

Ю.Л. Скоренький, О.І. Крамар

## Особливості стабілізації антиферромагнітного впорядкування в моделі квазіодновимірних органічних надпровідників

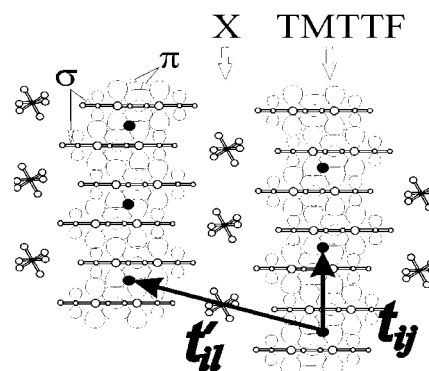
Тернопільський державний технічний університет імені Івана Пулюя,  
вул. Руська, 56, м. Тернопіль, 46001, Україна, E-mail: skorenky@tu.edu.te.ua

В методі одноелектронних запізнюючих функцій Гріна з використанням ефективного гамільтоніана в конфігураційному представленні досліджено перехід антиферромагнетик-парамагнетик у вузькозонних низьковимірних системах. Отримано вираз для параметра ефективного обміну  $zJ_{\text{eff}}$ , який є ключовим для існування антиферромагнетизму в квазіодновимірній системі з сильною кулонівською кореляцією електронів; при збільшенні  $zJ_{\text{eff}}/w$  температура фазового переходу (температура Нееля) швидко зростає. Проведено теоретичний розрахунок фазової (p-T) діаграми переходу з антиферромагнітного у парамагнітний стан для системи  $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ , результати якого добре узгоджуються з експериментальними даними.

**Ключові слова:** квазіодновимірні надпровідники, антиферромагнітне впорядкування, ефективний обмін, корельований перенос електронів.

Стаття поступила до редакції 04.01.2006; прийнята до друку 14.09.2007.

В останні роки увагу дослідників все більше привертають органічні надпровідники, в яких спостерігається тонкий взаємозв'язок між металічною, надпровідною, антиферромагнітною та зарядово-впорядкованою фазами [1,2]. Властивості цих сполук є надзвичайно чутливими до прикладання зовнішнього тиску, змін температури, магнітного поля та легування. Яскравими прикладами таких матеріалів є сполуки на основі тетраметил-тетратіафулвалену (TMTTF) чи тетраметил-тетраселенфулвалену (TMTSF). Солі Фабре  $(\text{TMTTF})_2\text{X}$  (тут X позначає одновалентний неорганічний аніон  $\text{PF}_6$ ,  $\text{AsF}_6$ ,  $\text{ClO}_4$  чи  $\text{Br}$ ) та Бекгарда  $(\text{TMTSF})_2\text{X}$  є сильно анізотропними органічними провідниками з багатомісцевими фазовою діаграмою, яка містить області антиферромагнітного, діелектричного, парамагнітного металічного, надпровідного стану та стану хвилі спінової густини, індукованого магнітним полем. Переходи між цими фазами можуть бути викликані змінами температури, заміщенням аніона X, прикладанням зовнішнього тиску  $p$  чи магнітного поля. Кристали органічних провідників  $(\text{TMTTF})_2\text{X}$  та  $(\text{TMTTF})_2\text{X}$  збудовані з зигзагоподібних ланцюжків плоских молекул TMTTF (TMTSF) та сусідніх ланцюжків аніонів X, як показано на рисунку 1.



**Рис. 1.** Структура сполуки  $(\text{TMTTF})_2\text{X}$ . Відмічено  $\pi$ - та  $\sigma$ -орбіталі. Також показано інтеграли перестрибування вздовж ланцюжка  $t_{ij}$  та в площині між ланцюжками  $t'_{ij}$ .

В роботі [3] для випадку сильного міжелектронного відштовхування, коли габбардівські квазічастинкові підзони значно віддалені та міжзонними переходами можна знехтувати, було застосовано метод канонічного перетворення гамільтоніану та отримано ефективний гамільтоніан

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= H_0 + H_{\text{tr}} + H'_{\text{tr}} + \\ &+ H_{\text{ex}} + H'_{\text{ex}} + \tilde{H}_{\text{ex}} + \tilde{H}'_{\text{ex}}, \\ H_0 &= -\mu \sum_{i\sigma} (X_i^\sigma + X_i^{\sigma 2}) + U \sum_i X_i^2, \\ H_{\text{tr}} &= \sum_{(ij)\sigma} t_{ij}(n) X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \sum_{(ij)\sigma} \tilde{t}_{ij}(n) X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2}, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned}
H'_{tr} &= \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t'_{ij}(n) X_i^{\sigma 0} X_j^{\sigma 0} + \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \tilde{t}'_{ij}(n) X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2}, \\
H_{ex} &= -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} J(ij) \left( (X_i^{\sigma} + X_i^{\sigma 2}) (X_j^{\sigma} + X_j^{\sigma 2}) + X_i^{\sigma \bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma} \sigma} \right), \\
H'_{ex} &= -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} J'(ij) \left( (X_i^{\sigma} + X_i^{\sigma 2}) (X_j^{\sigma} + X_j^{\sigma 2}) + X_i^{\sigma \bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma} \sigma} \right), \\
\tilde{H}_{ex} &= -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \tilde{J}(ij) (X_i^{\sigma} X_j^{\sigma} - X_i^{\sigma \bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma} \sigma}), \\
\tilde{H}'_{ex} &= -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \tilde{J}'(ij) (X_i^{\sigma} X_j^{\sigma} - X_i^{\sigma \bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma} \sigma}).
\end{aligned}$$

