

Переход металл–диэлектрик в модели Хаббарда при учете несоизмеримых магнитных структур

М. А. Тимиргазин¹⁾, А. К. Аржников, В. Ю. Ирхин

Физико-технический институт УрО РАН, 426000 Ижевск, Россия

Институт физики металлов УрО РАН, 620990 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 15 июня 2012 г.

В рамках модели Хаббарда исследован переход металл–диэлектрик (ПМД) для квадратной, простой кубической и ОЦК-решетки при половинном заполнении зоны при учете перескоков электронов на первую и вторую координационные сферы. Рассматриваются как шахматное антиферромагнитное, так и несоизмеримые магнитные состояния (спиральная спиновая волна). В то время как для трехмерных решеток учет последних не меняет общей картины ПМД, для квадратной решетки он открывает принципиально новую возможность ПМД первого рода между магнитоупорядоченными состояниями.

1. Введение. Переходы металл–диэлектрик (ПМД) [1] интенсивно изучаются с 40-х гг. прошлого столетия до настоящего времени. Однако количественное описание ПМД, а порой и качественное понимание физических явлений, определяющих эти переходы в конкретных системах, до сих пор остаются неудовлетворительными [2].

Согласно классификации работы [2] ПМД делятся на два типа: концентрационные переходы, которые происходят при изменении концентрации электронов, и переходы при фиксированной концентрации, равной одному электрону на узле (половинное заполнение), вызванные изменением параметров взаимодействия. Кроме того, в такой классификации может быть выделено несколько типов переходов в зависимости от магнитного состояния металла и диэлектрика, а также возможной сверхпроводящей фазы.

Обычно ПМД рассматриваются в контексте электронных корреляций, простейшей моделью для описания которых является модель Хаббарда. В работе самого Хаббарда [3] был рассмотрен ПМД в парамагнитной фазе, вызванный появлением корреляционной щели, который является непрерывным. В дальнейшем описание такого перехода было улучшено с использованием метода многоэлектронных операторов [4]. В последнее время при описании переходов Мотта–Хаббарда в парамагнитной фазе используется предел бесконечной размерности пространства d , который рассматривается в рамках динамической теории среднего поля (DMFT) [5], в том числе с использованием метода численной ренормгруппы [6].

При этом обсуждается возможность фазовых переходов первого рода.

При описании ПМД в основном состоянии модели Хаббарда важно антиферромагнитное упорядочение. Если для затравочного электронного спектра $\epsilon_{\mathbf{k}}$ выполняется условие нестинга, $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\epsilon_{\mathbf{k}}$ (например, для простых решеток в приближении переноса электронов между ближайшими соседями), то экспоненциально малая диэлектрическая щель слэтеровского типа (антиферромагнитные подзоны) возникает при сколь угодно малых значениях межэлектронного взаимодействия U . При нарушении условия нестинга (например, при учете перескока между следующими за ближайшими соседями с энергетическим масштабom W') ПМД происходит при конечном взаимодействии. Как было показано в работе [7], он является переходом первого рода (ранее данный вывод был сделан для случая дальнедействующего кулоновского взаимодействия). В случае малого W' сравнение энергий антиферромагнитного изолятора и парамагнитного металла дает для точки перехода

$$1/U_c \simeq \rho \ln(W/W'), \quad (1)$$

где W и ρ – затравочные значения ширины зоны и плотности состояний на уровне Ферми. В [7] обсуждались возможные сценарии перехода в изоляторную антиферромагнитную фазу: из металлической парамагнитной либо металлической антиферромагнитной фазы. Однако дальнейших расчетов для конкретных решеток, насколько нам известно, проведено не было.

Основной целью наших исследований является описание ПМД слэтеровского типа, т.е. переходов, связанных с возникновением щели в энергетическом спектре электронных состояний в результате магнитного упорядочения. Таким образом, будут рас-

¹⁾ e-mail: timirgazin@gmail.com

смагиваться переходы из магнитоупорядоченного металлического состояния в магнитоупорядоченное диэлектрическое, причем без учета сильных корреляций. Типичным примером такого класса переходов является переход между антиферромагнитным (АФ) металлом и АФ-диэлектриком, который наблюдается, например, в V_2O_{3-y} , $NiS_{2-x}Se_x$ [1]. В трехмерном случае данный переход описывается простейшим приближением Хартри–Фока (ПХФ). В двумерных или слоистых квазидвумерных системах ни в ПХФ, ни в более сложных приближениях ПМД между магнитоупорядоченными состояниями обнаружен не был. Поэтому сегодня принято считать, что критическая размерность, начиная с которой возможен ПМД между двумя магнитоупорядоченными состояниями, $d_{ml} > 2$ [2].

