

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

УДК 537.312.6:538.915

ТЕМПЕРАТУРНЫЙ ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК В МАНГАНИТАХ В ОБОБЩЁННОМ МЕТОДЕ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ¹

В.А. Гавричков, С.Г. Овчинников, Л.Е. Якимов*

Для манганитов $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ в рамках обобщённого метода сильной связи получено дисперсионное уравнение. Задание температуры ниже и выше критической через вид магнитного упорядочения — ФМ или ПМ — приводит, соответственно, к закрытию или открытию щели между валентной зоной и зоной проводимости. Открытие щели в ПМ фазе связано с уменьшением дисперсии, возникающим из-за равномерного распределения спектральной плотности квазичастиц между большим, чем в ФМ фазе, числом состояний.

В течение последнего времени манганиты $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ интенсивно исследуются в связи с практическим интересом, связанным с технологическим применением эффекта колоссального магнитосопротивления (КМС), и теоретическим, связанным с их уникальными свойствами, включающими, кроме КМС, наличие в зависимости от допирования и температуры различных типов магнитного упорядочения, проводимости, искажений кристаллической структуры, зарядового и орбитального упорядочения, эффекта Яна-Теллера и др. [1]

Данная работа посвящена результату, полученному в рамках обобщённого метода сильной связи (ОМСС), разработанного первоначально для ВТСП-купратов [2]. Эффективность его для купратов была продемонстрирована рядом работ, в частности [3], в которых получено хорошее качественное и количественное согласие с экспериментом.

В области $0,2 \leq x \leq 0,5$ ниже температуры Кюри (от 240 до 270К в зависимости от допирования) манганиты находятся в проводящем состоянии с ферромагнитным типом магнитного упорядочения. Выше T_c оно сменяется парамагнитным изолирующим состоянием [1]. Результатом данной работы стало получение перехода между металлическим и диэлектрическим состояниями при изменении магнитного упорядочения с ФМ на ПМ, что соответствует пересечению температурой точки Кюри.

Стоит особенно отметить: данный эффект связан с тем новым, что появился в манганитах по сравнению с купратами, а именно большой вырожденностью базисных состояний.

В соответствии с идеологией ОМСС работа имеет следующую структуру: выбор гамильтониана и запись его в функциях Ванье, точная диагонализация кластера, запись гамильтониана в базисе состояний кластера, получение дисперсионного уравнения, обсуждение получаемых дисперсионных зависимостей.

1. ГАМИЛЬТониАН P-D-МОДЕЛИ, СИММЕТРИЙНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Кристаллическая решётка $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ состоит из MnO_2 -слоев (по структуре аналогичных CuO_2 -плоскостям ВТСП-купратов) перемежающихся слоями $La_{1-x}Sr_xO$. Каждый ион Mn окружён октаэдром из шести ионов кислорода. Ионы La и Sr занимают межоктаэдрические пустоты. В зависимости от допирования решётка может претерпевать различные типы искажения: тетрагональный, орторомбический.

Существенными для нашего рассмотрения являются направленные к Mn *p*-орбитали кислорода $p_x(\vec{r} \pm \frac{\vec{a}_x}{2}) \equiv p_{x\pm 1/2}$, $p_y(\vec{r} \pm \frac{\vec{a}_y}{2}) \equiv p_{y\pm 1/2}$, $p_z(\vec{r} \pm \frac{\vec{a}_z}{2}) \equiv p_{z\pm 1/2}$ и орбитали марганца $d_{x^2-y^2}$ (в дальнейшем — d_x) и $d_{3z^2-r^2}$ (в дальнейшем — d_z), изображённые (с выбранными знаками волновых функций) на рис. 1.

В базисе этих состояний исходный гамильтониан кластера (пока без кулоновских слагаемых) может быть записан в следующем виде:

¹ При поддержке РФФИ, грант 03-02-16286, и программы РАН "Сильно коррелированные электроны".

