

НОСИТЕЛИ ТОКА В УЗКОЗОННОЙ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА – ХАББАРДА В СПИН-ВОЛНОВОЙ ОБЛАСТИ ТЕМПЕРАТУР

Аннотация. *Актуальность и цели.* Повышенный интерес к проблеме учета наряду с зонными эффектами и атомоподобного поведения d - и f - состояний связан с убеждением многих исследователей в том, что сильные электронные корреляции в d -электронной подсистеме обеспечивают сравнительно высокие температуры сверхпроводящего перехода в таких соединениях, как $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, а также проводимость окислов переходных металлов CrO_2 , VO_2 и растворов, таких как $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$. Весьма перспективным для изучения проводящих свойств в веществах с узкими энергетическими зонами является использование модели Андерсона – Хаббарда. Данная работа посвящена исследованию проводимости ферромагнитного материала при низких температурах, когда основным механизмом релаксации является процесс рассеяния на магнонах в случае сильных электронных корреляций в узкой энергетической зоне. *Материалы и методы.* Сравнение полученных теоретических результатов проведено с экспериментальными данными и другими теоретическими работами для зависимости времени релаксации от температуры и волнового вектора. Переход к хаббардовским операторам, который диагонализует одноузельную часть гамильтониана, позволяет использовать технику температурных функций Грина для учета межузельного перескокового слагаемого при исследовании проводящих свойств модели. Расчет тензора проводимости проведен с точностью до квадратичного слагаемого по интегралу переноса по узлам кристаллической решетки. *Результаты.* Исследована трехорбитальная модель Андерсона – Хаббарда с вырождением и симметричным изотропным интегралом перескока. Предложена систематическая процедура расчета межатомных корреляций с учетом обобщенных хаббардовских тензор-операторов. Приведен пример расчета спектра электронных возбуждений в простейшем случае. Для расчета проводимости соединений переходных металлов с переносом заряда по узкой зоне использовалось кинетическое уравнение. Получено выражение для проводимости ферромагнитного материала при низких температурах, когда основным механизмом релаксации является процесс рассеяния на магнонах. *Выводы.* Результаты показывают, что трехорбитальная модификация модели Хаббарда является более эффективной для описания поведения двух групп сильно взаимодействующих электронов – локализованных на узлах кристаллической решетки и электронов проводимости. Анализ нижней части энергетического спектра позволил получить выражение для сопротивления, связанного с квазичастицами в одной из корреляционных зон и зависящего от волнового вектора. Приведено сравнение результатов статьи с экспериментальными данными и результатами других теоретических работ для узкозонных твердых тел. Полученный материал предназначен для исследования оптического поглощения, ферромагнитного резонанса, органических и высокотемпературных сверхпроводников.

Ключевые слова: электросопротивление, электронные корреляции, эффективная масса, спиновая волна, время релаксации.

CURRENT CARRIERS IN THE NARROW-BAND PERIODIC ANDERSON-HUBBARD MODEL IN THE SPIN-WAVE TEMPERATURE RAGE

Abstract. *Background.* The increased interest to the problem of considering atom-like behavior of d- and f-states along with the band effects is connected with numerous researchers' belief that strong electron correlations in the d-electron subsystem provide for relatively high temperatures of superconducting transition in such compounds as $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, as well as the conductivity of transition metal oxides CrO_2 , VO_2 and solutions such as $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$. The use of the Anderson – Hubbard model seems to be very promising for the study of the conducting properties in materials with narrow energy bands. This paper investigates the conductivity of ferromagnetic material at low temperatures, when the main relaxation mechanism is the process of scattering by magnons in the case of strong electron correlations in narrow energy band. *Materials and methods.* The comparison of the theoretical results with experimental data and other theoretical works on the relaxation time dependence on the temperature and wave vector is carried out. The transition to Hubbard operators, which diagonalizes the single-site part of the Hamiltonian, allows using Green's technique of temperature functions for taking into account interstitial hopping term in the study of the model conducting properties. Calculation of the conductivity tensor is made up to the quadratic term for the transfer integral through crystal lattice sites. *Results.* The three-orbital Anderson – Hubbard model with degeneration and symmetric isotropic hopping integral is studied. A systematic procedure for calculating the interatomic correlations considering generalized Hubbard tensor operators is suggested. An example of calculating the spectrum of electronic excitations in the simplest case is given. The kinetic equation is used for calculating the conductivity of transition metal compounds with charge transfer along a narrow band. A formula for the conductivity of a ferromagnetic material at low temperatures, when the main relaxation mechanism is the scattering by magnons is deduced. *Conclusions.* The results show that the three-orbital modification of the Hubbard model is more effective to describe the behavior of two groups of strongly interacting electrons – those localized on the lattice sites and the conduction electrons. The analysis of the bottom portion of the energy spectrum allowed deducing a formula for the resistance that is connected with quasiparticles in one of the correlation zones and depends on the wave vector. The comparison of the article results with experimental data and results of other theoretical works for narrow-band solids is produced. The resulting material is designed to study optical absorption, ferromagnetic resonance, organic and high-temperature superconductors.