Необходимо отметить, что ранее при изучении ПМД ограничивались учетом лишь простейшего шахматного АФ-упорядочения, т.к. обычно предполагается, что оно является доминирующим вблизи половинного заполнения. Как было показано в работе [8], в модели Хаббарда в широкой области концентраций стабилизируются несоизмеримые магнитные структуры в виде спиральных спиновых (СС) волн. В частности, было показано, что при отношении интегралов перескока электрона на первую и вторую координационные сферы $t'/t = 0.45$ вблизи половинного заполнения зоны существует область параметров, где реализуется магнитоупорядоченное состояние, отличное от АФ. Хотя в [8] рассматривалась двумерная система, наши расчеты показывают, что и для трехмерных систем возможна реализация подобного чередования магнитоупорядоченных состояний. В связи с этим возникает вопрос: каким образом несоизмеримые магнитные состояния могут повлиять на картину ПМД и его параметры? Решению этой проблемы и посвящена данная работа.

2. Обобщенное приближение Хартри–Фока.

Рассмотрим гамильтониан модели Хаббарда:

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow}, \quad (2)$$

где $t_{ij} = -t$ – матричные элементы перескока электронов в первой координационной сфере, $t_{ij} = t'$ во второй координационной сфере, $c_{i\sigma}^+$ ($c_{i\sigma}$) – операторы рождения (уничтожения) электронов на узле i с проекцией спина σ , U – параметр кулоновского отталкивания электронов на узле.

Второе слагаемое гамильтониана (2) можно представить в следующей форме:

$$U \sum_i c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} = U \sum_i [n_i^2/4 - (\mathbf{e}_i \mathbf{S}_i)^2], \quad (3)$$

где \mathbf{e}_i – единичный вектор произвольного направления на узле i , $n_i = \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$ – оператор электронной плотности на узле, $\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^+ \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma'}$ – оператор электронного спина на узле, $\boldsymbol{\sigma}$ – матрицы Паули.

Мы предполагаем, что распределение по узлам намагниченности представляет собой спиральную спиновую волну с волновым вектором \mathbf{Q} , задающим вращение магнитного момента в плоскости xy :

$$\mathbf{e}_j = \mathbf{e}_x \cos \mathbf{Q} \mathbf{R}_j + \mathbf{e}_y \sin \mathbf{Q} \mathbf{R}_j. \quad (4)$$

В обобщенном приближении Хартри–Фока (среднего поля) гамильтониан, соответствующий такой магнитной структуре, выглядит следующим образом:

$$H_0 = UN \left(M^2 - \frac{n^2}{4} \right) + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{Un}{2} \right) c_{\mathbf{k}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma} - UM \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^+ c_{\mathbf{k}\uparrow} \right), \quad (5)$$

где

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = t \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\delta} + t' \sum_{\delta'} e^{i\mathbf{k}\delta'}, \quad (6)$$

n – плотность электронов на узле, M – величина намагниченности на узле, δ (δ') – индекс суммирования по узлам первой (второй) координационной сферы.

Гамильтониан H_0 можно диагонализировать с помощью операторного преобразования Боголюбова:

$$A_{\mathbf{k}} = c_{\mathbf{k}\uparrow} \cos \theta_{\mathbf{k}} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} \sin \theta_{\mathbf{k}}, \quad (7)$$

$$B_{\mathbf{k}} = c_{\mathbf{k}\uparrow} \sin \theta_{\mathbf{k}} - c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} \cos \theta_{\mathbf{k}},$$

$$\tan 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{-2UM}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}. \quad (8)$$

Тогда

$$H_0 = UN \left(M^2 - \frac{n_{el}^2}{4} \right) + \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}}^A A_{\mathbf{k}}^+ A_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}}^B B_{\mathbf{k}}^+ B_{\mathbf{k}}), \quad (9)$$

