

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА



СЗ26

K-89

12/1-76

P17 - 9239

А.Л.Куземский

92/2-76

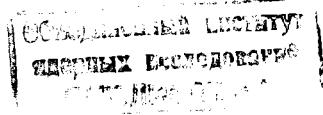
САМОСОГЛАСОВАННАЯ ТЕОРИЯ  
СИЛЬНОЙ КОРРЕЛЯЦИИ В МОДЕЛИ ХАББАРДА

**1975**

P17 - 9239

А.Л.Куземский

САМОСОГЛАСОВАННАЯ ТЕОРИЯ  
СИЛЬНОЙ КОРРЕЛЯЦИИ В МОДЕЛИ ХАББАРДА



Куземский А.Л.

P17 - 9239

Самосогласованная теория сильной корреляции в модели Хаббарда

Получено точное представление для массового оператора одночастичной двухвременной функции Грина в модели Хаббарда. Был использован формализм теории сплавов, позволивший получить обобщенное интерполяционное решение модели Хаббарда, дающее правильное поведение щели. Метод позволяет получить систематическим образом поправки за счет различных эффектов рассеяния.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований  
Дубна 1975

Kuzemsky A.L.

P17 - 9239

A Selfconsistent Theory of the Strong Correlation  
in the Hubbard Model

The exact representation for the self-energy of the one-particle two-time Green function of the Hubbard model was derived. This derivation was based on the alloy analogy and generalized interpolation solution of the Hubbard model was obtained. By this method the scattering corrections and resonance broadening corrections can be obtained in a very systematic way.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research  
Dubna 1975

**I. Постановка задачи**

В настоящей работе мы продолжим начатое в работе<sup>1/</sup> самосогласованное вычисление одночастичных двухвременных температурных функций Грина<sup>2,3/</sup> в модели Хаббарда<sup>4/</sup>, основанное на методике введения неприводимых функций Грина<sup>5,6/</sup>. Рассматриваемый метод позволяет, не прибегая к тому или иному способу обрыва цепочки зацепляющихся уравнений для функций Грина, записать уравнение Дайсона и получить точное аналитическое представление для массового оператора. Исходя из формального решения уравнения Дайсона с точным массовым оператором, удобно конструировать приближенные решения задачи, используя определенные приближения для массового оператора.

Метод вывода уравнения Дайсона с помощью введения неприводимых функций Грина является обобщением подхода, развивавшегося в работах Ю.А.Церковнико-ва<sup>7/</sup>, В.Гётце<sup>8,9/</sup> и в ряде других. Обобщение состоит в том, что вместо истинной функции Грина нулевого порядка используется перенормированная функция Грина, в которой уже учтены все ренормировки среднего поля. Введение такой функции Грина "нулевого порядка" отвечает определенному способу проектирования<sup>10/</sup> функции Грина высшего порядка на исходные, что эквивалентно обрыву цепочки зацепляющихся уравнений. Однако в данном методе цепочка не обрывается, поскольку та часть высшей функции Грина, которая не проектируется, относится к массовому оператору, и, таким образом, для последнего получается точное представление. Несколько иной вариант этого метода был ранее предложен в работах

по теории ферми-систем И.А.Квасникова с сотрудниками /12, 13/, в которых вводилась цепочка уравнений для неприводимых /регулярных/ частей двухвременных функций Грина, позволяющая получить /в соответствующем приближении/ замкнутые системы уравнений для одночастичной функции Грина и построить выражения для массовых операторов.

Мы будем рассматривать систему электронов, принадлежащих одной узкой  $s$ -зоне, описываемую гамильтонианом Хаббарда /2/:

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

где  $a_{i\sigma}^+$  и  $a_{i\sigma}$  - ферми-операторы рождения и уничтожения частиц со спином  $\sigma$  ( $\sigma = \pm 1$ ) в состоянии с волновой функцией Ванье  $\phi(\vec{r} - \vec{R}_i)$ , центрированной в узле решетки, задаваемом радиусом-вектором  $\vec{R}_i$ ;  $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$ . Коэффициенты  $t_{ij}$  являются матричными элементами перехода между узлами  $i$  и  $j$  и связаны с зонной энергией блоховских электронов  $\epsilon_q$  соотношением

$$t_{ij} = N^{-1} \sum_{\vec{q}} \epsilon_q \exp\{i\vec{q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)\}, \quad /2/$$

где  $N$  - полное число узлов решетки. Будем считать, что все энергии отсчитываются от центра тяжести зоны, т.е., что  $t_{ii} = \sum_{\vec{q}} \epsilon_q = 0$ . Второй член в гамильтониане /2/ описывает кулоновское отталкивание двух электронов в одном и том же узле с энергией взаимодействия, равной  $U$ . Вследствие принципа исключения Паули спины электронов имеют противоположное направление. Несмотря на схематизм, гамильтониан Хаббарда /2/ удобен, поскольку в нем сохраняются основные черты модели полностью коллективизированных электронов и модели локализованных спинов. Предельные случаи достигаются изменением одного параметра  $z = \Delta/U$ , где

$$\Delta = (N^{-1} \sum_{ij} |t_{ij}|^2)^{1/2}. \quad /3/$$

Таким образом, важнейшей задачей модели Хаббарда является получение интерполяционного решения, справед-

ливого в широком интервале значений параметра  $z$ . Несмотря на разнообразие методов теории многих тел, применявшимися здесь, эта задача еще не получила сколько-нибудь удовлетворительного решения /см., например, /13-15/. Даже предельные случаи - зонный, когда  $z \gg 1$ , и, в особенности, атомный, когда  $z \rightarrow 0$ , еще не получили полностью удовлетворительной трактовки. В этом смысле наличие точного выражения для массового оператора, справедливого при произвольном значении параметра  $z$ , может послужить основой для систематического построения надежных интерполяционных решений модели Хаббарда. В предыдущей работе /1/ мы получили точное представление для массового оператора, справедливое при произвольных значениях  $z$ . Это представление, однако, более удобно для получения приближенных решений в зонном пределе. В настоящей работе мы получим точное представление для массового оператора, также справедливое при произвольных  $z$ , которое более удобно для получения приближенных решений в атомном пределе, т.е. при  $z \rightarrow 0$ . Именно этот случай, как показано в работах /13-17/, встречает наибольшие трудности, поскольку теория возмущений по параметру  $z$  не является регулярной. Как отмечено в работах /14-17/, это связано с наличием многократного вырождения в системе, а также с тем, что предельный переход к  $z=0$  не является непрерывным.

