

С. С. Аплеснин, Н. И. Пискунова

СПИНОВЫЕ И ЗАРЯДОВЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ В ДИМЕРЕ С ВЫРОЖДЕННЫМИ ОРБИТАЛЯМИ И ЗАПОЛНЕНИЕМ ЭЛЕКТРОНОВ $n = 1,5$ *

Методом точной диагонализации вычислены спин-спиновые корреляционные функции по продольным и поперечным компонентам спина и корреляторы электронной плотности между орбиталями в модели Хаббарда – в димере с вырожденными орбиталями и числом заполнения $n = 1,5$ в двух предельных случаях: кулоновское отталкивание на узле сравнимо с шириной зоны ($U \approx W$); кулоновское отталкивание значительно меньше ширины зоны ($U < W$). Найдено неколлинеарное расположение спинов и температурные зависимости спиновых и зарядовых корреляций электронов.

Ключевые слова: модель Хаббарда, спиновые и электронные корреляторы.

Интенсивное развитие нанотехнологий позволяет создавать кластеры произвольной формы и различных размеров [1; 2]. Однако у кластеров, расположенных на границе раздела двух материалов с разным химическим потенциалом, возникает разность потенциалов, под действием которой могут изменяться их спиновые и электронные корреляции.

Особый интерес представляют ионы с орбитальным вырождением и электронной оболочкой, заполненной более чем наполовину. Здесь принципиальную роль играет учет кулоновского взаимодействия между электронами на разных орбиталях [3]. У полупроводников с сильными электронными корреляциями в некоторых случаях это может привести к определенному типу орбитального упорядочения [4]. Для слабовзаимодействующих электронов кулоновское взаимодействие будет способствовать перераспределению спектрального веса в плотности электронных состояний. При напылении пленок разного состава на границе интерфейса возникает контактная разность потенциалов, которая может изменить зарядовое и спиновое упорядочение вблизи поверхности. Если постоянные решетки двух пленок существенно отличаются, то возникающие искажения кристаллической решетки вызовут изменение локальной симметрии и гибридизацию волновых функций электронов, расположенных на разных орбиталях.

Необходимо исследовать влияние контактной разности потенциалов и межорбитальных интегралов перескока, возникающих в результате изменения симметрии кристаллического окружения в димере с вырожденными орбиталями и числом заполнения $n = 1,5$ в двух предельных случаях: когда кулоновское отталкивание на узле сравнимо с шириной зоны ($U \approx W$) и когда кулоновское взаимодействие значительно меньше этой ширины ($U < W$).

Рассмотрим двухузельный кластер с двумя орбиталями на узле и шестью электронами с числом заполнения $n = 1,5$. Соответствующий гамильтониан в модели Хаббарда [5] имеет вид

$$H = H_1 + H_3 + H_4 + H_5 + H_6 + H_7 + H_8,$$

где

$$H_1 = -\sum_{\alpha} (\varepsilon_{1,\alpha} + \delta) n_{1,\alpha} - \sum_{\alpha} (\varepsilon_{2,\alpha} - \delta) n_{2,\alpha}, \quad (1)$$

здесь α – номер орбитали, $\alpha = 1, 2$, $0 < n_{i,\alpha} = n_{i,\alpha,\uparrow} + n_{i,\alpha,\downarrow}$, $0 \leq n_{i,\alpha} \leq 2$;

$$H_3 = -\sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha=1} \sum_{\sigma} t_{i,j}^{1,1} (c_{i,\alpha,\sigma}^{\dagger} c_{j,\alpha,\sigma} + \text{HC}); \quad (2)$$

$$H_4 = -\sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha=2} \sum_{\sigma} t_{i,j}^{2,2} (c_{i,\alpha,\sigma}^{\dagger} c_{j,\alpha,\sigma} + \text{HC}); \quad (3)$$

$$H_5 = -\sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\sigma} t_{i,j}^{1,2} (c_{i,\alpha,\sigma}^{\dagger} c_{j,\beta,\sigma} + \text{HC}), \quad (4)$$

