

## Проблема основного состояния в модели Хаббарда при $U = \infty$

© Е.В. Кузьмин

Институт физики им. Л.В.Киренского Сибирского отделения Российской академии наук,  
660036 Красноярск, Россия

(Поступила в Редакцию 15 февраля 1996 г.

В окончательной редакции 7 июля 1996 г.)

В связи с проблемой основного состояния электронной системы в модели Хаббарда при  $U = \infty$  рассматривается нормальное (синглетное или немагнитное) N-состояние системы во всей области электронных концентраций  $n \leq 1$ . Показано, что в одночастичном приближении, например в обобщенном приближении Хартри–Фока, энергия N-состояния  $\varepsilon_0^{(1)}(n)$  ниже энергии насыщенного ферромагнитного состояния  $\varepsilon_{\text{FM}}(n)$  при всех  $n$ . В приближении случайных фаз вычислена динамическая магнитная восприимчивость и показано, что N-состояние стабильно во всей области электронных концентраций: статическая восприимчивость ( $\omega = 0$ ) при волновом векторе  $\mathbf{q} \rightarrow 0$  не имеет полюсной особенности. Получено формально точное представление для массового оператора одночастичной функции Грина и предложена его аппроксимация:  $M_{\mathbf{k}}(E) \simeq \lambda F(E)$ , где  $\lambda = n(1-n)/(1-n/2)z$  — параметр кинематического взаимодействия,  $z$  — число ближайших соседей,  $F(E)$  — полная одноузельная функция Грина. Для эллиптической плотности состояний интегральное уравнение относительно  $F(E)$  решено точно и показано, что спектральная интенсивность строго удовлетворяет правилу сумм. Вычисленная энергия сильно коррелированного N-состояния  $\varepsilon_0(n) < \varepsilon_{\text{FM}}(n)$  для всех  $n$ , в связи с чем обсуждается предположение об основном нормальном (синглетном) состоянии системы в термодинамическом пределе. Функция распределения электронов при  $T = 0$  существенно отличается от ферми-ступеньки: она "размазана" по всему энергетическому спектру, скачок в области химического потенциала отсутствует.

Модель Хаббарда [1] является основной моделью в теории сильно коррелированных электронных систем. Современное состояние теоретических исследований модели Хаббарда отражено в книгах [2,3] и в обзорах Изюмова [4,5] и Либа [6]. Либ отмечает, что после более чем 30-летнего исследования модели относительно ряда ее фундаментальных характеристик нет полной ясности.

Целью настоящей работы является обсуждение проблемы основного состояния электронной системы в модели Хаббарда в пределе бесконечной величины кулоновского отталкивания ( $U = \infty$ ). Запрет на появление "двоек" приводит к тому, что на каждом узле возможно существование лишь трех состояний:  $|0\rangle$ -дырка,  $|\alpha\rangle$ -электрон со спином "вверх" и  $|\beta\rangle$ -электрон со спином "вниз". Для описания электронных состояний и переходов между ними естественно использовать  $X$ -операторы Хаббарда, алгебра которых хорошо известна [1–3]. Гамильтониан модели  $H_\infty$  задается на  $D$ -мерной решетке из  $N$  узлов с координационным числом  $z$  и периодическими граничными условиями и описывает совокупность  $N_e$  электронов, туннелирующих на ближайшие незаполненные узлы решетки. Поскольку  $H_\infty$  содержит только один энергетический параметр  $t$  (интеграл туннелирования электрона на ближайший соседний узел решетки), его удобно обезразмерить на полуширину затравочной зоны  $zt$ . Гамильтониан и оператор числа электронов представим в виде

$$h_\infty = H_\infty / zt = \sum_{\mathbf{f}\Delta\sigma} \tau(\Delta) X_{\mathbf{f}}^{\sigma 0} X_{\mathbf{f}+\Delta}^{0\sigma}, \quad \hat{N}_e = \sum_{\mathbf{f}\sigma} X_{\mathbf{f}}^{\sigma\sigma}. \quad (1)$$

Здесь  $X_{\mathbf{f}}^{\sigma 0}$  — оператор перехода узла  $\mathbf{f}$  из дырочного состояния  $|0\rangle$  в одноэлектронное состояние  $|\sigma\rangle$ ,  $\Delta$  — вектор, соединяющий ближайшие соседние узлы (б.с.),  $\tau(\Delta) = -1/z$  только для б.с.,  $N_e$  — число электронов,  $N_0$  — число дырок ( $N = N_e + N_0$ ), концентрация электронов  $n = N_e/N$  может изменяться в пределах  $0 \leq n \leq 1$ . Наличие только трех состояний на узле отражается условием полноты

$$X_{\mathbf{f}}^{00} + X_{\mathbf{f}}^{\alpha\alpha} + X_{\mathbf{f}}^{\beta\beta} = 1. \quad (2)$$

Наряду с гамильтонианом  $N_e$ -электронная система характеризуется полным спином  $S$ , величина которого может принимать значения

$$S = S_{\text{max}}, \quad S_{\text{max}} - 1, \dots, S_{\text{min}}, \quad S_{\text{max}} = N_e/2, \quad (3)$$

где  $S_{\text{min}} = 0$  или  $1/2$ . Поскольку гамильтониан (1) коммутирует со всеми компонентами оператора полного спина системы  $\mathbf{S} = (S^+, S^-, S^z)$ , структура собственных  $N_e$ -электронных функций  $|\Psi_S\rangle$  и собственные значения  $E(S)$  уравнения Шриденгера  $h_\infty |\Psi_S\rangle = E(S) |\Psi_S\rangle$  зависят от  $S$ .

Все свойства системы с гамильтонианом  $h_\infty$  в термодинамическом пределе ( $N \rightarrow \infty$ ,  $N_e \rightarrow \infty$  при хорошо определенном значении  $n = N_e/N$ ) зависят только от топологии решетки (ее размерности  $D$ , числа б.с.  $z$ ), концентрации электронов  $n$  и величины полного спина  $S$ .

Возникает вопрос: какому значению  $S$  из набора (3) соответствует основное состояние системы (глобальный минимум  $E(S)$ ) в зависимости от концентрации электронов  $n$  при заданной геометрии решетки?

Предварительно отметим два важных факта. Во-первых, для гамильтонианов модели Хаббарда  $H_U$  и  $H_\infty$  имеется точное решение для любой размерности и топологий решетки и при любом допустимом числе электронов  $N_e$  — это насыщенное ферромагнитное состояние (ФМ) с  $S = S_{\max} = N_e/2$  (идеальный газ фермионов с одним направлением проекции спинов). Во-вторых, для одномерной замкнутой цепочки, как было показано Либом и Ву [7], в термодинамическом пределе основным является синглетное состояние ( $S = 0$ ).

История исследований проблемы основного состояния (ОС) в модели Хаббарда при  $U = \infty$  начинается с работы Нагаока [8], который доказал следующую теорему: на альтернантных решетках при наличии одной дырки ( $N_e = N - 1$ ) основным является ФМ-состояние с  $S = S_{\max}$  (позднее Тьян [9] доказал эту теорему более простым способом). К настоящему времени нет строгой теоремы относительно двух (и более) дырок. Многочисленные исследования привели к противоречивым прогнозам относительно структуры ОС.

