Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. В. Ведяев, М. Е. Журавлев, В. А. Иванов, М. Маринаро, Заполнение электронных зон в периодической модели Андерсона, *ТМФ*, 1996, том 108, номер 1, 101–108

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1180>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.174.149.18

26 апреля 2023 г., 16:36:08

А. В. Ведяев, М. Е. Журавлев, В. А. Иванов, М. Маринаро
**ЗАПОЛНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ЗОН В
ПЕРИОДИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА**

Проанализирована последовательность заполнения коррелированных энергетических зон в периодической модели Андерсона (ПМА) (модель Андерсона на решетке) с сильным электрон-электронным взаимодействием. Показано, что подход коррелированных “хаббардовских” подзон совместим с зонными представлениями. В отсутствие параметра порядка определена структура разрешенных энергетических зон для ПМА и получена зависимость химпотенциала от их заполнения электронами.

1. ВВЕДЕНИЕ

Для электронной структуры широкого класса узкозонных материалов с существенными межэлектронными взаимодействиями характерно сосуществование коллективизированных электронов проводимости и локализованных электронов незаполненных атомных оболочек. Одна из популярных моделей, отражающих эту ситуацию, – периодическая модель Андерсона (модель Андерсона на решетке) (ПМА). Она применялась для решения различных задач в рамках подходов, основанных на диагонализации одноузельной части гамильтониана [1, 2] с помощью $1/N$ -разложения [3], техники вспомогательных бозонов (slave-bosons) [4] и различных форм теории возмущений (например, [5]). Однако в упомянутых подходах не анализировались заполнение энергетических зон коррелированными электронами и положение их химпотенциала. Такой анализ необходим для применения развитого в [6] метода сильной связи коррелированных электронов к системам, описываемым ПМА, а также в связи с выяснением вопроса о латтинжеровском или ферми-жидкостном характере коррелированных электронов.

Сходная проблема заполнения зон электронами рассматривалась в [7] методом расщепления уравнений движения для функций Грина при анализе модели, предложенной Мюллером для описания медно-оксидных сверхпроводников. В настоящей работе на основе метода Хаббарда [8] (что совпадает с беспетельным приближением диаграммного метода для вырожденных систем [9]) исследована последовательность заполнения энергетических зон в ПМА в предельном случае узкой (по сравнению с расщеплением атомных уровней) затравочной зоны коллективизированных электронов. В парамагнитной фазе исследована зависимость химпотенциала электронов от их концентрации.

2. ДИАГОНАЛИЗАЦИЯ ОДНОУЗЕЛЬНОГО ГАМИЛЬТониАНА И ДИАГРАММНЫЙ МЕТОД

Гамильтониан ПМА с гибридизацией зонных (c -) и локализованных (d -) электронов

незаполненных атомных оболочек имеет вид

$$H = H_0 + H_{\text{hop}},$$

$$H_0 = \varepsilon \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^d + U \sum_i n_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d + V \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} + d_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}) - \mu \sum_{i\sigma} (n_{i\sigma}^d + n_{i\sigma}^c), \quad (1)$$

$$H_{\text{hop}} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma}, \quad U = \infty,$$

где $c_{i\sigma}^+$ ($c_{i\sigma}$) – операторы рождения (уничтожения) зонного электрона с проекцией спина σ в i -м узле кристаллической решетки, $d_{i\sigma}^+$ ($d_{i\sigma}$) – операторы рождения (уничтожения) локализованного электрона с проекцией спина σ в i -м узле, гибридационный параметр V связывает локальные комбинации зонных c - и остовных d -электронов, t – интеграл перескока зонных электронов между соседними узлами, $\varepsilon < 0$ определяет положение одноэлектронных d -уровней относительно зоны c -электронов.

