

## О корреляционных эффектах в узкозонной модели с электрон-дырочной асимметрией

Л. Д. Дидух, В. В. Ганкевич

Тернопольский государственный технический университет, Украина, 282001, г. Тернополь, ул. Руська, 56  
E-mail: didukh@tu.edu.te.ua

Статья поступила в редакцию 29 июня 1998 г., после переработки 14 декабря 1998 г.

Изучены некоторые корреляционные эффекты в узкозонной модели с электрон-дырочной асимметрией. Особенностью модели является учет интеграла переноса, вызванного электрон-электронным взаимодействием (коррелированный перенос). С помощью метода функций Грина найдены квазичастичный энергетический спектр, выражения для ширин нижней и верхней хаббардовских подзон. Показано, что специфика модели приводит в ряде случаев к следствиям, которые существенно отличаются от следствий из модели Хаббарда. Полученные результаты иллюстрируют в основном специфику модели в низкотемпературной области и используются для интерпретации особенностей физических свойств систем с узкими энергетическими зонами.

Вивчено деякі кореляційні ефекти у вузькозонній моделі з електронно-дірковою асиметрією. Особливістю моделі є врахування інтеграла переносу, зумовленого електрон-електронною взаємодією (корельований перенос). Методом функцій Гріна знайдено квазічастинковий енергетичний спектр, вирази для ширин нижньої і верхньої хаббардівських підзон. Показано, що специфіка моделі приводить для низки випадків до наслідків, які суттєво відрізняються від наслідків з моделі Хаббарда. Отримані результати ілюструють загалом специфіку моделі в низькотемпературній області та застосовуються для інтерпретації особливостей фізичних властивостей систем з вузькими енергетичними зонами.

PACS: 71.28.+d, 71.27.+a, 71.10.Fd, 71.30.+h

### Введение

Одним из характерных свойств модели Хаббарда [1], которая используется для описания корреляционных эффектов в узких зонах проводимости (укажем в этой связи лишь на обзоры [2–4]), является электрон-дырочная симметрия: физические свойства систем с  $n < 1$  и  $n > 1$  одинаковы ( $n$  — концентрация электронов в зоне). Эта симметрия обусловлена пренебрежением матричными элементами электрон-электронного взаимодействия

$$J(ikjk) = \iint \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \times \\ \times |\varphi(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_k)|^2 d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \quad (1)$$

в гамильтониане модели (матричные элементы (1) описывают переходы электронов между узлами  $i$  и  $j$  кристаллической решетки;  $\varphi$ -функции — функции Ванье).

Однако наличие экспериментальных данных, которые свидетельствуют об электрон-дырочной асимметрии в узкозонных материалах, с одной стороны, и теоретический анализ, с другой, указывают на принципиальную необходимость учесть коррелированный перенос (1) в обобщенной модели Хаббарда [5,6]. Это приводит к тому, что в такой обобщенной модели Хаббарда интегралы переноса, описывающие переходы в нижней и верхней хаббардовских подзонах, различаются между собой и отличаются от интеграла переноса, соответствующего переходам между хаббардовскими подзонами (в этой модели, в частности, нижняя и верхняя хаббардовские подзоны неэквивалентны). Подобные модели в последнее время интенсивно исследуются (см., например, работы [7–9] и ссылки в них).

В работах [10] нами изучены корреляционные эффекты, в частности, переход металл — изолятор в узкозонной модели с электрон-дырочной асимметрией при половинном заполнении зоны ( $n = 1$ )

и нулевой температуре на основе подхода, предложенного в работах [11,12]. Используемое приближение дает точные атомную и зонную границы в модели Хаббарда, а также описывает переход металл — изолятор.

Представляет интерес распространение этих исследований на случай узкозонных материалов с частично заполненными узкими зонами ( $n \neq 1$ ). Такое изучение было бы полезно как с теоретической точки зрения (на сегодня этот важный случай является недостаточно изученным, на что обращалось внимание в работах [2–4]), так и для возможностей интерпретации экспериментальных данных, наблюдаемых в некоторых узкозонных материалах. Эту цель и преследует предлагаемая работа.

