

УДК 537.611.44, 537.622.4

Олександр Крамар, к.ф.-м.н., доц., Юрій Скоренький, к.ф.-м.н., доц.
Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Україна

ОСОБЛИВОСТІ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРУ ЕЛЕКТРОНІВ У ФЕРОМАГНІТНИХ СИСТЕМАХ З ТРИКРАТНИМ ОРБИТАЛЬНИМ ВИРОДЖЕННЯМ

Oleksandr Kramar, Ph.D., Asoc. Prof., Yuriy Skorenkyu, Ph.D., Asoc. Prof.
THE PECULIARITIES OF ENERGY SPECTRUM OF ELECTRONS IN THE
FERROMAGNETIC SYSTEM WITH THREEFOLD ORBITAL DEGENERATED
BAND

Для детального теоретичного дослідження електричних (зокрема, переходу діелектрик-метал) та магнітних властивостей сполук типу легованих фулеридів було сформульовано модель [1], яка коректно враховувала трикратне орбітальне виродження енергетичних рівнів, кулонівську кореляцію, корельований перенос електронів, властивий вузькозонним матеріалам. Представляє суттєвий інтерес дослідження ефектів ферромагнітного впорядкування у вказаних системах, а тому необхідно узагальнити гамільтоніан, отриманий у вказаній роботі, крім розгляду гундівського обміну J_H , врахуванням міжвузлової обмінної взаємодії J електронів. У випадку слабкої кулонівської кореляції $U \ll w$ застосування підходу модифікованого середнього поля в методі функцій Гріна за логікою, подібною до роботи [2], дозволило розрахувати електронний енергетичний спектр:

$$E^{\lambda\sigma}(\vec{k}) = -\tilde{\mu}_{\lambda\sigma} + \alpha^{\lambda\sigma} t(\vec{k}), \quad (1)$$

де введено позначення для перенормованого хімічного потенціалу:

$$\tilde{\mu}_{\lambda\sigma} = \mu - \beta'_\lambda - \beta''_{\lambda\sigma} - Un_{\lambda\bar{\sigma}} - 2U'n_{\lambda\bar{\sigma}} - 2(U' - J_H)n_{\lambda\sigma} + zJ \sum_{\lambda} n_{\lambda\sigma}, \quad (2)$$

та для фактора кореляційного звуження енергетичної зони

$$\alpha^{\lambda\sigma} = 1 - \tau_1 n - 4\tau n_{\bar{\lambda}} - 2\tau'' n_{\lambda\bar{\sigma}} - \frac{zJ}{w} \sum_{j\sigma} \langle a_{ja\sigma}^+ a_{pa\sigma} \rangle. \quad (3)$$

За термінологією роботи [2] класифікуємо величину $\beta''_{\lambda\sigma}$ як спіновий зсув центра зони. Тут також введено безрозмірні параметри корельованого переносу $\tau' = t'_{pj} / |t_{pj}|$; $\tau'' = t''_{pj} / |t_{pj}|$ та враховано, що півширина енергетичної зони $w = z|t_{pj}|$, z – число найближчих вузлів, сусідніх до даного, n – концентрація електронів на вузол. Співвідношення між числами заповнення одноелектронних станів, за умови відсутності орбітального впорядкування, дозволяють отримати спінову концентрацію електронів на вузлі на довільній орбіталі у вигляді $n_{\alpha\uparrow} = (n+m)/3$, $n_{\alpha\downarrow} = (n-m)/3$.

Отриманий енергетичний спектр можна застосувати, зокрема, для розрахунку енергії основного стану E_0 , а використання умови $dE_0/dm = 0$ дозволить знайти рівноважне значення намагніченості системи m_{GS} , яке є нульовим наближенням при розрахунку намагніченості при ненульовій температурі.

Перелік посилань

1. Dovyhopaty Yu., Didukh L., Kramar O., Skorenkyu Yu., Drohobitskyu Yu. // Укр. фіз. журн.- Т. 57, № 9.- С. 920-929.

2. Didukh L., Hankevych V., Kramar O., Skorenkyu Yu. // Journal of Physics: Condensed Matter.– 2002.– vol.14.– pp.827-835.