СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

P17 - 10695

А.Л.Куземский

САМОСОГЛАСОВАННОЕ ИНТЕРПОЛЯЦИОННОЕ РЕШЕНИЕ МОДЕЛИ ХАББАРДА. АТОМНЫЙ И ЗОННЫЙ ПРЕДЕЛЫ

1977

P17 - 10695

А.Л.Куземский

САМОСОГЛАСОВАННОЕ ИНТЕРПОЛЯЦИОННОЕ РЕШЕНИЕ МОДЕЛИ ХАББАРДА. АТОМНЫЙ И ЗОННЫЙ ПРЕДЕЛЫ

Куземский А.Л. Р17 - 10695

Самосогласованное интерполяционное решение модели Хаббарда. Атомный и зонный пределы

На основании уравнения Дайсона для двухвременных функций Грина рассматривается самосогласованное вычисление одночастичных функций Грина в модели Хаббарда. Развитый метод позволяет получить обобщенное интерполяционное решение модели Хаббарда, справедливое для произвольных соотношений между эффективной шириной зоны и параметром кулоновского отталкивания. Два варианта теории позволяют получить два точных представления для массового оператора, которые используются для получения приближенных решений в атомном и зонном пределах.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Kuzemsky A.L. P17 - 10695

A Self-Consistent Interpolation Solution of the Hubbard Model. The Band and Atomic Limits

The self-consistent calculation of one-particle Green's functions in the Hubbard model was considered. The Dyson equation for the two-time thermal Green function was derived and a generalized interpolation solution of the Hubbard model was obtained. This solution is valid for any value of the Coulomb correlation. Two exact representations for the self-energy are used for obtaining approximate solutions in the band and atomic limits.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

1. ВВЕДЕНИЕ

Метод двухвременных температурных функций Грина [1,2] является удобным и эффективным подходом для исследования систем многих взаимодействующих частиц. В предыдущих работах [3,4] мы развили самосогласованную схему вычислений одночастичных двухвременных функций Грина для модели Хаббарда [5]. Как известно, эта модель является одной из наиболее употребительных для описания магнитных свойств и перехода из металлического состояния в неметаллическое в халькогенидах переходных металлов. Гамильтониан, предложенный Хаббардом [5]

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a^{+}_{i\sigma} a_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} , \qquad /1/$$

зависит от двух параметров: эффективной ширины зоны $w = (N^{-1} \sum_{ij} |t_{ij}|^2)^{1/2}$ и энергии внутриатомного кулоновского отталкивания электронов U. С изменением их отношения меняется структура полос системы. В зависимости от величины отношения $z = w/U$, плотности электронов и степени заполнения подзон система может быть либо металлом, либо диэлектриком. Таким образом, для того чтобы описывать переход из металлической фазы в неметаллическую и переход из немагнитного в магнитоупорядоченное состояние, необходимо получить интерполяционное решение гамильтониана Хаббарда, справедливое в широком интервале значений параметра z, от атомного предела $(z \to 0)$ до зонного предела $(z >> 1)$.

Несмотря на разнообразие методов теории многих тел, применявшихся здесь, задача эта еще не получила удовлетворительного решения. И первоначальная схема расцепления цепочки уравнений для функций Грина, примененная в работе Хаббарда/5/, и большинство других решений приводят к локальному массовому оператору, в то время как даже в атомном пределе решение является заведомо нелокальным. Как было отмечено в работе/6/, то, что массовый оператор не зависит от квазиимпульса, означает нарушение закона сохранения квазиимпульса при этих расцеплениях. Это приводит к тому, что в зонном пределе, т.е. для металлической фазы, не существует хорошо определенной поверхности Ферми, которая является характерным признаком металла.

Развитый нами в работах/3,4/ метод позволяет избежать указанных трудностей и дает самосогласованную схему систематического построения обобщенных интерполяционных решений гамильтониана Хаббарда, справедливых в широком интервале значений z. Самосогласованное решение строится как решение уравнения Дайсона для одночастичных двухвременных температурных функций Грина. Вывод уравнения Дайсона основывается на методике введения неприводимых функций Грина/7,8/. Этот метод тесно связан с определенным способом проектирования высших функций Грина на исходные; при этом в качестве "нулевой" функции Грина выбирается перенормированная с учетом всех ренормировок среднего поля нелокальная функция Грина. Два варианта теории/3,4/ позволяют получить два точных представления для массового оператора, являющихся основой для получения приближенных решений в атомном и зонном пределах.

2. *ЗОННЫЙ ПРЕДЕЛ*

В первом варианте теории/3/ было получено точное представление для массового оператора $M_{k\sigma}(\omega)$ одночастичной функции Грина/1,2/

$$G_{k\sigma}(t) = \langle\langle a_{k\sigma}(t); a^{+}_{k\sigma} \rangle\rangle = -i\theta(t)\langle [a_{k\sigma}(t), a^{+}_{k\sigma}] \rangle =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t}\, G_{k\sigma}(\omega) =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} (e^{\beta\omega'} + 1) J_{k\sigma}(\omega'), \qquad /2/$$

где $\beta = (kT)^{-1}$, а $J_{k\sigma}(\omega)$ - спектральная интенсивность.

