

АНАЛІТИЧНИЙ МЕТОД ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ АНТИФЕРОМАГНІТНОГО ВПОРЯДКУВАННЯ В МОДЕЛІ МОТТ-ГАББАРДІВСЬКОГО МАТЕРІАЛУ

В роботі проведений аналіз непрямих міжелектронних взаємодій у вузькозонних матеріалах, пов'язаних як з переносом заряду, так і з обміном між локалізованими магнітними моментами, який ґрунтується на методі ефективного гамільтоніану. Показано, що, оскільки ефективні інтеграли переносу залежать від параметра одноелектронної гібридизації $V(\vec{k})$ (більшого для „немагнітного” іона з меншою електровід'ємністю), то можна чекати, що електропровідність вища в тих сполуках типу металооксидів, в яких аніон має меншу електровід'ємність. Крім того, ефективні інтеграли обмінної взаємодії є порядку $V^4(\vec{k})$, отже в тих сполуках розглядуваного класу, в яких вища температура Кюрі (або Нееля), вища і електропровідність. Маємо наступний висновок: у сполуках, в яких $3d$ -оболонка заповнена менше, ніж наполовину (MnO_2) провідність повинна бути вища, ніж у сполуках MnO , NiO , де $3d$ -оболонка заповнена наполовину, або більше. При $T=0$ за відсутності носіїв струму як в катіонній, так і аніонній підсистемах реалізується феро- або антиферомагнітне впорядкування за рахунок непрямих (через аніони) обмінних взаємодій між локалізованими магнітними моментами. Типовий антиферомагнітний зв'язок здійснюється за рахунок механізму, еквівалентного делокалізованому непрямому обміну Андерсона. Феромагнітне впорядкування стабілізується за рахунок модифікованого (врахуванням p -зони) механізму Крамерса-Андерсона. Вираз для непрямой p - d -обмінної взаємодії вперше був отриманий в роботі [1] шляхом використання операторної форми теорії збурень Боголюбова-Тяблікова. У вибраній нами моделі непрямий p - d -обмінний інтеграл – додатний і може переважати прямий p - d -обмін. Особливістю отриманих виразів для складових ефективного обмінного інтеграла є наявність температурно залежних доданків як феро- так і антиферомагнітних типів.

В роботі розглянуто частково заповнену ($n < 1$) ВЗП для випадку, коли нижня і верхня підзони не перекриваються. Тоді для температур $T \leq T_N$ можна обмежитися розглядом нижньої підзони. Також необхідно взяти до уваги перенормування інтегралу переносу та міжвузлової обмінної взаємодії за рахунок як кореляційного переносу та непрямих взаємодій (через аніонну підсистему). В методі функцій Гріна з використанням процедури проектування для розрахунку енергетичного спектру отримано систему рівнянь для намагніченості та хімічного потенціалу, яку використано для розрахунку температури Нееля вузькозонного антиферомагнетика. Показано, що при реалістичних значеннях параметрів антиферомагнетизм зникає вже при низьких концентраціях носіїв діркового типу, тобто вже слабе легування відповідними домішками мотт-габбардівського діелектрика дестабілізує антиферомагнітне впорядкування. На цій основі можна пояснити залежність температури Нееля від концентрації носіїв струму (в магнітній підсистемі) у вузькозонних матеріалах, зокрема в сполуках $(V_{1-x}Ti_x)_2O_3$, Ni_xS і надпровідних кераміках.