Key words: electrical resistivity, electron correlations, the effective mass, spin wave, relaxation time.

Введение

В соединениях переходных металлов (окислы, халькогенидные шпинели, ВТСП и др.) возможен электроперенос как по широким зонам проводимости, так и трансляции *d*-электронов по узкой энергетической зоне. Наличие *d*-электронов обуславливает возможность магнитного упорядочения и вырождения узких зон по орбитальному квантовому числу. Поскольку скорость перескока *d*-электронов с атома на атом значительно меньше скорости электронов

проводимости, последние могут сильно коррелировать с d -электронами и экранировать их поля. Это приводит к особенностям в кинетике при наличии различных механизмов рассеяния. В работах [1–3] рассматривались явления переноса без учета орбитального вырождения. Перенос электронов по узким d -зонам с учетом вырождения рассматривался в работе [4], но в ней не учитывались сильные электронные корреляции $d(s)$ -электронов. Роль вырождения в переходных металлах с сильными электронными корреляциями изучалась в работах [5, 6], где не рассматривались особенности гибридизации $d(s)$ -электронов и их влияние на электросопротивление.

В настоящей работе в периодической модели Андерсона – Хаббарда [7, 8] с учетом орбитального вырождения и межэлектронных корреляций приведен расчет тензора электропроводности в спин-волновой области температур.

1. Модельный гамильтониан. Волновые функции и уровни энергии

В случае трехкратного вырождения гамильтониан периодической модели Андерсона – Хаббарда [9] запишем в виде

$$\tilde{H} = H_1 + H_2 + H_3 + H_4 + H_5 + H_6, \quad (1)$$

$$H_1 = \sum_{i,\sigma,m=a,b,c} \frac{I_m}{2} n_{i\sigma}^m n_{i\bar{\sigma}}^m, \quad H_2 = \frac{U}{2} \sum_{\substack{i,\sigma,\sigma' \\ m,n=a,b \\ m \neq n}} n_{i\sigma}^m n_{i\sigma'}^n, \quad H_3 = J \sum_i S_i^a S_i^b,$$

$$H_4 = \sum_{\substack{i,\sigma,m \\ (m=a,b,c)}} E^m d_{i\sigma m}^+ d_{i\sigma m}, \quad H_5 = \frac{V_0}{2} \sum_{i,\sigma} \left[(a_{i\sigma}^+ + b_{i\sigma}^+) c_{i\sigma} + \text{э.с.} \right],$$

$$H_6 = \sum_{\substack{i,j,\sigma \\ m=a,b,c}} t_{ij}^{mm} d_{i\sigma m}^+ d_{j\sigma m} + \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}^{ab} (a_{i\sigma}^+ b_{j,\sigma} + \text{э.с.}),$$