Полученное в работе/3/ уравнение Дайсона имеет вид

$$G_{k\sigma}(\omega) = G^{HF}_{k\sigma}(\omega) + G^{HF}_{k\sigma}(\omega) M_{k\sigma}(\omega) G_{k\sigma}(\omega)\ , \qquad /3/$$

где

$$G^{HF}_{k\sigma}(\omega) = (\omega - \epsilon^{HF}_{k\sigma})^{-1}\ ; \quad \epsilon^{HF}_{k\sigma} = \epsilon_k + \frac{U}{N} \sum_q \langle n_{q,-\sigma} \rangle\ , \qquad /4/$$

$$M_{k\sigma}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} (e^{\beta\omega'} + 1) U^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{i\omega' t} N^{-1} \times$$

$$\times \sum_{i \neq j} e^{-ik(R_i - R_j)} \langle a^{+}_{j\sigma} n_{j-\sigma} | n_{i-\sigma}(t)\, a_{i\sigma}(t) \rangle^{ir,c}\ . \qquad /5/$$

Выражение /5/ для массового оператора $M_{k\sigma}(\omega)$ одночастичной функции Грина модели Хаббарда является точным и справедливо для произвольных значений z. Массовый оператор выражен через неприводимую часть высшей функции Грина. Представление /5/ более удобно для получения приближенных решений в зонном пределе, поскольку явно содержит множитель U^2, но, вообще говоря, может также использоваться для получения приближенных решений и в случае сильной корреляции. Для получения приближенных решений нужно использовать определенные предположения о приближенном выражении для связанной части корреляционной функции в правой части /5/.

С помощью введения неприводимых частей мы отделили все ренормировки среднего поля, т.е. все одновременные спаривания. Произведем теперь, следуя работам /7,8/ , все возможные разновременные спаривания

$$N^{-1}\sum_{i\neq j} e^{-ik(R_i-R_j)} \langle a^{+}_{j\sigma} n_{j-\sigma} | n_{i-\sigma}(t)\, a_{i\sigma}(t)\rangle^{ir,c} \approx$$

$$\approx N^{-2}\sum_{pqrs} \langle a^{+}_{k+p,\sigma} a_{k+p,\sigma}(t)\rangle \langle a_{p+q,-\sigma}, a^{+}_{p+q,-\sigma}(t)\rangle \times$$

$$\times \langle a^{+}_{q,-\sigma} a_{q,-\sigma}(t)\rangle \delta_{k+s,\,k+p}\cdot\delta_{r+s,\,p+q}\cdot\delta_{r,q} +$$

$$+N^{-1}\sum_{i\neq j} e^{-ik(R_i-R_j)} \{\langle n_{j-\sigma} n_{i-\sigma}(t)\rangle \langle a^{+}_{j\sigma} a_{i\sigma}(t)\rangle +$$

$$+\langle a^{+}_{j\sigma} a_{j-\sigma} a^{+}_{i-\sigma}(t)\, a_{i\sigma}(t)\rangle \langle a^{+}_{j-\sigma} a_{i-\sigma}(t)\rangle +$$

$$+\langle a^{+}_{j\sigma} a^{+}_{j-\sigma} a_{i-\sigma}(t)\, a_{i\sigma}(t)\rangle \langle a_{j-\sigma} a^{+}_{i-\sigma}(t)\rangle \}. \qquad /6/$$

В работе /3/ мы ограничились рассмотрением только первого слагаемого в правой части /6/. Это соответствует вычислению массового оператора в парном приближении

$$M^{p}_{k\sigma}(\omega) = \frac{U^2}{N^2}\sum_{pq}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3}{\omega+\omega_1-\omega_2-\omega_3}\{n(\omega_1)[1-n(\omega_2)-n(\omega_3)]+$$

$$+n(\omega_2)n(\omega_3)\}\, g_{p+q,-\sigma}(\omega_1)\, g_{k+p,\sigma}(\omega_2)\, g_{q,-\sigma}(\omega_3) \qquad /7/$$

$$g_{k,\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,G_{k\sigma}(\omega+i\epsilon). \qquad /8/$$

Таким образом, парное приближение является достаточно разумным вне резонансных областей коллективных возбуждений. В этом случае, когда плотность низкая, можно ограничиться первым слагаемым в /6/. Именно такое расцепление было применено в работе /3/ при вычислении массового оператора в парамагнитном состоянии. Анализ остальных трех слагаемых в рамках данного формализма был проведен в работе /9/ для двухподрешеточного антиферромагнетика с электрон-фононным взаимодействием/.

Уравнения /3/ и /7/ представляют собой самосогласованную систему уравнений для одночастичной функции Грина в рамках парного приближения. Выбирая то или иное начальное представление для функции $g_{k\sigma}(\omega)$ в правой части /7/, мы можем вычислить функцию Грина $G_{k\sigma}(\omega)$. В принципе, подставляя полученный результат снова в /7/, можно найти более точное решение. В зонном пределе разумным начальным приближением, допускающим возможность такой итерации, является $g_{k\sigma}(\omega)=\delta(\omega-\epsilon_k)$. Для этого случая в работе /3/ было получено следующее представление для массового оператора в парном приближении

$$M^{p}_{k\sigma}(\omega) = \frac{U^2}{N^2}\sum_{pq}\frac{N^{\sigma}_{kpq}}{\omega-\Omega_{kpq}}, \qquad /9/$$

$$N^{\sigma}_{kpq} = n_{p+q,-\sigma}[1-n_{k+p,\sigma}-n_{q,-\sigma}]+n_{k+p,\sigma}\, n_{q,-\sigma},$$

$$\Omega_{kpq} = -\epsilon_{p+q}+\epsilon_{k+p}+\epsilon_{q}. \qquad /10/$$

Получим теперь уравнение для средних чисел заполнения в этом приближении. Для этого, следуя работе /10/, представим спектральную интенсивность полной функции Грина $G_{k\sigma}(\omega)$ в следующем виде:

$$-\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,G_{k\sigma}(\omega+i\epsilon) = \frac{1}{\pi}\,\frac{\Gamma_{k\sigma}(\omega)}{(\omega-E_{k\sigma})^2+\Gamma^2_{k\sigma}} \approx$$

$$\approx (1-a_{k\sigma})\delta(\omega - E_{k\sigma}) + \frac{1}{\pi}\,\frac{\Gamma_{k\sigma}(\omega)}{(\omega - E_{k\sigma})^2}\,, \qquad /11/$$