### Одночастичный энергетический спектр

Запишем гамильтониан модели в следующей форме [11]:

$$H = -\mu \sum_{i\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} + (t_0 + nT_1) \sum'_{ij\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + T_2 \sum'_{ij\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} n_{i\bar{\sigma}} + \text{э.с.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (2)$$

где  $\mu$  — химический потенциал;  $a_{i\sigma}^+$  ( $a_{i\sigma}$ ) — оператор рождения (уничтожения) электрона со спином  $\sigma$  ( $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ) на  $i$ -м узле ( $\bar{\sigma}$  обозначает проекцию спина, противоположную  $\sigma$ );  $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$  — оператор числа электронов со спином  $\sigma$  на  $i$ -м узле;  $n = \langle n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \rangle$  — концентрация электронов на узле;  $U$  — внутриатомное кулоновское отталкивание;

$$t_0 = \int \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \sum_l V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}, \quad (3)$$

$$T_1 = \sum_{\substack{k \neq i \\ k \neq j}} J(ikjk), \quad T_2 = J(iij) \quad (4)$$

— интегралы перехода электронов между ближайшими соседями  $i$  и  $j$  решетки ( $V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)$  — потенциальная энергия электрона в поле иона в  $l$ -м узле решетки). Штрихи возле сумм в гамильтониане (2) означают, что  $i \neq j$ .

Особенность гамильтониана (2) — учет коррелированного переноса  $T_1$ , что приводит к концентрационной зависимости интеграла перехода  $t_0 + nT_1$  в предлагаемой модели узкозонных материалов с электрон-дырочной асимметрией в отли-

чие от близких моделей, рассматриваемых в работах [6–9].

Для определения одночастичной функции Грина

$$G_{pp}^\sigma(E) = \langle\langle a_{p\sigma}^+ | a_{p'\sigma}^+ \rangle\rangle \quad (5)$$

воспользуемся вариантом обобщенного приближения Хартри — Фока [13–15], предложенным в работах [11,12]; отметим, что использование обобщенного приближения Хартри — Фока в форме [13] в области энергетических параметров, при которых возможен переход металл — диэлектрик, наталкивается на значительные трудности (о проблемах, возникающих на этом пути, см. работы [15,16]). Полученная таким образом функция Грина (5) в  $\mathbf{k}$ -представлении для парамагнитного случая имеет вид

$$G_{\mathbf{k}}(E) = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{A_{\mathbf{k}}}{E - E_1(\mathbf{k})} + \frac{B_{\mathbf{k}}}{E - E_2(\mathbf{k})} \right), \quad (6)$$

$$A_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} - \frac{(n-1)(U - \varepsilon(\mathbf{k}) + \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k})) - (2-n)\varepsilon_2(\mathbf{k}) - n\varepsilon_1(\mathbf{k})}{2Q(\mathbf{k})}, \quad (7)$$

$$B_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} + \frac{(n-1)(U - \varepsilon(\mathbf{k}) + \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k})) - (2-n)\varepsilon_2(\mathbf{k}) - n\varepsilon_1(\mathbf{k})}{2Q(\mathbf{k})}, \quad (8)$$

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = -\mu + \frac{U}{2} + \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) + \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k})}{2} \pm \frac{1}{2} Q(\mathbf{k}), \quad (9)$$

$$Q(\mathbf{k}) = \sqrt{[\varepsilon(\mathbf{k}) - \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) - U]^2 + 4\varepsilon_1(\mathbf{k})\varepsilon_2(\mathbf{k})}. \quad (10)$$

Фурье-образы величин, которые определяют выражения (7)–(10), задаются соотношениями

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \alpha t_{\mathbf{k}}(n), \quad \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}) = \tilde{\alpha} t_{\mathbf{k}}(n), \quad \varepsilon_1(\mathbf{k}) = \alpha_1 t'_{\mathbf{k}}(n), \quad \varepsilon_2(\mathbf{k}) = \alpha_2 t'_{\mathbf{k}}(n), \quad (11)$$

$$\alpha = -n + 2d + \frac{2(1-d)^2}{2-n} - \frac{2d(d-n+1)}{2-n} \frac{\tilde{t}(n)}{t(n)}, \quad (12)$$

$$\tilde{\alpha} = n - 2d + \frac{2d^2}{n} - \frac{2d(d-n+1)}{n} \frac{t(n)}{\tilde{t}(n)}, \quad (13)$$

$$\alpha_1 = n - 1 - \frac{2d}{n}, \quad \alpha_2 = -1 - n + \frac{2(1-d)}{2-n}, \quad (14)$$