где I_m – кулоновское расталкивание электронов на орбиталях $m = a, b, c$; U – межорбитальное кулоновское взаимодействие электронов a и b ; J – обменное (хундовское) взаимодействие a - и b -электронов; E^m – одночастичные энергии a -, b -, c -электронов, отсчитанные от уровня химического потенциала; V_0 – энергия андерсоновской гибридизации; t_{ij} – энергия туннелирования; $n_{i\sigma}^m = \{n_{i\sigma}^a, n_{i\sigma}^b\}$, $n_{i\sigma}^a = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$, $n_{i\sigma}^b = b_{i\sigma}^+ b_{i\sigma}$ – число частиц на орбитах типа « a » и « b »; $d_{i\sigma m} = \{a_{i\sigma}, b_{i\sigma}, c_{i\sigma}\}$ – операторы уничтожения электронов на орбитах типа a, b, c , соответственно. Далее считаем $I_a = I_b = I_1$, $I_c = I_2$, $I_2 \leq I_1$, $I_1 > U > J > V_0$. В качестве базиса для приведения одноузельной части гамильтониана к диагональному виду используем операторы Хаббарда, переход к которым имеет следующий вид [9–11]:

$$a_{i\sigma} = \sum_{p,k} \langle p | a_{i\sigma} | k \rangle X_p^k, \quad (X_p^k)^+ = X_k^p.$$

В случае переходов с 4-электронных на 3-электронные и с 3-электронных на 2-электронные состояния $p, k = |2aT_{bc}^{\sigma\sigma}\rangle, |2aT_{bc}^{\sigma\bar{\sigma}}\rangle, |\sigma\sigma\sigma\rangle, |T^\sigma\rangle, |L^\sigma\rangle, |L^{\sigma\bar{\sigma}}\rangle$ по орбиталям типа «a» и «b» было получено следующее представление одно-электронных операторов через хаббардовские [7]:

$$\begin{aligned} a_\sigma^+ &= \alpha\sigma \left(X_{2aT_{bc}^{\bar{\sigma}}}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}} + \frac{1}{\sqrt{3}} X_{2aT_{bc}^\sigma}^{T^\sigma} + \sqrt{\frac{2}{3}} X_{2aT_{bc}^{\sigma\bar{\sigma}}}^{T^{\bar{\sigma}}} \right) + \delta \left(X_{\sigma\sigma\sigma}^{L^\sigma} + \frac{1}{\sqrt{3}} X_{T^{\bar{\sigma}}}^{L^{\bar{\sigma}}} + \sqrt{\frac{2}{3}} X_{T^\sigma}^{L^{\sigma\bar{\sigma}}} \right). \\ b_\sigma^+ &= \alpha\sigma \left(X_{2aT_{ac}^{\bar{\sigma}}}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}} + \frac{1}{\sqrt{3}} X_{2aT_{ac}^\sigma}^{T^\sigma} + \sqrt{\frac{2}{3}} X_{2aT_{ac}^{\sigma\bar{\sigma}}}^{T^{\bar{\sigma}}} \right) + \\ &+ \delta \left(X_{\sigma\sigma\sigma}^{L^\sigma} + \frac{1}{\sqrt{3}} X_{T^{\bar{\sigma}}}^{L^{\bar{\sigma}}} + \sqrt{\frac{2}{3}} X_{T^\sigma}^{L^{\sigma\bar{\sigma}}} \right). \end{aligned} \quad (2)$$

Остальные операторы получаются путем циклической перестановки орбиталей и их сопряжением.

В соответствии с принципом электронейтральности и в отсутствие магнитного поля основное состояние электронов описывается волновыми функциями и соответствующим им энергетическим спектром:

$$\begin{aligned} |2aT_{bc}^\sigma\rangle &= \alpha\sigma \left(a_\sigma^+ a_{\bar{\sigma}}^+ b_\sigma^+ c_\sigma^+ |0\rangle + a_\sigma^+ b_\sigma^+ b_{\bar{\sigma}}^+ c_\sigma^+ |0\rangle \right) + \beta\sigma \left(a_\sigma^+ b_\sigma^+ c_\sigma^+ c_{\bar{\sigma}}^+ |0\rangle \right); \\ E(2aT_{bc}^\sigma) &= E(2aT_{bc}^{\sigma\bar{\sigma}}) = \varepsilon_1 + \frac{1}{2} \sqrt{\varepsilon_2^2 + 2V_0^2}; \\ |2aT_{bc}^{\sigma\bar{\sigma}}\rangle &= \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \left(a_\sigma^+ a_{\bar{\sigma}}^+ (b_\sigma^+ c_{\bar{\sigma}}^+ + b_{\bar{\sigma}}^+ c_\sigma^+) |0\rangle + b_\sigma^+ b_{\bar{\sigma}}^+ (a_\sigma^+ c_{\bar{\sigma}}^+ + a_{\bar{\sigma}}^+ c_\sigma^+) |0\rangle \right) + \frac{\beta}{\sqrt{2}} \left(c_\sigma^+ c_{\bar{\sigma}}^+ (a_\sigma^+ b_{\bar{\sigma}}^+ + a_{\bar{\sigma}}^+ b_\sigma^+) |0\rangle \right); \\ |\sigma\sigma\sigma\rangle &= a_\sigma^+ b_\sigma^+ c_\sigma^+ |0\rangle, E(\sigma\sigma\sigma) = E(T^\sigma) = \varepsilon_3; \\ |T^\sigma\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(a_{\bar{\sigma}}^+ b_\sigma^+ c_\sigma^+ + a_\sigma^+ b_{\bar{\sigma}}^+ c_\sigma^+ + a_\sigma^+ b_\sigma^+ c_{\bar{\sigma}}^+ \right) |0\rangle; \\ |L^\sigma\rangle &= \gamma \left(a_\sigma^+ b_\sigma^+ |0\rangle \right) + \delta \left(a_\sigma^+ c_\sigma^+ |0\rangle + b_\sigma^+ c_\sigma^+ |0\rangle \right); \\ E(L^\sigma) &= E(L^{\sigma\bar{\sigma}}) = \varepsilon_4 + \frac{1}{2} \sqrt{\varepsilon_2^2 + 2V_0^2}; \\ |L^{\sigma\bar{\sigma}}\rangle &= \frac{\gamma}{\sqrt{2}} \left((a_\sigma^+ b_\sigma^+ + a_{\bar{\sigma}}^+ b_{\bar{\sigma}}^+) |0\rangle \right) + \frac{\delta}{\sqrt{2}} \left((a_\sigma^+ c_\sigma^+ + a_{\bar{\sigma}}^+ c_{\bar{\sigma}}^+) |0\rangle + (b_\sigma^+ c_\sigma^+ + b_{\bar{\sigma}}^+ c_{\bar{\sigma}}^+) |0\rangle \right), \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \frac{1}{2} (I_1 + I_2 + 3U + 5E^a + 3E^c - J/2), \quad \varepsilon_2 = I_1 - I_2 + E^a - E^c + J/2, \\ \varepsilon_3 &= U - J/2 + 2E^a + E^c, \quad \varepsilon_4 = \frac{1}{2} (U - J/2 + 3E^a + E^c), \quad \varepsilon_5 = U - J/2 + E^a - E^c, \end{aligned}$$

$$\alpha = \frac{b-a}{\sqrt{2(b-a)^2 + V_0^2}}, \beta = \frac{V_0}{\sqrt{2(b-a)^2 + V_0^2}},$$

$$\gamma = \frac{V_0}{\sqrt{2(d-c)^2 + V_0^2}}, \delta = \frac{d-c}{\sqrt{2(d-c)^2 + V_0^2}},$$

$$b-a = \frac{1}{2} \sqrt{(\epsilon_2 + U)^2 + V_0^2} - \frac{\epsilon_2}{2}, \quad d-c = \frac{1}{2} \sqrt{\epsilon_5^2 + V_0^2} - \frac{\epsilon_5}{2}.$$

В случае узких зон структура энергетического спектра определяется формированием хаббардовских подзон качественно отличающихся от структуры спектра нормальной ферми-жидкости. Основное отличие состоит в том, что одному значению квазиимпульса соответствует одно значение энергии затравочных частиц и два значения энергии квазичастиц, отличающихся на хаббардовскую щель. В случае $N_e < N$ (N_e – число носителей тока, N – число узлов решетки) транспортные и релаксационные свойства определяются «дырочными» состояниями в нижней хаббардовской подзоне, в случае $N_e > N$ эти свойства определяются носителями в верхней хаббардовской подзоне.

В пределе сильных корреляций, по терминологии Хаббарда и принципу электронейтральности Полинга, ограничимся тремя термами $E_{n\pm 1}$, E_n , которым соответствуют два резонанса.