С одной стороны, приводится аргументация в пользу того, что уже при двух дырках ФМ-состояние не является основным [10–14], а численные расчеты на малых кластерах показывают в целом устойчивую тенденцию к низкоспиновому ОС [15–18].

С другой стороны, утверждается, что ФМ-состояние стабильно в достаточно широкой области дырочных концентраций  $\delta = N_0/N < \delta_{\text{cr}}$  [3, 18–20] (критическая концентрация дырок  $\delta_{\text{cr}} \simeq 1/3$  для прямоугольной плотности состояний [3]).

С физической точки зрения очевидно, что в газовом пределе ( $n \ll 1$ ) дальний магнитный порядок отсутствует, так что подозрение на существование ферромагнетизма относится к высококонцентрационной области.

Точка зрения автора такова. В классе пространственно однородных состояний наиболее вероятно, что ОС системы является либо насыщенное ФМ-состояние ( $S = S_{\max}$ ), либо синглетное состояние ( $S = 0$  для четного числа электронов). В ФМ-состоянии каждая ячейка импульсного  $\mathbf{k}$ -пространства внутри Ферми-поверхности заполнена только одним электроном; по этой причине энергия Ферми максимальна при заданном числе электронов  $N_e$ . В синглетном состоянии существует возможность двойного заполнения  $\mathbf{k}$ -ячейки электронами с противоположными проекциями спинов. С одной стороны, это приводит к понижению химического потенциала; с другой стороны, корреляции между электронами с антипараллельными спинами приводят к их эффективному отталкиванию и повышению энергии системы. Конкуренция этих факторов в результате и определяет энергию синглетного состояния.

Цель данной работы — вычислить энергию синглетного состояния системы в модели с  $U = \infty$  и

сравнить ее с точной энергией ФМ-состояния, что позволит сделать вывод об ОС системы. Используется метод функций Грина, который содержит лишь общие требования к средним по волновой функции синглетного состояния. В дальнейшем под синглетным состоянием будем подразумевать немагнитное состояние, или по аналогии с обычными ферми-системами нормальное (N) сильно коррелированное состояние.

Поскольку при низких электронных концентрациях ОС заведомо не обладает дальним магнитным порядком, устойчивость N-состояния при повышении концентрации электронов может быть исследована путем расчета магнитной восприимчивости (поперечной или продольной) как функции частоты  $\omega$  и волнового вектора  $\mathbf{q}$ . Расходимость статической восприимчивости ( $\omega = 0$ ) при  $\mathbf{q} \rightarrow 0$ , если она имеет место при некоторой концентрации  $n_c$ , свидетельствует о неустойчивости N-состояния и возникновении ферромагнетизма при  $n > n_c$ .

## 1. Уравнение движения

Введем фурье-образцы фермиподобных ( $X_{\mathbf{k}\sigma}$ ) и бозеподобных ( $X^{\sigma\sigma'}(\mathbf{q})$ ) хаббардовских операторов

$$\begin{aligned} X_{\mathbf{k}\sigma} &= N^{-1/2} \sum_{\mathbf{f}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{f}} X_{\mathbf{f}}^{0\sigma}, \\ X^{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}) &= N^{-1/2} \sum_{\mathbf{f}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{f}} X_{\mathbf{f}}^{\sigma\sigma'}, \end{aligned} \quad (4)$$

где векторы  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{q}$  принадлежат первой зоне Бриллюэна. В импульсном представлении гамильтониан (1) и оператор числа электронов принимают вид

$$h_\infty = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \omega_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}\sigma}^+ X_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \hat{N}_e = \sum_{\mathbf{k}\sigma} X_{\mathbf{k}\sigma}^+ X_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (5)$$

где  $\omega_{\mathbf{k}}$  — безразмерный закон дисперсии электронов в приближении б.с.

$$\omega_{\mathbf{k}} = \sum_{\Delta} \tau(\Delta) e^{i\mathbf{k}\Delta} = -\gamma_{\mathbf{k}}. \quad (6)$$

Внешняя простота гамильтониана (5) иллюзорна. Используя перестановочные соотношения для  $X$ -операторов, получаем нелинейные уравнения движения ( $\hbar = 1$ )

$$i\dot{X}_{\mathbf{k}\sigma} = [X_{\mathbf{k}\sigma}, h_\infty] = c_\sigma \omega_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}\sigma} + R_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} R_{\mathbf{k}\sigma} &= N^{-1/2} \sum_{\mathbf{f}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{f}} \sum_{\Delta} \tau(\Delta) \left( X_{\mathbf{f}}^{\bar{\sigma}\sigma} X_{\mathbf{f}+\Delta}^{0\bar{\sigma}} - \nu_{\mathbf{f}\bar{\sigma}} X_{\mathbf{f}+\Delta}^{0\sigma} \right) \\ &= N^{-1/2} \sum_{\mathbf{p}} \omega_{\mathbf{p}} \left( X^{\bar{\sigma}\sigma}(\mathbf{k}-\mathbf{p}) X_{\mathbf{p}\bar{\sigma}} - \nu_{\bar{\sigma}}(\mathbf{k}-\mathbf{p}) X_{\mathbf{p}\sigma} \right), \\ &\quad \bar{\sigma} = -\sigma. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь  $c_\sigma = 1 - n_{\bar{\sigma}}$  и введен флуктуационный оператор

$$\nu_{\mathbf{f}\bar{\sigma}} = X_{\mathbf{f}}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} - \langle X_{\mathbf{f}}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \rangle = X_{\mathbf{f}}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} - n_{\bar{\sigma}}. \quad (9)$$

Нелинейность уравнений движения связана с наличием кинематических корреляций электронов с противоположными проекциями спинов; они обусловлены алгеброй  $X$ -операторов и являются прямым следствием эффекта исключенного объема — запрета на двойное заполнение узла.

В FM-состоянии имеем электроны только с одним направлением проекции спина, например  $\sigma = \alpha$ , тогда

$$i\dot{X}_{\mathbf{k}\alpha} = \omega_{\mathbf{k}} X_{\mathbf{k}\alpha}. \quad (10)$$

## 2. Функции Грина. Общие свойства

Общая схема расчета базируется на методе двухвременных температурных функций Грина, изложенном в работах Боголюбова [21], Тябликова [22] и др. Введем двухвременную запаздывающую ( $r$ ) антикоммутирующую функцию Грина

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^{(r)}(\tau) = -i\theta(\tau) \left\langle \left\{ X_{\mathbf{k}\sigma}(t_1), X_{\mathbf{k}\sigma}^+(t_2) \right\} \right\rangle, \quad \tau = t_1 - t_2, \quad (11)$$

и ее фурье-образ

$$\langle \langle X_{\mathbf{k}\sigma} | X_{\mathbf{k}\sigma}^+ \rangle \rangle_E \equiv G_{\mathbf{k}\sigma}^{(r)}(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{iE\tau} G_{\mathbf{k}\sigma}^{(r)}(\tau), \quad (12)$$

где  $E$  — спектральная переменная,  $\theta(\tau)$  — ступенчатая функция (символ  $r$  в дальнейшем будем опускать).

