

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



10/6-76

P-413

P17 - 9487

1768/2-76

Г.Репке, Т.Фраунхейм

ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОДЕЛИ ХАББАРДА
И МЕТОД КОНТИНУАЛЬНОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ

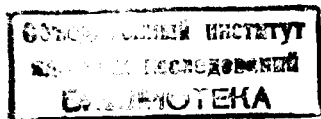
1976

P17 - 9487

Г. Репке, Т. Фраунхейм

ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОДЕЛИ ХАББАРДА
И МЕТОД КОНТИНУАЛЬНОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ

Направлено в журнал "Физика твердого тела"



1. Как известно, для изучения поведения системы сильно коррелирующих электронов в узких зонах /напр., V_2O_3 и соли TCNQ/ используется модель Хаббарда, которая характеризуется следующим гамильтонианом /1/ :

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = H^\wedge + H^U; \quad /1/$$

здесь $c_{i\sigma}^+$, $c_{i\sigma}$, $n_{i\sigma}$ - операторы рождения, уничтожения и числа заполнения электронов с проекцией спина $\sigma = \pm 1$ в узле i ; t_{ij} - интеграл перекрытия /мы полагаем $t_{ii} = 0$ / и U - параметр внутриаомного кулоновского взаимодействия. В модели /1/ пренебрегается взаимодействием электронов в различных узлах решетки. Рассматривается только одна невырожденная энергетическая зона, число электронов N_e равно числу узлов решетки N .

В пределе $U \rightarrow 0$ /зонный предел/ модель описывает квазисвободные электроны в металле, в пределе $t_{ij} \rightarrow 0$ /атомный предел/ - диэлектрик с локальными магнитными моментами, которые могут при низких температурах привести к дальнему магнитному порядку.

Такие динамические свойства, как динамическая магнитная восприимчивость $\chi(\vec{q}, \omega)$ или электропроводность $\sigma(\vec{q}, \omega)$ в этой модели до сих пор рассматривались только в атомном или зонном пределе /2-8/. Важной задачей является получение интерполяционного решения модели Хаббарда, которое описывает поведение системы вблизи перехода металл-диэлектрик, т.е. в области $\Delta/U \approx 1$, где $\Delta = (N^{-1} \sum_{ij} |t_{ij}|^2)^{1/2}$ - параметр ширины зоны. Метод кон-

тинуального интегрирования /3, 4, 9/ дает возможность найти приближенное решение модели в этой области $\Delta \approx U$. Например, исследуя статическую магнитную восприимчивость $\chi(\vec{q}, 0)$, в работе /9/ построили фазовую диаграмму

модели Хаббарда. Цель данной работы - найти приближенные выражения динамической магнитной и электрической восприимчивости с помощью метода континуального интегрирования вблизи $\Delta \approx U$.

2. Статические магнитные и электрические свойства в отсутствие внешнего поля получаются из производящего функционала /статсумма/

$$Z[B, C] = \text{Sp} \exp \left\{ -\beta H + \beta \sum_{i, \sigma} (\sigma B_i + C_i) n_{i\sigma} \right\}, \quad /2/$$

$$\chi^B(\vec{q}, 0) = \frac{\mu_B^2}{N\beta} \sum_{ij} e^{-i\vec{q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \frac{\delta^2 \ln Z}{\delta B_i \delta B_j} \Big|_{B_i=0, C_i=\mu}, \quad /3a/$$

$$\Pi(\vec{q}, 0) = \frac{1}{q^2} \frac{e^2}{N\beta} \sum_{ij} e^{-i\vec{q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \frac{\delta^2 \ln Z}{\delta C_i \delta C_j} \Big|_{B_i=0, C_i=\mu}, \quad /3b/$$

где химический потенциал μ определяется условием $\langle \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \rangle = N$.