в (2)–(4) $i \neq j$, в (4) $\alpha \neq \beta$;

$$H_6 = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\alpha} \sum_{\sigma} U_{i,\sigma,-\sigma} n_{i,\alpha,\sigma} n_{i,\alpha,-\sigma}; \quad (5)$$

$$H_7 = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\sigma,\sigma'} V_{i,\sigma,\sigma'} n_{i,\alpha,\sigma} n_{i,\beta,\sigma'}; \quad (6)$$

$$H_8 = -\sum_i \sum_{\alpha \neq \beta} \sum_{\sigma,\sigma'} J_i^{\alpha,\beta} (c_{i,\alpha,\sigma}^{\dagger} c_{i,\alpha,\sigma'} c_{i,\beta,\sigma}^{\dagger} c_{i,\beta,\sigma'} + c_{i,\alpha,\sigma}^{\dagger} c_{i,\beta,\sigma} c_{i,\alpha,\sigma'}^{\dagger} c_{i,\beta,\sigma'} + \text{HC}). \quad (7)$$

В (1)–(7) приняты следующие обозначения: $\varepsilon \pm \delta$ – уровень энергии первого и второго ионов, $t_{\alpha\beta}$ – матричный элемент перескока между ближайшими узлами и орбиталями (α, β); U, V – кулоновское отталкивание электронов на узле и на одной орбитали и между орбиталями соответственно; J – хундовское обменное взаимодействие между электронами на разных орбиталях; $c_{i,\sigma}^{\dagger} (c_{i,\sigma})$ – операторы рождения (уничтожения) электронов со спином σ на узле i ; $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma}$.

С помощью метода точной диагонализации был вычислен спектр собственных значений, на основе которых определялась величина спин-спиновых корреляционных функций по продольным $\langle S_1^z S_2^z \rangle$, $S^z = (n_{i,\sigma} - n_{i,-\sigma})/2$ и поперечным $\langle S_1^+ S_2^- \rangle$, $S_i^+ = c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\downarrow}$, $S_i^- = c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\uparrow}$ компонентам спина, а также корреляторы электронной плотности между орбиталями $\langle n_{\alpha} n_{\beta} \rangle$ (рис. 1).

*Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 09-02-92001-ННС_а, РФФИ № 11-02-98018 р_сибирь_а; АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы» № 2.1.1/401.

Анализ полученных зависимостей спин-спиновых корреляций между узлами от величины кулоновского взаимодействия между орбиталями показывает следующее. При малых параметрах междуорбитального взаимодействия $V < V_c$ наблюдается антиферромагнитное расположение спинов. Для двухорбитальной модели с числом заполнения $n = 1,5$ максимально возможное значение спинового коррелятора $\langle S_1^z S_2^z \rangle = -0,125$. Зарядовые флуктуации между узлами, например $n_1 = 4$ и $n_2 = 1$, и орбиталями приводят к уменьшению спиновых корреляций электронов на соседних узлах. Уменьшение междуорбитальных электронных корреляций $\langle n_\alpha n_\beta \rangle$ при V_c связано с появлением ферромагнитных спиновых корреляций по поперечным компонентам спина.

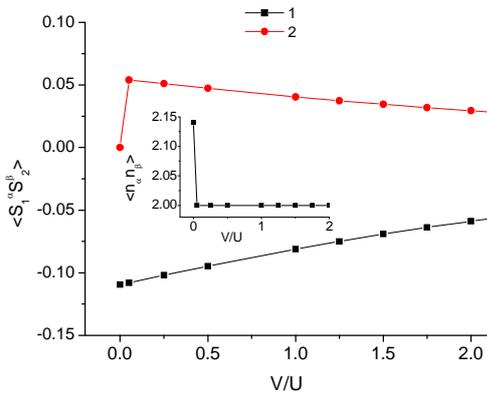


Рис. 1. Спин-спиновые корреляционные функции по продольным $\langle S_1^z S_2^z \rangle$ (1) и поперечным $\langle S_1^+ S_2^- \rangle$ (2) компонентам спина и корреляторы электронной плотности между орбиталями $\langle n_\alpha n_\beta \rangle$ от величины междуорбитального кулоновского взаимодействия для $U/t = 0,2, J/t = 0,5, t^{12} = 0, \epsilon_1 - \epsilon_2 = 0$ (вставка)

В объемных образцах или в больших нанокластерах при этих параметрах возможно образование скошенного типа антиферромагнитного порядка. Дальнейший рост междуорбитального кулоновского взаимодействия индуцирует динамическое орбитальное упорядочение, связанное с перераспределением элек-

тронов по орбиталям, например $n_\alpha = 1, n_\beta = 2$. В результате коррелятор электронной плотности $\langle n_\alpha n_\beta \rangle = 2$, а переход электрона с орбитали с $n_\beta = 2$ на орбиталь с $n_\alpha = 1$ возможен только при параллельной спиновой конфигурации электронов, что вызывает существенное уменьшение антиферромагнитных корреляций.

