Морозова Ю.

Науковий керівник – доц. Басістий П. В

МОДЕЛЮВАННЯ У КВАНТОВІЙ ФІЗИЦІ НА ПРИКЛАДІ ДОСЛІДЖЕННЯ ЕНЕРГІЇ ЗВ'ЯЗКУ МОДЕЛІ ХАББАРДА

Моделювання – це спосіб дослідження будь-яких явищ, процесів або об'єктів шляхом побудови та аналізу їх моделей [1, с. 15].

Про значення модельних уявлень видатний фізик XX ст. Макс Борн говорив наступне: "Всі видатні експериментальні відкриття зобов'язані інтуїції тих людей, котрі широко використовували моделі. Ці моделі були, однак, не просто результатом їхньої фантазії, але являли собою відображення реальних предметів. Як взагалі може працювати експериментатор, як може він спілкуватися зі своїми колегами й сучасниками, якщо він не використовує моделі?" [2, с. 228]

Мета статті полягає у застосуванні теоретичної моделі електронної підсистеми та проведення її математичного опрацювання методом точної діагоналізації гамільтоніана для моделювання властивостей кристалів сполук перехідних металів.

Актуальність дослідження. Використовуючи моделі на теоретико-множинному рівні абстрактного опису можна отримувати досить загальні відомості про реальні системи. Вивчення переходу від властивостей реальних об'єктів до властивостей системи вцілому є найважливішим завданням теорії систем, яке сьогодні є надзвичайно актуальним в зв'язку із застосуванням обчислювальної техніки до задач моделювання складних багатокомпонентних систем.

Узагальнена модель Хаббарда є математичною абстрактною моделлю, яка успішно використовується для опису широкого класу властивостей вузькозонних систем на основі перехідних металів. Серед методів, які застосовувалися для аналізу властивостей цієї моделі метод діагоналізації малих кластерів [4, с. 141].

Модель була запропонована в 1963-1965 роках Дж. Габбардом і отримала широкий розвиток в наступні роки. Модель Хаббарда являє собою основну модель для опису зонного магнетизму в металах, фазового переходу метал-діалектрик і різноманітних аспектів взаємозв'язку магнітних і електричних властивостей твердих тіл. Перевагами моделі є її простота фізичне наповнення [3, с. 238-257].

В моделі Хаббарда розглядаються електрони які рухаються по кристалічній гратці квантовими переходами (перескакуванням) з вузла на вузол і які мають локальну кулонівську взаємодію на одному вузлі.

$$H = H_0 + H_1 + H_1' \qquad (1)$$

$$H_0 = (E_\alpha - \mu)\sum_i\left(X_i^\sigma + X_i^{\bar\sigma} + 2X_i^2\right) + U\sum_i X_i^2 \qquad (2)$$

$$H_1 = \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j}(n)\left(X_i^{\sigma 0}X_i^{0\sigma}\right) + \sum_{i,j,\sigma} \tilde{t}_{i,j}(n)\left(X_i^{\sigma 2}X_i^{2\sigma}\right) \qquad (3)$$

$$H_1 = \sum_{i,j,\sigma} t'_{i,j}(n)\left(X_i^{\bar\sigma 0}X_i^{\sigma 2} - X_i^{\sigma 0}X_i^{\bar\sigma 2} + h.c.\right), \qquad (4)$$

де E_α – енергія атомного рівня, U – енергія кулонівської внутрішньоатомної взаємодії електронів, $t_{i,j}, t'_{i,j}, \tilde{t}_{i,j}$ – інтеграли перестрибування електронів між вузлами, які мають різні електроні конфігурації, X_i – оператори Хаббарда переходу вузла від одної конфігурації до іншої, $h.c.$ – ермітово-спряжені оператори Хаббарда. Для знаходження власних функцій і власних значень гамільтоніана Хаббарда необхідно розв'язати рівняння Шредінгера, але гамільтоніан має блочну структуру, тому для знаходження власних значень і власних функцій гамільтоніана моделі Хаббарда необхідно використати метод діагоналізації малих кластерів і провести діагоналізацію кластерів (блоків).