где

$$\Gamma_{k\sigma}(\omega) = -\mathrm{Im}\,M^{p}_{k\sigma}(\omega + i\epsilon) = \pi\,\frac{U^2}{N^2}\sum_{pq} N^{\sigma}_{kpq}\,\delta(\omega - \Omega_{kpq})\,,$$

$$E_{k\sigma} = \epsilon^{HF}_{k\sigma} + \mathrm{Re}M^{p}_{k\sigma}(E_{k\sigma}) = \epsilon^{HF}_{k\sigma} + \delta\epsilon\,;$$

$$\delta\epsilon = \mathcal{P}\,\frac{U^2}{N^2}\sum_{pq}\frac{N^{\sigma}_{kpq}}{\omega - \Omega_{kpq}}\,. \qquad /12/$$

Неизвестный множитель $(1-a_{k\sigma})$ при дельта-функции в правой части /11/ определяется из условий нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, g_{k\sigma}(\omega) = 1\,. \qquad /13/$$

При этом, с учетом /11/ и /12/, получим из /13/

$$a_{k\sigma} = \frac{U^2}{N^2}\sum_{pq}\frac{N^{\sigma}_{kpq}}{(\Omega_{kpq} - E_{k\sigma})}\,, \qquad /14/$$

откуда для средних чисел заполнения будем иметь

$$n_\sigma = \frac{1}{N}\sum_k n(E_{k\sigma}) + \frac{U^2}{N^3}\sum_{kpq}\frac{N^{\sigma}_{kpq}}{(\Omega_{kpq} - E_{k\sigma})^2}[n(\Omega_{kpq}) - n(E_{k\sigma})]. \qquad /15/$$

Таким образом, средние числа заполнения определяются из уравнения /15/ самосогласованным образом. Первый член в правой части /15/ описывает эффекты перенормировки энергии частиц в среднем поле, а второй - эффекты парных столкновений квазичастиц во втором порядке по U. Плотность состояний квазичастиц в этом приближении равна

$$D_\sigma(\omega) = N^{-1}\sum_k g_{k\sigma}(\omega) = N^{-1}\sum_k\{(1-a_{k\sigma})\delta(\omega - E_{k\sigma}) + a_{k\sigma}\,\delta(\omega - \Omega_{kpq})\}\,. \qquad /16/$$

Средняя энергия системы в данном приближении будет определяться выражением

$$\langle\mathcal{H}\rangle = \frac{1}{2N}\sum_{k\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}(\omega + \epsilon_k)J_{k\sigma}(\omega)\,d\omega = \frac{1}{2N}\sum_{k\sigma}(E_{k\sigma} + \epsilon_k)\,n(E_{k\sigma}) + (\Delta E)_2\,, \qquad /17/$$

где

$$(\Delta E)_2 = -\frac{1}{2N}\,\frac{U^2}{N^2}\sum_{kpq\sigma}\frac{N^{\sigma}_{kpq}}{(\Omega_{kpq} - E_{k\sigma})}[(E_{k\sigma} + \epsilon_k)n(E_{k\sigma}) - (\Omega_{kpq} + \epsilon_k)\,n(\Omega_{kpq})] \qquad /18/$$

- величина, по структуре подобная поправке энергии второго порядка в многопримесной модели Андерсона или модели Хаббарда с $s-d$ гибридизацией [11].

Рассмотрим теперь, какую форму приобретает критерий магнетизма при использовании для массового оператора парного приближения и затравочной дельтообразной спектральной плотности. Для этого, следуя [12], введем среднее число электронов $n = \frac{1}{2}(n_\uparrow + n_\downarrow)$ и намагниченность $m = \frac{1}{2}(n_\uparrow - n_\downarrow)$. Обозначая $n_\sigma \equiv f(\epsilon_f;\epsilon_k + Un_{-\sigma})$ и рассматривая условие существования решений уравнения

$$m = \tfrac{1}{2}f(\epsilon_f;\epsilon_k + Un - Um) - \tfrac{1}{2}f(\epsilon_f;\epsilon_k + Un + Um), \qquad /19/$$

найдем критерий возникновения ферромагнетизма в нашей системе. Он будет иметь вид

$$N^{-1}\sum_{k\sigma} U_{eff}(k)\cdot g_{k\sigma}(\epsilon_f) - \Delta(\epsilon_f) > 1. \qquad /20/$$

Здесь введены обозначения

$$U_{eff}(k) = U\{1+\tfrac{1}{2}\frac{U^2}{N^2}\sum_{pq}\frac{N^{\uparrow}_{kpq} - N^{\downarrow}_{kpq}}{[\Omega_{kpq}-(\epsilon_k+Un)]^2}\},$$

$$\Delta = \frac{U^3}{N^3}\sum_{kpq}\frac{N^{\uparrow}_{kpq}-N^{\downarrow}_{kpq}}{[\Omega_{kpq}-(\epsilon_k+Un)]^3}[n(\Omega_{kpq})-n(\epsilon_k+Un)]. \qquad /21/$$