Рассмотрим транспортные свойства, сформированные на орбитах типа «а», порожденные переходами с «четверок» на «тройки» и с «троек» на «двойки»:

$$\begin{array}{cccccc} |2a\sigma\sigma\rangle & |2aT_{bc}^{\sigma\bar{\sigma}}\rangle & |2a\bar{\sigma}\bar{\sigma}\rangle & |\sigma\sigma\sigma\rangle & |T^\sigma\rangle & |T^{\bar{\sigma}}\rangle \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \text{ и } \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ |T^\sigma\rangle & |T^{\bar{\sigma}}\rangle & |\bar{\sigma}\bar{\sigma}\bar{\sigma}\rangle & |L^\sigma\rangle & |L^{\sigma\bar{\sigma}}\rangle & |L^{\bar{\sigma}}\rangle \end{array}$$

Ниже рассматривается случай с максимальной мультиплетностью, что соответствует стабилизации феррофазы при переходе в металлическое состояние.

Учитывая связь электронных операторов с хаббардовскими, запишем туннелирующую часть гамильтониана (2) для рассматриваемых переходов в виде

$$H_{\text{int}} = \alpha^2 \sum_{n,m} t_{nm} \cdot \left[X_{n2aT_{bc}^+}^{+++} \cdot X_{m+++}^{2aT_{bc}^+} + \frac{1}{3} X_{n2aT_{bc}^-}^{T-} \cdot X_{mT^-}^{2aT_{bc}^-} + \frac{2}{3} X_{n2aT_{bc}^-}^{T+} \cdot X_{mT^+}^{2aT_{bc}^-} + \right. \\ \left. + X_{n2aT_{bc}^-}^{---} \cdot X_{m---}^{2aT_{bc}^-} + \frac{1}{3} X_{n2aT_{bc}^+}^{T+} \cdot X_{mT^+}^{2aT_{bc}^+} + \frac{2}{3} X_{n2aT_{bc}^+}^{T-} \cdot X_{mT^-}^{2aT_{bc}^+} \right]. \quad (4)$$

Условие полноты для указанных переходов имеет вид

$$\sum_{\sigma} \langle X_{\sigma\sigma\sigma}^{\sigma\sigma\sigma} \rangle + \sum_{\sigma} \langle X_{2T^\sigma}^{2T^\sigma} \rangle + \sum_{\sigma} \langle X_{2T^{\sigma\bar{\sigma}}}^{T^{\sigma\bar{\sigma}}} \rangle + \sum_{\sigma} \langle X_{T^\sigma}^{T^\sigma} \rangle = 1,$$

или в электронных концентрациях:

$$\sum_{\sigma} n_{\sigma\sigma\sigma} + \sum_{\sigma} n_{2T\sigma} + \sum_{\sigma} n_{2T\sigma\bar{\sigma}} + \sum_{\sigma} n_{T\sigma} = 1. \quad (5)$$

При наличии сильных электронных корреляций вероятность заполнения четырехчастичных состояний значительно меньше, чем у трехчастичных. Предполагая равновероятность последних, окончательно запишем условие (5) в виде

$$2n_{+++} + 2n_{---} = 1. \quad (6)$$

2. Расчет тензора электропроводности. Уравнения самосогласования

Расчет тензора электропроводности удобно проводить методом двух-временных функций Грина, составляя цепочки уравнений для них. Общее уравнение для произвольных операторов A и B в энергетическом представлении имеет вид [12–14]

$$\varepsilon \langle \langle A|B \rangle \rangle_E = \langle \{A, B\} \rangle + \langle \langle [A, H]|B \rangle \rangle_E, \quad (7)$$

где H – полный оператор энергии (1).

С учетом коммутационных соотношений для операторов Хаббарда имеем

$$\left[X_i^{pq}, X_j^{sr} \right]_{\pm} = X_i^{pq} \cdot X_j^{sr} \pm X_j^{sr} \cdot X_i^{pq} = \delta_{ij} \left(X_i^{pr} \delta_{s,q} \pm X_i^{sq} \delta_{p,r} \right). \quad (8)$$

Запишем уравнение (7) в импульсно-энергетическом представлении:

$$\left[i\omega - \frac{\alpha^2}{2} t(k) \right] \left\langle \left\langle X_{k,+++}^{2aT_{bc}^+}(t) \middle| X_{-k,2aT_{bc}^+}^{+++} \right\rangle \right\rangle_{\omega} = n_{+++} + \\ + \alpha^2 \sum_q t(k-q) \left\langle \left\langle \left(\frac{1}{3} X_{q,+++}^{T^+} \cdot X_{k-q,T^+}^{2aT_{bc}^+} - X_{q,---} \cdot X_{k-q,+++}^{2aT_{bc}^+} \right) (t) \middle| X_{-k,2aT_{bc}^+}^{+++} \right\rangle \right\rangle_{\omega}. \quad (9)$$

Уравнение (9) представляет собой первое приближение по интегралу перескока.