* © В.А. Гавричков^{1,2}, С.Г. Овчинников^{1,2}, Л.Е. Якимов¹, 2004; ¹ Красноярский госуниверситет (Россия), ² Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН; E-mail: leofant@mail.ru

$$\begin{aligned}
 H_c &= H_d + H_p + H_{pd} + H_{pp}; \\
 H_d &= \sum_{\lambda=x,z;\sigma} \varepsilon_{d_\lambda} n_{\sigma}^{d_\lambda}; \quad H_p = \sum_{\lambda=(x,y,z)\pm 1/2;\sigma} \varepsilon_{p_\lambda} n_{\sigma}^{p_\lambda}; \\
 H_{pd} &= \sum_{\sigma} \left\{ t_{pd} d_{x\sigma}^\dagger (p_{x+1/2,\sigma} - p_{x-1/2,\sigma} + p_{y+1/2,\sigma} - p_{y-1/2,\sigma}) + \right. \\
 &+ \frac{t_{pd}}{\sqrt{3}} d_{z\sigma}^\dagger (-p_{x+1/2,\sigma} + p_{x-1/2,\sigma} + p_{y+1/2,\sigma} - p_{y-1/2,\sigma}) + 2t_{pd} d_{z\sigma}^\dagger (p_{z+1/2,\sigma} - p_{z-1/2,\sigma}) \left. \right\} + h.c.; \\
 H_{pp} &= \sum_{\sigma} \left\{ t_{pp} p_{x+1/2,\sigma}^\dagger (-p_{y+1/2,\sigma} + p_{y-1/2,\sigma}) + t_{pp} p_{x-1/2,\sigma}^\dagger (p_{y+1/2,\sigma} - p_{y-1/2,\sigma}) + \right. \\
 &+ t_{pp} p_{z+1/2,\sigma}^\dagger (p_{x+1/2,\sigma} - p_{x-1/2,\sigma} - p_{y+1/2,\sigma} + p_{y-1/2,\sigma}) + \\
 &\left. + t_{pp} p_{z-1/2,\sigma}^\dagger (-p_{x+1/2,\sigma} + p_{x-1/2,\sigma} + p_{y+1/2,\sigma} - p_{y-1/2,\sigma}) \right\} + h.c.
 \end{aligned} \tag{1}$$

Он включает следующие энергетические параметры: одноэлектронные энергии $\varepsilon_{d_\lambda}, \varepsilon_{p_\lambda}$; энергии $p-d$ - и $p-p$ -перескоков t_{pd}, t_{pp} .

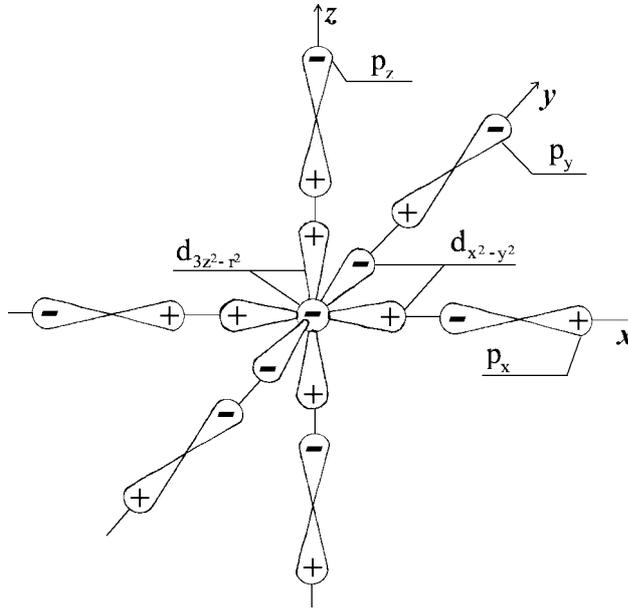


Рис. 1. Кластер MnO_6

Данное представление кластерного гамильтониана наглядно, но обладает тем недостатком, что каждая из кислородных орбиталей принадлежит двум разным кластерам, в результате чего орбитали разных кластеров получаются неортогональными. Чтобы иметь базис состояний, ортогональных для разных кластеров, переходим к функциям Ванье, построенным на кислородных орбиталях. Для этого делается следующее:

- переходим к решётке кластеров;
- используем преобразование Фурье исходных атомных операторов: $c_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f c_f e^{-ikf}$;
- вводим обозначение $\sin \frac{k_\alpha}{2} \equiv s_\alpha$, $\alpha = x, y, z$;
- из кислородных атомных орбиталей формируем комбинации a и b симметрии преобразованием: $\begin{bmatrix} b_k \\ a_k \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \end{bmatrix} = \frac{i}{\mu_k} \begin{bmatrix} s_x & s_y \\ \text{sgn}(k_x k_y) s_y & -\text{sgn}(k_x k_y) s_x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \end{bmatrix}$, где из условия $\|A\|=1$ получаем, что $\mu_k^2 = s_x^2 + s_y^2$;
- для направления z заменяем $i \text{sgn}(k_z) p_z \rightarrow p_z$.