С помощью континуального интегрирования можно найти формальное решение для $Z[B, C]$ /см. /3,9,10/ и Приложение/:

$$Z = Z_{U=0} \int \prod_i dx_{i0} dy_{i0} \prod_{n>0} d\text{Re} x_n d\text{Im} x_n d\text{Re} y_n d\text{Im} y_n e^{-\beta F[x, y]}, \quad /4/$$

где введен функционал свободной энергии

$$\beta F[x, y] = \pi \sum_i \left\{ \left(x_{i0} - \frac{\beta}{c} B_i \right)^2 + \left(y_{i0} - \frac{\beta}{ic} C_i \right)^2 + 2 \sum_{n>0} (|x_{in}|^2 + |y_{in}|^2) \right\} - \text{Sp} \ln(1 - vG^0), \quad /4a/$$

$$(v)_{ij, nn'}^{\sigma\sigma'} = -(\sigma c x_{i, n-n'} + ic y_{i, n-n'}) \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad /4b/$$

$$(G^0)_{ij, nn'}^{\sigma\sigma'} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{e^{ik(\vec{R}_i - \vec{R}_j)}}{i\omega_n - \beta\epsilon_k} \delta_{nn'} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad /4в/$$

Гриновская функция для невзаимодействующих электронов определяется через зонную энергию блоховских электронов /фурье-образ от t_{ij} /; $c = (\pi\beta U)^{1/2}$; $\omega_n = (2n+1)\pi$, $n = 0, \pm 1, \dots$.

Корреляционные функции выражаются через производные по внешним полям от статсуммы /4/, например,

$$\langle \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_i \frac{\delta \ln Z}{\delta C_i} = \frac{2\pi}{iC_i} \sum_i \langle y_{i0} \rangle + \frac{2}{U} \sum_i C_i = N, \quad /5/$$

где символ $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по стохастическим полям

$$\langle \dots \rangle = \frac{1}{Z} \int D^2 x_{in} D^2 y_{in} (\dots) e^{-\beta F[x, y]}. \quad /6/$$

В предположении, что F симметрична по y , из /5/ следует, что $\mu = U/2$ - известный результат для случая $N_c = N$.

Для нелокальных статических магнитной и электрической восприимчивостей имеем

$$\chi_{ij}^B(0) = \frac{\mu_B^2}{\beta} \frac{\delta^2 \ln Z}{\delta B_i \delta B_j} \Big|_{B_i=0, C_i=\mu} = \frac{4\pi\mu_B^2}{U} (\langle x_{i0} x_{j0} \rangle - \frac{\delta_{ij}}{2\pi}), \quad /7a/$$

$$\chi_{ij}^C(0) = \frac{e^2}{\beta} \frac{\delta^2 \ln Z}{\delta C_i \delta C_j} \Big|_{B_i=0, C_i=\mu} = -\frac{4\pi e^2}{U} (\langle y_{i0} y_{j0} \rangle - \frac{\delta_{ij}}{2\pi}), \quad /7b/$$

где мы ограничились неупорядоченной фазой $\langle x_{i0} \rangle = \langle y_{i0} \rangle = 0$.

Нелокальные динамические магнитные и электрические восприимчивости

$$\chi_{ij}^B(\omega) = \mu_B^2 i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \theta(t) \langle [m_i(t), m_j] \rangle, \quad /8a/$$

$$\chi_{ij}^C(\omega) = e^2 i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \theta(t) \langle [n_i(t), n_j] \rangle, \quad /8b/$$

где $m_i = n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}$, $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$, можно получить как аналитическое продолжение температурных гриновских функций в верхней полуплоскости ω /7,11/:

$$\chi_{ij}^B(i\frac{\Omega_n}{\beta}) = \beta \mu_B^2 \int_0^1 d\tau e^{i\Omega_n \tau} \langle T_\tau m_i(\tau) m_j \rangle, \quad /9a/$$

$$\chi_{ij}^C(i\beta^{-1}\Omega_n) = \beta e^2 \int_0^1 d\tau e^{i\Omega_n \tau} \langle T_\tau n_i(\tau) n_j \rangle, \quad /9б/$$

($\Omega_n = 2\pi n$). Эти корреляционные функции выражаются через флуктуации стохастических полей /см. Приложение/:

$$\chi_{ij}^B(i\beta^{-1}\Omega_n) = \frac{4\pi\mu_B^2}{U} (\langle x_{in} x_{j,-n} \rangle - \frac{\delta_{ij}}{2\pi}), \quad /10a/$$

$$\chi_{ij}^C(i\beta^{-1}\Omega_n) = -\frac{4\pi e^2}{U} (\langle y_{in} y_{j,-n} \rangle - \frac{\delta_{ij}}{2\pi}). \quad /10б/$$

Действительная часть электропроводности $\sigma(\vec{q}, \omega) = -i\omega\Pi(\vec{q}, \omega)$ связана с мнимой частью электрической восприимчивости

$$\text{Re}\sigma(\vec{q}, \omega) = \frac{\omega}{q^2} \frac{1}{N} \sum_{ij} \text{Im} \chi_{ij}^C(\omega) e^{-i\vec{q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)}. \quad /11/$$

Таким образом, получены точные выражения для динамических свойств модели Хаббарда в виде континуальных интегралов, которые справедливы также и в области $\Lambda \approx U$. Вычисление таких континуальных интегралов до сих пор возможно только при некоторых приближениях.