Спочатку розглянемо систему із двох вузлів. Найпростіше діагоналізувати не всю матрицю, а окремо її блоки. Матриця для двох вузлів складається із трьох кластерів, а також відраховуємо енергію від рівня хімічного потенціалу ($\mu = 0$) і приймаємо, що $t = 1, t' = \left(\frac{8}{10}\right)t, \tilde{t} = \left(\frac{5}{10}\right)t$.

Матриця для двох вузлів (двох вузлова задача).

Таблиця 1

Два вузли, кластер №1

	0.0	0.↑	↑.0	0.↓	↓.0
0.0	0				
0.↑		-μ	t		
↑.0		t	-μ		
0.↓				-μ	t
↓.0				t	-μ

Зразок обрахунок власних значень кластеру №1 проводимо за допомогою програми Maxima.

```
-->   H:matrix([-m,t,0,0],[t,-m,0,0],[0,0,-m,t],[0,0,t,-m]);
```

$$(H)\quad \begin{bmatrix} -m & t & 0 & 0 \\ t & -m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -m & t \\ 0 & 0 & t & -m \end{bmatrix}$$

```
-->   eivals(H);
(%o2) [[-t-m,t-m],[2,2]]
-->   eivects(H);
(%o3) [[[-t-m,t-m],[2,2]],[[[1,-1,0,0],[0,0,1,-1]]]]
```

Перше значення після матриці дає нам власні значення блоку матриці, друге значення - кратність власних значень в порядку відображення. Власні стани ми можемо отримати із явного вигляду блоку матриці. Отримаємо $\psi_{\uparrow}^{\pm} = |0\uparrow\rangle \pm |\uparrow 0\rangle$; $\psi_{\downarrow}^{\pm} = |0\downarrow\rangle \pm |\downarrow 0\rangle$ з відповідними власними значеннями $E_1^{\pm} = -\mu \pm t$ (подвійно вироджене).

Таблиця 2

Два вузли, кластер №2

	↓.↑	↑.↓	0.2	2.0
↓.↑	-2μ		t'	t'
↑.↓		-2μ	t'	t'
0.2	t'	t'	-2μ	
2.0	t'	t'		-2μ

Зразок обрахунок власних значень кластеру №2 проводимо за допомогою програми Maxima.

```
(%i1) H:matrix([-2*m,0,8/10*t,8/10*t],[0,-2*m,8/10*t,8/10*t],[8/10*t,8/10*t,-2*m,0],[8/10*t,8/10*t,0,-2*m]);
```

$$(H)\quad \begin{bmatrix} -2m & 0 & \frac{4t}{5} & \frac{4t}{5} \\ 0 & -2m & \frac{4t}{5} & \frac{4t}{5} \\ \frac{4t}{5} & \frac{4t}{5} & -2m & 0 \\ \frac{4t}{5} & \frac{4t}{5} & 0 & -2m \end{bmatrix}$$

```
(%i2) eivals(H);
```

$$(\%o2)\quad [[-\frac{8t+10m}{5}, -\frac{10m-8t}{5}, -2m], [1,1,2]]$$

```
(%i3) eivects(H);
```

$$(\%o3)\quad [[[-\frac{8t+10m}{5}, -\frac{10m-8t}{5}, -2m], [1,1,2]], [[[1,1,-1,-1]], [[1,1,1,1]], [[1,-1,0,0], [0,0,1,-1]]]]$$

Власні стани ми можемо отримати із явного вигляду блоку матриці.