Ограничивая вычисления линейным приближением по числу спиновых волн, вторым порядком по перескоку t^2 и малой концентрацией $c = (N_e - N)/N \ll 1$, запишем уравнение движения следующего шага приближения, вводя функцию Грина

$$L(q|kpE) = \left\langle \left\langle \left(X_{-p,---}^{+---} X_{q,+-}^{---} X_{k+p-q,+++}^{2aT_{bc}^+} \right) (t) \middle| X_{-k,2aT_{bc}^+}^{+++} \right\rangle \right\rangle_E, \quad (10)$$

для которой в импульсно-энергетическом представлении имеет место уравнение

$$\left[E - \frac{\alpha^2}{2} t(q) \right] L(k+p-q|kpE) = \left\langle X_{-p,---}^{+---} X_{k+p-q,+-}^{---} X_{q,+++}^{+++} \right\rangle +$$

$$+\alpha^2 \sum_r \left[\frac{1}{6} t(q-r) - t(k+p-r) \right] L(r|kpE). \quad (11)$$

Последнее уравнение можно привести к более компактному виду:

$$\left[E - \frac{\alpha^2}{2} t(q) \right] \varphi(q|kpE) = \frac{1}{2} \delta_{q,p} - \frac{E - \frac{\alpha^2}{2} t(p)}{E - \frac{\alpha^2}{2} t(q)} +$$

$$+\alpha^2 \sum_r \left[\frac{1}{6} t(k+p-q-r) - t(r) \right] \varphi(r|kpE), \quad (12)$$

если ввести функцию

$$\varphi(q|kpE) = \left[E - \frac{\alpha^2}{2} t(p) \right] \cdot N_p^{-1} \cdot L(k+p-q|kpE), \quad (13)$$

где N_p – функция Бозе – Эйнштейна.

Уравнение (12) представляет собой интегральное уравнение второго этапа приближения.

Самосогласованное решение уравнений (9) и (12) позволяет записать общее выражение для функции Грина в виде

$$G(k, E) = \frac{n_{+++}}{E - \frac{\alpha^2}{2} t(k) - 2\alpha^2 \cdot \Sigma(k, E)}, \quad (14)$$

где $\Sigma(k, E)$ – выражение для собственной энергии носителей тока, мнимая часть которой определяет обратное время релаксации;

$$\gamma_k = \frac{\pi}{18} \sum_{p,q} N_p [t(q-p) - 3t(q)] \cdot [t(p-q) - 6t(q)] \cdot \delta(t(k) - t(q)). \quad (15)$$

Наличие дельта-функции в (15) обеспечивает равенство $t(k) = t(q)$. Принимая во внимание, что в феррофазе при малых импульсах справедлив квадратичный закон дисперсии для спектра спиновых волн $\omega_p = D \cdot p^2$ (где D – спиновая жесткость решетки), можно вычислить γ_k вблизи центра зоны Бриллюэна. В случае, когда импульс $k \ll p_T$, где $p_T = (T/D)^{1/2}$ – тепловой импульс магнона, зависимость от импульса k и температуры имеет вид

$$\gamma_k = \frac{1}{18} \cdot \frac{15\Omega_0 \xi\left(\frac{7}{2}\right)}{256\pi^{5/2} m^*} k \left(\frac{T}{D}\right)^{7/2}, \quad (16)$$

где Ω_0 – объем элементарной ячейки; $\xi(x)$ – дзета-функция Римана; m^* – эффективная масса электрона при $k = 0$.