Можно,говоря условно, считать соотношение /20/ обобщенной формой критерия Стонера возникновения ферромагнетизма в модели Хаббарда. Наиболее близкую форму к этому критерию соотношение /20/ приобретает в случае, когда можно считать $U_{eff}(k) \approx U_{eff}(0)$. При этом из /20/ получаем

$$U_{eff}(0)\cdot D(\epsilon_f) - \Delta(\epsilon_f) > 1. \qquad /22/$$

Из этого результата видно, что возникновение ферромагнетизма в системе определяется плотностью состояний электронов; при этом ренормированное кулоновское взаимодействие должно быть достаточно велико. Возникновение перенормированной величины U_{eff} и параметра Δ является естественным при более точном учете корреляции, чем в приближении Хартри-Фока, которое ведет к критерию Стонера. Известно, что в приближении Хартри-Фока тенденция системы к образованию магнитоупорядоченного состояния сильно преувеличивается.

Как уже говорилось выше, в зонном пределе представление /16/ можно использовать для итерационного вычисления высших /по параметру взаимодействия U / порядков массового оператора, для чего надо подставить /16/ в /7/. Выпишем, для краткости, только первый

и последний члены выражения, полученного в результате такой итерации

$$g_{p+q,-\sigma}(\omega_1)g_{k+p,\sigma}(\omega_2)g_{q,-\sigma}(\omega_3) =$$

$$= \delta(\omega_1 - E_{p+q})\delta(\omega_2 - E_{k+p})\delta(\omega_3 - E_q)\times$$

$$\times\left(1-\frac{U^2}{N^2}\sum_{mn}\frac{N_{p+q,mn}}{(\Omega_{p+q,mn}-E_{p+q})^2}\right)\times$$

$$\times\left(1-\frac{U^2}{N^2}\sum_{m_1n_1}\frac{N_{k+p,m_1n_1}}{(\Omega_{k+p,m_1n_1}-E_{k+p})^2}\right)\left(1-\frac{U^2}{N^2}\sum_{m_2n_2}\frac{N_{q,m_2n_2}}{(\Omega_{q,m_2n_2}-E_q)^2}\right)+$$

$$+\ldots+\delta(\omega_1-\Omega_{p+q,mn})\delta(\omega_2-\Omega_{k+p,m_1n_1})\delta(\omega_3-\Omega_{q,m_2n_2})\times$$

$$\times\frac{U^6}{N^6}\sum_{mn}\sum_{m_1n_1}\sum_{m_2n_2}\frac{N_{p+q,mn}N_{k+p,m_1n_1}N_{q,m_2n_2}}{(\Omega_{p+q,mn}-E_{p+q})^2(\Omega_{k+p,m_1n_1}-E_{k+p})^2(\Omega_{q,m_2n_2}-E_q)^2}. \qquad /23/$$

Таким образом, предлагаемая самосогласованная процедура позволяет построить теорию возмущений для массового оператора.

Представление /7/ справедливо, вообще говоря, для любых значений z в рамках применимости парного приближения, которое разумно в случае низкой плотности; величина взаимодействия может быть любой. В силу этого, в качестве прямого обобщения приближения свободных квазичастиц $g_{k\sigma}(\omega) = \delta(\omega-\epsilon_k)$ можно использовать одно из известных двухполюсных приближений, представляющих спектральную плотность в виде суммы двух дельта-функций. Как было показано в работах /13,14/, такое представление спектральной плотности является простейшим приближением, которое эффективным образом учитывает парные корреляции

$$g_{k\sigma}(\omega) = a_1^{\sigma}(k)\delta(\omega - E_1^{\sigma}(k)) + a_2^{\sigma}(k)\delta(\omega - E_2^{\sigma}(k)). \qquad /24/$$

Метод моментов [13,14] дает следующие выражения для параметров представления /24/ в случае, когда корреляция не мала:

$$E_1^{\sigma}(k) = (1-n_{-\sigma})\epsilon_k + n_{-\sigma}B_{-\sigma}; \quad a_1^{\sigma}(k) = (1-n_{-\sigma}),$$

$$E_2^{\sigma}(k) = U + n_{-\sigma}\epsilon_k + (1-n_{-\sigma})B_{-\sigma}; \; a_2^{\sigma}(k) = n_{-\sigma}. \qquad /25/$$

Использование представления /24/ в уравнении /7/ дает:

$$g_{p+q,-\sigma}(\omega_1)g_{k+p,\sigma}(\omega_2)g_{q,-\sigma}(\omega_3) =$$

$$= \delta(\omega_1 - E_1^{\sigma}(p+q))\delta(\omega_2 - E_1^{\sigma}(k+p))\delta(\omega_3 - E_1^{\sigma}(q)) \times$$

$$\times a_1^{-\sigma}(p+q)a_1^{\sigma}(k+p)a_1^{-\sigma}(q) + \ldots +$$

$$+\delta(\omega_1 - E_2^{\sigma}(p+q))\delta(\omega_2 - E_2^{\sigma}(k+p))\delta(\omega_3 - E_2^{\sigma}(q)) \times$$

$$\times a_2^{-\sigma}(p+q)a_2^{\sigma}(k+p)a_2^{-\sigma}(q). \qquad /26/$$

В пределе $z \to 0$, когда $n_{-\sigma} + n_{\sigma} < 1$, уровень Ферми должен лежать в нижней из двух квазичастичных подзон. В этом случае характер поведения системы будет определяться плотностью состояний нижней подзоны [15]:

$$D_{\sigma}(\omega) = N^{-1}\sum_k a_1^{\sigma}(k)\delta(\omega - E_1^{\sigma}(k)). \qquad /27/$$