где  $E_1(\mathbf{k})$  ( $E_2(\mathbf{k})$ ) — энергия электронов в нижней (верхней) хаббардовской подзоне;  $d$  — концентрация двукратно занятых узлов (двоек);  $t(n)$  =

$= t_0 + nT_1$  и  $\tilde{t}(n) = t(n) + 2T_2$  описывают переходы квазичастиц в нижней и верхней хаббардовских подзонах соответственно (перенос дырок и двоек);  $t'(n) = t(n) + T_2$  является интегралом перехода квазичастиц между нижней и верхней подзонами (процессы парного рождения и уничтожения дырок и двоек). В модели, описываемой гамильтонианом (2), возможны четыре следующих состояния:  $|0\rangle$  — состояние узла, не занятого электроном — дырка;  $|\sigma\rangle \equiv a_{i\sigma}^+|0\rangle$  — состояние узла, занятого электроном со спином  $\sigma$ ;  $|2\rangle \equiv a_{i\uparrow}^+a_{i\downarrow}^+|0\rangle$  — двукратно занятое (двумя электронами с противоположными спинами) состояние узла — двойка.

Химический потенциал определяется выражением

$$\frac{n}{2} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} J_{\mathbf{k}}(E) dE, \quad (15)$$

где  $J_{\mathbf{k}}(E)$  — спектральная интенсивность функции Грина (6).

Отметим здесь общие особенности выражений (6) и (9). При  $n < 1$  и  $U \rightarrow \infty$  получаем

$$E_1(\mathbf{k}) = -\mu + \left( \frac{2}{2-n} - n \right) t_{\mathbf{k}}(n) \quad (16)$$

(нижняя хаббардовская подзона); если  $n > 1$  и актуальна только верхняя хаббардовская подзона, то

$$E_2(\mathbf{k}) = -\mu + U + \left( \frac{2}{n} - 2 + n \right) \tilde{t}_{\mathbf{k}}(n). \quad (17)$$

Для модели Хаббарда ( $t(n) = \tilde{t}(n) = t'(n) = t_0$ )  $E_1(\mathbf{k})$  при  $n \rightarrow 0$  и  $E_2(\mathbf{k})$  при  $n \rightarrow 2$  приобретают зонную форму. Кроме того, выражения (6) и (9) при  $t_0 = 0$  дают точную атомную границу, а при  $U = 0$  описывают зонную ситуацию.

Обратим внимание на следующее важное обстоятельство. Вследствие отличия интегралов переноса  $t(n)$  и  $\tilde{t}(n)$  энергетическая ширина верхней подзоны может оказаться намного меньше, а эффективная масса носителей тока в этой подзоне намного больше, чем в нижней подзоне. Таким образом, в рамках рассматриваемой модели естественным образом вводятся понятия «узкая» и «широкая» подзоны, «легкие» и «тяжелые» носители тока (как следствие электрон-электронных взаимодействий).

Особенность общего выражения для квазичастичного энергетического спектра (9) — зависимость от концентрации двоек (и, следовательно, от температуры).

Концентрация двоек определяется уравнением

$$d = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{J}_{\mathbf{k}}(E) dE = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{C_{\mathbf{k}}}{\exp(E_1(\mathbf{k})/\theta) + 1} + \frac{D_{\mathbf{k}}}{\exp(E_2(\mathbf{k})/\theta) + 1} \right), \quad (18)$$

где

$$C_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} - \frac{U + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k})}{2Q(\mathbf{k})}; \quad (19)$$

$$D_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} + \frac{U + \tilde{\epsilon}(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k})}{2Q(\mathbf{k})};$$

