

**Ефективний гамільтоніан періодичної моделі андерсона для опису систем з квантовими точками / Дідух Л., Крамар О., Скоренький Ю. // Вісник ТНТУ. — 2010. — Том 15. — № 4. — С.168-177. — (математичне моделювання. математика. фізика).**

УДК 538.1; 539.2

**Л.Дідух, докт. фіз.-мат. наук; О.Крамар, канд. фіз.-мат. наук;  
Ю.Скоренький, канд. фіз.-мат. наук; Ю.Довгоп'ятий;  
Ю.Дрогобицький, канд. фіз.-мат. наук**

*Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя*

## **ЕФЕКТИВНИЙ ГАМІЛЬТОНІАН ПЕРІОДИЧНОЇ МОДЕЛІ АНДЕРСОНА ДЛЯ ОПИСУ СИСТЕМ З КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ**

**Резюме.** *Із застосуванням методу канонічного перетворення отримано ефективний гамільтоніан моделі андерсон-габбардівського матеріалу, яка враховує основні типи взаємодій як у підсистемі локалізованих, так і в підсистемі колективізованих електронів, а також гібридизацію цих підсистем. Оператор канонічного перетворення підібрано таким чином, щоб розрізнити процеси, які відповідають за формування аналогів габбардівських підзон та процеси, які зумовлюють як посередній обмін між локалізованими магнітними моментами, так і взаємодію БКШ-типу в „зонній” підсистемі. Отриманий ефективний гамільтоніан дозволив класифікувати процеси непрямого обміну та непрямого переносу в системах з андерсон-габбардівськими центрами.*

**Ключові слова:** *періодична модель Андерсона, канонічне перетворення, системи з квантовими точками.*

**L. Didukh, O. Kramar, Yu. Skorenkyu, Yu. Dovichaty, Yu.  
Drohobitskyu**

## **EFFECTIVE HAMILTONIAN OF PERIODIC ANDERSON MODEL FOR DESCRIPTION OF SYSTEMS WITH QUANTUM DOTS**

**The summary.** *On the basis of the canonical transformation method the effective Hamiltonian of Anderson-Hubbard model taking into account the basic types of interactions in localized and itinerant electron subsystems as well as the hybridization of these subsystems has been obtained in this paper. The canonical transformation operator has been chosen if form which separate processes of Hubbard subband analogues formation and those responsible for the indirect exchange between the magnetic moments as well as BCS-type interaction in the itinerant subsystem. The obtained effective Hamiltonian allows to classify processes of indirect exchange and indirect hopping for the systems with Anderson-Hubbard centers.*

**Key words:** *periodic Anderson model, canonical transformation, systems with quantum dots.*

**Вступ.** В останні десятиліття прогрес новітніх технологій пов'язується із синтезом нових матеріалів з унікальними електричними та магнітними властивостями. До найперспективніших матеріалів такого типу слід віднести системи з квантовими точками, в яких „атом” домішки знаходиться в матриці „вузькозонного” провідника. Спроби теоретичного опису електричних та магнітних властивостей „квантової точки” розпочато ще у піонерській роботі [1]. В роботах [2,3] запропоновано узагальнення одноцентрової моделі Андерсона [1] на випадок періодично розташованих андерсон-габбардівських центрів (періодична модель Андерсона за загальноприйнятою тепер термінологією). В рамках такої моделі було показано, що за умови сильної внутрішньоатомної взаємодії між локалізованими магнітними моментами виникають непряма (через зонну підсистему) обмінна взаємодія, пропорційна до четвертого степеня інтеграла гібридизації, і непрямий перенос носіїв струму в локалізованій підсистемі (пропорційний квадрату інтеграла гібридизації). В цій же моделі було показано можливість пояснення дробового атомного магнітного моменту (за рахунок гібридизації) в перехідних металах і спостережувані температурні залежності “ $T^2$ ” і “ $T^{3/2}$ ” для намагніченості. На сьогодні періодична модель Андерсона користується

надзвичайною увагою і є поряд з моделлю Габбарда основою для опису властивостей вузькозонних матеріалів. У роботах [4,5] на основі одно- та дводомішкової моделі Андерсона досліджувалася електропровідність систем із квантовими точками. При цьому у гамільтоніані в роботі [5] враховувалися процеси кулонівської взаємодії та гібридизації „зонних” і „локалізованих” рівнів та досліджувалася залежність провідності від величини кулонівської взаємодії між локалізованими електронами. За результатами роботи [4] можна зробити висновок, що магнітне впорядкування в системі зонних електронів відіграє важливу роль у спин-залежному транспорті крізь квантову точку.

**Мета цієї роботи** – вивести ефективний гамільтоніан моделі андерсон-габбардівського матеріалу, який враховує основні типи взаємодій як у підсистемі локалізованих, так і в підсистемі колективізованих електронів, а також гібридизацію цих підсистем і дозволяє класифікувати процеси непрямого обміну та непрямого переносу в системах з андерсон-габбардівськими центрами.

