1964.
3. Hubbard J.C. Electron correlations in narrow energy bands. III. An improved solution / J.C. Hubbard // Proc. Roy. Soc. – 1964. – Vol. A281. – P. 401.
4. Georges A. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions / Georges A., Kotliar G., Krauth W. et al. // Rev. Mod. Phys. – 1996. – V. 68.

Овчинников С.Г. Простий метод оцінки критерію переходу метал-діелектрик в моделі Хаббарда / С.Г. Овчинников, К.О. Сидоров // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізика. – 2009. – Т. 22(61), № 1. – С. 57-60.

У роботі розраховані енергії основного стану парамагнітного металу в наближеннях Хартрі-Фока і Хаббард-1 як функції параметра $\lambda = \frac{U}{2w}$. Визначено граничне значення параметра λ як точка

перетину графіків залежності енергії від параметра λ у вказаних наближеннях. Це граничне значення можна розглядати як точку переходу метал-діелектрик.

Ключові слова: електронні кореляції, перехід метал-діелектрик, наближення Хартрі-Фока, модель Хаббарда.

Ovchinnikov S.G. Simple method of an estimation of the metal-insulator transition criterion in the Hubbard model / S.G. Ovchinnikov, K.A. Sidorov // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics. – 2009. – Vol. 22(61), No. 1. – P. 57-60.

We have calculated energy of the paramagnetic system with one electron per atom in the Hartree-Fock and the Hubbard-1 approximations as functions of parameter $\lambda = \frac{U}{2w}$. Threshold value of parameter as a crossing

point of graphs of the energy dependence on parameter λ in specified approximations is certain. This threshold value it is possible to consider as a point of transition metal-insulator.

Key words: electron correlations, metal-insulator transition, Hartree-Fock approximation, Hubbard model.

Поступила в редакцію 26.11.2009 г.