## 2. Описание корреляции на языке теории сплавов

Известно /13-17/, что первоначальное решение Хаббарда, данное им в работе /4/, неудовлетворительно со многих точек зрения. Более точная теория, дающая правильную структуру решения, была развита им в работе /18/. Решение, полученное в этой работе, принято называть "Хаббард III". В значительной мере этот успех обязан использованию для описания сильной корреляции формализма теории сплавов /18, 19/, позволяющего очень компактно учесть различные процессы рассеяния в системе электронов и дырок.

Переход к описанию на языке теории сплавов основан на введении операторов проекционного типа<sup>/18/</sup>  $d_{i\alpha\sigma}$ :

$$d_{i\alpha\sigma} = n_i^\alpha - \sigma a_{i\sigma} (\alpha = \pm); \quad n_{i\sigma}^+ = n_{i\sigma}, \quad n_{i\sigma}^- = (1 - n_{i\sigma}),$$

$$\sum_\alpha n_{i\sigma}^\alpha = 1; \quad n_{i\sigma}^\alpha n_{j\sigma}^\beta = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} n_{i\sigma}^\alpha (\alpha, \beta = \pm); \quad \sum_\alpha d_{i\alpha\sigma} = a_{i\sigma}. \quad /4/$$

Операторы  $d_{i\alpha\sigma}$  и  $d_{j\beta\sigma}^+$  удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям

$$[d_{i\alpha\sigma}, d_{j\beta\sigma}^+] = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} n_{i-\sigma}^\alpha. \quad /5/$$

Удобство введения операторов  $d_{i\alpha\sigma}$  особенно хорошо видно из уравнения движения для них

$$i \dot{d}_{i\alpha\sigma} = E_\alpha d_{i\alpha\sigma} + \sum_{j \neq i} t_{ij} \{ n_{i-\sigma}^\alpha a_{j\sigma} + a_{i\sigma} b_{ij, -\sigma} \}, \quad /6/$$

где

$$E_+ = U, \quad E_- = 0; \quad b_{ij, \sigma} = (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} - a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}). \quad /7/$$

На основании уравнения /6/ можно описывать систему как состоящую из двух типов атомов с уровнями  $E_+$  и  $E_-$ , которые образуют два типа рассеивающих центров. Два члена, стоящие в фигурных скобках /6/, описывают, соответственно, два типа эффектов рассеяния, а именно: 1/ рассеяние вследствие неупорядоченности системы и 2/ рассеяние вследствие собственного движения электронов со спином  $(-\sigma)$ . Важнейшей особенностью решения "Хаббард III" является правильное поведение щели в спектре квазичастичных состояний, а именно - исчезновение щели при  $U \rightarrow 0$ . Такое поведение определяется функциональной структурой полученного решения для фурье-образа однчастичной функции Грина<sup>/2,3/</sup>:

$$g_{ij}(\omega) = \langle \langle a_{i\sigma} | a_{j\sigma}^+ \rangle \rangle \omega = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \{ -\theta(t) \langle [a_{i\sigma}(t), a_{j\sigma}^+] \rangle_+ \} =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \cdot N^{-1} \sum_q g(q, \omega) \exp\{-iq(R_i - R_j)\}, \quad /8/$$

которая имеет характерный двухполосный вид<sup>/18,19/</sup>:

$$g(q, \omega) = \{ F_\sigma(\omega) - \epsilon_q \}^{-1}, \quad /9/$$

$$F_\sigma^{-1}(\omega) = \frac{\omega - (n_{-\sigma}^+ E_- + n_{-\sigma}^- E_+) - \lambda}{(\omega - E_+ - n_{-\sigma}^+ \lambda)(\omega - E_- - n_{-\sigma}^- \lambda) - n_{-\sigma}^+ n_{-\sigma}^- \lambda^2}, \quad /10/$$

где  $\lambda$  - определенная функция<sup>/19/</sup>, зависящая от параметров системы. Если  $\lambda$  мало ( $\lambda \ll \Delta \gg 0$ ), то /10/ принимает вид

$$F_\sigma^{-1}(\omega) = \frac{n_{-\sigma}^-}{\omega - E_- - n_{-\sigma}^+ \lambda} + \frac{n_{-\sigma}^+}{\omega - E_+ - n_{-\sigma}^- \lambda},$$

который соответствует двум сдвинутым зонам. Если  $\lambda$  велико, тогда получим

$$F_\sigma^{-1}(\omega) = \frac{\lambda}{[(\omega - E_-) n_{-\sigma}^- + (\omega - E_+) n_{-\sigma}^+] \lambda} = \frac{1}{\omega - (n_{-\sigma}^+ E_+ + n_{-\sigma}^- E_-)}. \quad /11/$$

Это решение соответствует единичной зоне при энергии, равной средней энергии двух зон, т.е. при  $\omega = n_{-\sigma}^{+\pm} U$ . Возникновение функциональной структуры /10/ легко понять в рамках теории сплавов<sup>/19/</sup>. В самом деле, если ввести два типа потенциалов рассеяния  $t_+$  и  $t_-$ , где  $t_{\pm} = (\omega - E_{\pm})^{-1}$ , то можно ввести две  $t$ -матрицы  $T_+$  и  $T_-$ , уравнения для которых можно схематически записать как

$$T_+ = t_+ + t_+ G_{++}^o T_+ + t_+ G_{+-}^o T_-,$$

$$T_- = t_- + t_- G_{-+}^o T_- + t_- G_{--}^o T_+, \quad /11/$$

где  $G_{\alpha\beta}^o$  описывает свободное распространение квазичастиц между узлами типов  $/+/-$ . Решение уравнений /11/ имеет вид

$$T_{\pm} = \frac{t_{\pm} + t_{\pm} G_{\pm} t_{\mp}}{(1 - t_+ G_{++})(1 - t_- G_{--}) - G_{+-} G_{+-} t_+ t_-} = \\ = \frac{t_{\mp}^{-1} + G_{\pm}}{(t_+^{-1} - G_{++})(t_-^{-1} - G_{--}) - G_{+-} G_{+-}}. \quad /12/$$

Таким образом, сравнивая /12/ и /10/, можно дать наглядную интерпретацию функциональной структуры уравнения /10/, вводя дополнительное приближение  $\bar{T} \approx n_{-\sigma}^+ T_+ + n_{-\sigma}^- T_-$ . Мы не будем более подробно останавливаться на формализме теории сплавов, который здесь привлекается только для облегчения наглядной интерпретации тех решений, которые будут получены ниже. Более точное и подробное исследование модели Хаббарда на основе сведения ее к задаче о сплаве было проведено недавно в серии интересных работ В. Веллера с сотрудниками /20/.

