

ЛЬВІВСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ім. Івана Франка

На правах рукопису

ДІДУХ
Леонід Дмитрович

ЕФЕКТИ МІЖЕЛЕКТРОННИХ
ВЗАЄМОДІЙ В КРИСТАЛАХ
З ВУЗЬКИМИ ЗОНАМИ ПРОВІДНОСТІ

01.04.07 - фізика твердого тіла

А в т о р е ф е р а т
дисертації на здобуття наукового ступеня доктора
фізико-математичних наук

Львів - 1994



00756795 (\$)

AB 30,623

Робота виконана у Тернопільському приладобудівному інституті.

Офіційні опоненти:

- доктор фізико-математичних наук,
професор **Владіміров В.В.**
- доктор фізико-математичних наук
Гурський З.О.
- доктор фізико-математичних наук,
професор **Мельничук С.В.**

Провідна організація

— Інститут проблем матеріалознавства
НАН України (м. Київ).

Захист відбудеться « 14 » 09 1994 р. о « 15¹⁵ »
год. на засіданні Спеціалізованої ради Д.068.26.05 при Львівському державному університеті ім. І.Франка за адресою: 290005, м. Львів, вул. Кирила і Мефодія, 8а, Велика фізична аудиторія.

З дисертацією можна ознайомитися в науковій бібліотеці Львівського державного університету ім. І.Франка (м. Львів, вул. Драгоманова, 5).

Автореферат розісланий « 28 » 07 1994 р.

Вчений секретар Спеціалізованої ради
доктор фізико-математичних наук,
професор

А.Є.Носенко

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Інтенсивні дослідження, як теоретичні, так і експериментальні, матеріалів з вузькими зонами провідності (ВЗП) (прикладом їх є оксиди, сульфіді і селеніді перехідних металів), які проводяться в останні 25-30 років, викликані унікальними фізичними властивостями цих матеріалів.

Спостережувані у багатьох сполуках цього класу переходи діелектрик-метал, різноманітність магнітних властивостей, взаємозв'язок електричних і магнітних характеристик, наявність немагнітних типів електронного впорядкування - властивості матеріалів з ВЗП, які викликають великий науковий і практичний інтерес. Відкриття високотемпературної надпровідності в міднооксидних сполуках є новим яскравим підтвердженням перспективності вузькозонних матеріалів (ВЗМ).

На даний час немає сумнівів, що особливості фізичних властивостей вузькозонних систем, викликані міжелектронними взаємодіями, важливість яких була обґрунтована в класичних працях С.Шубіна і С.Вонсовського, М.Боголюбова, Н.Мотта. Сучасний етап досліджень пов'язаний, насамперед, з роботами Дж.Хаббарда і П.Андерсона, в яких було показано, що внутрішньоатомна кулонівська взаємодія кардинально модифікує енергетичний спектр систем з локалізованими магнітними моментами. Разом з тим, незважаючи на величезну кількість робіт по дослідженню фізичних властивостей систем із вузькими енергетичними зонами, савдання побудови послідовної теорії електричних і магнітних властивостей ВЗМ залишається одним із центральних у фізиці твердого тіла. В останній час коло питань, пов'язаних з кореляційною проблемою значно розширилося, а необхідність у поглибленому вивченні властивостей вузькозонних систем сильно зросла з відкриттям металоксидів із високою температурою надпровідного переходу (ВТНП).

Проблеми, які виникають при цьому, можна поділити на три групи: перша - побудова моделей вузькозонних матеріалів на мові модельних гамільтоніанів, адекватних вузькозонним матеріалам, друга - пошуки методів ефективного математичного опрацювання модельних гамільтоніанів, третя - розробка послідовної теорії кореляційних ефектів у вузьких енергетичних зонах і пояснення чаш цієї основі особливостей фізичних властивостей матеріалів із ВЗП.

Дві перші групи проблем вперше були поставлені і частково

вирішені С.Шубіним і С.Вонсовським в їх теорії полярної моделі металу¹⁾. Проте, хоча полярна модель виявилася надзвичайно багатоманітною за своїм фізичним змістом²⁾ завдяки ідеї "конфігураційного" опису (яка стала базовою для модельних розглядів сполук із Zd-елементами - Самсонов В.Г., Прядко І.Ф., Прядко Л.Ф. Електронная локалізація в твердому тілі. - М., 1976), математична природа конфігураційного представлення в рамках традиційної форми полярної моделі не була з'ясована належним чином.

Послідовна теорія кореляційних ефектів у вузьких зонах провідності повинна дати, насамперед, вирішення проблеми енергетичної щільності в одночастинковому енергетичному спектрі. Хоча даній проблематиці і присвячена велика кількість робіт, питання коректного опису переходу діелектрик-метал залишається в центрі уваги дослідників (актуальність проблеми ілюструють роботи^{3,4)}).

На даний час немає переконливих доказів, за виключенням деяких окремих випадків, наявності або відсутності феромагнетизму в орбітально невивродженій моделі Хаббарда. Поряд з поширеною на даний час точкою зору, за якою феромагнетизм у ВЗП може реалізуватися поза механізмом міжатомного обміну за рахунок особливостей трансляційної енергії електронів у вузьких зонах провідності, існують роботи, в яких ставиться під сумнів "трансляційний" феромагнетизм.

В полі зору дослідників залишаються і питання, пов'язані із послідовним описом фізичних властивостей вузькозонних матеріалів, в яких можуть реалізуватися немагнітні типи електронного впорядкування - зарядове та орбітальне. Тут, зокрема, важливим, як з точки зору теорії, так і з погляду на перспективу практичного використання, є завдання пояснення зміни температури фазового переходу діелектрик-метал, викликаного зарядовим розвпорядкуванням у фазах Магнелі $V O_{n-1}$. Невирішеним є і

1) Schubin S., Wonsowsky S. // Proc.Roy.Soc.- 1934.- A145.- P. 159-180.

2) Можливості полярної моделі демонструють, зокрема, недавні роботи: Вонсовский С.В., Свирицкий М.С., Свирицкая Л.М. // ФМН.- 1992.- № 10.- С. 49-60, 61-72; № 12.- С. 41-53.

3) Зайцев Р.О., Кузьмин Е.В., Овчинников С.Г. // УФН.- 1986.- 148.- С. 603-636.

4) Алястратов А.Л., Димашко В.А., Подольский В.С. // Письма в ЖЭТФ.- 1993.- 57.- С. 313-316.

питання про реалізацію орбітального впорядкування у вузькозонних матеріалах.

Коло проблем, означених вище, в тій або іншій формі пов'язане з проблемою високотемпературної надпровідності в металооксидах. Незважаючи на великі успіхи на шляху з'ясування природи надпровідності в цих матеріалах, ряд питань принципового плану залишаються невирішеними через надзвичайну складність проблеми.

Не вдаючись тут в подальшу конкретизацію актуальних питань, пов'язаних із проблемою дослідження кореляційних ефектів у ВЗП, можна, в підсумку, твердити, зважаючи на наукові та прикладні аспекти проблеми, що дослідження ефектів міжелектронних кореляцій у вузьких енергетичних зонах є важливим напрямом у фізиці твердого тіла.

Мета роботи. В узагальненій формі метою роботи є дослідження ефектів міжелектронних взаємодій у вузьких енергетичних зонах. У цьому зв'язку завданнями роботи є:

1. Формулювання моделей вузькозонних матеріалів (на нові модельних гамільтоніанів).

2. Розробка нових математичних підходів до опрацювання модельних гамільтоніанів:

- введення операторів переходу;
- встановлення алгоритму переходу від електронного представлення до представлення в операторах переходу;
- формулювання нової форми теорії збурень для переходу від модельних андерсон-хаббардівських гамільтоніанів до ефективних гамільтоніанів.

3. Отримання коректного квазічастинкового енергетичного спектру у ВЗП.

4. Пояснення на основі розвинутої теорії особливостей електричних і магнітних властивостей матеріалів із вузькими зонами провідності.

Наукова новизна роботи -

1. Огрунтована принципова необхідність узагальнення моделі Хаббарда для опису особливостей фізичних властивостей ВЗМ. Зокрема, показано, що кореляційний перенос перенормує зонний інтеграл переносу; внаслідок цього ефективний інтеграл переносу є концентраційно залежним, що приводить до ряду важливих наслідків.

2. Вперше (на прикладі полярної моделі і періодичної моделі Андерсона) вирішена проблема переходу від електронних форм

модельних гамільтоніанів до їх конфігураційного представлення. У цьому зв'язку -

Введені оператори переходів між конфігураційними станами полярної моделі. Вперше встановлений зв'язок між електронними операторами та операторами переходу (операторами Хаббарда).

Вперше показано, що належна ідентифікація операторів дозволяє встановити еквівалентність між операторами переходу і відповідними парами операторів Шубіна-Вонсовського.

3. Впроваджений ефективний метод опрацювання модельних гамільтоніанів з андерсон-хаббардівськими центрами - метод переходу до ефективного гамільтоніану. В основі методу лежить конфігураційна форма модельних гамільтоніанів та зручна форма теорії збурень, яка дозволяє брахувати, як віртуальні, переходи електронів у високоенергетичні стани на андерсон-хаббардівських центрах. Для окремого випадку мотт-хаббардівського діелектрика запропонована форма теорії збурень еквівалентна операторній формі теорії збурень Боголюбова.

Вперше отримані ефективні гамільтоніани у періодичній моделі Андерсона, p-d-моделі і їх узагальненнях.

Вперше отриманий t-J (за сьогодишньою термінологією) гамільтоніан.

Вперше дане формулювання ефективних гамільтоніанів в представленні χ_1^{kl} -операторів.

Вперше використані ефективні гамільтоніани в χ_1^{kl} -представленні для розгляду проблем феро- і антиферромагнетизму та зарядового впорядкування у вузьких енергетичних зонах.

4. Розвинутий новий підхід до розгляду енергетичного спектру у вузьких енергетичних зонах, який ґрунтується на узагальненому наближенні Хартрі-Фокса та запропонованому в роботі варіанті методу наближеного вторинного квантування. Підхід дозволяє дати коректний опис електричних і магнітних властивостей матеріалів із вузькими зонами провідності; тут, зокрема, отримується (на відміну від відомих наближень) коректний перехід до гомеоплярної границі ($U \rightarrow \infty$, $n=1$) та перехід діелектрик-метал.

5. Вперше показано, що врахування переносу електронів, зумовленого електрон-електронною взаємодією, приводить до електрон-діркової асиметрії, спостережуваної у матеріалах із вузькими зонами провідності. Показано, що кореляційний перенос може суттєво модифікувати енергетичний спектр хаббардівських підзон.

6. На основі узагальненої вузькозонної моделі розрахована залежність енергії зв'язку у вузьких енергетичних зонах від ступеня заповнення зони та параметрів системи, що дозволяє пояснити спостережувані особливості залежності енергії зв'язку від атомного номера у перехідних металах.

7. Запропонована методика розрахунку зміни ширини енергетичної щільності у системах із вузькими енергетичними зонами під дією зовнішніх впливів. Отримані вирази для ширини забороненої зони у квазічастинковому спектрі, залежні від зовнішніх факторів – температури, тиску, легування, зовнішнього магнітного поля. Показано при цьому, що специфіка моделі може привести до ряду наслідків, принципово відмінних як від результатів зонної теорії, так і стандартних результатів моделі Хаббарда. Показано, зокрема, що спостережуваний у NiS_2 і $(\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x)_2\text{O}_3$ перехід із стану парамагнітного металу у стан МХД при підвищенні температури може бути пояснений запропонованою теорією.

8. Розроблена методика розрахунку енергетичного спектру вузькозонних систем при наявності зовнішнього магнітного поля. На відміну від попередніх розглядів у рамках стандартної форми полярної моделі та її модифікацій запропонований підхід дозволяє вивчати властивості не лише напівпровідникових матеріалів, але і вузькозонних систем із металевим типом провідності та систем, в яких можливий фазовий перехід напівпровідник-метал. Для випадку сильного магнітного поля враховано квантування по Ландау. Отриманий вираз для енергетичної щільності між хаббардівськими підзонами і показано, зокрема, що, на відміну від аналогічного виразу у зонній теорії, зееманівська енергія є фактором, який дестабілізує металевий стан. Показана можливість керування фазовим переходом діелектрик-метал в системах типу NiS_2 , $(\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x)_2\text{O}_3$ за допомогою магнітного поля.

9. Запропонований підхід до розгляду провідності у вузькій енергетичній зоні, який дозволяє розраховувати як провідність легованих мотт-хаббардівських діелектриків, так і вузькозонних систем, в яких можливий перехід діелектрик-метал під дією зовнішніх впливів. Показано, що для концентрацій електронів, при яких $\partial\sigma/\partial n$ має певний знак, провідність можна представити у формі Друде-Лоренца з ефективною масою, залежною від ступеня заповнення зони; зміна знаку похідної $\partial\sigma/\partial n$ вказує на зміну (n-p) типу провідності. На цій основі пояснюється зміна типу провідності, спостережувана, зокрема, у сполуках VO_x , $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$.