Тут  $X^{kl}$  – є оператори переходу вузла із стану  $|l\rangle$  в стан  $|k\rangle$  (оператори Габбарда) в конфігураційному представленні.

Доданки в гамільтоніані (1) мають наступний зміст:  $H_0$  описує електронну підсистему в атомній границі ( $\mu$  – хімічний потенціал,  $U$  – енергія кулонівського відштовхування електронів на вузлі), перша сума в  $H_{tr}$  описує перестрибування електрона в ланцюжку молекул TMTTF (TMTSF) між однократно зайнятими та незайнятими вузлами з інтегралом переносу  $t_{ij}(n)$  (ці процеси формують нижню габбардівську підзону), друга сума – між двократно та однократно зайнятими вузлами з інтегралом переносу  $\tilde{t}_{ij}(n)$  (ці процеси формують верхню габбардівську підзону),  $H'_{tr}$  описує відповідні процеси перестрибування електрона між ланцюжками з інтегралами переносу  $t'_{ij}(n)$  та  $\tilde{t}'_{ij}(n)$ ,  $H_{ex}$  та  $H'_{ex}$  описують прямий міжвузловий обмін феромагнітного типу вздовж ланцюжка молекул та між ланцюжками, відповідно;  $\tilde{H}_{ex}$  описує ефективну обмінну взаємодію в ланцюжку молекул з ефективним обмінним інтегралом  $\tilde{J}(ij) = \frac{(\tilde{t}_{ij}(n))^2}{U}$ ,

$\tilde{H}'_{ex}$  описує ефективну міжланцюжкову обмінну взаємодію з ефективним обмінним інтегралом  $\tilde{J}'(ij) = (\tilde{t}'_{ij}(n))^2 / U$  ( $\tilde{t}_{ij}$  та  $\tilde{t}'_{ij}$  – інтеграли парного

народження дірок і двійок при трансляційному русі вздовж ланцюжка молекул TMTTF та між ланцюжками, відповідно). Інтеграли переносу є концентраційно-залежними внаслідок врахування корельованого переносу електронів [4], який приводить до залежності ймовірностей міжвузлових переходів від заселеності вузлів ґратки. Анізотропію транспортних властивостей зручно описувати за допомогою безрозмірного параметра  $g = t'_{ij}(n)/t_{ij}(n)$  ( $g$  може залежати від зовнішнього тиску чи легування). Для (TMTSF)<sub>2</sub>X з аніонами типу PF<sub>6</sub>, ClO<sub>4</sub> величини провідності вздовж кристалографічних напрямків a:b:c співвідносяться як 10<sup>5</sup>:10<sup>3</sup>:10<sup>0</sup> [5].

Моделі квазіодновимірних надпровідників формувалися нещодавно в роботах [6-9] в термінах операторів народження і знищення електронних станів (ми, натомість, використовуємо конфігураційне представлення, яке є більш зручним для аналізу, незважаючи на певну громіздкість гамільтоніану). Згадані моделі були надзвичайно важкими для опрацювання не лише стандартними методами теорії твердого тіла, але і такими сучасними методами, як теорія динамічного середнього поля [10]. Для дослідження цих моделей було розвинено двочастинкове самоузгоджене наближення [8], коміркову теорію динамічного середнього поля [9], динамічне кластерне наближення [11], кластерну теорію збурень [12]. Проте застосування цих нових методів пов'язане із значно більшим часом числових розрахунків, обмеженнями на значення параметрів системи, труднощами з ідентифікацією механізмів фізичних ефектів. В той же час існує метод незбуреного характеру [4, 13, 3], який дозволяє пояснити такі особливості сильно скорельованих електронних систем, як перехід метал-діелектрик [14-17], феромагнетизм [18-20] та електрон-діркову асиметрію провідності [21,22]. Із застосуванням нової процедури розчеплення ланцюжка рівнянь для функцій Гріна, запропонованої в роботах [4,13], було отримано одночастинкову функцію Гріна квазіодновимірного провідника типу (TMTSF)<sub>2</sub>X у вигляді:

$$\langle \langle X_s^{\sigma \uparrow} | X_{s'}^{\sigma \uparrow} \rangle \rangle_{\vec{k}} = \frac{\langle X_s^{\sigma \uparrow} + X_{s'}^{\sigma \uparrow} \rangle}{2\pi} \left( \frac{A_{\vec{k}}^{\uparrow}}{E - E_1^{\uparrow}(\vec{k})} + \frac{B_{\vec{k}}^{\uparrow}}{E - E_2^{\uparrow}(\vec{k})} \right), \quad (2)$$

$$A_{\vec{k}}^{\uparrow} = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{K^{\uparrow}}{\sqrt{(K^{\uparrow})^2 + 4\alpha_s^{\uparrow} \alpha_p^{\uparrow} (t_{\vec{k}}^{\uparrow})^2}} \right), \quad B_{\vec{k}}^{\uparrow} = 1 - A_{\vec{k}}^{\uparrow}.$$

Тут енергетичний спектр має вигляд:

$$E_{1,2}^{\uparrow}(\vec{k}) = -\mu + \frac{1}{2} \sum_x (\alpha_x^{\uparrow} t_x(n) + \beta_x^{\uparrow}(\vec{k}) - C_x^{\uparrow}) \mp \frac{1}{2} \sqrt{(K^{\uparrow})^2 + 4\alpha_s^{\uparrow} \alpha_p^{\uparrow} (t_{\vec{k}}^{\uparrow})^2}, \quad (3)$$

де  $t(\vec{k})$  – інтеграл перестрибування в  $\vec{k}$ -

представленні,  $x$  позначає вузли ґратки  $p$  чи  $s$ , які

належать до різних ланцюжків,

$$K^{\uparrow} = (\alpha_s^{\uparrow} - \alpha_p^{\uparrow})t_k(n) + \beta_s^{\uparrow} - \beta_p^{\uparrow} - C_s^{\uparrow} + C_p^{\uparrow},$$

$$C_x^{\uparrow} = z_1 J \lambda_x^{\uparrow} + \frac{1}{2} z_2 J' \lambda_x^{\uparrow} + z_1 \tilde{J} \tilde{\lambda}_x^{\uparrow} + \frac{1}{2} z_2 \tilde{J}' \tilde{\lambda}_x^{\uparrow}.$$

Наближена процедура розкладу квадратного кореня в рівнянні (3) по параметру  $g^2 \ll 1$  дозволяє ідентифікувати величини  $\alpha_x^{\sigma}$  та  $\alpha_x'^{\sigma}$  як фактори кореляційного звуження зони та  $\beta_x^{\sigma}(\vec{k})$  як спін-залежні зсуви центрів підзон. Підкореневий вираз у спектрі (3) є залежним від намагніченості підгратки  $m$  і, таким чином, від температури. Це дозволяє отримати температурно-залежну щільність в спектрі, наявність якої є принципово важливою для пояснення незвичайного квантового ефекту Холла у стані з хвилюю спінової густини, індукованою сильним магнітним полем [23]. Для послідовного розгляду цього ефекту в рамках нашого підходу необхідно включити в гамільтоніан (1) квантує магнітне поле (це буде зроблено в наступних роботах).

Величини факторів кореляційного звуження зони  $\alpha_x^{\sigma}$  та  $\alpha_x'^{\sigma}$ , а також параметрів  $\lambda_x^{\sigma}$ ,  $\lambda_x'^{\sigma}$ ,  $\tilde{\lambda}_x^{\sigma}$ ,  $\tilde{\lambda}_x'^{\sigma}$  можуть бути знайдені з використанням квазікласичного наближення для розрахунку середніх типу  $\langle X_s^{\downarrow\uparrow} X_j^{\uparrow\downarrow} \rangle$ , вибираючи вирази для  $\langle X_s^{\sigma} \rangle$ , відповідні до розглядуваного типу магнітного впорядкування. Спін-залежні зсуви центрів підзон  $\beta_x^{\sigma}(\vec{k})$  треба розраховувати самоузгоджено.

У випадку антиферомагнітного впорядкування вираз для концентрацій електронів зі спіном  $\sigma$  має вигляд (при використанні прямокутної густини станів):

$$n_{s\sigma} = \frac{\langle X_s^0 + X_s^{\sigma} \rangle}{2w} \times \int_{-w}^w \left( \frac{A_{\varepsilon}^{\sigma}}{\exp(E_1^{\sigma}/kT) + 1} + \frac{B_{\varepsilon}^{\sigma}}{\exp(E_2^{\sigma}/kT) + 1} \right) d\varepsilon. \quad (4)$$

Цей вираз дає можливість отримати рівняння для розрахунку хімічного потенціалу (з умови

сталості числа частинок)  $n_{s\uparrow} + n_{s\downarrow} = n$ , а також рівняння для намагніченості  $n_{s\uparrow} - n_{s\downarrow} = m$ .