### 3. Выход уравнения Дайсона

На основе формализма теории сплавов одночастичную функцию Грина  $g_{ij}(\omega)$  можно представить в виде

$$g_{ij}(\omega) = \sum_{\alpha\beta} \langle\langle d_{i\alpha\sigma} | d_{j\beta\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = \sum_{\alpha\beta} G_{ij}^{\alpha\beta}(\omega), \quad /13/$$

где  $G_{ij}^{\alpha\beta}(\omega)$  - матричная функция Грина

$$\bar{G}_{ij}(\omega) = \langle\langle (\frac{d_{i+\sigma}}{d_{i-\sigma}}) | (\frac{d_{j+\sigma}^+}{d_{j-\sigma}}) \rangle\rangle_{\omega} = \begin{cases} \langle\langle d_{i+\sigma} | d_{j+\sigma}^+ \rangle\rangle \langle\langle d_{i+\sigma} | d_{j-\sigma}^+ \rangle\rangle \\ \langle\langle d_{i-\sigma} | d_{j+\sigma}^+ \rangle\rangle \langle\langle d_{i-\sigma} | d_{j-\sigma}^+ \rangle\rangle, \end{cases} \quad /14/$$

уравнение движения для компонент которой имеет вид:

$$(\omega - E_a) G_{ij}^{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} n_{-\sigma}^a + \sum_{k \neq i} t_{ik} \langle\langle n_{i-\sigma}^a a_{k\sigma} + a_{i\sigma} b_{ik, -\sigma} | d_{j\beta\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega}. \quad /15/$$

### Вводя матричную запись

$$\bar{E} = \begin{bmatrix} \omega - E_+ & 0 \\ 0 & \omega - E_- \end{bmatrix} \quad \text{и} \quad \bar{\Phi} = \begin{bmatrix} n_{-\sigma}^+ & 0 \\ 0 & n_{-\sigma}^- \end{bmatrix}, \quad /16/$$

перепишем уравнение /15/ в форме

$$\{ \bar{E} \cdot \bar{G}_{ij}(\omega) - \bar{\Phi} \delta_{ij} \}_{\alpha\beta} = \sum_{k \neq i} t_{ik} \langle\langle n_{i-\sigma}^a a_{k\sigma} + a_{i\sigma} b_{ik, -\sigma} | d_{j\beta\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega}. \quad /17/$$

Введем теперь, следуя работам /5,6/, матричную неприводимую функцию Грина  $\bar{D}_{ik}^{(ir)}(\omega)$ :

$$\bar{D}_{ik}^{(ir)} = \begin{bmatrix} \langle\langle n_{i-\sigma}^+ a_{k\sigma} + a_{i\sigma} b_{ik, -\sigma} | d_{j+\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} & \langle\langle n_{i-\sigma}^+ a_{k\sigma} + a_{i\sigma} b_{ik, -\sigma} | d_{j-\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} \\ \langle\langle n_{i-\sigma}^- a_{k\sigma} - a_{i\sigma} b_{ik, -\sigma} | d_{j+\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} & \langle\langle n_{i-\sigma}^- a_{k\sigma} - a_{i\sigma} b_{ik, -\sigma} | d_{j-\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} \end{bmatrix} -$$

$$- \sum_{\alpha'} \left\{ \begin{bmatrix} A_{ik}^{+\alpha'} \\ A_{ik}^{-\alpha'} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G_{ij}^{\alpha'+} & G_{ij}^{\alpha'-} \\ G_{kj}^{\alpha'+} & G_{kj}^{\alpha'-} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} B_{ki}^{+\alpha'} \\ B_{ki}^{-\alpha'} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G_{kj}^{\alpha'+} & G_{kj}^{\alpha'-} \\ G_{ki}^{\alpha'+} & G_{ki}^{\alpha'-} \end{bmatrix} \right\}, \quad /18/$$

коэффициенты  $\bar{A}_{ik}$  и  $\bar{B}_{ki}$  определяются из условия

$$\langle [ \{ \bar{D}_{ik}^{(ir)} \}_{\alpha\beta} ]_{\alpha\beta} \rangle = 0. \quad /19/$$

Вычисляя соответствующие коммутаторы в /19/ и приравнивая между собой члены, пропорциональные  $\delta_{ij}$  и  $\delta_{jk}$  соответственно, получим ( $i \neq k$ ):

$$\{ \bar{A}_{ik} \}_{\alpha\beta} = \frac{\alpha (\langle d_{i\beta-\sigma}^+ a_{k-\sigma} \rangle + \langle d_{i-\beta-\sigma}^+ a_{k-\sigma}^+ \rangle)}{n_{-\sigma}^{\beta}}, \quad /20/$$

$$\{\bar{B}_{ki}\}_{\alpha\beta} = \frac{<_{n_{k-\sigma}^{\alpha}} + \alpha\beta(<_{a_{i\sigma}^+ a_{i-\sigma}^+ a_{k-\sigma}^+ a_{k\sigma}^+} - <_{a_{i\sigma}^+ a_{i-\sigma}^+ a_{k-\sigma}^+ a_{k\sigma}^+})}{n_{-\sigma}^{\beta}}. /21/$$