**1. Модель андерсон-габбардівського вузькозонного матеріалу.** Сформулюємо модель андерсон-габбардівського матеріалу, яка узагальнює моделі, запропоновані у роботах [2,6], і враховує особливості кореляційних ефектів у вузьких зонах. Гамільтоніан моделі без урахування орбітального виродження як “локалізованої” (“*d*”-підсистеми), так і “зонної” (“*s*”-підсистеми) візьмемо у вигляді

$$H = H_0 + H_{вз}, \quad (1)$$

де

$$H_0 = H_d + \sum_{\vec{k}\sigma} (\varepsilon_{\vec{k}} - \mu) a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma}, \quad (2)$$

$$H_{вз} = \sum_{i\vec{k}\sigma} (V(i\vec{k}) d_{i\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma} + e.c.) + \sum_{\substack{ij\vec{k} \\ i \neq j}} (V(ij\vec{k}, -\vec{k}) d_{i\sigma}^+ d_{j\sigma}^+ a_{-\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} + e.c.). \quad (3)$$

Тут  $\varepsilon_{\vec{k}}$  – енергія електрона провідності з квазіімпульсом  $\vec{k}$ ;  $V(i\vec{k})$  і  $V(ij\vec{k}, -\vec{k})$  – матричні елементи, які описують відповідно “одноелектронну” і “двоелектронну” гібридизацію “зонних” і “локалізованих” електронів;  $d_{i\sigma}^+$ ,  $d_{i\sigma}$  – оператори народження і знищення електрона зі спіном  $\sigma$  на  $i$ -тому центрі у “*d*”-стані;  $a_{\vec{k}\sigma}^+$ ,  $a_{\vec{k}\sigma}$  – оператори народження і знищення електронів провідності зі спіном  $\sigma$  і квазіімпульсом  $\vec{k}$ .  $H_d$  описує підсистему “локалізованих” електронів з гамільтоніаном:

$$H_d = (E_d - \mu) \sum_{i\sigma} d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_{ij}(n) d_{i\sigma}^+ d_{j\sigma} + \sum_{ij\sigma} (T(ij) d_{i\sigma}^+ d_{j\sigma} n_{\bar{\sigma}} + e.c.) + \\ + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{ij\sigma\sigma'} J(ij) d_{i\sigma}^+ d_{j\sigma'}^+ d_{i\sigma} d_{j\sigma'} + \frac{1}{2} \sum_{ij\sigma\sigma'} V(ij) n_{i\sigma} n_{j\sigma'}, \quad (4)$$

де

$$t_{ij}(n) = t(ij) + n \sum_{\substack{p \neq i \\ p \neq j}} J(ipjp) \quad (5)$$

– ефективний інтеграл переносу між найближчими сусідами у розглядуваній моделі.

Модельний гамільтоніан (4) враховує основні типи взаємодій у вузькій орбітально невиродженій зоні (міжвузловий перенос електронів – друга і третя суми у (4), кулонівське відштовхування на одному вузлі – четверта сума, міжатомну обмінну взаємодію – п’ята сума і міжатомну кулонівську взаємодію – остання сума), його можна застосувати до розгляду властивостей матеріалів із вузькими зонами провідності. Особливістю моделі, описуваної гамільтоніаном (4), є його специфічна

структура, зумовлена наявністю трьох типів переходів електронів (і відповідно трьох типів інтегралів переносу), – “зонного” переносу –

$$\sum_{ij\sigma} t_{ij}(n) d_{i\sigma}^+ d_{j\sigma}, \quad (6)$$

корельованого переносу першого типу –

$$\sum_{ij\sigma} T_1(j) d_{i\sigma}^+ d_{j\sigma} \quad (7)$$

та корельованого переносу другого типу –

$$\sum_{ij\sigma} (T(j) d_{i\sigma}^+ d_{j\sigma} n_{\bar{\sigma}} + e.c.). \quad (8)$$

Врахування взаємодії, яка представлена останньою сумою у виразі (3), може бути аргументовано, зокрема тим, що взаємодія, близька за своєю природою до розглядуваної,

$$\sum_{ijn} (J(ijnm) d_{i\uparrow}^+ d_{j\downarrow}^+ a_{n\uparrow} a_{n\uparrow} + e.c.), \quad (9)$$

яка описує двоелектронний перенос між аніоном і сусідніми катіонами (взаємодія 180°-типу), є важливою для стабілізації антиферромагнітного впорядкування в матеріалах із вузькими зонами провідності (тут  $i$  і  $j$  – найближчі катіонні вузли,  $n$  – аніонний вузол, розміщений між ними).

$H_d$  у виразі (2) враховує взаємодії в  $d$ -підсистемі, зумовлені прямим перекриттям відповідних хвильових функцій. Представлення  $H_d$  у формі (4) може бути виправданим лише для випадку опису  $d$ -підсистеми  $3d$ -металів (і, можливо, сполук типу оксидів ванадію і титану, де також можна чекати помітного прямого перекриття хвильових функцій сусідніх катіонів). Для сплавів перехідних металів із неперехідними, переважно більшості оксидів, сульфідів і селенідів перехідних металів, зокрема високотемпературних надпровідних матеріалів, сполук на основі рідкоземельних елементів, пряме перекриття хвильових функцій у підсистемі локалізованих електронів слабе, тому тут можна знехтувати всіма матричними елементами, які описують міжатомний перенос електронів та міжатомну взаємодію й записати

$$H_d = (E_d - \mu) \sum_{i\sigma} d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} + U \sum_i d_{i\uparrow}^+ d_{i\uparrow} d_{i\downarrow}^+ d_{i\downarrow}. \quad (10)$$

Зауважимо щодо використовуваних тут термінів “локалізовані” електрони і “зонні” електрони. Якщо розглядається перехідний  $3d$ -метал, то локалізована підсистема –  $3d$ -електрони, а зонна підсистема –  $s-p$ -електрони (як і для розбавлених сплавів); для випадку, який реалізується в оксидах, локалізована підсистема – також  $3d$ -електрони, а енергетична зона формується як  $3d$ -підсистемою, так і  $2p$ -електронами кисневої підсистеми й, можливо,  $4s$ -електронами катіонної підсистеми; у сполуках на основі рідкоземельних елементів локалізована підсистема – це  $f$ -електрони, а зонні стани формуються  $s-p-d$ -електронами.