3. Вычисление континуальных интегралов /10а,б/ возможно только в определенных случаях. В общем случае необходимо сделать некоторые приближения. В методе континуального интегрирования для модели Хаббарда используются, например, следующие приближения^{/3,4,9,10/}

1. Локальное приближение, которое приводит к независимому интегрированию по различным узлам. В этом приближении в разложении функционала свободной энергии /см. /9/ /

$$F[x, y] = \sum_i F_1[x_i, y_i] + \sum_{i < j} F_2[x_i, y_i; x_j, y_j] + \dots \quad /12/$$

учитывается только первое слагаемое /т.е. $(G^{0\sigma})_{ij, nn}^{\sigma\sigma'} \sim \delta_{ij} /$.

2. Статическое приближение, в котором интегрирование производится независимо по различным частотам n . В этом приближении в разложении функционала свободной локальной энергии /см. /10/ /

$$\beta F_1[x_i, y_i] = \beta F_1^{\text{st}}(x_{i0}, y_{i0}) + 2\pi \sum_{n>0} (|x_{in}|^2 + |y_{in}|^2) - \text{Sp} \ln M, \quad /13a/$$

где

$$\beta F_1^{\text{st}}(x_{i0}, y_{i0}) = \pi(x_{i0}^2 + (y_{i0} + i\frac{\beta U}{2c})^2) - \text{Sp} \ln(1 - v_{i0}^{\sigma} G_{ii, n}^{0\sigma}), \quad /13б/$$

$$(M)_{ii, nn}^{\sigma\sigma'} = \delta_{nn} \delta_{\sigma\sigma'} - (1 - \delta_{nn}) v_{i, n-n}^{\sigma} [(G_{ii, n}^{0\sigma})^{-1} - v_{i0}^{\sigma}]^{-1} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad /13в/$$

пренебрегают недиагональными элементами матрицы M /т.е. $(v)_{ij, nn}^{\sigma\sigma'} \sim \delta_{nn} /$.

3. Приближение для гриновской функции /4б/ с целью получения аналитических выражений для F . Например, можно воспользоваться плотностью состояний Лоренца^{/3/}, которое дает

$$(G^{0\sigma})_{ii, nn}^{\sigma\sigma} = (i\omega + i\beta\Lambda \text{sign} \omega_n)^{-1}. \quad /14/$$

После этого континуальный интеграл перейдет в произведение обычных интегралов, которые можно вычислить в явном виде^{/3/}. Приближение, полученное таким образом, отличается от других приближений, например, в теории возмущений^{/10/}. Оно может описывать возникновение локальных магнитных моментов в модели Хаббарда вблизи $\Lambda \approx U$.

Обсудим приближения 1-3 в случае, когда нас интересует динамическая восприимчивость. Приближение для функции Грина /14/ мы не считаем очень серьезным, так как нас интересует только общая зависимость восприимчивости от ширины зоны Λ , но не от деталей зонной структуры. Использование более реальной гриновской

функции усложняет вычисление интегралов, но оно необходимо, например, если рассматривать возникновение дальнего порядка магнитных моментов /9/.

В локальном приближении /12/ зависимость восприимчивости от \vec{q} исчезает. Чтобы получить переход в дальнеупорядоченную фазу, необходимо улучшить локальное приближение. Последнее было сделано в /9/, где из разложения восприимчивости по z^{-1} / z - число соседей/ была получена фазовая диаграмма для модели Хаббарда. В данной работе мы не будем применять эту технику и, таким образом, ограничимся изучением локальной динамической восприимчивости.

Особый интерес состоит в разложении /13/, поскольку в статическом приближении $\chi(i\beta^{-1}\Omega_n) = 0$, $n \neq 0$. Очевидно, что для вычисления динамических свойств нужно выходить за пределы статического приближения. Улучшение статического приближения в модели Хаббарда рассмотрено до сих пор только в некоторых работах, - см. /3,4/.