Из определения /18/ следует, что неприводимая функция Грина не содержит ренормировок среднего поля. С помощью введения неприводимой части функции Грина более высокого порядка представляются в виде суммы двух частей - той части, которая может быть представлена через функции Грина низшего порядка, и остальной части, которая не может быть выражена через низшие функции Грина и называется неприводимой. Ту часть, которую мы выразили через исходные функции Грина, удобно записать с помощью введения функции Грина "нулевого порядка", содержащей все ренормировки среднего поля

$$\begin{aligned} \{\bar{E} \cdot \bar{G}_{0ij} - \bar{\Phi} \delta_{ij}\}_{\alpha\beta} &= \\ &= \sum_{k\alpha'} t_{ik} \left\{ \begin{bmatrix} A_{ik}^{+\alpha'} \\ A_{ik}^{-\alpha'} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G_{0ij}^{+\alpha'} & G_{0ij}^{-\alpha'} \\ G_{0kj}^{+\alpha'} & G_{0kj}^{-\alpha'} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} B_{ki}^{+\alpha'} \\ B_{ki}^{-\alpha'} \end{bmatrix} \right\} /22/ \end{aligned}$$

С помощью преобразования Фурье

$$\bar{G}_{0ij} = N^{-1} \sum_q e^{iq(R_i - R_j)} \bar{G}_{0q}$$

можно найти явный вид матрицы  $\bar{G}_{0q}$ :

$$\begin{bmatrix} G_{0q}^{++}(\omega) & G_{0q}^{+-}(\omega) \\ G_{0q}^{-+}(\omega) & G_{0q}^{--}(\omega) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n_{-\sigma}^+ b & n_{-\sigma}^- d \\ n_{-\sigma}^+ c & n_{-\sigma}^- a \end{bmatrix} \cdot (ab - cd)^{-1}. /23/$$

Коэффициенты  $a, b, c, d$  равны:

$$\begin{aligned} a &= (\omega - E_+ - N^{-1} \sum_{\tau} \epsilon_{\tau} (A^{++}(-\tau) - B^{++}(\tau - q))), \\ b &= (\omega - E_- - N^{-1} \sum_{\tau} \epsilon_{\tau} (A^{--}(-\tau) - B^{--}(\tau - q))), \\ c &= N^{-1} \sum_{\tau} \epsilon_{\tau} (A^{-+}(-\tau) - B^{-+}(\tau - q)), \\ d &= N^{-1} \sum_{\tau} \epsilon_{\tau} (A^{+-}(-\tau) - B^{+-}(\tau - q)). \end{aligned} /24/$$

Подставив /23/ в /18/, получим:

$$\bar{G}_q(\omega) = \bar{G}_{0q}(\omega) + \bar{G}_{0q}(\omega) \cdot \bar{\Phi}^{-1} \cdot \bar{D}_{1q}(\omega), /25/$$

где

$$D_{1q}(\omega) = \{ \ll \sum_k t_{ik} D_{ik,\alpha}^{(ir)} |d_{j\beta\sigma}^{+\alpha}| \}_{q\alpha}.$$

Таким образом, для получения уравнения Дайсона нам необходимо вычислить матрицу  $\bar{D}_{1q}(\omega)$ . Для этого про-дифференцируем эту матричную функцию Грина по второму времени

$$-i \frac{d}{dt} \ll \sum_k t_{ik} D_{ik,\alpha}^{(ir)} ; d_{j\beta\sigma}^{+\alpha}(t) \gg. /26/$$

Выделяя теперь в уравнении /26/, аналогично /22/, неприводимую по правым операторам функцию Грина, будем иметь, с учетом /19/,

$$\begin{aligned} \bar{D}_{1,ij}(\omega) \cdot \bar{E} - \bar{D}_{2,ij}(\omega) &= \\ &= \sum_{m\beta'} t_{mj} \left\{ \begin{bmatrix} D_{1,ij}^{+\beta'} \\ D_{1,ij}^{-\beta'} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \{A_{mj}^{+\beta'}\}^+ & \{A_{mj}^{-\beta'}\}^+ \\ \{B_{jm}^{+\beta'}\}^+ & \{B_{jm}^{-\beta'}\}^+ \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} D_{1,im}^{+\beta'} \\ D_{1,im}^{-\beta'} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \{B_{jm}^{+\beta'}\}^+ & \{B_{jm}^{-\beta'}\}^+ \\ \{B_{jm}^{-\beta'}\}^+ & \{B_{jm}^{+\beta'}\}^+ \end{bmatrix} \right\}, /27/ \end{aligned}$$

где

$$\{\bar{D}_{2,ij}\}_{\alpha\beta} = \left\langle\left\langle \sum_k t_{ik} D_{ik,\alpha}^{(ir)} \mid \sum_m t_{mj} \{D_{mj,\beta}^{(ir)}\}^+ \right\rangle\right\rangle_\omega, \quad /28/$$

откуда непосредственно следует, что

$$\bar{G}_q(\omega) = \bar{G}_{0q}(\omega) + \bar{G}_{0q}(\omega) \cdot \bar{P}_q(\omega) \cdot \bar{G}_{0q}(\omega), \quad /29/$$

где

$$\bar{P}_q(\omega) = \bar{\Phi}^{-1} \cdot \bar{D}_{2,q}(\omega) \cdot \bar{\Phi}^{-1} \quad /30/$$

имеет смысл радиационного оператора<sup>/5,6/</sup>. Массовый оператор  $\bar{M}_q(\omega)$  полной функции Грина, определяемый уравнением Дайсона

$$\bar{G}_q(\omega) = \bar{G}_{0q}(\omega) + \bar{G}_{0q}(\omega) \cdot \bar{M}_q(\omega) \cdot \bar{G}_q(\omega), \quad /31/$$

связан с оператором  $\bar{P}_q(\omega)$  уравнением

$$\bar{P}_q(\omega) = \bar{M}_q(\omega) + \bar{M}_q(\omega) \bar{G}_{0q}(\omega) \bar{P}_q(\omega). \quad /32/$$

Из /32/ следует, что  $\bar{M}_q(\omega)$  представляет собой собственную или сильно связанную часть оператора  $\bar{P}_q(\omega)$

$$\bar{M}_q(\omega) = \bar{P}_q^{(c)}(\omega) = \bar{\Phi}^{-1} \cdot \left\{ \sum_{km} t_{ik} t_{mj} \left\langle \left\langle \bar{D}_{ik}^{(ir)} \mid \bar{D}_{mj}^{(ir)} \right\rangle \right\rangle_\omega^c \right\} \cdot \bar{\Phi}^{-1}, \quad /33/$$