В моделі, розглянутій вище, прийнято, що зонна підсистема описується в наближенні вільних електронів. Можливість опису підсистеми електронів у рамках стандартної зонної теорії блохівськими функціями не викликає сумнівів для випадку  $s$ - або  $p$ -електронів у перехідних і рідкоземельних металах та їх сплавах і, можливо,  $t_{2g}$ -електронів у перехідних металах (хоча, мабуть, варто говорити про гібридизовані  $s-p-t_{2g}$ -стани через близькість енергій цих електронів у вільних атомах [7]). Проте існують класи речовин (де представлення однієї з підсистем у термінах локалізованих магнітних моментів цілком виправдане), для яких модельний гамільтоніан (1) незастосовний, бо зони провідності в таких матеріалах вузькі й тому не можуть бути описані на основі зонної теорії без урахування кореляційних ефектів. До таких речовин можна віднести сполуки типу  $\text{SmS}$ , тверді розчини типу  $\text{Sm}_{1-x}\text{ReS}$  ( $\text{Re}=\text{Ga}, \text{Yb}, \text{Gd}, \text{Nd}$ ),

системи з важкими ферміонами ( $\text{CeAl}_3$ ,  $\text{CeCu}_2\text{Si}$ ,  $\text{CeCu}_6$ ,  $\text{UPt}$ ,  $\text{UBe}_{13}$  та інші, див. у цьому зв'язку огляд [8]) і т.і. Прикладом низьковимірної системи з важкими ферміонами може бути нещодавно синтезований методом молекулярної епітаксії шаруватий матеріал  $\text{CeIn}_3$ , в якому можливі квантові переходи [9].

У згаданих вище матеріалах унікальність фізичних властивостей зумовлена, в основному, саме наявністю вузької зони провідності. Тому для опису фізичних властивостей таких речовин необхідно враховувати кореляційні ефекти в зоні провідності. Найпростіший і природний шлях узагальнення моделі, представленої гамільтоніаном (1), на випадок вузької зони провідності полягає у заміні

$$\sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}\sigma}^+ a_{\vec{k}\sigma} \rightarrow H_c, \quad (11)$$

де  $H_c$  має таку ж структуру, як і гамільтоніан, заданий виразом (4); гамільтоніан „локалізованої” підсистеми в даному випадку природно взяти у формі (10). Таким чином, для опису властивостей ( $c$ - $d$ )-підсистеми (на відміну від  $s$ - $d$ -підсистеми, якій відповідає гамільтоніан (3)), можна виходити із гамільтоніана

$$H = H_c + H_d + H_{cd}. \quad (12)$$

$H_{cd}$  є узагальненням  $s$ - $d$  гібридаційної взаємодії у  $s$ - $d$ -моделі:

$$H_{cd} = \sum_{ij\sigma} (V(ij) c_{i\sigma}^+ d_{j\sigma} + e.c.) + \sum_{ijl p\sigma} (V(ijl p) c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma}^+ d_{p\sigma} d_{l\sigma} + e.c.). \quad (13)$$

У (12), як і в  $s$ - $d$ -гамільтоніані (1), не враховані міжцентрові обмінні взаємодії. Як буде показано далі, той або інший тип магнітного впорядкування в  $d$ -підсистемі стабілізується, в основному, за рахунок непрямих (викликаних гібридаційною взаємодією) обмінних взаємодій та, можливо, за рахунок трансляційного механізму обміну в  $c$ -підсистемі.

**2. „Полярна” модель вузькозонних матеріалів з андерсонівськими центрами.** Особливість конфігураційного опису – представлення кулонівського відштовхування на одному центрі у діагональній формі й „перенесення” ефектів, пов'язаних з урахуванням внутрішньоатомних кореляцій, на процеси переносу. Як для випадку габбардівських центрів, що взаємодіють із сусідніми через електронні переходи, так і в системах з андерсонівськими центрами, гібридаційне представлення (вперше введено при розгляді гібридаційних  $s$ - $d$ -моделей у роботах [2,6]) виявляється досить плідним і сьогодні широко використовується.

Перейдемо у гамільтоніані (12) від електронних  $d_{i\sigma}^+$ ,  $d_{i\sigma}$ -операторів до  $X_i^{kl}$ -операторів [10,11]. Маємо

$$H = H_0 + H_1 + H_2, \quad (14)$$

де

$$H_0 = (E_d - \mu) \sum_i (X_i^\uparrow + X_i^\downarrow + 2X_i^2) + U \sum_i X_i^2 + \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^+ c_{\vec{k}\sigma}, \quad (15)$$

$$H_1 = H_a + H_b, \quad (16)$$

$$H_2 = H_c + H_d + H_e, \quad (17)$$

при цьому

$$H_a = \sum_{i\vec{k}\sigma} (\eta_\sigma V(\vec{k}i) c_{\vec{k}\sigma}^+ X_i^{0\sigma} + e.c.), \quad (18)$$

