ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК В ПЕРИОДИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА-ХАББАРДА В СЛУЧАЕ ТРЕХКРАТНОГО ВЫРОЖДЕНИЯ

В.Е. Шилов, Е.В. Шилова

Марийский государственный университет, Йошкар-Ола

В кристаллах, содержащих переходные и редкоземельные элементы, важную роль играют сильные электрон-электронные корреляции. Последние определяют характер основного состояния и примыкающих к нему спектров возбуждений. В работе предложен гамильтониан трехзонной периодической модели Андерсона-Хаббарда и должным образом симметризованный базис волновых функций. На симметричной части этого базиса, в соответствии с правилом Хунда и принципом электронейтральности Полинга, построены хаббардовские подзоны за счет трансляционного движения электронов по решетке и по одной из орбиталей. В отсутствие магнитного поля получен критерий перехода диэлектрик-металл.

In the crystals containing transitive and rare-earth elements, strong electron-electronic correlations play an important role. These latter ones determine the character of the basic condition and excitations spectra adjoined to it. Hamiltonian to three-band periodic model of Anderson-Habbard and properly symmetric basis of wave functions are presented. On a symmetric part of this basis, according to the Hund rule and a principle of electroneutrality of Polinger, habbard subzones due to transmitting movement of electrons on a lattice and on one of orbitals are constructed. In the absence of magnetic fields, the criterion of transition isolator-metal is received.