

УДК 537.9

**Олександр Крамар**

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя,  
 м. Тернопіль, Україна

## ВПЛИВ ФОРМИ ГУСТИНИ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ НА ХІМІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ В УЗАГАЛЬНЕНІЙ МОДЕЛІ ГАББАРДА

У роботі досліджено поведінку хімічного потенціалу як функції температури та параметрів узагальненої моделі Габбарда з корельованим переносом при різних формах незбуреної густини електронних станів (ГС). З використанням розрахованого [1] квазічастинкового енергетичного спектру, який враховує кореляційне звуження  $\alpha$  та трансляційний зсув  $\beta$  центра підзони, у парамагнітному випадку проведено числовий розрахунок хімічного потенціалу на основі виразу:

$$\frac{n}{2-n} = \int_{-w(n)}^{w(n)} \frac{\rho(t)dt}{\exp\left(\frac{-\mu + \alpha t + \beta - zJ_{eff}n/2}{\Theta}\right) + 1},$$

де  $n$  – концентрація електронів у квазічастинковій підзоні,  $w(n)$  – концентраційно залежна (за рахунок корельованого переносу [2]) ширина підзони,  $\rho(t)$  задає форму незбуреної ГС,  $\Theta = k_B T$ .

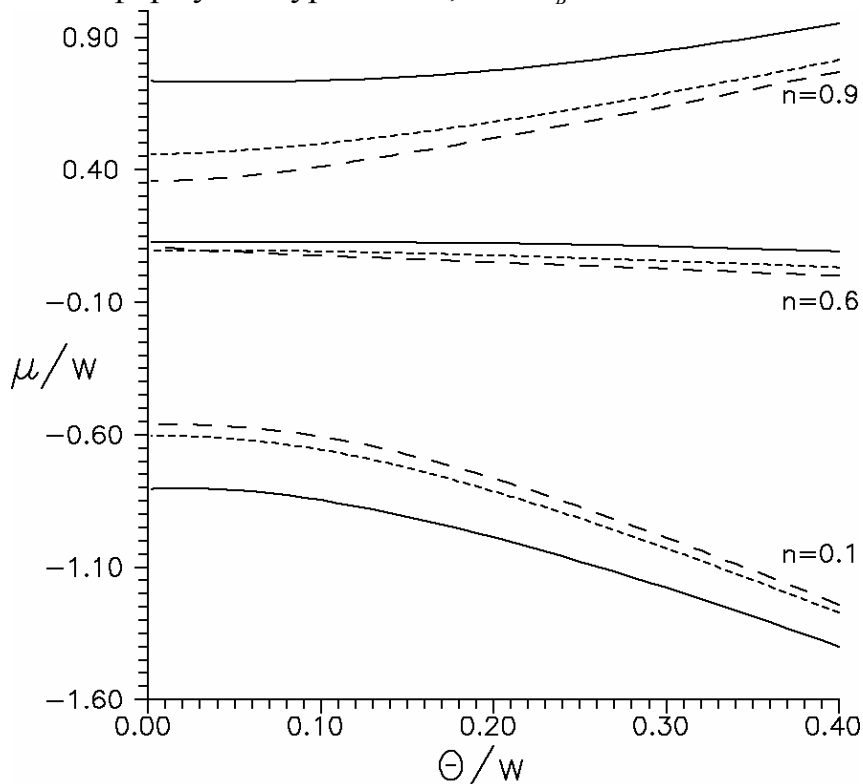
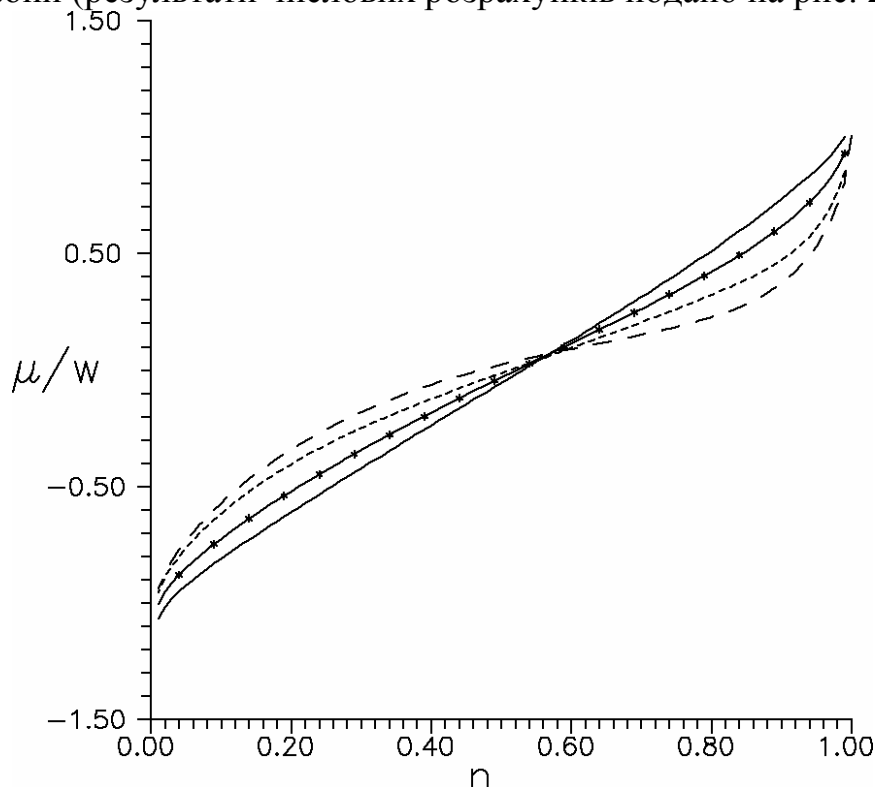