4. Чтобы вычислить $\langle |x_n|^2 \rangle, \langle |y_n|^2 \rangle$ /10/, надо аккуратно учесть флуктуации полей x_n, y_n в $F[x_i, y_i]$. Мы будем рассматривать улучшение статического приближения, в котором точно учитывается зависимость F от $x_{i0}, y_{i0}, x_{in}, y_{in}$, а все остальные компоненты x_{im}, y_{im} , $m \neq 0, \pm n$ флуктуируют независимо.

Такое прямое обобщение статического приближения было получено в трактовке модели Андерсона с помощью континуального интегрирования /10,12/, где, кроме $n = 0$, точно учитывается вклад еще одной частоты $n \neq 0$ в функционал свободной энергии /13/. Если мы перенесем этот метод на модель Хаббарда, мы сможем точно учесть зависимость F от одновременных флуктуаций полей x_0, y_0, x_n, y_n любых амплитуд.

В методе, разработанном в /10,12/, имеем /опуская индекс i /

$$\exp\{\text{Sp} \ln M\} = \det M \approx \prod_{\sigma} \det D_n^{\sigma}, \quad /15a/$$

где

$$(D_n^{\sigma})_{mm'} = \delta_{mm'} + (\delta_{m,m'-n} + \delta_{m,m'+n}) M_{mm'}^{\sigma\sigma} \quad /15b/$$

- трехдиагональная матрица, которая зависит только от полей v_0^{σ} и v_n^{σ} . Смысл такого приближения детально обсужден в /10/.

Поскольку M и D_n^{σ} - бесконечные матрицы, их вычисление составляет сложную математическую задачу. Тем не менее, вычисление трехдиагонального определителя $\det D_n^{\sigma}$ произведено в работах /10,12/, где использовалась гриновская функция для плотности состояний Лоренца /14/:

$$\det D_n^{\sigma} = \prod_{k=0}^{n-1} \frac{\beta\Delta}{n\pi} \Gamma\left[\frac{1}{n}\left(k + \frac{1}{2} + \frac{\beta\Delta}{2\pi} - \frac{v_0^{\sigma}}{2\pi i}\right)\right] \Gamma\left[\frac{1}{n}\left(-k + n - \frac{1}{2} + \frac{\beta\Delta}{2\pi} + \frac{v_0^{\sigma}}{2\pi i}\right)\right] \times$$

$$\times \sum_{m_k=0}^{\infty} \frac{(v_n^{\sigma} v_{-n}^{\sigma})^{2m_k} \Gamma\left(\frac{\beta\Delta}{n\pi} + 2m_k\right) / \Gamma\left(\frac{\beta\Delta}{n\pi} + m_k + 1\right)}{\Gamma\left[m_k + \frac{1}{n}\left(k + \frac{1}{2} + \frac{\beta\Delta}{2\pi} - \frac{v_0^{\sigma}}{2\pi i}\right)\right] \Gamma\left[m_k + \frac{1}{n}\left(-k + n - \frac{1}{2} + \frac{\beta\Delta}{2\pi} + \frac{v_0^{\sigma}}{2\pi i}\right)\right]}$$

/16/

где $\Gamma(x)$ - гамма-функция. Ряд /16/ сходится, и мы рассматриваем в дальнейшем только нулевой и первый порядки по $(v_n^{\sigma} v_{-n}^{\sigma})$:

$$\det D_n^{\sigma} - 1 = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\beta\Delta}{n\pi} \frac{v_n^{\sigma} v_{-n}^{\sigma}}{4\pi^2} \left[\left(k + \frac{1}{2} + \frac{\beta\Delta}{2\pi} - \frac{v_0^{\sigma}}{2\pi i}\right) \times \right.$$

$$\left. \times \left(-k + n - \frac{1}{2} + \frac{\beta\Delta}{2\pi} + \frac{v_0^{\sigma}}{2\pi i}\right) \right]^{-1}. \quad /17/$$

В области очень низких температур $\beta\Delta \gg 1, \beta U \gg 1$ выражение /17/ можно разложить по степеням β^{-1} и провести суммирование по k :

$$\det D_n^{\sigma} - 1 = \frac{U}{\Delta} (|x_n|^2 - |y_n|^2 + 2\sigma i \text{Re}(x_n y_n^*)) \times$$

$$\times \left[\frac{1}{1 + (v_0^{\sigma}/\beta\Delta)^2} - \frac{2\pi n/\beta\Delta}{(1 + (v_0^{\sigma}/\beta\Delta)^2)^2} + \dots \right]. \quad /18/$$