$$H_b = \sum_{i\vec{k}\sigma} (V(\vec{k}i) c_{\vec{k}\sigma}^+ X_i^{\sigma^2} + e.c.), \quad (19)$$

$$H_c = 2 \sum_{ijk} (V(ij\vec{k}, -\vec{k}) X_i^\uparrow X_j^\downarrow c_{\vec{k}\uparrow} c_{-\vec{k}\downarrow} + e.c.), \quad (20)$$

$$H_d = 2 \sum_{ijk} \left( V(ij\bar{k}, -\bar{k}) X_i^{2\uparrow} X_j^{2\downarrow} c_{-\bar{k}\downarrow} c_{\bar{k}\uparrow} + e.c. \right), \quad (21)$$

$$H_e = 2 \sum_{ijk} \left( V(ij\bar{k}, -\bar{k}) \left( X_i^{\downarrow 0} X_j^{2\downarrow} c_{-\bar{k}\downarrow} c_{\bar{k}\uparrow} - X_i^{2\uparrow} X_j^{\uparrow 0} c_{-\bar{k}\downarrow} c_{\bar{k}\uparrow} \right) + e.c. \right). \quad (22)$$

Введемо параметри, які характеризують відносну величину гібридизації, яка описується відповідно складовими  $H_a, H_b, H_c, H_d$  і  $H_e$ :

$$\frac{V(\bar{k}i)}{E_F - E_d} \equiv \mathcal{G}_a(\bar{k}i), \quad \frac{V(i\bar{k})}{E_d + U - E_F} \equiv \mathcal{G}_b(i\bar{k}), \quad (23)$$

$$\frac{V(\bar{k}, -\bar{k}ij)}{2(E_F - E_d)} \equiv \mathcal{G}_c(\bar{k}, -\bar{k}ij), \quad \frac{V(ij, -\bar{k}\bar{k})}{2(E_d + U - E_F)} \equiv \mathcal{G}_d(ij, -\bar{k}\bar{k}), \quad (24)$$

$$\frac{V(ij, -\bar{k}\bar{k})}{2E_d + U - E_F} \equiv \mathcal{G}_e(ij, -\bar{k}\bar{k}). \quad (25)$$

Якщо для одного із параметрів  $\mathcal{G}_i$  ( $i=a, b, c, d, e$ ) у (14) виконується умова  $\mathcal{G}_i \ll 1$ , то гібридизаційну взаємодію, яка описується відповідним гамільтоніаном  $H_i$ , можна врахувати за допомогою теорії збурень (зручна форма якої формулюється саме завдяки конфігураційному опису). Виконання при цьому сильної нерівності типу  $E_d + U - E_F \gg E_F - E_d$  (або протилежної) дозволяє знехтувати відповідними процесами переносу у гамільтоніані (14). Ці висновки узгоджуються з оцінкою гібридизаційних матричних елементів у моделі сполук з важкими ферміонами, наведеною в монографії [12]. Нарешті, доцільність представлення гамільтоніанів андерсонівського типу через  $X_i^{kl}$ -оператори зумовлена і зручністю математичного опрацювання таких гамільтоніанів, зокрема, в методі функцій Гріна.

**3. Канонічне перетворення та ефективний гамільтоніан.** Згідно з ідеєю переходу до ефективного гамільтоніану приймемо, що параметри, які характеризують відносну величину гібридизації, задовольняють умовам

$$\mathcal{G}_a(\bar{k}i) \ll 1, \quad \mathcal{G}_b(i\bar{k}) \ll 1, \quad \mathcal{G}_c(\bar{k}, -\bar{k}ij) \ll 1, \quad (26)$$

$$\mathcal{G}_d(ij, -\bar{k}\bar{k}) \ll 1, \quad \mathcal{G}_e(ij, -\bar{k}\bar{k}) \ll 1$$

і здійснимо канонічне перетворення, яке виключає із гамільтоніана (14) складові першого порядку по  $V(i\bar{k})$  і  $V(ij\bar{k}, -\bar{k})$ :

$$\tilde{H} = e^S H e^{-S}, \quad (27)$$

де

$$S = S_a + S_b + S_c + S_d, \quad (28)$$

$$S_a = \sum_{ik} L_a(\bar{k}i) \left( c_{\bar{k}\downarrow}^+ X_i^{0\downarrow} - c_{\bar{k}\uparrow}^+ X_i^{0\uparrow} \right) + \sum_{ik} M_a(i\bar{k}) \left( X_i^{\downarrow 0} c_{\bar{k}\downarrow} - X_i^{\uparrow 0} c_{\bar{k}\uparrow} \right),$$

$$S_b = \sum_{ik} L_b(\bar{k}i) \left( c_{\bar{k}\uparrow}^+ X_i^{\downarrow 2} + c_{\bar{k}\downarrow}^+ X_i^{\uparrow 2} \right) + \sum_{ik} M_b(i\bar{k}) \left( X_i^{2\downarrow} c_{\bar{k}\uparrow} + X_i^{2\uparrow} c_{\bar{k}\downarrow} \right),$$

$$S_c = \sum_{ijk} L_c(ij\bar{k}) X_i^{\uparrow 0} X_j^{\downarrow 0} c_{\bar{k}\uparrow} c_{-\bar{k}\downarrow} + \sum_{ijk} M_c(\bar{k}ji) c_{-\bar{k}\downarrow}^+ c_{\bar{k}\uparrow}^+ X_j^{0\downarrow} X_i^{0\uparrow},$$

$$S_d = \sum_{ijk} L_d(ij\bar{k}) X_i^{2\uparrow} X_j^{2\downarrow} c_{-\bar{k}\downarrow} c_{\bar{k}\uparrow} + \sum_{ijk} M_d(\bar{k}ji) c_{\bar{k}\uparrow}^+ c_{-\bar{k}\downarrow}^+ X_j^{\downarrow 2} X_i^{\uparrow 2}. \quad (29)$$