Функцию Грина удобно записать в виде

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = c_\sigma F_{\mathbf{k}\sigma}(E), \quad (13)$$

выделив одновременной антикоммутирующей  $\langle \{ X_{\mathbf{k}\sigma}, X_{\mathbf{k}\sigma}^+ \} \rangle = 1 - n_{\bar{\sigma}} \equiv c_\sigma$ . Введем спектральную интенсивность

$$N_{\mathbf{k}\sigma}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_{\mathbf{k}\sigma}(E + i0), \quad (14)$$

через которую на основании спектрального представления типа Лемана–Челлена находятся средние (здесь и далее рассматривается случай  $T = 0$ )

$$n_{\mathbf{k}\sigma} \equiv \langle X_{\mathbf{k}\sigma}^+ X_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = c_\sigma \int_{-\infty}^{\mu} N_{\mathbf{k}\sigma}(E) dE. \quad (15)$$

Спектральная интенсивность является вещественной положительно определенной функцией и должна подчиняться правилу сумм

$$\int_{-\infty}^{+\infty} N_{\mathbf{k}\sigma}(E) dE = 1. \quad (16)$$

Химический потенциал  $\mu$  находится из уравнения

$$n = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} n_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_\sigma \int_{-\infty}^{\mu} N_{\mathbf{k}\sigma}(E) dE, \quad (17)$$

где  $n$  — заданная концентрация электронов. После самосогласованного вычисления химического потенциала  $\mu = \mu(n)$  формула (15) определяет одночастичную функцию распределения  $n_{\mathbf{k}\sigma}$ . Энергия системы (на узел решетки) равна

$$\varepsilon = \langle k_{\infty} \rangle / N = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} c_\sigma \int_{-\infty}^{\mu} N_{\mathbf{k}\sigma}(E) dE. \quad (18)$$

Все вычисления будут проводиться в термодинамическом пределе, и поэтому систематически используется прием замены суммы интегралом

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} F(\omega_{\mathbf{k}}) = \int_{-1}^{+1} D(\omega) F(\omega) d\omega, \quad \int_{-1}^{+1} D(\omega) d\omega = 1, \quad (19)$$

где  $D(\omega)$  — плотность состояний, соответствующая закону дисперсии  $\omega_{\mathbf{k}}$  (для альтернантных решеток  $D(\omega) = D(-\omega)$ ,  $-1 \leq \omega_{\mathbf{k}} \leq 1$ ).

Для FM-состояния имеем точное решение

$$G_{\mathbf{k}\alpha}(E) = (E - \omega_{\mathbf{k}})^{-1}, \quad -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\mathbf{k}\alpha}(E + i0) = \delta(E - \omega_{\mathbf{k}}),$$

из которого после использования спектральных соотношений следует

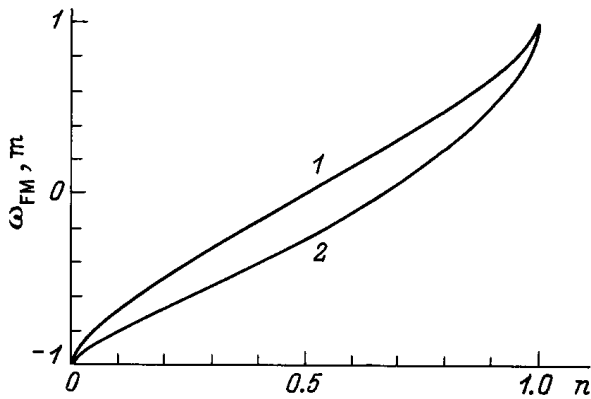
$$n = \int_{-1}^{\omega_{\text{FM}}} D(\omega) d\omega \equiv g(\omega_{\text{FM}}), \quad (20)$$

$$\varepsilon_{\text{FM}} = \int_{-1}^{\omega_{\text{FM}}} \omega D(\omega) d\omega \equiv v(\omega_{\text{FM}}).$$

Здесь  $\omega_{\text{FM}}(n)$  — энергия Ферми в насыщенном ферромагнитном состоянии,  $\varepsilon_{\text{FM}}$  — энергия системы (на узел решетки). Исключая верхний предел в этих интегралах, можно найти явную концентрационную зависимость  $\varepsilon_{\text{FM}}(n)$ .

## 3. Одночастичное приближение

Одночастичное приближение соответствует тому или иному способу линеаризации уравнения (7). Простейшим из них является приближение "Хаббард-I" (аналог расщепления Тябликова [22] на разных узлах), которое уже учтено в линейном члене этого уравнения за счет введения флуктуационного оператора (9). Возможна также дальнейшая линеаризация оператора  $R_{\mathbf{k}\sigma}$ , соответствующая обобщенному



**Рис. 1.** Концентрационная зависимость химического потенциала (энергии Ферми) в насыщенном ферромагнитном состоянии  $\omega_{FM}(n)$  (1) и эффективного химического потенциала  $m(n)$  (2) в нормальном состоянии для эллиптической плотности состояний.

приближению Хартри–Фока (ОПХФ). Она основана на введении неприводимого оператора  $\tilde{R}_{k\sigma}$  [22–26]

$$\tilde{R}_{k\sigma} = R_{k\sigma} - \frac{\langle \{R_{k\sigma}, X_{k\sigma}^+\} \rangle}{\langle \{X_{k\sigma}, X_{k\sigma}^+\} \rangle} X_{k\sigma} \equiv R_{k\sigma} - \frac{a_{k\sigma}}{c_\sigma} X_{k\sigma}, \quad (21)$$

обладающего свойством ”ортогональности”:  $\langle \{ \tilde{R}_{k\sigma}, X_{k\sigma}^+ \} \rangle = 0$ . С учетом (21) уравнение движения (7) принимает вид

$$\begin{aligned} i\dot{X}_{k\sigma} &= \Omega_{k\sigma} X_{k\sigma} + \tilde{R}_{k\sigma}, \\ \Omega_{k\sigma} &= c_\sigma \omega_k + \frac{a_{k\sigma}}{c_\sigma} \equiv A_\sigma + B_\sigma \omega_k, \\ A_\sigma &= \frac{|\varepsilon_{\bar{\sigma}}|}{c_\sigma}, \quad B_\sigma = c_\sigma + \frac{\varkappa_{\bar{\sigma}}}{c_\sigma}. \end{aligned} \quad (22)$$

Спектр в ОПХФ  $\Omega_{k\sigma}$  содержит сдвиг спиновой подзоны  $A_\sigma$ , где  $\varepsilon_{\bar{\sigma}}$  — энергия подсистемы электронов с проекцией спина  $\bar{\sigma}$ , и дополнительную (по сравнению с приближением Хаббард-I) модификацию дисперсии  $B_\sigma$ , где

$$\varkappa_\sigma = \frac{1}{N} \sum_f \langle X_f^{\bar{\sigma}\sigma} X_{f+\Delta}^{\sigma\bar{\sigma}} + \nu_{f\bar{\sigma}} \nu_{f+\Delta, \bar{\sigma}} \rangle \quad (23)$$

— корреляционная функция в первой координационной сфере (для б.с.).

