

ВИКОРИСТАННЯ ЧИСЕЛЬНИХ МЕТОДІВ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧ ФІЗИКИ СИЛЬНОСКОРЕЛЬОВАНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СИСТЕМ

Сучасна фізика конденсованого стану речовини зосереджена на складних багаточастинкових системах, в яких існують найрізноманітніші взаємодії, причому послідовний розгляд властивостей моделей таких систем математично досить громіздкий. Зокрема, електричні та магнітні властивості вузькозонних матеріалів – електронних систем із сильними кореляціями, далеко не завжди можуть бути адекватно описані аналітично. У зв'язку з цим на передній план [1] виходять чисельні методи у застосуванні до математичних моделей реальних спінових систем.

У даній роботі досліджено клас чисельно-розрахункових задач, які виникають при розгляді узагальненої вузькозонної моделі з корельованим переносом електронів [2], зокрема можливого переходу діелектрик-метал (ПМД) та різних типів електронних впорядкувань (як магнітних, так і немагнітних). Дослідження ПМД пов'язане з необхідністю самоузгодженого розрахунку концентрації полярних станів та хімічного потенціалу в моделі на основі системи нелінійних параметричних інтегральних рівнянь (в якості констант виступають енергетичні параметри моделі, нормована температура та концентрація носіїв). Оптимальним способом розв'язування відповідної системи рівнянь виступає поєднання [3] методу покоординатного спуску та золотого перерізу для аналізу відповідної цільової функції декількох змінних (досить часто застосовують також традиційний метод перебору).

У випадку магнітних типів впорядкування задача ускладнюється можливістю існування декількох мінімумів цільової функції, які відповідають можливим магнітним розв'язкам, що зумовлює необхідність розбиття області визначення системи на інтервали та перевірки існування розв'язку рівнянь на кожному з них. У підсумку масив розв'язків аналізується з точки зору мінімуму енергії основного стану (чи вільної енергії) системи. Цікавою є можливість подальшого розрахунку статичної провідності (використовується чисельне інтегрування) та спин-залежних ефективних мас носіїв.

Окремо виділяється завдання розрахунку температур переходів з електронновпорядкованих станів у невпорядковані, що математично спирається на необхідність отримання надійного розв'язку на основі методу Brenta-Деккера [4], який поєднує швидкість методу Ріддера та гарантовану збіжність методу бісекції.

З використанням описаних методик було отримано як намагніченість та температуру Кюрі вузькозонного ферромагнетика, так і здійснено попередній аналіз можливостей чисельного дослідження зарядового та орбітального впорядкування в моделі системи з сильними кореляціями при застосуванні довільної форми незбуреної густини електронних станів.

Література

- [1] Кашурников В.А., Красавин А.В. Численные методы квантовой статистики.- М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010.- 609 с.
[2] Didukh L. A modified form of the polar model of crystals // Acta Physica Polonica B.- 2000.- vol.31, No. 12. – pp. 3097-3133.
[3] Боглаев Ю. П. Вычислительная математика и программирование.- М.: Высш. шк., 1990.- 544 с.
[4] [Presshttp://www.amazon.com/Numerical-Recipes-3rd-Edition-Scientific/dp/0521880688](http://www.amazon.com/Numerical-Recipes-3rd-Edition-Scientific/dp/0521880688) W.H., Teukolsky S.A.
<http://www.amazon.com/Numerical-Recipes-3rd-Edition-Scientific/dp/0521880688>, Vetterling W.T.
<http://www.amazon.com/Numerical-Recipes-3rd-Edition-Scientific/dp/0521880688>, Flannery B.P. Numerical recipes in C: the art of scientific computing.- Cambridge University Press, 1992.- 925 p.