

ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ТА УМОВИ ПЕРЕХОДУ ДІЕЛЕКТРИК-МЕТАЛ В МАТЕРІАЛАХ З АНДЕРСОН-ГАББАРДІВСЬКИМИ ЦЕНТРАМИ

Наноструктурні вузькозонні матеріали з квантовими точками володіють незвичайними електричними властивостями, які зазнають суттєвих змін при дії зовнішнього впливу (зміни температури, прикладання тиску), що відкриває перспективи практичного застосування цих систем. Для опису електричних властивостей згаданих матеріалів нами в періодичній моделі Андерсона-Габбарда із застосуванням варіанту методу проектування [1] в рівняннях руху для функцій Гріна розраховано квазічастинковий енергетичний спектр:

$$E_{1,2} = -\mu + \frac{E_d + E_b(u)}{2} + \frac{U \langle n_{p\downarrow} \rangle}{2} + \frac{t_k^-(u)}{2} \mp \frac{1}{2} \sqrt{(E_d - E_b(u) + U \langle n_{p\downarrow} \rangle - t_k^-(u))^2 + 4(V(u))^2},$$

тут ширина s -зони провідності $E_b(u)$, параметр зонного переносу $t_k^-(u)$ та параметр гібридизації $V(u)$ є залежними від відносної деформації u кристалічної ґратки. З цього виразу видно, що перенормування ширини зони під дією прикладеного тиску у випадку помірної кулонівської взаємодії U в підсистемі локалізованих електронів може мати більший ефект на перехід з діелектричного у металічний стан, ніж гібридизація зонних та локалізованих станів. У цьому зв'язку нами було досліджено вплив тиску на електричні властивості моделі сильноскорельованого андерсон-габбардівського матеріалу без врахування гібридизації. Шляхом мінімізації термодинамічного потенціалу Гіббса було розраховано рівноважні значення параметра u (тут спостерігається відомий ефект само-стискання ґратки [2]), від яких суттєво залежить умова переходу метал-діелектрик. Це дало можливість побудувати температурні залежності енергетичної щільності ΔE при різних величинах прикладеного тиску, які дозволяють пояснити перехід з діелектричного в металічний стан в сильноскорельованому андерсон-габбардівському матеріалі.

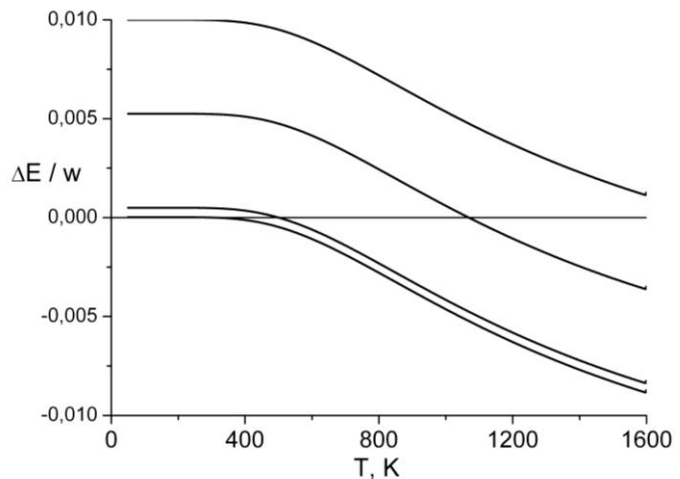


Рис. 1. Залежність $\Delta E(T)$. Криві зверху вниз відповідають $pV_0/w = 2,00; 2,05; 2,10; 2,105$.

Література.

1. ДІДУХ Л.Д. Ефекти міжелектронних взаємодій в кристалах з вузькими зонами провідності /Л.Д.Дідух //Дис. доктора фіз.-мат. наук: 010407. – Тернопіль, 1995. – 398 с.
2. ГРИГОРЧУК Р.А. Электрон-деформационное взаимодействие и сжатие решетки в кристаллах, описываемых моделью Хаббарда / Р.А. Григорчук, И.В. Стасюк // Укр. физ. журн.- 1980.- Т. 25, № 3.- С. 404-410.