В ОПХФ пренебрегают неприводимым оператором  $\tilde{R}_{k\sigma}$ , тогда

$$G_{k\sigma}^{(RPA)}(E) \equiv G_{k\sigma}^{(1)}(E) = c_\sigma / (E - \Omega_{k\sigma}). \quad (24)$$

Таким образом в любом одночастичном приближении (символ (1)) функция Грина имеет простой полюс, и поэтому функция распределения при  $T = 0$  является ступенькой.

Рассмотрим нормальное состояние в ОПХФ (все характеристики системы не зависят от проекции спина:

$n_\alpha = n_\beta = n/2$ ,  $c_\alpha = c_\beta = c = 1 - n/2$  и т.д.) с электронным спектром  $\Omega_k = A(n) + B(n)\omega_k$ . Функция распределения имеет вид

$$n_k = c \int_{-\infty}^{\mu} \delta[E - (A + B\omega_k)] dE = c\theta(m - \omega_k) \equiv cf_k, \quad (25)$$

где  $m = (\mu - A)/B$ . Перенормированный химический потенциал  $m$  и энергия системы в  $N$ -состоянии в одночастичном приближении  $\varepsilon_0^{(1)}(n)$  выражаются через ранее введенные функции  $g$  и  $v$  (см. (20))

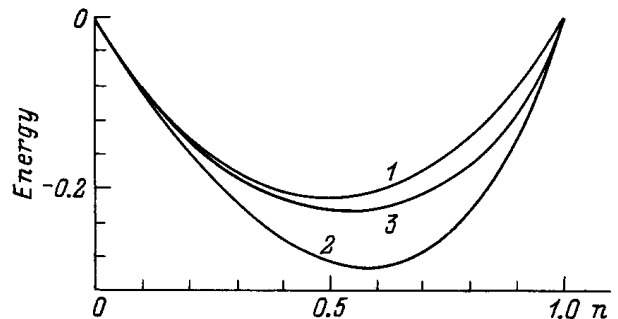
$$n/(2 - n) = g(m), \quad \varepsilon_0^{(1)}(n)/(2 - n) = v(m). \quad (26)$$

Важно отметить, что детали спектра (коэффициенты  $A$  и  $B$ ) не входят в окончательную концентрационную зависимость  $\varepsilon_0^{(1)}(n)$ , так как верхний предел в обоих интегралах исключается (аналогичная ситуация имеет место и для соотношений (20) в ФМ-случае).

Сопоставление соотношений (20) и (26) показывает, что при любой плотности состояний и для произвольной концентрации электронов  $n$  энергия нормального состояния, вычисленная в одночастичном приближении, ниже энергии насыщенного ферромагнитного состояния

$$\varepsilon_0^{(1)}(n) \leq \varepsilon_{FM}(n) \quad (27)$$

(знак равенства имеет место только при  $n = 0$  и  $1$ , когда обе энергии обращаются в нуль). В качестве иллюстрации на рис. 1 и 2 показаны зависимости  $\omega_{FM}(n)$ ,  $m(n)$  и энергии  $\varepsilon_{FM}(n)$ ,  $\varepsilon_0^{(1)}(n)$  для эллиптической плотности состояний. Неравенство (27) отражает лишь первый из указанных ранее факторов — энергетическую выгодность нормального состояния за счет понижения химического потенциала системы. Учету корреляций посвящены разделы 5–7.



**Рис. 2.** Концентрационная зависимость энергии системы (на узел решетки) для эллиптической плотности состояний. 1 —  $\varepsilon_{FM}(n)$  в насыщенном ФМ-состоянии (точное решение), 2 —  $\varepsilon_0^{(1)}(n)$  в нормальном состоянии (одночастичное приближение), 3 —  $\varepsilon_0(n)$  в нормальном состоянии с учетом кинематических корреляций (см. раздел 6).

#### 4. Приближение случайных фаз

Динамическая магнитная восприимчивость системы по отношению к внешнему малому магнитному полю с волновым вектором  $\mathbf{q}$  и частотой  $\omega$ , согласно теории линейной реакции [22], выражается через фурье-образ запаздывающей коммутаторной функции Грина

$$\chi^{ij}(\mathbf{q}, \omega) = -\langle\langle S^i(\mathbf{q})|S^j(-\mathbf{q})\rangle\rangle_{\omega+i0}, \quad (28)$$

где  $i, j$  — проекция спиновых операторов (+, -, z).

Поперечная функция Грина строится на операторах  $S^+(\mathbf{q})$  и  $S^(-\mathbf{q})$ , которые для модели Хаббарда при  $U = \infty$  имеют вид

$$S^+(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{f}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{f}} X_{\mathbf{f}}^{\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{p}} X_{\mathbf{p}\alpha}^+ X_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta},$$

$$S^(-\mathbf{q}) = \left(S^+(\mathbf{q})\right)^+. \quad (29)$$

На основании (7) имеем точное уравнение ( $\hbar = 1$ )

$$i \frac{d}{dt} \left(X_{\mathbf{p}\alpha}^+ X_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta}\right) = \left(c_{\beta}\omega_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - c_{\alpha}\omega_{\mathbf{p}}\right) X_{\mathbf{p}\alpha}^+ X_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta} + \left(X_{\mathbf{p}\alpha}^+ R_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta} - R_{\mathbf{p}\alpha}^+ X_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta}\right), \quad (30)$$

где

$$R_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \left(X_{\mathbf{k}\alpha} S^+(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) - X_{\mathbf{k}\beta} \nu_{\alpha}(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k})\right), \quad (31)$$

$$R_{\mathbf{p}\alpha}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \left(S^+(\mathbf{k} - \mathbf{p}) X_{\mathbf{k}\beta}^+ - \nu_{\beta}(\mathbf{k} - \mathbf{p}) X_{\mathbf{k}\alpha}^+\right). \quad (32)$$

Используя (30), получаем уравнение для запаздывающей коммутаторной функции Грина в виде

$$(\omega - \Omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}) \langle\langle X_{\mathbf{p}\alpha}^+ X_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta} | S^(-\mathbf{q}) \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{\sqrt{N}} (n_{\mathbf{p}\alpha} - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta}) - \langle\langle R_{\mathbf{p}\alpha}^+ X_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta} - X_{\mathbf{p}\alpha}^+ R_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta} | S^(-\mathbf{q}) \rangle\rangle_{\omega}, \quad (33)$$

где  $\Omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}} = c_{\beta}\omega_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - c_{\alpha}\omega_{\mathbf{p}}$ .

