

Л.Д. Дідух, Ю.Л. Скоренький, О.І. Крамар, Ю.М. Довгоп'ятий.  
Тернопільський державний технічний університет імені Івана Пулюя

## ЕЛЕКТРОННА ПРОВІДНІСТЬ В МОДЕЛІ МАТЕРІАЛУ З СИЛЬНИМИ ЕЛЕКТРОННИМИ КОРЕЛЯЦІЯМИ

В моделі матеріалу з сильними електронними кореляціями [1] було розраховано провідність при ненульовій температурі та досліджено залежності провідності від змін температури, тиску та легування. Вирази для розрахунку провідності знайдено з використанням енергетичного спектру електронів у вузькій зоні для випадку сильних кореляцій, отриманого в методі [2] типу узагальненого наближення середнього поля. Результати числових розрахунків провідності дозволили проінтерпретувати експериментальні дані для вузькозонних сполук, в яких спостерігається електрон-діркова асиметрія. Отримано вирази для провідності у нижній габбардівській підзоні і у верхній габбардівській підзоні як функції температури, відносної деформації ґратки (залежної від тиску), концентрації електронів та параметрів корельованого переносу. При зростанні температури провідність монотонно спадає (металічний тип провідності), при цьому провідність є тим більшою, чим ближчим є заповнення підзони до половинного (тоді зона заповнена на чверть). При наявності корельованого переносу при фіксованій концентрації електронів провідність є тим меншою, чим більшим є параметр корельованого переносу електронів, оскільки корельований перенос приводить до звуження зони. Прикладання зовнішнього тиску має зворотній ефект – стискання приводить до розширення зони, таким чином, до зростання провідності (для деяких сполук перехідних металів легування катіонної підсистеми може бути еквівалентним до прикладання зовнішнього тиску [3]).

Отримано концентраційні залежності провідності при відмінній від нуля абсолютній температурі. Встановлено, що провідність вузькозонної системи сильно залежить від легування та температури. Корельований перенос, як і зростання температури, приводить до зменшення провідності, причому при наявності впливу заселеності вузлів на процеси переходу електрона між цими ж вузлами з'являється асиметрія відносно половинного заповнення. Як і в основному стані, тип провідності змінюється (при зміні концентрації електронів  $n$  від 0 до 2) тричі – в області першого та другого максимумів та біля  $n=1$ . Відмінність від випадку нульової абсолютної температури полягає у тому, що положення максимуму провідності повільно зсувається до половинного заповнення зони при зростанні температури. Прикладання

зовнішнього тиску приводить до зростання провідності, але для фізичних значень температури та відносної деформації кристалу зміна провідності є помітною лише в околі максимуму (в майже на чверть та майже на три чверті заповненій зоні).

Отримані залежності якісно узгоджуються із наявними експериментальними даними для широкого класу систем із сильними електронними кореляціями. Це підтверджує висновок про визначальну роль квазічастинкових збурень всередині підзон порівняно з міжзонними у статичну провідність у однорідному зовнішньому полі.

Робота виконана за фінансової підтримки Державного фонду фундаментальних досліджень, проект №02.07/266.

- [1]. Дідух Л. Модель вузькозонного матеріалу з електронно-дірковою асиметрією // Журн. фіз. досл.- 1997.- Т.1, №2.- С. 241-250.
- [2]. Didukh L. A modified form of the polar model of crystals // Acta Physica Polonica B - 2000.- vol.31, No.12.- p. 3097-3133.
- [3]. Imada M., Fujimori A., and Tokura Y. Metal-insulator transitions // Rev. Mod. Phys.- 1998.- vol. 70, No. 4.- p. 1039-1264.