

13. Kukushkin I V et al. *Europhys. Lett.* **22** 287 (1993)
14. Дорожкин С И и др. *Письма в ЖЭТФ* **58** 893 (1993) [*JETP Lett.* **58** 834 (1993)]
15. Chakraborty T *Surf. Sci.* **229** 16 (1990)
16. Chakraborty T, Pietiläinen P *Phys. Rev. Lett.* **76** 4018 (1996)
17. Haug R J et al. *Phys. Rev. B* **36** 4528 (1987)
18. Clark R G et al. *Phys. Rev. Lett.* **62** 1536 (1989)
19. Eisenstein J P et al. *Phys. Rev. Lett.* **62** 1540 (1989); Eisenstein J P et al. *Phys. Rev. B* **41** 7910 (1990)
20. Wu X G, Dev G, Jane J K *Phys. Rev. Lett.* **71** 153 (1993)
21. Hampton J et al. *Solid State Commun.* **94** 559 (1995)

Несингулярные вихри-скирмионы в двумерной электронной системе

С.В. Иорданский

Задача о состояниях термодинамической системы двумерных взаимодействующих электронов в сильном магнитном поле до сих пор не решена полностью. Имеются различные качественные, а также феноменологические результаты и накоплено большое количество различных экспериментальных данных.

В последнее время большой интерес вызывает описание состояний вблизи однократного заполнения уровня Ландау. Однократно заполненный уровень Ландау при большом магнитном поле можно рассматривать в приближении Хартри–Фока с детерминантом Слэттера, соответствующим полному заполнению этого уровня. При этом отрицательная обменная энергия вызывает ферромагнитное упорядочение спинов.

В ферромагнетике имеется возможность образования особых макроскопических возбуждений, соответствующих медленному вращению спина электронов в пространстве, так что возникает топологически нетривиальное отображение двумерной плоскости с ферромагнитным упорядочением на больших расстояниях на сферу направлений среднего спина [1, 2]. Подобные же состояния были предложены для двумерного электронного газа в сильном магнитном поле [3, 4].

Оставляя в стороне феноменологические и численные результаты, мы сосредоточимся на результатах, получаемых путем разложения по градиентам матрицы поворота [5–7]. Эти работы используют приближение волновых функций, спроектированных на один уровень Ландау.

Отметим основные трудности такого подхода. Авторы работ [5–7] используют матрицу поворота электронных спиноров, зависящую от двух углов Эйлера. Однако в этом случае один из углов Эйлера должен иметь вид

$$\alpha = m\varphi + \tilde{\alpha}(\varphi), \quad (1)$$

где $\tilde{\alpha}$ — регулярная периодическая функция полярного угла φ в некоторой системе координат, причем m совпадает со степенью отображения. Однако в этом случае матрица поворота обязательно имеет точечную особенность и может быть, вообще говоря, неоднозначной. Разложение Фурье для матрицы поворота и ее производных также будет иметь особенность, которая, однако, не учитывается в расчетах, выполняемых в

предположении малости всех производных. Неособая, гладкая матрица поворота, зависящая от двух углов Эйлера, имеет степень отображения равную нулю и не может описывать скирмиона. Переход в [6, 7] от матрицы поворота $U(\mathbf{r})$ к матрице $\tilde{U}$, действующий в пространстве функций одного уровня Ландау, также вызывает серьезные затруднения. В частности, он ликвидирует свойство унитарности $U^+(\mathbf{r})U(\mathbf{r}) = 1$ для спроектированной матрицы $\tilde{U}(\mathbf{r})$.

Все эти затруднения вызывают желание найти путь решения, непосредственно использующий только гладкие и медленно меняющиеся в пространстве матрицы поворота, свободный от указанных недостатков и в то же время позволяющий вычислить энергию и другие физические величины в главном (первом и нулевом) порядке по внешнему магнитному полю. С этой целью мы будем рассматривать полное дифференциальное уравнение Шрёдингера, не ограничиваясь проекцией на один выделенный уровень Ландау.