не содержащую частей, соединенных одной линией  $\bar{G}_{0q}(\omega)$ . Формальное решение уравнения /31/ имеет вид:

$$\begin{aligned} \bar{G}_q(\omega) &= \{\bar{G}_{0q}^{-1}(\omega) - \bar{M}_q(\omega)\}^{-1} = \\ &= \frac{1}{\det(\bar{G}_{0q}^{-1} - \bar{M}_q)} \begin{bmatrix} \left(\frac{b}{n_{-\sigma}} - M_{q-}^{--}(\omega)\right) & \left(\frac{d}{n_+^+} + M_{q+}^{+-}(\omega)\right) \\ \left(\frac{c}{n_{-\sigma}} + M_{q-}^{-+}(\omega)\right) & \left(\frac{a}{n_+^-} - M_{q+}^{++}(\omega)\right) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad /34/$$

Таким образом, задача нахождения функции Грина свелась к вычислению элементов матриц  $\bar{G}_{0q}^{-1}$  и  $\bar{M}_q(\omega)$ . Подчеркнем еще раз, что полученное представление для массового оператора /33/ является точным. Перейдем теперь к рассмотрению матриц  $\bar{G}_{0q}$  и  $\bar{M}_q$ .

#### 4. Функция Грина "нулевого порядка"

Из уравнения /22/ следует, что функция Грина "нулевого порядка"  $\bar{G}_{0q}(\omega)$  представляет собой, согласно терминологии, принятой в работе /21/, см. также /3/, /, решение уравнения /17/ в обобщенном приближении Хартри-Фока /ОПХФ/. Полная функция Грина нулевого порядка  $g_0(q, \omega)$ , согласно /13/, равна

$$g_0(q, \omega) = (ab - cd)^{-1} \frac{(n_{-\sigma}^- a + n_{-\sigma}^+ b + n_{-\sigma}^- d + n_{-\sigma}^+ c) = \omega - (n_{-\sigma}^+ E_- + n_{-\sigma}^- E_+) - \lambda(q)}{(\omega - E_+ - n_{-\sigma}^- \lambda_1(q)) (\omega - E_- - n_{-\sigma}^+ \lambda_2(q)) - n_{-\sigma}^- n_{-\sigma}^+ \lambda_3(q) \lambda_4(q)}, \quad /35/$$

где

$$\lambda_2^1(q) = \frac{1}{n_{-\sigma}^+} \sum_r \epsilon_r (A^{\pm\pm}(-r) - B^{\pm\pm}(r-q)),$$

$$\lambda_4^3(q) = \frac{1}{n_{-\sigma}^-} \sum_r \epsilon_r (A^{\pm\mp}(-r) - B^{\pm\mp}(r-q)), \quad /36/$$

$$\lambda(q) = (n_{-\sigma}^-)^2 (\lambda_1 + \lambda_3) + (n_{-\sigma}^+)^2 (\lambda_2 + \lambda_4).$$

Таким образом, наша функция Грина "нулевого порядка" имеет двухполюсную структуру, очень близкую к решению "Хаббард III". Имеется, однако, одно существенное отличие, на которое необходимо обратить внимание. Решение "Хаббард III" в атомном пределе переходит в решение

$$g(\omega) = \frac{\omega - Un_{-\sigma}^-}{(\omega - U)\omega}, \quad /37/$$

диагональное в узловом представлении. В отличие от этого случая, наша функция Грина "нулевого порядка" /35/ зависит от квазимпульса при любых сколь угодно малых значениях  $z \rightarrow 0$ , т.е. сохраняет недиагональную структуру. Как известно, теория возмущений, опирающаяся на использование функции Грина "нулевого порядка" /14-16/, приводит к неправильным результатам /22, 23/, в которых при выводе уравнения Дайсона используется начальная функция Грина /37/.

Уравнение для полюсов функции Грина /35/ имеет вид

$$\{(\omega - F_+ - N^{-1} \sum_{\tau} \epsilon_{\tau} (A^{++}(-\tau) - B^{++}(\tau-q)) (\omega - F_- - N^{-1} \sum_{\tau} \epsilon_{\tau} (A^{--}(-\tau) - B^{--}(\tau-q))) - \\ - N^{-1} \sum_{\tau} \epsilon_{\tau} (A^{-+}(-\tau) - B^{-+}(\tau-q)) \cdot N^{-1} \sum_{\tau} \epsilon_{\tau} (A^{+-}(-\tau) - B^{+-}(\tau-q))\} = 0. \quad /38/$$

Спектр квазичастичных возбуждений будет состоять из двух ветвей

$$\omega_{1,2}(q) = \frac{1}{2} \{ (E_+ + E_- + a_1 + b_1) \pm [(E_+ + E_- - a_1 - b_1)^2 - 4cd]^{1/2} \}, \quad /39/$$

где

$$a_1 = \omega - E_+ - a; \quad b_1 = \omega - E_- - b.$$

Таким образом, спектральная интенсивность функции Грина "нулевого порядка" будет иметь два пика, расстояние между которыми равно

$$\omega_1(q) - \omega_2(q) = \{(U - a_1 - b_1)^2 - cd\}^{1/2} \approx U(1 - \frac{(a_1 - b_1)}{U}) + O(z). \quad /40/$$

Наше двухполюсное представление для функции Грина "нулевого порядка" /35/, в котором отсуммированы все ренормировки среднего поля, уже содержит довольно много информации о системе. Некоторые приближенные решения получаются из /35/ как частные случаи. Покажем, как из /35/ можно получить решение "Хаббард I"

при  $z \rightarrow 0$ . Функцию Грина  $\bar{G}_{0q}(\omega)$  /23/ можно переписать в виде

$$\bar{G}_{0q}(\omega) = \begin{bmatrix} \{\frac{a}{n_{-\sigma}^+} - \frac{db^{-1}c}{n_{-\sigma}^+}\}^{-1} & \frac{d}{a} \{\frac{b}{n_{-\sigma}^-} - \frac{da^{-1}c}{n_{-\sigma}^-}\}^{-1} \\ \frac{c}{b} \{\frac{a}{n_{-\sigma}^+} - \frac{db^{-1}c}{n_{-\sigma}^+}\}^{-1} & \{\frac{b}{n_{-\sigma}^-} - \frac{da^{-1}c}{n_{-\sigma}^-}\}^{-1} \end{bmatrix}, \quad /41/$$

