

УДК 537.611.44, 537.622.4

О. Крамар

(Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя)

ВПЛИВ ДЕФОРМАЦІЇ ГРАТКИ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ МОТТ-ГАББАРДІВСЬКОГО ФЕРОМАГНЕТИКА ПРИ РІЗНИХ ФОРМАХ НЕЗБУРЕНОЇ ГУСТИНИ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ

При прикладанні зовнішнього тиску до вузькозонного матеріалу кореляційні ефекти можуть бути коректно описані при умові врахування перенормування параметрів переносу за рахунок деформації кристалічної ґратки. Під дією зовнішнього тиску p залежність ширини зони від відносної зміни об'єму $u = \Delta V/V_0 \sim p$ (V_0 – об'єм елементарної комірки) можна записати у вигляді [1]: $w = w_0 \sqrt{1 + au}$, $a = (V_0/w_0) \cdot (\partial w/\partial V) < 0$, де w_0 – напівширина незбуреної зони. Отже інтеграли переносу в моделі мотт-габбардівського матеріалу з нееквівалентними підзонами [2] повинні бути перенормовані $t \rightarrow t \sqrt{1 + a_1 u}$, $\tilde{t} \rightarrow \tilde{t} \sqrt{1 + a_2 u}$, де a_2 має зміст аналогічний до a_1 . Подібне перенормування потрібно провести і для інших матричних величин, що описують трансляцію електрона між вузлами кристалічної ґратки. Для подальшого спрощення викладу розглянемо випадок $a_1 = a_2$, тобто підзони розширюються однаково.

Для аналізу впливу деформації ґратки на феромагнітні властивості мотт-габбардівського матеріалу спочатку на основі методу функцій Гріна було отримано квазічастинкові енергетичні спектри у випадку сильної кулонівської взаємодії. Далі одержані спектри було застосовано у процедурі мінімізації енергії основного стану, а також при розрахунку намагніченості для довільних температур (деталі розробленої методики описані у роботі [3]) при різних формах незбуреної густини електронних станів (ГС). У роботі показано, що при деформації ґратки під дією зовнішнього тиску чи легування аніонної підсистеми, яке може бути еквівалентне прикладанню тиску, характер зміни феромагнітних параметрів (намагніченості, температури Кюрі) залежить від форми ГС. Зокрема, у випадку напівеліптичної ГС стабільність феромагнітного стану лише незначно підвищується у всьому концентраційному інтервалі існування спонтанного магнітного моменту, причому збільшення різниці енергій парамагнітного та феромагнітного станів ΔE^{FM} максимальне в області піку цієї залежності. Для простої кубічної (sc) ґратки при заповненні зони n , близькому до половинного, величина ΔE^{FM} також збільшується, однак при $n < 2/3$ стабільність феромагнітного впорядкування дещо послаблюється, що має наслідком незначне зменшення намагніченості та спадання температури Кюрі при збільшенні параметра деформації au . У цьому зв'язку відзначимо, що для вузькозонної системи $\text{CoS}_{2-x}\text{Se}_x$ з кубічною симетрією ґратки, в якій легування Se еквівалентне прикладанню зовнішнього тиску та зростанню ширини енергетичної зони, також спостерігається зменшення температури Кюрі [4]. Отримані нами результати при значеннях модельних параметрів системи ($zJ_{\text{eff}}/w=0,1$, $2w=1$ еВ) дають якісно правильний хід залежності температури Кюрі T_C від тиску та її кількісно відповідні експериментальним значення.

Перелік посилань

1. Григорчук Р.А., Стасюк И.В. // Укр. физ. журн. – 1980. – Т.25. – № 3. – С.404-410.
2. Didukh L. // Acta Physica Polonica B. – 2000. – vol. 31.- № 12. – P.3097-3133.
3. Didukh L., Skorenkyu Yu., Kramar O. // Condensed Matter Physics.- 2008.- vol. 11.- No. 3(55).- pp. 443-454.
4. Goto T., Shindo Y., Takahashi H. // Phys. Rev. B.- 1997.- vol. 56.- pp. 14019-14028; Yamada H., Fukamichi K., Goto T. // Phys. Rev. B.- 2001.- vol. 65.- pp. 024413(1-6).