Известно, что приближение случайных фаз (ПСФ) соответствует линеаризации уравнений по отношению к исходной операторной структуре и осуществляется путем спаривания "внешних" операторов ( $X_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta}$  и  $X_{\mathbf{p}\alpha}^+$ ). В ПСФ имеем

$$R_{\mathbf{p}\alpha}^+ X_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} S^+(\mathbf{k} - \mathbf{p}) \langle X_{\mathbf{k}\beta}^+ X_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta} \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta} \omega_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} S^+(\mathbf{q}),$$

$$X_{\mathbf{p}\alpha}^+ R_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \langle X_{\mathbf{p}\alpha}^+ X_{\mathbf{k}\alpha} \rangle S^+(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} n_{\mathbf{p}\alpha} \omega_{\mathbf{p}} S^+(\mathbf{q}). \quad (34)$$

В результате уравнение (33) в ПСФ принимает вид

$$(\omega - \Omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}) \langle\langle X_{\mathbf{p}\alpha}^+ X_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta} | S^(-\mathbf{q}) \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{\sqrt{N}} \left( (n_{\mathbf{p}\alpha} - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta}) - J_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \langle\langle S^+(\mathbf{q}) | S^(-\mathbf{q}) \rangle\rangle_{\omega} \right),$$

$$J_{\mathbf{p}\mathbf{q}} = n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta} \omega_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - n_{\mathbf{p}\alpha} \omega_{\mathbf{p}}. \quad (35)$$

Стандартным способом из (35) находим  $\langle\langle S^+(\mathbf{q}) | S^(-\mathbf{q}) \rangle\rangle_{\omega}$  и далее в соответствии с (28) определяем поперечную восприимчивость

$$\chi^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_0^{+-}(\mathbf{q}, \omega)}{1 + J(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (36)$$

$$\chi_0^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\beta} - n_{\mathbf{p}\alpha}}{\omega - \Omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}},$$

$$J(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \frac{J_{\mathbf{p}\mathbf{q}}}{\omega - \Omega_{\mathbf{p}\mathbf{q}}}. \quad (37)$$

Продольная восприимчивость  $\chi^{zz}(\mathbf{q}, \omega)$  вычисляется аналогично.

Рассмотрим  $N$ -состояние и исследуем его устойчивость (или неустойчивость) по отношению к возникновению ферромагнетизма. Для этого найдем статическую восприимчивость ( $\omega = 0$ ) при  $\mathbf{q} \rightarrow 0$ . Вычисляя пределы

$$\lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \chi_0^{+-}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \left( -\frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \omega_{\mathbf{p}}} \right) \equiv \chi_0(0, 0), \quad (38)$$

$$\lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} J(\mathbf{q}, 0) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \left( f_{\mathbf{p}} + \omega_{\mathbf{p}} \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \omega_{\mathbf{p}}} \right) = -\frac{n/2}{1 - (n/2)} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \left( -\frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \omega_{\mathbf{p}}} \right) \quad (39)$$

и подставляя их в (36), находим

$$\chi^{+-}(0, 0) = \frac{\chi_0(0, 0)}{\frac{1 - n}{1 - (n/2)} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \left( -\frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \omega_{\mathbf{p}}} \right)}. \quad (40)$$

В одночастичном приближении (см. (25), (26))

$$f_{\mathbf{p}} = \theta(m - \omega_{\mathbf{p}}), \quad -\frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \omega_{\mathbf{p}}} = \delta(m - \omega_{\mathbf{p}}), \quad \frac{n}{2 - n} = g(m)$$

и восприимчивость (40) принимает вид

$$\chi^{+-}(0, 0) = \frac{D(m)}{\frac{1 - n}{1 - (n/2)} + mD(m)}, \quad (41)$$

где  $D(m)$  — плотность состояний при значении эффективного химического потенциала  $m$ .

Анализ показывает, что восприимчивость (41) полюсной особенности не имеет при любых допустимых электронных концентрациях  $n$  и при всех плотностях состояний  $D(\omega)$ , соответствующих альтернантным решеткам (включая плотность состояний с логарифмической особенностью). Следовательно, нормальное (немагнитное) состояние является устойчивым по отношению к возникновению ферромагнитной фазы.

Этот вывод согласуется с результатом предыдущего раздела, а также с работой Хаббарда и Джейна [27], но противоречит выводам Изюмова и Летфулова (см. [3]), которые получили выражение для восприимчивости, расходящееся при некоторой критической концентрации электронов  $n_c$ , что свидетельствует о возникновении ферромагнетизма при  $n > n_c$ . В задачу автора не входит критический анализ этого метода и использованного в [3] приближения. В рамках метода уравнений движения линеаризация (34) очевидна и приводит к легко прослеживаемому результату (36)–(41).

## 5. Уравнение Дайсона и аппроксимация массового оператора

Уравнение Дайсона для рассматриваемой модели получено в работе автора [28]. Функция Грина имеет вид

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{c_\sigma}{E - \Omega_{\mathbf{k}\sigma} - M_{\mathbf{k}\sigma}(E)},$$

$$M_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{1}{c_\sigma} \langle\langle R_{\mathbf{k}\sigma} | R_{\mathbf{k}\sigma}^+ \rangle\rangle_E^{\text{con}}. \quad (42)$$

Массовый оператор  $M_{\mathbf{k}\sigma}(E)$  является связанной частью (не разрезаемой по линии  $G_{\mathbf{k}\sigma}^{\text{(RPA)}}$  графического представления) высшей гриновской функции и учитывает все корреляции вне рамок этого приближения. Представление функции Грина в виде (42) является формально точным. Отметим, что такой способ представления массового оператора неоднократно использовался (см., например, [22,26]).

Вычисление массового оператора  $M_{\mathbf{k}\sigma}(E)$  представляет собой исключительно трудную задачу (отсутствие малого параметра). Предлагаемая аппроксимация состоит в расщеплении высшей гриновской функции по следующей схеме:

$$\begin{aligned} \langle\langle R_{\mathbf{k}\sigma} | R_{\mathbf{k}\sigma}^+ \rangle\rangle_E^{\text{con}} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \omega_{\mathbf{p}} \omega_{\mathbf{p}'} \langle\langle X^{\sigma\sigma}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) X_{\mathbf{p}\sigma} \\ &- \nu_{\bar{\sigma}}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) X_{\mathbf{p}\sigma} | X^{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{k}-\mathbf{p}') X_{\mathbf{p}'\bar{\sigma}}^+ - \nu_{\bar{\sigma}}(\mathbf{k}-\mathbf{p}') X_{\mathbf{p}'\sigma}^+ \rangle\rangle_E^{\text{con}} \\ &\simeq \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \omega_{\mathbf{p}}^2 \langle\langle X^{\sigma\sigma}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) X^{\sigma\bar{\sigma}}(\mathbf{k}-\mathbf{p}) \rangle\rangle G_{\mathbf{p}\bar{\sigma}}(E) \\ &+ \langle\langle \nu_{\bar{\sigma}}(\mathbf{p}-\mathbf{k}) \nu_{\bar{\sigma}}(\mathbf{k}-\mathbf{p}) \rangle\rangle G_{\mathbf{p}\sigma}(E). \end{aligned} \quad (43)$$

Рассмотрим синглетное состояние системы при  $T = 0$ . Усреднение в (43) проводится по  $N_e$ -электронной синглетной ( $S = 0$ ) волновой функции  $|\Psi_0\rangle = |0\rangle$ , которая обладает свойствами

$$S^z|0\rangle = 0, \quad \mathbf{S}^2|0\rangle = 0, \quad \hat{N}_e|0\rangle = N_e|0\rangle. \quad (44)$$