На границе раздела двух материалов разность потенциалов может достигать нескольких электрон-вольт, что может существенно изменить разность уровней энергии одноэлектронных состояний и вызвать изменение обменного взаимодействия. В частности, параметр обмена $J \sim t^2/(U + \epsilon_1 - \epsilon_2)$ [6] во втором порядке теории возмущения уменьшается как с ростом величины зарядовой щели, так и при увеличении кулоновского взаимодействия (рис. 2). При изменении этого параметра от $U/t = 0,2$ до $U/t = 1$ наблюдается плавное уменьшение спиновых корреляций как от зарядовой щели, так и от величины кулоновского взаимодействия. Корреляционная функция электронной плотности не меняется и остается постоянной: $\langle n_\alpha n_\beta \rangle = 2$. Температурные флуктуации вызывают плавное уменьшение спиновых корреляций без изменения знака.

Влияние несогласованности параметров решетки, кристаллических структур, приводящее к упругим искажениям, моделируется дополнительным интегралом перескока между орбиталями (рис. 3). Следует отметить, что при некотором критическом параметре t_{12} наблюдается резкий рост спиновых и зарядовых корреляций.

Таким образом, межорбитальное кулоновское взаимодействие в димере с вырожденными орбиталями для числа заполнения $n = 1,5$ приводит к неколлинеарному расположению спинов. Авторами определена зависимость спин-спиновых корреляций между ближайшими узлами от величины зарядовой щели и температуры для $U < t$, а также найдено изменение спиновых и зарядовых корреляций электронов на разных орбиталях от величины межорбитального перескока электронов при учете кулоновского взаимодействия между электронами.

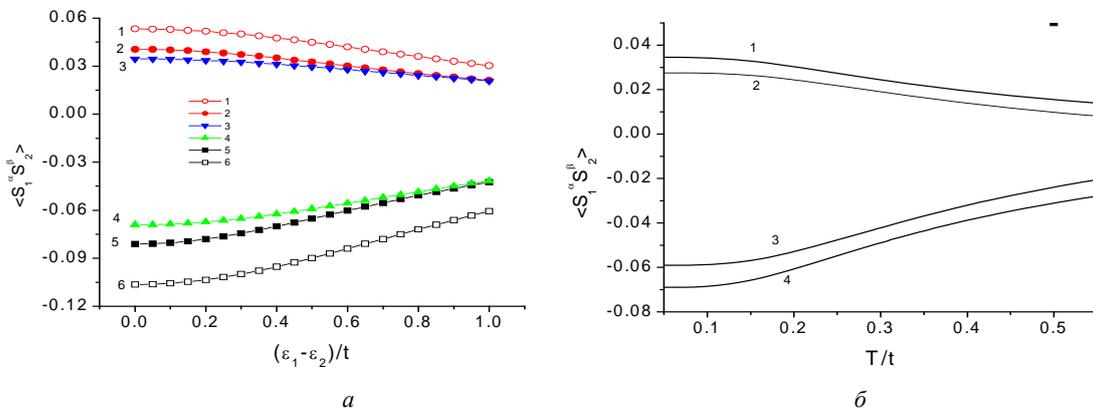


Рис. 2. Спин-спиновые корреляционные функции по продольным $\langle S_1^z S_2^z \rangle$ (3, 4) и по поперечным $\langle S_1^+ S_2^- \rangle$ (1, 2) компонентам спина от величины зарядовой щели для $U/t = 0,2, V/U = 0, J/t = 0,5$ (1, 6), $J/t = 1$ (2, 5), $J/t = 1, V/U = 0,3$ (3, 4) (a) и от температуры (б) для $U/t = 0,2, J/t = 0,5, t^{12} = 0, \epsilon_1 - \epsilon_2 = 0$ (1, 4), $(\epsilon_1 - \epsilon_2)/t = 0,5$ (2, 3)