10. Вперше показано, що використання наближення Хаббарда-І до розгляду вузькозонних феромагнетиків (із врахуванням міжатомної обмінної взаємодії) приводить до невірних результатів якісного характеру. При цьому запропоновані підходи, які дозволяють отримати коректні рівняння для намагніченості і вираз для температури Кюрі, залежний від ступеня заповнення зони.

11. Запропонована нова форма моделі феромагнетика з колективізованими (за умови слабкої внутрішньоатомної взаємодії) електронами, особливості якої, зумовленою врахуванням кореляційного переносу, є залежність ефективного переносу від намагніченості і концентрації електронів та наявність спин-залежного зсуву центрів підзон електронів. Ефективний інтеграл обміну та температура Кюрі виявляються при цьому концентраційно-залежними.

12. Вперше отримано, що в рамках орбітально спродженої моделі із сильними внутрішньоатомними кулонівськими та обмінними взаємодіями існує принципово новий механізм феромагнітного впорядкування, пов'язаний непрямыми переходами електронів (через віртуальні хундівські стани). Ефективність механізму зростає при збільшенні ступеня легування мотт-хаббардівських феромагнетиків.

13. Показано, що пропонується теорія феромагнетизму у вузьких енергетичних зонах може пояснити нетипову (з точки зору обмінної моделі) залежність температури Кюрі від складу у легуваних вузькозонних феромагнетиках. Так, отриманий вираз для T_c дозволяє пояснити експериментально спостережувану залежність T_c від концентрації локалізованих магнітних моментів у змішаних дисульфідах $Co_x Fe_{1-x} S_2$, $Co_x Ni_{1-x} S_2$ та феромагнітних шпінелях $Gd_{1-x} Cr_x CuS_4$.

14. Запропонована методика розрахунку температур фазових переходів (Кюрі, Нееля, Вервея, Рот) в системах з електронним впорядкуванням. Отримані вирази для температур фазових переходів у вузьких частково заповнених зонах провідності дозволяють пояснити залежність температури Нееля у ВТНП-металооксидах (в антиферомагнітній області) від ступеня легування, залежність температури фазового переходу від складу у фазах Магнелі $V_n O_{2n-1}$, відсутність орбітального впорядкування у сполуці CoS_2 (ймовірно орбітально впорядкованої сполуки).

15. Запропоновані моделі вузькозонних надпровідних матеріалів, які дозволяють пояснити, зокрема, вузькість енергетичних зон в надпровідникових металооксидних матеріалах як

діркового та і електронного типів (поза рамками поляронного механізму, - за рахунок процесів переносу, зумовлених електрон-електронною взаємодією).

Практичне значення роботи. Впроваджені в роботі моделі вузькозонних матеріалів, які відображають основні типи міжелектронних взаємодій у вузьких енергетичних зонах, та методи математичного опрацювання модельних гамільтоніанів носять, в значній мірі, загальний характер, тому запропонована теорія кореляційних ефектів у вузьких зонах провідності може бути базовою і при розгляді властивостей конкретних ВЗМ із врахуванням їх реальної кристалічної та електронної структури, ефектів неупорядкування, сильної електрон-фононої взаємодії і т.п.

Отримані результати дають можливість послідовної інтерпретації широкого кола спостережуваних властивостей матеріалів з вузькими зонами провідності і можуть бути використані для прогнозування зміни властивостей вузькозонних матеріалів (провідність, температура фазових переходів) під дією зовнішніх впливів (легування, зміна температури, тиску, зовнішніх електричного і магнітного полів).

В роботі показана можливість існування у вузькозонних матеріалах специфічних фізичних ефектів і створення на цій основі принципово нових електронних пристроїв.

На захист виноситься:

1. Розробка моделей електронних підсистем матеріалів в вузькими зонами провідності та обґрунтування принципової важливості врахування процесів переносу електронів, викликаних електрон-електронною взаємодією.

2. Методика представлення модельних вузькозонних гамільтоніанів через оператори переходу андерсон-хаббардівських центрів.

3. Метод переходу до ефективного гамільтоніана через виключення за допомогою зручної форми теорії збурень високоенергетичних станів андерсон-хаббардівських центрів - дієвий спосіб математичного опрацювання модельних вузькозонних гамільтоніанів. В окремому випадку мотт-хаббардівських діелектриків запропонований метод еквівалентний операторній формі теорії збурень Боголюбова.

4. Обґрунтування наявності електрон-діркової асиметрії у вузьких енергетичних зонах (в протилежність до електрон-діркової симетрії в моделі Хаббарда).

5. Метод розрахунку квазічастинкового енергетичного спектру у вузьких зонах провідності, який приводить до коректного опису переходу діелектрик-метал та гомеополлярної границі ($n+1$, $U \rightarrow \infty$).

6. Розрахунок енергетичного спектру в 3d-системах із врахуванням внутрішньоатомної кулонівської взаємодії та кореляційного переносу для випадку слабкої та помірної взаємодії, який приводить, зокрема, до спостережуваних особливостей в залежності енергії зв'язку від атомного номера в 3d-металах.

7. Результати досліджень зовнішніх впливів (легування, зміна температури, зовнішній тиск, магнітне поле) на фазовий перехід діелектрик-метал та інтерпретація відповідного експериментального матеріалу.

8. Висновок про існування у легуваних мотт-хаббардівських магнетиках принципово нового механізму феромагнетизму, зумовленого переходами електронів через збуджені хундівські стани.

9. Результати досліджень феро- та антиферомагнетизму у вузьких зонах провідності, які дозволяють пояснити, зокрема, концентраційні залежності температури Кюрі в дисульфідах перехідних металів та температури Нееля в легуваних мотт-хаббардівських діелектриках.

10. Результати досліджень зарядо-впорядкованих і орбітально впорядкованих станів, які дозволяють отримати концентраційні залежності відповідних температур фазових переходів та інтерпретувати на цій основі експериментальний матеріал для фаз Магнелі ванадію та дисульфідів перехідних металів.

11. Моделі металооксидних надпровідних матеріалів електронного і діркового типів, які дозволяють інтерпретувати залежність температури Нееля від ступеня легування, "виділеність" матеріалів із високою температурою надпровідного переходу, вузькість енергетичних зон в цих матеріалах (поза рамками поляронного механізму).

Апробація роботи. Дисертація доповідалася на засіданні кафедри теоретичної фізики Львівського державного університету ім. Ів.Франка. Основні результати дисертації доповідалися і обговорювалися на семінарах Інституту фізики конденсованих систем АН України, регіональних семінарах секції фізики Західного наукового центру АН України; доповідалися, обговорювалися та опубліковані в матеріалах наступних конференцій: Всесоюзних конференціях з теорії напівпровідників (Кишинів, 1964; Тарту.

1966; Тбілісі, 1978), Всесоюзній конференції по фізиці феро- та антиферромагнетизму (Свердловськ, 1965), 3-ій Всесоюзній конференції по інтерметалічним сполукам (Львів, 1976), IX Всесоюзному симпозиумі "Електронное строение и физико-химические свойства тугоплавких соединений" (Івано-Франковск, 1979), Всесоюзній конференції з фізики магнітних явищ (Харків, 1979), Всесоюзній школі-семінарі з теорії напівпровідників (Чернівці, 1985), II Всесоюзній конференції "Матеріалознавство халькогенідних полупроводников" (Чернівці, 1986); Всесоюзній конференції "Современные проблемы статистической физики" (Львів, 1987), Всесоюзних конференціях "Двухелектронная динамика в неорганических материалах" (Черноголовка, 1986; Черноголовка, 1989), Українсько-французькому симпозиумі "Конденсована речовина: Наука і індустрія" (Львів, 1993).

Публікації. По матеріалах дисертації опубліковано 48 робіт. Перелік основних із них наведений в кінці авторефературу.

Структура і об'єм дисертації. Дисертація складається із вступу, шести розділів, заключного розділу, в якому наведені основні результати роботи, та списку цитованої літератури. Робота викладена на 398 сторінках. Основні частини роботи викладена на 300 сторінках. Рисуноків - 57. Список літератури містить 266 джерел.

ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтована актуальність досліджень, викладених у дисертації, сформульована мета роботи, відзначена її наукова новизна та вказані основні положення, які виносяться на захист.

У першому розділі дисертації сформульовані моделі для опису електронних підсистем матеріалів із вузькими енергетичними зонами, на основі яких у наступних розділах вивчаються ефекти міжелектронних взаємодій у вузьких зонах провідності.

Для випадку орбітально невиродженої зони запропонована узагальнена вузькозонна модель, особливістю якої є врахування взаємодій типу

$$\sum_{i,j,k\sigma} \langle ik_{\mp}^{\dagger}jk \rangle a_{i\sigma}^{\dagger} n_k a_{j\sigma} \quad (1)$$

де $\langle ik_{\mp}^{\dagger}jk \rangle$ - матричний елемент електрон-електронної взаємодії, побудований на функціях Ваньє, $a_{i\sigma}^{\dagger}$, $a_{j\sigma}$ - оператори народження і знищення електрона на i -центрі з проекцією спіну σ (\mp, \pm),

$$n_k = \alpha_{k\tau}^+ \alpha_{k\tau} + \alpha_{k+}^+ \alpha_{k+}$$

Нахтування взаємодіями, описуваними виразом (1), при переході від загальної форми гамільтоніана системи взаємодіючих електронів до широко вживаного при дослідженнях системи електронів у вузьких енергетичних зонах гамільтоніана Хаббарда звичайно аргументується малістю величин $\langle ik_{\frac{1}{2}}^{\downarrow} jk \rangle$ у порівнянні з величиною кулонівського відштовхування двох електронів з протилежними спінами на одному і тому ж центрі $\langle 11_{\frac{1}{2}}^{\downarrow} 11 \rangle = U$. При цьому випускається з поля зору та обставина, що вираз (1) описує міжцентрові переходи електронів, тобто матричні елементи $\langle ik_{\frac{1}{2}}^{\downarrow} jk \rangle$ мають зміст інтегралів переходу. Тому врахування (1) приводить до перенормування трансляційних процесів, описуваних "зонним" інтегралом переносу $t(ij)$. Оскільки величини $t(ij)$, $\langle ik_{\frac{1}{2}}^{\downarrow} jk \rangle$ у ВЗП близькі за абсолютними значеннями і протилежні за знаком, то зрозуміла необхідність врахування взаємодій (1) при дослідженні ефектів міжелектронних кореляцій у вузьких енергетичних зонах.

Якщо у виразі (1) виділити взаємодії з $k \neq i$, $k \neq j$ і врахувати вплив заселеності k -вузлів на електронні переходи між вузлами j та i методом середнього поля, то (1) можна представити у зонній формі з інтегралом кореляційного переносу (першого типу - за прийнятою в роботі термінологією)

$$T_i(ij) = n \sum_{k \neq i, k \neq j} \langle ik_{\frac{1}{2}}^{\downarrow} jk \rangle, \quad (2)$$

де n - концентрація електронів. Кореляційний перенос другого типу дається виразом

$$\sum_{i,j\sigma} \{ \langle 11_{\frac{1}{2}}^{\downarrow} 1j \rangle \alpha_{i\sigma}^+ \alpha_{j\sigma} n_{i\sigma} + e.c. \} \quad (3)$$

($\bar{\sigma} = -\sigma$). Характерна властивість цього типу кореляційного переносу та, що він здійснюється за умови, що один із центрів, між якими відбувається перехід електрона двократно зайнятий (двома електронами з протилежними спінами). Врахування кореляційного переносу приводить, як показано у наступних розділах, до ряду важливих наслідків. Відзначимо у цьому зв'язку роботи⁽⁵⁾ (опубліковані пізніше роботи [15][†], де вперше була запропонована модель типу (4)), які демонструють багатий фізичний

5) Hirsch J.E. // Physica B.- 1990.- 163.- P. 291-297.

Журавлев М.Е., Иванов Е.А. // ТМФ.- 1991.- 86.- С. 312-317.

*) Список літератури в кінці автореферату.

зміст моделей ВЗМ із врахуванням кореляційного переносу (3).

