

## **ВПЛИВ ФОРМИ МОДЕЛЬНОЇ ГУСТИНИ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ НА ЕЛЕКТРИЧНІ ТА МАГНІТНІ ВЛАСТИВОСТІ ВУЗЬКОЗОННИХ МАТЕРІАЛІВ**

Крамар О.І., Скоренький Ю.Л.

*Тернопільський національний університет імені Івана Пулюя,*

e-mail: [kramar@tu.edu.te.ua](mailto:kramar@tu.edu.te.ua)

Одним з найперспективніших напрямків у сучасній фізиці конденсованого стану є вивчення унікальних фізичних властивостей матеріалів з сильними кулонівськими кореляціями [1]. Зокрема, зацікавлення викликають спостережувані в багатьох сполуках цього класу (в першу чергу, в сполуках перехідних металів) переходи діелектрик-метал, різноманітність типів магнітного впорядкування, взаємозв'язок електричних і магнітних властивостей. В останні роки, наприклад, інтенсивно досліджуються проблеми, пов'язані з реалізацією феромагнітного впорядкування у дихалькогенідах перехідних металів. Сильнокорельовані електронні системи володіють також незвичайними транспортними властивостями. Проведені дотепер теоретичні дослідження головним чином стосуються систем з густиною електронних станів (ГС) без особливостей. Незважаючи на значні зусилля дослідників, нерозв'язаною залишається проблема розрахунку при ненульових температурах провідності в моделі з корельованим переносом та ГС, яка відповідає реальним вузькозонним матеріалам.

В даній роботі для випадку сильної кулонівської кореляції з використанням методу функцій Гріна при дослідженні ефективного гамільтоніану однозонної узагальненої моделі Габбарда з корельованим переносом і обмінною взаємодією та при врахуванні зовнішніх тиску, магнітного поля в методі проектування [2] отримано одночастинкові енергетичні спектри; на цій основі показано важливість процесів трансляційного руху електронів для феромагнітного впорядкування в системі [3]. У роботі проведено розрахунок енергії основного стану для різних форм незбуреної ГС отримано (для основного стану) критичні концентрації, при яких магнітний момент виникає та досягає насичення, розраховано намагніченість. Також досліджено стабільність феромагнітного впорядкування на основі вивчення особливостей поведінки різниці енергій парамагнітного та феромагнітного основних станів. Отримані результати (залежності намагніченості від ступеня заповнення енергетичної зони та параметрів системи, критичні концентрації) в граничних випадках моделі добре узгоджуються з результатами інших підходів. Важливо відзначити результати стосовно впливу корельованого переносу на стабільність феромагнітного впорядкування при різних формах ГС в моделі вузькозонного матеріалу. Для випадку сильних кулонівських кореляцій корельований перенос обумовлює зменшення величини зсуву центрів спінових підзон і послаблює ефективність трансляційного механізму феромагнітного впорядкування, призводить до

асиметрії концентраційних залежностей намагніченості відносно половинного заповнення зони.

У випадку ненульових температур запропоновано підхід, який дозволяє з використанням числових методів розрахувати намагніченість для системи з довільною незбуреною ГС. Виявлено, що намагніченість з ростом температури може змінюватися як неперервно, так і стрибкоподібно, причому температура та рід переходу у парамагнітний стан, а також феромагнітний концентраційний інтервал визначаються формою ГС та величиною ефективної обмінної взаємодії. Встановлено, що концентраційна залежність температури Кюрі має максимум, положення якого залежить від величини ефективної обмінної взаємодії та форми незбуреної ГС.

У роботі також запропоновано узагальнення підходу до розрахунку електропровідності мотт-габбардівських систем, в яких можлива реалізація феромагнітного впорядкування: спонтанного (за рахунок трансляційного механізму і особливостей форми незбуреної ГС та обмінного механізму) чи під дією зовнішнього магнітного поля. Показано, що поведінка концентраційної залежності провідності обумовлена особливостями відповідних залежностей кінетичної енергії електронів та намагніченості ґратки. Встановлено, що наявність зовнішніх впливів (магнітного поля, тиску) може суттєво модифікувати транспортні характеристики вузькозонного матеріалу. Зміна провідності при зростанні магнітного поля може мати різний характер в залежності від концентрації та форми ГС. Вплив прикладеного зовнішнього тиску на концентраційну залежність провідності зводиться до збільшення величини провідності за рахунок розширення енергетичної зони при деформації ґратки. Характер змін провідності зі зростанням температури є металічним: провідність монотонно спадає при збільшенні температури.

Розраховано ефективні маси носіїв при різних формах незбуреної ГС. Перенормування мас носіїв у досліджуваній системі визначається двома факторами: корельованим переносом електронів та коефіцієнтом кореляційного звуження зони. З'ясовано, що ефективні маси є спін-залежними. Реалізація в системі феромагнітного впорядкування суттєво модифікує поведінку ефективних мас носіїв, поява намагніченості приводить до розщеплення ефективних мас носіїв з різними напрямками спінів, яке визначається особливостями незбуреної ГС та величиною магнітного поля. Встановлено, що корельований перенос практично не впливає на точку спінового розщеплення ефективної маси, однак суттєво змінює її абсолютне значення і може привести до зміни характеру концентраційної залежності.

*Автори вдячні ДФФД України за фінансову підтримку досліджень (грант GP/F13/0073).*

[1] Изюмов Ю.А., Курмаев Э.З. Материалы с сильными электронными корреляциями // УФН.- 2008.- Т. 178.- С. 25-60.

[2] Дідух Л. Модель вузькозонного матеріалу з електронно-дірковою асиметрією // Журн. фіз. досл. – 1997. – Т.1. – № 2. – С. 241-250.

[3] Крамар О., Скоренький Ю., Дідух Л. Роль форми густини електронних станів у стабілізації феромагнетизму вузькозонного матеріалу // Фізичний збірник НТШ. – 2008. – Т.7. – С.168–181.