КОНФІГУРАЦІЙНІ ПРЕДСТАВЛЕННЯ МОДЕЛЕЙ НАНОСТРУКТУРНИХ НИЗЬКОВИМІРНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СИСТЕМ

Скоренький Ю.Л. [1], Крамар О.І. [1], Дрогобицький Ю.В. [2]

[1] *Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя,*
[2] *Тернопільський національний педагогічний університет ім. В.Гнатюка*
e-mail: skorenkyy@tstu.edu.ua

В даному дослідженні сформулювано моделі електронної підсистеми легованих фулеридів та систем з андерсон-габбардівськими центрами. Ці результати узагальнюють відповідні моделі, використані іншими дослідниками, врахуванням орбітального виродження енергетичних рівнів та корельованого переносу електронів. Для сформульованих моделей побудовані конфігураційні представлення, які дозволяють виокремити процеси, які формують квазічастинкові підзони, виявити механізми локалізації електронів та стабілізації різних типів магнітного впорядкування. Незважаючи на певну громіздкість виразів, конфігураційне представлення має ряд переваг: воно дозволяє у явному вигляді розділити доданки гамільтоніана, які описують процеси, що формують квазічастинкові підзони, та процеси гібридизації цих підзон, отримати діагональний вигляд доданків, які описують кулонівські одновузлові взаємодії (коректне врахування яких є принципово важливим), класифікувати процеси корельованого переносу електронів та відповідні їм звуження квазічастинкових підзон.

Електричні, оптичні та механічні властивості фулеридів [1, 2] та систем з квантовими точками [3, 4] вказують на багатий фізичний зміст явищ, які в них відбуваються, та на значні перспективи використання цих матеріалів у електроніці та інших галузях науки і техніки. Зокрема, легування твердого фулерида C_{60} невеликою кількістю лужного металу приводить до утворення матеріалу з металічним типом провідності, який при низьких температурах переходить в надпровідний стан (T_c від 2,5 К для сполуки Na_2KC_{60} до 33 К для сполуки $RbCs_2C_{60}$). Лише A_3C_{60} є металічним, тоді як AC_{60}, A_2C_{60}, та A_4C_{60} – діелектриками [5]. Різні фази цих сполук утворюються при зміні температури, концентрації лужного металу, параметра ґратки та структури ґратки. Зокрема, металічна, діелектрична і надпровідна фази отримані при різному заповненні n (n може змінюватися від 0 до 6) найвищої незаповненої молекулярної орбіталі (LUMO) в C_{60}. Електрон-електронна взаємодія в C_{60} описується двома основними параметрами: внутрішньомолекулярного кулонівського відштовхування U та обмінної взаємодії J. У фулеридах конкуренція між кулонівською взаємодією електронів на одному вузлі та процесами делокалізації, пов’язаними з трансляційним рухом електронів (визначають ширину зони), обумовлює реалізацію діелектричного чи металічного стану [6]. Для детального теоретичного дослідження електричних (зокрема, переходу метал-діелектрик) та магнітних властивостей сполук типу легованих фулеридів в моделі необхідно адекватно враховувати орбітальне виродження

енергетичних рівнів, сильну кулонівську кореляцію а також корельований перенос електронів у вузьких енергетичних зонах.

