

Матеріали XVIII наукової конференції ТНТУ ім. І. Пулюя, 2014

## Секція: ФІЗИКА

Керівники: проф. Л. Дідух, доц. Л. Скоренький

Вчений секретар: доц. О. Крамар

УДК 538.1; 539.2

Л. Дідух, докт. фіз.-мат. наук, професор

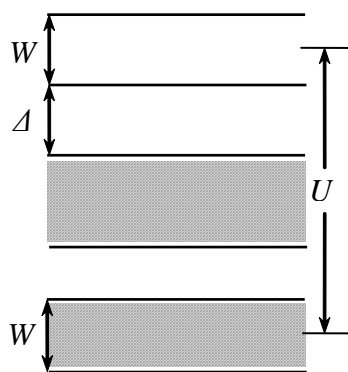
Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

### ПЕРЕХІД ДІЕЛЕКТРИК-МЕТАЛ В АНТИФЕРОМАГНЕТИКАХ ХАББАРД-АНДЕРСОНІВСЬКОГО ТИПУ: КВАЗІКЛАСИЧНЕ НАБЛИЖЕННЯ

L. Didukh

#### METAL-INSULATOR TRANSITION IN CHARGE-TRANSFER ANTIFERROMAGNET: QUASI-CLASSICAL APPROXIMATION

В антиферомагнетиках андерсон-хаббардівського типу, енергетична схема яких показана на рис., внутрішньоатомна кулонівська взаємодія електронів в катіонах  $U \gg \Delta$  ( $\Delta$  – ширина зони халькогеніда), тому при  $T=0$  нижня хаббардівська зона заповнена, а верхня хаббардівська зона порожня.



З  $p$ - $d$ -гамільтоніана, який враховує як одноелектронні так і двоелектронні гібридизації, можна отримати ефективний гамільтоніан, який враховує як непрямий перенос електронів у верхній хаббардівській зоні, так і непрямую обмінну взаємодію (зумовлену одноелектронними, так і двоелектронними  $p$ - $d$ -переходами):

$$H = \Delta \sum \alpha_{i2}^+ \alpha_{i2} + \sum_{ij\sigma} t(ij) \alpha_{i2}^+ \alpha_{i\sigma} \alpha_{j\sigma}^+ \alpha_{j2} + H_{ex};$$

тут  $\alpha_{i2}^+$ ,  $\alpha_{i2}$  – оператори народження і знищення носіїв струму у верхній хаббардівській зоні,  $\alpha_{i\sigma}^+$ ,  $\alpha_{i\sigma}$  – оператори народження і знищення  $|i\sigma\rangle$ -станів на катіонах,  $H_{ex}$  – описує

антиферомагнітну обмінну взаємодію між катіонами.

Прийmemo квазікласичне наближення (оператори переходу замінюються на оператори Шубіна-Вонсовського з наступною заміною операторів  $c$ -числами) [1, 2]:

$$\alpha_{p\uparrow} = \alpha_{s\downarrow} \rightarrow \left( \frac{1+m-2d}{2} \right)^{1/2}, \quad \alpha_{i2}^+ = \alpha_{i2} \rightarrow \sqrt{d};$$

$m$  – намагніченість підґратки антиферомагнетика,  $d$  – концентрація двійок.

Мінімізація енергії антиферомагнетика показує, що за умови

$$Wd \approx zJ$$

( $z$  – число найближчих сусідів в катіонній підґратці,  $J$  – величина обмінного інтегралу) трансляційний перенос двійок дестабілізує антиферомагнітне впорядкування.

Збудження двійкових станів на катіонах може бути забезпечене дією зовнішнього тиску, освітлення, електричного поля, температурним впливом. Можливе зменшення  $\Delta$  при цьому, розширення верхньої хаббардівської зони зі зменшенням намагніченості підґратки може привести до зникнення антиферомагнітного впорядкування з одночасним переходом системи в металічний стан. Подібний перехід спостерігається в антиферомагнітному діелектрику  $\text{NiI}_2$ , який під дією тиску ( $p \approx 19$  GPa) може бути переведений в парамагнітний метал [3, с. 47].

#### Література:

1. Л. Дідух // Журн. фіз. досл. – Т. 1, №2. – 1997. – С. 241.
2. L. Didukh // Acta. Phys. Pol. – В 31. – 2000. – С. 3097.
3. F. Gebhard. The Mott metal-insulator transition: models and methods (Springer, Berlin, 1997).