откуда получим

$$g_0(q, \omega) = \frac{n_{-\sigma}^+(1 + c/b)}{a - db^{-1}c} + \frac{n_{-\sigma}^-(1 + d/a)}{b - ca^{-1}d}. \quad /42/$$

Учитывая тот факт, что при  $z \rightarrow 0$ , следуя работам /23-25/, можно считать, что

$$A_{ik}^{a\beta} \ll B_{ki}^{a\beta}; B^{++} \approx -n_{-\sigma}^+, B^{--} \approx -n_{-\sigma}^-, B^{\pm\mp} \approx 0, \quad /43/$$

перепишем уравнение /42/ в форме

$$g_0(q, \omega) = \frac{n_{-\sigma}^+(1 + c/b)}{(\omega - E_+ - N^{-1} \sum_q \epsilon_{q'-q} (A^{++}(q'-q) - B^{++}(q')) - db^{-1}c} + \\ + \frac{n_{-\sigma}^-(1 + d/a)}{\omega - E_- - N^{-1} \sum_q \epsilon_{q'-q} (A^{--}(q'-q) - B^{--}(q')) - ca^{-1}d} \approx \\ \approx \frac{n_{-\sigma}}{\omega - U - \epsilon_{q' n_{-\sigma}}} + \frac{1 - n_{-\sigma}}{\omega - \epsilon_q (1 - n_{-\sigma})} + O(z). \quad /44/$$

Решение /44/ впервые было получено Хаббардом в работе /4/.

Таким образом, использование в качестве функции Грина "нулевого порядка" представления /35/ дает большие преимущества. Правильная функциональная структура, как видно из сравнения с /10/, автоматически обеспечивает правильное поведение щели в спектре квазичастичных состояний. При этом, однако, более точно учитываются иедиагональные элементы функции Грина, чем в решении "Хаббард III". Заметим, что параметры  $\lambda_i(q)$  не содержат зависимости от частоты. Такая зависимость, обусловленная неупругими процессами рассеяния, как будет показано ниже, возникает за счет массового оператора, что позволяет в явном виде учесть поправки за счет эффектов рассеяния квазичастиц.

### 5. Поправки за счет массового оператора

Перенормированный за счет массового оператора спектр системы будет задаваться уравнением

$$0 = \left( \frac{a}{n_{-\sigma}^+} - M_q^{++}(\omega) \right) \left( \frac{b}{n_{-\sigma}^-} - M_q^{--}(\omega) \right) - \left( \frac{c}{n_{-\sigma}^-} + M_q^{-+}(\omega) \right) \left( \frac{d}{n_{-\sigma}^+} + M_q^{+-}(\omega) \right) /45/$$

и существенно определяться характером приближений, использованных для вычисления массового оператора. Полная функция Грина  $g(q, \omega)$  будет иметь вид:

$$\begin{aligned} g(q, \omega) &= \frac{1}{\det(\bar{G}_0^{-1} - \bar{M}_q(\omega))} \left\{ \frac{1}{n_{-\sigma}^+} (a - n_{-\sigma}^+ M_q^{++}(\omega)) + \right. \\ &+ \frac{1}{n_{-\sigma}^-} (b - n_{-\sigma}^- M_q^{--}(\omega)) + \frac{1}{n_{-\sigma}^+} (d + n_{-\sigma}^+ M_q^{+-}(\omega)) + \frac{1}{n_{-\sigma}^-} (c + n_{-\sigma}^- M_q^{-+}(\omega)) \left. \right\} = \\ &= \frac{\omega - (n_{-\sigma}^+ E_- + n_{-\sigma}^- E_+) - \tilde{\lambda}(q, \omega)}{(\omega - E_+ - n_{-\sigma}^- \tilde{\lambda}_1(q, \omega)) (\omega - E_- - n_{-\sigma}^+ \tilde{\lambda}_2(q, \omega)) - n_{-\sigma}^- n_{-\sigma}^+ \tilde{\lambda}_3(q, \omega) \tilde{\lambda}_4(q, \omega)} /46/ \end{aligned}$$

где

$$\tilde{\lambda}_2^1(q, \omega) = \lambda_2^1(q) - \frac{n_{-\sigma}^+}{n_{-\sigma}^-} M_q^{\pm\pm}(\omega),$$

$$\tilde{\lambda}_4^3(q, \omega) = \lambda_4^3(q) + \frac{n_{-\sigma}^-}{n_{-\sigma}^+} M_q^{\mp\mp}(\omega),$$

$$\tilde{\lambda}(q, \omega) = \lambda(q) + n_{-\sigma}^+ n_{-\sigma}^- (M_q^{++}(\omega) + M_q^{--}(\omega) - M_q^{-+}(\omega) - M_q^{+-}(\omega)).$$

/47/

Поправки за счет массового оператора входят в /47/ как аддитивные добавки, что очень удобно при оценке вкладов различных эффектов рассеяния. Решение /46/ является точным представлением для функции Грина  $g(q, \omega)$ , определяющимся лишь способом выбора функции Грина "нулевого порядка" /35/. Поэтому решение "Хаббард III" является лишь частным случаем решения /46/. Поскольку решение /46/ справедливо для произвольных  $z$ , его можно использовать при построении приближенных интерполяционных или предельных решений. Для этого удобно записать элементы матрицы  $\bar{M}_q(\omega)$  через корреляционные функции /5, 6, 1/:

$$\begin{aligned} \{\bar{\Phi} \cdot \bar{M}_q \cdot \bar{\Phi}\}_{\alpha\beta} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} (e^{\omega'/\theta} - 1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega't} N^{-1} \sum_{ijk\alpha} e^{-iq(R_i - R_j)} \times \\ &\times t_{ik}^{(+ir)} t_{mj}^{(-ir)} \langle D_{mj, \beta}^{(+ir)}(t) D_{ik, \alpha}^{(-ir)} \rangle^{(c)}. \end{aligned} /48/$$

