

ილიას სახელმწიფო უნივერსიტეტი

**ერთ-განზომილებიანი ნახევრად შევსებული იონური
ჰაბარდის მოდელის ძირითადი მდგომარეობის ფაზური
დიაგრამა სპინზე დამოკიდებული გადახტომების
შემთხვევაში**

თეზისის ავტორი: ლუკა ჯიბუტი

6 ივლისი 2017 წ.

ხელმძღვანელი: პროფესორი გიორგი ჯაფარიძე

სამაგისტრო პროგრამა: ახალი მასალები ნანოელექტრონიკასა და ნანოინჟინერიისთვის

ელექტრონული ფოსტა: luka.jibuti.1@iliauni.edu.ge

ანოტაცია

ნაშრომის ფარგლებში შესწავლილია ერთგანზომილებიანი ნახევრადშევსებული იონური ჰაბარდის მოდელის ძირითადი მდგომარეობის ფაზური დიაგრამა სპინ-ასიმეტრიულ ($t_{\uparrow} \neq t_{\downarrow}$) გადახტომების შემთხვევაში ჰარტრი-ფოკის მიახლოების გამოყენებით. ვაჩვენებთ, რომ $U \geq 0$ სისტემის ძირითადი მდგომარეობა ხასიათდება შორი წესრიგის მქონე მუხტის სიმკვრივის ტალღისა (CDW) და სპინის სიმკვრივის ტალღის (SDW) თანაარსებობით. მუხტის სიმკვრივის ტალღის ამპლიტუდა აღწევს თავის მაქსიმალურ მნიშვნელობას, როცა ურთიერთქმედება ნაწილაკებს შორის ნულის ტოლია ($U = 0$), უწყვეტად მცირდება ურთიერთქმედების გაზრდით და უახლივდება ნულოვან მნიშვნელობას როცა $U \rightarrow \infty$. სპინის სიმკვრივის ტალღის ამპლიტუდა კი მინიმალურია $U = 0$ შემთხვევაში, იზრდება ურთიერთქმედების ამპლიტუდის გაზრდით და აღწევს გაჯერებულ მნიშვნელობას $U \rightarrow \infty$ შემთხვევაში. ფაზური დიაგრამა ხასიათდება ერთი $U = U_{crit}$ კრიტიკული მნიშვნელობით, როცა მეტად მოძრავი (მსუბუქი) ფერმიონების ადგზნების სპექტრი ხდება უღრიჭო. კრიტიკული წერტილისგან მოშორებით სისტემა ხასიათდება ზონური იზოლატორული ყოფაქცევით სპინზე დამოკიდებული ადგზნების ღრიჭოთი. კრიტიკულ წერტილში სისტემა არის ნახევრად-მეტალი და ავლენს სპინის ფილტრაციის ეფექტს. მუხტის გადამტანის სპინზე დამოკიდებული მუხტის პინინგის (დაბმის) ეფექტი ძლიერდება ურთიერთქმედების ამპლიტუდის და $\delta t = t_{\uparrow} - t_{\downarrow}$ კოეფიციენტის გაზრდით. ეს ეფექტი ყველაზე კარგად წარმოჩინდება იონურ ფალიკოვ-კიმბელის ჯაჭვში სადაც $t_{\uparrow} = 1$, ხოლო $t_{\downarrow} = 0$. ასეთ სისტემაში ყველა უძრავი ნაწილაკები არიან ჩაჭერილი დაბალი ენერგიის იონურ ქვემესერში ნებისმიერი $U > 0$ მნიშვნელობისთვის.

სამაგისტრო ნაშრომში მიღებული შედეგები შესულია როგორც შემადგენელი ნაწილი და გამოქვეყნებულია, შემდეგ ორ პუბლიკაციაში: Luka Jibuti, M. Sekania and G.I. Japaridze, "Ground state phase diagram of the half-filled ionic chain with spin-asymmetric hopping" და Nano Studies 6, 41-50, (2016). M. Sekania, D. Baeriswyl, L. Jibuti, and G.I. Japaridze, "The Mass-Imbalanced Ionic Hubbard Chain" (ArXiv/1704.07459), რომელიც მიღებულია დასაბეჭდად Phys. Rev. B-ში.

შინაარსი

1 შესავალი	1
2 ძლიერი ბმის მოდელი	3
3 ჰამილტონიანი საშუალო ველის მიახლოებაში	5
3.1 ჰამილტონიანი	5
3.2 ჰამილტონიანის დიაგონალიზაცია	7
4 თვითშეთანხმების განტოლებები	9
5 თვითშეთანხმების განტოლებების ამოხსნის მეთოდი	10
6 არაურთიერთქმედი ფერმიონები: $U = 0$	12
6.1 ძლიერი იონური პოტენციალის შემთხვევა: $\Delta \gg t_\sigma$	13
6.2 სუსტი იონური პოტენციალის შემთხვევა: $\Delta \ll t_\sigma$	13
6.3 იონური ფალიკოვ-კიმბელის ჯაჭვი: $t_\uparrow \neq 0$ და $t_\downarrow = 0$	14
7 ურთიერთქმედი ფერმიონები: $U \neq 0$	15
7.1 იონური ჰაბარდის ჯაჭვი სპინ-სიმეტრიულ შემთხვევაში: $t_\uparrow = t_\downarrow = 1$ და $\Delta = 1$	17
7.2 იონური ჰაბარდის ჯაჭვი სპინ-ასიმეტრიულ შემთხვევაში: $t_\uparrow \neq t_\downarrow$ და $\Delta = 1$	19
7.3 იონური ფალიკოვ-კიმბელის ჯაჭვი: $t_\uparrow \neq 0$ და $t_\downarrow = 0$, $U \neq 0$	21
8 ნაშრომის შეჯამება	23