В случае, когда $k \gg p_T$, основной вклад равен

$$\gamma_k = \frac{15}{18} \cdot \frac{\Omega_0 \cdot \xi\left(\frac{3}{2}\right)}{64 \cdot \pi^{5/2} \cdot m^*} \cdot k^5 \cdot \left(\frac{T}{D}\right)^{3/2}. \quad (17)$$

Полученные в данной работе импульсные и температурные зависимости обратных времен релаксации (16), (17) являются основными результатами данной работы.

Заключение

Выражение для проводимости, полученное в настоящей работе при наличии вырождения, отличается от аналогичного выражения в работах [2, 13] при отсутствии такового численным множителем

$$\sigma_{\text{выр}}(k, T) = 18 \cdot \sigma_{\text{нев}}(k, T),$$

где $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*} = \frac{ne^2}{m^*\gamma_k}$, τ – время релаксации.

Это различие мы связываем с более эффективным переносом заряда по вырожденным состояниям.

В случае, когда импульс электрона много меньше теплового импульса магнона ($k \ll p_T$), импульсная и температурная зависимости в данной работе и работах [2, 13] совпадают с точностью до числового множителя.

Если импульс электрона много больше теплового импульса магнона ($k \gg p_T$), имеет место существенная разница как в импульсной ($\gamma_k \approx k^3$ в [2, 11], $\gamma_k \approx k^5$ в данной работе), так и в температурной зависимости ($\gamma_k \approx (T/D)^{5/2}$ в [2, 13], $\gamma_k \approx (T/D)^{3/2}$ в настоящей работе). Это различие связано с обменным взаимодействием электронов и гибридизацией Андерсона при наличии вырожденных состояний.

В работе не затронут вопрос об эффективной массе электронов проводимости, которая может зависеть от частоты внешнего электрического поля и влиять на оптические свойства в системах с сильными электронными корреляциями.

В дальнейшем авторы предполагают изучить этот вопрос более подробно.

Список литературы

1. **Нагаев, Э. Л.** Физика магнитных полупроводников / Э. Л. Нагаев. – М. : Наука, 1979. – 432 с.
2. **Ирхин, В. Ю.** Носители тока в узкозонном хаббардовском ферромагнетике в спин-волновой области температур / В. Ю. Ирхин, Н. И. Кацнельсон // Физика твердого тела. – 1983. – Т. 25, № 9. – С. 3383–3388.
3. **Kagan, M. Yu.** Anomalous resistivity and superconductivity in the two-band Hubbard model with one narrow band / M. Yu. Kagan, V. V. Valkov // Fizika Nizkikh Temperatur. – 2011. – Vol. 37, № 1. – P. 84–99.
4. **Ницович, М. В.** Электропроводность по d -зонам соединений переходных металлов / М. В. Ницович, Р. П. Мунтяну, И. Я. Кановский // Физика твердого тела. – 1985. – Т. 27, № 9. – С. 2631–2635.

5. **Зайцев, Р. О.** К теории ферромагнетизма в модели Хаббарда с вырождением / Р. О. Зайцев // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1997. – Т. 112, № 6. – С. 2223–2236.
6. **Гончарук, И. Н.** Электрон-электронные корреляции в спектрах комбинационного рассеяния в VO_2 / И. Н. Гончарук, А. В. Ильинский, О. Е. Квашенкина, Е. Б. Шадрин // Физика твердого тела. – 2013. – Т. 55, № 1. – С. 147–156.
7. **Hubbard, Y.** Electron Correlations in Narrow Energy Bands / J. Hubbard // Proc. Roy. Soc. – 1963. – A276. – P. 238–257.
8. **Anderson, P. W.** Localized magnetic states in metals / P. W. Anderson // Phys. Rev. – 1961. – Vol. 124. – P. 41–53.
9. **Шилов, В. Е.** Переход металл-диэлектрик в периодической модели Андерсона – Хаббарда в случае трехкратного вырождения / В. Е. Шилов, Е. В. Шилова // Вестник МарГУ. – 2007. – № 1 (2). – С. 130–134.
10. **Ведяев, А. В.** Об одной возможности использования операторов Окубо для учета корреляций в модели Хаббарда с вырождением / А. В. Ведяев, В. А. Иванов, В. Е. Шилов // Теоретическая и математическая физика. – 1985. – Т. 28, № 1. – С. 104–114.
11. **Косов, А. А.** Исследование сверхпроводящего перехода в рамках двухорбитальной модели Андерсона – Хаббарда / А. А. Косов, В. Е. Шилов // Физика низких температур. – 1996. – Т. 22, № 9. – С. 1032–1041.
12. **Зубарев, Д. Н.** Двухвременные функции Грина в статистической физике / Д. Н. Зубарев // Успехи физических наук. – 1960. – Т. 71. – С. 71–115.
13. **Вонсовский, С. В.** Локализованное и делокализованное поведение электронов в металлах / С. В. Вонсовский, М. И. Кацнельсон, А. В. Трефилов // Физика металлов и металловедение. – 1993. – Т. 76, № 4. – С. 3–94.
14. **Любутин, И. С.** Современные достижения в исследовании фазовых превращений в оксидах 3d-металлов при высоких и сверхвысоких давлениях / И. С. Любутин, А. Г. Гаврилюк // Успехи физических наук. – 2009. – Т. 179, № 10 – С. 1048–1078.