Если обозначить плотность состояний для свободных квазичастиц $D_0(\omega) = N^{-1}\sum_k \delta(\omega - \epsilon_k)$, то из /27/ получим

$$D_{\sigma}(\omega) = D_0\left(\frac{\omega - n_{-\sigma}B_{-\sigma}}{1 - n_{-\sigma}}\right). \qquad /28/$$

Предполагая, что плотность состояний D_0 известна, можно вычислить $D_{\sigma}(\omega)$ для различных значений электронной плотности n. В том случае, когда справедливо /27/, в уравнении /26/ остается только первый член и рассмотрение можно провести аналогично рассмотренному выше.

В области резонанса одночастичных и коллективных возбуждений парное приближение становится неприменимым и необходимо учитывать следующие слагаемые в /6/.

$$M_{k\sigma}(\omega) = M_{k\sigma}^{e\ell}(\omega) + M_{k\sigma}^{s}(\omega) + M_{k\sigma}^{d}(\omega) =$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\omega - \omega'}(e^{\beta\omega'}+1)U^2N^{-1}\sum_{ij} e^{-ik(R_i - R_j)} \times$$

$$\times\{\int_{-\infty}^{\infty} dE n_F(E)(-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\langle\langle a_{i\sigma}|a_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle_{E+i\epsilon}) \times$$

$$\times n_B(\omega' - E)(-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\langle\langle n_{i-\sigma}|n_{j-\sigma}\rangle\rangle_{\omega'-E+i\epsilon}) +$$

$$+\int_{-\infty}^{\infty} dE n_F(E)(-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\langle\langle a_{i-\sigma}|a_{j-\sigma}^{+}\rangle\rangle_{E+i\epsilon}) \times \qquad /29/$$

$$\times n_B(\omega' - E)(-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\langle\langle a_{i-\sigma}^{+}a_{i\sigma}|a_{j\sigma}^{+}a_{j-\sigma}\rangle\rangle_{\omega'-E+i\epsilon}) +$$

$$+\int_{-\infty}^{\infty} dE n_F(E)(-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\langle\langle a_{i-\sigma}^{+}|a_{j-\sigma}\rangle\rangle_{E+i\epsilon}) \times$$

$$\times n_B(\omega' - E)(-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\langle\langle a_{i-\sigma}a_{i\sigma}|a_{j\sigma}^{+}a_{j-\sigma}^{+}\rangle\rangle_{\omega'-E+i\epsilon})\}.$$

Здесь $M^{e\ell}_{k\sigma}(\omega)$, $M^{s}_{k\sigma}(\omega)$ и $M^{d}_{k\sigma}(\omega)$ - вклады в массовый оператор, учитывающие коллективные движения электронной плотности, спиновой плотности и плотности двоек, соответственно; $n^{\beta}_{F}(\omega) = [\exp(\omega/\theta) \mp 1]^{-1}$.

Рассмотрим, для примера, вычисление вклада $M^{e\ell}_{k\sigma}(\omega)$ в простейшем приближении

$$M^{e\ell}_{k\sigma}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\int^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega-\omega'}(e^{\beta\omega'}+1)U^{2}N^{-1}\sum_{ij} e^{ik(R_i-R_j)} \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{i\omega' t}\{<a^{+}_{j\sigma}a_{i\sigma}(t)>(n^{2}_{-\sigma}+K_{ij}(t)\}, \qquad /30/$$

где $K_{ij}(t) = <(n_{j-\sigma}-n_{-\sigma})(n_{i-\sigma}(t)-n_{-\sigma})>$.

Если ограничиться статическим приближением для K_{ij} , т.е. положить $K_{ij}(t) \approx K_{ij}(0)$/см. работу [8] /, то из /30/ получим

$$M^{e\ell}_{k\sigma}(\omega) = \frac{U^{2}}{N}\sum_{q}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dE\, n_F(E)}{\omega-E}(e^{\beta E}+1)\} \times$$

$$\times\{-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\, G_{q\sigma}(E+i\epsilon)\}\{n^{2}_{-\sigma}+K_{k-q}\}. \qquad /31/$$

Уравнения /31/ и /3/ представляют собой самосогласованную систему уравнений для одночастичной функции Грина $G_{k\sigma}(\omega)$ в данном приближении. Беря в качестве затравочного значения $g_{q\sigma}(\omega)\approx\delta(\omega-\epsilon_q)$, получим из /31/

$$M^{e\ell}_{k\sigma}(\omega) = \frac{U^{2}}{N}\sum_{q}(\omega-\epsilon_{k-q})^{-1}\{n^{2}_{-\sigma}+K_{q}\}. \qquad /32/$$

Аналогично можно провести вычисления величин $M^{s}_{k\sigma}(\omega)$ и $M^{d}_{k\sigma}(\omega)$.

3. АТОМНЫЙ ПРЕДЕЛ

В настоящем разделе мы рассмотрим схему вычисления второго точного представления для массового

оператора. Это представление [4] также справедливо для произвольных значений z , но более удобно для получения приближенных представлений в пределе сильной корреляции, поскольку явным образом содержит множитель $|t_{ij}|^{2}$.