Характерно, що для антиферомагнітного стану з комбінації факторів кореляційного звуження підзон та зсувів центрів підзон можна виділити множник, незалежний від знаку намагніченості:

$$\alpha_s^{\sigma} - \alpha_p^{\sigma} = \eta_{\sigma} m \left( 1 - \frac{n^2 - m^2}{(2-n)^2 - m^2} \right),$$

$$\alpha_s^{\sigma} + \alpha_p^{\sigma} = (2-n) \left( 1 + \frac{n^2 - m^2}{(2-n)^2 - m^2} \right),$$

$$\beta_s^{\sigma} - \beta_p^{\sigma} = -4\eta_{\sigma} m \frac{w(1-n)}{(2-n)^2 - m^2},$$

$$\beta_s^{\sigma} + \beta_p^{\sigma} = 2w(1-n) \frac{n(2-n) + m^2}{(2-n)^2 - m^2},$$

$$C_s^{\sigma} - C_p^{\sigma} = \eta_{\sigma} m \left( z_1(J - \tilde{J}) + \frac{z_2}{2}(J' - \tilde{J}') \right),$$

$$C_s^{\sigma} + C_p^{\sigma} = \eta_{\sigma} m \left( z_1(J + \tilde{J}) + \frac{z_2}{2}(J' + \tilde{J}') \right),$$

$$\alpha_s'^{\sigma} \alpha_p'^{\sigma} = \frac{((2-n)^2 + n^2)^2 - 4m^2(2-n)^2}{4((2-n)^2 - m^2)},$$

де  $\eta_{\sigma} = 1$ , при  $\sigma = \uparrow$  і  $\eta_{\sigma} = -1$ , при  $\sigma = \downarrow$ ,  $w$  – напівширина незбуреної енергетичної зони. Таким чином отримуємо, що  $K^{\sigma} = \eta_{\sigma} m L$ , де

$$L = \left( 1 - \frac{n^2 - m^2}{(2-n)^2 - m^2} \right) t_k - \frac{4w(1-n)}{(2-n)^2 - m^2} + z J_{\text{eff}},$$

$$z J_{\text{eff}} = z_1(J - \tilde{J}) + z_2(J' - \tilde{J}')/2 < 0, \quad (5)$$

$z_1$  – число найближчих сусідніх вузлів в ланцюжку,  $z_2$  – між ланцюжками.

Систему рівнянь для намагніченості та хімічного потенціалу можна подати у вигляді:

$$m = \frac{m}{4w} \int_{-w}^w d\varepsilon (f(E_1) + f(E_2)) - \frac{m(2-n)}{4w} \int_{-w}^w d\varepsilon \frac{L(\varepsilon)}{\sqrt{D}} (f(E_1) - f(E_2)),$$

$$n = \frac{2-n}{2wn} \int_{-w}^w d\varepsilon (f(E_1) + f(E_2)) - \frac{m^2(2-n)}{4w} \int_{-w}^w d\varepsilon \frac{L(\varepsilon)}{\sqrt{D}} (f(E_1) - f(E_2)), \quad (6)$$

причому  $\sqrt{D} = \sqrt{(K_{\varepsilon}^{\sigma})^2 + 4\alpha_s'^{\sigma} \alpha_p'^{\sigma} g^2 \varepsilon^2}$ ,

$f(E) = 1/(\exp(E/kT) + 1)$ . Оскільки  $g^2 \ll 1$ , завжди можна розкласти корінь:

$$\left( 1 + \frac{4\alpha_s'^{\sigma} \alpha_p'^{\sigma} g^2 \varepsilon^2}{(K_{\varepsilon}^{\sigma})^2} \right)^{-\frac{1}{2}} = 1 - \frac{2\alpha_s'^{\sigma} \alpha_p'^{\sigma} g^2 \varepsilon^2}{(K_{\varepsilon}^{\sigma})^2}$$

тоді

$$A_{\varepsilon}^{\sigma} = \frac{\alpha_s^{\sigma} \alpha_p^{\sigma} g^2 \varepsilon^2}{\left( (\alpha_s^{\sigma} - \alpha_{ps}^{\sigma}) \varepsilon + \beta_s^{\sigma} - \beta_p^{\sigma} - (C_s^{\sigma} - C_p^{\sigma}) \right)^2}.$$

Система рівнянь (6) дозволяє розрахувати намагніченість підґратки в залежності від температури, зовнішнього тиску та параметрів моделі, а також з умови  $m(T) \rightarrow 0$  отримати рівняння для визначення температури Нееля. В точці

$$\frac{2n}{2-n} = 2 - \frac{\Theta_N}{\alpha_1 w} \ln \left( \frac{\exp\left(\frac{\mu^*}{\Theta_N}\right) + \exp\left(\frac{\alpha_1 w}{\Theta_N}\right)}{\exp\left(\frac{\mu^*}{\Theta_N}\right) + \exp\left(-\frac{\alpha_1 w}{\Theta_N}\right)} \right) - \frac{\Theta_N}{\alpha_2 w} \ln \left( \frac{\exp\left(\frac{\mu^*}{\Theta_N}\right) + \exp\left(\frac{\alpha_2 w}{\Theta_N}\right)}{\exp\left(\frac{\mu^*}{\Theta_N}\right) + \exp\left(-\frac{\alpha_2 w}{\Theta_N}\right)} \right) \quad (7)$$

