

УДК 538.1

Л. Дідух¹, Ю. Морозов², Ю. Скоренький¹

¹Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

²Тернопільський національний педагогічний університет імені Володимира Гнатюка

МОДЕЛІ СИСТЕМ ЕЛЕКТРОНІВ З СИЛЬНИМИ ВЗАЄМОДІЯМИ ДЛЯ РОЗРАХУНКУ ЕНЕРГІЇ ЗВ'ЯЗКУ ПЕРЕХІДНИХ МЕТАЛІВ

L. Didukh¹, Yu. Morozov², Yu. Skorenkyu¹

MODELS OF ELECTRON SYSTEMS WITH STRONG CORRELATIONS FOR CALCULATION OF BINDING ENERGY OF TRANSITION METALS

Незважаючи на значний інтерес до сполук перехідних металів, зумовлений їх унікальними електричними властивостями та високою технологічністю, особливості енергії зв'язку 3d-перехідних металів досі не отримали повного пояснення. Вибір теоретичної моделі для опису властивостей електронної підсистеми повинен базуватися на глибокому аналізі її спостережуваних характеристик. В роботі [1] було показано, що для пояснення існування локалізованого магнітного моменту атомів групи заліза, розчинених у немагнітних металах, необхідно враховувати кулонівське відштовхування двох електронів на одному і тому ж центрі (в додаток до гібридаційної взаємодії між локалізованим станом і зоною провідності). В періодичній моделі Андерсона гібридація локалізованих і зонних станів приводить до ефективного переносу заряду в двох підзонах різної ширини. В роботі [2] була запропонована модель матеріалу з вузькою енергетичною зоною (3d-зона в перехідних металах та їх сполуках), яка узагальнювала зонну теорію врахуванням, як і у роботі [1], кулонівського відштовхування на одному вузлі. Узагальнення моделі Габбарда [2] є основою коректного опису переходу метал-діелектрик, магнітних та немагнітних типів електронного впорядкування. У роботах [3, 4] було показано, що для моделі з нееквівалентними габардівськими підзонами характерна електронно-діркова асиметрія, спостережувана у матеріалах із вузькими зонами провідності. Із цієї точки зору можна трактувати низку спостережуваних особливостей матеріалів з сильними міжелектронними взаємодіями [5].

У доповіді обговорено особливості застосування теоретичних моделей систем електронів із сильними кореляціями для розрахунку енергії зв'язку 3d-перехідних металів та їх сполук.

1. P.W. Anderson, Phys. Rev. – 1961. – Vol. 124. – P41.
2. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A – 1963. – Vol. 281, № 1369 – P. 238.
3. Didukh L. Condens. Matter Phys. – 1998. – Vol. 1. – № 1 (13). – P. 125.
4. Didukh L. Acta Physica Polonica B. – 2000. – Vol. 31. – № 12. – P.1.
5. L. Didukh, Yu. Skorenkyu, O. Kramar, Yu. Dovyhopaty / 20th General Conference of the condensed matter division of the European Physical Society : Book of abstracts. – Prague (Czech Republic), 2004. – P. 233.