Вывод основан на введении неприводимых частей для функции Грина $G_{ij\sigma}(t) = <<a_{i\sigma}(t);a^{+}_{j\sigma}>>$, которая записывается в виде:

$$G_{ij\sigma}(\omega) = <<a_{i\sigma}|a^{+}_{j\sigma}>>_{\omega} = \sum_{\alpha\beta}<<d_{i\alpha\sigma}|d^{+}_{j\beta\sigma}>>_{\omega} =$$

$$= \sum_{\alpha\beta} G^{\alpha\beta}_{ij\sigma}(\omega),$$

$$d_{i\alpha\sigma} = n^{\alpha}_{i-\sigma}a_{i\sigma}\quad(\alpha=\pm);\ n^{+}_{i\sigma}=n_{i\sigma},\ n^{-}=(1-n_{i\sigma}). \qquad /33/$$

В работе [4] для фурье-образа матричной функции Грина $\bar{G}_{ij\sigma}(\omega)$ было получено следующее выражение:

$$\bar{G}_{q\sigma}(\omega) = \{\bar{G}^{-1}_{0q\sigma}(\omega)-\bar{M}_{q\sigma}(\omega)\}^{-1} =$$

$$= \frac{1}{\det(\bar{G}^{-1}_{0q\sigma}-\bar{M}_{q\sigma})}\begin{bmatrix} (\frac{b}{n^{-}_{-\sigma}}-M^{--}_{q\sigma}(\omega)) & (\frac{d}{n^{+}_{-\sigma}}+M^{+-}_{q\sigma}(\omega)) \\ (\frac{c}{n^{-}_{-\sigma}}+M^{-+}_{q\sigma}(\omega)) & (\frac{a}{n^{+}_{-\sigma}}-M^{++}_{q\sigma}(\omega)) \end{bmatrix}. \qquad /34/$$

Полная функция Грина "нулевого порядка" $G_{0\sigma}(q,\omega) = \sum_{\alpha\beta} G^{\alpha\beta}_{0q\sigma}$ равна

$$G_{0\sigma}(q,\omega) = (ab-cd)^{-1}(n^{-}_{-\sigma}a + n^{+}_{-\sigma}b + n^{-}_{-\sigma}d + n^{+}_{-\sigma}c). \qquad /35/$$

Величины a, b, c, d имеют вид[4]:

$$\left.\begin{matrix} a \\ b \end{matrix}\right\} = (\omega - E_{\pm} - N^{-1} \sum_{\tau} \epsilon_{\tau} (A^{\pm\pm}(-\tau) - B^{\pm\pm}(\tau - q)),$$

$$\left.\begin{matrix} c \\ d \end{matrix}\right\} = N^{-1} \sum_{\tau} \epsilon_{\tau} (A^{\mp\pm}(-\tau) - B^{\mp\pm}(\tau - q)). \qquad /36/$$

Здесь

$$\{\bar{A}_{ij}\}_{\alpha\beta} = \frac{\alpha(\langle d^{+}_{i\beta-\sigma} a_{j-\sigma}\rangle + \langle d_{i-\beta-\sigma} a^{+}_{j-\sigma}\rangle)}{n^{\beta}_{-\sigma}}, \qquad /37/$$

$$\{\bar{B}_{ji}\}_{\alpha\beta} = \frac{\langle n^{\beta}_{j-\sigma} n^{\alpha}_{i-\sigma}\rangle + \alpha\beta(\langle a_{i\sigma} a^{+}_{i-\sigma} a_{j-\sigma} a^{+}_{j\sigma}\rangle - \langle a_{i\sigma} a_{i-\sigma} a^{+}_{j-\sigma} a^{+}_{j\sigma}\rangle)}{n^{\beta}_{-\sigma}}. \qquad /38/$$

Величина $\{\bar{B}\}$ записывается через корреляционные функции электронной плотности, спиновой плотности и плотности двоек. Через эти же корреляционные функции выражаются элементы матрицы массового оператора

$$\{\bar{\Phi} \cdot \bar{M}_{q\sigma} \cdot \bar{\Phi}\}_{\alpha\beta} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} (e^{\omega'/\theta} + 1) \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{i\omega' t} \; N^{-1} \sum_{ij\ell m} e^{-iq(R_i - R_j)} \times$$

$$\times t_{i\ell}\, t_{mj} \langle D^{+(ir)}_{mj,\beta} D^{(ir)}_{i\ell,\alpha}(t)\rangle^{(c)}. \qquad /39/$$

/См. обозначения в работе[4] /. Поправки за счет массового оператора обусловливают зависимость от частоты[4] параметров функции Грина "нулевого порядка".

Функция Грина "нулевого порядка" /35/ имеет двухполюсную структуру, близкую к решению "Хаббард III" и решению Рот /см.[16–18], однако в выражении /35/ более точно учитываются недиагональные элементы. Часто для построения теории возмущений для гамильтониана Хаббарда используется начальная функция Грина атомного предела $G(\omega) = \frac{\omega - Un_{-\sigma}}{(\omega - U)\omega}$, имеющая локальный характер. Как известно[19], теории [20,21] использующие такое приближение в качестве начального, неточно учитывают недиагональные элементы функции Грина и не могут считаться удовлетворительными, поскольку даже в атомном пределе решение является заведомо нелокальным [19,22].

