

УДК 537.312.62, 538.945

Л.Дідух, О.Крамар, Ю.Скоренький, Ю.Довгоп'ятий
(Тернопільський національний технічний університет ім. І.Пулюя)

ПРОГНОЗУВАННЯ СПЕЦИФІЧНИХ ВУЗЬКОЗОННИХ ЕФЕКТІВ В НОВИХ ПЕРСПЕКТИВНИХ МАТЕРІАЛАХ ТИПУ МОТТ- ГАББАРДІВСЬКИХ СИСТЕМ.

Термоелектричні властивості вузькозонних матеріалів дозволяють прогнозувати можливість їх використання в якості альтернативних джерел енергії та застосування в інших перспективних галузях. Пояснення дослідних даних вимагає докладного врахування зонної структури та сильних міжелектронних взаємодій, властивих таким системам. При високих температурах необхідність врахування електрон-фононої взаємодії значно ускладнює отримання коректного виразу для коефіцієнта термоелектрорушійної сили. В широкому інтервалі значень температури та концентрації носіїв струму відношення кореляційної функції "перенос енергії-перенос заряду" до кореляційної функції "перенос заряду - перенос заряду" ("струм-струм") є незалежним від температури, отже температурна залежність коефіцієнта термо-е.р.с. визначається головним чином температурною залежністю хімічного потенціалу. Поведінка хімічного потенціалу як функції температури та параметрів моделі суттєво залежить від форми незбуреної густини станів (ГС). Наші дослідження показують певні відмінності 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. Результати розрахунку коефіцієнта термоелектрорушійної сили на основі виразів для енергетичного спектру легованого мотт-габбардівського діелектрика дозволяють зробити висновок, що поведінка коефіцієнта термо-е.р.с. є характерною для металічного стану (і він є від'ємним), коли заповнення габбардівських підзон є малим і провідність теж є електронного типу. Для майже заповненої зони, коли провідність є дірковою, проявляється сильна кулонівська взаємодія і термо-е.р.с. має напівпровідниковий характер.

Таким чином в рамках однієї моделі вдається отримати різні значення (додатні чи від'ємні) та різні температурні залежності коефіцієнта термо-е.р.с. Це відкриває нові можливості використання сполук перехідних металів у фізиці та техніці. Так, створюючи у хімічно однорідному матеріалі градієнт концентрації носіїв струму (за допомогою легування, опромінення чи магнітного поля), можна отримати керовані ефекти появи термоелектрорушійної сили в замкнутому електричному колі (аналог ефекта Зеебека) та виділення теплоти (окремо від джоулевої) при протіканні струму через електричне коло (аналог ефекта Пельтьє). Підкреслимо, що в обох випадках йдеться про використання не пари матеріалів, а одного хімічно однорідного вузькозонного матеріалу, властивостями якого можна керувати завдяки особливостям його електронної будови. Також з'ясовано, що ефективні маси носіїв струму у матеріалах типу мотт-габбардівських систем є спін-залежними. Реалізація в системі феромагнітного впорядкування суттєво модифікує поведінку ефективних мас носіїв, поява намагніченості приводить до розщеплення ефективних мас носіїв з різними напрямками спінів, яке визначається особливостями незбуреної ГС та величиною магнітного поля. Було з'ясовано механізми впливу магнітного поля на провідність мотт-габбардівського матеріалу. Наші результати показують, що магнітне поле дозволяє контролювати величину струму в системі та, що найбільш важливо, досягати його спінової поляризації. Це відкриває перспективи у застосуванні такого ефекту у спінтроніці.