Собственным функциям одноузельного гамильтониана H

$$\begin{aligned} |\sigma l\rangle &= (\cos \varphi c_{\sigma}^+ - \sin \varphi d_{\sigma}^+) |0\rangle, \\ |\sigma u\rangle &= (\sin \varphi c_{\sigma}^+ + \cos \varphi d_{\sigma}^+) |0\rangle, \\ |2l\rangle &= \left(\cos \alpha c_{\uparrow}^+ c_{\downarrow}^+ - \frac{\sin \alpha}{\sqrt{2}} (c_{\uparrow}^+ d_{\downarrow}^+ - c_{\downarrow}^+ d_{\uparrow}^+) \right) |0\rangle, \\ |2u\rangle &= \left(\sin \alpha c_{\uparrow}^+ c_{\downarrow}^+ - \frac{\cos \alpha}{\sqrt{2}} (c_{\uparrow}^+ d_{\downarrow}^+ - c_{\downarrow}^+ d_{\uparrow}^+) \right) |0\rangle, \\ |20\rangle &= \frac{(c_{\uparrow}^+ d_{\downarrow}^+ + c_{\downarrow}^+ d_{\uparrow}^+)}{\sqrt{2}}, \quad |2\sigma\rangle = c_{\sigma}^+ d_{\sigma}^+ |0\rangle, \quad |3\sigma\rangle = c_{\uparrow}^+ c_{\downarrow}^+ d_{\sigma}^+ |0\rangle \end{aligned} \quad (2)$$

соответствуют следующие собственные значения:

$$\begin{aligned} \lambda_{\sigma l} &= \frac{\varepsilon - \sqrt{\varepsilon^2 + 4V^2}}{2} - \mu, & \lambda_{\sigma u} &= \frac{\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 + 4V^2}}{2} - \mu, \\ \lambda_{2l} &= \frac{\varepsilon - \sqrt{\varepsilon^2 + 8V^2}}{2} - 2\mu, & \lambda_{2u} &= \frac{\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 + 8V^2}}{2} - 2\mu, \\ \lambda_{20} &= \varepsilon - 2\mu, & \lambda_{2\sigma} &= \varepsilon - 2\mu, & \lambda_{3\sigma} &= \varepsilon - 3\mu, \\ \cos \varphi &= \frac{\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 + 4V^2}}{\sqrt{2\sqrt{\varepsilon^2 + 4V^2}(\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 + 4V^2})}}, \\ \cos \alpha &= \frac{\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 + 4V^2}}{\sqrt{(\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 + 4V^2})^2 + 8V^2}}. \end{aligned} \quad (3)$$

Заметим, что идея такого учета гибридационного взаимодействия высказывалась еще при анализе экситонных состояний в “черной” и “золотой” фазах SmS [10]. Собственные энергии (3) учитывают все характерные энергии электронов. Индексы l и u обозначают соответствующие верхние и нижние уровни энергий.

Обобщенные операторы Хаббарда (атомные) $X_q^p = |p\rangle\langle q|$ переводят узел из энергетического состояния $|q\rangle$ в состояние $|p\rangle$ из набора (2). Диаграммная техника для операторов Хаббарда невырожденных s -электронов естественным образом обобщается на

атомные операторы для систем орбитально вырожденных электронов [6, 9]. Она основана на обобщенной теореме Вика [11], примененной к X -операторам классической модели Хаббарда [12–14], а затем [15], по аналогии со спиновыми операторами в модели Гайзенберга [16]. Одноэлектронные операторы разложим по атомным операторам:

$$\begin{aligned}
 c_{\sigma}^{+} &= \cos \varphi X_0^{\sigma l} + \sin \varphi X_0^{\sigma u} + \sigma \left(\cos \varphi \cos \alpha + \frac{\sin \varphi \sin \alpha}{\sqrt{2}} \right) X_{\sigma l}^{2l} + \left(\cos \varphi \sin \alpha + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\sin \varphi \cos \alpha}{\sqrt{2}} \right) X_{\sigma l}^{2u} - \frac{\sin \varphi}{\sqrt{2}} X_{\sigma l}^{20} + \sigma \left(\cos \alpha \sin \varphi - \frac{\sin \alpha \cos \varphi}{\sqrt{2}} \right) X_{\sigma u}^{2l} + \\
 &\quad + \sigma \left(\sin \alpha \sin \varphi - \frac{\cos \alpha \cos \varphi}{\sqrt{2}} \right) X_{\sigma u}^{2u} + \frac{\cos \varphi}{\sqrt{2}} X_{\sigma u}^{20} + \frac{\sin \alpha}{\sqrt{2}} X_{2l}^{3\sigma} + \frac{\cos \alpha}{\sqrt{2}} X_{2u}^{3\sigma} + \\
 &\quad + \frac{\sigma}{\sqrt{2}} X_{20}^{3\sigma} + \sigma X_{2\sigma}^{3\sigma} - \sin \varphi X_{\sigma l}^{2\sigma} + \cos \varphi X_{\sigma u}^{2\sigma}, \\
 d_{\sigma}^{+} &= -\sin \varphi X_0^{\sigma l} + \cos \varphi X_0^{\sigma u} - \sigma \frac{\sin \alpha \cos \varphi}{\sqrt{2}} X_{\sigma l}^{2l} - \sigma \frac{\cos \alpha \cos \varphi}{\sqrt{2}} X_{\sigma u}^{2u} - \\
 &\quad - \sigma \frac{\sin \varphi \sin \alpha}{\sqrt{2}} X_{\sigma u}^{2l} - \sigma \frac{\sin \varphi \cos \alpha}{\sqrt{2}} X_{\sigma u}^{2u} - \frac{\cos \varphi}{\sqrt{2}} X_{\sigma l}^{20} - \frac{\sin \varphi}{\sqrt{2}} X_{\sigma u}^{20} + \\
 &\quad + \cos \alpha X_{2l}^{3\sigma} + \sin \alpha X_{2u}^{3\sigma} - \cos \varphi X_{\sigma l}^{2\sigma} - \sin \varphi X_{\sigma u}^{2\sigma}.
 \end{aligned} \tag{4}$$

В отличие от разложения по хаббардовским X -операторам, коэффициенты разложения в (4) зависят от энергетических параметров задачи. Подставляя (4) в (1), получим гамильтониан в обобщенных X -операторах, в которых H_0 диагонален с собственными значениями (3), а H_{hop} рассматриваем как возмущение с помощью диаграммной техники. Пользуясь правилом $X_q^p X_s^r = X_s^p \delta_{qr}$, из (4) получаем в атомном пределе выражение для числа электронов n на одном узле (их концентрацию):

$$\bar{n}_{\sigma} = \overline{c_{\sigma}^{+} c_{\sigma}} + \overline{d_{\sigma}^{+} d_{\sigma}} = \overline{X_{\sigma l}^{\sigma l}} + \overline{X_{\sigma u}^{\sigma u}} + \frac{1}{2} (\overline{X_{2l}^{2l}} + \overline{X_{2u}^{2u}} + \overline{X_{20}^{20}} + 2\overline{X_{2\sigma}^{2\sigma}}) + 2\overline{X_{3\sigma}^{3\sigma}} + \overline{X_{3\bar{\sigma}}^{3\bar{\sigma}}}. \tag{5}$$

В соотношении (5) X_{α}^{α} является средним числом узлов в состоянии α .

3. ФУНКЦИИ ГРИНА ЗАДАЧИ

Причинные функции Грина определим следующим образом:

$$G^{(\alpha, \beta)} = -\langle T X_{\alpha_2}^{\alpha_1} X_{\beta_1}^{\beta_2} \rangle, \tag{6}$$

где $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2)$, $\beta = (\beta_1, \beta_2)$ для X -операторов в представлении Гайзенберга и мацубаровского времени τ , T – оператор хронологизации Вика, а усреднение произведено по ансамблю Гиббса, соответствующему гамильтониану задачи.