тут  $\Theta_N = kT_N$ ,  $\mu^* = \mu - \beta^* + C^*$ ,

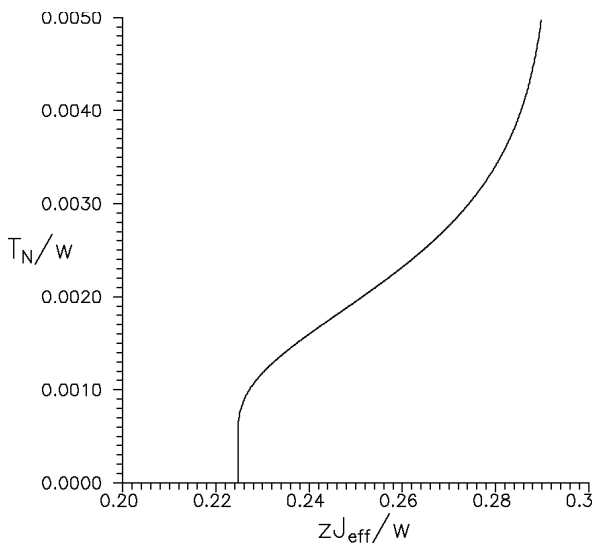
$$\alpha_{1,2} = (1 \mp g) \frac{2-2n+n^2}{2-n}, \quad \beta^* = \frac{w(1-n)n}{2-n},$$

$$C^* = \frac{n}{2} (z_1 (J + \tilde{J}) + z_2 (J' + \tilde{J}')/2).$$

В квазіодновимірних надпровідниках переходи відбуваються при температурах порядку 10 К. Температурна залежність хімічного потенціалу при таких умовах проявляється слабо, тому можна обмежитися виразом для хімічного потенціалу в основному стані. При  $T = 0$  для хімічного потенціалу отримуємо вираз:

$$\frac{\mu}{w} = (1-g^2) \frac{(3n-2)(2-2n+n^2)}{(2-n)^2} - \frac{(1-n)n}{2-n} + \frac{n z J_{\text{eff}}}{2w} \quad (8)$$

Використовуючи вираз (8) можна числовим методом розрахувати залежності температури Нееля



**Рис. 2.** Залежність температури Нееля від ефективного обміну антиферомагнітного типу при  $g=0,1$ .

Нееля

$$L(\varepsilon) = \left( 1 - \frac{n^2}{(2-n)^2} \right) \varepsilon - \frac{4w(1-n)}{(2-n)^2} + zJ_{\text{eff}}.$$

Рівняння на хімічний потенціал можна подати у вигляді:

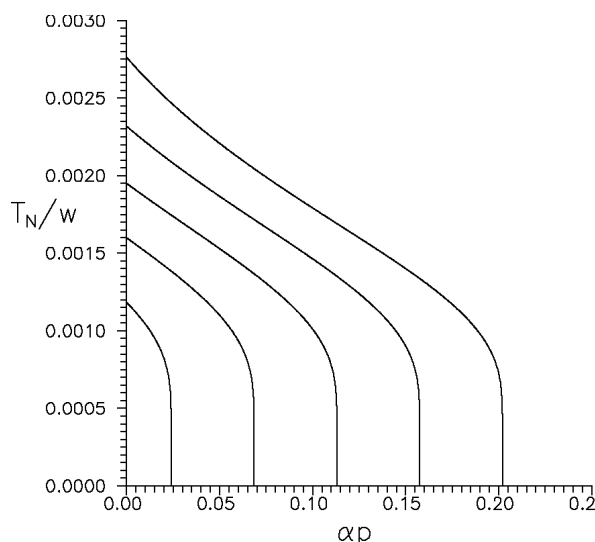
від параметрів моделі, тиску при концентрації електронів  $n=0,5$ , характерній для сполук (TMTSF)<sub>2</sub>X.

З рисунка 2 видно, що параметр  $zJ_{\text{eff}}/w$  є ключовим для існування антиферомагнетизму в системі. Зокрема, для  $n=0,5$  та  $g=0,1$  антиферомагнетизм виникає при  $zJ_{\text{eff}}/w > 0,225$ ; при збільшенні  $zJ_{\text{eff}}/w$  температура переходу швидко зростає.