Продемонстрируем эти преобразования на примере части гамильтониана (для простоты без спинного индекса и эрмитово сопряжённой части):

$$\begin{aligned}
 t_{pd} \sum_f d_{xf}^\dagger (p_{x,f+1/2} - p_{x,f-1/2} + p_{y,f+1/2} - p_{y,f-1/2}) &= t_{pd} \sum_k d_{xk}^\dagger (2ip_{xk} s_x + 2ip_{yk} s_y) = \\
 &= t_{pd} \sum_k d_{xk}^\dagger \cdot 2i \cdot b \left(-i \frac{s_x^2 + s_y^2}{\mu} \right) = 2t_{pd} \sum_k \mu_k d_{xk}^\dagger b_k.
 \end{aligned} \tag{2}$$

После Фурье-преобразования обратно к узлам решётки эта часть гамильтониана превратится в $2t_{pd} \sum_{ij} \mu_{ij} d_{xi}^\dagger b_j$, $\mu_{ij} = \frac{1}{N} \sum_k \mu_k e^{-ik(i-j)}$. Введённые таким образом линейные комбинации исходных кислородных орбиталей b_i (а также a_i и p_{zi}) обладают необходимым свойством ортогональности на разных узлах: $\{b_i, b_j^\dagger\} = \delta(i, j)$. По аналогии с μ вводятся коэффициенты $\xi, \lambda, \nu, \chi, \kappa$.

Итак, после аналогичных преобразований и добавления кулоновских слагаемых получаем окончательный на данном этапе вид гамильтониана:

$$\begin{aligned}
 H &= H_c + H_{cc}; \quad H_c = \sum_f H_f; \quad H_f = h^{(b)} + h^{(a)} + h^{(ab)}; \\
 h^{(b)} &= \sum_\sigma (\varepsilon_b n_\sigma^b + \varepsilon_{d_x} n_\sigma^{d_x}) + U_d n_\uparrow^{d_x} n_\downarrow^{d_x} + U_b n_\uparrow^b n_\downarrow^b + V_{pd} n^{d_x} n^b - \tau_b \sum_\sigma (d_{x\sigma}^\dagger b_\sigma + h.c.); \\
 h^{(a)} &= \sum_\sigma (\varepsilon_a n_\sigma^a + \varepsilon_{d_z} n_\sigma^{d_z} + \varepsilon_{p_z} n_\sigma^{p_z}) + U_d n_\uparrow^{d_z} n_\downarrow^{d_z} + U_a n_\uparrow^a n_\downarrow^a + \\
 &\quad + V'_{pd} n^{d_z} n^{p_z} + U'_p n^{p_z} n^{p_z} + V_{pd} n^{d_x} n^a + \\
 &\quad + \tau_a \sum_\sigma (d_{z\sigma}^\dagger a_\sigma + h.c.) - \tau'_{pd} \sum_\sigma (d_{z\sigma}^\dagger p_{z\sigma} + h.c.) - \tau'_{pp} \sum_\sigma (a_\sigma^\dagger p_{z\sigma} + h.c.); \\
 h^{(ab)} &= U_d n^{d_x} n^{d_z} + U_{ab} n^a n^b + V_{pd} n^{d_x} n^a + V_{pd} n^b n^{d_z} + V'_{pd} n^{d_x} n^{p_z}; \\
 H_{cc} &= \sum_{ij\sigma} (h_{hop}^{(a)} + h_{hop}^{(b)} + h_{hop}^{(ab)}); \\
 h_{hop}^{(b)} &= -2t_{pd} \mu_{ij} d_{xi\sigma}^\dagger b_{j\sigma} - t_{pp} \nu_{ij} b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} + h.c.; \\
 h_{hop}^{(a)} &= \frac{2t_{pd}}{\sqrt{3}} \lambda_{ij} d_{zi\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + t_{pp} \nu_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} - 4t_{pp} \kappa_{ij} \lambda_{ij} p_{zi\sigma}^\dagger a_{j\sigma} - 4t_{pd} \kappa_{ij} p_{zi\sigma}^\dagger d_{zj\sigma} + h.c.; \\
 h_{hop}^{(ab)} &= \frac{2t_{pd}}{\sqrt{3}} \xi_{ij} d_{zi\sigma}^\dagger b_{j\sigma} + 2t_{pp} \chi_{ij} a_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} - 4t_{pp} \kappa_{ij} \xi_{ij} p_{zi\sigma}^\dagger b_{j\sigma} + h.c.;
 \end{aligned} \tag{3}$$