Узагальнений вузькозонний гамільтоніан включає також міжатомні обмінні та кулонівські взаємодії і має вигляд

$$H = \sum_{I, J, \sigma} t_{IJ}(n) a_{I\sigma}^{\dagger} a_{J\sigma} + \sum_{I, J, \sigma} [T(I, J) a_{I\sigma}^{\dagger} a_{J\sigma}^{\dagger} n_{I\sigma} + \text{в.с.}] + U \sum_I n_{I\uparrow} n_{I\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{I, J, \sigma, \sigma'} J(I, J) a_{I\sigma}^{\dagger} a_{J\sigma'}^{\dagger} a_{I\sigma'} a_{J\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{I, J, \sigma, \sigma'} V(I, J) a_{I\sigma}^{\dagger} a_{I\sigma'}^{\dagger} a_{J\sigma'} a_{J\sigma}. \quad (4)$$

де $T(I, J) = \langle 1 | \frac{1}{r} | 1 \rangle$, $J(I, J) = \langle 1 | \frac{1}{r} | 1 \rangle$, $V(I, J) = \langle 1 | \frac{1}{r} | 1 \rangle$,

$$t_{IJ}(n) = t(I, J) + n \sum_{k \neq I, k \neq J} \langle 1 | \frac{1}{r} | k \rangle. \quad (5)$$

Модель, описана вище, поширена на випадок двократного орбітального виродження. Така модель адекватна ситуації, яка реалізується для ряду сполук перехідних металів, наприклад, в дисульфідах MS_2 , $(M_1)_x(M_2)_{1-x}S_2$ (M - перехідний метал). Особливістю моделі є наявність кореляційного переносу, заданого виразом

$$\sum_{I, J, \sigma} [\langle 1 | \gamma | 1 \rangle \frac{1}{r} | \gamma \rangle] a_{I\gamma\sigma}^{\dagger} a_{J\gamma\sigma} n_{I\bar{\gamma}} + \text{в.с.}, \quad (6)$$

де матричний елемент $\langle 1 | \frac{1}{r} | k \rangle$ узагальнення на випадок виродження матричного елемента $\langle 1 | \frac{1}{r} | k \rangle$ однозонної моделі, $\gamma = (\alpha, \beta)$ нумерує орбітальні стани; $\bar{\gamma} = \beta$, якщо $\gamma = \alpha$ і $\bar{\gamma} = \alpha$, якщо $\gamma = \beta$, $n_{I\gamma} = a_{I\gamma\uparrow}^{\dagger} a_{I\gamma\uparrow} + a_{I\gamma\downarrow}^{\dagger} a_{I\gamma\downarrow}$. Перенос цього типу відсутній у однозонному випадку і є властивістю орбітально виродженої моделі.

Сформульована модель андерсон-хаббардівського матеріалу, яка узагальнює вузькозонну модель для орбітально невиродженої зони, описану вище, на випадок врахування гібридизаційної взаємодії із зонною (s -) підсистемою. Береться до уваги як одноелектронна, так і двоелектронна гібридизація. Остання має вигляд

$$\sum_{I, J, k} [V(I, J, -k) a_{I\sigma}^{\dagger} a_{J\sigma}^{\dagger} a_{-k\sigma} a_{k\sigma} + \text{в.с.}] \quad (7)$$

(позначення загальноприйняті). Врахування цієї взаємодії обґрунтовується тим, що взаємодія, близька за своєю природою до розглядуваної, важлива для стабілізації антиферромагнетизму в металооксидах. В запропонованій моделі ці (віртуальні) процеси приводять, з однієї сторони, до непрямой обмінної взаємодії між локалізованими магнітними моментами, з другої - ініціюють взаємодії БШ-типу в підсистемі електронів провідності. Запропоновані узагальнення гібридизаційної s - d -моделі на випадок,

коли "з"-зона провідності вузька.

Варіантом моделі, описаної вище, є модель металоксиду, яка враховує наявність як катіонної, так і аніонної підсистем. Гамільтоніан моделі виораний у вигляді

$$H = H_m + H_n + H_{nm}; \quad (8)$$

де H_m дається формулою (5), H_n враховує як одноелектронну, так і двоелектронну гібридизацію, а гамільтоніан аніонної підсистеми дається виразом, який містить доданки типу двох перших сум у формулі (4), а також доданок, який описує внутрішньоатомне притягання двох електронів і протилежними спінами, що можна інтерпретувати як прояв енергії хімічної спорідненості. Відмінність гамільтоніана (8) від відомого гамільтоніана Емері⁶⁾ зумовлена наявністю у (8) концентраційно залежних інтегралів переносу та двоелектронної гібридизації.

В останньому параграфі розділу розглянуто узагальнення вузькозонної моделі, описуваної гамільтоніаном (4), на випадок врахування електрон-фононої взаємодії, яке зводиться, насамперед, до перенормування інтегралів переносу за рахунок електрон-деформаційного та поляронного ефектів.

У другому розділі викладений метод переходу від "електронного" представлення модельних гамільтоніанів, розглянутих у першому розділі, до "конфігураційного", який ґрунтується на модифікованій формі полярної моделі Шубіна-Вонсовського, запропонованій в роботах [3, 7]).

Схема такого переходу наступна. Оператори станів вузла даються формулами

$$X_1^c = (1 - n_{1,+}) (1 - n_{1,+}), \quad X_1^o = n_{1,o} (1 - n_{1,o}); \quad X_1^z = n_{1,+} n_{1,+} \quad (9)$$

(у стані $|0\rangle$ на вузлі немає електрона (дірка), стани $|0\rangle$ відповідають однократно зайнятим вузлам зі спіном 0, в стані $|+ \rangle = |12\rangle$ на вузлі знаходяться два електрони з протилежними спінами). Система операторів переходу між станами будується за допомогою співвідношень:

$$\begin{aligned} X_1^{+o} &= \alpha \alpha_{1,+}^+ (1 - n_{1,+}), & X_1^{+o} &= \beta \alpha_{1,+}^+ (1 - n_{1,+}), \\ X_1^{z+} &= \gamma \alpha_{1,+}^+ n_{1,+}, & X_1^{z+} &= \delta \alpha_{1,+}^+ n_{1,+}, \end{aligned} \quad (10)$$

де $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ - дійсні коефіцієнти. (Початково, в роботах [3, 7] вводилися позначення для операторів переходу вузла B_{kl}^i . В

6) Emery V.J. // Phys.Rev.Lett. - 1987. - 58. - P. 2794-2798.

дисертації використовуються загальноприйняті тепер позначеннями X_1^{kl} , а також більш зручна нумерація станів, ніж раніше використовувана: $|1\rangle \rightarrow |10\rangle$, $|13\rangle \rightarrow |1^+\rangle$, $|14\rangle \rightarrow |1^+\rangle$. Використання умови $\sum_{\nu=1}^4 X_1^{\nu} = 1$, а також фермієвських переставних співвідношень для електронних операторів, приводить до представлення електронних операторів через оператори переходу (3):

$$\begin{aligned} \alpha_{1\uparrow}^{\dagger} &= X_1^{\uparrow 0} - X_1^{e^{\dagger}}, & \alpha_{1\downarrow}^{\dagger} &= X_1^{\downarrow 0} + X_1^{e^{\dagger}}, \\ \alpha_{1\uparrow} &= X_1^{0^{\dagger}} - X_1^{\downarrow e}, & \alpha_{1\downarrow} &= X_1^{0^{\dagger}} + X_1^{\downarrow e}. \end{aligned} \quad (11)$$

З іншої сторони, формули (11) дозволяють отримати вирази для операторів X_1^{kl} через електронні.

Проведений порівняльний аналіз конфігураційного опису відомих форм полярної моделі. Показано, зокрема, що належна ідентифікація відповідних пар операторів Шубіна-Вонсовського приводить до еквівалентності цієї форми конфігураційного представлення і представлення через оператори переходу:

$$\begin{aligned} X_1^{\uparrow 0} &= \Phi_1 \Phi_1^{\dagger}, & X_1^{\downarrow 0} &= \Phi_1 \Phi_1^{\dagger}, \\ X_1^{e^{\dagger}} &= \Phi_1 \Phi_1^{\dagger}, & X_1^{\downarrow e} &= \Phi_1 \Phi_1^{\dagger}, \end{aligned} \quad (12)$$

де Φ_1 , Φ_1 , Φ_1 , Φ_1 - оператори Шубіна-Вонсовського («використані традиційні позначення полярної моделі»). При цьому

$$\begin{aligned} X_1^{\uparrow} &= \Phi_1 \Phi_1^{\dagger}, & X_1^{\downarrow} &= \Phi_1 \Phi_1^{\dagger}, \\ X_1^0 &= \Phi_1 \Phi_1^{\dagger}, & X_1^e &= \Phi_1 \Phi_1^{\dagger}. \end{aligned} \quad (13)$$

Зрозуміло, що переставні співвідношення можна записати лише для пар операторів Шубіна-Вонсовського.

На основі представлення (11) через оператори Шубіна - Вонсовського сформульований варіант методу наближеного вторинного квантування, близький за своїм змістом до форми полярної моделі Глаубермана - Владімірова - Стасика⁷⁾. Це наближення дозволяє розділити гомеоплярні і полярні "ступені вільності" для випадку мотт-хаббардівських діелектриків, коли концентрація дірок і двійок s у широкому інтервалі температур мала ($s \sim \exp(-\frac{U}{2E})$), внаслідок чого гомеоплярні стани можна розглядати як स्वतंत्रну квазікласичну систему. При цьому прийняття квазікласичного

7) Глауберман А.Е., Владіміров В.В., Стасик И.В. // ДАН СССР.- 1969.- 126.- С. 543-545; ФТР.- 1960.- 2.- С. 133-143.

наближення для опису гомеополлярної підсистеми із необхідністю констатує ферміївський характер переставних співвідношень для дірок і двійок (в протилежність до традиційної форми полярної моделі, де ці співвідношення приймалися за Бозевські).

Проведена також порівняння запропонованої форми полярної моделі з методом вузлових елементарних збуджень Стасика⁸⁾ та встановленні межі застосовності останнього; при цьому, зокрема, має місце наближена еквівалентність обох підходів для випадку мотт-кабардівських магнетиків в області низьких, в порівнянні з температурою магнітного фазового переходу, температур.

Викладена вище методика введення операторів переходу вузла поширена на випадок двократного орбітального виродження.

На основі представлення електронних операторів через оператори переходу вузлів, розглядається "конфігураційна" форма модельних гамільтоніанів, описаних у першому розділі. Виявляється, що конфігураційне представлення модельних гамільтоніанів корисне для розуміння фізики кореляційних ефектів у вузьких зонах провідності та зручне з точки зору математичного опрацювання моделей.

Першою важливою особливістю "вузлового" опису є те, що основна взаємодія вузькозонних моделей -

$$H_0 = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (14)$$

записується у вузловому представленні у діагональній формі $U \sum_i X_i^2$. Ця обставина виявляється надзвичайно корисною при аналізі властивостей систем із сильною внутрішньоатомною взаємодією; так, точне рішення задачі сильно взаємодіючих електронів в атомній границі міститься, фактично вже у "вузловій" формі гамільтоніана (14), в той час як використання наближення Хартрі-Фока у цьому випадку може привести до фіктивних фазових переходів. Доцільність конфігураційного опису можна бачити і з наступного. У електронному представленні міжвузельний перенос електронів $\sum_j t_{ij} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma}$ не враховує "заселеності" як вузла i , так і вузла j . Якщо ж представити зонний перенос у конфігураційній формі (через перетворення (11)), то ефект внутрішньоатомних кореляцій проявляється вже в структурі складових трансляційної енергії. При цьому можна розрізняти як "трансляційні", так і енергетично нееквівалентні їм "активаційні" процеси. Так, перші, в моделі,

8) Стасик І.Б. // Питання фізики твердого тіла.- 1964.- Львів.- С. 3-17.

описуваній (4), даються виразом

$$\sum_{I, J \sigma} [t_{I, J}(n) X_I^{\sigma} X_J^{\sigma} + \tilde{t}_{I, J}(n) X_I^{\sigma} X_J^{\sigma}] \quad (15)$$

(процес переносу дірок і двійок), де

$$\tilde{t}_{I, J}(n) = t_{I, J}(n) + 2 \langle 1 | \frac{1}{r} | 1 \rangle, \quad (16)$$

"активаційні" - виразом

$$\sum_{J \sigma} [t'_{I, J}(n) [X_I^{\sigma} X_J^{\sigma} - X_I^{\sigma} X_J^{\sigma}] + e.c.], \quad (17)$$

де $t'_{I, J}(n) = t_{I, J}(n) + \langle 1 | \frac{1}{r} | 1 \rangle$. Вказана енергетична нееквівалентність дозволяє розглядати у випадку сильних внутрішньоатомних взаємодій "активаційні" процеси за допомогою теорії збурень, викладеної у третьому розділі. Вузловий опис природно враховує і процеси, описувані виразом (3): врахування їх приводить до перенормування інтеграла переносу за виразом (16), що стверджує, зокрема, наявність електрон-діркової асиметрії у вузьких зонах провідності. Відмітимо при цьому принципову відмінність між пропонованою моделлю і двоконфігураційною моделлю Ірхіна⁹⁾, зумовлену врахуванням у виразах (15) і (17) кореляційного переносу.

У третьому розділі впродовжений ефективний метод опрацювання модельних гамільтоніанів із андерсон-хаббардівськими центрами - метод переходу до ефективного гамільтоніана. В основі методу лежить конфігураційна форма модельних гамільтоніанів та зручна форма теорії збурень, яка дозволяє врахувати, як віртуальні, переходи електронів у високоенергетичні стани на андерсон-хаббардівських центрах. При цьому отриманий ефективний гамільтоніан (ЕГ) має такий самий низькоенергетичний спектр, що і вихідний гамільтоніан. На даний час загальноприйнято, що підхід до опрацювання модельних гамільтоніанів шляхом переходу до ЕГ є досить плідним при вивченні властивостей вузькозонних гамільтоніанів, зокрема механізмів обмінної взаємодії, механізмів нефононної надпровідності, взаємозв'язку між електричними і магнітними властивостями цих матеріалів. Перехід до ЕГ дозволяє частково розділити гомеополарні та полярні "ступені вільності" і виділити взаємодії, які відповідають за перенос заряду та обмінні взаємодії. Таким чином вдається значно спростити подальший математичний розгляд вихідних модельних гамільтоніанів. Важливою особливістю запропонованої методики є її насичність і ефективність

9) Ірхин Д.П. // ФТТ.- 1993.- 35.- С. 1432-1442.

