

НОВИЙ МЕТОД РОЗРАХУНКУ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРУ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК СИСТЕМ З КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ

В роботі досліджено теоретичну модель електронної підсистеми матеріалу із періодично розташованими андерсон-габбардівськими центрами в матриці вузькозонного металу. Крім взаємодії між локалізованими магнітними моментами та сильної одновузлової кулонівської взаємодії, модель враховує гібридизацію локалізованої підсистеми та зони провідності, що приводить до виникнення непрямого переносу та непрямого обміну. Проведено класифікацію процесів непрямого переносу, оскільки конфігураційне представлення дозволяє розділити процеси, які формують енергетичні підзони та процеси гібридизації цих підзон. В границі сильної кулонівської кореляції було отримано ефективний гамільтоніан, на основі якого розраховано одноелектронну функцію Гріна, причому до трансляційної частини гамільтоніану застосовано наближення типу проектування, а до обмінної частини – наближення середнього поля. Такий підхід виявився плідним в роботі [1] для дослідження особливостей провідності мотт-габбардівських систем. Таким чином, енергетичний спектр нижньої підзони матиме вигляд $E_{\sigma}(\vec{k}) = E_d + \alpha_{\sigma} t(\vec{k}) + \beta_{\sigma} + \beta_{\sigma}^J$, де α_{σ} - спін-залежний коефіцієнт звуження зони, β_{σ} - спін-залежний зсув центра підзони, обумовлений трансляційними процесами, β_{σ}^J - спін-залежний обмінний зсув.

Ефективну масу знайдемо з виразу $m_{eff}^{\sigma} = \left(\frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k^2} \right)^{-1}$. Після диференціювання отримуємо $m_{eff}^{\sigma} = \hbar^2 (\alpha_{\sigma} a^2 t_{\vec{k}})^{-1}$. У парамагнітному випадку $m_{eff} = m_0 / \alpha$, де $\alpha = 1 - \frac{n^d}{2} + \frac{(n^d)^2}{4} \left(1 - \frac{n^d}{2} \right)^{-1}$, причому n^d – концентрація електронів у локалізованій підсистемі.

У випадку, коли система знаходиться під впливом зовнішнього тиску або концентрацію вузлів d -підсистеми можна змінювати шляхом легування, вигляд концентраційної залежності ефективної маси d -електронів може суттєво змінюватися. Справа у тому, що у випадку, коли всі електрони провідності знаходяться у d -зоні (при $2n^d = n$), отримується залежність, характерна для легованого мотт-габбардівського діелектрика, із концентраційними інтервалами провідності електронного та діркового типів, а коли всі електрони знаходяться у s -зоні ($n^d = 0$), ефективна маса носіїв є чисто зонного типу. В проміжних випадках, коли електрони розподілені певним чином між d -і s -зонами, в моделі можна досягти як зсуву області максимуму концентраційної залежності ефективної маси до більших значень n , так і повного вилучення інтервалу з дірковим типом провідності.