где

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^A = \frac{Un}{2} + \epsilon_{\mathbf{k}}^+ + \text{sign}(\epsilon_{\mathbf{k}}^-) \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}}^-)^2 + (UM)^2}, \quad (10)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^B = \frac{Un}{2} + \epsilon_{\mathbf{k}}^+ - \text{sign}(\epsilon_{\mathbf{k}}^-) \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}}^-)^2 + (UM)^2},$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^+ = \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2}, \quad \epsilon_{\mathbf{k}}^- = \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2}. \quad (11)$$

Для определения основного магнитного состояния необходимо при фиксированных параметрах U/t и \mathbf{Q} решить систему из двух самосогласованных уравнений, одно из которых определяет магнитный момент M , а другое – число электронов n :

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\langle A_{\mathbf{k}}^{\dagger} A_{\mathbf{k}} \rangle + \langle B_{\mathbf{k}}^{\dagger} B_{\mathbf{k}} \rangle), \\ M &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} (\langle A_{\mathbf{k}}^{\dagger} A_{\mathbf{k}} \rangle - \langle B_{\mathbf{k}}^{\dagger} B_{\mathbf{k}} \rangle) \sin 2\theta_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (12)$$

Основное состояние определяется минимизацией полной энергии системы

$$\begin{aligned} E_{SS}(\mathbf{Q})/N &= U \left(M^2 - \frac{n^2}{4} \right) + \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}}^A \langle A_{\mathbf{k}}^{\dagger} A_{\mathbf{k}} \rangle + \epsilon_{\mathbf{k}}^B \langle B_{\mathbf{k}}^{\dagger} B_{\mathbf{k}} \rangle) \end{aligned} \quad (13)$$

по всем возможным векторам \mathbf{Q} . При этом $\langle A_{\mathbf{k}}^{\dagger} A_{\mathbf{k}} \rangle = f(\epsilon_{\mathbf{k}}^A)$, $\langle B_{\mathbf{k}}^{\dagger} B_{\mathbf{k}} \rangle = f(\epsilon_{\mathbf{k}}^B)$, $f(\epsilon) = (1/2)\{1 - \tanh[(\epsilon - \mu)/(2T)]\}$ – функция Ферми, вырождающаяся при $T = 0$ в ступенчатую функцию Хевисайда.

Анализ плотности состояний в рамках данного формализма позволяет определить проводящее состояние системы по наличию или отсутствию энергетической щели на уровне Ферми. В рамках рассматриваемого подхода при учете перескоков на следующих за ближайшими соседями ПМД происходит при конечных U/t , как это было описано во введении.

Граница перехода из парамагнитного (ПМ) в магнитное состояние определяется в общем случае путем сравнения энергии этих фаз между собой, т.к. критерии типа Стонера, определяющие данный переход, справедливы только для перехода второго рода и некорректны в случае перехода первого рода.

3. Результаты для фазовой диаграммы. Мы провели исследование ПМД при половинном заполнении для квадратной и трехмерных кубических решеток при различных значениях параметра t'/t . Законы дисперсии для квадратной, простой кубической и объемноцентрированной кубической решеток имеют вид

$$\begin{aligned} \epsilon_{\mathbf{k}}^{sq} &= -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y, \\ \epsilon_{\mathbf{k}}^{sc} &= -2t(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z) + \\ &+ 4t'(\cos k_x \cos k_y + \cos k_y \cos k_z + \cos k_z \cos k_x), \\ \epsilon_{\mathbf{k}}^{bcc} &= -8t \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2} \cos \frac{k_z}{2} + \\ &+ 2t'(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z). \end{aligned}$$

Для различных значений U основное состояние системы определялось путем сравнения энергии СС-

состояний с различными векторами \mathbf{Q} . Индикатором ПМД служило появление энергетической щели на уровне Ферми. На рис. 1 представлена плотность

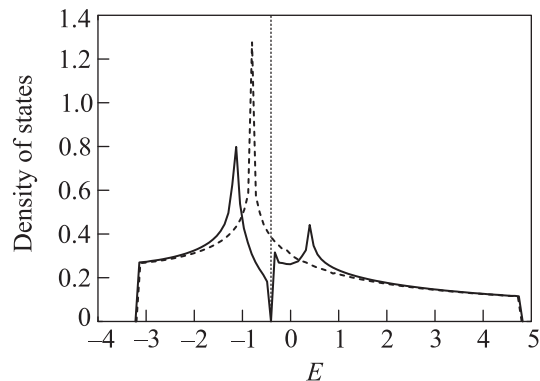


Рис. 1. Плотность состояний для диэлектрического АФ (сплошная линия) и металлического СС (штриховая линия) состояний при $t'/t = 0.2$ и $U/t = 2.07$ на квадратной решетке. Вертикальная пунктирная линия обозначает уровень Ферми

состояний для АФ- и СС-состояний при $t'/t = 0.2$ и $U/t = 2.07$ на квадратной решетке. Энергетическая щель, которая возникает в АФ-состоянии при $\epsilon = -0.41$, соответствующем уровню Ферми, переводит систему в диэлектрическое состояние.