В трикратно виродженій моделі кожен із вузлів ґратки може перебувати у одному із 64 станів. Гамільтоніан моделі в конфігураційному представленні має вигляд: $H = H_0 + T$, де H_0 позначає атомну частину гамільтоніану, а трансляційна частина гамільтоніану може бути подана у вигляді $T = \sum_{n,m} T_{nm}$, де *n,m* нумерують базисні стани. До гамільтоніанів T_{nm} входять процеси, що формують енергетичні підзони (аналоги габбардівських підзон), та процеси гібридизації цих підзон. Переходам в різних підзонах T_{nn} чи між різними підзонами T_{nm} $(n \neq m)$ відповідають різні інтеграли переносу t_{ij}^{nm}. У виродженій моделі, в зв’язку з більшою кількістю можливих електронних конфігурацій вузла та наявністю додаткових механізмів корельованого переносу, можна виділити більше, порівняно з невиродженою моделлю, різних за величиною інтегралів переносу електрона з вузла на вузол. Відповідно підзони, що формуються внаслідок переходів електрона, матимуть різні ширини. Взаємне розташування та перекриття цих підзон залежить від співвідношень між значеннями параметрів кулонівської взаємодії, гундівської обмінної взаємодії та ширинами підзон. При цілих значеннях концентрації електронів *n* від 1 до 5 в системі може відбуватися перехід метал-діелектрик.

Енергетичний спектр моделі, адекватної електронній підсистемі A_xC_{60} розраховано, використовуючи формалізм функцій Гріна. Для утворення замкнутої системи рівнянь використано процедуру проектування, подібну до використаної в роботі [7]. Енергетичний спектр є залежним від концентрації двократно зайнятих станів. Аналіз залежності ширини енергетичної щілини від параметра кулонівської взаємодії та параметрів корельованого переносу показує, що корельований перенос суттєво впливає на електричні характеристики вузькозонного матеріалу із трикратним орбітальним виродженням енергетичних рівнів. Як заселеність вузлів, які беруть участь у процесі трансляційного руху електронів (їх вплив спричиняє корельований перенос першого роду), так і заселеність сусідніх до них вузлів (корельований перенос другого роду), можуть привести до появи енергетичної щілини у спектрі – стабілізації діелектричного стану. Однак, енергетична щілина виникає при відносно значній зміні параметрів корельованого переносу, яка не може реалізуватися в певній сполуці лише при зміні зовнішніх умов. Настільки суттєва зміна параметрів може бути отримана лише при легуванні. Інша картина спостерігається при зміні параметра одновузлової кулонівської взаємодії – при зростанні (*U*-3*J*)/w вище певного критичного значення (залежного від величин параметрів корельованого переносу) виникає енергетична щілина, відбувається перехід метал – діелектрик.

Для опису систем із квантовими точками сформульовано модельний гамільтоніан андерсон-габбардівського матеріалу, який узагальнює моделі, запропоновані у роботах [8, 9], врахуванням особливостей кореляційних ефектів у підсистемі „локалізованих” електронів, підсистемі „зонних” електронів та гібридизації цих підсистем:

$$H = H_0 + H_1 + H_2, \tag{1}$$

де

$$H_0 = E\sum_i \left(X_i^{\uparrow} + X_i^{\downarrow} + 2X_i^2\right) + U\sum_i X_i^2 + \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^{+} c_{\vec{k}\sigma}, \tag{2}$$

$$H_1 = H_a + H_b, \tag{3}$$

$$H_2 = H_c + H_d + H_e, \tag{4}$$

при цьому

$$H_a = \sum_{i\vec{k}\sigma} \left(\eta_\sigma V\left(\vec{k}i\right) c_{\vec{k}\sigma}^{+} X_i^{0\sigma} + e.c.\right), \tag{5}$$

$$H_b = \sum_{i\vec{k}\sigma} \left(V\left(\vec{k}i\right) c_{\vec{k}\sigma}^{+} X_i^{\sigma 2} + e.c.\right), \tag{6}$$

$$H_c = 2\sum_{ij\vec{k}} \left(V\left(ij\vec{k},-\vec{k}\right) X_i^{\uparrow 0} X_j^{\downarrow 0} c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} + e.c.\right), \tag{7}$$

$$H_c = 2\sum_{ij\vec{k}} \left(V\left(ij\vec{k},-\vec{k}\right) X_i^{2\uparrow} X_j^{2\downarrow} c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} + e.c.\right), \tag{8}$$

$$H_e = 2\sum_{ij\vec{k}} \left(V\left(ij\vec{k},-\vec{k}\right)\left(X_i^{\downarrow 0} X_j^{2\downarrow} c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} - X_i^{2\uparrow} X_j^{\uparrow 0} c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow}\right) + e.c.\right), \tag{9}$$