Тут індекси  $a, b, c, d$  дозволяють розрізнити процеси, які відповідають за формування аналогів габбардівських підзон: перенос у „дірковій” та „двійковій” зонах і процеси, які зумовлюють як посередній обмін між локалізованими магнітними моментами, так і

взаємодію БКШ-типу в „зонній” підсистемі, а  $L(\vec{i}\vec{k})$ ,  $M(\vec{k}i)$ ,  $L(\vec{i}\vec{k})$  і  $M(\vec{k}ij)$  визначаємо із рівнянь

$$\begin{aligned} [S_a H_0] + H_a &= 0, \\ [S_b H_0] + H_b &= 0, \\ [S_c H_0] + \frac{1}{2}[S_a H_a]' + H_c &= 0, \\ [S_d H_0] + \frac{1}{2}[S_b H_b]' + H_d &= 0, \end{aligned} \quad (30)$$

де штрих біля дужки Пуасона означає, що в рівняння (30) входять члени  $\frac{1}{2}[S_b H_b]'$ , які мають ту ж операторну структуру, що й  $H_2$ .

З рівнянь (30) отримуємо:

$$\begin{aligned} L_a(\vec{k}i) &= \frac{V(\vec{k}i)}{\varepsilon_{\vec{k}} - E_d}, & M_a(\vec{i}\vec{k}) &= \frac{V(\vec{i}\vec{k})}{E_d - \varepsilon_{\vec{k}}}, \\ L_b(\vec{k}i) &= \frac{V(\vec{k}i)}{\varepsilon_{\vec{k}} - E_d - U}, & M_b(\vec{i}\vec{k}) &= \frac{V(\vec{i}\vec{k})}{E_d + U - \varepsilon_{\vec{k}}}, \\ L_c(\vec{i}\vec{k}) &= \frac{V(\vec{i}\vec{k}, -\vec{k})}{2(\varepsilon_{\vec{k}} - E_d)}, & M_c(\vec{k}ij) &= \frac{V(-\vec{k}, \vec{k}, ji)}{2(E_d - \varepsilon_{\vec{k}})}, \\ L_d(\vec{i}\vec{k}) &= \frac{V(\vec{i}\vec{k}, -\vec{k})}{2(\varepsilon_{\vec{k}} - E_d - U)}, & M_d(\vec{k}ij) &= \frac{V(-\vec{k}, \vec{k}, ji)}{2(E_d + U - \varepsilon_{\vec{k}})}, \end{aligned}$$

(31)

Таким чином, (27) з точністю до членів четвертого порядку малості (вважаючи  $V(\vec{i}\vec{k})$  величиною першого порядку малості,  $V(\vec{i}\vec{k}, -\vec{k})$  – другого,  $H_0$  – нульового) матиме вигляд

$$\tilde{H} = H + [SH] + \frac{1}{2}[S[SH_0]] + \frac{1}{6}[S[S[SH]]] + \frac{1}{24}[S[S[S[SH_0]]]] + \dots \quad (32)$$

Візьмемо до уваги, що в спін-спіновий зв'язок між локалізованими магнітними моментами та посередній перенос у „локалізованій” підсистемі дають внесок лише вирази четвертого порядку малості й знехтуємо процесами, які викликають одночасне народження або знищення двох електронів на одному вузлі. Таким чином, приходимо до ефективного гамільтоніана

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + H'_1 + H_{cd} + H_{dd} + H_{cc}, \quad (33)$$

де

$$\tilde{H}_0 = H_0 + \sum_{ij\sigma} t_0(ij) X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_2(ij) X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2}, \quad (34)$$

$$H'_1 = \sum_{ij} (t_{02}(ij) (X_i^{2\downarrow} X_j^{0\uparrow} - X_i^{2\uparrow} X_j^{0\downarrow}) + e.c.), \quad (35)$$

$$\begin{aligned} H_{cd} &= \sum J_0(\vec{i}\vec{k}\vec{k}i) (c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} (X_i^\uparrow + X_i^0) + c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow} (X_i^\downarrow + X_i^0) - \\ &- c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} X_i^{\uparrow\downarrow} - c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} X_i^{\downarrow\uparrow}) + \sum J_2(ikk'i) (c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} (X_i^\downarrow + X_i^2) + \\ &+ c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow} (X_i^\uparrow + X_i^2) + c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} X_i^{\uparrow\downarrow} + c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow} X_i^{\downarrow\uparrow}) \end{aligned} \quad (36)$$

