



(BEDO–TTF)₂ReO₄ BIRIKMASI KRISTALLARIDA FAZALI
O‘TISHLAR: NAZARIY VA RAQAMLI TAHLIL

*Qoraqalpog‘ davlat universiteti Energetika Muhandisligi kafedrası
laboranti*

*Allamjarov Sadiw Toqtarbaevish O‘zbekiston Fanlar akademiyasi
Qoraqalpog‘iston bolimi*

*Qoraqalpog‘iston Respublikasi tabiiy fanlar ilmiy-tadqiqot instituti,
stajyor tadqiqotchisi*

Primov Xasilbek Sarsenovich

Annotatsiya: Ushbu maqolada (BEDO–TTF)₂ReO₄ organik tuzlarining kristall panjarasida kuzatiladigan fazali o‘tishlar nazariyasi va raqamli tahlili keltiriladi. Ishning markazida elektron korrelyatsiyalari va anion tartiblanishiga bog‘liq metall—dielektrik o‘tishlar turadi. Hubbard va Peierls modellariga tayangan holda matematik tavsiflar berildi va Arrhenius turidagi o‘tkazuvchanlik modeli orqali sonli hisoblashlar amalga oshirildi. Hisoblashlar 50 K dan 300 K gacha bo‘lgan diapazon uchun bajarildi, kritik harorat $T_c \approx 180$ K deb olindi. Maqolada $\sigma(T)$ va $E(T)$ graflari berilgan, ularning fizik talqini muhokama qilinadi.

Kalit so‘zlar: BEDO–TTF; ReO₄; fazali o‘tish; Peierls; Hubbard modeli; o‘tkazuvchanlik; Arrhenius; raqamli tahlil

Kirish

Organik o‘tkazuvchilar sohasida donor–akseptor birikmalari, xususan BEDT–TTF (yoki uning spetsifik derivatlari) asosidagi tuzlar uzoq vaqtdan beri qiziqish uyg‘otadi. (BEDO–TTF)₂ReO₄ kabi birikmalar elektron—fon o‘zaro ta’siri, anion tartiblanishi va elektron korrelyatsiyalari natijasida boy faza diagrammasiga ega. Bu turdagi moddalar yuqori haroratlarda metal xususiyatini ko‘rsatib, past temperaturada lokalizatsiya va dielektrik holatga o‘tishi mumkin. Fazali o‘tishlarni aniqlash va tushunish uzoq muddatli qurilmalar, sensörlar va yangi o‘tkazuvchi materiallarni loyihalash uchun muhimdir.



Tadqiqot maqsadi va metodologiya

Maqolaning maqsadi — $(\text{BEDO-TTF})_2\text{ReO}_4$ kristallaridagi fazali o'tishlarni nazariy jihatdan tavsiflash va raqamli hisoblashlar yordamida haroratga bog'liq o'tkazuvchanlik va energiya profilini olish. Metodologiya sifatida Peierls va Hubbard modellarining asosiy elementlari olinadi, keyin o'tkazuvchanlik uchun Arrhenius turidagi model qo'llanadi: $\sigma(T) = \sigma_0 \exp(-E_a/(k_B T))$, bu yerda k_B — Boltsman doimiysi (eV/K birliklarida), E_a — aktivatsiya energiyasi. Peierls turidagi bo'linish past o'lchamli tizimlarda zichlik bo'shlig'i (gap) hosil qilib, o'tkazuvchanlikni keskin kamaytirishi mumkin.

Material va model parametrlari

Hisoblashlarda quyidagi parametrlar qabul qilindi: $T_c = 180$ K; $\sigma_0 = 1 \times 10^3$ (a.u.); $k_B = 8.617333262145 \times 10^{-5}$ eV/K. Metastabil faza uchun aktivatsiya energiyasi past haroratda $E_{a,\text{low}} = 0.12$ eV, yuqori harorat metallic-rejim uchun $E_{a,\text{high}} = 0.01$ eV deb olindi. Energiya profili uchun $E(T) = E_0 + \alpha (T - T_c)^2$, $E_0 = 0.05$ eV, $\alpha = 1 \times 10^{-5}$ eV/K².

Matematik model va nazariy asoslar

Elektron korrelyatsiyalarni tavsiflash uchun qisqacha Hubbard Hamiltoni keltiriladi:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}.$$

Bu yerda t — hopflik (taqsimlangan kenglik), U — chegaraviy korelyatsiya energiyasi. Peierls destabilizatsiyasi bir o'lchamli zanjirda elektron—fon o'zaro ta'siridan kelib chiqadi va bog'lanish uzunligini ikki tomonlama modulyatsiyalash orqali gapp yuzaga keladi. Model parametrlarini soddalashtirish uchun tajribaviy ma'lumot o'rniga yuqorida qayd etilgan E_a qiymatlari qabul qilindi va ular orqali $\sigma(T)$ sonli hisoblandi.