Отримаємо $\psi_{\uparrow}^{\pm} = |\uparrow 0\rangle|\downarrow 2\rangle \pm |\downarrow 0\rangle|\uparrow 2\rangle$; $\psi_{\downarrow}^{\pm} = |\downarrow 0\rangle|\uparrow 2\rangle \pm |\uparrow 0\rangle|\downarrow 2\rangle$ з відповідними власними значеннями $E_2^{\pm} - \quad 2\mu$ (подвійно вироджене), $E_2^{\pm} - \quad 2\mu \quad 2t'$, $E_2^{\pm} - -2\mu + 2t'$

Таблиця 3

Два вузли, кластер №3

	↑.2	2.↑	↓.2	2.↓	2.2
↑.2	-3μ	t			
2.↑	t	-3μ			
↓.2			-3μ	t	
2.↓			t	-3μ	
2.2					-4μ+2U

Зразок обрахунок власних значень кластеру №3 проводимо за допомогою програми Maxima.

(%i1) H:matrix([-3*m+U,5/10*t,0,0],[5/10*t,-3*m+U,0,0],[0,0,-3*m+U,5/10*t],[0,0,5/10*t,-3*m+U]);

(H) $\begin{bmatrix} U-3m & \frac{t}{2} & 0 & 0 \\ \frac{t}{2} & U-3m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U-3m & \frac{t}{2} \\ 0 & 0 & \frac{t}{2} & U-3m \end{bmatrix}$

(%i2) eivals(H);

(%o2) $[[\frac{-t-6m+2U}{2}, \frac{t-6m+2U}{2}],[2,2]]$

(%i3) eivects(H);

(%o3) $[[[\frac{-t-6m+2U}{2}, \frac{t-6m+2U}{2}],[2,2]],[[[1,-1,0,0],[0,0,1,-1]]]]$

Власні стани ми можемо отримати із явного вигляду блоку матриці.

Отримаємо $\psi_{2\uparrow}^{\pm} = |2\uparrow\rangle \pm |\uparrow 2\rangle$, $\psi_{2\downarrow}^{\pm} = |2\downarrow\rangle \pm |\downarrow 2\rangle$ з відповідними власними значеннями $E_3^{\pm} = -3\mu + U \pm t$.

Для видалення одного електрона із кластеру необхідно обрахувати енергію зв'язку електрона від кількості вузлів в моделі Хаббарда.

Таблиця 4

Результати для двох вузлової задачі Хаббарда.

N	0	1	2	3	4
$E_{осн}$	0	$-\mu - t$	$-2\mu - 2t'$	$-3\mu + u - t$	$-4\mu + 2u$
ΔE	$-\mu - t$	$-\mu - 2t' + t$	$-\mu + u - t' + 2t'$	$-\mu + u + t$	

Якщо прийняти зроблені нами припущення про відносні величини інтегралів перестрибування електронів, то: ΔE приймає значення: $-1; -0.6; 6.1; 5.5$

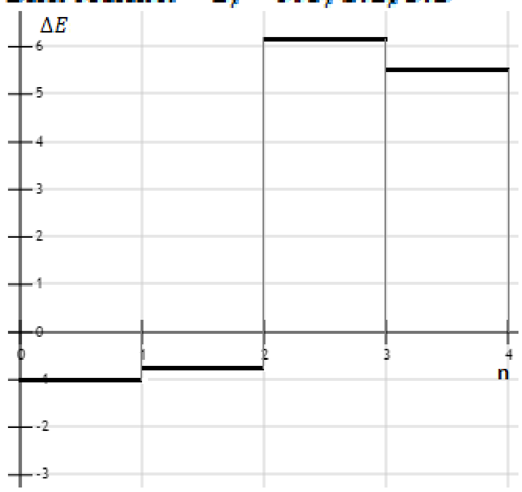

Рис. 1. Залежність енергії когезії від заповнення двох вузлового кластера.

Як видно з рис. 1 при переході через половинне заповнення кластера спостерігається різка зміна енергії когезії, пов’язана з кулонівського відштовхування між електронами. Аналогічну операцію можна провести і для більшої кількості вузлів. В результаті ми отримаємо:

Для трьох вузлової задачі ми отримаємо:

Для видалення одного електрона із трьох вузлового кластеру необхідно обрахувати енергію зв’язку електрона від кількості вузлів в моделі Хаббарда.