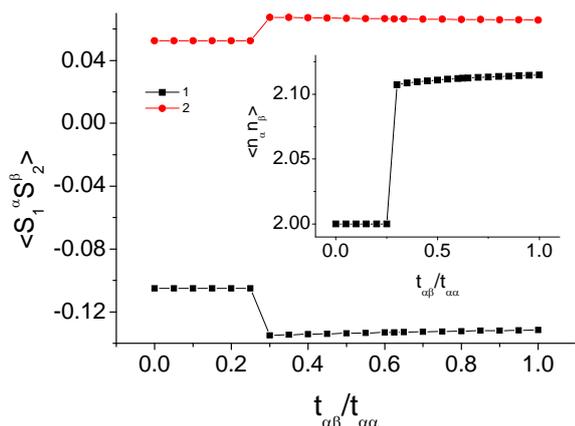


Рис. 3. Спин-спиновые корреляционные функции по продольным $\langle S_{\alpha}^z S_{\beta}^z \rangle$ (1) и по поперечным $\langle S_{\alpha}^+ S_{\beta}^- \rangle$ (2) компонентам спина и корреляторы электронной плотности между орбиталями $\langle n_{\alpha} n_{\beta} \rangle$ от величины интеграла перескока между разными орбиталями для $U/t = 0,2, J/t = 0,5, \epsilon_1 - \epsilon_2 = 0$ (вставка)

Библиографические ссылки

1. Poole C. P., Owens F. J. Introduction to Nanotechnology. N. Y. : Wiley, 2003.
2. Суздаев И. П. Нанотехнология: Физикохимия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М. : Либроком, 2009.
3. Кугель К. И., Хомский Д. И. Эффект Яна–Теллера и магнетизм: соединения переходных металлов // Успехи физ. наук. 1982. Т. 136. С. 621–664.
4. Computation of Correlation-Induced Atomic Displacements and Structural Transformations in Paramagnetic $KCuF_3$ and $LaMnO_3$ / I. Leonov, D. Korotin, N. Bingeli, et al. // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 81. P. 075109.
5. The One-Dimensional Hubbard Model / F. H. L. Essler, H. Frahm, F. Gohmann, et al. N. Y. : Cambridge Univ. Press, 2005.
6. Изюмов Ю. А., Скрыбин Ю. Н. Базовые модели в квантовой теории магнетизма. Екатеринбург : Изд-во Урал. отд-ния Рос. акад. наук, 2002.

S. S. Aplesnin, N. I. Piskunova

SPIN AND CHARGE CORRELATIONS OF THE ELECTRONS IN THE DIMER WITH DEGENERATE ORBITALS AND ELECTRON OCCUPATION $n = 1,5$

The spin-spin correlation functions in the dilatational and transverse components of the spin, the correlators of density of electrons, located on different orbitals in the Hubbard model in two limiting cases are calculated by the method of exact diagonalization; the Coulomb repulsion on the node point is comparable to the width of the band ($U \approx W$) and significantly lower ($U < W$) as compared with degenerate orbitals and the occupation number $n = 1,5$ are calculated by the method of exact diagonalization. A non-collinear spin arrangement and the temperature dependence of the spin and charge correlations of electrons are revealed.

Keywords: Hubbard model, spin and electron correlators.

© Аплеснин С. С., Пискунова Н. И., 2012

УДК 681.142.1

Е. Н. Булакина, Д. О. Почуфаров, П. В. Лебедкин, О. Н. Булакина

ЭКСПЕРТНАЯ СИСТЕМА ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕДУР ДЛЯ НЕПРЕРЫВНЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ*

Разработана экспертная система восстановительных процедур для непрерывных технологических процессов, которая позволит значительно снизить потери при технологических простоях.

Ключевые слова: восстановительные процедуры, экспертная система, аварийное восстановление, технологический процесс, непрерывность.

Как показывает практика, при возникновении чрезвычайных ситуаций потери от простоев непрерывных технологических процессов (ТП), обеспечивающих функционирование предприятия, могут в несколько раз превышать стоимость их отказа [1].

Для минимизации времени простоев авторами создана экспертная система восстановительных процедур технологических процессов.

Внедрение гибкой системы восстановительных процедур для технологических процессов предприятий в комплексе с основными требованиями к организации обеспечения непрерывности технологических процессов и их восстановления после сбоев, рекомендованной стандартами ISO 17799:2005, ISO 9000, стандартом Банка России СТО БР ИББС-1.0 и др., позволит значительно снизить влияние последствий чрезвычайных ситуаций и минимизировать финансовые потери.

*Проект участвовал в Первом конкурсе научных работ «Новое поколение», проводимом журналом «Директор информационной службы» (URL: www.CIO.RU), поддержан Национальным открытым университетом «ИНТУИТ» в 2011 г. и представлен вниманию профессионального сообщества URL: www.GLOBALCIO.ru).