ВАЛЕНТНАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ d-, f- ЭЛЕМЕНТОВ В КОНФИГУРАЦИОННОЙ МОДЕЛИ ВЕЩЕСТВА

Прядко Л.Ф.
Институт проблем материаловедения НАН им. И.Н.Францевича,
03680, Киев-142, ул. Кржижановского 3, Украина, lfp@ukr.net

1. С позиций квантово-полевой теории электромагнитной материи обсуждаются концептуальные основы конфигурационной модели вещества Самсонова (КМВ) [1] в сопоставлении с идейным базисом атомной и зонной моделей. Использование единого универсального гамильтониана для квантово-статистического описания вещества, с учётом внешних полей, а также обмена системы частицами и энергией с внешним окружением, позволяет выйти за рамки стандартной схемы самосогласованного поля и рассортировать основные вклады нелокального обменно-корреляционного взаимодействия между электронами, пребывающими в состояниях различной симметрии и степени локализации. Такое обобщение базисного подхода открывает путь к более последовательной формулировке дилеммы "локализация – коллективизация" для валентных электронов и включает в себя предельные режимы, описываемые известными модельными гамильтонианами Хаббарда, Гейзенберга, Рудермана-Киттеля, Андерсона, Кондо и др., предоставляя также достаточно адекватный и физически прозрачный понятийный аппарат для качественной интерполяции между такими пределами [2].

2. На основе квантово-полевой теории анализируются эффекты, связанные с проявлением атомами переходных и редкоземельных элементов валентной неустойчивости в сплавах и соединениях. Концепция одноэлектронных состояний (атомных оболочек, молекулярных орбит, блоховских волн), последовательно заполняющихся "независимыми" электронами, позволяет реализовать лишь начальный, упрощённый проект первопринципной теории атомов, молекул или кристаллов. Такой подход отвечает замене истинных межчастичных взаимодействий в триаде "частицы-взаимодействия-поля" эффективными полями, вследствие чего теряются важны эффекты локальных межчастичных корреляций (спонтанная перестройка основного состояния в ферромагнетиках или сверхпроводниках, возникновение элементарных возбуждений поляронного или экситонного типа, фазовые переходы вещества из диэлектрического в металлическое состояние).

3. Эвристические потенции триады "состав-структура-свойства в теории вещества определяются возможностями концепций нормальной химической валентности элементов и классических моделей межатомной связи. При наличии в химическом составе материала переходных и редкоземельных элементов функцией его состава становится не только структура, но и склонность к изменению структуры под влиянием различных внешних воздействий. Источником общей неустойчивости в этом случае может стать неустойчивость одноэлектронных состояний изолированного атома в актах присоединения, отрыва или возбуждения электронов. Такая неустойчивость не только лишает эти d- и f- элементы "законного" места в Периодической Системе Менделеева, но и является причиной иррегулярного заполнения электронами валентных оболочек в больших периодах. По этой же причине в d- и f- материалах возникают состояния с "нулевой", "амфотерной" или "промежуточной" валентностью, а зависимости их свойств от внешних условий обнаруживают отклонения от законов идеального, регулярного или нормального поведения вещества.

4. Изложенные положения иллюстрируются результатами компьютерного моделирования термодинамических, магнитных и электрофизических свойств валентно-неустойчивых материалов, выполненных с использованием различных модельных гамильтонианов [3].

1. G.V.Samsonov, I.F.Pryadko, L.F.Pryadko. A Cofigurational Model of Matter.- N.Y.-L.: Consult. Bureau. - 1973.
2. Г.В.Самсонов, И.Ф.Прядко, Л.Ф.Прядко. Электронная локализация в твердом теле.- М.: Наука, 1976.
3. Л.Д.Дідух, Л.Ф.Прядко, І.В.Стасюк. Кореляційні ефекти в вузькозонних матеріалах. – Львів: Вища школа, 1978.