

МЕТОД КАНОНІЧНОГО ПЕРЕТВОРЕННЯ ТА ЕФЕКТИВНИЙ ГАМІЛЬТОНІАН ПЕРІОДИЧНОЇ МОДЕЛІ АНДЕРСОНА

Для інтерпретації електричних та магнітних властивостей андерсон-габбардівських матеріалів широко використовується періодична модель Андерсона, яка дозволяє описати локалізовані стани (відповідальні за особливості магнітних властивостей) та зонні стани, а також гібридизацію між ними. При математичному опрацюванні таких гамільтоніанів виникають принципові труднощі [1], які можна розв'язати шляхом канонічного перетворення гамільтоніану.

На основі методики, запропонованій у роботах [2,3], нами отримано форми ефективних гамільтоніанів гібридизаційних моделей, які є зручними для опису властивостей матеріалів з вузькими зонами провідності. Оператор канонічного перетворення підібрано таким чином, щоб розрізнити процеси, які відповідають за формування аналогів габбардівських підзон: перенос в „дірковій” та „двійковій” зонах, перевероти спінів за участю діркових та двійкових станів. В підсумку, ефективний гамільтоніан системи з андерсон-габбардівськими центрами має вигляд

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + H'_1 + H_{dd} + H_{ss} + H_{sd},$$

$$\tilde{H}_0 = H_0 + \sum_{ij\sigma} t_0(ij) X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_2(ij) X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2},$$

$$H'_1 = \sum_{ij} (t_{02}(ij) (X_i^{2\downarrow} X_j^{0\uparrow} - X_i^{2\uparrow} X_j^{0\downarrow})) + e.c.),$$

$$H_{sd} = \sum J_0 (i\vec{k}\vec{k}'i) (c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} (X_i^\uparrow + X_i^0) + c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow} (X_i^\downarrow + X_i^0) - c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} X_i^{\uparrow\downarrow} - c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow} X_i^{\downarrow\uparrow}) + \sum J_2 (ikk'i) (c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} (X_i^\downarrow + X_i^2) + c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow} (X_i^\uparrow + X_i^2) + c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} X_i^{\uparrow\downarrow} + c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow} X_i^{\downarrow\uparrow}),$$

H_0 – стандартний гамільтоніан атомної границі, H_{dd} описує обмінну взаємодію та посередній перенос $|i0\rangle$ - та $|i^\uparrow\downarrow\rangle$ -станів, H_{ss} – взаємодію БКШ-типу в c -підсистемі, а H_{sd} – гібридизацію зонних та локалізованих станів. Для опису процесів в підсистемі колективізованих електронів використані електронні оператори $c_{\vec{k}\sigma}$, оператори X_i^σ описують локалізовані стани. Параметри $t_0(ij)$, $t_2(ij)$, $t_{02}(ij)$ є інтегралами опосередкованого переносу за участю вузлів з локалізованими електронами (катіонна підсистема в сполуках перехідних металів, домішки у фулеридах, квантові точки). Величина цих параметрів може суттєво перенормувувати стандартний „зонний” перенос $t(ij)$ і сприяти ефектам локалізації електронів чи „металізації” сполуки.

Література.

3. ДІДУХ Л.Д. Ефекти міжелектронних взаємодій в кристалах з вузькими зонами провідності /Л.Д.Дідух //Дис. доктора фіз.-мат. наук: 010407. – Тернопіль, 1995. – 398 с.
4. ДИДУХ Л.Д. Эффективный гамильтониан в модели Андерсона / Л.Д. Дидух, И.В. Стасюк // Физика металлов и металловедение. – 1968. – Т. 26.- № 4. – С. 582–588.
5. ДІДУХ Л. Модель вузькозонного матеріалу з електронно-дірковою асиметрією /Л.Дідух //Журн. фіз. досл. – 1997. – Т.1. – № 2. – С. 241-250.