тут $\varepsilon_{\vec{k}}$ - енергія електрона провідності із квазіімпульсом $\vec{\boldsymbol{k}}$, $V(i\vec{\boldsymbol{k}})$ і $V(ij\vec{\boldsymbol{k}},-\vec{\boldsymbol{k}})$ – матричні елементи, які описують відповідно “одноелектронну” і “двоелектронну” гібридизацію “зонних” і “локалізованих” електронів. X_i^{kl} – оператори описують переходи між станами вузлві локалізованої підсистеми, $c_{\vec{k}\sigma}^{+}$, $c_{\vec{k}\sigma}$ - оператори народження і знищення електронів провідності зі спіном σ і квазіімпульсом $\vec{k}$. Якщо розглядається перехідний 3*d*-метал, то локалізована підсистема - 3*d*-електрони, а зонна підсистема – *s*-*p*-електрони (як і для розбавлених сплавів); для випадку, який реалізується в оксидах, локалізована підсистема – також 3*d*-електрони, а енергетична зона формується як 3*d*-підсистемою, так і 2*p*-електронами кисневої підсистеми та, можливо, 4*s*-електронами катіонної підсистеми; у сполуках на основі рідкоземельних елементів локалізована підсистема – це *f*-електрони, а зонні стани формуються *s*-*p*-*d*-електронами). До таких речовин можуть бути віднесені сполуки типу SmS, тверді розчини типу $Sm_{1-x}ReS$ (Re=Ga, Yb, Gd, Nd), системи з важкими ферміонами ($CeAl_3$, $CeCu_2Si$, $CeCu_6$, UPt, UBe_{13} та інші, див. у цьому зв’язку огляд [10]). Прикладом низьковимірної системи з важкими ферміонами може бути нещодавно синтезований методом молекулярної епітаксії шаруватий матеріал $CeIn_3$, в якому можливі квантові переходи [11].

Доцільність представлення гамільтоніанів андерсонівського типу через X_i^{kl}-оператори зумовлена зручністю математичного опрацювання таких

гамільтоніанів, зокрема, в методі функцій Гріна. На даний час, в рамках конфігураційних представлень вузькозонних гамільтоніанів розвинуто ряд методів [7, 12] розрахунку одноелектронного енергетичного спектру, які показали свою ефективність при дослідженнях електричних та магнітних властивостей вузькозонних сполук перехідних металів.

[1] А.В. Елецкий, Б.М. Смирнов // Усп. физ. наук , 1995, **165**, 977.
[2] N. Manini, E. Tosatti // E-print cond-mat/0602134.
[3] Ping Zhang et al // Phys. Rev. Lett., 2002, **89,** 286803.
[4] L. Dias da Silva et al // Phys. Rev. B, 2008, **78**, 153304.
[5] D.M. Poirier et al // Phys. Rev. B, 1993, **47**, 9870.
[6] O. Gunnarsson, E. Koch and R.M. Martin // Phys. Rev. B., 1997, **56**, 1146.
[7] Л. Дідух // Журн. фіз. досл., 1997, **1**, 241.
[8] Л.Д. Дидух, И.В. Стасюк // Физика металлов и металловедение, 1968, **26,** 582.
[9] Л.Д. Дидух, В.Д. Дидух, И.В. Стасюк // Укр. физ. журн., 1975, **20,** 97.
[10] Ю.А. Изюмов, Э.З. Курмаев // Усп. физ. наук, 2008, **178**, 25.
[11] H. Shishido et al // Science, 2010, **327,** 980.
[12] Л. Дідух // Вісник ТДТУ ім. І.Пулюя, 2009, 14, 180.