

УДК 538.9, 539.21

**О. Крамар, Ю. Скоренький, Ю. Довгоп'ятий**

(Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя)

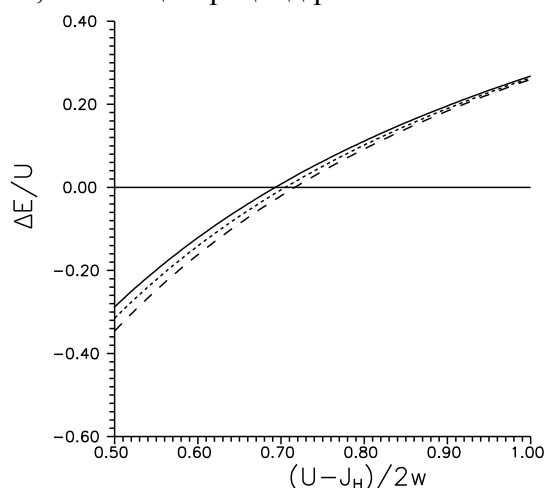
## ВПЛИВ ФОРМИ НЕЗБУРЕНОЇ ГУСТИНИ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ НА КОНЦЕНТРАЦІЮ ПОЛЯРНИХ СТАНІВ ТА ЕНЕРГЕТИЧНУ ЩІЛИНУ В МОДЕЛІ ОРБІТАЛЬНО ВИРОДЖЕНОЇ ЗОНИ.

Інтенсивні дослідження [1-4] узагальнення моделі Габбарда, що враховує орбітальне виродження атомних рівнів, свідчать про існування переходу метал-діелектрик у таких системах. Крім вивчення ролі внутрішньоатомного кулонівського відштовхування електронів на вузлі та гундівської обмінної взаємодії при переході метал-діелектрик актуальним залишається питання про вплив форми незбуреної густини електронних станів при аналізі параметрів переходу. У даній роботі досліджено начверть заповнену (концентрація електронів на вузол  $n=1$ ) двократно орбітально вироджену зону у випадку сильної кулонівської кореляції та сильного гундівського зв'язку. З використанням процедури проектування у рівняннях руху для функцій Гріна раніше було розраховано [4] квазічастинковий енергетичний спектр:

$$E_{1,2}(\vec{k}) = -\mu + \frac{U - J_H}{2} + 3t(\vec{k}) \left( \frac{c}{2} - \frac{1}{4} \right) \mp \frac{1}{2} \sqrt{\left[ U - J_H - \frac{t(\vec{k})}{2} \right]^2 + 6c^2 (t(\vec{k}))^2},$$

де  $\mu$  - хімічний потенціал,  $U$  - параметр кулонівського відштовхування електронів на вузлі,  $J_H$  - параметр гундівської обмінної взаємодії електронів на орбіталях,  $t(\vec{k})$  - інтеграл переносу електронів між сусідніми вузлами,  $c$  - концентрація діркових станів.

З використанням методів чисельного розрахунку отримано концентрацію полярних станів (діркових  $c$  та двійкових  $d$ ) при різних значеннях енергетичних параметрів моделі та температурах. Розрахунок здійснювався для випадку різних незбурених густин електронних станів (ГС). На основі отриманих даних обчислено нормовану (на параметр кулонівського відштовхування) ширину енергетичної щілини  $\Delta E/U$  як функцію енергетичного параметра  $(U - J_H)/2w$  (рисунок 1, нормована температура  $k_B T/2w = 0.1$ ,  $w$  - напівширина незбуреної енергетичної зони, суцільна крива - прямокутна ГС, штрихована крива з дрібним штрихом - напівеліптична ГС, штрихована крива з великим штрихом - ГС для простої кубічної ґратки). Відзначимо, що зміна форми ГС модифікує значення критичного параметра, при якому відбувається перехід з металічної фази у діелектричну при фіксованій температурі.



### Література

- Klejnberg A., Spalek J // Phys. Rev. B.- 1998.- vol. 57.- p. 12041-12055.
- Hasegawa H. // Phys. Rev. B.- 1997.- vol. 56.- pp. 1196-1203.
- Bunemann J., Weber W. // Phys. Rev. B.- 1997.- vol. 55.- pp. 4011-4014.
- Dovhopiy Yu., Didukh L., Kramar O., Skorenkyu Yu., Drohobitskyu Yu. // Ukr. J. Phys.- 2012.- vol. 57.- pp. 920-929.