Как видно из разложения (4), причинные функции Грина, выраженные в одноэлектронных операторах c - и d -электронов, являются линейными комбинациями функций Грина (6), выраженных в атомных X -операторах.

Мацубаровские невозмущенные функции Грина в ω -представлении имеют следующий вид:

$$G_0^{(\alpha, \beta)} = \frac{F_{\alpha} \delta_{\alpha\beta}}{-i\omega + (\lambda_{\alpha_2} - \lambda_{\alpha_1})}, \tag{7}$$

где $F_\alpha = X_{\alpha_1}^{\alpha_1} + X_{\alpha_2}^{\alpha_2}$ – корреляционные факторы.

Полюсы невозмущенных (атомных) функций Грина (7) определяют спектр резонансных энергий $(\lambda_{\alpha_2} - \lambda_{\alpha_1})$ (разность между электронными n -частичным и $n-1$ -частичным атомными уровнями энергии, выписанными в выражениях (3)). На резонансных энергиях центрированы зоны, порожденные тунелированием электронов, как и в классической модели Хаббарда [8]. Соответствие между корреляционными хаббардовскими зонами и традиционными блоховскими, образующимися из размытия уровней, заселенных n электронами, можно установить, полагая, что n -частичным зонам Блоха $\alpha(n)$ соответствуют зоны, порожденные внутриатомными переходами $\alpha(n) \rightarrow \beta(n-1)$. Для этого убедимся, что заполнение хаббардовских зон согласуется с последовательностью заполнения n -электронных уровней.

ПМА имеет следующую последовательность резонансных энергий:

$$\lambda_{2l} - \lambda_{1u} < \lambda_{1l} - \lambda_0 < \lambda_{2l} - \lambda_{1l} < \dots \quad (8)$$

Заметим для сравнения, что в традиционной модели Хаббарда [8] иерархия резонансных энергий соответствует иерархии n -электронных уровней: энергия единственной хаббардовской “двойки” (для химпотенциала в нижней хаббардовской зоне) $\varepsilon_2 = I - 2\mu > 0$ больше энергии одноэлектронных уровней $\varepsilon_+ = \varepsilon_- = -\mu$, вырожденных по проекции спина, и разность энергий двухчастичного и одночастичного уровней $\varepsilon_2 - \varepsilon_- = (I - 2\mu) - (-\mu)$ соответственно больше разности энергий одночастичного и пустого уровней $\varepsilon_+ - \varepsilon_0 = -\mu - 0 = -\mu$ (см. рисунок). В нашем же случае модели (1) с несколькими n -электронными уровнями (см. (3)) такого соответствия нет и нижайшими по энергии могут быть переходы и зоны, которые не всегда заполняются первыми, как это станет ясным из анализа атомного предела (2), (3) ниже.

Следуя хаббардовскому методу (беспетельное приближение диаграммной техники), обратный гриниан составим из обратных электронных функций Грина:

$$\begin{aligned} (G^{(\alpha, \alpha)})^{-1} &= \frac{-i\omega + F_\alpha g_{\alpha\alpha}^2 t_p + (\lambda_{\alpha_2} - \lambda_{\alpha_1})}{F_\alpha}, \\ (G^{(\alpha, \beta)})^{-1} &= -t_p \quad \text{для } \alpha \neq \beta, \end{aligned} \quad (9)$$

где $g_{\alpha\alpha}^2$ – генеалогический коэффициент перед членом $(X_{\alpha_1}^{\alpha_2})_i (X_{\alpha_2}^{\alpha_1})_j$ в перескоковой части, возникающий после подстановки разложений (3) в H_{hop} (1). Из выражений (9) видно, что в случае узкой зоны $g_{\alpha\alpha}^2 t \ll (\lambda_{\alpha_2} - \lambda_{\alpha_1})$ учет недиагональных по собственным состояниям (2) функций Грина для общей концентрации электронов $\bar{n} = \sum_\sigma (\bar{c}_\sigma^\dagger \bar{c}_\sigma + \bar{d}_\sigma^\dagger \bar{d}_\sigma)$

пренебрежимо мал. Поэтому ниже ограничимся лишь диагональными функциями Грина из (9).