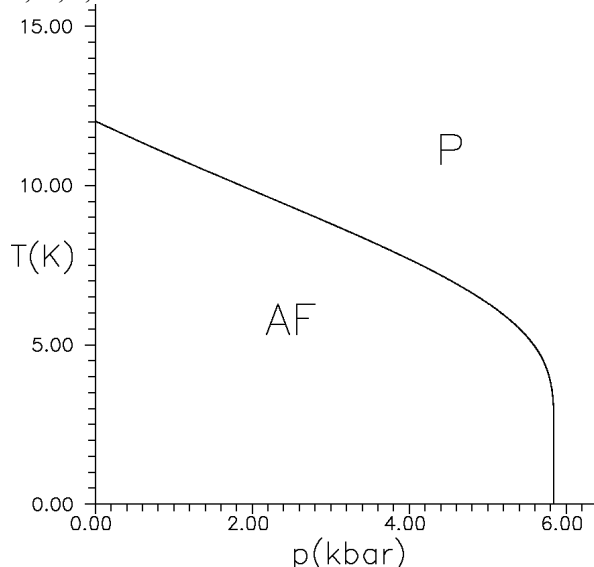
Цей рисунок можна використовувати для опосередкованої оцінки параметра ефективного антиферомагнітного обміну (який враховує і прямий обмін, і антиферомагнітний надобмін, і корельований перенос) у різних сполуках ряду (TMTCF)<sub>2</sub>X (де С позначає сірку або селен).

На рисунку 3 подано залежності температури Нееля від параметра деформації ґратки при різних значеннях  $zJ_{\text{eff}}/w$ . З рисунка видно, що в системі, яка описується моделлю (1), при зростанні температури відбувається перехід з антиферомагнітної фази у парамагнітну, причому значення температури Нееля суттєво залежить від параметра ефективного антиферомагнітного обміну (зростання  $zJ_{\text{eff}}/w$  приводить до збільшення  $T_N$ ). Прикладання тиску також може привести до переходу антиферомагнетик-парамагнетик, причому при більших значеннях  $zJ_{\text{eff}}/w$  більшим є критичне значення тиску.

Для розрахунку залежності температури Нееля від прикладеного тиску важливо коректно вибрати значення параметру ефективної обмінної взаємодії та параметру анізотропії для конкретної сполуки. В роботі [24] зі спектрів відбивання в інфрачервоній області було отримано оцінки інтегралів переносу. Інтеграл  $|t_{ij}|$  має такі значення для сполук: 0,27 еВ для (TMTSF)<sub>2</sub>ClO<sub>4</sub>, 0,25 еВ для (TMTSF)<sub>2</sub>PF<sub>6</sub>, 0,27 еВ для (TMTSF)<sub>2</sub>BF<sub>4</sub>, 0,25 еВ для (TMTTF)<sub>2</sub>ReO<sub>4</sub>, 0,20 еВ для (TMTTF)<sub>2</sub>Br, 0,18 еВ для (TMTTF)<sub>2</sub>PF<sub>6</sub>. Зазначимо у цьому зв'язку, що заміна S на Se приводить до зростання інтегралів переносу вздовж ланцюжка. В нашому підході така заміна ("хімічний тиск") може бути змодельована перенормуванням параметра переносу. Прикладання зовнішнього тиску приводить до збільшення ймовірності перестрибування



**Рис. 3.** Залежність температури Нееля від деформації ґратки при різних значеннях ефективного обміну антиферомагнітного типу при  $g = 0,1$ . Зверху вниз:  $zJ_{eff}/w = 0,27, 0,26, 0,25, 0,24, 0,23$ .



**Рис. 4.** Теоретично розрахована фазова діаграма переходу антиферомагнетик-парамагнетик.  $zJ_{eff}/w = 0,2535, g = 0,1, \alpha = 0,022$ .

електрона, отже до перенормування інтеграла переносу  $t(\vec{k}) \rightarrow (1 + \alpha\rho)t(\vec{k})$ , згідно з роботою [25]. Оцінки параметрів міжплощинного переносу, що зроблені в [26], дають  $t' = 0,012 \pm 0,001$  eV для  $(TMTSF)_2ClO_4$ . Сполуку  $(TMTSF)_2PF_6$  зазвичай моделюють начверть заповненою моделлю Габбарда із значення параметрів  $t = 0,270$  eV,  $U = 1 \div 1,25$  eV [6]. Межа між антиферомагнітним та надпровідним станами, знайдена у роботі [6] із застосуванням

наближення хаотичних фаз добре узгоджується з експериментом для сполуки  $(TMTSF)_2AsF_6$  при  $g = 0,099$ . За оцінками робіт [6, 27] для сполук  $(TMTTF)_2PF_6$ ,  $(TMTTF)_2ClO_4$  значення  $g = 0,1$ . В роботі [28] напівширина зони провідності для класу сполук  $(TMTSF)_2X$  була оцінена в 0,8 eV за даними вимірювань питомого опору. Для прикладу, для сполуки  $(TMTSF)_2PF_6$  отримуємо оцінку параметра ефективного антиферомагнітного обміну  $zJ_{eff}/w = 0,2535$ , а параметр анізотропії приймаємо рівним  $g = 0,1$ .