Подставляя /18/, /15/, /13/ в /10/ и выполняя интегрирование по всем частотам кроме $m = 0$, получим

$$\begin{aligned} \langle |x_{in}|^2 \rangle - \frac{1}{2\pi} = -\langle |y_{in}|^2 \rangle + \frac{1}{2\pi} = & \left[\int dx_0 dy_0 e^{-\beta F_1^{st}} \right]^{-1} \times \\ & \times \frac{U}{4\pi^2 \Lambda} \int dx_0 dy_0 e^{-\beta F_1^{st}} \sum_{\sigma} \left[\left(1 + \frac{v^{\sigma}}{\beta \Lambda} \right)^{-1} - \frac{2\pi}{\beta \Lambda} \left(1 + \frac{v^{\sigma}}{\beta \Lambda} \right)^{-2} \right]. \end{aligned} \quad /19/$$

Таким образом, разложение /18/ по малым температурам приводит к простой зависимости $\chi(i\beta^{-1} \Omega_n)$ от n , так как нетрудно построить аналитическое продолжение в ω -плоскости. В данном случае получим постоянный и линейный по ω член в разложении $\chi(\omega)$ вблизи $\omega = 0$.

5. Обратимся к вычислению $\beta F_1^{st}(x_0, y_0)$ /136/. Сумма по матцубаровским частотам преобразуется в соответствующий интеграл в комплексной ω -плоскости

$$\sum_n f\left(\frac{i\omega_n}{\beta}\right) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_C \frac{e^{\beta \delta \omega} d\omega}{e^{\beta \omega} + 1} f(\omega), \quad /20/$$

где C обходит полюса функции Ферми в ω -плоскости в отрицательном направлении. Деформируя C , имеем при $\beta \rightarrow \infty$ в применении к /136/

$$\begin{aligned} \sum_n \ln(1 - v^{\sigma} G_n^{\sigma}) = & \frac{\beta \Lambda}{\pi} \ln |\Lambda| + \\ & + \frac{1}{2\pi i} (v^{\sigma} - i\beta \Lambda) \left[\ln |i\Lambda - v^{\sigma}/\beta| + \arctan \frac{\text{Im } v^{\sigma} - \beta \Lambda}{\text{Re } v^{\sigma}} \right] - \\ & - \frac{1}{2\pi i} (v^{\sigma} + i\beta \Lambda) \left[\ln |i\Lambda + v^{\sigma}/\beta| + \arctan \frac{\text{Im } v^{\sigma} + \beta \Lambda}{\text{Re } v^{\sigma}} \right] - \\ & - v^{\sigma} \theta(-\text{Re } v^{\sigma}), \end{aligned} \quad /21/$$

и, таким образом, имеем βF_1^{st} /136/ в явном виде.

Особый интерес представляет распределение минимумов x_0°, y_0° статической свободной энергии βF_1^{st} , в которых $\partial F_1^{st} / \partial x_0, \partial F_1^{st} / \partial y_0$ обращаются в ноль. Для $U > 0$ получим $y_0^{\circ} = 0$,

$$\frac{\partial^2 \beta F_1^{st}}{\partial y_0^2} \Big|_{x_0^{\circ}, y_0^{\circ}} = 2\pi + 2 \frac{U}{\Lambda} \left(1 + \frac{\pi U}{\beta \Lambda^2} x_0^{\circ 2} \right)^{-1}, \quad /22a/$$

а $x_0^{\circ} = 0$ только для $U/\Lambda < \pi$, хотя для $U/\Lambda > \pi$ мы получаем два минимума, определяемые из уравнения

$$x_0^{\circ} = \frac{c}{\pi^2} \arctan \frac{c x_0^{\circ}}{\beta \Lambda}. \quad /23/$$

Поведение F_1^{st} вблизи этих минимумов описывается через /22a/ и

$$\frac{\partial^2 \beta F_1^{st}}{\partial x_0^2} \Big|_{x_0^{\circ}, y_0^{\circ}} = 2\pi - 2 \frac{U}{\Lambda} \left(1 + \frac{\pi U}{\beta \Lambda^2} x_0^{\circ 2} \right)^{-1} \quad /22b/$$

Положение минимумов свободной энергии и ее второй производной в этих точках в зависимости от U/Λ показано на рис. 1. Там приведен и случай $U < 0$ / "attractive model" Хаббарда, см. /13//, где меняются ролями поля x_0, y_0 .