Таблиця 5

Результати для трьох вузлової задачі Хаббарда.

n	0	1	2	3	4
$E_{осн}$	0	$-\mu$	$-\mu-\sqrt{2}t$	$-2\mu-t$	$-2\mu+2t$
ΔE	$-\mu$	$-\sqrt{2}t$	$-\mu-t+\sqrt{2}t$	$3t$	$-2t+U$
n	5	6	7	8	9
$E_{осн}$	$-2\mu+U$	$-3\mu-t$	$-3\mu+3t$	$-3\mu+3t+U$	$-4\mu+U$
ΔE	$-\mu-t+U$	$4t$	U	$-\mu-3t$	U
n	10	11	12	13	14
$E_{осн}$	$-4\mu+2U$	$-5\mu+2U$	$-6\mu+3U$		
ΔE	$-\mu$	$-\mu+U$			

Якщо прийняти зроблені нами припущення про відносні величини інтегралів перестрибування електронів, то:

ΔE приймає значення: $0;\ -1.4; 0.4; 3; 3; 4; 4; 5;\ -3; 5; 0; 5$

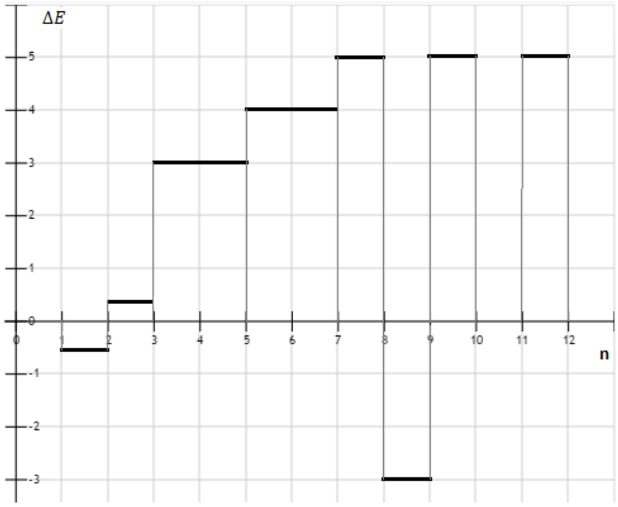

Рис. 2. Залежність енергії когезії від заповнення трьох вузлового кластера.

Як видно з рис. 2 при переході через половинне заповнення кластера спостерігається різка зміна енергії когезії, пов’язана з кулонівського відштовхування між електронами.

Для чотирьох вузлової задачі ми отримаємо:

Для видалення одного електрона із кластеру необхідно обрахувати енергію зв’язку електрона від кількості вузлів в моделі Хаббарда.

Таблиця 6

Результати для чотирьох вузлової задачі Хаббарда.

n	0	1	2	3	4
$E_{осн}$	0	$-\mu-\frac{(\sqrt{5}-1)t}{2}$	$-\mu-\frac{(\sqrt{5}+1)t}{2}$	$-2\mu-t$	$-2\mu+U$
ΔE	$-\mu-\frac{(\sqrt{5}-1)t}{2}$	$-t$	$-\mu+\frac{(\sqrt{5}-1)t}{2}$	$U+t$	$-\mu-U-\frac{(\sqrt{5}-1}{2}$

