

Секція: ФІЗИКА

Керівники: **проф. Л.Дідух, доц. Л.Скоренький**

Секретар: **О. Сіткар**

УДК 538.1

Л. Дідух

(Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя)

НЕСЕМИТРИЧНА T-J-МОДЕЛЬ: ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ В СИЛЬНОСКОРЕЛЬОВАНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СИСТЕМАХ У КВАЗІКЛАСИЧНОМУ НАБЛИЖЕННІ

Відомо, що базова модель для опису сильноскорельованих електронних систем (ССЕС – оксиди, сульфіді, селеніди перехідних металів, фулерени та ін.) модель Хаббарда і широко відома t - J -модель симетричні щодо електрон-діркової замін. Так, наприклад, за моделлю Хаббарда фізичні властивості легованого мотт-хаббардівського діелектрика (ЛМХД) з дірковим типом провідності такі самі, як і у ЛМХД з електронним типом провідності (за рівності концентрації відповідних носіїв). Насправді ж, в багатьох матеріалах вказаного класу електрон-діркова симетрія (ЕДС) відсутня, зокрема, у високотемпературних надпровідних матеріалах (ВТНМ) область існування антиферромагнітного впорядкування суттєво ширша в ВТНМ електронного типу, ніж в ВТНМ діркового типу.

У цій роботі показано, що природне пояснення відсутності ЕДС в ССЕС можна дати в рамках модифікованої форми полярної моделі (МФПМ) металу, запропонованої в роботах [1, 2].

Важливою особливістю МФПМ є перенормування інтегралів переносу електронів за рахунок електрон-електронних взаємодій (врахування так званого корельованого переносу двох типів). При цьому модуль ефективного інтегралу переносу зменшується із зростанням концентрації електронів, і ЛМХД при переході системи із стану діркової до електронної провідності ширина зони може різко зменшитися. Наслідком цього може бути і різка зміна енергії активації, величини провідності, величини і знаку термоерс.

У застосуванні до фазових переходів антиферромагнетизм-парамагнетизм, зарядовпорядкований стан – невпорядкований стан врахування корельованого переносу може привести до суттєвого розширення концентраційної області існування впорядкованої фази у ЛМХД. Так, наприклад, умова існування АФ-фази у ЛМХД діркового типу визначатиметься умовою (при $T=0$)

$$zJ > c_1 w_1$$

а у ЛМХД електронного типу – умовою

$$zJ > c_2 w_2$$

де z – число найближчих сусідів, J – обмінний інтеграл, c_1, c_2 – концентрації дірок і електронів, w_1 і w_2 – відповідні ефективні ширини зон (у випадку моделі Хаббарда $w_1 = w_2$). Оскільки w_2 може бути суттєво меншим, ніж w_1 , то видно, що область існування АФ-фази в матеріалах електронного типу провідності ширша, ніж в області з дірковим типом провідності. На цій основі можна пояснити відсутність ЕДС у ВТНМ. Існування антиферромагнітного впорядкування (АФ-впорядкування) у фазах Магнелі ванадію у широкому інтервалі концентрації носіїв у d -зоні знаходить також пояснення. Ці міркування можна поширити і на зарядовпорядковані системи та на температури відмінні від абсолютного нуля, та на врахування зовнішніх впливів. При цьому використовується квазікласичне наближення, описане в роботах [1, 2].

1. Didukh L. Condens. Matter Phys. – 1998. – Vol. 1. – № 1 (13). – P. 125–144.
2. Didukh L. Acta Physica Polonica B. – 2000. – Vol. 31. – № 12. – P.1–36.