

УДК 539.2

Морозов Ю. – ст. гр. МФ

Тернопільський національний педагогічний університет імені В. Гнатюка

ДОСЛІДЖЕННЯ ЕНЕРГІЇ ЗВ'ЯЗКУ МОТТ-ГАББАРДІВСЬКОЇ СИСТЕМИ МЕТОДОМ ДІАГОНАЛІЗАЦІЇ МАЛИХ КЛАСТЕРІВ

Науковий керівник: к.ф.-м.н., доц. Скоренький Ю.Л.

Yu. Morozov

Ternopil Volodymyr Hnatyuk National Pedagogical University

INVESTIGATION OF MOTT-HUBBARD SYSTEM BINDING ENERGY BY SMALL CLUSTER HAMILTONIAN DIAGONALIZATION

Supervisor: Dr. Yu. Skorenkyu

Ключові слова: енергія зв'язку, сильні міжелектронні взаємодії.

Keywords: binding energy, strong electron interactions.

Незважаючи на видиму простоту гамільтоніана, модель Габбарда використовується для опису надзвичайно широкого класу явищ – від магнітних типів впорядкування в системах сильно взаємодіючих електронів до високотемпературної надпровідності [1]. Узагальнення цієї моделі [2] шляхом врахування особливостей трансляційних явищ у сполуках перехідних металів дозволило дослідити перехід метал-діелектрик та інші ефекти міжелектронних взаємодій. Крім аналітичних, для дослідження моделі Габбарда широко застосовуються числові методи, наприклад, метод точної діагоналізації [3], метод Монте-Карло [4].

В цій роботі, шляхом діагоналізації кластерів, в межах яких електрони описуються гамільтоніаном моделі [2], досліджено залежність енергії зв'язку електронів від кількості електронів на кластері та показано, що вже навіть для малих кластерів спостерігається немонотонна концентраційна залежність та асиметрія відносно половинного заповнення.

1. Mario Rasetti. The Hubbard Model: Recent Results – World Scientific, 1991. – 232p.
2. Дідух Л.Д. Модель вузькозонного матеріалу з електронно-дірковою асиметрією // Журнал фізичних досліджень. – 1997. – Т.1. – № 2. – С.241-250.
3. Wei-Feng Tsai. Inhomogeneous Hubbard Models. Dissertation for the degree of Doctor of Philosophy in Physics – University of California, Los Angeles, 2008. – 141p.
4. Yong-Jun Liu, Jin-Ming Dong, Chang-De Gong. Calculation of the Binding Energy in the One-Dimensional Hubbard Model by the VMC Method // Communications in Theoretical Physics – 1994. – Vol. 21(4). – p.403.