

УДК 538.1; 539.2

Л. Дідух, докт. фіз.-мат. наук, професор

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

«ДІРКОВИЙ ФОРМАЛІЗМ» В МОДЕЛІ З ВНУТРІШНЬОЦЕНТРОВИМ ПРИТЯГАННЯМ ЕЛЕКТРОНІВ

L. Didukh

«HOLE REPRESENTATION» IN MODEL WITH INTRA-SITE ELECTRON ATTRACTION

Моделі електронних систем із внутрішньоцентровим притяганням електронів широко використовуються для пояснення особливостей електричних і магнітних властивостей сполук перехідних металів (фази Магнелі, Ванадію, Титану), високотемпературних надпровідників (моделі біполяронної надпровідності, модель Емері), особливостей твердотільного водню. Як найпростіше, тут береться модель Хаббарда з $U < 0$.

Природним тут є використання теоретичних підходів, які показали свою ефективність в застосуванні до моделі Хаббарда ($U > 0$). У цьому зв'язку привабливими є підходи, запропоновані в роботах [1, 2], проте їх пряме застосування до моделей з $U < 0$ не є коректним, оскільки тут втрачається підгрунтя, пов'язане з використанням методу наближеного вторинного контролю (при заміні операторів народження і знищення вузла c -числами).

В роботі пропонується «дірковий формалізм», який дозволяє використати основні ідеї, сформульовані в роботах [1, 2].

Схематично введення «діркового формалізму» відображене на рис. 1.

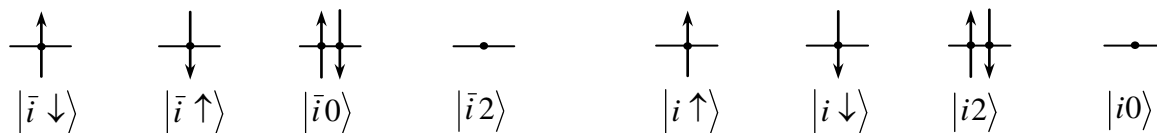


Рис. 1. Стани вузла в «дірковому формалізмі»

Рис. 2. Стани вузла в «електронному представленні»

Можна бачити наступну відповідність між станами вузла в «електронному представленні» і станами вузла в «дірковому представленні» (рис. 1, рис. 2):

$$|i\sigma\rangle \rightarrow |\bar{i}\bar{\sigma}\rangle, \quad |i\uparrow\downarrow\rangle \rightarrow |\bar{i}0\rangle, \quad |i0\rangle \rightarrow |\bar{i}2\rangle.$$

При цьому оператор переходу стану вузла (оператор Хаббарда) переходить в оператор зміни «діркового» стану вузла:

$$X_i^{kl} \rightarrow Y_i^{kl}.$$

На цій основі можна аналізувати перехід діелектрик-метал, зарядове впорядкування, зростання парамагнітної сприйнятливості, спостережуване у фазах магнелію, ванадію і титану. Використання методики роботи [1] приводить, зокрема, до енергетичного спектру

$$E_{1,2}(\vec{k}) = (1 - 2\alpha)t(\vec{k}) \mp \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + (4\alpha t(\vec{k}))^2},$$

де α – концентрація станів з однією діркою на вузлі (в моделі з $U > 0$ $\alpha \rightarrow d$; d – концентрація «електронних» двійок.

Література:

1. L. Didukh. Phys. Status Solidi B 206. – 1998. – R5.
2. L. Didukh. Acta. Phys. Pol. B 31. – 2000. – 3097.