при конкретних розрахунках. Для окремого випадку мотт-Хаббардівського діелектрика запропонована форма теорії збурень еквівалентна операторній формі теорії збурень Боголюбова. В загальному, метод дозволяє розглядати і леговані МХД та системи, описувані гібридизаційними моделями, і, таким чином, висвітити як обмінні взаємодії, так і електричні властивості вузькозонних матеріалів.

Суть методики в застосуванні до узагальненої вузькозонної моделі, описуваної (4), полягає у виключенні за теорією збурень "активаційних" процесів, заданих виразом (17). Обмеження складовими другого порядку по інтегралах переносу приводить до ЕГ у вигляді

$$\begin{aligned}
 H_{\text{эф}} = & U \sum_i X_i^2 + \sum_{i,j\sigma} t_{ij}(n) X_i^{\sigma\sigma} X_j^{\sigma\sigma} + \sum_{i,j\sigma} \tilde{t}_{ij}(n) X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2} - \\
 & - \sum_{i,j\sigma} \frac{t'_{ij}(n) t'_{ji}(n)}{U} \{X_i^{\sigma\sigma} X_j^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} - X_i^{\sigma\bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma}\sigma}\} - \sum_{i,j,k} \frac{t_{ij}(n) t_{jk}(n)}{U} \{X_i^{\sigma\sigma} X_j^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_k^{\sigma\sigma} - \\
 & - X_i^{\sigma\sigma} X_j^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_k^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}\} + \sum_{i,j,k\sigma} \frac{\tilde{t}_{ij}(n) t'_{ij}(n)}{U} \{X_i^{2\sigma} X_j^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_k^{\sigma 2} - X_i^{2\sigma} X_j^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} X_k^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}\}, \quad (18)
 \end{aligned}$$

(у двох останніх сумах вузли і та к - найближчі до j). Виключення процесів парного народження і знищення дірок і двійок (у першому порядку по інтегралах переносу) приводить до появи у виразі для ЕГ двох доданків, один із яких описує непряму обмінну взаємодію (надобмін), другий - непрямий перенос електронів. Механізм надобміну, викликаний переходами $|i\sigma\rangle$ -станів у $|j\bar{\sigma}\rangle$ -стани, стабілізує антиферромагнітне впорядкування станів $|i\sigma\rangle$ і $|j\bar{\sigma}\rangle$ на сусідніх вузлах. (Вкажемо у цьому зв'язку на твердження, яке зустрічається, що відмінність полярної моделі від моделі Хаббарда полягає, зокрема, в тому, що в останній відсутні процеси парного народження і знищення дірок і двійок. Як видно із попереднього, це не так: такі процеси містяться і в гамільтоніані Хаббарда, записаному у конфігураційному представленні, а їх врахування за теорією збурень приводить до надобміну). Останню суму у ЕГ (18) можна класифікувати, по аналогії із надобміном, як надперенос. Відмінність ЕГ (18) від узагальнених форм t-J-моделей (Гарріс-Ланге¹⁰⁾, Чао-Спалек-Олес¹¹⁾) зумовлена перш за

10) Harris A.B. and Lange R. // Phys.Rev.- 1967.- 157.- P. 295-314.

11) Chao K.A., Spalek J., Oles A. // J.Phys.C.- 1977.- 10.- L. 271-276.

всеконцентраційною залежністю інтегралів переносу і відсутністю електрон-діркової симетрії (четвертий розділ).

На основі ЕГ (18), узагальненого врахуванням міжатомної обмінної взаємодії, обговорені моделі мотт-хаббардівських магнітних напівпровідників (для випадку середнього числа електронів на вузол $n=1$) і провідників (коли $n \neq 1$). Для моделі магнітного напівпровідника запропонована форма представлення ЕГ через оператори вузлових квазічастинок, яка для випадку антиферромагнетика приводить до висновку про сильну залежність інтегралів переносу дірок t_0 і двійок t_2 від відносної намагніченості підгратки m : $t_0 = (1-m^2)t(n)$, $t_2 = (1-m^2)\tilde{t}(n)$ (ровняються найближчі сусіди); при низьких температурах можуть виявитися важливими переходи, зумовлені надпереносом, які не дестабілізують антиферромагнітне впорядкування.

Для випадку частково заповненої зони ($n \neq 1$), при аналізі проблем магнітного, зарядового впорядкувань, надпровідних кореляцій у вузьких зонах провідності, корисним є наближення, яке полягає у представленні процесів переносу ЕГ (18) в "зонній" формі з ефективним інтегралом переносу, залежним від ступеня заповнення зони. Зокрема, якщо $n < 1$, то ефективний "зонний" інтеграл переносу дається виразом (випадок однорідного розподілу спінових магнітних моментів)

$$t_{\text{ef}}(n, m) = \frac{4(1-n)}{(2-n)^2 - m^2} t(n); \quad (19)$$

якщо $n > 1$, то у правій стороні (19) потрібно зробити заміну $n \rightarrow 2-n$, $t(n) \rightarrow \tilde{t}(n)$.

Для гібридизаційних моделей, описаних у першому і другому розділах, перехід до ефективних гамільтоніанів, в яких виключені за допомогою теорії збурень гібридизаційні взаємодії першого порядку, здійснюється за умов, що рівень E_d , який відповідає однократно зайнятому стану локалізованим моментом в "d"-підсистемі, лежить достатньо глибоко під рівнем фермі зонної підсистеми, а двократно зайнятий "d"-рівень (з енергією $2E_d + U$) достатньо високо над рівнем фермі. В цьому випадку використання методики, описаної у [7], приводить до ефективного гамільтоніана в узагальненій періодичній моделі Андерсона:

$$H_{\text{ef}} = H_0 + H_{sd} + H_{dd} + H_{ss} \quad (20)$$

де H_0 описує "s-d"-підсистему при відсутності гібридизації, H_{sd} описує непряму "s-d"-обмінну взаємодію, H_{dd} містить непряму (через "s" підсистему) перенос електронів у σ - 0 - і $+\sigma$ - σ -підзонах

"d"-підсистеми, непряму обмінну взаємодію гейзенбергівського типу, а також ефекти парного народження і знищення дірок і двійок у d-підсистемі (врахування їх за теорією збурень також дає внесок в спин-спіновий зв'язок в "d"-підсистемі). Накінець, "s-d" гібридизація приводить до взаємодії типу надпереносу (аналог двох останніх сум у виразі (18)). H_{sd} має структуру взаємодії БКШ-типу з константою взаємодії, яка включає параметри одноелектронної та двоелектронної гібридизаційних взаємодій.

Методика переходу до ЕГ, застосована до орбітально-невиродженої моделі, поширена на модель з орбітальним виродженням. При цьому приймається умова сильного внутрішньоатомного зв'язку, тобто беруться до уваги лише незайняті, однократно зайняті та двократно зайняті хундівські стани на центрі. Процеси парного народження і знищення дірок та двійок враховуються за методикою, описаною вище для випадку невиродженої вузькозонної моделі. В результаті отриманий ЕГ орбітально виродженої моделі, який узагальнює ЕГ (18) на орбітально вироджений випадок. Принципова відмінність ЕГ виродженої моделі від (18) та, що непряма обмінна взаємодія з параметром обміну $J_{\phi} \sim t^2(n)/U - J_x$ (J_x - енергія внутрішньоатомного обміну) та непрямий перенос (надперенос) стабілізують феромагнітне впорядкування (на відміну від антиферомагнітного характеру відповідних взаємодій у орбітально невиродженій моделі).

Отримані форми ЕГ використовуються в наступних розділах для дослідження фізичних властивостей системи взаємодіючих електронів у вузьких зонах провідності.

У четвертому розділі розглянута як загальна проблема послідовного опису електронних кореляцій у ВЗП, так і ряд наслідків, які випливають із запропонованих у попередніх розділах моделей вузькозонних матеріалів. Показано, що послідовне врахування кореляційних ефектів у вузькозонних системах приводить до наслідків, суттєво відрізняються як від результатів зонної теорії, так і стандартних результатів в моделі Хаббарда; це дозволяє пояснити ряд особливостей фізичних властивостей, спостережуваних у матеріалах із ВЗП.

Отримано, що одноелектронний енергетичний спектр в узагальненій вузькозонній моделі (4) для випадку слабкої внутрішньоатомної взаємодії дається виразом

$$E_{\sigma}(k) = \beta_{\sigma} + n_{\sigma}U + t(n, \sigma)\gamma(k), \quad (21)$$

де $\beta_{\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \langle \alpha_{i\sigma}^+ \alpha_{j\sigma} \rangle$, $t(n, \sigma) = t(n) + 2n_{\sigma} T$, (враховуються

найближчі сусіди - $T = T(i,j)$, $t(n) = t_{i,j}(n)$, $\gamma(k) = \sum \exp(ikr)$ (сумування по найближчих сусідах), n_{σ} - середнє число електронів на вузол зі спіном σ . Врахування кореляційного переносу, по-перше, перенормує вихідний інтеграл переносу (при цьому він стає концентраційно та спін-залежним) і, по-друге, приводить до незалежного від квазіімпульса зсуву центра зони, також залежного від намагніченості.

Для випадку сильної внутрішньоватомної взаємодії, коли адекватним є опис в термінах σ -0- і $\uparrow\downarrow$ - σ -підзон, (випадок легьованого мотт-Хаббардівського діелектрика) квазічастинковий спектр в цих підзонах у двокіплексному наближенні дається відповідно виразами

$$E(k) = \beta_{\sigma} + \alpha_{\sigma} t_k(n), \quad \tilde{E}(k) = \tilde{\beta}_{\sigma} + \tilde{\alpha}_{\sigma} \tilde{t}_k(n) + U, \quad (22)$$

де α_{σ} і $\tilde{\alpha}_{\sigma}$ - фактори, які описують ефекти звуження підзон, а β_{σ} і $\tilde{\beta}_{\sigma}$ - незалежні від квазіімпульса спін-залежні зсуви підзон (визначаються через середні енергії трансляційного руху електронів з відповідним спіном), $t_k(n)$, $\tilde{t}_k(n)$ - фур'є компоненти виразів (5) і (16). Обговорене визначення факторів звуження підзон за допомогою поширених наближень та за допомогою запропонованого узагальненого наближення середнього поля, яке використовується також для аналізу енергетичного спектра системи у випадку, коли, на відміну від спектра (22), між інтегралами переносу і величиною U може бути довільний зв'язок. Ідея підходу полягає у використанні варіанту методу наближеного вторинного квантування (розділ 2) на певному етапі опрацювання рівнянь для функцій Гріна за допомогою узагальненого наближення Хартрі-Фока (у формі, близькій до використаної в роботі¹²⁾).

Особливості отриманого в такий спосіб квазічастинкового спектра вручно проілюструвати на прикладі моделі Хаббарда (коли в гамільтоніані (4) залишити лише електрон-електронну взаємодію на одному і тому ж вузлі "i") для принципово важливого випадку $n=1$. При відсутності магнітного впорядкування енергетичний спектр дається виразом

12) Plakida N.M., Yushankhai V.Yu., Stasjuk I.V. // Physica C.- 1989.- 160, № 1.- P. 80-83.

$$E_{1,2} = \frac{U}{2} + (1-2c)t_k \mp \frac{1}{2} [U^2 + (4ct_k)^2]^{1/2} \quad (23)$$

($c = \langle X_1^0 \rangle = \langle X_2^0 \rangle$), який суттєво відрізняється від хаббардівського¹³⁾. Спектр (23) (як і функція Гріна, з якої він отримується) задовільняють коректному граничному переходу до атомної та зонної границь. Найважливіша особливість отриманого виразу полягає у вирішенні проблеми енергетичної щільності (енергетична щільність зникає при $2w > U$, де w - напівширина вихідної зони). Спектр (23), на відміну від хаббардівського, є температурно залежним (через концентрацію поляризованих станів). Розрахована квазічастинкова густина станів, яка ілюструє трансформацію зонної густини станів у квазічастинкову за рахунок міжелектронних кореляцій; при цьому система, фіксується як в режимі МХД, так і в металічному стані з перекриттям підзон. Врахування кореляційного переносу показує, що квазічастинкові густини станів, суттєво змінюються при переході системи із стану легованого МХД, коли $n < 1$, у стан із $n > 1$.