$H_{dd}$  описує обмінну взаємодію та посередній перенос  $|i0\rangle$ - та  $|i^\uparrow\downarrow\rangle$ -станів, а  $H_{cc}$  – взаємодію БКШ-типу в  $c$ -підсистемі

$$\begin{aligned}
 t_0(ij) &= \sum_{\vec{k} > \vec{k}_F} \frac{V(\vec{i}\vec{k})V(\vec{k}j)}{E_d - \varepsilon_{\vec{k}}}, \\
 t_2(ij) &= \sum_{\vec{k} < \vec{k}_F} \frac{V(\vec{i}\vec{k})V(\vec{k}j)}{E_d + U - \varepsilon_{\vec{k}}}, \\
 t_{02}(ij) &= \frac{1}{2}(t_0(ij) + t_2(ij)), \\
 J_1(\vec{i}\vec{k}\vec{k}'i) &= \frac{V(\vec{i}\vec{k})V(\vec{k}'i)}{2} \left( \frac{1}{\varepsilon_{\vec{k}} - E_d} + \frac{1}{\varepsilon_{\vec{k}'} - E_d} \right), \\
 J_2(\vec{i}\vec{k}\vec{k}'i) &= \frac{V(\vec{i}\vec{k})V(\vec{k}'i)}{2} \left( \frac{1}{\varepsilon_{\vec{k}} - E_d - U} + \frac{1}{\varepsilon_{\vec{k}'} - E_d - U} \right).
 \end{aligned} \tag{37}$$

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 перенормувати стандартний „зонний” перенос  $t(ij)$  і сприяти ефектам локалізації електронів чи „металізації” сполуки. На рисунку 1 зображено, як в описуваній системі відбувається зонний та „гібридаційний” перенос електронів. У зв’язку зі значним перекриттям хвильових функцій електронів на вузлах, які формують зону провідності, слід очікувати, що не лише опосередкований перенос значно перенормує зонний, але й гібридаційна обмінна взаємодія характеризується більшим за величиною параметром (порядку  $\frac{t^4}{\Delta^3}$ ), ніж прямі обмінні взаємодії.

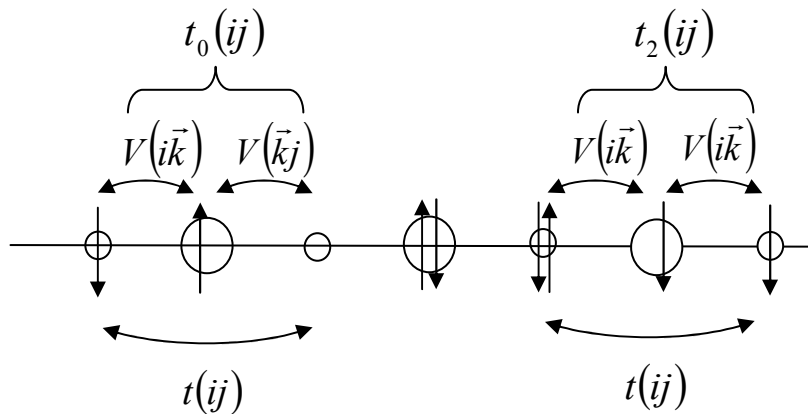


Рисунок 1. Процеси „гібридаційного” та зонного переносу

Бачимо, що врахування  $c-d$ -гібридації за теорією збурень призводить до ЕГ (33), який стверджує такі ефекти одноелектронної гібридації: 1) непрямий перенос у ( $\sigma$ -0)-і ( $\uparrow\downarrow$ - $\sigma$ )-підзонах, 2) парне народження двійок і дірок, 3) непряму  $c-d$ -обмінну взаємодію, 4) непряму обмінну взаємодію та непрямий перенос між локалізованими магнітними моментами. Врахування двоелектронної гібридації призводить як до спин-спінового зв’язку, так і до взаємодії БКШ-типу [13] у підсистемі електронів провідності.

Якщо виконуються умови (26), то „реальні” дірки і двійки у системі, яку розглядаємо, відсутні при  $T=0$ , а при  $T \neq 0$  ( $T$  – температура того ж порядку, що і температура магнітного або надпровідного переходу),

$$\begin{aligned} \langle X_i^0 \rangle &\sim \exp((E_d - E_F)/kT), \\ \langle X_i^2 \rangle &\sim \exp((E_d + U - E_F)/kT). \end{aligned}$$

Тобто можна вважати, що  $\langle X_i^0 \rangle \cong 0$ ,  $\langle X_i^2 \rangle \cong 0$  (введення відповідних домішок може суттєво змінити ситуацію). Враховуючи, що вузька ( $\sigma=0$ )-підзона лежить глибоко під рівнем Фермі, а ( $\uparrow\downarrow$ - $\sigma$ )-підзона достатньо високо над рівнем Фермі (за умов (26)), то перенормуванням  $H_0$  у випадку, що розглядаємо, можна знехтувати. Переходи, які описуються  $H'_1$  (формула (35)), призводять до „віртуальних” дірок і двійок (аналогічно моделі орбітально невиродженої зони). Їх можна розглянути за допомогою теорії збурень. Це призводить до переходу від гамільтоніана  $H'_1$  до його ефективного виразу у формі обмінної взаємодії

$$H'_1 \rightarrow \sum_{ij\sigma} \frac{|t_{02}(ij)|^2}{U} (X_i^{\bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma}} - X_i^{\sigma\bar{\sigma}} X_j^{\bar{\sigma}\sigma}), \quad (38)$$

тому вираз (35) можна включити як доданок у  $H_{dd}$ . Таким чином, приходимо до ЕГ

$$H = H_0 + H_{cd} + H_{dd} + H_{cc}. \quad (39)$$

$H_{cd}$  описує непряму  $c$ - $d$ -обмінну взаємодію, аналогічну за своєю структурою прямій  $s$ - $d$ -обмінній взаємодії в  $s$ - $d$ -обмінній моделі з тією принциповою відмінністю, що прямий  $s$ - $d$ -обмінний інтеграл додатний, а ефективний  $c$ - $d$ -обмінний інтеграл, викликаний переходами між  $|\sigma\rangle$ - і  $|\uparrow\downarrow\rangle$ -станами і зоною провідності, – від’ємний (якщо виходити із енергетичної схеми, зображеної на рисунку 2.