$\theta = k_B T$ ;  $N$  — число узлов кристаллической решетки;  $\tilde{J}_{\mathbf{k}}(E)$  — спектральная интенсивность функции Грина

$$\langle\langle a_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} | a_{i\sigma}^+ \rangle\rangle_{\mathbf{k}} = \frac{n/2}{2\pi} \left( \frac{C_{\mathbf{k}}}{E - E_1(\mathbf{k})} + \frac{D_{\mathbf{k}}}{E - E_2(\mathbf{k})} \right). \quad (20)$$

Примем прямоугольную плотность состояний

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - t(\mathbf{k})) = \frac{1}{2w} \theta(w^2 - E^2) \quad (21)$$

( $\theta(x) = 1$  ( $x > 0$ ) и  $\theta(x) = 0$  ( $x < 0$ );  $w = z|t(n)|$ ;  $z$  — число ближайших к узлу соседей). Из формулы (18) получаем тогда уравнение для нахождения концентрации двоек ( $d \geq 0$ ) при  $T = 0$ :

$$\left[ \frac{2(1-d)}{2-n} - 1 \right] \frac{4}{n} - 2 = \frac{\beta}{\beta^2 + \gamma} \frac{Q(\epsilon_1) - Q(\epsilon_2)}{w} + \frac{U}{w} \frac{\gamma}{[(\beta^2 + \gamma)^3]^{1/2}} \ln \left| \frac{\sqrt{\beta^2 + \gamma} Q(\epsilon_2) + (\beta^2 + \gamma)\epsilon_2 - U\beta}{\sqrt{\beta^2 + \gamma} Q(\epsilon_1) + (\beta^2 + \gamma)\epsilon_1 - U\beta} \right|, \quad (22)$$

где  $E_{1,2}(\epsilon)$ ,  $Q(\epsilon)$  получаются из соотношений (9) и (10) заменой  $t_{\mathbf{k}}(n) \rightarrow \epsilon$ ,  $\tilde{t}_{\mathbf{k}}(n) \rightarrow [\tilde{t}(n)/t(n)]\epsilon$ ;  $t'_{\mathbf{k}}(n) \rightarrow [t'(n)/t(n)]\epsilon$ ;  $\beta = \alpha - \alpha[\tilde{t}(n)/t(n)]$ ;  $\gamma = 4\alpha_1\alpha_2 \times [t'(n)/t(n)]^2$ ;  $\epsilon_1, \epsilon_2$  — корни уравнений  $E_{1,2}(\epsilon) = 0$ , причем  $\epsilon_2 > \epsilon_1$ .

Концентрация дырок  $s$  задается выражением  $s = d - n + 1$ , которое получено из двух условий:  $s + d + n^\uparrow + n^\downarrow = 1$  и  $n^\uparrow + n^\downarrow + 2d = n$ , где  $n^\uparrow$  и  $n^\downarrow$  — концентрации однократно занятых (электронами со спином  $\sigma = \uparrow$  и  $\sigma = \downarrow$ ) узлов.

Зависимость концентрации двоек  $d$  от параметра  $U/w_0$  ( $w_0 = z|t_0|$ ) для разных значений  $n$  показана на рис. 1. Параметры  $\tau_1 = T_1/|t_0|$ ,  $\tau_2 = T_2/|t_0|$  ха-

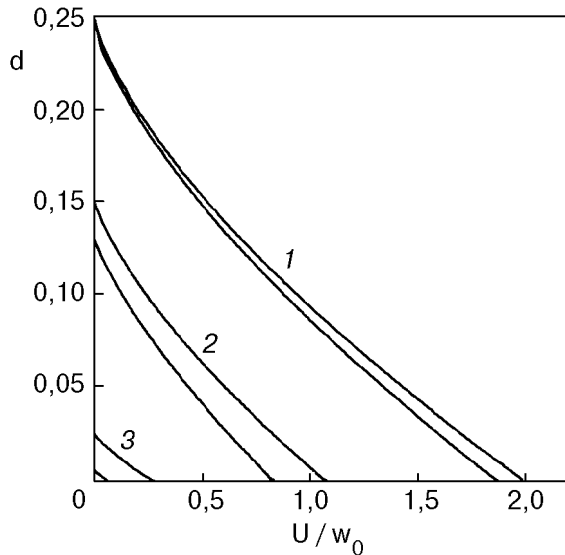


Рис. 1. Зависимость концентрации двоек  $d$  от  $U/w_0$  для различных концентраций электронов,  $n$ : 1,2 (1); 0,8 (2); 0,5 (3); верхним кривым соответствует  $\tau_1 = \tau_2 = 0$  (модель Хаббарда), нижним —  $\tau_1 = \tau_2 = 0,2$ .