Рисунок 1- Температурна залежність хімічного потенціалу при різних концентраціях електронів. Суцільні криві відповідають прямокутній ГС, криві з коротким штрихом – ГС sc-гратки, криві з довгим штрихом – ГС bcc-гратки.

Виявлено певні особливості властивостей хімічного потенціалу для систем з напівеліптичною ГС, ГС з асиметрією на краю зони та ГС ґраток кубічної симетрії (*sc* та *bcc*) порівняно з результатами для прямокутної ГС. Зокрема з температурної залежності видно (рис. 1), що для довільної форми ГС зміни значення хімічного потенціалу є тим більш суттєві, чим вищою є температура та чим сильніше заповнення зони  $n$  відрізняється від половинного. Разом з тим, при низьких температурах хімічний потенціал залежить від температури слабо. Це дозволяє використовувати в оцінках низькотемпературних характеристик моделі значення хімічного потенціалу основного стану. У роботі показано також, що при використанні асиметричної ГС [3] зростання параметра асиметрії  $a$  приводить до помітного зсуву хімічного потенціалу до нижнього краю підзони. Відзначимо також, що при малих концентраціях у випадку низьких температур і сильно асиметричної ГС хімічний потенціал лежить нижче, ніж для прямокутної ГС. В низькотемпературній області відхилення  $\mu/w$  для реалістичних ґраток від модельної прямокутної ГС є мінімальним при концентрації  $n \cong 0,6$ , в той час коли у високотемпературній області при цій же концентрації відхилення є максимальним. Більшість специфічних вузькозонних термо-магніто-електричних ефектів виникає при контакті матеріалів з різними значеннями концентрації електронів (а отже - і хімічного потенціалу). В зв'язку з цим викликає інтерес дослідження поведінки хімічного потенціалу від ступеня заповнення зони (результати числових розрахунків подано на рис. 2).



Риунок 2 – Концентраційна залежність хімічного потенціалу при фіксованій температурі  $\Theta/w = 0,05$ . Суцільна крива відповідає прямокутній ГС, суцільна крива з крапками - напівеліптичній ГС, крива з коротким штрихом – ГС *sc*-ґратки, крива з довгим штрихом – ГС *bcc*-ґратки.

Концентраційна залежність хімічного потенціалу в даній моделі є несиметричною відносно половинного заповнення. Особливості поведінки залежності  $\mu(n, T)$  визначаються впливом трьох основних факторів: температури, кореляційного зсуву центра зони і ефективного обміну  $J_{eff}$ . При зростанні температури хімічний потенціал в області електронної провідності зменшується, а в області діркової провідності - зростає. Кореляційний зсув має немонотонну залежність від електронної концентрації, максимум якої лежить в області максимуму провідності. Обмінний зсув має лінійну залежність від концентрації, отже є найбільш помітним в більш ніж напівзаповненій підзоні, причому кореляційний та обмінний зсуви мають різний знак. Показано, що температурний фактор практично не проявляється в області переходу від електронного до діркового типу провідності і є найбільш значним в майже порожній підзоні (газова границя) чи майже заповненій підзоні  $n \rightarrow 1$ .

1. L. Didukh, O. Kramar, *Condens. Matter Phys.* **8**, 547 (2005).
2. L. Didukh, *Condens Matter Phys.* **1**, 125 (1998).
3. J. Wahle, N. Blumer, J. Schlipf, K. Held, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. B* **58**, 12749 (1998).