Особливості енергетичного спектру узагальненої вузькозонної моделі, описуваної гамільтоніаном (4), ілюструються на прикладі концентраційної залежності енергетичних ширин відповідних зон. Для випадку слабких, або помірних електрон-електронних взаємодій, коли застосовне наближення Хартрі-Фока, ширина енергетичної зони дається виразом

$$w = w_0 [1 - n(\tau_1 + \tau_2)], \quad (24)$$

де $w_0 = 2|t_0|$ (t_0 - зонний інтеграл переносу), τ_1 і τ_2 - відношення кореляційних інтегралів переносу першого і другого типів до $|t_0|$. Для випадку сильної внутрішньоатомної взаємодії, коли перенос заряду здійснюється в $\sigma=0$ -підзоні (якщо $n < 1$), або у $\uparrow+\sigma$ -підзоні (коли $n > 1$), ефективні напівширини цих підзон даються виразами (для випадку, коли впорядкування по спіну відсутнє)

$$w = \alpha z [1 - n\tau_1] |t_0|, \quad (25)$$

$$\tilde{w} = \tilde{\alpha} z [1 - n\tau_1 - 2\tau_2] |t_0|. \quad (26)$$

Концентраційна залежність ширин підзон зумовлена, по-перше (як і в інших вузькозонних моделях) кореляційним ефектом звуження підзон (коефіцієнти α і $\tilde{\alpha}$) і, по-друге, що є особливістю моделі, концентраційною залежністю інтегралів переносу у нижній ($t(n)$) і верхній ($\tilde{t}(n)$) підзонах. При цьому за рахунок кореляційного

13) Hubbard J. // Proc. Roy. Soc. - 1963. - A 276. P. 238-257.

переносу другого типу ширина зони стрибкоподібно зменшується на величину $2\tilde{\alpha}zT$ при переході легованого МХД із стану з $n < 1$ в стан з $n > 1$. Розрахована також концентраційна залежність ширин підзон із врахуванням ефекту кореляційного звуження підзон в описаному вище узагальненому наближенні середнього поля, коли $\alpha = (2-2n+n^2)/(2-n)$, $\tilde{\alpha} = (2-2n+n^2)/n$. Особливістю отриманих при цьому залежностей, є наявність мінімумів (для моделі Хаббарда, коли $\tau_1 = \tau_2 = 0$, при $n_1 \approx 0,6$ і $n_2 \approx 1,4$; врахування кореляційного переносу зміщує ці значення). Зміну ефективного інтеграла переносу із зміною концентрації електронів можна пояснити наступним. В інтервалі концентрації $0 < n < n_1$ переходи у σ - 0 -підзоні можна інтерпретувати як перенос $|\sigma\rangle$ -станів із ефективним інтегралом переносу, що зменшується із збільшенням концентрації, а при подальшому зростанні n у проміжку $n_1 < n < 1$ σ - 0 -перенос можна тлумачити як перенос дірок з ефективним інтегралом, що зростає. Іншими словами, при $n_1 \approx 0,6$ (для моделі Хаббарда) відбувається зміна електронного типу провідності на дірковий. Концентраційну зміну ширини $\uparrow + \sigma$ -підзони можна пояснити аналогічно. Така інтерпретація повністю узгоджується із закономірностями концентраційної залежності провідності у легованих МХД, отриманими у четвертому розділі.

Важливий результат полягає в тому, що модель (4) описує гамільтоніан з нееквівалентними хаббардівськими підзонами, тобто для моделі характерна електрон-діркова асиметрія (моделі Хаббарда властива електрон-діркова симетрія: властивості системи не змінюються при заміні $\langle X_1^0 \rangle \leftrightarrow \langle X_1^2 \rangle$). У відповідності із цим інтеграли переносу, які описують переходи електронів у σ - 0 - (дірковий) підзоні і $\uparrow + \sigma$ -підзоні (зона двійск), відрізняються один від одного і є концентраційно залежними, причому ефект кореляційного переносу зростає із збільшенням концентрації електронів (при цьому ефективні інтеграли переносу (5) і (16) зменшуються). Внаслідок цього енергетична ширина верхньої зони може виявитися набагато меншою, а ефективна маса набагато більшою, ніж у нижній підзоні; таким чином у розглядуваній моделі природно (як наслідок електрон-електронних взаємодій) вводяться поняття "легких" і "важких" носіїв струму.

Далі отримані загальні вирази для енергії системи, описуваної гамільтоніаном (4), які використовуються у подальшому для конкретних розрахунків; тут отримане, зокрема, рівняння для концентрації полярних станів при $T=0$ для випадку напівзаповненої

зони:

$$c = \frac{1}{4} - \frac{U}{32wc} \ln[1-4c]. \quad (27)$$

Проведений розрахунок енергії зв'язку в легованих МХД (випадок сильної внутрішньоатомної взаємодії) та для випадку слабких та помірних електрон-електронних взаємодій, коли енергія зв'язку (на вузол) в системі, описуваній (4), дається виразом

$$E_z = -\frac{2}{N} \sum_k \left[t(n) + nT \right] \langle \alpha_{k\sigma}^\dagger \alpha_{k\sigma} \rangle \gamma(k) - \nu U, \quad (28)$$

де $\nu = n^2/4$, якщо $n < 1$ і $\nu = 1 - n + n^2/4$, якщо $n > 1$. Залежність енергії зв'язку від концентрації d-електронів в 3d-системах можна знайти узагальненням (28) за умови еквівалентності 5-ти d-підзон. Отриманий результат пояснює особливості залежності енергії зв'язку від атомного номера в 3d-металах - мінімум для Mn і наявність двох нееквівалентних максимумів (V, Co). При цьому отримується задовільне узгодження між експериментальними і розрахунковими ($1.5 \cdot 10^5$ Дж/моль + $5 \cdot 10^5$ Дж/моль) значеннями енергії зв'язку при $w \approx 2-4$ еВ, $U \approx 1,5-3$ еВ, $\tau_1 = \tau_2 \approx 0,1$.

Розглянутий енергетичний спектр вузькозонної системи в магнітному полі. Для випадку слабких магнітних полів отримано узагальнення виразів (22); при цьому нижня і верхня підзони розщеплюються на дві спів-залежні з різними ефективними (залежними від магнітного поля) інтегралами переносу, а зміщення центрів підзон викликане як зсесманівським розщепленням, так і кореляційним ефектом; останнє може виявитися більшим, ніж за рахунок зсесманівської взаємодії. Для випадку сильних магнітних полів спектри трансформуються у спектри Ландау з ефективними масами і циклотронними частотами, залежними від магнітного поля; при цьому вказані величини для σ -0- і \uparrow^+ - σ -підзон можуть сильно відрізнитися за рахунок відміченої вище електрон-діркової асиметрії, викликаної суттєвою відмінністю відповідних інтегралів переносу ((5) і (16)). Відмінність запропонованого підходу від попередніх розглядів енергетичного спектру в рамках полярної моделі полягає в тому, що він дозволяє розглядати не тільки мотт-хаббардівські напівпровідники, але і системи з перекриттям "діркової" і "двійкової" підзон і, таким чином, вивчати перехід діелектрик-метал в магнітному полі.

У п. 4.9 на основі квазічастинкового спектру (23) отриманий вираз для енергетичної щільності:

$$\Delta E = -2w[1-2c] + \sqrt{U^2 + (4cw)^2}. \quad (29)$$

При заданих w і U щільна зникає за умови, що $c < c_0$, де $c_0 = 1/4 - U/8w$. $\Delta E < 0$ при $2w > U$, що узгоджується із критерієм переходу до металічного стану, який отримується із виразу (27) для c .

В наступному параграфі розглянуто зміну ширини енергетичної щільності у вузькозонних матеріалах під дією зовнішніх впливів (зміни температури, зовнішнього тиску, легування, магнітного поля). Із виразу (29) виходить, що енергетична щільність зростає при заданих U і w (тобто за умови сталого тиску) із зростанням концентрації носіїв струму. Таке зростання може бути викликане, зокрема, і за рахунок збільшення температури; умова металічності $c < c_0$ при цьому може перестати виконуватися. Отримані залежності c і ΔE від температури. Отримана температурна залежність ΔE може пояснити спостережувані переходи у NiS_2 (Wilson J.A., Pitt G.D. Phys.Mag., 1971, 23, P. 1297) і $(V_{1-x}Cr_x)_2O_3$ (Mc Whan D.B., Remeika J.P. Phys.Rev.B., 1970, 2, P. 3734) із стану парамагнітного металу до стану МХД із підвищенням температури. Розрахунок показує, що при типовій для металооксидів ширині вузької зони $w \approx 1$ еВ перехід здійснюється при $T \approx 200$ К, що узгоджується із експериментом для вказаних сполук. При цьому виконується умова $U < 2w$.

Концентраційна залежність ΔE вказує на можливість наступних ефектів, які дозволяють керувати переходом діелектрик-метал за допомогою магнітного поля та через фотоэффект. Так, сильне магнітне поле може привести до зменшення c , що ініціюватиме перехід із діелектричного стану до металічного (див. формулу (31)). Навпаки, збільшення c за рахунок фотоэффекту стимулюватиме зворотний перехід - метал-діелектрик аналогічно температурному впливу. Зауважимо, що ці висновки зроблені за умови, що актуальні лише нижня і верхня хабардівські підзони; наявність в сполуці близько розташованих широких зон провідності або локальних рівнів ожуть змінити напрям переходу (метал \leftrightarrow діелектрик).

Розраховані також заселеності c і ΔE від тиску за умови, що залежність ширини зони від відносної зміни об'єму μ дається виразом $w = w_0(1 + \alpha\mu)$: Отримані залежності дозволяють пояснити фазову P-T-діаграму для вказаних вище сполук, а також переходи діелектрик-метал в оксидах перехідних металів під тиском.

Розглянута також зміна енергії активації ΔE у вузькозонних системах за рахунок зміни концентрації електронів у вузьких енергетичних зонах; при цьому розглянуті випадки, коли поряд із σ -0- і π^+ - σ -підзонами, актуальні і інші, - вище і нижче розміщені

широкі зони провідності (або локальні рівні). Так, для випадку, коли достатньо врахувати лише переходи між σ - 0 -підзонами і вище розташованими незаповненими (при $n=1$ і $T=0$) станами, ΔE при зменшенні n дається виразом

$$\Delta E = \Delta E_0 - k\pi n [1-n] - \beta, \quad (30)$$

де ΔE_0 - енергетична щільність при $n=1$, k - величина, що визначається фактором кореляційного звуження зони (ця величина залежно від вибраного наближення, може бути як додатною, так і від'ємною), β - величина зсуву центра підзони. На основі (30) можна пояснити спостережувану в $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{VO}_3$ залежність ΔE від x (Мотт Н.Ф. Переходи металл-ізолятор.- М., 1979.- С. 284).

Незалежно від факторів кореляційного звуження підзон і величини зсуву центрів підзон, маємо, що при переході системи із стану з $n < 1$ у стан з $n > 1$ (за рахунок, наприклад, зміни хімічного складу компонент) енергія активації поблизу $n=1$ повинна різко змінюватися. При цьому в залежності від взаємного розміщення σ - 0 - і $\uparrow\downarrow$ - σ -підзон відносно інших зон можливе як збільшення енергії активації, так і її зменшення. Така різка зміна енергії активації дійсно спостерігається у сполуках $\text{Mn}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ (Крупичка С. Фізика ферритів. Т. 2.- М., 1976.- С. 485) та $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ (Jonker G.H. J.Phys.Chem.Sol. 1959, 9.- P. 165) при $x=1$.

Отримано, що енергетична щільність в моделі, описуваній (4) у квантованому магнітному полі при $n=1$ дається виразом

$$\Delta E(H) = \Delta E_0 + \frac{e\hbar H}{2c} \left[\frac{1}{m} + \frac{1}{\tilde{m}} + \frac{2}{m_0} \right], \quad (31)$$

де ΔE_0 - щільність при $H=0$, m і \tilde{m} - ефективні маси в σ - 0 - і $\uparrow\downarrow$ - σ -підзонах, m_0 - маса електрона. Принципова відмінність (31) від ΔE у зонній теорії (в двозонній - електрон-дірковій моделі) - наявність додатного доданка (на відміну від від'ємного у зонній теорії), що зумовлено особливостями системи із сильним внутрішньоатомним відштовхуванням (в дуже сильних полях $\langle X_1^2 \rangle = \langle X_1^0 \rangle \rightarrow 0$, що і дає перехід метал-діелектрик на відміну від можливого зворотного переходу в стандартній двозонній моделі). Розглянуто поширення результатів моделі, описуваної (4), на її узагальнення і вказано на можливість застосування теорії до пояснення переходів діелектрик-метал під дією магнітного поля в напівметалічних сплавах типу $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ (Краак W. et.al. Phys.St.Sol.B.- 1988, 148, P. 333) та домішкових зонах.