рактически характеризуют величину коррелированного переноса (1). Видно, что концентрация двоек быстро уменьшается с ростом  $U/w_0$  при  $n < 1$ .

### Некоторые корреляционные эффекты в узких энергетических зонах

Рассмотрим некоторые следствия из полученных выше результатов.

1. Используя выражение (9), найдем для квазиэлектронного энергетического спектра разность энергий между дном верхней и потолком нижней хаббардовских подзон. Имеем

$$\Delta E = -(\alpha\omega + \tilde{\alpha}\tilde{\omega}) + \frac{1}{2}(Q_1 + Q_2), \quad (23)$$

$$Q_1 = \sqrt{(\alpha\omega - \tilde{\alpha}\tilde{\omega} + U)^2 + 4\alpha_1\alpha_2[z\ell(n)]^2}, \quad (24)$$

$$Q_2 = \sqrt{(\alpha\omega - \tilde{\alpha}\tilde{\omega} - U)^2 + 4\alpha_1\alpha_2[z\ell(n)]^2}, \quad (25)$$

где  $\tilde{\omega} = z|\ell(n)|$ .

При нулевой температуре и  $n = 1$  энергетическая щель (23) исчезает, когда

$$U \leq \omega + \tilde{\omega}, \quad (26)$$

в соответствии с общими физическими соображениями Мотта [17]. В случае  $\ell' = 0$  (т.е.  $t = -T_2$ ) критерий перехода металл—изолятор найден точно в работах [18]; полученное нами условие (26) совпадает с этим точным результатом. Для случая  $\ell' \neq 0$  ( $t \neq -T_2$ ) нахождение критерия перехода ме-

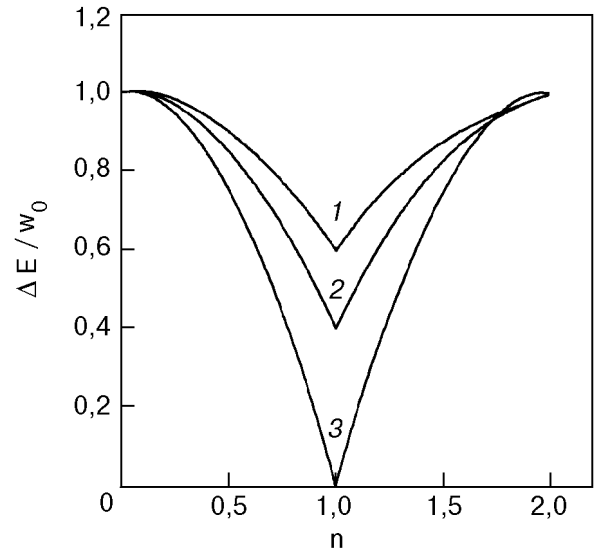


Рис. 2. Концентрационная зависимость  $\Delta E$  при  $U/w_0 = 2$ ;  $\tau_1 = \tau_2 = 0,3$  (1);  $\tau_1 = \tau_2 = 0,2$  (2);  $\tau_1 = \tau_2 = 0$  (модель Хаббарда) (3).

талл—изолятор остается пока открытой проблемой (см., например, [8,9]). В работах [8] получен критерий перехода металл—изолятор, который совпадает с условием (26). В работе [9] с помощью метода вспомогательных бозонов [19] найдено, что система переходит из металлического в диэлектрическое состояние при  $U_c = 4z|t + T_2|$ ; здесь, однако, естественно возникает проблема согласования этого результата с точным критерием перехода металл—изолятор, найденным в [18] (при  $t = -T_2$ ). Отметим также, что использование приближения Хаббарда-I [1] в рассматриваемой модели не приводит, как и в модели Хаббарда, к описанию перехода металл—диэлектрик.