В связи с этим остановимся более подробно на сравнении нашего начального приближения /35/ с другими известными решениями гамильтониана Хаббарда в случае сильной корреляции. Для этого перепишем выражение /35/ в следующем виде:

$$G_{0\sigma}(q,\omega) = \frac{n^{+}_{-\sigma}(1 + c/b)}{a - d b^{-1} c} + \frac{n^{-}_{-\sigma}(1 + d/a)}{b - c a^{-1} d} \approx$$

$$\approx \frac{n^{-}_{-\sigma}}{\omega - E_{-} - n^{+}_{-\sigma} W^{-}(q,-\sigma)} + \frac{n^{+}_{-\sigma}}{\omega - E_{+} - n^{-}_{-\sigma} W^{+}(q,-\sigma)}. \qquad /40/$$

Здесь

$$n^{+}_{-\sigma} n^{-}_{-\sigma} W^{\pm}(q,-\sigma) = N^{-1} \sum_{ij} t_{ij} \exp[-iq(R_i - R_j)] \times$$

$$\times \{(\langle a^{+}_{i-\sigma} n^{\pm}_{i\sigma} a_{j-\sigma}\rangle + \langle a_{i-\sigma} n^{\mp}_{i\sigma} a^{+}_{j-\sigma}\rangle) +$$

$$+ (\langle n^{\pm}_{j-\sigma} n^{\pm}_{i-\sigma}\rangle + \langle a_{i\sigma} a^{+}_{i-\sigma} a_{j-\sigma} a^{+}_{j\sigma}\rangle -$$

$$- \langle a_{i\sigma} a_{i-\sigma} a^{+}_{j-\sigma} a^{+}_{j\sigma}\rangle)\} \qquad /41/$$

- величины сдвигов для верхней и нижней подзон. В таком виде наше решение /40/ очень близко к решению, получаемому методом Рот[17,18] и методом моментов[13–15]. Выражения для зонного сдвига /41/ совпадают с результатами для зонного сдвига, получаемого в этих методах, с тем отличием, что зонный сдвиг /41/ отличается для верхней и нижней подзон и не содержит членов, не зависящих от квазиимпульса. Таким образом, наше выражение для зонного сдвига является более общим, чем в этих методах.

Обычно в атомном пределе, в методе Рот и методе моментов при рассмотрении зонного сдвига, в нем оставляется только часть, которая не зависит от квазиимпульса. При этом зонный сдвиг записывается в следующем виде [14,18]:

$$\langle n^{+}_{i-\sigma}\rangle\langle n^{-}_{i-\sigma}\rangle W_{i,-\sigma} = N^{-1}\sum_{ij} t_{ij}\langle a^{+}_{i-\sigma}a_{j-\sigma}(n_{i\sigma}+n_{j\sigma}-1)\rangle . \qquad /42/$$

Именно локальное решение

$$g^{\sigma}_{i}(\omega) = \frac{1-\langle n_{i-\sigma}\rangle}{\omega-\epsilon_{i}-\langle n_{i-\sigma}\rangle W_{i,-\sigma}} + \frac{\langle n_{i-\sigma}\rangle}{\omega-\epsilon_{i}-U_{i}-(1-\langle n_{i-\sigma}\rangle)W_{i,-\sigma}} \qquad /43/$$

используется обычно для описания сильной корреляции в приближении когерентного потенциала[23], которое является существенно одноузельным приближением. В нашем подходе, для получения дальнейших приближенных решений из представления /41/ необходимо сравнивать коллективные корреляционные функции в правой части /41/.

При $z\to 0$ и $n_{\sigma}+n_{-\sigma}<1$ можно, следуя работе [24], считать, что корреляционные функции $\langle d^{+}_{i\beta-\sigma}a_{j-\sigma}\rangle$, $\langle d_{i-\beta-\sigma}a^{+}_{j\sigma}\rangle$ и $\langle a_{i\sigma}a^{+}_{i-\sigma}a_{j-\sigma}a^{+}_{j\sigma}\rangle$ малы. При этом из /41/ получим следующее выражение для зонного сдвига

$$n^{+}_{-\sigma}n^{-}_{-\sigma}W^{\pm}(q,-\sigma) =$$

$$= N^{-1}\sum_{ij} t_{ij}\langle n^{\pm}_{j-\sigma}n^{\pm}_{i-\sigma}\rangle \exp\{-iq(R_{i}-R_{j})\} . \qquad /44/$$

Решение /44/ переходит в решение "Хаббард I", если сделать дополнительное приближение $\langle n_{j-\sigma}n_{i-\sigma}\rangle \approx n^{2}_{-\sigma}$

$$G_{0\sigma}(q,\omega) = \frac{1-n_{-\sigma}}{\omega-\epsilon_{q}(1-n_{-\sigma})} + \frac{n_{-\sigma}}{\omega-U-\epsilon_{q}n_{-\sigma}} . \qquad /45/$$

Решение /45/ впервые было получено Хаббардом в работе [5].

Таким образом, использование в качестве функции Грина "нулевого порядка" представления /35/ дает большие преимущества. Функциональная структура нелокального решения /35/ обеспечивает исчезновение щели при некотором критическом значении z. В атомном пределе известные решения "Хаббард I", решение Рот и решение по методу моментов содержатся в решении /35/ как предельные случаи. Поправки же за счет массового оператора к параметрам "начальной" функции Грина /35/ входят как аддитивные добавки, что очень удобно при оценке поправок рассеяния, поправок резонансного уширения и интерференционных поправок.