На рисунку 4 подано теоретично розраховану фазову діаграму переходу з антиферомагнітного у парамагнітний стан для системи  $(TMTSF)_2PF_6$ . Можна бачити, що дані теоретичного аналізу добре узгоджуються із експериментальними отриманою фазовою діаграмою цієї сполуки за відсутності магнітного поля [29]. Розрахунок впливу магнітного поля на електронну підсистему виходить за рамки даної роботи, хоча застосований підхід дозволяє здійснити таке узагальнення.

Варто відзначити, що при дуже низьких температурах в області значень тисків, при яких в сполуці  $(TMTSF)_2PF_6$  відбувається перехід в надпровідний стан, згідно даних наших розрахунків існують локалізовані магнітні моменти.

Подібні переходи відбуваються і у інших сполуках цього класу, наприклад,  $(TMTSF)_2NO_3$  при атмосферному тиску є металом аж до температури 10 K, при якій відбувається перехід у антиферомагнітний стан. Прикладання зовнішнього тиску приводить до зменшення  $T_N$ , перехід у надпровідний стан відбувається аж під тиском 24 кбар при температурі 50 мК [30].

## Висновки

Результати, отримані у цій роботі, дозволяють пояснити переходи із антиферомагнітного у парамагнітний стан при збільшенні температури чи прикладанні тиску у цілому класі сполук  $(TMTSF)_2X$  та  $(TMTTF)_2X$  (для яких значення параметрів  $g$ ,  $zJ_{eff}/w$ ,  $\alpha$  відомі з результатів експериментів чи теоретичних розрахунків зонної структури). Отриманий нами вираз для параметра ефективного міжатомного обміну враховує прямі та непрямі обмінні взаємодії (як в ланцюжку молекул, так і між ланцюжками), намагніченість підґратки та концентрацію електронів. Встановлено, що цей ефективний міжатомний обмін відіграє вирішальну роль в стабілізації магнітного впорядкування; внутрішньоатомна кулонівська взаємодія та корельований перенос сприяють стабілізації антиферомагнетизму.

- [1] T. Ishiguro, K. Yamaji and G. Saito. *Organic Superconductors*. Springer, New York, 519 p. (1998).
- [2] C. Bourbonnais. in *High Magnetic Fields Applications in Condensed Matter Physics and Spectroscopy*. Eds. C. Berthier et al., pp. 235-270, Springer, New York, 493 p. (2002).
- [3] Yu. Skorenky, O. Kramar. Energy spectrum of the organic quasi-1D conductors with NNN and correlated hopping // *Condens. Matter Phys.*, **9**(1), pp.161-168 (2006).