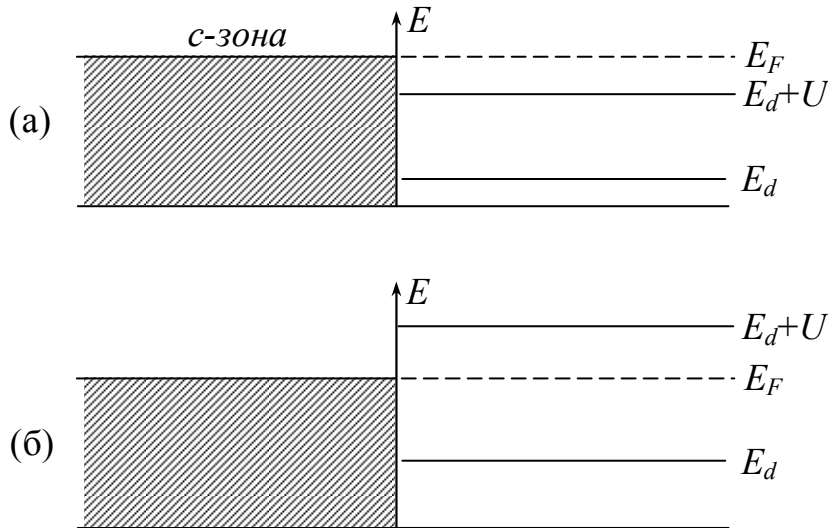


Рисунок 2. Енергетична схема ( $c$ - $d$ )-системи при  $T=0$  й за умови відсутності гібридизації. Випадки (а) і (б) відповідають двом можливим розміщенням  $|d\sigma\rangle$ - і  $|d\uparrow\downarrow\rangle$ -рівнів відносно рівня Фермі

Представимо (36) у зручнішій формі, ввівши спінові оператори

$$S_i^z = \frac{1}{2}(X_i^\uparrow - X_i^\downarrow), \quad S_i^+ = X_i^{\uparrow\downarrow}, \quad S_i^- = -X_i^{\downarrow\uparrow}, \quad (40)$$



маючи на увазі, що  $\langle X_i^0 \rangle = 0$ ,  $\langle X_i^2 \rangle = 0$ . Маємо

$$H_{cd} = \frac{1}{N} \sum_{j\vec{k}\vec{k}'} J(\vec{k}\vec{k}') \exp(i\vec{R}_j(\vec{k} - \vec{k}')) (S_j^z (c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} - c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow}) + S_j^+ c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow} + S_j^- c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow}) \quad (41)$$

де

$$J_2(\vec{k}\vec{k}') = \frac{V(\vec{k})V(\vec{k}')}{2} \left( \frac{1}{\varepsilon_{\vec{k}} - E_d - U} + \frac{1}{\varepsilon_{\vec{k}'} - E_d - U} - \frac{1}{\varepsilon_{\vec{k}} - E_d} - \frac{1}{\varepsilon_{\vec{k}'} - E_d} \right). \quad (42)$$

Прийmemo для оцінки  $J(\vec{k}\vec{k}')$ , що основний внесок у непрямий  $c$ - $d$ -обмін вносять електрони провідності, які мають енергії, близькі до енергії Фермі. Тоді

$$J(\vec{k}_F, \vec{k}_F) = \frac{UV^2(\vec{k}_F)}{(E_F - E_d - U)(E_F - E_d)} \quad (43)$$

(цей результат узгоджується з роботами [14, 15]) і, якщо рівні  $|i\sigma\rangle$  і  $|i\uparrow\downarrow\rangle$  розміщені так, як зображено на рисунку 2,  $J(\vec{k}\vec{k}')$  – величина від’ємна.

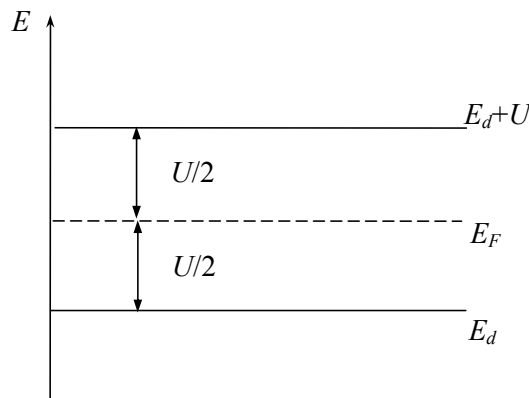


Рисунок 3. Енергетична схема ( $c$ - $d$ )-системи при  $T=0$  і за умови симетричного розташування  $E_d$  та  $E_d + U$  – рівнів відносно рівня Фермі

Зокрема, у „симетричному” випадку (рис. 3), коли  $E_d + U - E_F = E_F - E_d$ , маємо

$$J(k_F, k_F) = -4 \frac{V^2(k_F)}{U}. \quad (44)$$

Вперше вираз типу (43) для непрямого  $s$ - $d$ -обмінного інтеграла був отриманий в моделі Андерсона ізольованого магнітного моменту в роботах [15] і [2] для періодичної моделі Андерсона. Антиферромагнітний характер  $c$ - $d$ -обмінної взаємодії може проявитися в ряді специфічних ефектів [16-19], дослідження яких є одним із центральних напрямків фізики твердого тіла.