Рассмотрим полную матрицу поворота, параметризованную тремя углами Эйлера:

$$U(\mathbf{r}) = U_z(\gamma(\mathbf{r}))U_y(\beta(\mathbf{r}))U_z(\alpha(\mathbf{r})),$$

$$U_z(\alpha) = \cos \frac{\alpha}{2} + i \sin \frac{\alpha}{2} \sigma_z,$$

$$U_y(\beta) = \cos \frac{\beta}{2} + i \sin \frac{\beta}{2} \sigma_y,$$

где $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ — матрицы Паули. На больших расстояниях от кора при конечной величине g -фактора электронов средний спин должен быть направлен по магнитному полю. Поэтому угол β , который мы отсчитываем от направления магнитного поля, при $r \rightarrow \infty$ должен быстро (можно показать, что экспоненциально) стремиться к нулю. Предполагается, что матрица $U(\mathbf{r})$ не имеет сингулярностей при любых $\mathbf{r}$, что соответствует отсутствию особенностей у матриц

$$A_k = iU^+ \frac{\partial U}{\partial x_k} = \Omega_k^l(\mathbf{r})\sigma_l.$$

Выражения для Ω_k^l легко получить непосредственным дифференцированием $U(\mathbf{r})$:

$$\Omega_k^z = \frac{1}{2}(\partial_k \alpha + \cos \beta \partial_k \gamma),$$

$$\Omega_k^x = \frac{1}{2}(\sin \beta \cos \alpha \partial_k \gamma - \sin \alpha \partial_k \beta),$$

$$\Omega_k^y = \frac{1}{2}(\cos \alpha \partial_k \beta + \sin \beta \sin \alpha \partial_k \gamma).$$

Единичный вектор направления среднего спина $\mathbf{n} = (\cos \beta, \sin \beta \cos \alpha, \sin \beta \sin \alpha)$ получается из z -направления путем поворота на угол α вокруг оси z и затем на угол β вокруг оси y . В случае ненулевой степени отображения угол $\alpha(\mathbf{r})$ имеет особенность в пространстве и величины Ω^l будут иметь особенность, неустранимую при двух углах Эйлера ($\alpha, \gamma = 0, \beta$). Однако эта особенность устраняется и $\Omega_k^l(\mathbf{r})$ несингулярны, если точечная особенность $\gamma(\mathbf{r})$ совпадает с особенностью $\alpha(\mathbf{r})$ и находится в точке, где $\cos \beta = -1$. Таким образом, в матрице U должны быть представлены все три угла Эйлера, и угол α имеет вихревую особенность с целым квантованием из-за однозначности матрицы поворота. Поэтому правильнее

говорить о несингулярных вихрях, кор которых задается скирмионом по аналогии с ^3He [8], причем в отличие от ^3He , вихревые числа являются любыми целыми, а не только четными. Интеграл

$$\frac{1}{2\pi} \int \text{rot } \Omega^z d^2r = Q$$

является топологическим инвариантом и выражается непосредственно через изменение фазы α при обходе контура большого радиуса. Гладкая матрица поворота $U(\mathbf{r})$ позволяет совершить унитарное преобразование электронных спиноров $\psi = U(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r})$ к новым спинорам $\chi(\mathbf{r})$, использование которых столь же допустимо, как и исходных спиноров χ .

Хотя это преобразование может быть проведено для спиноров — операторов вторичного квантования в общем случае — мы рассмотрим для простоты преобразование простейшего хартри-фоковского уравнения с локальным обменным взаимодействием:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} (-i\nabla - \mathbf{A}_0)^2 - \gamma \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \psi,$$

где γ — обменная константа, а $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ медленно меняется в пространстве. Мы используем систему единиц, где

$$\hbar = B_0 = l_B^2 = \frac{c\hbar}{eB} = 1.$$

Дифференцируя формулу преобразования и умножая на U^+ , получаем

$$-i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} (-i\nabla - \mathbf{A}_0)^2 \chi - \frac{i}{2m} U^+ \nabla U (-i\nabla - \mathbf{A}_0) \chi - \frac{1}{2m} U^+ \nabla^2 U \chi - \gamma U^+ \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} U \chi.$$

Добавляя к этому выражению величину

$$-\frac{1}{m} (U^+ (\nabla U) U^+ \nabla U + (\nabla U^+) \nabla U) = 0,$$

равную нулю в силу условия унитарности ($U^+ U = 1$, $\nabla U^+ U + U^+ \nabla U = 0$), и выбирая матрицу поворота так, чтобы $U^+ \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} U = \sigma_z$, уравнение для χ можно записать в виде

$$i \frac{\partial \chi}{\partial t} = \frac{1}{2m} (-i\nabla - \mathbf{A}_0 + \Omega'_l \sigma_l)^2 \chi - \gamma \sigma_z \chi + \Omega'_l \sigma_l \chi. \quad (2)$$

Это уравнение является преобразованием исходного и полностью ему эквивалентно. Однако в отличие от исходного уравнения его главная часть (при $\Omega'_l = 0$) соответствует уравнению Шрёдингера в однородном магнитном поле с однородным обменным членом. К полученному выражению можно добавить малые члены, содержащие зеемановскую энергию и кулоновское взаимодействие, которые пока малосущественны для нас.