Нижайшая энергетическая зона возникает на атомном переходе между нижайшим двухчастичным $2l$ - и верхним одночастичным σu -уровнями (ср. (5)). Предположение, что она заполняется электронами первой, противоречит тому, что в атомном пределе первым заселяется электронами нижний одночастичный уровень σu , которому соответствует коррелированная зона на резонансе $\sigma l \rightarrow 0$, а верхний одночастичный уровень σu вообще не заполняется.

4. ЗАПОЛНЕНИЕ ЗОН ЭЛЕКТРОНАМИ В ПМА

Система уравнений на средние значения диагональных X -операторов $\overline{X}_\alpha^\alpha = \sum_{\omega, p} G(\omega, p) e^{i\omega(-0)}$ в низкотемпературной парамагнитной фазе вытекает из фермиевских функций Грина (9):

$$\begin{aligned}\overline{X}_{\sigma u}^{\sigma u} &= (\overline{X}_0^0 + \overline{X}_{\sigma u}^{\sigma u}) \int \vartheta(-F_{\sigma u 0} g_{\sigma u 0}^2 t_p - (\lambda_{\sigma u} - \lambda_0)) dp, \\ \overline{X}_{2l}^{2l} &= (\overline{X}_{2l}^{2l} + \overline{X}_{\sigma u}^{\sigma u}) \int \vartheta(-F_{2l \sigma u} g_{2l \sigma u}^2 t_p - (\lambda_{2l} - \lambda_{\sigma u})) dp \text{ и т.д.}\end{aligned}$$

Перепишем ее в виде

$$\begin{aligned}\overline{X}_{\sigma u}^{\sigma u} &= (\overline{X}_0^0 + \overline{X}_{\sigma u}^{\sigma u}) F(\sigma u, 0), \\ \overline{X}_{2l}^{2l} &= (\overline{X}_{\sigma u}^{\sigma u} + \overline{X}_{2l}^{2l}) F(2l, \sigma u) \text{ и т.д.}\end{aligned}\tag{10}$$

Функции F принимают такие значения на отрезке $[0; 1]$, что $F(\alpha, \beta) = 0$, если μ лежит ниже зоны, центрированной на резонансе $\alpha(n) \rightarrow \beta(n-1)$, $F(\alpha, \beta) = 1$, если химпотенциал выше этой зоны, причем $0 < F(\alpha, \beta) < 1$ для μ внутри зоны. Для прямоугольной плотности состояний $\rho(\varepsilon) = (1/2w)\theta(w^2 - \varepsilon^2)$, где $w = zt$ — полуширина зоны в кристаллической решетке с z ближайшими соседями, имеем

$$F(2l, \sigma u) = (1/2w) \left(\frac{\lambda_{\sigma u} - \lambda_{2l}}{F_{2l \sigma u} g_{2l \sigma u}^2} + w \right).\tag{11}$$

Ниже рассмотрены всевозможные случаи заполнения энергетических корреляционных зон для различных положений химпотенциала согласно последовательности (8) резонансных энергий $\lambda_{\alpha_2} - \lambda_{\alpha_1}$.

1. μ внутри зоны, возникшей из внутриатомного $2l \rightarrow \sigma u$ перехода. Отметим, что этот переход наинизший по энергии из набора (8). Следующие уравнения определяют концентрацию электронов n и заселенность зон этими электронами:

$$\begin{aligned}\overline{X}_{2l}^{2l} &= (\overline{X}_{2l}^{2l} + \overline{X}_{\sigma u}^{\sigma u}) F(2l, \sigma u), \\ \overline{X}_{\sigma l}^{\sigma l} &= \overline{X}_{\sigma u}^{\sigma u} = [\text{все остальные } \overline{X}_\alpha^\alpha, \text{ кроме } \overline{X}_{2l}^{2l} \text{ и } \overline{X}_0^0] = 0 \\ &\quad (\text{из-за обращения в нуль } \vartheta\text{-функций}), \\ \sum_\alpha \overline{X}_\alpha^\alpha &= 1.\end{aligned}\tag{12}$$