Использованы обозначения: $\xi = \frac{s_x^2 - s_y^2}{\mu}$, $\lambda = \frac{2|s_x s_y|}{\mu}$, $\nu = \lambda^2$, $\chi = \lambda \xi$, $\kappa = |s_z|$; $\varepsilon_b = \varepsilon_p - 2t_{pp} \nu_{00}$, $\varepsilon_a = \varepsilon_p - 2t_{pp} \nu_{00}$, $\tau_b = 2t_{pd} \mu_{00}$, $\tau_a = 2t_{pd} \lambda_{00} / \sqrt{3}$, $\tau'_{pd} = 4t_{pd} \kappa_{00}$, $\tau'_{pp} = 4t_{pp} \kappa_{00} \lambda_{00}$.

Гамильтониан разделён на внутрикластерную и межкластерную части, каждая из которых разделена на три части по симметрии входящих операторов.

Введённые функции Ванье – a_i , b_i и p_{zi} – решают проблему ортогональности кислородных молекулярных орбиталей на соседних ячейках. Однако перескоки между различными функциями Ванье теперь уже не ограничены ближайшими соседями, так как матричные элементы $\mu, \xi, \lambda, \nu, \chi, \kappa$ достаточно медленно спадают с расстоянием (табл. 1, 2).

Таблица 1
Плоскостные матричные элементы для первых четырёх координационных сфер

(xy)	00	10	11	20
μ	0.958	-0.140	-0.024	-0.014
ν	0.727	-0.273	0.122	-0.064
λ	0.7459	-0.176	0.062	-0.071
ξ	0	0.258	0	0.039
χ	0	0.134	0	-0.041
(xy)	00	10	11	20
μ	0.958	-0.140	-0.024	-0.014

Таблица 2
Зависимость матричного элемента κ от расстояния вдоль оси z

(z)	0	1	2
κ	0.637	-0.212	-0.042

2. ДИАГОНАЛИЗАЦИЯ КЛАСТЕРА MnO_6

Электронное состояние кластера $d^5 p^6$ (ион марганца Mn^{2+} в конфигурации d^5 , кислородные p -орбитали заполнены) мы будем считать вакуумом — $|0\rangle$. Добавляя дырку (убирая электрон), получаем недопированный ($x=0$) состав $LaMnO_3$ в конфигурации $d^4 p^6$ либо $d^5 p^5$. Двухдырочное состояние ($d^3 p^6, d^4 p^5$ или $d^5 p^4$) будет соответствовать составу $SrMnO_3$ ($x=1$).

Проведём точную диагонализацию кластера MnO_6 в этих трёх секторах гильбертова пространства: вакуумном ($n_h=0$), однодырочном ($n_h=1$) и двухдырочном ($n_h=2$). (Секторы независимы, так как оператор числа частиц коммутирует с гамильтонианом.)

В вакуумном секторе имеется единственное состояние — $|0\rangle$. Операция диагонализации здесь тривиальна.