Зависимость  $\Delta E$  от концентрации электронов  $n$  при  $T = 0$  К показана на рис. 2. Видно, что для значений  $n$ , близких к 0 и 2, разница энергий между дном верхней и потолком нижней хаббардовских подзон слабо зависит от параметров коррелированного переноса  $\tau_1, \tau_2$ . Для  $n \approx 1$ ,  $\Delta E$  существенно зависит от  $\tau_1, \tau_2$ . При отклонении от половинного заполнения  $\Delta E$  возрастает ( $\Delta E$  имеет минимум при  $n = 1$ ). Поэтому понятен тот результат, что в металлической фазе оксиды ванадия с нецелым числом электронов на катион  $V_kO_{2k-1}$  ( $k \geq 3$ ) проявляют «металличность» слабее, чем оксиды  $VO_2$  и  $V_2O_3$  (целое число электронов на узел) [20].

Вследствие зависимости  $\Delta E$  от концентрации двоек энергетическая щель (23) зависит от температуры. Зависимость  $\Delta E(T)$  показывает, что с возрастанием температуры может осуществляться переход из состояния с  $\Delta E \leq 0$  в состояние с  $\Delta E > 0$ .

В этой связи отметим, что с возрастанием температуры в NiS<sub>2</sub> [21] наблюдается переход из состояния парамагнитного металла в состояние парамагнитного мотт-халлардовского диэлектрика.

Модель (2) может быть применена к описанию легированных узкозонных материалов. По-видимому, можно считать (см., например [2,4,22]), что в соединениях переходных металлов типа (M<sub>1</sub>)<sub>1-x</sub>(M<sub>2</sub>)<sub>x</sub>X (M<sub>1</sub>, M<sub>2</sub> — переходной металл, X — кислород, сера, селен) основной эффект замены M<sub>1</sub> → M<sub>2</sub> (M<sub>1</sub>, M<sub>2</sub> — соседи по периодической системе) состоит в изменении концентрации электронов в узкой *d*-зоне (в особенности, для малых *x*). Таким образом, полученную температурную зависимость энергетической щели (23) можно использовать для объяснения наблюдаемого с возрастанием температуры перехода металл — диэлектрик в парамагнитной фазе в соединении (V<sub>1-x</sub>Cr<sub>x</sub>)<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [17,23] при *x* = 0,04.

2. Используя одночастичный энергетический спектр (16) и (17), получаем, что в состоянии с  $U \rightarrow \infty$  ширина нижней халлардовской подзоны при  $n < 1$

$$\Delta E_1 = E_1(\omega) - E_1(-\omega) = 2\omega \left( \frac{2}{2-n} - n \right), \quad (27)$$

а при  $n > 1$  ширина верхней халлардовской подзоны

$$\Delta E_2 = E_2(\tilde{\omega}) - E_2(-\tilde{\omega}) = 2\tilde{\omega}(n - 2 + 2/n). \quad (28)$$

Из выражений (27) и (28) получаем зависимость энергетических ширин подзон от концентрации электронов (рис. 3). Концентрационная зависи-

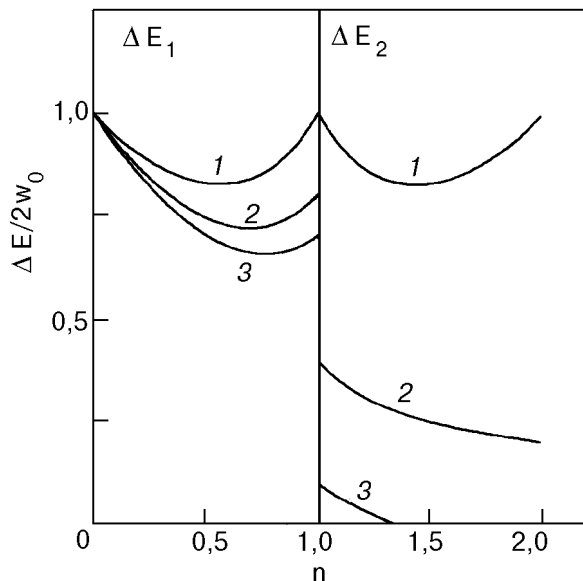


Рис. 3. Зависимость энергетической ширины нижней ( $\Delta E_1$ ) и верхней ( $\Delta E_2$ ) подзон от концентрации электронов  $n$ :  $\tau_1 = \tau_2 = 0$  (1);  $\tau_1 = \tau_2 = 0,2$  (2);  $\tau_1 = \tau_2 = 0,3$  (3).