4. *ОБСУЖДЕНИЕ*

Общие выражения для массового оператора /5/ и /39/ позволяют систематическим образом строить интерполяционные решения модели Хаббарда в широком интервале значений параметра z, от атомного до зонного предела. При этом, в частности, можно сразу выделить те аппроксимации для массового оператора, которые не нарушают закона сохранения квазиимпульса в системе. Это особенно существенно в зонном пределе /6/. В самом деле, если при стремлении ω к некоторому фиксированному значению ϵ_f, затухание $\Gamma_{\vec{k}\sigma}(\omega) = -\mathrm{Im} M_{\vec{k}\sigma}(\omega + i\epsilon)$ стремится к нулю, то

$$g_{\vec{k}\sigma}(\omega) = \frac{\Gamma_{\vec{k}\sigma}(\omega)}{[\omega - \epsilon^{HF}_{\vec{k}\sigma} - \Lambda_{\vec{k}\sigma}(\omega)]^2 + \Gamma^2_{\vec{k}\sigma}(\omega)} \approx$$

$$\approx \delta(\omega - \epsilon^{HF}_{\vec{k}\sigma} - \Lambda_{\vec{k}\sigma}(\omega))|_{\omega \to \epsilon_f} . \qquad /46/$$

Множество значений квазиимпульса k, удовлетворяющих уравнению

$$\epsilon_f - \epsilon^{HF}_{\vec{k}\sigma} - \Lambda_{\vec{k}\sigma}(\epsilon_f) = 0, \qquad /47/$$

в общем случае принадлежит некоторой поверхности в импульсном пространстве. Как известно, /25/ поверхность, определяемая уравнением /47/, называется поверхностью Ферми взаимодействующей системы. Из уравнений /46/, /47/ следует, что для определенной таким образом поверхности Ферми функция распределения по импульсам испытывает скачок при переходе через точку $\vec{k} = \vec{k}_f$. Латтинжер /25/ при довольно общих предположениях показал в произвольном порядке теории возмущений, что взаимодействие может деформировать поверхность Ферми, но не приводит к изменению ее объема. Общее выражение для массового оператора облегчает конструирование таких приближенных решений, которые будут удовлетворять уравнению /46/. Конкретно же вопрос о существовании поверхности Ферми должен исследоваться в нашем подходе отдельно для каждого конкретного приближения. Для массового оператора вида /9/ доказательство существования хорошо определенной поверхности Ферми можно найти в работе /26/.

Таким образом, развитый самосогласованный метод построения обобщенных интерполяционных решений модели Хаббарда является весьма общим, не опирается на использование конкретного нулевого приближения и может применяться к более сложным системам. Для двухподрешеточного антиферромагнетика Хаббарда с электрон-фононным взаимодействием этот метод был применен в работе /9/.

Для систематического построения приближенных решений в данной схеме важно получить явные выражения для коллективных корреляционных функций, входящих в выражения /6/ и /39/. Мы предполагаем обсудить это в следующей работе.

В заключение мне хотелось бы искренне поблагодарить Н.М.Плакиду за ценные советы и обсуждения. Я благодарен В.Веллеру, К.Эльку, В.Коллей и Ю.Шрайберу за полезные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. ДАН СССР, 1959, 126, 53.*
2. *Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма. М., Наука, 1975.*
3. *Куземский А.Л. ОИЯИ, Р4-7225, Дубна, 1973.*
4. *Куземский А.Л. ОИЯИ, Р17-9239, Дубна, 1975.*
5. *Hubbard J. Proc.Roy.Soc., 1963, A276, 238.*
6. *Edwards D.M., Hewson A.C. Rev.Mod.Phys., 1968, 40, 810.*
7. *Плакида Н.М. ТМФ, 1970, 5, 147; ФТТ, 1972, 14, 2841.*
8. *Plakida N.M. Phys.Lett., 1973, A43, 481.*
9. *Кузьмин Е.В., Овчинников С.Г. Препринт 41Ф Института физики СО АН СССР. Красноярск, 1976; ФТТ, 1977, 19, 1127.*
10. *Плакида Н.М., Русек П.Р. ОИЯИ, Р4-8032, Дубна, 1974.*
11. *Kuzemsky A.L. Acta Phys.Pol., 1976, A49, 169.*
12. *Уайт Р.М. Квантовая теория магнетизма. М., Мир, 1972.*
13. *Калашников О.К., Фрадкин Е.С. ЖЭТФ, 1968, 55, 607; ТМФ, 1970, 5, 417.*
14. *Nolthing W. Z.Physik, 1972, 255, 25.*
15. *Nolthing W. J.Magnetism and Magnet Materials, 1975, 1, 81.*
16. *Hubbard J. Proc.Roy Soc., 1964, A281, 401.*
17. *Roth L.M. Phys.Rev., 1969, 184, 451.*
18. *Krisement O. Z.Physik, 1974, 270, 383.*

19. Esterling D.M. Phys.Rev., 1970, B2, 4686.
20. Schanhammer K. J.Physics, 1974, C7, 3520.
21. Elk K. phys.stat.sol., 1974, 64, 489.
22. Капустин В.А. ФТТ, 1974, 16, 804; ТМФ, 1974, 21, 118.
23. Schweitzer J.W. "Magnetism in Metals and Metallic Compounds". Ed. Lopuszanski J.,Pekalski A., Przystawa J. Plenum Press, 1976.
24. Tahir-Kheli R.A., Jarret H.S. Phys.Rev., 1969, 180, 544.
25. Luttinger J.M. Phys.Rev., 1960, 119, 1153.
26. Галицкий В.М. В сб. "Применение методов квантовой теории поля к задачам многих тел", М., Госатомиздат, 1963, стр. 33.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 мая 1977 года.