Мы видим, что в уравнении для χ появляется зависящий от спина вектор-потенциал и дополнительная потенциальная энергия, выражаемые через величины Ω'_k , малые по предположению, что позволяет использовать соответствующую теорию возмущений. При этом глав-

ная невозмущенная часть этого уравнения имеет известную функцию Грина

$$G_0(t - t', \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{dp}{2\pi} g_s(\omega) \exp[i\omega(t' - t)] \times \exp[ip(y - y')] \Phi_{\text{sp}}(x) \Phi_{\text{sp}}(x'), \quad (3)$$

где $\Phi_{\text{sp}}(x)$ — осцилляторные функции в магнитном поле в выбранной калибровке Ландау. Матрицы $g_s(\omega)$ соответствуют полному заполнению нулевого уровня Ландау (мы ограничимся этим случаем) для состояний со спином вверх

$$g_0 = \frac{1 + \sigma_z}{2} \frac{1}{\omega + \gamma - i\delta} + \frac{1 - \sigma_z}{2} \frac{1}{\omega - \gamma + i\delta}, \quad \delta \rightarrow +0, \quad (4)$$

что же касается состояний с $s > 0$, то они все являются пустыми:

$$g_s = \frac{1}{\omega - s\omega_c + \gamma\sigma_z + i\delta}. \quad (5)$$

В этих формулах мы ввели химический потенциал $\mu = \hbar\omega_c/2$, соответствующий заполнению низших состояний. Вычисление различных физических величин по теории возмущений стандартно и использует диаграммное разложение полной функции Грина G и формулу $S = i \text{Tr} \ln G$ для действия. Детали вычислений опубликованы в [9–11]. Результат для энергии и электронной плотности в низшем порядке теории возмущений имеет простой физический смысл: существенна только величина $\text{rot } \Omega^z$, определяющая добавку к внешнему магнитному полю: $B_{\text{eff}} = B_0 - \text{rot } \Omega^z(\mathbf{r})$. Остальные компоненты Ω^x , Ω^y входят в более высоком порядке. Электронная плотность ρ совпадает с локальной плотностью состояний

$$\rho = \frac{1}{2\pi} B_{\text{eff}}$$

в неоднородном эффективном магнитном поле, поэтому все состояния на нижнем уровне Ландау заполнены. Вследствие этого полное изменение числа электронов из-за образования скирмиона составляет $\delta N = -Q$. При этом полная дополнительная термодинамическая энергия всех электронов в главном порядке без учета изменения потенциальной энергии имеет вид

$$\delta \langle H - \mu N \rangle = -\frac{\hbar\omega_c}{2} Q.$$

Это обстоятельство показывает необходимость учета поправок к кинетической энергии и решения соответствующих дифференциальных уравнений, а не правомерность замены ее на константу, как это делается в приближении функций, спроектированных на нулевой уровень Ландау. При этом нулевой уровень Ландау действительно заполнен, но в переменном по пространству эффективном магнитном поле. Отметим, что в отсутствие скирмиона при $Q = 0$ суммарной поправки к кинетической энергии нет. Поправки к плотности позволяют найти соответствующие члены в потенциальной и обменной энергии [11], так что полное изменение термодинамической энергии при образовании вихря-скир-

миона имеет вид

$$F = \delta \langle H - \mu N \rangle = -\frac{\hbar \omega_c}{2} Q + \frac{3e^2}{2l_B} \sqrt{\frac{\pi}{2}} Q + \frac{e^2}{2} \int \frac{\text{rot } \Omega_z(\mathbf{r}) \cdot \text{rot } \Omega_z(\mathbf{r}')}{(2\pi)^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^2 r d^2 r' + \int \left[\frac{J}{2} \left(\frac{\partial n_i}{\partial r_k} \right)^2 + g \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} \frac{1}{2\pi(l_B)^2} \right] d^2 r. \quad (6)$$