Расщепление минимума $x_0^{\circ} = 0$ на два минимума при $U/\Lambda = \pi$ интерпретируется как возникновение локальных магнитных моментов с двумя направлениями спина и значением, зависящим от U/Λ . Расщепление y_0° для $U/\Lambda = -\pi$ можно интерпретировать как возникновение зарядовых состояний, $\langle n_i \rangle \neq 1$, стабилизирующихся при возникновении дальнего порядка.

С помощью явного выражения для βF_1^{st} можно произвести интегрирование в /19/. Поскольку разложение по малым температурам является и разложением по степеням n , из /19/ получим $\chi_{ii}^{(0)}$ и $\partial \chi_{ii} / \partial \omega |_{\omega=0}$, заменяя n на $\beta \omega / 2\pi i$ /8-10/.

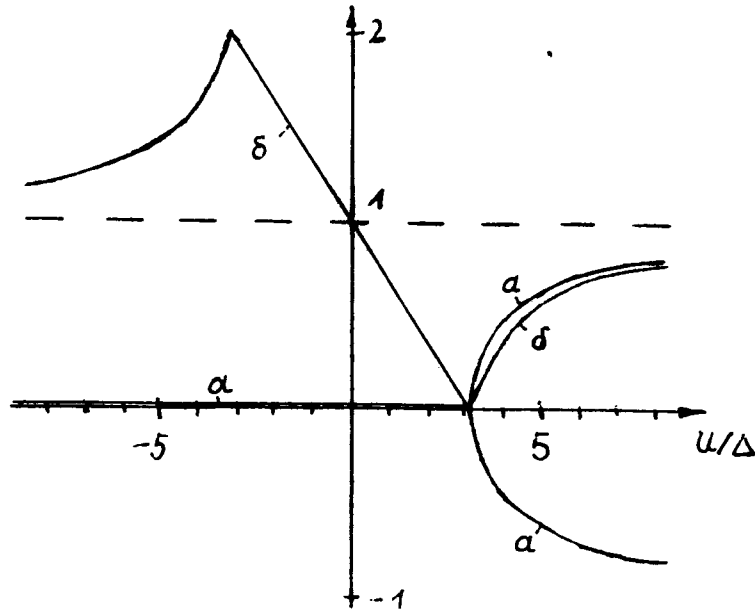


Рис. 1. Минимумы свободной энергии F_1^{st} и ее производной в этих точках в зависимости от U/Λ .

$$a - \frac{2\pi x_0^2}{c} \left(\frac{U}{\Lambda}\right) = \frac{2\pi y_0^2}{c} \left(-\frac{U}{\Lambda}\right),$$

$$\delta - \frac{1}{2\pi} \partial^2 \beta F_1^{st} \left(\frac{U}{\Lambda}\right) / \partial x_0^2 = \frac{1}{2\pi} \partial^2 \beta F_1^{st} \left(-\frac{U}{\Lambda}\right) / \partial y_0^2.$$

Применяя метод перевала, получим в зонном пределе ($U \ll \Lambda$)

$$\frac{1}{\mu_B^2} \chi_{ii}^B(\omega) = \frac{1}{e^2} \chi_{ii}^C(\omega) = \frac{2}{\pi\Lambda} + \frac{2i\omega}{\pi\Lambda^2}, \quad /24a/$$

а в атомном пределе ($\Lambda \ll U$)

$$\frac{1}{\mu_B^2} \chi_{ii}^B(\omega) = \frac{1}{e^2} \chi_{ii}^C(\omega) = \frac{2}{\pi\Lambda} A + \frac{2i\omega}{\pi\Lambda^2} A^2, \quad /24б/$$

где $A = (1 + \pi U x_0^2 / \beta \Lambda^2)^{-1}$.

Поведение $\chi_{ii}(0)$ и $\partial \chi_{ii} / \partial \omega |_{\omega=0}$ в зависимости от Δ/U , полученное из численного расчета, показано на рис. 2. Результат дает точное значение для $\Delta/U = 0, \infty$ и интерполирует решение в промежуточную область.