С помощью введения неприводимых частей функций Грина мы отделили все одновременные спаривания. Воспользуемся теперь методом, предложенным в работе /6/, а именно - проведем возможные разновременные спаривания для корреляционной функции в правой части уравнения /48/. Тогда получим:

$$\langle D_{mj, \beta}^{(+ir)}(t) D_{ik, \alpha}^{(-ir)} \rangle^{(c)} \approx \langle a_{m\sigma}^+(t) a_{k\sigma}^- \rangle \langle n_{j-\sigma}^\beta(t) n_{i-\sigma}^\alpha \rangle + \langle a_{m\sigma}^+(t) n_{i-\sigma}^\alpha \rangle \langle n_{j-\sigma}^\beta(t) a_{k\sigma}^- \rangle +$$

$$\begin{aligned}
& + \beta \langle b_{mj,-\sigma}^+ (t) a_{k\sigma} \rangle \langle a_{j\sigma}^+ (t) n_{i-\sigma}^\alpha \rangle + \beta \langle b_{mj,-\sigma}^+ (t) n_{i-\sigma}^\alpha \rangle \langle a_{j\sigma}^+ (t) a_{k\sigma} \rangle + \\
& + \alpha \langle a_{m\sigma}^+ (t) a_{i\sigma} \rangle \langle n_{j-\sigma}^\beta (t) b_{ik,-\sigma} \rangle + \alpha \langle a_{m\sigma}^+ (t) b_{ik,-\sigma} \rangle \langle n_{j-\sigma}^\beta (t) b_{ik,-\sigma} \rangle + \\
& + \alpha \beta \langle b_{mj,-\sigma}^+ (t) a_{i\sigma} \rangle \langle a_{j\sigma}^+ (t) b_{ik,-\sigma} \rangle + \alpha \beta \langle b_{mj,-\sigma}^+ (t) b_{ik,-\sigma} \rangle \langle a_{j\sigma}^+ (t) a_{i\sigma} \rangle. \\
& /49/
\end{aligned}$$

Входящие в /49/ величины можно интерпретировать на языке теории сплавов как поправки рассеяния вследствие неупорядоченности, поправки резонансного уширения и интерференционные поправки.

В качестве примера вычислим поправку, обусловленную неупорядоченностью системы, т.е. будем считать, что

$$\begin{aligned}
& \langle D_{mj,\beta}^{+(ir)} (t) D_{ik,\alpha}^{(ir)} \rangle^{(v)} = \langle a_{m\sigma}^+ (t) a_{k\sigma} \rangle \langle n_{j-\sigma}^\beta (t) n_{i-\sigma}^\alpha \rangle = \\
& = \langle a_{m\sigma}^+ (t) a_{k\sigma} \rangle \{ n_{-\sigma}^\beta n_{-\sigma}^\alpha + K_{ij}^{a\beta} (t) \}, \\
& /50/
\end{aligned}$$

где

$$K_{ij}^{a\beta} (t) = \langle n_{i-\sigma}^\beta (t) - n_{-\sigma}^\beta \rangle \langle n_{i-\sigma}^\alpha - n_{-\sigma}^\alpha \rangle.$$

Первый член в уравнении /50/ описывает рассеяние квазичастичных возбуждений со спином  $\sigma$  в среднем поле  $n_{-\sigma}$ , второй - дополнительную передачу импульса при рассеянии. Для качественной оценки второго эффекта можно воспользоваться статическим приближением  $K_{ij}^{a\beta} (t) \approx K_{ij}^{a\beta} (t=0)$  /сравни /6/. Подставляя /50/ в /48/, получим

$$\begin{aligned}
& \{ \bar{\Phi} \cdot \bar{M}_q \cdot \bar{\Phi} \}_{a\beta} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} (e^{\omega'/\theta} - 1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega't} N^{-1} \sum_{ijk\sigma} e^{-iq(R_i - R_j)} \times \\
& \times t_{ik} t_{mj} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{\omega_1/\theta - 1} e^{i\omega_1 t} \left\{ -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} g_{mk}(\omega_1 + i\epsilon) \right\} \{ n_{-\sigma}^\beta n_{-\sigma}^\alpha + K_{ij}^{a\beta} (0) \}. \\
& /51/
\end{aligned}$$

Уравнения /46/ и /51/ представляют собой самосогласованную систему уравнений для одиночественной функции Грина  $g(q, \omega)$ . Выбирая то или иное начальное представление для функции  $g_{mk}(\omega + i\epsilon)$  в правой части /51/, мы можем вычислить функцию Грина  $g(q, \omega)$  /46/. Затем, подставляя полученный результат снова в /51/, можно найти, в принципе, более точное решение. Для оценки эффектов рассеяния вследствие неупорядоченности в пределе  $z \rightarrow 0$ , возьмем в качестве "затравочного" представление для  $g_{mk}(\omega)$  в виде /44/. Тогда, подставляя /44/ в /51/, получим

$$\begin{aligned}
& \{ \bar{\Phi} \cdot \bar{M}_q \cdot \bar{\Phi} \}_{a\beta} \approx N^{-1} \sum_q |\epsilon_{q-q'}|^2 \{ K_{q'}^{a\beta} + n_{-\sigma} n_{-\sigma}^\alpha \} \times \\
& \times \left\{ \frac{n_{-\sigma}}{\omega - U - \epsilon_{q-q'} n_{-\sigma}} + \frac{1 - n_{-\sigma}}{\omega - \epsilon_{q-q'} (1 - n_{-\sigma})} \right\}, \\
& /52/
\end{aligned}$$

откуда мы в явном виде можем найти сдвиг энергии и затухание вследствие неупругого рассеяния квазичастичных возбуждений, что является значительным преимуществом по сравнению с работой /18/, где явное вычисление аналитического вида массового оператора для различных поправок весьма затруднительно. Заметим, что вычисление корреляционной функции  $K_q^{a\beta}$  требует особого рассмотрения и потому в данной работе не проводится. Подобным же образом можно учесть и поправки резонансного уширения. Мы предполагаем рассмотреть этот вопрос отдельно. Заметим, что наличие явного выражения для поправок рассеяния /47/ позволяет учесть влияние последних на критерий ферромагнитного упорядочения в системе, поскольку статическая восприимчивость системы  $\chi$  выражается через функцию  $g(q, \omega)$ :

$$\chi = -\frac{2\mu_B}{N} \sum_{q\sigma} (\operatorname{sign} \sigma) \cdot \frac{d}{dH} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\omega n(\omega) \operatorname{Im} g(q, \omega + i\epsilon) \right\} |_{H=0} /53/$$

Более подробно этот вопрос будет рассмотрен в следующей работе.