В однодырочном секторе базисными будут 5 состояний с дыркой, находящейся на орбиталях d_x, d_z, p_z, a и b . Причём они делятся по симметрии на две несмешивающиеся группы. В однодырочном секторе b -симметрии будут состояния d_x и b ; a -симметрии — d_z, a, p_z . Соответственно, гамильтониан H_c запишется в виде матриц:

$$\hat{H}_c^{(b)} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{d_x} & -\sqrt{\frac{5}{6}}\tau_b \\ -\sqrt{\frac{5}{6}}\tau_b & \varepsilon_b \end{bmatrix}, \quad \hat{H}_c^{(a)} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{d_z} & -\sqrt{\frac{5}{6}}\tau_a & 4\sqrt{\frac{5}{6}}t_{pd}\kappa_{00} \\ -\sqrt{\frac{5}{6}}\tau_a & \varepsilon_a & 4\sqrt{\frac{5}{6}}t_{pp}\kappa_{00}\lambda_{00} \\ 4\sqrt{\frac{5}{6}}t_{pd}\kappa_{00} & 4\sqrt{\frac{5}{6}}t_{pp}\kappa_{00}\lambda_{00} & \varepsilon_{p_z} \end{bmatrix}. \quad (4)$$

В двухдырочном секторе за базис берутся состояния, соответствующие распределению двух дырок по пяти базисным орбиталям: $d_x a, b a, d_x d_z, b d_z, d_x p_z, b p_z$.

Задавая значения параметрам, эти матрицы можно численно диагонализировать и получить набор собственных состояний кластера в каждом из трёх рассматриваемых секторов. В дальнейшем из этого набора мы учитываем лишь нижнее по энергии состояние в каждом секторе, так как остальные термы оказываются значительно выше по энергии и, таким образом, не являются существенными для интересующей нас физики низкоэнергетических возбуждений. В однодырочном секторе приходится брать в расчёт два оказывающихся вырожденными по энергии нижних состояния ${}^5a_{1g^-}$ и ${}^5b_{1g^-}$ симметрии.

3. ГАМИЛЬТониАН В БАЗИСЕ КЛАСТЕРНЫХ СОСТОЯНИЙ

Проведя диагонализацию и оставив низшие по энергии состояния, получаем базис, на который спроецируем гамильтониан. Для этой цели используем операторы Хаббарда $X_f^{pq} = |p\rangle\langle q|$, построенные на наших базисных кластерных состояниях. Для обозначения состояний, переход между которыми описывается оператором Хаббарда, мы кроме явной записи X_f^{pq} будем использовать также запись через номер корневого вектора [4] $\alpha_m(p, q)$, соответствующего какой-то конкретной паре состояний: $X_f^m = |p\rangle\langle q|$.

Фермиевские операторы выражаются через операторы Хаббарда как $c_{f\lambda\sigma} = \sum_m \gamma_{\lambda\sigma}(m) X_f^m$. Внутрикластерная часть гамильтониана приобретает диагональный вид:

$$H_c = \sum_{fp} (\varepsilon_{1p} - \mu) X_f^{pp} + \sum_{fq} (\varepsilon_{2q} - 2\mu) X_f^{qq}; \quad (5)$$

здесь индекс p пробегает все однодырочные термы с энергиями ε_{1p} , индекс q — все двухдырочные с энергиями ε_{2q} . Межкластерные перескоки будут описываться гамильтонианом (сделан Фурье-переход к квазиимпульсу)

$$H_{cc} = \sum_{ij\lambda\lambda'} T_{\lambda\lambda'}(i, j) \{c_{i\lambda\sigma}^\dagger c_{j\lambda'\sigma} + h.c.\} = \sum_{\lambda\lambda'\sigma kmn} \gamma_{\lambda\sigma}^*(m) \gamma_{\lambda'\sigma}(n) T_{\lambda\lambda'}(k) \{X_{k\sigma}^{im} X_{k\sigma}^n + h.c.\}. \quad (6)$$

Нужно отметить важное отличие манганитов от купратов. В однодырочном секторе конфигурационного пространства купратов имеют место два спиновых дублета — a_{1g} и b_{1g} . Двумерная кристаллическая структура ВТСП материалов приводит к сильному расщеплению последних, и основным состоянием оказывается b_{1g} . В двухдырочном секторе из-за отсутствия высокого спина на t_{2g} -оболочке основное состояние формируется в условиях конкуренции состояния Жанга-Райса A_{1g} и спинового триплета ${}^3B_{1g}$. Число переходов между этими секторами равно произведению мультиплетностей: $2 \cdot (3+1) = 8$.