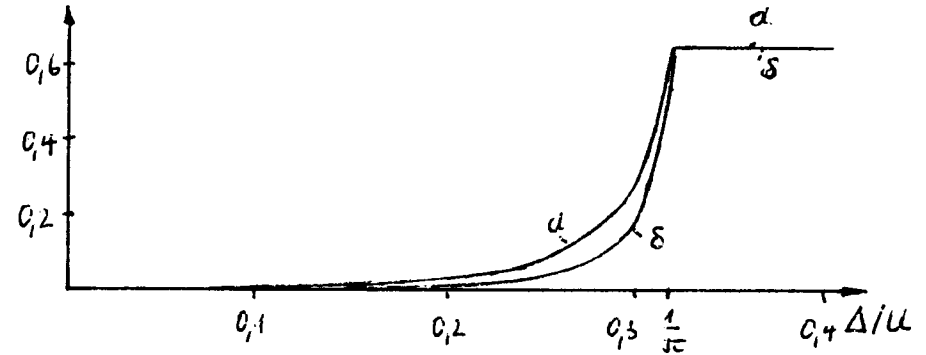


Рис. 2. Локальные динамические восприимчивости в приближении /15/-/18/

$$a - \frac{\Delta}{\mu_B^2} \operatorname{Re} \chi_{ii}^B(\omega \rightarrow 0) = \frac{\Delta}{e^2} \operatorname{Re} \chi_{ii}^C(\omega \rightarrow 0),$$

$$\delta - \frac{\Delta^2}{\mu_B^2} \partial \operatorname{Im} \chi_{ii}^B(\omega \rightarrow 0) / \partial \omega = \frac{\Delta^2}{e^2} \partial \operatorname{Im} \chi_{ii}^C(\omega \rightarrow 0) / \partial \omega.$$

Вблизи $\Delta/U = \pi^{-1}$ /это значение зависит от используемой плотности состояний/ динамические свойства резко меняются, но изменение с Δ/U непрерывно. Поскольку $\operatorname{Im} \chi_{ii}(\omega)$ связана с электропроводностью /11/, можно говорить о "металлической фазе" для $U/\Lambda \ll \pi$ и "диэлектрике" для $U/\Lambda \gg \pi$, но фазовый переход размазан /см. /9/ /.

Вопрос, существует ли при $T=0$ отношение Δ/U , при котором $\sigma(0,0)$ обратится в ноль, в данном приближении не решается. Для этого, нам кажется, необходимо использовать другие плотности состояний, не имеющие длинных "хвостов"/например, плотность состояний Лоренца/ и, кроме того, надо учитывать в /12/ связь между

различными узлами решетки, что приводит к возникновению дальнеупорядоченных фаз при низких температурах.

Улучшение статического приближения /13/, /15/, /16/ можно характеризовать на языке диаграммного разложения для /4/ таким образом, чтобы учитывались все диаграммы одного узла с частотами $\omega=0, 2\pi n$. Нам кажется важным учет этих частот потому, что n имеет "резонансный" характер, а в v_0^σ обнаружится неустойчивость при $U/\Lambda = \pi$. И поскольку мы ограничились вычислением $\chi(\omega)$ и $\partial \text{Im} \chi(\omega) / \partial \omega$ при $\omega = 0$, уширилось статическое приближение на частоты с $n = \pm 1$. В работе /10/ показано, что главный дополнительный вклад в $F_1^{st}(x_i, y_i)$ происходит от этих частот $\pm 2\pi$. Флуктуации других компонент полей x_{in}, y_{in} влияют на результат в особенности в области $U \approx \Lambda$.

Отметим, что $\chi_{ii}(0)$ нужно вычислить непосредственно из /7/, поскольку гриновские функции неаналитичны в этой точке. Для $\chi^B(q, \omega)$ действителен закон Кюри-Вейсса /более подробно см. в работе /9/ /.