В это выражение включено изменение обменной энергии из-за изменения эффективного магнитного поля, кулоновская энергия, энергия, связанная с неоднородностью направления спина, и зеемановская энергия (последний член), где

$$J = \frac{1}{16\sqrt{2}\pi} \frac{e^2}{l_B}.$$

Полученная энергия соответствует хартри-фоковской энергии электронов в поле неоднородной матрицы поворота $U(\mathbf{r})$. К этому выражению имеются поправки, связанные с нулевыми колебаниями самой матрицы поворота, вычисление которых требует рассмотрения коллективных колебаний. Мы ограничимся рассмотрением наиболее существенной поправки, связанной с движением заряженного вихря-скирмиона как целого во внешнем магнитном поле.

Для ее вычисления необходимо найти эффективную массу скирмиона. Если скирмион движется как целое, матрица вращения является функцией $U(\mathbf{r} - \mathbf{X})$, где $\mathbf{X}(t)$ — положение центра скирмиона. Это приводит к дополнительному малому члену $\Omega'_l \sigma_l = -\dot{\mathbf{X}} \cdot \Omega'_l \sigma_l = H_1$ в хартри-фоковских уравнениях (2). В изотропном случае соответствующий линейный по $\dot{\mathbf{X}}$ член в полном действии для скирмиона обращается в нуль и разложение действия начинается с квадратичного члена теории возмущений

$$\delta S = \frac{i}{2} \text{Tr} (H_1 G_0 H_1 G_0).$$

В низшем порядке по производным это выражение может быть записано с помощью (3) в виде

$$\delta S = \frac{i}{2} \text{Tr} \int (\Omega'_l \sigma_l \dot{\mathbf{X}}) g_0(\omega) (\Omega''_{l'} \sigma_{l'} \dot{\mathbf{X}}) g_0(\omega) \exp(i\omega\delta) \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d^2 r}{2\pi} dt.$$

Вклады дают члены, у которых полюса расположены по разные стороны от действительной оси ω , вычисление Тг и учет изотропии дают

$$\delta S = \int \frac{(\dot{\mathbf{X}})^2}{2\gamma} \sum_{l \neq z} \frac{(\Omega'_l)^2}{2} \frac{d^2 r}{2\pi} dt.$$

Это выражение может быть переписано с помощью формул (1) в виде

$$\delta S = \int dt \frac{(\dot{\mathbf{X}})^2}{8\gamma} \frac{1}{4\pi} \int \left(\frac{\partial n_i}{\partial r_k} \right)^2 d^2 r.$$

Известно, что низшее по энергии состояние скирмиона соответствует согласно [2] величине интеграла

$$\frac{1}{2} \int \left(\frac{\partial n_i}{\partial r_k} \right)^2 d^2 r = 4\pi |Q|,$$

что дает

$$\delta S = \int \frac{m \dot{\mathbf{X}}^2}{2} dt, \quad m = \frac{|Q|}{2\gamma}.$$

Кроме члена кинетической энергии в функции Лагранжа имеется член с вектор-потенциалом внешнего поля $(e/c) Q \dot{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{A}_0$, который можно получить также дифференцированием изменения фазы волновой функции при переносе заряда Q . Таким образом, функция Лагранжа для движения скирмиона как целого имеет вид

$$L = \frac{m \dot{\mathbf{X}}^2}{2} + \frac{e}{c} Q \dot{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{A}_0.$$

Можно ввести обобщенный импульс $P_i = \partial L / \partial \dot{X}_i$ и проквантовать задачу, считая выполненными стандартные коммутационные соотношения $[P_i, X_i] = i\hbar$. Это приводит к циклотронной частоте для скирмиона как целого $\hbar \omega_s = 2\gamma$ и минимальной энергии $E_s = \gamma$. Таким образом, экспериментально должен наблюдаться циклотронный резонанс для скирмиона с частотой 2γ . Величина γ определяется как обменная энергия на один электрон, в случае полностью заполненного уровня Ландау

$$\gamma = \frac{e^2}{l_B} \sqrt{2\pi}.$$

Энергию γ нужно добавить к полученному ранее выражению (5) для полной энергии.