В манганитах же вакуумное состояние ${}^6b_{1g}$ вырождено по спину $S = \frac{5}{2}$ шестикратно, оба однодырочных — ${}^5a_{1g}$ и ${}^5b_{1g}$ — пятикратно (их таким образом 10) и двухдырочное — ${}^4B_{1g}$ — четырёхкратно. Соответственно, между однодырочным и двухдырочным секторами число переходов для манганитов равняется $4 \cdot (5+5) = 40$.

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ ДИСПЕРСИИ, РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Согласно методу уравнений движения для матричной функции Грина [5] на основе нашего гамильтониана получаем дисперсионное уравнение:

$$\left\| \frac{\delta_{mn}(E - \Omega_m)}{F(m)} - 2 \sum_{\lambda\lambda'} \gamma_{\lambda\sigma}^*(m) T_{\lambda\lambda'}(k) \gamma_{\lambda'\sigma}(n) \right\| = 0. \quad (7)$$

Здесь Ω_m — разность энергий базисных уровней, между которыми происходит m -й переход; $F(m)$ — фактор заполнения для m -го перехода: $F(m) \equiv \langle F\alpha_m(p, q) \rangle = \langle X^{pp} \rangle + \langle X^{qq} \rangle$. Это уравнение решается для набора точек зоны Бриллюэна (заданием импульса k). В координатах (k, E) мы получаем набор дисперсионных кривых. В расчёте учитываем тетрагональное искажение кислородного октаэдра, имеющее место для величин допирования x от 0,3 до 0,7. На рис. 2, 3 приведены результаты расчёта, соответственно, для ФМ и ПМ фазы при $x = 0,3$.

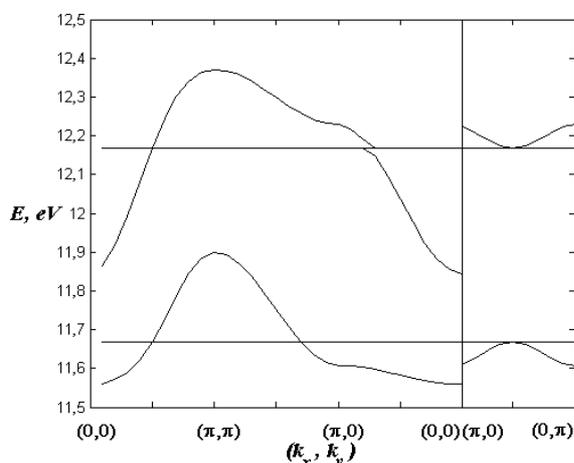


Рис. 2. Дисперсия квазичастиц в ФМ фазе ($x = 0,3$)

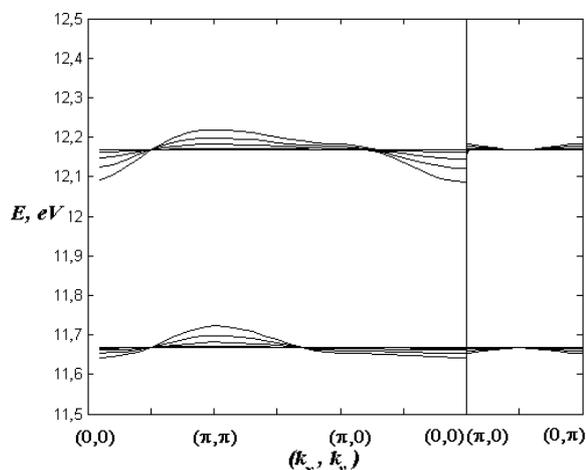


Рис. 3. Дисперсия квазичастиц в ПМ фазе ($x = 0,3$)

Для ферромагнитной фазы (рис. 2) характерно сосредоточение всего спектрального веса на одном квазичастичном переходе, что приводит к большой дисперсии (ширины) соответствующих зон. В результате валентная зона и зона проводимости хорошо перекрываются, что обеспечивает металлическое основное состояние. Надо отметить, что приведённая на рис. 2 картина зонной структуры соответствует спину носителя, сонаправленному с ферромагнитным моментом всей кристаллической решётки. Для антипараллельного спина носителя дисперсия зон мала (в случае $T = 0$ вообще отсутствует), имеется диэлектрическая щель. Таким образом, перенос заряда осуществляется носителями только с одной из возможных проекций спина. Подобного рода проводящие системы носят название половинных металлов (*half metals*) [6].