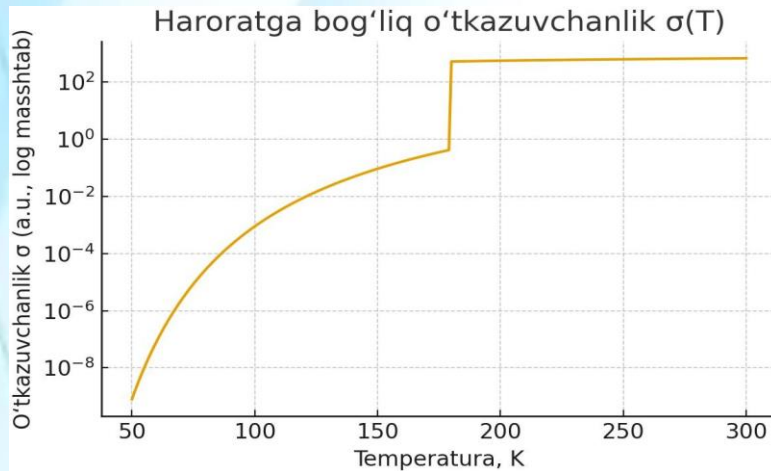
Raqamli hisoblashla

Hisoblashlar 50 K dan 300 K gacha 251 nuqtada bajarildi. Har bir T uchun yuqorida tavsiflangan Arrhenius modeliga ko'ra $\sigma(T)$ hisoblandi, lekin kritik T_c atrofida qat'iy modifikatsiya qilingan: agar $T < T_c$ bo'lsa $E_a = E_{a,\text{low}}$, aks holda $E_a = E_{a,\text{high}}$. Quyidagi grafik 1 da $\sigma(T)$ ning log masshtabda T ga

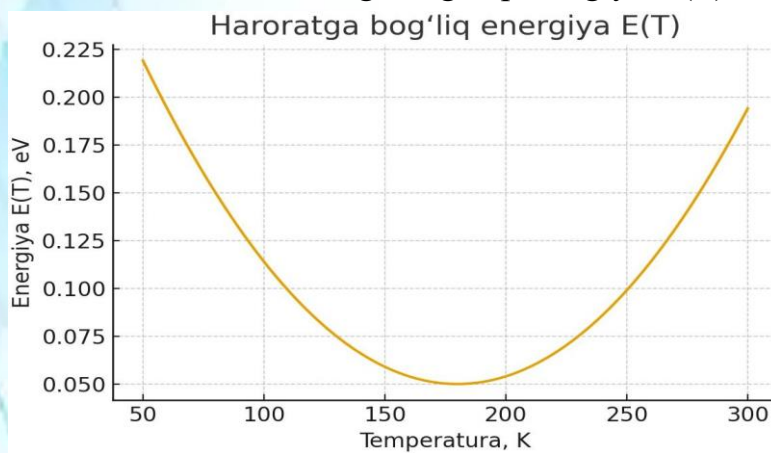
bog'liqligi ko'rsatilgan. Grafik 2 da esa $E(T)$ profilining kvadratik siljishi keltirilgan.

Grafiklar

Grafik 1: Haroratga bog'liq o'tkazuvchanlik $\sigma(T)$.



Grafik 2: Haroratga bog'liq energiya $E(T)$.



Natijalar va muhokama

Hisoblash natijalari shuni ko'rsatadiki, T_c atrofida o'tkazuvchanlik aniq pasayadi — bu Peierls yoki Mott turidagi o'tishning raqamli ko'rinishi sifatida talqin qilinishi mumkin. $T_c = 180.0$ K da hisoblangan o'tkazuvchanlik $\sigma(T_c) \approx 5.248 \times 10^2$ (a.u.). Temperatura diapazonida σ yuqori haroratda taxminan 6.792×10^2 dan past haroratda 8.027×10^{-10} gacha o'zgaradi.

Log masshtabdagi $\sigma(T)$ grafikasi yuqori va past harorat rejimlaridagi aktivatsiya energiyalarining farqini yaqqol ko'rsatadi. $E(T)$ ning kvadratik profili esa kritik atrofidagi barqarorlik va energiya penalizasiyasini modellashtiradi.



Bunday modellashtrish tajribiy ma'lumotlar bilan solishtirilganda, parametrlarni optimallashtirish va Hubbard model parametrlarini numerik diagonalizatsiya yordamida takomillashtirish mumkin.

Xulosa

Ushbu ishda (BEDO–TTF)₂ReO₄ kristallarida yuz beradigan fazali o'tishlar nazariy va raqamli jihatdan o'rganildi. Arrhenius turidagi o'tkazuvchanlik modeli va kvadratik energiya profili yordamida $\sigma(T)$ va $E(T)$ graflari olinib, $T_c \approx 180$ K atrofida sezilarli o'zgarishlar aniqlangan. Natijalar organik donor–akseptor birikmalarida anion tartiblanishi va elektron korrelyatsiyalari faza o'tishlarini tushunishda qo'llanilishi mumkin. Kelajakda qo'shimcha ish sifatida Hubbard modelining to'liq numerik o'rganilishi va spektroskopik ma'lumotlar integratsiyasi tavsiya etiladi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. Jérôme D., Schulz H. J., 'Organic conductors and superconductors', Advances in Physics, 1982.
2. Williams J. M. et al., 'Organic Superconductors (Including Fullerenes)', Prentice Hall, 1992.
3. Mori H., 'Charge ordering in organic conductors', Chemical Reviews, 2004.
4. Kato R., 'Conducting metal–anion charge-transfer salts', Journal of Materials Chemistry, 2010.
5. Ishiguro T., Yamaji K., 'Organic Superconductors', 1998. Seo H., 'Toward systematic understanding of charge ordering in molecular conductors.', 2004