Кроме этого представляет интерес нахождение члена с хопфовским инвариантом в действии, который, согласно современным представлениям, определяет статистику скирмионов [11]. Для этого необходимо найти члены, содержащие одну временную Ω'_l и две пространственные Ω^l компоненты в разложении действия по степеням Ω^l . Вычисления до третьего порядка включительно довольно громоздки и требуют рассмотрения большого числа диаграмм, причем диаграммы второго порядка также дают вклад, так как необходимо учитывать запаздывание во времени и нелокальность в пространстве [9, 10]. Мы приведем только окончательный результат, соответствующий "фермионному" характеру вихрей-скирмионов:

$$S_H = \pi H, \quad H = \frac{1}{2\pi^2} \int e^{lim} \Omega_l \Omega_j \times \Omega_l d^2 r dt, \quad (7)$$

где e^{lim} — единичный антисимметричный тензор третьего ранга. Целочисленный хопфовский инвариант H выражен через величины Ω^l [12]. Этот результат не совпадает с результатом, полученным в рамках метода спроектированных на нулевой уровень Ландау функций [7], представляющим собой сумму некоторых полных пространственных производных. В то же время формула (7) имеет стандартный вид и совпадает с предложенной в дискуссионной заметке [13].

В заключение отметим еще раз, что решение дифференциальных уравнений хартри-фоковского приближения существенно и определяет отклонение результатов от описания с помощью проектирования на один уровень Ландау, когда дифференциальная форма кинетической энергии в уравнении Шрёдингера заменяется на постоянную энергию. Особенно это важно при вычислении термодинамической энергии вихря-скирмиона, где появляется добавка $(-\hbar \omega_c / 2) Q$, которая в достаточно сильном магнитном поле может привести к спонтанному появлению вихрей и перестройке основного состояния.

Исследование выполнено при частичной поддержке грантом RPL-273 US CRDF for Independent States of FSU. Настоящая работа также поддержана грантами INTAS 95-I/RU-675 и Российского фонда фундаментальных исследований 95-02-05883.

Список литературы

1. Skyrme T U R *Proc. R. Soc. A* **247** 260 (1958)
2. Белавин А А, Поляков А М *Письма в ЖЭТФ* **22** 245 (1975)
3. Sondhi S et al. *Phys. Rev. B* **47** 16418 (1993)
4. Fertig H et al. *Phys. Rev. B* **50** 11018 (1994)
5. Moon K et al. *Phys. Rev. B* **51** 5138 (1995)
6. Bychkov Yu, Maniv T, Vagner I *Phys. Rev. B* **53** 10148 (1995)
7. Apel W, Bychkov Yu *Phys. Rev. Lett.* **78** 2188 (1997)
8. Иорданский С, Плясунов С *Письма в ЖЭТФ* **65** 248 (1997)
9. Иорданский С *Письма в ЖЭТФ* **66** 178 (1997)
10. Иорданский С, Плясунов С *ЖЭТФ* **112** 1899 (1997); cond-mat/9706236
11. Wilczek F, Zee A *Phys. Rev. Lett.* **51** 2250 (1983)
12. Volovik G, Yakovenko V J. *Phys. Cond. Matter* **1** 5263 (1989)
13. Volovik G, Yakovenko V, cond-mat/973228

Микроскопический вывод эффективного лагранжиана для скирмионов в двумерном газе взаимодействующих электронов при малом g -факторе

В. Апелъ, Ю.А. Бычков

1. Введение

Электронные системы, ограниченные в двух измерениях и находящиеся в сильных магнитных полях, продолжают интенсивно исследоваться как экспериментально, так и теоретически [1]. Из-за магнитного поля электронные энергии отдельных частиц образуют вырожденные уровни Ландау, и электрон-электронные взаимодействия являются критическими для физических свойств. В последнее время большое внимание привлекает спиновая степень свободы. В течение долгого времени было принято считать, что основными возбуждениями являются возбуждения типа частица–дырка (спин–экситон), когда циклотронная энергия намного больше, чем характерная кулоновская энергия [2–5]. Однако последние эксперименты, проведенные при факторе заполнения близком или равном единице, когда полностью заполнен один из спиново-расщепленных подуровней Ландау, поменяли это представление. Энергия активации сопротивления, измеренного под давлением [6], спиновая поляризация, измеренная с помощью спектроскопии магнитного поглощения [7], транспортные эксперименты в наклонных магнитных полях [8], и измерения сдвига Найта с помощью оптически накачиваемого ЯМР [9] служат доказательством того, что существует новый тип основных возбуждений — скирмионы. Теоретически возбуждения такого рода были изучены ранее при исследовании двумерных изотропных ферромагнетиков [10]. Только недавно было показано, что в системе взаимодействующих электронов в магнитном поле также существуют скирмионы при условии, что g -фактор меньше некоторой критической величины [11]. Энергия необходимая для создания пары скирмион–анти-

