

## 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 ґратки (електрон-деформаційний ефект [3]). У відповідності з цим ефективний інтеграл переносу є залежним від енергії трансляційного руху дірок і двійок, і, таким чином, при

половинному заповненні зони перехід із діелектричного стану в металічний може супроводжуватися "самостисканням" ґратки. Ініціювання переходу діелектрик-метал може відбутися за рахунок зовнішніх факторів, зокрема, зовнішнього тиску.

Розгляд ведеться на основі узагальненого вузькозонного гамільтоніана, який враховує залежність інтеграла переносу від концентрації електронів та концентрації полярних станів. Отриманий енергетичний спектр є температурно залежним (через концентрацію полярних станів) і для напівзаповненої зони приводить до виразу для енергетичної щільності, формально еквівалентному роботі [1], особливістю якого є залежність ширини зони від концентрації полярних станів внаслідок врахування електрон-деформаційної взаємодії.

На основі отриманих результатів досліджується перехід діелектрик-метал, розраховані залежності концентрації носіїв струму і провідності від параметрів системи, тиску і температури.

1. Дідух Л.Д. Ефекти міжелектронних взаємодій в кристалах з вузькими зонами провідності.- Дис. д-ра фіз.-мат. наук. Львів, 1994.- 398 с.
2. Hubbard J. Proc.Roy.Soc.- 1963.- A267.- P. 238.
3. Стасюк І.В., Григорчук Р.О.// УФЖ.- 1980, N 26.- С. 404.

## ФІЗИЧНА ПРИРОДА САМООРГАНІЗАЦІЇ І ТЕРТЯ О.Закалов, Ю.Паливода

В роботі розглянуті сучасні уявлення про фізичну природу самоорганізації і тертя як дисипативного процесу, методологія інформаційної механіки, яка дозволяє з єдиних позицій аналізувати процеси мікро- і макроруйнування одиничних об'єктів і статистичних параметрів надійності їх сукупності, закономірності утворення дисипативних структур, самоорганізації і руйнування трибосистем і зв'язку цих закономірностей з фізичною надійністю вузлів тертя машин і механізмів.

Досягнення сучасної фізики призвели до відкриття феномену самоорганізації, загального для живої і неживої природи [1,2]. Нарівні із зростанням ентропії в закритих термодинамічних системах (у відповідності з другим началом термодинаміки) в природі відбуваються і протилежні процеси утворення структур. Це упорядкування матерії відповідає зменшенню ентропії  $S$  і зростанню від'ємної ентропії (негентропії), яка еквівалентна інформації. Структуроутворення реалізується у відкритих системах при деякому критичному потоці  $\Phi_k$  енергії  $\epsilon$  і речовини (негентропії  $J$ ). При цьому відбуваються деградації енергії і речовини, тобто перехід до більш ентропійних форм. Однак зовнішній потік  $\Phi$  приводить і до утворення градієнтів (концентрації, температури, швидкості і т.п.), тобто до макроскопічної впорядкованості, а при  $\Phi = \Phi_k$  частинки, що хаотично рухаються, кооперуються і в межах деякої комірки їх рух стає упорядкованим (когерентним). Ці комірки є вже новими елементами (квазічастинками) системи, і представляють, так звану, дисипативну структуру [1]. Тут, по суті, нестійкість руху на