Из системы линейных уравнений (12) следует, что $X_0^0 = 1$, таким образом, в системе нет ни однократно, ни двукратно занятых узлов ($X_\alpha^\alpha = 0$ с $\alpha \neq 0$). И так, ни одна разрешенная энергетическая зона не заполняется электронами при таком положении химпотенциала.

2. μ внутри зоны, порожденной переходом $\sigma l \rightarrow 0$. Уравнения на число электронов в этом случае имеют вид

$$\begin{aligned} F(\sigma l, 0) \overline{X_0^0} + (F(\sigma l, 0) - 1) \overline{X_{\sigma l}^{\sigma l}} &= 0, \\ \overline{X_{\sigma u}^{\sigma u}} &= \overline{X_{2l}^{2l}} = 0, \\ F(2l, \sigma u) \overline{X_{\sigma u}^{\sigma u}} + (F(2l, \sigma u) - 1) \overline{X_{2l}^{2l}} &= 0, \\ \overline{X_0^0} + 2 \overline{X_{\sigma l}^{\sigma l}} &= 1. \end{aligned} \quad (13)$$

Из этой системы уравнений получаем средние концентрации однократно занятых узлов и пустых:

$$\overline{X_{\sigma l}^{\sigma l}} = \frac{F(\sigma l, 0)}{1 + F(\sigma l, 0)}, \quad \overline{X_0^0} = \frac{1 - F(\sigma l, 0)}{1 + F(\sigma l, 0)}.$$

Таким образом, первой заполняется зона, соответствующая переходу $\sigma l \rightarrow 0$ (с одноэлектронного нижнего уровня на пустой). Именно эта зона должна заполняться первой в соответствии с атомным пределом. Концентрационная зависимость химпотенциала задана уравнением

$$(\cos^2 \varphi) w \left(\frac{3}{2} n - 1 \right) + \lambda_{\sigma l} = 0. \quad (14)$$

3. μ внутри зоны, центрированной на энергии перехода $2l \rightarrow \sigma l$. Из системы уравнений

$$\begin{aligned} F(\sigma l, 0) \overline{X_0^0} + (F(\sigma l, 0) - 1) \overline{X_{\sigma l}^{\sigma l}} &= 0, \\ \overline{X_{\sigma u}^{\sigma u}} &= 0, \\ F(2l, \sigma l) \overline{X_{\sigma l}^{\sigma l}} + (F(2l, \sigma l) - 1) \overline{X_{2l}^{2l}} &= 0, \\ 2 \overline{X_{\sigma l}^{\sigma l}} + \overline{X_{2l}^{2l}} &= 1 \end{aligned}$$

с учетом $F(\sigma l, 0) = 1$ находим следующие значения для концентрации узлов решетки с одним (в состоянии $|\sigma l\rangle$) и двумя (в состоянии $|2l\rangle$) электронами, соответственно:

$$\overline{X_{\sigma l}^{\sigma l}} = \frac{1 - F(2l, \sigma l)}{2 + F(2l, \sigma l)}, \quad \overline{X_{2l}^{2l}} = \frac{F(2l, \sigma l)}{2 - F(2l, \sigma l)}. \quad (15)$$

Отсюда видно, что с ростом μ (т.е. с ростом $F(2l, \sigma l)$, ср. (11)) концентрация X_{2l}^{2l} узлов с двумя электронами увеличивается, тогда как концентрация узлов с одним электроном уменьшается. Коэффициент $1/2$ в (5) – сумма произведений генеалогических коэффициентов перед слагаемыми $X_{\sigma l}^{2l} X_{2l}^{\sigma l}$ и $X_{\sigma u}^{2l} X_{2l}^{\sigma u}$. Это означает, что зона, порожденная внутриатомным переходом $\sigma l \rightarrow 2l$, не может вместить два разноспинных электрона или одну хаббардовскую двойку. Согласно результату (15) такая пара электронов полностью размещается только в обеих зонах, порожденных переходами $2l \rightarrow \sigma l$ и $2l \rightarrow \sigma u$.