В синглетном состоянии гриновские функции и все средние не зависят от спиновых проекций

$$G_{\mathbf{p}\sigma}(E) = G_{\mathbf{p}\bar{\sigma}}(E) = G_{\mathbf{p}}(E) = (1 - (n/2)) F_{\mathbf{p}}(E),$$

$$\langle 0 | X_{\mathbf{f}}^{\alpha\beta} X_{\mathbf{m}}^{\beta\alpha} | 0 \rangle = \langle 0 | X_{\mathbf{f}}^{\beta\alpha} X_{\mathbf{m}}^{\alpha\beta} | 0 \rangle,$$

$$\langle 0 | X_{\mathbf{f}}^{\alpha\alpha} X_{\mathbf{m}}^{\alpha\alpha} | 0 \rangle = \langle 0 | X_{\mathbf{f}}^{\beta\beta} X_{\mathbf{m}}^{\beta\beta} | 0 \rangle.$$

Учитывая эту спиновую изотропность, из (43) получаем следующее выражение для массового оператора в синглетном состоянии системы:

$$M_{\mathbf{k}}(E) \simeq \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \omega_{\mathbf{p}}^2 L(\mathbf{p}-\mathbf{k}) F_{\mathbf{p}}(E), \quad (45)$$

где

$$L(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \varkappa(\mathbf{r}), \quad (46)$$

$$\varkappa(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{f}} \langle 0 | \mathbf{S}_{\mathbf{f}} \mathbf{S}_{\mathbf{f}+\mathbf{r}} + \frac{1}{4} (\hat{n}_{\mathbf{f}} \hat{n}_{\mathbf{f}+\mathbf{r}} - n^2) | 0 \rangle. \quad (47)$$

Фурье-образ  $L(\mathbf{q})$  обладает следующими свойствами: его среднее значение по зоне Бриллюэна сводится к одноузельному коррелятору  $\varkappa(0) = n(1 - (n/4))$ , а из свойств (44) следует, что при  $\mathbf{q} = 0$  значение  $L(0) = 0$ . Для  $L(\mathbf{q})$  имеем следующее эквивалентное представление:

$$L(\mathbf{q}) = \langle 0 | \mathbf{S}(\mathbf{q}) \mathbf{S}(-\mathbf{q}) | 0 \rangle + \frac{1}{4} \langle 0 | \nu(\mathbf{q}) \nu(-\mathbf{q}) | 0 \rangle, \quad (48)$$

где  $\mathbf{S}(\mathbf{q})$  — оператор спиновой плотности,  $\nu(\mathbf{q})$  — оператор флуктуаций плотности. Фигурирующие в (48) средние вычисляются через соответствующие функции Грина, причем из-за спиновой изотропности

$$\langle 0 | \mathbf{S}(\mathbf{q}) \mathbf{S}(-\mathbf{q}) | 0 \rangle = \frac{3}{2} \langle 0 | S^+(\mathbf{q}) S^-(\mathbf{q}) | 0 \rangle. \quad (49)$$

При  $T = 0$  имеем

$$\begin{aligned} \langle 0 | S^+(\mathbf{q}) S^-(\mathbf{q}) | 0 \rangle &= \int_0^\infty d\omega \left( \frac{1}{\pi} \right) \\ &\times \text{Im} \langle\langle S^+(\mathbf{q}) | S^-(\mathbf{q}) \rangle\rangle_{\omega+i0} \equiv \sigma(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (50)$$

$$\begin{aligned} \langle 0 | \nu(\mathbf{q}) \nu(-\mathbf{q}) | 0 \rangle &= \int_0^\infty d\omega \left( -\frac{1}{\pi} \right) \\ &\times \text{Im} \langle\langle \nu(\mathbf{q}) | \nu(-\mathbf{q}) \rangle\rangle_{\omega+i0} \equiv P(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (51)$$

Поперечная спиновая функция Грина вычислена в разделе 4 в приближении случайных фаз (см. (28), (37) и (38)). Поскольку ферромагнитная неустойчивость отсутствует (восприимчивость остается конечной при любых  $\mathbf{q}$  и  $\omega$  и при произвольной электронной концентрации),  $\sigma(\mathbf{q})$  вычислим в нулевом приближении, используя выражение для  $\chi_0^{\pm}(\mathbf{q}, \omega)$  с функцией распределения (25)

$$\sigma_0(\mathbf{q}) = \int_0^\infty d\omega \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} (n_{\mathbf{p}} - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \delta[\omega - c(\omega_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{p}})]. \quad (52)$$

Интеграл отличен от нуля, если  $\omega_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{p}} > 0$ , что реализуется при  $n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} = 0$  (состояние с энергией  $\omega_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} > m$  свободно) и  $n_{\mathbf{p}} = c = 1 - n/2$  (состояние с энергией  $\omega_{\mathbf{p}} \leq m$  занято),  $m$  — эффективный химический потенциал, т.е.

$$\sigma_0(\mathbf{q}) = \left(1 - (n/2)\right) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \theta(\omega_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - m) \theta(m - \omega_{\mathbf{p}}). \quad (53)$$

Выражение (53) является (с точностью до множителя) аналогом статического формфактора для идеального ферми-газа [29]. Однако в рассматриваемом случае модели Хаббарда имеет место иной характер заполнения электронами импульсного пространства, а также возникают эффекты, связанные с границами зоны Бриллюэна. В уравнении (26)  $n/(2 - n) = g(m)$  для эффективного химического потенциала  $m$  функция  $g(m)$  имеет простой геометрический смысл: это доля объема зоны Бриллюэна внутри изоэнергетической поверхности  $\omega = m$ . Рассмотрим частные случаи на примере простой кубической (или квадратной) решетки.

а) В окрестности центра зоны Бриллюэна ( $\mathbf{p} = 0$ ) изоэнергетические поверхности  $\omega_{\mathbf{p}}$  приближенно являются сферическими; в случае малой электронной концентрации ( $n \ll 1$ ) фермиевская поверхность также есть сфера радиуса  $p_F$ , причем малость  $n$  означает, что  $2p_F < \pi/a$ . Область допустимых значений  $\mathbf{p}$ , для которых выполняются условия  $\omega_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} > m$  и  $\omega_{\mathbf{p}} < m$  при фиксированном векторе  $\mathbf{q}$ , изображается "полумесяцем" на рис. 3,а (см. [29]). Его объем и определяет значение искомой суммы. Учитывая характер заполнения, находим

$$\sigma_0(\mathbf{q}) = \left(1 - \frac{n}{2}\right) \frac{n}{(2 - n)} S^0\left(\frac{q}{2p_F}\right),$$

$$S^0(x) = \begin{cases} \frac{3}{2}x - \frac{1}{2}x^3, & x < 1, \\ 1, & x \geq 1, \end{cases} \quad (54)$$

где  $x = q/2p_F$ . Предельное значение равно  $[\sigma_0(q)]_{\max} = n/2$ .