References

1. Nagaev E. L. *Fizika magnitnykh poluprovodnikov* [Physics of magnetic semiconductors]. Moscow: Nauka, 1979, 432 p.
2. Irkhin V. Yu., Katsnel'son N. I. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 1983, vol. 25, no. 9, pp. 3383–3388.
3. Kagan M. Yu., Valkov V. V. *Fizika Nizkikh Temperatur* [Low-temperature physics]. 2011, vol. 37, no.1, pp. 84–99.
4. Nitsovich M. V., Muntyanu R. P., Kanovskiy I. Ya. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 1985, vol. 27, no. 9, pp. 2631–2635.
5. Zaytsev R. O. *Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki* [Journal of experimental and theoretical physics]. 1997, vol. 112, no. 6, pp. 2223–2236.
6. Goncharuk I. N., Il'inskiy A. V., Kvashenkina O. E., Shadrin E. B. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 2013, vol. 55, no. 1, pp. 147–156.
7. Hubbard Y. *Proc. Roy. Soc.* 1963, A276. pp. 238–257.
8. Anderson P. W. *Phys. Rev.* 1961, vol. 124, pp. 41–53.
9. Shilov V. E., Shilova E. V. *Vestnik MarGU* [Mari State University bulletin]. 2007, no. 1 (2), pp. 130–134.
10. Vedyayev A. V., Ivanov V. A., Shilov V. E. *Teoreticheskaya i matematicheskaya fizika* [Theoretical and mathematical physics]. 1985, vol. 28, no. 1, pp. 104–114.
11. Kosov A. A., Shilov V. E. *Fizika nizkikh temperatur* [Low-temperature physics]. 1996, vol. 22, no. 9, pp. 1032–1041.

12. Zubarev D. N. *Uspekhi fizicheskikh nauk* [Progress of physical sciences]. 1960, vol. 71, pp. 71–115.
 13. Vonsovskiy S. V., Katsnel'son M. I., Trefilov A. V. *Fizika metallov i metallovedenie* [Physics of metals and metal science]. 1993, vol. 76, no. 4, pp. 3–94.
 14. Lyubutin I. S., Gavril'yuk A. G. *Uspekhi fizicheskikh nauk* [Progress of physical sciences]. 2009, vol. 179, no. 10, pp. 1048–1078.
-

Шилов Владимир Егорович

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра общей и прикладной
физики, Марийский государственный
университет (Россия, г. Йошкар-Ола,
пл. Ленина, 1)

E-mail: crabflo@mail.ru

Shilov Vladimir Egorovich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of general and applied
physics, Mari State University
(1 Lenin square, Yoshkar-Ola, Russia)

Шилова Елена Владимировна

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра общей и прикладной
физики, Марийский государственный
университет (Россия, г. Йошкар-Ола,
пл. Ленина, 1)

E-mail: crabflo@mail.ru

Shilova Elena Vladimirovna

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of general and applied
physics, Mari State University
(1 Lenin square, Yoshkar-Ola, Russia)

УДК 538.1; 539.213

Шилов, В. Е.

Носители тока в узкозонной периодической модели Андерсона – Хаббарда в спин-волновой области температур / В. Е. Шилов, Е. В. Шилова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2013. – № 3 (27). – С. 189–198.