

ЭЛЕКТРОННЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ И ПАРАМАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ УЗКОЗОННЫХ АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ ИЗОЛЯТОРОВ С ВОЛНАМИ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ

А.А.Повзнер, А.Г.Волков

1. Среди механизмов электронных превращений металл-изолятор, наблюдаемых в соединениях переходных металлов с узкими d -зонами [1], выделяют внутриаомные корреляции [2] и эффекты спаривания конгруэнтных электрон-дырочных участков поверхности Ферми, приводящие к образованию волны зарядовой плотности (ВЗП) (см., например, [3]). Так, в V_2O_3 , начинающем ряд Магнелли (V_xO_{2x-1} , $x \geq 2$), ВЗП не образуется, а фазовый переход из высокотемпературного парамагнитного металлического состояния в антиферромагнитную диэлектрическую фазу объясняется влиянием кулоновских корреляций. У VO_2 , который замыкает ряд Магнелли ($x \rightarrow \infty$), антиферромагнитное упорядочение не обнаружено и переход (с понижением температуры) в изоляторное состояние хорошо описывается возникновением ВЗП. Наконец, для промежуточных окислов этого ряда V_xO_{2x-1} с уменьшением температуры сначала происходит переход металл-изолятор, сопровождаемый образованием ВЗП, а затем — переход парамагнетик-антиферромагнетик.

2. В работе [4] исследовалось корреляционное усиление парамагнитной восприимчивости при заполнении зоны $n \rightarrow 1$ и было установлено, что ее температурная зависимость описывается законом Кюри-Вейсса, а парамагнитная температура Кюри меняет знак при переходе от металлического состояния ($n \neq 1$) к изоляторному ($n = 1$).

В настоящей работе показано, что одной из причин возникновения изоляторного состояния и антиферромагнитного упорядочения в соединениях типа V_xO_{2x-1} является усиление кулоновских корреляций за счет образования ВЗП. При этом рассмотрены образованные за счет действия кристаллического поля не перекрывающиеся по энергии полоса электронных состояний ВЗП и зона сильно коррелированных электронов, разделенная кулоновской щелью на подзоны одиночных электронов («единиц») и пар электронов с противоположными спинами («двоек»).

Гамильтониан системы коррелированных электронов (которые не участвуют в формировании ВЗП) имеет вид

$$H = \sum_{\nu\sigma} (\varepsilon_1 + Qn_{\nu\sigma})(1 - P_\nu)n_{\nu\sigma} + \sum_{\nu\mu} t_{\nu\mu}(1 - P_\nu)(1 - P_\mu)a_{\nu\sigma}^+ a_{\mu\sigma}, \quad (1)$$

где P_ν — проекционный оператор, равный единице на узле, занятом ВЗП, и нулю в противном случае; ε_1 — энергия атомного уровня; Q — параметр внутриаомного кулоновского взаимодействия; $t_{\nu\mu}$ — интеграл перескоков; $a_{\nu\sigma}^+$ ($a_{\nu\sigma}$) — оператор рождения (уничтожения) электрона со спином σ на узле ν : $n_{\nu\sigma} = a_{\nu\sigma}^+ a_{\nu\sigma}$, $\sigma = -\sigma$.

Используя далее методику вычисления функций Грина, описанную в [4], получаем, что учет образования ВЗП ведет к сужению зоны коррелирующих электронов $W(p) = W(1-p)^{1/2}$ и уменьшению числа состояний «единиц» $Z_1 = (1-p)(2-n)$ и «двоек» $Z_2 = (1-p)n$ (p — концентрация узлов, входящих в ВЗП). Кроме того, используя результаты [4], можно показать, что парамагнитная восприимчивость рассматриваемой системы в изоляторном состоянии удовлетворяет закону Кюри–Вейсса ($\chi(T) = C/(T + \Theta)$) с константой и температурой Кюри, зависящими от концентрации узлов ВЗП