Приложение

Чтобы понять смысл выражения /4/, коротко опишем вывод этой формулы /3,9,10/. Корреляционная часть N^U в /1/ переписывается в виде:

$$N^U = -\frac{U}{4} \sum_i (m_i^2 - n_i^2). \quad /A1/$$

Экспонента в /2/ с помощью тождества Фейнмана разлагается в Т-произведение экспоненциальных функций операторов, зависящих от фиктивного времени τ , $0 \leq \tau \leq 1$:

$$e^{A+B} = T_\tau e^{\int_0^1 d\tau A_\tau} e^{\int_0^1 d\tau B_\tau}. \quad /A2/$$

В результате применения тождества Стратоновича /14/ квадратичные члены /A1/ преобразуются в линейные за счет интегрирования по фиктивным полям $x_i(\tau), y_i(\tau)$:

$$Z = Z_{U=0} \int \prod_i D x_i(\tau) D y_i(\tau) \exp\{-\pi \int_0^1 d\tau \sum_i (x_i^2(\tau) + y_i^2(\tau))\} \times \\ \times \text{Sp} \{ T_\tau \exp\{-\int_0^1 d\tau [\beta H_\tau - \sum_{i\sigma} (\sigma c x_i(\tau) + \sigma \beta B_{i\sigma} + ic y_i(\tau) + \beta C_{i\sigma}) n_{i\sigma, \tau}]\} \}. \quad /A3/$$

Таким образом, вместо проблемы взаимодействующих электронов /1/ мы рассматриваем проблему движения не взаимодействующих электронов в стохастических полях $x_i(\tau), y_i(\tau)$ и усреднение по всем значениям полей. Поле $x_i(\tau)$ связано со спиновой плотностью $m_{i,\tau}$, а поле $y_i(\tau)$ - с зарядовой плотностью $n_{i,\tau}$.

Движение квазисвободных электронов в флуктуирующем внешнем поле решается обычным образом с помощью уравнения Дайсона для гриновских функций /3/, а после фурье-преобразования

$$x_{in} = \int_0^1 e^{i\Omega n \tau} x_i(\tau) d\tau + \frac{\beta}{c} B_i \delta_{n,0}, \quad /A4/$$

$$y_{in} = \int_0^1 e^{i\Omega n \tau} y_i(\tau) d\tau + \frac{\beta}{ic} C_i \delta_{n,0},$$

/ $x_{i,-n} = x_{in}^*$, $y_{i,-n} = y_{in}^*$, $n \neq 0$ / интегрирование по всем полям x_{in}, y_{in} приведет к выражению /4/.

Если мы подставим в /A3/ дифференциальный опера-

тор $\frac{1}{c^2 Z} \frac{\delta}{\delta x_j(\tau) \delta x_j(\tau')}$, действующий на выражение под

знаком шпура, получим корреляторы типа /9а,б/. Интегрируя по частям, имеем усреднение флуктуаций стохастического поля в виде /10а,б/.

Литература

1. J. Hubbard. Proc. Roy. Soc., A276, 238 (1963).
2. T. Izuyama, D. J. Kim, R. Kubo. J. Phys. Soc. Japan, 18, 1025 (1963); J. Hubbard, J. K. Jain. J. Phys., C1, 1650 (1968); W. Nolting. Phys. Stat. Sol. (b), 61, 99 (1974), 70, 505 (1975).

3. W.E.Evenson, J.R.Schrieffer, S.Q.Wang. *J.Appl. Phys.*, 41, 1199 (1970); J.R.Schrieffer, B.A.P. *Summer School, Banff*, 1969.
4. J.A.Hertz, M.A.Klenin. *Phys.Rev.*, B10, 1084 (1974).
5. K.Kubo. *J.Phys.Soc.Japan*, 31, 30 (1972).
6. R.A.Bari, T.A.Kaplan. *Phys.Rev.*, B6, 4623 (1972).
7. К.А.Кикоин, Г.Н.Флеров. *ФТТ-16*, 362 /1974/; 17, 835 /1975/.
8. W.Schiller, G.Roepke, V.Christoph. *Phys.Stat.Sol.*, Jan. 1976.
9. G.Roepke, B.Albani, W.Schiller. *Phys.Stat.Sol. (b)*, 69, 407 (1975).
10. H.Keiter, D.J.Amit, *J.Low Temp. Phys.*, 11, 603 (1973).
11. А.А.Абрикосов, А.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, М., Мир, 1962.
12. D.J.Amit, C.M.Bender. *Phys.Rev.*, B4, 3115 (1971).
13. P.Pincus, P.Chaikin, C.F. *Coll. Solid State Commun.*, 12, 1265 (1973).
14. П.Л.Стратонович. *ДАН СССР*, 115, 1097 /1957/.

Рукопись поступила в издательский отдел
27 января 1976 года.