В п. 1 данного раздела показано, что зона $2l \rightarrow \sigma u$ пуста, если химпотенциал находится внутри нее. В данном случае при заполнении зоны $2l \rightarrow \sigma l$ более низкая по энергии зона $2l \rightarrow \sigma u$ также оказывается заполненной по причине ненулевого корреляционного фактора $X_{\sigma u}^{\sigma u} + X_{2l}^{2l}$ в числителе функции Грина $G^{(\sigma u, 2l)}$ (ср. (9)). Концентрация электронов в рассматриваемой зоне $2l \rightarrow \sigma u$ возрастает с ростом фактора X_{2l}^{2l} при полной ее

заполненности из-за положения μ в более высокой зоне $2l \rightarrow \sigma l$. Выделим вклады в заселенность дважды занятых узлов по упомянутым корреляционным зонам следующим образом (см. (4)):

$$\begin{aligned} \overline{X_{2l}^{2l}} = & \left\{ \left(\cos \alpha \cos \varphi + \frac{\sin \alpha \sin \varphi}{\sqrt{2}} \right)^2 + \frac{\sin^2 \alpha \cos^2 \varphi}{2} \right\} \overline{X_{2l}^{2l}} + \\ & + \left\{ \left(\cos \alpha \sin \varphi - \frac{\sin \alpha \cos \varphi}{\sqrt{2}} \right)^2 + \frac{\sin^2 \alpha \sin^2 \varphi}{2} \right\} \overline{X_{2l}^{2l}}. \end{aligned}$$

Здесь первое слагаемое соответствует концентрации электронов в заполняемой зоне $2l \rightarrow \sigma l$, а второе слагаемое отвечает за концентрацию электронов в нижней полностью заполненной зоне $2l \rightarrow \sigma u$. Вместимость отдельных зон $2l \rightarrow \sigma u$ и $2l \rightarrow \sigma l$ определяется параметрами задачи, тогда как их суммарная вместимость равна единице. Когда в этих обеих зонах находится одна хаббардовская “двойка”, химпотенциал достигает потолка верхней $2l \rightarrow \sigma l$ зоны (что означает $F(2l, \sigma l) = 1$). Зависимость $\mu(n)$ в данном случае определена уравнением

$$g_{2l\sigma l}^2 w \left(\frac{3}{2}n - 1 \right) + (\lambda_{2l} + \lambda_{\sigma l}) = 0.$$

Заполнение других верхних энергетических зон (с тремя электронами) рассматривается аналогично.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненный анализ позволяет согласовать зонную картину хаббардовского подхода с последовательностью заполнения многоэлектронных уровней (п. 1 и 2 раздела 4).

Зона, порожденная переходом с n -электронного уровня α (см. (2)) на уровень с $n - 1$ электронами, заполняется тогда и только тогда, когда атомный уровень α является нижайшим n -частичным. В таком случае при наличии нескольких $n - 1$ -частичных уровней электроны заполняют все зоны, порожденные переходами с этого уровня α на $n - 1$ -электронные уровни. При этом электроны распределены по энергиям между частично заполненной верхней зоной и полностью заполненными нижними корреляционными зонами (п. 3 раздела 4).

Последовательность заполнения корреляционных зон не совпадает с последовательностью резонансных энергий (8).

Недиагональные функции Грина из (9) меняют лишь конкретную концентрационную зависимость химпотенциала $\mu(n)$, сохраняя рассмотренную последовательность заполнения электронных зон. Учет всех элементов полной функции Грина (9) в первом порядке по интегралу перескока t эквивалентен методу сильной связи Слэйтера, обобщенного для коррелированных электронов [6].