**Висновки.** В роботі виведено ефективний гамільтоніан моделі андерсон-габбардівського матеріалу з квантовими точками, який враховує основні типи взаємодій у вузькій орбітально невинродженій зоні. На нашу думку, унікальність фізичних властивостей таких систем зумовлена, насамперед, наявністю вузької зони провідності. Той або інший тип магнітного впорядкування в  $d$ -підсистемі стабілізується, в основному, за рахунок непрямих (викликаних гібридаційною взаємодією) обмінних взаємодій та, можливо, за рахунок трансляційного механізму ферромагнетизму в  $c$ -підсистемі.

Шляхом канонічного перетворення гамільтоніана вдається подолати принципові труднощі, які виникають при математичному опрацюванні гамільтоніанів вузькозонних систем з квантовими точками в електронному представленні.

Підхід, реалізований у даній роботі, може виявитися корисним для інтерпретації особливостей електричних та магнітних властивостей матеріалів типу систем з „квантовими точками” у матриці матеріалу з вузькими зонами провідності, сполук із важкими ферміонами та розгляду проблеми надпровідності у вузьких енергетичних зонах.

#### Література

1. Anderson P. W. Localized magnetic states in metals / P.W. Anderson // *Phys. Rev.* – 1961. – Vol. 124. – P. 41–53.
2. 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.
3. Дидух Л.Д. К теории ферромагнетизма с учетом s-d-переходов / Л.Д. Дидух, И.В. Стасюк // *Укр. физ. журн.* – 1968. – Т.13. – С.1774–1780.
4. Ping Zhang Spin-dependent transport through an interacting quantum dot / Ping Zhang, Qi-Kun Xue, Yupeng Wang, and Xie X.C. // *Phys. Rev. Lett.* – 2002. – Vol. 89. – 286803 [4 pages].
5. Dias da Silva L. Finite-temperature conductance signatures of quantum criticality in double quantum dots / L. Dias da Silva, K. Ingersent, N.Sandler, and S. E. Ulloa.–*Phys. Rev. B.* – 2008. – Vol. 78. – 153304 [4 pages].
6. Дидух Л.Д. Простая модель электрических и магнитных свойств магнитных полупроводников / Л.Д. Дидух, В.Д. Дидух, И.В. Стасюк // *Укр. физ. журн.* – 1975. – Т.20. – № 1. – С. 97–102.
7. Кузьмин Е.В. Физика магнитоупорядоченных веществ / Е.В. Кузьмин, Г.А. Петраковский, Э.А. Завадский. – Новосибирск: Наука, 1976. – 287 с.
8. Изюмов Ю.А. Материалы с сильными электронными корреляциями / Ю.А. Изюмов, Э.З. Курмаев // *УФН.* – 2008. – Т. 178. – С. 25–60.
9. Shishido H. Tuning the Dimensionality of the Heavy Fermion Compound CeIn<sub>3</sub> / H. Shishido, T. Shibauchi, K. Yasu, T. Kato, H. Kontani, H. Terashima, Y. Matsuda // *Science.* – 2010. – Vol. 327. – No. 5968. – P. 980 – 983.
10. Hubbard J. Electron correlation in narrow energy bands. The atomic representation / J.Hubbard // *Proc. Roy. Soc. A.* – 1965. – V.285. – No. 1403. – P.542–560.
11. Дідух Л. Модель вузькозонного матеріалу з електронно-дірковою асиметрією /Л.Дідух //Журн. фіз. досл. – 1997. – Т.1. – № 2. – С. 241–250.
12. Fazekas P. Lecture notes on electron correlation and magnetism / P. Fazekas. – Singapore: World Scientific Publishing, 1999. – 777 p.
13. Дідух Л.Д. Надпровідність в моделі матеріалу з вузькою енергетичною зоною і локальними парами / Л.Д. Дідух // В кн.: Фізичний збірник. – Львів: НТШ, 1993. – С. 69–80.
14. Kondo J. Anomalous Hall Effect and Magnetoresistance of Ferromagnetic Metals /J. Kondo// *Progress of Theoretical Physics.* – 1962. – Vol. 27. – P. 772–792.
15. Schrieffer J. R. Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians / J. R. Schrieffer, P. A. Wolff // *Phys. Rev.* – 1966. – Vol 149. – P.491–492.
16. Lacroix C. Some exact results for the Kondo-lattice with infinite exchange interaction / C. Lacroix // *Solid State Commun.* – 1985.– V.54. – No. 11. – P.991–994.
17. Hirsch J. E. Strong-coupling expansion for a Kondo-lattice model / J. E. Hirsch // *Phys. Rev. B.* – 1984. – Vol. 30. – No. 9. – P. 5383–5385.
18. Мошчалков В.В. Немагнитные кондо-решетки /В.В. Мошчалков, Н.Б. Брандт // *Успехи физических наук.* – 1986 – Т. 149. – № 8. – С. 585–634.
19. Pyper N.C. The characteristic electronic structure needed for high-temperature superconductivity / N.C. Pyper, P.P. Edwards // *Chem. Phys. Letters.* – 1991. –Vol. 176. – No. 2. – P.225–232.

Отримано 1.11.2010