## 6. Обсуждение

Таким образом, в настоящей работе удалось обобщить методику введения неприводимых частей функций Грина для случая очень сильной корреляции электронов и получить общее решение модели Хаббарда, дающее правильное поведение щели в спектре и являющееся обобщением решения "Хаббард III" и решения Рота<sup>/18, 24/</sup>. В отличие от указанных работ, наш метод позволяет последовательно рассмотреть влияние конечного времени жизни квазичастиц, которым в большинстве работ пренебрегается, и получить явные аналитические выражения для различных вкладов от эффектов рассеяния. Преимуществом метода является также использование в качестве функций Грина "нулевого порядка" недиагонального в узельном представлении выражения<sup>/35/</sup>. Наличие самосогласованной системы уравнений<sup>/46/</sup> и<sup>/51/</sup>, а также точного представления для массового оператора очень удобно при систематическом построении приближенных интерполяционных решений.

Развитый в настоящей работе метод весьма близок к методу Рота<sup>/24, 26/</sup> и методу моментов<sup>/15, 25, 27, 28/</sup>, отличаясь от них конкретным способом проектирования высших функций Грина на исходные. Как и методы<sup>/15, 24–28/</sup>, наш метод не является полностью самосогласованным, в том смысле, что не все возникающие корреляционные функции можно вычислить через исходные функции Грина, поскольку операторы  $d_{i\alpha\beta}$  и  $d_{j\beta\sigma}^+$  не образуют алгебру операторов. Для построения полностью самосогласованного решения необходимо, как указано в работах<sup>/22, 29/</sup>, пользоваться алгеброй операторов  $\{D\}$

$$\begin{aligned} D_i^1 &= n_{i\downarrow}^+ a_{i\uparrow}; \quad D_i^2 = n_{i\downarrow}^- a_{i\uparrow}; \quad D_i^3 = n_{i\uparrow}^+ a_{i\downarrow}; \quad D_i^4 = n_{i\uparrow}^- a_{i\downarrow}; \\ D_i^5 &= a_{i\uparrow}^+ a_{i\downarrow}; \quad D_i^6 = a_{i\uparrow}^- a_{i\downarrow}; \quad D_i^7 = n_{i\uparrow}; \quad D_i^8 = n_{i\downarrow}. \end{aligned} \quad /54/$$

Представляет интерес попытаться обобщить развитый подход для алгебры операторов  $\{D\}$ <sup>/54/</sup>. Метод также допускает расширение для случая модели Андерсона, для

которой недавно была развита теория корреляции<sup>/30/</sup> на основе уравнения Дайсона с "нулевой" функцией Грина вида<sup>/37/</sup>. Заметим, наконец, что не представляет особого труда обобщение данной техники на случай использования операторов Хаббарда  $\{X_i^{pq}\}$ <sup>/31/</sup>.

В заключение автор выражает глубокую благодарность профессору Вольфгангу Гётце за стимулирующие дискуссии, в результате которых появилась эта работа. Автор искренне признателен Н.М.Плакиде за внимание к работе и интересные обсуждения, а также Д.И.Хомскому, К.А.Кикоину, В.А.Капустину, Ю.Шрайбера за прочтение рукописи и полезные критические замечания.

## Литература

1. А.Л.Куземский. ОИЯИ, Р4-7225, Дубна, 1973.
2. Н.Н.Боголюбов, С.В.Тябликов. ДАН СССР, 126, 53, 1959.
3. С.В.Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. М., Наука, 1975.
4. J.Hubbard. Proc. Roy. Soc., A276, 238 (1963).
5. Н.М.Плакида. ТМФ 5, 147 /1970/, ФТГ 14, 2841 /1972/.
6. Н.М.Плакида. Phys.Lett., A43, 481 (1973).
7. Ю.А.Церковников. ДАН СССР, 143, 831 /1962/; ДАН СССР, 169, 1064 /1966/.
8. W.Götze, P.Wolfe. J.Low Temp. Phys., 5, 575 (1971).
9. W.Götze, P.Schliemann. Solid State Commun., 13, 17 (1973).
10. M.Ichiyama. J.Phys.Soc. Japan, 32, 604 (1972).
11. И.А.Квасников, В.Д.Озрин, В.П.Олейников. ИТФ-68-62, Киев, 1969; ИТФ-71-84Р, Киев, 1971.
12. В.Д.Озрин. ТМФ, 4, 66 /1970/.
13. Д.И.Хомский. ФММ 29, 31 /1970/.
14. D.M.Esterling. Phys.Rev., B2, 4686 (1970).
15. D.M.Esterling, H.C.Dubin. Phys.Rev., B6, 4276 (1972).
16. R.A.Bari. Phys.Rev., B2, 2260 (1970).
17. В.А.Капустин. ФТГ 16, 804 /1974/.
18. J.Hubbard. Proc. Roy. Soc., A281, 401 (1964).
19. J.L.Beeby. Theory of Magnetism in Transition Metals, Ed. W.Marschall (Academic Press, 1967), p. 87.

20. W.Weller et al. *Phys. Stat. Sol.*, 60, 783 (1973);  
*Phys. Stat. Sol.*, 66, 175 (1974); JINR, E4-8448,  
Dubna, 1974.
21. Ю.Г.Рудой, Ю.А.Церковников. ТМФ 14, 102 /1973/.
22. K.Elk. *Phys.Stat. Sol.*, 64, 489 (1974).
23. K.Schonhammer. *J.Phys.*, C7, 3520 (1974).  
24. L.M.Roth. *Phys.Rev.*, 184, 451 (1969).
25. R.A.Tahir-Kheli, H.S.Jarrett. *Phys.Rev.*, 180, 544 (1969).  
26. O.Krisement. *Z.Physik.*, 270, 383 (1974).
27. О.К.Калашников, Е.С.Фрадкин. ЖЭТФ, 55, 607  
/1968/.  
28. W.Nolting. *Z.Physik.*, 225, 25 (1972).
29. A.Pawlowski, B.Westwanski. *Phys.Lett.*, A43,  
201 (1973); B.Westwanski. *Acta Phys.Pol.*, A47,  
761 (1975).
30. W.Brenig, K.Schonhammer. *Z.Physik.*, 267, 201  
(1974).
31. J.Hubbard. *Proc. Roy. Soc.*, A285, 542 (1965).

Рукопись поступила в издательский отдел  
22 октября 1975 года.