скирмион при $g \rightarrow 0$ равна только половине энергии создания синглетного спин-экситона с очень большим импульсом. Заряд скирмиона равен заряду электрона e . Число перевернутых электронных спинов, содержащихся в скирмионе, было вычислено в приближении Хартри–Фока (ХФ) [12]; это число зависит от g -фактора и больше единицы. Совсем недавно квантовая природа скирмиона — его спин — была рассмотрена с помощью микроскопической теории [13] путем обобщения метода, использованного ранее [14] для вывода гамильтоновой части эффективного лагранжиана.

Данная статья организована следующим образом. В разделе 2 мы введем модель и свои обозначения, а также приведем основные результаты вывода эффективного лагранжиана, который уже был частично описан в предыдущей работе [14, 13]. Разделы 3 и 4 посвящены краткому обсуждению уравнений движения и тензора энергии-импульса. В разделе 5 мы получим критерий применимости ХФ-приближения.

2. Эффективный лагранжиан

Исследуем взаимодействующие 2D-электроны, движущиеся в сильном магнитном поле. Орбитальные состояния этих электронов ограничены самым нижним уровнем Ландау, мы будем работать в калибровке Ландау. Пусть $\hat{a}_p^\dagger$ ($\hat{b}_p^\dagger$) — оператор рождения состояния отдельной частицы с квантовым числом p и спиновой проекцией, параллельной (антипараллельной) магнитному полю. Тогда гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, p_1, p_2} \tilde{V}(\mathbf{q}) \exp[i\mathbf{q}_x(p_2' - p_1)] \times \\ \times [\hat{a}_{p_1}^\dagger \hat{a}_{p_2}^\dagger \hat{a}_{p_2'} \hat{a}_{p_1'} + (\hat{a} \rightarrow \hat{b}) + 2\hat{a}_{p_1}^\dagger \hat{b}_{p_2}^\dagger \hat{b}_{p_2'} \hat{a}_{p_1'}]. \quad (1)$$

Здесь $\tilde{V}(\mathbf{q}) = \exp(-q^2/2)V(\mathbf{q})$, где $V(\mathbf{q})$ — взаимодействие электронов; $p_{1,2}' = p_{1,2} \mp q_y$. Магнитная длина l_H используется как единица измерения длины, величина $\hbar$ полагается равной 1. К (1) можно легко добавить член, связанный с эффектом Зеемана, здесь мы его опустили для краткости.

2.1. Приближение Хартри–Фока

В приближении Хартри–Фока основное состояние определяется детерминантом Слэттера для одночастичных состояний $|\Psi_{\text{HF}}\rangle = P_p \hat{A}_p^\dagger |0\rangle$. Операторы рождения состояний в нижней (верхней) зоне ХФ $\hat{A}_p^\dagger$ ($\hat{B}_p^\dagger$) определяются через операторы рождения начальных электронных состояний

$$\hat{A}_p = \sum_{p_1} (U_{p,p_1} \hat{a}_{p_1} + V_{p,p_1} \hat{b}_{p_1}), \\ \hat{B}_p = \sum_{p_1} (W_{p,p_1} \hat{a}_{p_1} + X_{p,p_1} \hat{b}_{p_1}), \quad (2)$$

где матрицы

$$\hat{U} = \exp(i\frac{\hat{\psi}}{2}) \cos \frac{\hat{\theta}}{2} \exp(i\frac{\hat{\phi}}{2}), \quad \hat{V} = \exp(i\frac{\hat{\psi}}{2}) \sin \frac{\hat{\theta}}{2} \exp(-i\frac{\hat{\phi}}{2}), \\ \hat{W} = -\exp(-i\frac{\hat{\psi}}{2}) \sin \frac{\hat{\theta}}{2} \exp(i\frac{\hat{\phi}}{2}), \quad \hat{X} = \exp(-i\frac{\hat{\psi}}{2}) \cos \frac{\hat{\theta}}{2} \exp(-i\frac{\hat{\phi}}{2}) \quad (3)$$