

ПРО ПЕРЕХОДИ АНТИФЕРОМАГНЕТИК-ПАРАМАГНЕТИК І ДІЕЛЕКТРИК-МЕТАЛ В ФАЗАХ МАГНЕЛІ ВАНАДІЮ

Л.Дідух, В.Дідух

Досліджується система електронів у вузькій частково заповненій зоні провідності. Отриманий ефективний гамільтоніан системи, який містить надобмінну взаємодію та міжатомну кулонівську взаємодію, що стабілізують, за певних умов (залежних від ступеня заповнення зони та співвідношення між шириною зони і кулонівськими взаємодіями), антиферомагнітне та зарядове впорядкування, спостережуване в фазах Магнелі ванадію.

Квазічастинковий енергетичний спектр розраховується методом функцій Гріна з використанням узагальненого наближення середнього поля [1]; такий підхід приводить до коректної гомеоплярної границі і описує перехід діелектрик-метал. При цьому приймається, у згоді із експериментальними даними для фаз Магнелі ванадію, що температура Нееля набагато менша від температури переходу із зарядовпорядкованого стану в неупорядкований. Із отриманого виразу для функції Гріна отримані рівняння для розрахунку температур Нееля і Вервея T_v ; останню можна ототожнити з переходом діелектрик-метал, поскільки при цьому зникає енергетична щільність у квазічастинковому спектрі. Концентраційна залежність температури Нееля при умові зарядового впорядкування суттєво відрізняється від виразу для температури Нееля в "стандартному" переході антиферомагнетизм-парамагнетизм [2]; розрахункові значення температури Нееля знаходяться у згоді із спостережуваними. Отримані вирази для T_v дозволяють пояснити спостережувані температури фазових переходів діелектрик-метал. Проведене порівняння даної методики розрахунку T_v з раніше запропонованими [2, 3].

1. Дідух Л.Д. Ефекти міжелектронних взаємодій в кристалах з вузькими зонами провідності // Дис. на здобуття вченого ступеня д-ра ф-м.н.-Львів, 1994. 398 с.
2. Дідух Л.Д. Упорядоченные состояния в материалах с узкими зонами проводимости // В кн.: Механизмы двухэлектронной динамики.- М., 1990.- С. 166-186.
3. Дідух В.Д.// УФЖ.- 1978.- Т. 23.- С. 1041.

ПЕРЕХІД ДІЕЛЕКТРИК-МЕТАЛ ІЗ ВРАХУВАННЯМ ЕЛЕКТРОН-ДЕФОРМАЦІЙНОЇ ВЗАЄМОДІЇ

Л.Дідух, Ю.Довгоп'ятий

Методика розрахунку енергетичного спектру у вузьких енергетичних зонах, що ґрунтується на узагальненому наближенні середнього поля [1] (і яка приводить до переходу діелектрик-метал на відміну від широко вживаного наближення Хаббард-І [2]), доповнена врахуванням самоузгодженого зв'язку між середньою трансляційною енергією системи і "спонтанною" деформацією гратки (електрон-деформаційний ефект [3]). У відповідності з цим ефективний інтеграл переносу є залежним від енергії трансляційного руху дірок і двійок, і, таким чином, при