В п. 4.11 проведено узагальнення методу

Адлера-Барі-Ланга¹⁴⁾ в теорії електропровідності у вузьких енергетичних зонах на випадок системи, описуваної гамільтоніаном (4). У двошполвсному наближенні для одноелектронної функції Гріна; коли спектри у підзонах даються виразами (22), провідність не залежить від наближень, які конкретизують фактори звуження зони α , $\tilde{\alpha}$ та величини зсувів β і β , і для випадку легovanого МХД, або вузькозонного напівметалу із слабоким перекриттям підзон, дається виразом (прямокутна густина станів)

$$\sigma = \sigma_0 (n-2d) \left[\frac{c(1-n\tau_1)}{2-n} + \frac{d(1-n\tau_1-2\tau_2)}{n} \right], \quad (32)$$

де σ_0 - концентраційно незалежна величина, $c = \langle X_1^0 \rangle$, $d = \langle X_2^0 \rangle$, τ_1 і τ_2 мають той самий зміст, що і у виразі (24). В області параметрів, для яких $d\sigma/dn > 0$, маємо провідність n-типу, якщо ж $d\sigma/dn < 0$, то провідність діркового типу. Таким чином p-n-тип провідності системи в режимі легovanого МХД при зміні концентрації електронів від 0 до 2 змінюється тричі - в області першого та другого максимумів (якщо $\tau_1 = \tau_2 = 0$, то це відповідно $n_1 = 0,6$ і $n_2 = 1,4$) та біля $n=1$. В області певного типу провідності вираз (32) може бути представлений у вигляді формули Друде-Лоренца з ефективними масами, залежними від концентрації електронів. Зміна типу провідності поблизу половинного заповнення вихідної зони узгоджується із спостережуваною для ряду сполук, наприклад у VO_x ; в рамках використовуваної моделі стан МХД у цій сполуці при $x=0$ моделюється концентрацією електронів $n=1$ (що відповідає наполовину заповненій t_{2q} -зоні). При $x < 1$ у VO_x появляються "дірки" (V^{3+}), а при $x > 1$ - "двійки" (V^{2+}). У згоді з викладеним вище експеримент (Мотт Н.Ф. Переходи металл-ізолятор.- М., 1979.- С. 286) вказує на перехід при $x > 1$ від провідності p-типу (при $x > 1$) до провідності n-типу ($x < 1$). Аналогічна зміна типу провідності спостерігається і в сполуці $Co_xFe_{2-x}O_3$ при $x=1$ (Jonker G.N. J.Phys.Chem.Sol. 1959, 9, P. 165).

В п'ятому розділі розглядаються проблеми феро- та антиферромагнетизму в системах із сильними внутрішньобатомними взаємодіями на основі моделей та методик, запропонованих у попередніх розділах.

В п. 5.2. аналізується проблема "трансляційного" механізму феромагнетизму у ВЗП, коли в рамках наближених розглядів (типу

14) Bari R., Adler D., Lange V. // Phys.Rev.B.- 1970.- 2.- P. 2898-2905.

відомого наближення Рот) отримується феромагнітне рішення для легованих МХД за умов $U \rightarrow \infty$ і відсутності міжатомної обмінної взаємодії. Разом з тим, отримано, що у двошполюсному наближенні для спектрів типу (22) енергія трансляційного руху системи для випадку неабуреної прямокутної густини станів дається виразом ($n < 1$):

$$E_0/N = - \frac{w(1-n)n_+}{1-n+n_+} - \frac{w(1-n)n_-}{1-n+n_-}, \quad (33)$$

(N - число вузлів) тобто не залежить від наближення, яке конкретизує фактори кореляційного звуження зони та кореляційного зсуву центра підзони. Для випадку $n > 1$ у (33) потрібно зробити заміни $n \rightarrow 2-n$, $w \rightarrow \tilde{w}$. Видно, що енергія парамагнітного стану нижча від феромагнітного. Використання напівеліптичної густини станів приводить до того ж висновку.

В п. 5.3. обґрунтована необхідність узагальнення гамільтоніана Хаббарда за рахунок міжатомної обмінної взаємодії.

Проведений спін-хвильовий розгляд обмінної моделі феромагнетика із врахуванням полярних станів за допомогою наближення Боголюбова-Тяблікова. Отриманий спін-хвильовий спектр і рівняння для намагніченості, яке дає для температури Кюрі $\theta_c = J/4C$ (якщо $U=0$) і $\theta_c = J/2C$ (якщо $U \rightarrow \infty$), де C - величина, залежна від типу кристалічної структури.

Проведений розгляд вузькозонної моделі, яка враховує міжатомну обмінну взаємодію, внутрішньоатомне кулонівське відштовхування та перенос електронів (із врахуванням кореляційного переносу). Показана некоректність широко вживаних наближення Хаббард-1 і його узагальнень при розгляді феромагнетизму у ВЗП: вказані наближення в гомеополярній границі ($n=1$, $U \rightarrow \infty$) дають невірні рівняння для намагніченості і вираз для температури Кюрі (насправді повинні отримуватися результати обмінної моделі). Показано, що одноелектронна функція Гріна, отримана у 4-тому розділі методом узагальненого наближення середнього поля (і яка дає перехід діелектрик-метал у моделі Хаббарда), приводить до рівняння для намагніченості, яке в гомеополярній границі переходить до рівняння обмінної моделі. Для випадку $n < 1$ і $w/U \rightarrow 0$, коли можна обмежитися розглядом нижньої підзони, отриманий вираз для температури Кюрі, наближений вигляд якого при $zJ \ll w$ є

$$\theta_c = \frac{2(1-n)w}{2-n} \cdot \frac{1}{\ln^{(2-n)}/m_c}, \quad (34)$$

де $m_0 = ((2-n)^2 - 8(1-n)w/zJ)^{1/2}$ - відносна намагніченість при $T=0$. Якщо зона заповнена більше, ніж наполовину, то у виразі (34) потрібно зробити заміну $n \rightarrow 2-n$, $w(n) \rightarrow \tilde{w}(n)$. Оскільки $\tilde{w}(n) < w(n)$, то з точки зору даного розгляду для реалізації феромагнетизму більш сприятливий випадок зони, заповненої більше, ніж наполовину. Відмітимо у цьому зв'язку, що феромагнетизм 3d-металів і їх сплавів спостерігається лише у тих випадках, коли 3d-оболонка заповнена більше, ніж наполовину.

Проведений спін-хвильовий розгляд досліджуваного гамільтоніана. При розщепленні вищих функцій Гріна використовується наближення типу наближень Боголюбова-Тяблїкова в обмінній моделі феромагнетика. Для випадку $U \ll t(n)$ і $n < 1$, коли можна обмежитися розглядом $\sigma=0$ -підзони, отриманий спін-хвильовий спектр (в якому міжатомний інтеграл переносу перенормований за рахунок трансляційного руху електронів), рівняння для намагніченості, вираз для температури Кюрі. Показано, що у ВЗП внаслідок умови $w \gg zJ \theta_c$ може зростати при зменшенні концентрації локалізованих магнітних моментів; для моделі Хаббарда ($\tau_1=0$) θ_c зростає при зменшенні n від одиниці до $n=0,5$. Якщо знехтувати прямою обмінною взаємодією, то отримується умова феромагнетизму, яка якісно узгоджується як із раннім результатом Нагаоки¹⁵⁾ та і з недавнім розглядом в рамках t - J -моделі¹⁶⁾.

Проаналізована умова феромагнетизму, отримане рівняння для намагніченості та вираз для температури Кюрі в узагальненій вузькозонній моделі за умови слаької та помірної електрон-електронної взаємодії, коли остання враховується у наближенні Хартрі-Фока за методикою, викладеною у п. 4.3.1. Отримано, що врахування кореляційного переносу, який зумовлює залежність ефективного інтеграла переносу від концентрації електронів та намагніченості, а також спін-залежний зсув центра зони, приводить до умови феромагнетизму (прямокутня густина станів):

$$[zJ + U]/2w + \tau_2 [3-n]/2 > 1, \quad (35)$$

($w = w_0(1 - n\tau_1)$), а рівняння для намагніченості має вигляд

15) Nagaoka Y. // Phys.Rev.- 1966.- 147.- P. 392-403.

16) Изимов Ю.А., Летфулов Б.М., Шипицын Е.В. // ФММ.- 1991.- 10.- С. 90-100. Изумов Yu.A. et.al. // Phys.Rev.B.- 1992.- 46.- P. 15697-15711.

$$\exp\left[-mJ_{\sigma\sigma}/\theta\right] = \frac{\text{Sh}\left[\frac{(1-n_+)}{\alpha_+}w/\theta\right]\text{Sh}\left[\frac{\alpha_+n_+}{\alpha_+}w/\theta\right]}{\text{Sh}\left[\frac{(1-n_-)}{\alpha_-}w/\theta\right]\text{Sh}\left[\frac{\alpha_-n_-}{\alpha_-}w/\theta\right]}; \quad (36)$$

де $J_{\sigma\sigma} = zJ + U + zT(n-1)$, $\alpha_{\sigma} = 1 - 2n_{\sigma}\tau_{\sigma}$ - фактор звуження зони. Із (36) знайдені концентраційні залежності температури Кюрі. Отримані результати використані для пояснення залежності $\theta_c(n)$ у дисульфідах перехідних металів (в області незастосовності моделі сильно взаємодіючих електронів).

У п. 5.5 розглядається феромагнетизм у вузьких орбітально вироджених енергетичних зонах за умови сильного хундівського зв'язку. Існує принципова відмінність між ЕГ в орбітально невиродженій і орбітально виродженій моделі: для невиродженого випадку основний стан МХД - антиферомагнітний, для двократного орбітального виродження стан магнітодіелектрика може бути як антиферомагнітний, так і феромагнітний в залежності від концентрації електронів (якщо $n=1$, то феромагнітний). При цьому виявляється, що в моделі легованого мотт-хаббардівського феромагнетика існує (поряд з механізмом феромагнітного надобміну) додатковий механізм стабілізації феромагнетизму, пов'язаний з непрямым переносом електронів (через збуджені хундівські стани), який, зокрема, може бути важливим для пояснення особливостей магнітних властивостей дисульфідів перехідних металів. В додаток до електрон-діркової асиметрії, викликаній врахуванням кореляційного переносу в орбітально виродженій моделі існує додаткова нееквівалентність між випадками, коли концентрація електронів $p < 1$ і $n > 1$, що зумовлено різною фізичною і математичною природою процесів переносу діркових ($n < 1$) і хундівських ($n > 1$) станів (це відповідає ситуації, яка реалізується у сполуках $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ і $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x\text{S}_2$).

Аналіз умов реалізації трансляційного феромагнетизму у легованих мотт-хаббардівських системах (без врахування міжатомної надобмінної взаємодії) на основі енергетичного спектру, який враховує ефекти кореляційного звуження $\gamma\sigma$ -0- і $\sigma\sigma$ - $\gamma\sigma$ -підзон ($|\sigma\sigma\rangle$ -хундівські $|\alpha^+\beta^+\rangle$, $|\alpha^+\beta^-\rangle$ -стани; $|\gamma\sigma\rangle$ -однократно зайняті - $|\alpha\sigma\rangle$, $|\beta\sigma\rangle$ -стани) та спин-залежного кореляційного зсуву центрів підзон, викликаного особливостями процесів переносу в орбітально виродженій ВЗП. Розрахунок при цьому енергії трансляційного руху системи приводить до висновку, що основний стан системи при $p < 1$ - парамагнітний. Для випадку $n > 1$ у згоді із відміченою вище електрон-дірковою асиметрією енергії

феро- і парамагнітних станів при $T=0$ рівні, і умовою феромагнетизму є умова $J_\phi > 0$ (а не $J_\phi \chi_w(n)(1-n)$, як для $n < 1$).

Ефективний гамільтоніан орбітально вродженої моделі містить переходи з операторною структурою типу

$$J_\phi \sum_{ijk} \chi_k^{\beta\alpha} \chi_j^{\alpha\alpha} \beta \sigma_{i1}^{\alpha\alpha} \quad (37)$$

де J_ϕ - інтеграл феромагнітного надобміну. Аналіз внеску в енергію основного стану від процесів непрямого переносу показує, що за умови $8z(1-n)^2 \chi(2-n)^2$ він може переважати відповідний внесок від феромагнітного надобміну і, таким чином, відігравати важливу роль в стабілізації феромагнетизму у легованих вузькозонних феромагнетиках, що підтверджується концентраційною залежністю температури Кюрі.

Отримані в попередніх параграфах результати використані для пояснення концентраційної залежності температури Кюрі в дисульфідах перехідних металів $Fe_{1-x}Co_xS_2$ і $Ni_{1-x}Co_xS_2$ (Jarrett H.S. et.al. Phys.Rev.Let.- 1968, 21, P. 617), найцікавішою особливістю яких є нетипова з точки зору стандартної теорії локалізованих магнітних моментів залежність T_c від концентрації електронів (у сполучі $Fe_{1-x}Co_xS_2$ T_c збільшується при зменшенні n в інтервалі $0,75 < 1$), а також різке зменшення T_c в сполучі $Ni_{1-x}Co_xS_2$ при зростанні n . Узагальнення спін-хвильового розгляду, проведеного у п. 5.3.4., на вроджений випадок дає для температури Кюрі вираз

$$\theta_c = \frac{n}{2C} \left[zJ_\phi + \frac{16(1-n)^2 w}{(4-3n)^2} \right]. \quad (38)$$

Врахування орбітального вродження приводить при реалістичних значеннях відношення w/zJ до зміщення максимуму $T_c(n)$ із області $n=0,5$ (для однозонної моделі) в область $n=0,7$ у згоді із експериментальною залежністю $T_c(n)$ для $Fe_{1-x}Co_xS_2$. Якщо взяти $2w=0,5$ еВ (експериментальні значення для CoS_2), $zJ/2w=10^{-2}$, то для $n=0,75$ отримуємо значення $T_c \approx 140$ у згоді із даними для $Fe_{0,25}Co_{0,75}S_2$ (Джарретт та інші - 1968). Для випадку концентрацій електронів $0,96 < n < 1$ у сполучі $Fe_{1-x}Co_xS_2$ і для $n > 1$ у $CoNi_{1-x}S_2$ експеримент вказує на колективізацію електронів з утворенням нехундівських станів. У цьому разі можна скористатися розглядом вузькозонної моделі, проведеним у п. 5.4. (наближення помірної взаємодії), одним із наслідків якого є концентраційна залежність ефективного інтеграла переносу від ступеня заповнення зони, причому при $n < 1$ вказане перенормування приводить до

підвищення температури Кюрі, а при $n > 1$ - пониження у відповідності із спостережуваною залежністю у $Fe_{1-x}Co_xS_2$ і $Co_xNi_{1-x}S_2$ в області $0,95 < n < 1,1$.