В случае же парамагнитной фазы (рис. 3) видно наличие энергетической щели, говорящей о диэлектрическом состоянии системы. Вследствие большой мультиплетности базисных состояний и их вырожденности в отсутствие ФМ момента решётки начинает работать большее количество переходов по сравнению с ситуацией в магнитоупорядоченном состоянии. Спектральный вес равномерно распределяется по ним. Мы имеем большое количество зон со сравнительно небольшим спектральным весом и, как следствие, небольшой дисперсией (шириной), которой не хватает для закрытия диэлектрической щели.

Таким образом, приводимые результаты качественно воспроизводят экспериментальные данные в том, что при низких температурах (и наличии ФМ упорядочения) манганиты являются проводниками (а именно половинными металлами), а при высоких (в отсутствие магнитного порядка) — диэлектриками. Хотя нужно отметить, что лишь в ФМ фазе, где зоны явно перекрываются, можно с уверенностью говорить о наличии металлической проводимости. А о том, что в ПМ фазе щель имеет диэлектрический характер, можно будет говорить только после решения уравнения на хипотенциал.

Предлагаемый механизм потенциально способен объяснить наблюдаемую в эксперименте величину изменения проводимости при переходе металл-диэлектрик, чего, как известно, не удаётся сделать в широко используемой модели двойного обмена (ДО) [7]. В ней амплитуда перескока e_g -электрона между узлами является функцией взаимной ориентации спинов на этих узлах, а именно, пропорциональна косинусу половины угла между ними, в соответствии с чем следует ожидать изменения проводимости в $\sqrt{2}$ раз при переходе ПМ-ФМ. Зануляться же амплитуда перескока должна только в АФМ фазе. Из эксперимента же известно, что разница между проводимостями ПМ и ФМ фаз достигает 2–3 порядков. Об этом несоответствии известно, и направление теоретических исследований по манганитам уже сместилось от “чистой” модели ДО к новым механизмам, способным количественно объяснить изменение проводимости. Таковой является и данная работа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Локтев В.М. Особенности физических свойств и колоссальное магнитосопротивление манганитов / В.М.Локтев, Ю.Г.Погорелов // ФНТ. – 2000. – Т. 26. – № 3. – С.231–261.
2. Вальков В.В. Квазичастицы в сильно коррелированных системах / В.В.Вальков, С.Г.Овчинников. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2001. – С.44.
3. Гавричков В.А. Эволюция зонной структуры квазичастиц с допированием в оксидах меди в рамках обобщённого метода сильной связи / В.А.Гавричков, А.А.Борисов, Е.Г.Горячев, С.Г.Овчинников // ЖЭТФ. – 2000. – Т. 118. – С.422–437.
4. Зайцев Р.О. Обобщённая диаграммная техника и спиновые волны в анизотропном ферромагнетике / Р.О. Зайцев // ЖЭТФ. – 1975. – Т. 68. – С.207.
5. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма / С.В. Тябликов. – М: Наука, 1975.
6. Park J.-H. Direct evidence for a half-metallic ferromagnet / J.-H. Park et al. // Nature. – 1998. – V. 392. – P. 794–796.
7. Изюмов Ю.А. Модель двойного обмена и уникальные свойства манганитов / Ю.А.Изюмов, Ю.Н.Скрябин // УФН. – 2001. – Т. 171. – № 2. – С.121–148.

TEMPERATURE-DEPENDENT METAL-INSULATOR TRANSITION IN MANGANITES IN GENERALIZED TIGHT-BINDING METHOD

V.A. Gavrichkov, S.G. Ovchinnikov, L.E. Yakimov

For $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ manganites the dispersion equation is obtained within the framework of the generalized tight-binding method. For temperatures above and below T_C set in our calculations by means of para- or ferromagnetic order determination we see respectively presence or absence of the gap between valence and conduction bands. The gap appearance in paramagnetic phase is related to the band dispersion decrease which is due to the equal quasiparticle density distribution among more states than in ferromagnetic phase.