Проблема заполнения зон электронами и их вместимости актуальна также и для других моделей с сильнокоррелированными электронами [17–19]. В частности, в редуцированном гамильтониане Эмери–Хирша в [17] заполнение энергетических зон электронами детально не исследовалось. В работе [18] для реалистической $p - d$ -модели высокотемпературных сверхпроводников отмечено отклонение такого заполнения от теории Латтинжера. В связи с этим представляет интерес применение представленного

анализа электронной структуры к моделям узкозонных материалов с сильными электрон-электронными корреляциями.

Работа М. Е. Ж. частично поддерживалась грантом РФФИ № 94-03-08895. В. А. И. благодарен Японскому обществу развития науки за поддержку и проф. Н. М. Плакиде за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] *C. Bastide, C. Lacroix* // J. Phys. C. 1988. V. 21. P. 3557.
- [2] *F. Mancini, M. Marinaro, Y. Nakao* // Physica. 1989. V. B159. P. 330.
- [3] *P.S. Riseborough* // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. P. 13984.
- [4] *J. Karbowski, J. Spalek* // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. P. 1454.
- [5] *Л.Д. Дудух, И.В. Стасюк* // ФММ. 1968. Т. 36. №4. С. 582.
- [6] *V.A. Ivanov* // J. Phys.: Condens. Matter. 1994. V. 6. P. 2065.
- [7] *I.V. Stasyuk, A.M. Shvaika*. On the Electron spectrum of Hubbard Model taking into account interaction with local anharmonic vibrations: Preprint Inst. Phys. Cond. Matt. 91-56P. Lvov, 1991.
- [8] *J. Hubbard* // Proc. Roy. Soc. 1963. V. A 276. P. 238.
- [9] *А.В. Ведяев, В.А. Иванов, В.Е. Шилов* // ТМФ. 1985. Т. 64. №1. С. 163-170.
- [10] *К.А. Кикоин* // ЖЭТФ. 1983. Т. 85. №3. С. 1000.
- [11] *M. Gaudin* // Nucl. Phys. 1960. V. 15. P. 89.
- [12] *B. Westwanski, A. Pawlikowsky* // Phys. Lett. A. 1973. V. 43. P. 21.
- [13] *B. Westwanski* // Phys. Lett. A. 1973. V. 74. P. 27.
- [14] *В.Д. Слободян, И.В. Стасюк* // ТМФ. 1974. Т. 19. №3. С. 423-429.
- [15] *Б.Г. Вакс, А.И. Ларкин, С.А. Пукун* // ЖЭТФ. 1967. Т. 53. С. 281, 1089.
- [16] *Р.О. Зайцев* // ЖЭТФ. 1976. Т. 70. С. 1100.
- [17] *R. Hayn, V. Yu. Yussanckhai, S.V. Lovtsov* // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 5253.
- [18] *N.M. Plakida, R. Hayn, J.-L. Richard* // Phys. Rev. B. 1995. V. 51. №23. P. 16599.
- [19] *V.I. Belinicher, A.L. Chernyshev* // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 390.

Институт общей и неорганической
химии им. Н.С. Курнакова
Российской академии наук

Поступила в редакцию
25.IX.1995 г.

A. V. Vedyayev, M. E. Zhuravlev, V. A. Ivanov, M. Marinaro

THE FILLING OF ELECTRON BANDS IN THE PERIODICAL ANDERSON MODEL

The sequence of the band filling of correlated energy bands for periodical Anderson model (PMA) (the Anderson model on the lattice) with strong electron-electron correlation interaction is investigated. It is shown that the approach in the frame of correlated Hubbard subbands is compatible with the standard band theory approach. The structure of allowed energy bands for PVA is found in the absence of the order parameter. The dependence of the chemical potential on the electron filling is obtained.