В п. 5.6. розглядається проблема антиферомагнетизму в частково заповнених енергетичних зонах за умови сильних внутрішньоатомних кореляцій, коли адекватним є опис на основі ЕГ вузькозонної моделі. Система рівнянь для визначення одночастинкової функції Гріна лінеаризується за допомогою узагальненого наближення Хартрі-Фока. При цьому надобмінний інтеграл зменшується за рахунок дестабілізуючого двошпідграткове антиферомагнітне впорядкування трансляційного руху в σ - 0 - або в π - σ -підзонах. За допомогою отриманих одночастинкових функцій Гріна знаходиться система рівнянь для підграткової намагніченості і хімпотенціала, з якої знаходиться температура Нееля T_N (в наближенні Хаббард-1 $T_N=0$) через використання наближення "енергетичного центра ваги"; це наближення дозволяє частково обійти проблему конкретизації енергетичного спектру і полягає в заміні виразів (22) під знаком відповідних сум по k їх середніми значеннями, взятими по підзонах. Таким способом отримується концентраційно залежний вираз для температури Нееля в частково заповненій ($n < 1$) зоні:

$$\theta_N = \frac{2w(1-n)}{2-n} \left[\operatorname{arctanh} \frac{4(1-n)w}{E_N} \right]^{-1}, \quad (39)$$

де \tilde{J} - перенормований трансляційним переносом інтеграл надобміну. Із (39) маємо, що при реалістичних значеннях параметрів, які входять у вираз (39), антиферомагнетизм зникає при декількох відсотках дірок. Отриманий результат знаходиться у згоді із пізнішою роботою¹⁷⁾, в якій використовувався варіант методу наближеного вторинного квантування. Якщо $n > 1$, то θ_N дається виразом (39) із заміною $n \rightarrow 2-n$ і $w \rightarrow \tilde{w}$. На основі (39) можна пояснити залежність температури Нееля від концентрації носіїв струму (в магнітній підсистемі) у вузькозонних матеріалах, зокрема, у сполуках $(V_{1-x}Ti_x)_2O_3$, Ni_xS_2 , ВТНП-матеріалі $La_{2-x}Sr_xCuO_4$; при цьому \tilde{J} потрібно розглядати як феноменологічний параметр, оскільки в реальних матеріалах антиферомагнітний надобмін включає катіон-аніон-катіонні ефективні взаємодії. Якщо для оцінки взяти $w/E_N \approx 10^{-2}$, то нестійкість антиферомагнітного

17) Hu L. et.al. // Phys.Rev.B.- 1989.- 40.- P. 11306-11308.

впорядкування настає при концентраціях носіїв струму $\approx 0,03$; експеримент для сполук $(V_{1-x}Ti_x)_2O_3$ (Mc. Whan D.B. et al. Phys.Rev.B., 1973, 7, P. 1920), NiS_2 (Sparks J.T. and Komoto T. Rev.Mod.Phys., 1968, 40, P. 752) і $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (Mitsuda et al. Phys.Rev.B., 1987, 36, P. 822) дає відповідно $x=0,05$, $x=0,04$ і $x=0,03$.

Отриманий також спін-хвильовий спектр антиферромагнетика, який приводить як до лінійної залежності енергії антиферромагнітів від k , так і до коректної залежності від параметрів системи (стандартний розгляд задачі безпосередньо із вихідного гамільтоніана Хаббарда, - без переходу до ЕГ, дає лінійну залежність від інтеграла переходу без коректуючого множника $(1-n)$). Умова антиферромагнетизму, яка отримується при цьому, узгоджується із умовою, що слідує із виразу (39) $((1-n)U \ll W)$.

У шостому розділі розглядаються немагнітні типи електронного впорядкування у ВЗП - зарядове, орбітальне та деякі питання, пов'язані з надпровідними електронними кореляціями.

У п. 6.1 на основі гамільтоніана вузькозонної моделі, яка узагальнює (4) врахуванням міжатомної кулонівської взаємодії, аналізується проблема зарядового впорядкування (38) для типової у вузькозонних матеріалах типу фаз Магнелі ванадію $V_{2v-1}O_{2v-1}$ ситуації, коли U значно перевищує ширину зони, а зона частково заповнена. Розгляд доповнює і уточнює дослідження¹⁸⁾, в яких внутрішньоатомна взаємодія враховувалася в наближенні Хартрі-Фока. Пропонований підхід ґрунтується на переході від загальної форми модельного гамільтоніана до ЕГ, який описує перенос електронів у $\sigma=0$ - ($n < 1$), або $^{++}\text{-}\sigma$ -підзонах ($n > 1$) із врахуванням міжцентрових кулонівських взаємодій. Використання методики, аналогічної до випадку двошпідграткового вузькозонного антиферромагнетика, приводить до наступного виразу для температури фазового переходу зарядовпорядкований стан (ЗВС) - неупорядкований (з однорідним розподілом зарядів по вузлах гратки) -

$$\theta_v = \frac{4(1-n)W}{2-n} \left[\ln \left(\frac{1+\phi_1}{1-\phi_1} \cdot \frac{1+\phi_2}{1-\phi_2} \right) \right]^{-1}, \quad (40)$$

де $n < 1$.

18) Ионов Г.В., Ионов С.П. // Изв. АН СССР, сер.физ.-1978.- 42.- С. 1297-1315.

$$\varphi_1 = \frac{2w}{(2-n)^2V}, \quad \varphi_2 = \frac{4(1-n)w}{n(2-n)^2V}. \quad (41)$$

V - енергія кулонівського відштовхування між найближчими сусідами; якщо $n > 1$, то у виразі (40) потрібно зробити стандартну заміну $n \rightarrow 2-n$, $w \rightarrow \tilde{w}$. За допомогою (40) можна дозволити пояснити, зокрема, спостережувані концентраційні залежності температури фазового переходу діелектрик-метал, які можна ототожити із температурою виникнення ЗВС (оскільки при цьому зникає щільна у квазічастинковому спектрі) у фазах Магнелі ванадію V_2O_{2v-1} . Так, вказані температури $T_1 = 430$ К для V_3O_5 ($n=2/3$) і $T_2 = 240$ К для V_4O_7 ($n=1/2$), (де існування ЗВС не викликає сумнівів¹⁹) узгоджуються із вирахованими по формулі (40) при $w/V=0,56$, $2w=0,21$ еВ.

У п. 6.2 аналізується проблема існування орбітально впорядкованих станів (ОВС) у вузькій зоні із двократним орбітальним виродженням (дисульфідні перехідних металів). Дослідження ведеться на основі ЕГ орбітально виродженої моделі за методикою, близькою до використаної у попередньому параграфі. Отриманий енергетичний спектр, який характеризується діелектричною щільною у ОВС, а також умова реалізації ОВС у вузькій двократно виродженій енергетичній зоні -

$$zJ_\phi > 4w(1-n), \quad (42)$$

де J_ϕ - надобмінний інтеграл. Таким чином, у згоді із фізичними міркуваннями, перенос дірок дестабілізує ОВС. Аналіз на основі експериментальних даних можливості існування ОВС у дисульфідах перехідних металів, як найбільш перспективних з цього погляду матеріалів, приводить до висновку, що відсутність ОВС у CoS_2 (де є сприятливі умови для реалізації ОВС, оскільки e_g -зона напівзаповнена), яка підтверджена нейтронографічними дослідженнями (Ito Y. and Ohzawa A.J. Phys.Soc.Jap., 1975, 39, P. 1623), зумовлена невиконанням умови типу (42). Дійсно, оскільки для CoS_2 $w < 0,5$ еВ (Waki S., Ogawa S.J. Phys.Soc.Jap., 1972, 32, P. 284), $zJ < 2 \cdot 10^{-2}$ еВ, концентрація полярних станів (за результатами вимірювання магнітного моменту - Джарретт та інші - 1968) $S \approx 0,05$, то умова (42) не виконується. Умова (42) не задовільняється і для змішаних дисульфідів $Co_{1-x}Fe_xS_2$ та $Co_{1-x}Ni_xS_2$. Існує проте, принципова можливість створення за допомогою сильного магнітного поля умов, сприятливих для

19) Chudnovskii F.A., Terukov E.I., Khomskii D.I. Solid State Commun., 1978, 25, P. 2201.

спостереження ОВС. Дійсно, як було відмічено вище, сильне магнітне поле може привести до переходу із провідного стану у стан МХД (з $n=1$); за таких умов створяться ідеальні умови для спостереження ОВС. Більш реальна, проте, ситуація, коли за рахунок сильного магнітного поля (10^4-10^5 е), зменшується концентрація полярних станів до величини c_0 так, що виконується умова $J_{\phi} \lesssim c_0 w$. Такий індукований магнітним полем перехід до ОВС може виявитися, проте, більш ефективним не для CoS_2 , а для $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ в області концентрацій електронів, дещо більших від 0,96 (початок області ненасиченого феромагнетизму, викликаного появою полярних станів - Джарретт та інші, 1968). Непрямим підтвердженням такого переходу до ОВС був би спостеряжуваний при цьому перехід від металічного типу провідності до активаційного.

У передостанньому параграфі досліджуються електронні надпровідні кореляції, зумовлені специфікою процесів переносу заряду у вузьких енергетичних зонах.

Для випадку орбітально невиродженої зони розгляд ведеться на основі ЕГ (18), відмінність якого від гамільтоніанів узагальнених форм t - J -моделі, зокрема моделі, яка ґрунтується на відомій концепції спінової рідини²⁰⁾ зумовлена, перш за все, концентраційною залежністю інтегралів переносу і відсутністю електрон-діркової симетрії. Ці особливості моделі дозволяють інтерпретувати виділеність міднооксидних надпровідників як електронного так і діркового типів як наслідок вузькості енергетичних зон, зумовленої врахуванням кореляційного переносу.

Розгляд ЕГ (18) методом функцій Гріна дозволяє виділити аномальні середні в процесах, що описують непрямий перенос (який інтерпретується як перенос гомеополарних пар). Важливо відмітити, що функція Гріна, в якій виділяються надпровідні корелятори, має структуру відповідної функції Гріна в теорії БМШ у вузловому представленні. Для оцінки концентраційної залежності температури надпровідного переходу використана методика, що і для визначення температури Нееля у ВВП. Це дає

$$T_c = \frac{I \langle \gamma^2(k) \rangle (3n-2)}{16} \left(\text{arth} \frac{3n-2}{2-n} \right)^{-1}, \quad (43)$$

де I - величина, яка визначається інтегралом надпереносу, а усереднення квадрата структурного фактора ведеться по нижній

20) Spalek J. and Wojcák W. // Phys.Rev.B. - 1988.- 37.- P. 1532-1536.

підзоні ($n < 1$). Якщо $n > 1$, то потрібно зробити стандартну заміну $n \rightarrow 2-n$. Із виразів (39) і (43) видно, що стани системи, які відповідають максимальним значенням температур Нееля і надпровідного переходу, розділені помітним концентраційним інтервалом (у згоді із фазовою діаграмою ВТНП-матеріалів). θ_c за формулою (43) приводить до температур $\theta_c \approx 10^2$ К за умов, близьких до тих, які реалізуються у ВТНП.

Запропонована модель надпровідного матеріалу, яка є узагальненням моделі Іонова-Любімова-Кострубова²¹⁾ на випадок ВЗП і врахування двоелектронної гібридизації, і яка може бути застосована, насамперед, до пояснення властивостей надпровідних матеріалів з електронним типом провідності ($Nd_{2-x}Cu_xO_4$), де провідність можна інтерпретувати в термінах $^{+}\sigma$ -підзони (при цьому Cu^{2+} -іони ототожнюються із $|\sigma\rangle$ -станами, а іони Cu^{1+} - із $^{+}\sigma$ -станами). Підсистемі локальних пар тут співставляються O^{2-} -іони, стійкість яких враховується через ^{-}U -взаємодію. Така модель дозволяє пояснити як антиферромагнетизм Nd_2CuO_4 системи, так і його зникнення при незначному легуванні. Перехід до ЕГ дозволяє звести задачу до вигляду, формально еквівалентного ЕГ орбітально невиродженої моделі з параметрами, залежними від гібридизаційних взаємодій. Модель модифікується і на випадок ВТНП-матеріалів діркового типу. В цьому випадку p -підсистема моделюється гамільтоніаном типу (4) з ^{-}U -взаємодію, а в підсистемі іонів Cu^{2+} враховується лише взаємодія на одному центрі. Врахування гібридизаційної взаємодії приводить до ЕГ, в якому антиферромагнетизм зумовлений непрямыми (через p -підсистему) обмінними взаємодіями між локалізованими магнітними моментами (Cu^{2+} -підсистема), а перенос заряду викликаний як безпосередніми переходами в p -підсистемі, так і посередніми (через Cu^{2+} -підсистему). Формально ВТНП-матеріали, як діркового, так і електронного типів, описуються в рамках однієї і тієї ж моделі ЕГ, в якій провідність здійснюється у $^{+}\sigma$ -підзоні (вузькість якої зумовлена врахуванням кореляційного переносу), а надпровідні кореляції пов'язані з непрямыми переходами типу надобмінних. Розрахована в логарифмічному наближенні температура надпровідного переходу приводить до концентраційної залежності T_c , особливістю якої є два максимуми - поблизу слабого ($n \approx 1,1-1,2$) і сильного

21) Іонов С.П., Любімов В.С., Кострубов Ю.Н. // Препринт ИАЭ АН СССР 4583/9.- 1988.- М.- 36 с.

