

УДК 537.312; 538.9; 539.21

**Л. Дідух, Ю. Скоренький, О.Крамар, Ю. Довгоп'ятий.**

(Тернопільський державний технічний університет імені Івана Пулюя)

## **УМОВИ РЕАЛІЗАЦІЇ ЗАРЯДОВОГО ВПОРЯДКУВАННЯ В МОДЕЛІ МОТТ-ГАББАРДІВСЬКОГО МАТЕРІАЛУ З КОРЕЛЬОВАНИМ ПЕРЕНОСОМ**

Дана робота продовжує теоретичні дослідження ефектів міжелектронних взаємодій у вузькозонних матеріалах на основі узагальненої моделі з корельованим переносом електронів. Застосуванням методики ефективного гамільтоніану [1] дозволяє виявити механізми, відповідальні за формування різних типів електронних впорядкувань в сполуках перехідних металів. Унікальність властивостей оксидів перехідних металів проявляється, зокрема, і в існуванні кристалів, в яких у певному інтервалі температур реалізується зарядове впорядкування, тобто стан з періодичним розподілом заряду по вузлах катіонної підгратки (наприклад, у фазах Магнелі  $V_xO_{2x-1}$ ). Важливо зазначити, що перехід з впорядкованого у невпорядкований стан при певній критичній температурі (температурі Вервея) супроводжується переходом метал-діелектрик.

Для розрахунку енергетичного спектру електронної підсистеми застосовано узагальнену процедуру проектування [2] в ланцюжках рівнянь для функції Гріна. На основі отриманого спектру досліджено залежності параметра зарядового впорядкування, температури Вервея як функцій параметрів в моделі невиродженої енергетичної зони та встановлено критерій переходу діелектрик-метал у сполуках із зарядовим впорядкуванням. З одержаної системи рівнянь для розрахунку параметра орбітального впорядкування та хімічного потенціалу слідує залежність вказаних характеристик від температури, прикладеного тиску та легування катіонної підсистеми. Зокрема, при зростанні температури за рахунок перебудови енергетичного спектру (підзони перекриваються, енергетична щільність зникає) відбувається перехід між діелектричною фазою, в якій реалізується зарядове впорядкований стан іонів  $V^{3+}$  і  $V^{4+}$ , та металічною фазою, у якій впорядкування відсутнє. Зміна параметра міжвузлової кулонівської взаємодії  $V/w$  суттєво впливає на величину інтервалу електронних концентрацій  $n$ , в якому спостерігається зарядове впорядкування; критичне значення  $n$  швидко зменшується із зростанням  $V/w$ , так само швидко зростає значення температури Вервея у області максимуму. Показано, що при різних заповненнях підзони темп зростання температури Вервея при збільшенні параметра міжвузлової кулонівської взаємодії  $V/w$  суттєво відрізняється і є тим більшим, чим меншою є електронна концентрація. Це дає можливість ефективно керувати величиною критичної температури переходу у зарядово впорядкований стан шляхом прикладання зовнішнього тиску (при цьому відношення  $V/w$  зменшується). Досліджено вплив корельованого переносу на стабільність зарядового впорядкування та критичну концентрацію, при якій відбувається перехід у зарядово-впорядкований стан. Отримані результати дозволяють побудувати фазові діаграми переходу діелектрик-метал в системах із зарядовим впорядкуванням (типу фаз Магнелі).

### **ЛІТЕРАТУРА:**

1. Didukh L., Kramar O., Skorenkyu Yu. Metallic ferromagnetism in a generalized Hubbard model // *New Developments in Ferromagnetism Research*. Ed.: V.N. Murray. Nova Science Publishers, Inc. , 2005, pp. 39-80.
2. Didukh L. A modified form of the polar model of crystals // *Acta Physica Polonica B*.- 2000.- vol.31, No. 12, p.3097-3133.