б) В окрестности граничной точки зоны Бриллюэна  $\mathbf{Q} = \frac{\pi}{a}(1,1,1)$  в схеме расширенных зон изоэнергетические поверхности  $\omega_{\mathbf{p}}$  также приближенно являются сферическими. При малой концентрации дырок

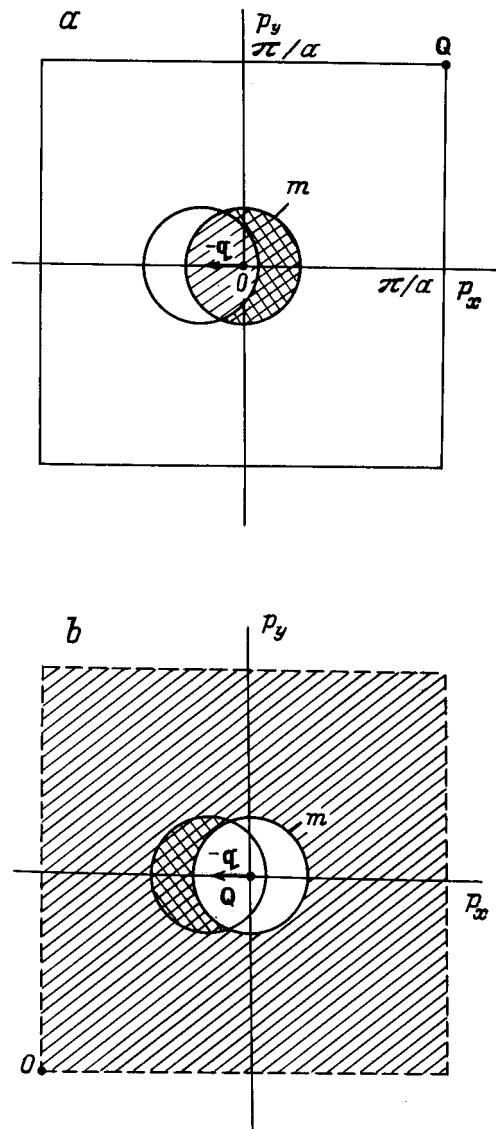


Рис. 3. Области разрешенных значений вектора  $\mathbf{p}$  в зоне Бриллюэна квадратной решетки (двойная штриховка). а) "Полумесяц" при малой электронной концентрации (заполненная часть зоны Бриллюэна заштрихована), б) схема расширенных зон и "полумесяц" относительно дырочной сферы в случае малой дырочной концентрации.

$n_0 \ll 1$  ( $n + n_0 = 1$ ) имеем дырочную сферу радиуса  $p_0$  ( $2p_0 < \pi/a$ ) с соответствующим значением эффективного химического потенциала  $m$ . По-прежнему при фиксированном векторе  $\mathbf{q}$  область допустимых значений  $\mathbf{p}$  определяется объемом "полумесяца" (рис. 3,б), и очевидно, что его объем при  $q \geq 2p_0$  становится равным объему дырочной сферы, т.е.

$$\sigma_0(\mathbf{q}) = \left(1 - (n/2)\right) \left(1 - \frac{n}{2 - n}\right) S^0(q/2p_0), \quad (55)$$

максимальное значение (55) равно концентрации дырок  $n_0 = 1 - n$ .

с) Для концентрации  $n$ , соответствующей эффективному химическому потенциалу  $m = 0$ , фермиевская поверхность является кубом (квадратом) с объемом, равным половине зоны Бриллюэна. Если вектор  $\mathbf{q} = (q, 0, 0)$  изменяется в направлении  $[1, 0, 0]$ , то геометрический формфактор  $S^0(\mathbf{q})$  является линейной функцией  $q$ ; максимум достигается при  $q = \pi/a$  и составляет  $1/2$  от заполненной части. Если же вектор  $\mathbf{q}$  изменяется в направлении  $[1, 1, 1]$ , то по-прежнему  $S^0(\mathbf{q})$  является линейной функцией  $q$ , достигающей максимума при  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ ; максимальное значение равно заполненной части зоны Бриллюэна.

Сопоставляя результаты (54), (55) и учитывая случай промежуточных концентраций, можно записать интерполяционное выражение для верхней границы  $\sigma_0(\mathbf{q})$  как функции концентрации  $n$

$$[\sigma_0(\mathbf{q})]_{\max} \cong \frac{n(1-n)}{2-n}. \quad (56)$$

Важно отметить, что максимальное значение  $\sigma_0(\mathbf{q})$  лимитируется концентрацией электронов  $n$  при  $n \ll 1$  и концентрацией дырок  $n_0 = 1 - n$  при  $n_0 \ll 1$ .

Коррелятор  $P(\mathbf{q})$  вычисляется аналогично в том же приближении. Его максимальное значение

$$[P(\mathbf{q})]_{\max} \cong n(1-n). \quad (57)$$

Объединяя полученные результаты, имеем следующее интерполяционное выражение для максимального значения коррелятора

$$\begin{aligned} [L(\mathbf{q})]_{\max} &\cong \frac{3}{2}[\sigma_0(\mathbf{q})]_{\max} + \frac{1}{4}[P(\mathbf{q})]_{\max} \\ &\cong \frac{n(1-n)}{1-(n/2)} \equiv L(n). \end{aligned} \quad (58)$$

Важно подчеркнуть, что при  $n \rightarrow 1$  корреляции обращаются в нуль.

При дальнейшей аппроксимации массового оператора (45) будем использовать заведомо завышенное значение для коррелятора  $L(\mathbf{k} - \mathbf{p})$ , заменив его максимальным значением  $L(n)$ . В этом приближении массовый оператор от импульса не зависит

$$M_{\mathbf{k}}(E) \simeq L(n) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \omega_{\mathbf{p}}^2 F_{\mathbf{p}}(E) \equiv L(n) F_2(E) = M(E). \quad (59)$$

Из-за отсутствия импульсной зависимости массового оператора приближение (59) аналогично одноузельному когерентному потенциалу. Отметим, что такая же ситуация имеет место в теории с бесконечной размерностью пространства [5].

Из общей структуры гриновской функции (42) и аппроксимации (59) следует интегральное уравнение для "взвешенной" функции Грина  $F_2(E)$

$$F_2(E) = \int_{-1}^{+1} \frac{\omega^2 D(\omega) d\omega}{E - (A + B\omega) - L(n)F_2(E)}, \quad (60)$$

решение которого зависит от вида плотности состояний  $D(\omega)$ . Чтобы теория была самосогласованной в рамках принятых приближений, к коэффициенту  $B$  следует опустить несущественную перенормировку, т.е.  $B = c$ .