($n=1,8-1,9$) заповнення $\uparrow\uparrow$ - σ -підзони, причому другий максимум - вищий. Перший відповідає електронному типу провідності, другий - діркового. Високі в порівнянні з t - J -моделлю (яка ґрунтується на гамільтоніані Хаббарда) температури надпровідного переходу отримуються за рахунок значного звуження $\uparrow\uparrow$ - σ -підзони, зумовленого кореляційним переносом.

В останньому параграфі розділу на основі запропонованих моделей проаналізований зв'язок між надпровідністю та антиферромагнетизмом у ВТНП-матеріалах.

В заключному розділі дисертації приведені основні результати і висновки, які коротко сформульовані у розділі Загальна характеристика роботи автореферату.

Основні результати роботи опубліковані в працях:

1. Дидух Л.Д., Стасик И.В. Косвенное обменное взаимодействие через полярные состояния в ферромагнетиках // Вестник Львовского госуниверситета, сер. физич.- 1966.- вып. 2.- С. 14-19.
2. Дидух Л.Д., Стасик И.В. К теории обменных взаимодействий в антиферромагнетиках с учетом полярных состояний // Изв. АН СССР, рес. физ.- 1966.- Т. 30, вып. 6.- С. 915-920.
3. Дидух Л.Д., Стасик И.В. К теории ферромагнетизма в полярной модели // Укр. физ. журн.- Т. 13, вып. 6.- С. 899-904.
4. Дидух Л.Д., Стасик И.В. Спин-волновое рассмотрение ферромагнетика с учетом полярных состояний // Укр. физ. журн.- 1968.- Т. 13, вып. 11.- С. 1923-1925.
5. Дидух Л.Д., Стасик И.В. К теории ферромагнетизма с учетом s - d -переходов // Укр. физ. журн.- 1968.- Т. 13, вып. 11.- С. 1774-1800.
6. Дидух Л.Д., Стасик И.В. Об обменном взаимодействии в антиферромагнетиках // Физ. мет. и метал.- 1968.- Т. 26, вып. 3.- С. 435-442.
7. Дидух Л.Д., Стасик И.В. Эффективный гамильтониан в модели Андерсона // Физ. мет. и метал.- 1968.- Т. 26, вып. 4.- С. 582-588.
8. Дидух Л.Д. О некоторых фазовых переходах в магнитоупорядоченных системах // Физ. мет. и метал.- 1969.- Т. 27, вып. 5.- С. 942-944.
9. Дидух Л.Д. О ферромагнетизме в полярной модели // Физ. мет. и метал.- 1969.- Т. 27, вып. 6.- С. 1109-11011.

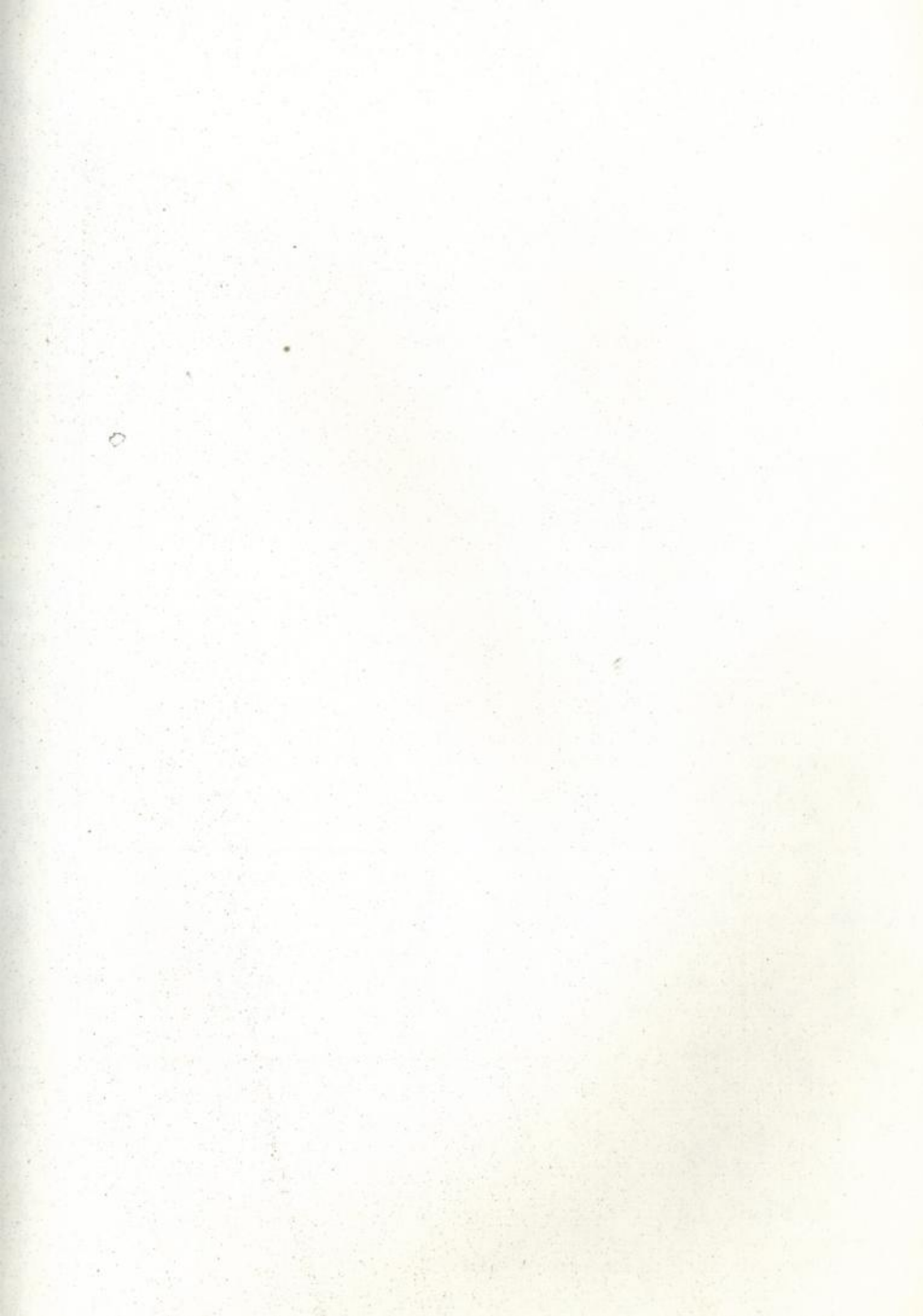
10. Дидух Л.Д. О температурной зависимости намагниченности ферромагнетика // Укр. физ. журн.- 1972.- Т. 17, вып. 2.- С. 323-325.
11. Дидух Л.Д., Стасюк И.В. Об энергии основного состояния и условия ферромагнетизма // Физ. мет. и метал.- 1972.- Т. 33, вып. 2.- С. 429-432.
12. Дидух Л.Д. Антиферромагнитное решение в модели Хаббарда // Физ. тв. тела.- 1974.- вып. 8.- С. 2393-2394.
13. Дидух Л.Д., Дидух В.Д., Стасюк И.В. Простая модель электрических и магнитных свойств магнитных полупроводников // Укр. физ. журн.- 1975.- Т. 20, № 1.- С. 97-103.
14. Дидух Л.Д., Дидух В.Д. Об энергетическом спектре носителей тока в кристаллах с зарядовым упорядочением // Укр. физ. журн.- 1977.- Т. 22, № 5.- С. 852-854.
15. Дидух Л.Д. Об учете корреляционных эффектов в узких зонах проводимости // Физ. тв. тела.- 1977.- Т. 19, вып. 8.- С. 2217-2223.
16. Дидух Л.Д. Упорядоченные состояния в двухзонной модели Хаббарда // В кн.: Всесоюзная конференция по физике магнитных явлений.- Харьков, 1978.- С. 102.
17. Дидух Л.Д. Учет междуатомного обменного взаимодействия в узких зонах проводимости // В кн.: Всесоюзная конференция по физике магнитных явлений.- Харьков, 1978.- С. 105.
18. Дидух Л.Д. Косвенное обменное взаимодействие через узкие зоны проводимости // Физ. мет. и метал.- 1978.- Т. 46, № 2.- С. 348-352.
19. Дидух Л.Д. "Зонное" Описание систем с сильным внутриатомным взаимодействием // Физ. тв. тела.- 1978.- Т. 20, вып. 5.- С. 1420-1423.
20. Дидух Л.Д., Прядко Л.Ф., Стасюк И.В. Корреляционные эффекты в материалах с узкими зонами проводимости.- Львов: Вища школа.- 1978.- 120 с. (монография)
21. Дидух Л.Д. Одночастичный спектр в узкой зоне проводимости // В кн.: Материалы Всесоюзной школы-семинара по теории полупроводников.- Черновцы, 1985.- Ч. 2.- С. 180-183.
22. Дидух Л.Д. Эффективная ширина узкой зон: проводимости // В кн.: Материалы Всесоюзной школы-семинара по теории полупроводников.- Черновцы, 1985.- Ч. 2.- С. 184-187.
23. Дидух Л.Д., Прядко Л.Ф., Стасюк И.В. Модельные подходы к описанию энергетического спектра вещества // В кн.:

- Электронное строение и физико-химические свойства тугоплавких соединений.- Киев: Наукова думка, 1980.- С. 3-22.
24. Дидух Л.Д. О ферромагнитном упорядочении в узких зонах проводимости // В кн.: Электронное строение и физико-химические свойства тугоплавких соединений.- Киев: Наукова думка, 1980.- С. 32-37.
 25. Дидух Л.Д. Концентрационная зависимость температуры Кюри в узких зонах проводимости // Изв. вузов. Физика.- 1988.- Т. 31, № 5.- С. 24.
 26. Дидух Л.Д., Дидух В.Д. Упорядоченные состояния в узкозонных материалах.- Львов: Вища школа.- 1981.- 102 с. (монография).
 27. Дидух Л.Д. К теории ферромагнетизма в узких зонах проводимости // Укр. физ. журн.- 1988.- Т. 33, № 3.- С. 449-453.
 28. Дидух Л.Д. Уравнения для намагниченности и температуры Кюри в модели Хаббарда // Физич. електроніка.- 1988.- № 37.- С. 6-10.
 29. Дидух Л.Д. Изменение типа проводимости в узких зонах, вызванное двухэлектронными процессами // В кн.: Всесоюзное совещание "Механизмы двухэлектронной динамики в неорганических материалах".- Черноголовка-Москва, 1989.- С. 67-68.
 30. Дидух Л.Д. Концентрационная зависимость температур фазовых переходов в узких зонах проводимости // В кн.: Современные проблемы статистической физики.- Киев: Наукова думка.- 1989.- С. 159-166.
 31. Дидух Л.Д. Сверхпроводящие электронные корреляции в узких зонах проводимости.- Киев, 1980.- 28 с.- (Препринт АН УССР, ИТФ; ИТФ-89-22Р).
 32. Дидух Л.Д. Упорядоченные состояния в материалах с узкими зонами проводимости.- Москва: ВНИИФТИ, 1990.- С. 166-185.
 33. Дидух Л.Д. Корреляционные эффекты в материалах с неэквивалентными хаббардовскими подзонами.- Львов, 1993.- 32 с. (Препринт АН Украины. ІФКС; ІФКС-92-9Р).
 34. Дидух Л.Д. Деякі властивості матеріалів із вузькими зонами провідності // Тези Українсько-французького симпозиуму "Конденсована речовина: Наука і промисловість".- Львів, 1993.- С. 275.
 35. Дидух Л.Д. Надпровідність в моделі матеріалу із вузькою зоною провідності і локальними парами // В кн.: Фізичний збірник.- Львів: ІТШ, 1993.- С. 69-80.

Дидух

Підписано до друку 27.06.94р. Формат паперу 60x84¹/16.
Папір білий друкарський. Друкарських листів 2.
Друк офсетний ротопронтний. Замовлення 613. тираж 100 .

Тернопіль, вул. Над Оставом, 10. Обласне управління статистики.
Відділ оперативної поліграфії.



AB 30.623