мость ширин подзон обусловлена, во-первых, корреляционным эффектом сужения подзон (выражения в скобках в формулах (27), (28)), во-вторых, концентрационной зависимостью интегралов переноса в нижней  $t(n)$  и верхней  $\tilde{t}(n)$  халлардовских подзонах (особенность рассматриваемой модели). Видно, что учет коррелированного переноса (1) приводит к существенному сужению подзон, при этом сужение увеличивается с возрастанием концентрации электронов. На рис. 3 также видно, что в рассматриваемой модели (в противоположность электрон-дырочной симметрии модели Хаббарда) случаи  $n < 1$  и  $n > 1$  неэквивалентны.

Особенностью выражений (27) и (28) для концентрационной зависимости энергетических ширин подзон является существование минимумов, изображенных на рис. 3 (для модели Хаббарда, когда  $\tau_1 = \tau_2 = 0$ , при  $n_1 \approx 0,6$  и  $n_2 \approx 1,4$ ). Отмеченное изменение энергетических ширин подзон можно объяснить следующим образом. В интервале концентраций  $0 < n < n_1$  переходы в нижней халлардовской подзоне можно интерпретировать как перенос  $|\sigma\rangle$ -состояний с эффективным интегралом перехода, который уменьшается с возрастанием концентрации электронов (это приводит к тому, что  $\Delta E_1$  убывает при  $0 < n < n_1$ ), а при последующем увеличении концентрации электронов на промежутке  $n_1 < n \leq 1$  переходы в нижней халлардовской подзоне можно интерпретировать как перенос дырок с эффективным интегралом перехода, который увеличивается (поэтому  $\Delta E_1$  также возрастает). Другими словами, при  $n = n_1$  происходит изменение электронного типа проводимости на дырочный. Концентрационную зависимость ширины верхней халлардовской подзоны можно объяснить аналогичным образом. Такая интерпретация зависимостей, показанных на рис. 3, полностью согласуется с отмеченной в работе [11] концентрационной зависимостью проводимости в частично заполненных узких энергетических зонах.

Отметим, что в случае слабых электрон-электронных взаимодействий гамильтониан (2) также приводит к ряду существенных отличий от модели Хаббарда, что было показано в работах [6,11]. В частности, использование (2) позволяет объяснить зависимость энергии связи  $3d$ -систем от концентрации  $d$ -электронов — минимум для Mn и существование двух неэквивалентных максимумов (V, Co) (следствие учета коррелированного переноса (1)) [11].

### Заключение

В работе изучены некоторые корреляционные эффекты в узкозонной модели с электрон-дырочной асимметрией с помощью методики, предложенной в работах [11,12]. Для этой модели характерным является последовательный учет электрон-электронных взаимодействий, описывающих перенос электронов (коррелированный перенос).

Найдены одночастичная функция Грина, энергетический спектр квазичастиц. Особенностью этих выражений является зависимость от концентрации доек или дырок (и, таким образом, от температуры) и неэквивалентность концентрационнозависимых ширин верхней и нижней хаббардовских подзон.

С помощью квазичастичного энергетического спектра получены выражения для энергетической щели (разность энергий между дном верхней и потолком нижней хаббардовских подзон) и ширин нижней и верхней подзон.

Показано, что энергетическая щель увеличивается при отклонении от половинного заполнения зоны.

Температурная зависимость энергетической щели дает возможность изучать температурно-индуцированный переход металл — диэлектрик.

Исследована концентрационная зависимость ширин хаббардовских подзон. Получено, что учет коррелированного переноса (1) приводит к существенному сужению подзон, причем эффект сужения за счет этого фактора увеличивается с возрастанием концентрации электронов.