n	5	6	7	8	9
$E_{осн}$	$-3\mu-\frac{(\sqrt{5}-1)t}{2}$	$-3\mu-\frac{(\sqrt{5}+1)t}{2}$	$-3\mu+U$	$-3\mu+U-\sqrt{2}$	-4μ
ΔE	$-t$	$U+\frac{(\sqrt{5}+1)t}{4}$	$-\sqrt{2}t$	$-\mu-U-\sqrt{2}t$	$U-t$
n	10	11	12	13	14
$E_{осн}$	$-4\mu+U-t$	$-4\mu+U$	$-4\mu+U+2t$	$-4\mu+2U$	$-5\mu-\frac{2U-(\sqrt{5}-}{4}$
ΔE	t	$2t$	$U-2t$	$-\mu-\frac{6U+(\sqrt{}}{}$	$-\frac{t}{2}$
n	15	16	17	18	19
$E_{осн}$	$-5\mu-\frac{2U-(\sqrt{5}+}{4}$	$-5\mu+2U-t$	$-5\mu+2U$	$-5\mu+2U-($	$-5\mu+2U-\frac{(\sqrt{17}}{}$
ΔE	$\frac{6U+(\sqrt{5}-3)t}{4}$	t	$-\frac{(\sqrt{17}-3)t}{4}$	$-\frac{3t}{2}$	$\frac{(-4\sqrt{3}+\sqrt{17}+3)}{4}$
n	20	21	22	23	24
$E_{осн}$	$-5\mu+2U-\sqrt{3}t$	$-5\mu+2U$	$-6\mu+\frac{12U-(\sqrt{5}-}{4}$	$-6\mu+\frac{12U-}{}$	$-6\mu+3U$
ΔE	$-\sqrt{3}t$	$-\mu+\frac{4U-(\sqrt{5}-1)}{4}$	$-\frac{t}{2}$	$-\frac{(\sqrt{5}-1)t}{4}$	$-\mu-\frac{(\sqrt{5}-1)t}{4}$
n	25	26	27		
$E_{осн}$	$-7\mu+\frac{12U-(\sqrt{5}}{4}$	$-7\mu+\frac{12U-(\sqrt{5}+}{4}$	$-8\mu+4U$		
ΔE	$-\frac{t}{2}$	$-\mu+\frac{4U-(\sqrt{5}+1)}{4}$			

Якщо прийняти зроблені нами припущення про відносні величини інтегралів перестрибування електронів, то:

ΔE приймає значення: -0.62; -1; 0.62; 6; -5.62; -1; 6.62; -1.4; -4.6; 4; 1; 2; 3; -7.31; -0.5; 7.31; 1; -0.28; -1.5; 0.05; -1.73; 4.69; -0.5; -0.81; -0.81; -0.5; 4.19

Як видно з рис. 3 при переході через половинне заповнення кластера спостерігається різка зміна енергії когезії, пов'язана з кулонівського відштовхування між електронами.

Рис. 3. Залежність енергії когезії від заповнення трьох вузлового кластера.

Залежність енергії когезії від кількості електронів на кластері має складний характер, оскільки при великих кількостях електронів потрібно також враховувати конкретні електроні конфігурації, в яких вони перебувають. Однак вже з порівняння рисунків 1, 2, 3 видно, що збільшується кількість електронів, максимальні енергії зв'язку зростають, а середні енергії зменшуються, при чому максимальні енергії є більшими для більш ніж наполовину заповнених кластерів.

Висновки. В цій роботі, шляхом діагоналізації кластерів, в межах яких електрони описуються гамільтоніаном моделі Хаббарда, досліджено залежність енергії зв'язку електронів від кількості електронів на кластері та показано, що вже навіть для малих кластерів спостерігається немонотонна концентраційна залежність та асиметрія відносно половинного заповнення 3d зони перехідних металів.

ЛІТЕРАТУРА

1. Томашевський В. М. Моделювання систем. – К.: Видавнича група BHV, 2005. – 352 с.: іл.
2. Макс Борн, Физика в жизни моего поколения, М., ИЛ, 1963 р., с. 228.
3. Hubbard J. Electron correlation in narrow energy bands // Proc.Roy.Soc.- 1963.- A 281, № 1369.- P. 238-257
4. Wei-Feng Tsai. Inhomogeneous Hubbard Models. Dissertation for the degree of Doctor of Phylosophy in Physics – University of California, Los Angeles, 2008. –141p.