На рис. 2–4 представлены зависимости критических значений U/t , при которых происходит ПМД, от

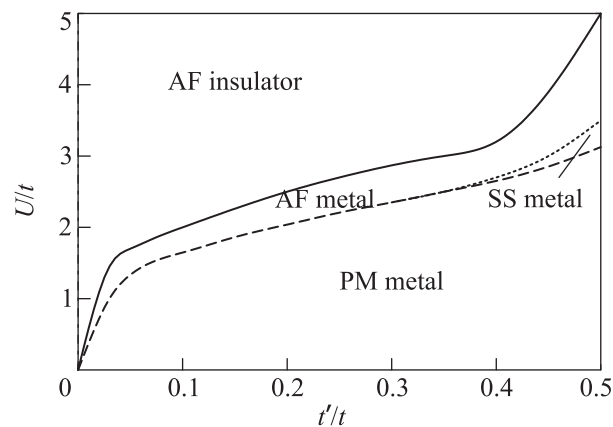


Рис. 2. Зависимость параметра U/t , отвечающего переходу металл–диэлектрик в ПК-решетке, от величины t'/t (сплошная линия). Пунктирная линия – граница перехода из СС- в АФ-состояние. Штриховая линия – граница перехода из ПМ- в магнитное состояние

t'/t . Для простой кубической и ОЦК-решетки (рис. 2 и 3) наблюдается одинаковая последовательность переходов: вне зависимости от соотношения t'/t ПМД происходит из металлической АФ-фазы в диэлектри-

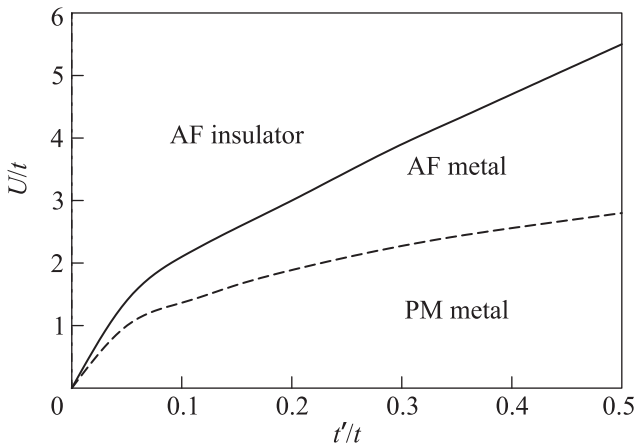


Рис. 3. Зависимость параметра U/t , отвечающего переходу металл–диэлектрик в ОЦК решетке, от величины t'/t (сплошная линия). Штриховая линия – граница перехода из ПМ- в АФ-состояние

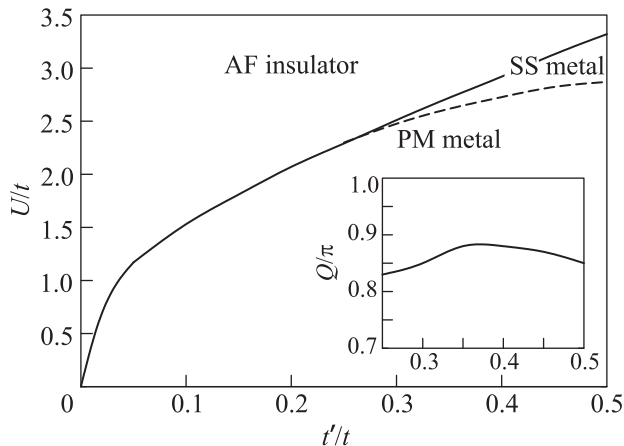


Рис. 4. Зависимость параметра U/t , отвечающего переходу металл–диэлектрик в квадратной решетке, от величины t'/t (сплошная линия). Штриховая линия – граница перехода из СС- в ПМ-состояние. На вставке представлена зависимость волнового вектора спирали Q на линии ПМД из СС- в АФ-состояние