Полученные результаты позволяют объяснить некоторые экспериментальные данные в узкозонных материалах.

Авторы благодарны проф. Д. Хомскому за обсуждение части результатов, которые рассматривались в работе.

1. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* **A276**, 238 (1963).
2. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
3. Ю. А. Изюмов, *УФН* **165**, 403 (1995).
4. F. Gebhard, *The Mott Metal-Insulator Transition — Models and Methods*, Springer, Berlin (1997).
5. Л. Д. Дидух, *ФТТ* **19**, 1217 (1977).
6. J. E. Hirsch, *Physica* **C158**, 326 (1989); *Physica* **B199-200**, 366 (1994).
7. H. Q. Lin and J. E. Hirsch, *Phys. Rev.* **B52**, 16155 (1995); J. C. Amadon and J. E. Hirsch, *Phys. Rev.* **B54**, 6364 (1996).

8. E. R. Gagliano, A. A. Aligia, L. Arrachea, and V. Avignon, *Phys. Rev.* **B51**, 14012 (1995); L. Arrachea, E. R. Gagliano, and A. A. Aligia, *Phys. Rev.* **B55**, 1173 (1997).
9. B. R. Bulka, *Phys. Rev.* **B57**, 10303 (1998); *cond-mat/9703040*.
10. Л. Дидух, В. Ганкевич, Ю. Довгоп'ятий, *Журнал фізичних досліджень* **2**, 362 (1998); L. Didukh and V. Hankevych, *cond-mat/9811213*.
11. Л. Дидух, *Журнал фізичних досліджень* **1**, 241 (1997).
12. L. Didukh, *Phys. Status Solidi* **B206**, R5 (1998).
13. L. M. Roth, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1431 (1968); *Phys. Rev.* **184**, 451 (1969).
14. Д. Н. Зубарев, Ю. Г. Рудой, *УФН* **163**, 103 (1993).
15. Ю. А. Изюмов, Н. И. Чащин, *ФММ* **84**, 16 (1997).
16. B. Mehlig, H. Eskes, R. Hayn, and M. Meinders, *Phys. Rev.* **B52**, 2463 (1995); J. Beenen and D. M. Edwards, *Phys. Rev.* **B52**, 13636 (1995).
17. N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, Taylor and Francis, London (1990).
18. R. Strack and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2637 (1993); A. A. Ovchinnikov, *J. Phys.: Condens. Matter* **6**, 11057 (1994); A. A. Aligia, L. Arrachea, and E. R. Gagliano, *Phys. Rev.* **B51**, 13774 (1995); J. de Boer and A. Schadschneider, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4298 (1995).
19. G. Kotliar and A. E. Ruckenstein, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1362 (1986).
20. K. Kosuge, H. Okinaka, and S. Kachi, *IEEE Trans. Mag.* **Mag-8**, 581 (1972); P. О. Зайцев, Е. В. Кузьмин, С. Г. Овчинников, *УФН* **148**, 603 (1986).
21. J. A. Wilson, *The Metallic and Nonmetallic States of Matter*, Taylor and Francis, London (1985).
22. H. Kajueter, G. Kotliar, and G. Moeller, *Phys. Rev.* **B53**, 16214 (1996).
23. D. B. Mc Whan, J. B. Remeika, T. M. Rice, W. F. Brinkman, J. P. Maita, and A. Menth, *Phys. Rev. Lett.* **27**, 941 (1971).

### On correlation effects in a narrow-band model with electron-hole asymmetry

L. D. Didukh and V. V. Hankevych

Some correlation effects are studied in a narrow-band model with electron-hole asymmetry. The peculiarity of the model is a consideration of the hopping integral caused by electron-electron interaction (correlated hopping). The Green function method is used to derive quasiparticle energy spectrum, widths of the upper and lower Hubbard bands. It is shown that in a series of cases the model leads to the consequences that differ essentially from those of the Hubbard model. The results obtained principally illustrate the model specificity at low temperatures and can be applied to interpret the peculiarities of physical properties of systems with narrow energy bands.