Годун П.

Науковий керівник – доц. Мацюк В. М.

ЗАСОБИ І ПРИЙОМИ РЕАЛІЗАЦІЇ МІЖПРЕДМЕТНИХ ЗВ'ЯЗКІВ

Актуальність проблеми дослідження. Міжпредметні зв'язки в сучасній дидактиці й методиці навчання розглядаються як одна з найважливіших дидактичних умов підвищення наукового рівня викладання будь-якого навчального предмета та підвищення ефективності всього процесу навчання.

До основних завдань середньої освіти віднесено набуття школярами практично-необхідних життєво важливих знань, а поряд із цим - розвиток творчої особистості, формування цілісного природничо- наукового світогляду учнів. Розв'язання останнього завдання можливо лише за умови інтеграції змісту природничих предметів, особливо з урахуванням однієї із визначальних рис нових програм - інформаційного розвантаження навчального матеріалу. І тут перед педагогами і методистами постає проблема вибору засобів інтеграції, того стержня, який об'єднував би матеріал та допомагав здійснювати міжпредметні та транс дисциплінарні зв'язки [7, с. 40].

Реалізації міжпредметних зв'язків у навчанні сприяє наступність у формуванні понять на уроках різних дисциплін [1, с. 16].

Метою даної статті є визначення засобів реалізації міжпредметних зв'язків в процесі навчання та методичних прийомів здійснення міжпредметних зв'язків, коротка їх характеристика.

Питання про шляхи здійснення міжпредметних зв'язків - один із аспектів загальної проблеми вдосконалення методів навчання. Сучасні методи навчання повинні допомагати різносторонньому використанню міжпредметних зв'язків, що відображені в змісті освіти. Міжпредметні зв'язки позбуджують до пошуку методів, які потребують взаємозв'язку вчителів різних предметів. Учитель не повинен діяти самостійно в предметній системі навчання, а працювати зі своїми колегами.

У працях П.Р. Атутова, М.М. Берулави, С.У. Гончаренка, Р.С. Гуревича, І.А. Зязюна, В.Р. Ільченко, В.М. Максимової, В.К. Сидоренка, Д.А. Тхоржевського, доведено, що однією з найбільш важливих умов підвищення наукового рівня вивчення основ наук та підвищення ефективності всього навчального процесу є дидактична інтеграція знань.

Проблема практичної реалізації міжпредметних зв'язків у навчально-виховному процесі розроблялася на рівні середньої загальноосвітньої школи, зокрема, у дослідженнях Н. Буринської, І.Д. Звєрєва, В.Р. Ільченко, В.М. Максимової, професійно-технічних навчальних закладів у працях П.Р. Атутова, Г.М. Гуторова, О.С. Дубінчук, І.К. Петрової [2, с. 34].

Засоби реалізації міжпредметних зв'язків в процесі навчання можуть бути різними: запитання, завдання, задачі, наочні посібники, тексти, проблемні ситуації, пізнавальні задачі, навчальні проблеми міжпредметного характеру та інші.

Питання міжпредметного характеру направляють діяльність учнів на відтворення раніше вивчених в різних навчальних предметах знань і на їх застосування при вивчені нового навчального матеріалу.

Особливе значення для активізації пізнавальної діяльності учнів мають проблемні питання. Проблемним називається питання, що містить видиме або передбачає пізнавальне протиріччя. Це протиріччя може відображати зв'язок з різних предметів. Тоді проблемне питання матиме міжпредметний характер. Міжпредметні проблемні питання служать різним цілям в навчанні. Це можуть бути окремі ситуативні питання, які узагальнюють певні поняття, що вивчаються в різних предметах, але ці питання не об'єднуються вчителем загальною задачею. Подібні питання важливі. Але на уроці вони відіграють лише допоміжну роль.

Міжпредметні проблемні питання можуть бути зв'язані єдиною навчальною задачею. Сукупність