$$C = (1-p)C(0), \quad \Theta(p) = W^2(p)/8Q. \quad (2)$$

Обсуждаемая модель согласуется с экспериментальными данными о фазах Магнелли. Действительно, учитывая, что в V_2O_3 ВЗП отсутствует ($p = 0$), а зоне коррелированных электронов отвечает половинное заполнение ($n = 1$), находим из экспериментального значения температуры Нееля V_2O_3 [2] $T_N = W^2/8Q = 157$ К, парамагнитные температуры Кюри для V_xO_{2x-1} : $\Theta(p) = (1-p)157$ К (считая, что в V_xO_{2x-1} и V_2O_3 значения W и Q совпадают). Концентрацию узлов ВЗП можно определить как долю VO_2 в V_xO_{2x-1} : $p = (x-2)(x-1)$. При этом нами было принято во внимание, что образование ВЗП с указанной концентрацией ведет к установлению парамагнитного изоляторного состояния. Результаты расчетов зависимости $\Theta(p)$ в случае V_xO_{2x-1} в сопоставлении с экспериментальными данными представлены в таблице.

Влияние ВЗП на парамагнитную температуру Кюри–Нееля фаз Магнелли

Соединение	T_N (эксп.[2])	$\Theta(p)$ (теория)	Концентрация узлов ВЗП p
V_3O_5	76	78	1/2
V_4O_7	40	52	2/3
V_5O_9	30	39	3/4
V_6O_{11}	23	31	4/5
V_8O_{15}	7	22	6/7

Проведенное сравнение с экспериментом позволяет утверждать, что электронный переход из парамагнитного металлического состояния в парамагнитное изоляторное в V_xO_{2x-1} происходит вследствие сужения зоны коррелированных электронов, вызванного образованием ВЗП, и выталкивания химического потенциала из зоны «единиц» в область кулоновской щели.

Для проверки развитых здесь представлений были бы интересны экспериментальные исследования фотоэмиссионных спектров при температурах превращения металл–изолятор, а также прямые зонные расчеты электронных спектров узкозонных соединений d -металлов (в частности, фаз Магнелли), учитывающие как эффекты образования ВЗП, так и сильные кулоновские корреляции.

- [1] Мотт Н.Ф. Переход металл-изолятор. М.: Наука, 1979. 340 с.
 [2] Бугаев А.А., Захарченя Б.П., Чудновский Ф.А. Фазовый переход металл-изолятор и его применение. Л., 1979. 183 с.
 [3] Копаев Ю.В., Мокеров В.Г. // ДАН СССР. 1982. Т. 264. № 6. С. 1370-1374.
 [4] Повзнер А.А., Волков А.Г. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 3. С. 657-661.

Уральский государственный
 технический университет
 Екатеринбург

Поступило в Редакцию
 24 марта 1994 г.

© Физика твердого тела, том 36, № 11, 1994
 Solid State Physics, vol. 36, N 11, 1994

К ВОПРОСУ О МОДЕЛИ ИЗИНГА В ПОПЕРЕЧНОМ СЛУЧАЙНОМ ПОЛЕ

Л.А.Серков, В.О.Швалёв

В последнее время значительное внимание уделяется изучению модели Изинга в поперечном случайном поле (TRFIM). При этом, однако, нет полной ясности в вопросе о том, может ли введение случайности в направлении поперечного поля изменить термодинамические свойства этой модели. В частности, в работе [1] TRFIM ($s = 1/2$) исследовалась методом ренормгруппы среднего поля. В результате этого исследования было установлено существование разрыва на фазовой диаграмме при $T = 0$ при переходе от тримодального к бимодальному распределению случайного поля. В работе [2] недавно доказано на качественном уровне, что существование этого разрыва является артефактом из-за использования приближения среднего поля, т.е. термодинамические свойства модели не должны изменяться при переходе от одного к другому распределению.

В данном сообщении будет доказана справедливость утверждений работы [2] и показано, что артефакт возникает из-за отсутствия учета близкодействующих спиновых корреляций в методе ренормгруппы среднего поля. Для этого TRFIM рассмотрим в рамках приближения эффективного поля с учетом близкодействующих корреляций [3,4]. Гамильтониан этой модели определяется следующим образом:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i^z S_j^z - \sum_{\langle i \rangle} \Omega_i S_i^x, \quad (1)$$

где S_i^x и S_i^z — спиновые $1/2$ операторы (матрицы Паули); J_{ij} — обменное взаимодействие между ближайшими соседями; Ω_i — поперечное случайное поле, распределенное по тримодальному закону

$$P(\Omega_i) = p\delta(\Omega_i) + \frac{1}{2}(1-p)[\delta(\Omega_i + \Omega) + \delta(\Omega_i - \Omega)]. \quad (2)$$