- [4] Дідух Л. Модель вузькозонного матеріалу з електронно-дірковою асиметрією // *Журн. фіз. досл.*, **1**(2), сс. 241-250 (1997).
- [5] U.M. Sheven, S.T. Hannahs, C. Immer, and P.M. Chaikin. Thermodynamics in the high-field phases of  $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$  // *Phys. Rev. B*, **56**(13), pp. 7804-7807 (1997).
- [6] J. Favand, F. Mila. Theory of the optical conductivity of  $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$  in the midinfrared range // *Phys. Rev. B*, **54**(15), pp. 10425-10429 (1996).
- [7] W. Hofstetter, D. Vollhardt. Frustration of antiferromagnetism in the  $t$ - $t'$ -Hubbard model at weak coupling // *Ann. Physik*, **7**, pp.48-52 (1998).
- [8] S. Allen, A.-M. Tremblay, and Y. M. Vilk. in *Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons*. Eds. D. Senechal, A.-M. Tremblay and C. Bourbonnais, pp. 341-356, CRM Series in Mathematical Physics, Springer, New York, 361 p. (2003).
- [9] O. Parcollet, G. Biroli, G. Kotliar. Cluster dynamical mean field analysis of the Mott transition // *Phys. Rev. Lett.*, **92**(22), 226402 (2004).
- [10] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions // *Rev. Mod. Phys.*, **68**(1), pp. 13-125 (1996).
- [11] M.H. Hettler et al. Dynamical cluster approximation: nonlocal dynamics of correlated electron systems // *Phys. Rev. B*, **61**(19), pp. 12739-12756 (2000).
- [12] D. Senechal, D. Perez, M. Pioro-Ladriere. Spectral weight of the Hubbard model through cluster perturbation theory // *Phys. Rev. Lett.*, **84**(3), pp. 522-525 (2000).
- [13] L. Didukh. A modified form of the polar model of crystals // *Acta Physica Polonica B*, **31**(12), pp. 3097-3133 (2000).
- [14] L. Didukh, V. Hankevych, Yu. Dovhopyaty. Metal-insulator transition: a new mean-field approximation // *Physica B*, **259-261**, pp. 719-720 (1999).
- [15] L. Didukh and V. Hankevych. Metal-insulator transition in a generalized Hubbard model with correlated hopping at half-filling // *Phys. Stat. sol. (b)*, **211**(2), pp. 703-712 (1999).
- [16] L. Didukh, Yu. Skorenky, Yu. Dovhopyaty, and V. Hankevych. Metal-insulator transition in a doubly orbitally degenerate model with correlated hopping // *Phys. Rev. B*, **61**(12), pp. 7893-7908 (2000).
- [17] L. Didukh, Yu. Skorenky. Electron correlations in narrow energy bands: ground state energy and metal-insulator transition // *Condens. Matter Phys.*, **3**(4), pp. 787-798 (2000).
- [18] L. Didukh, O. Kramar, Yu. Skorenky. Ferromagnetic ordering in a generalized Hubbard model // *Condens. Matter Phys.*, **4**(1), pp. 101-108 (2001).
- [19] L. Didukh, Yu. Skorenky, V. Hankevych, and O. Kramar. Ground state ferromagnetism in a doubly orbitally degenerate model // *Phys. Rev. B*, **64**(14), pp. 144428(1-10) (2001).
- [20] L. Didukh and O. Kramar. Metallic ferromagnetism in the systems with strongly correlated electrons // *Condens. Matter Phys.*, **8**(3), pp. 547-564 (2005).
- [21] Л. Дідух, Ю. Скоренький, О. Крамар, Ю. Довгоп'ятий. Вплив легування, зміни температури та деформації на електронну провідність матеріалу з сильними електронними кореляціями // *Препринт Інституту фізики конденсованого стану НАН України*, ICMP-03-31U, 30 p., (2003).
- [22] L. Didukh, O. Kramar, Yu. Skorenky and Yu. Dovhopyaty. Magnetic field dependence of conductivity and effective mass of carriers in a model of Mott-Hubbard material // *Condens. Matter Phys.*, **8**(4), pp. 825-834 (2005).
- [23] W. Kang et al. Magnetotermopower study of  $(\text{TMTTF})_2\text{PF}_6$  // *Phys. Rev. B*, **45**(23), pp. 13566-13571 (1992).
- [24] D. Pedron et al. Electronic interactions in the organic conductors  $(\text{TMTSF})_2\text{X}$  ( $\text{X}=\text{ClO}_4$  and  $\text{PF}_6$ ) and  $(\text{TMTTF})_2\text{X}$  ( $\text{X}=\text{Br}$  and  $\text{PF}_6$ ) from their infrared spectra // *Phys. Rev. B*, **49**(16), pp. 10893-10907 (1994).
- [25] Р.А. Григорчук, И.В. Стасюк. Электрон-деформационное взаимодействие и сжатие решетки в кристаллах, описываемых моделью Хаббарда // *Укр. физ. журн.*, **25**(3), сс. 404-410 (1980).
- [26] G.M. Danner, P.M. Chaikin, and S.T. Hannahs. Critical imperfect nesting in  $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$  // *Phys. Rev. B*, **53**(5), pp. 2727-2731 (1996).
- [27] S.K. McKernan, S.T. Hannahs, U.M. Scheven, G.M. Danner, P.M. Chaikin. Competing instabilities and the high field phases of  $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$  // *Phys. Rev. Lett.*, **75**(8), pp. 1630-1633 (1995).
- [28] L. Gor'kov and M. Mochena. Temperature dependence of resistivity of quasi-one-dimensional conductors with nested electronic spectra // *Phys. Rev. B*, **57**(11), pp. 576204-576207 (1998).
- [29] W. Kang, S.T. Hannahs, and P.M. Chaikin. Towards a unified phase diagram in  $(\text{TMTSF})_2\text{X}$  // *Phys. Rev. Lett.*, **70**(20), pp. 3091-3094 (1993).
- [30] S. Tomic et al. Non-Ohmic electrical transport in the spin-density-wave state of tetramethyltetraselenfulvelinium nitrate,  $(\text{TMTTF})_2\text{NO}_3$  // *Phys. Rev. Lett.*, **62**(4), pp. 462-465 (1982).

Yu. Skorenkyy, O.Kramar

## **Peculiarities of the Antiferromagnetic Ordering in a Model of Quasi-Onedimensional Organic Superconductors**

*Ternopil State Technical University, 56, Ruska St., Ternopil, UA- 46001, Ukraine, E-mail: skorenky@tu.edu.te.ua*

Within the single-electron retarded Green function method, with use of effective Hamiltonian in configurational representation the transition from antiferromagnet to paramagnet state in narrow-band low-dimensional system has been studied. The form of effective exchange parameter  $zJ_{eff}/w$  which govern the antiferromagnetic order stabilization in quasi-onedimensional system with strong Coulomb correlation has been found. At increase of  $zJ_{eff}/w$  the temperature of the phase transition (Neel temperature) increases rapidly. The calculation of phase ( $p$ - $T$ ) diagram of antiferromagnet-paramagnet transition for the system  $(TMTSF)_2PF_6$  has been carried out. The obtained results agree with experimental data.

**Key words:** quasi-onedimensional superconductors, antiferromagnetic ordering, effective exchange, correlated hopping of electrons.