

**УДК 539.2**

**Ю.М. Морозов**

Тернопільський національний педагогічний університет імені Володимира Гнатюка,  
Україна

## **МОДЕЛЮВАННЯ В ЗАДАЧАХ КВАНТОВОЇ СТАТИСТИЧНОЇ ФІЗИКИ СИСТЕМ З СИЛЬНИМИ МІЖЕЛЕКТРОНИМИ ВЗАЄМОДІЯМИ**

**Yu.M. Morozov**

### **MODELING OF SYSTEMS WITH STRONG ELECTRON INTERACTIONS IN QUANTUM STATISTICAL PHYSICS**

Моделювання є потужним засобом наукового пізнання. На теоретико-множинному рівні абстрактного опису можна отримувати досить загальні відомості про реальні системи [1]. Вивчення переходу від властивостей реальних об'єктів до властивостей системи є найважливішим завданням теорії систем. Властивість ізоморфності стосується структур систем і функцій їх елементів. Виникає проблема вибору або побудови системи, яка може бути моделлю досліджуваної системи. Одною з відкритих проблем в теорії систем є пояснення властивості емерджентності, коли з окремих елементів утворюється складна єдність цілого, нова сутність, властивості якої не є сумою властивостей складових.

Узагальнена модель Габбарда є математичною абстрактною моделлю, яка успішно використовується для опису широкого класу властивостей вузькозонних систем на основі перехідних металів (див. у цьому зв'язку [2]). Серед методів, які застосовувалися для аналізу властивостей цієї моделі, вкажемо аналітичні методи та чисельне моделювання [3,4] а також статистичне моделювання [5] (метод Монте-Карло) та метод діагоналізації малих кластерів [6].

В цій роботі на основі результатів попереднього дослідження [6] проведено статистичне моделювання та на цій основі проведено аналіз властивостей узагальненої моделі Габбарда.

#### **Література**

1. Томашевський В. М. Моделювання систем. – К.: Видавнича група ВНУ, 2005. – 352с.
2. Дідух Л.Д. Модель вузькозонного матеріалу з електронно-дірковою асиметрією // Журнал фізичних досліджень. – 1997. – Т.1. – № 2. – С.241-250.
3. Kramar O., Dohopyaty Yu. Skorenkyu Yu., Didukh L. Mott transition, ferromagnetism and conductivity in the generalized Hubbard model // Acta Physica Polonica A – 2007. – Vol. 111. – p. 635-644.
4. Kramar O., Didukh L., Skorenkyu Yu. Electron correlations in narrow energy bands: modified polar model approach // Condensed Matter Physics – 2008. – Vol. 11. – p. 443-454.
5. Yong-Jun Liu, Jin-Ming Dong, Chang-De Gong. Calculation of the Binding Energy in the One-Dimensional Hubbard Model by the VMC Method // Communications in Theoretical Physics – 1994. – Vol. 21(4). – p.403.
6. Морозов Ю. Дослідження енергії зв'язку мотт-габбардівської системи методом діагоналізації малих кластерів // Матеріали □ Всеукраїнської студентської науково-технічної конференції „Природничі та гуманітарні науки. Актуальні питання“, 20-21 квітня 2016 року — Т. : ТНТУ, 2016 — Том 1. — С. 204.