ческую АФ-фазу (похожий сценарий, включающий, однако, металлическую парамагнитную фазу, обсуждался в [7]). При больших значениях t'/t в случае ПК-решетки появляется участок СС-состояний. Однако он лежит ниже ПМД (рис. 2). Это означает, что СС-состояния не оказывают влияния на ПМД. Таким образом, полученные результаты согласуются с имеющимися данными по ПМД в объемных материалах (см. введение). При наличии СС-состояний реализуется последовательность переходов ПМ–металл–СС–металл–АФ–металл–АФ–диэлектрик.

В случае квадратной решетки наблюдается иная картина (рис. 4): при небольших параметрах $t'/t \lesssim$

$\lesssim 0.26$ ПМД происходит из металлической парамагнитной фазы в диэлектрическую АФ и является переходом первого рода в согласии с рассмотрением [7]. При этом СС-состояние на линии половинного заполнения не реализуется. В работе [9] было показано, что в двумерном случае переход между ПМ и магнитным состоянием не может быть переходом первого рода. Однако это доказательство справедливо только для случая $t'/t = 0$, т.е. наши результаты не противоречат выводам [9].

Для $t'/t \gtrsim 0.26$ при половинном заполнении реализуется область СС-состояния параллельного типа (с направлением волнового вектора (Q, π)), причем это состояние является металлическим. С увеличением U/t происходит переход из металлического ПМ-состояния в металлическое СС-состояние, а затем из металлического СС-состояния в диэлектрическое АФ-состояние. Таким образом, ПМД в данном диапазоне t'/t в точности совпадает с магнитным фазовым переходом из СС- в АФ-состояние. При этом переходе происходит скачок величины намагниченности и волнового вектора спирали (см. вставку к рис. 4).

Следует отметить, что в работе [10] в рамках динамического приближения среднего поля был исследован ПМД для квадратной решетки с переносом между первыми и вторыми соседями, в том числе с учетом антиферромагнитных корреляций. Найдена линия переходов первого рода на фазовой диаграмме. Однако несоизмеримые магнитные состояния в ней не учитывались.

Обнаруженный нами при больших значениях параметра t'/t ПМД между СС- и АФ-состояниями является, по нашим сведениям, первым примером ПМД в двумерных материалах между двумя магнитоупорядоченными состояниями. Таким образом, наши исследования показывают, что теоретическое значение критической размерности [2], начиная с которой становится возможным ПМД между двумя магнитоупорядоченными состояниями, $d_{ml} > 1$.

Разумеется, полученные нами результаты (как для двумерных, так и для трехмерных систем) могут видоизмениться при учете корреляционных эффектов, что требует дополнительных исследований. В частности, можно ожидать, что корреляции приведут к некоторому уменьшению области существования спиральных состояний.

Авторы благодарят П.А. Игошева за полезные обсуждения. Работа частично поддержана грантами УрО РАН # 12-Т2-1001, 11-2-НП-483 и 12-У-2-1021, а также проектами РФФИ # 11-02-00931-а, 11-02-00937-а и 12-02-00632-а.

1. N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, Taylor & Francis, London, 1990 [Н. Ф. Мотт, *Переходы металл-изолятор*, М.: Наука, 1979].
2. M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998).
3. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A* **281**, 401 (1964).
4. Р. О. Зайцев, *ЖЭТФ* **75**, 2362 (1975); А. О. Anokhin, V. Yu. Irkhin, and M. I. Katsnelson, *J. Phys.: Condens. Matter.* **3**, 1475 (1991); V. Yu. Irkhin and A. V. Zarubin, *Eur. Phys. J. B* **38**, 563 (2004).
5. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
6. R. Bulla, T. A. Costi, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B* **64**, 045103 (2001).
7. M. I. Katsnelson and V. Yu. Irkhin, *J. Phys. C* **17**, 4291 (1984).
8. P. A. Igoshev, M. A. Timirgazin, A. A. Katanin et al., *Phys. Rev. B* **81**, 094407 (2010).
9. M. S. Laad, ArXiv 0810.4416 (unpublished).
10. S. Onoda and M. Imada, *Phys. Rev. B* **67**, 161102 (2003).