## 6. Пример точно решаемого уравнения для массового оператора. Энергия и функция распределения

Для упрощения последующих вычислений заменим в (59)  $\omega_{\mathbf{p}}^2$  его средним значением по зоне Бриллюэна

$$\langle \omega_{\mathbf{p}}^2 \rangle_{\text{av}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \omega_{\mathbf{p}}^2 = \frac{1}{z} = \int_{-1}^{+1} \omega^2 D(\omega) d\omega, \quad (61)$$

тогда

$$\begin{aligned} M(E) &\simeq \lambda(n)F(E), \quad F(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} F_{\mathbf{p}}(E), \\ \lambda(n) &= \frac{1}{z} \frac{n(1-n)}{1-(n/2)}. \end{aligned} \quad (62)$$

Здесь  $F(E)$  — полная одноузельная функция Грина,  $z$  — число ближайших соседей,  $\lambda$  — параметр кинематического корреляционного взаимодействия. С учетом (62) имеем интегральное уравнение для функции  $F(E)$

$$F(E) = \int_{-1}^{+1} \frac{D(\omega) d\omega}{E - A - c\omega - \lambda F(E)}. \quad (63)$$

Дальнейшие расчеты, разумеется, не могут претендовать на количественную строгость, однако они отражают качественно характер поведения системы при наличии кинематических корреляций.

Рассмотрим эллиптическую плотность состояний (ЭПС)

$$D(\omega) = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \sqrt{1 - \omega^2}, & |\omega| \leq 1, \\ 0, & |\omega| > 1. \end{cases} \quad (64)$$

Из-за корневого поведения на границах интервала она соответствует одночастичному спектру некоторого модельного трехмерного кристалла. Однако в соответствии с (61) для плотности состояний (64) координационное число модельного кристалла оказывается равным  $x = 4$ .

Для ЭПС

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E - \omega_{\mathbf{k}}} &= \int_{-1}^{+1} \frac{D(\omega) d\omega}{E - \omega} = 2 \left( E - \sqrt{E^2 - 1} \right) \\ &= \begin{cases} 2E - i\pi D(E), & |E| \leq 1, \\ 2(E - \sqrt{E^2 - 1}), & |E| > 1. \end{cases} \end{aligned} \quad (65)$$



Используя (65), находим точное аналитическое решение уравнения (63)

$$F(E) = (2/\alpha) \left( x - \sqrt{x^2 - 1} \right), \quad \alpha^2 = c^2 + 4\lambda, \quad (66)$$

где  $x = (E - A)/\alpha$  — новая спектральная переменная; тогда функция Грина  $F_{\mathbf{k}}(E)$  принимает вид

$$F_{\mathbf{k}}(x) = \left[ \alpha x - c\omega_{\mathbf{k}} - \frac{2\lambda}{\alpha} \left( x - \sqrt{x^2 - 1} \right) \right]^{-1}. \quad (67)$$

Спектральную интенсивность  $N_{\mathbf{k}}(E)$  удобно представить в виде

$$N_{\mathbf{k}}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_{\mathbf{k}}(E) = \frac{1}{\alpha} N(x, \omega_{\mathbf{k}}), \quad (68)$$

$$N(x, \omega_{\mathbf{k}}) = \xi \frac{D(x)}{(ax - \omega_{\mathbf{k}})^2 + b^2(1 - x^2)}, \quad (69)$$

$$\xi = \lambda/c^2, \quad b = 2\lambda/\alpha c, \quad a = \sqrt{1 + b^2}. \quad (70)$$

1) Покажем, что найденная спектральная интенсивность удовлетворяет правилам сумм. Поскольку

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} F(E) = N(E) = \frac{1}{\alpha} D(x), \quad (71)$$

”интегральное” правило сумм для  $N(E)$  выполняется автоматически. С другой стороны, соотношение (7-1) можно предоставить в форме

$$\begin{aligned} N(E) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}}(E) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\alpha} N(x, \omega_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{\alpha} \int_{-1}^{+1} d\omega D(\omega) N(x, \omega) \\ &= \frac{D(x)}{\alpha} \int_{-1}^{+1} \xi \frac{D(\omega) d\omega}{(ax - \omega)^2 + b^2(1 - x^2)} = \frac{D(x)}{\alpha}, \end{aligned}$$

т.е. интеграл

$$I_0(x) = \xi \int_{-1}^{+1} \frac{D(\omega) d\omega}{(ax - \omega)^2 + b^2(1 - x^2)} = 1 \quad (72)$$

при указанных выше соотношениях между параметрами  $a, b$  и  $\xi$ . Легко убедиться в том, что знаменатель подынтегрального выражения (72) инвариантен относительно замены  $\omega \rightarrow x$ . Поэтому

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dE N_{\mathbf{k}}(E) &= \int_{-1}^{+1} dx N(x, \omega_{\mathbf{k}}) \\ &= \xi \int_{-1}^{+1} \frac{D(x) dx}{(ax - \omega_{\mathbf{k}})^2 + b^2(1 - x^2)} = 1, \quad (73) \end{aligned}$$

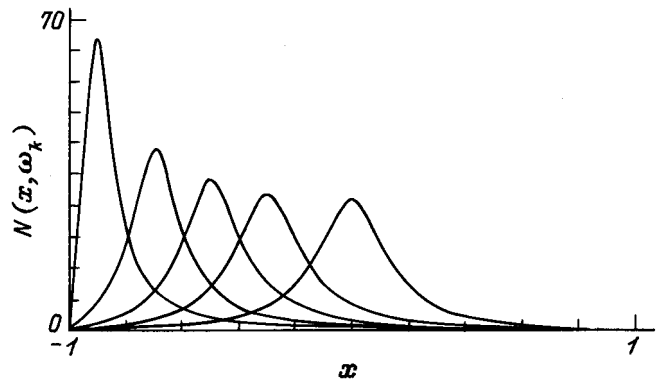


Рис. 4. Типичный вид спектральной интенсивности  $N(x, \omega_{\mathbf{k}})$  для различных значений  $\omega_{\mathbf{k}}$  ( $x$  — спектральная переменная,  $n = 0.03$ ). Пики расположены симметрично относительно значения  $\omega_{\mathbf{k}} = 0$ .

т.е. фундаментальное правило сумм (16) выполняется точно. Типичный вид спектральной интенсивности  $N(x, \omega_{\mathbf{k}})$  изображен на рис. 4.

2) Уравнение для самосогласованного нахождения химического потенциала (17) приводится к виду

$$\begin{aligned} \frac{n}{2-n} &= \int_{-1}^m dx \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} N(x, \omega_{\mathbf{k}}) = \int_{-1}^m dx D(x) I_0(x) \\ &= \int_{-1}^m D(x) dx \equiv g(m), \quad (74) \end{aligned}$$

где  $m = (\mu - A)/\alpha$ . Уравнение (74) в точности совпадает с уравнением (26) для нормального состояния в одночастичном приближении, т.е. эффективный химический потенциал  $m$  не меняется из-за учета корреляций. Для ЭПС взаимосвязь  $n$  и  $m$  такова

$$n = \frac{2g(m)}{1 + g(m)},$$

$$g(m) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \left[ m\sqrt{1 - m^2} + \arcsin(m) \right]. \quad (75)$$

3) Энергия системы (18) в N-состоянии принимает вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= (2-n) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\mu} dE N(x, \omega_{\mathbf{k}}) \\ &= (2-n) \int_{-1}^m dx D(x) I_1(x), \quad (76) \end{aligned}$$

где интеграл

$$I_1(x) = \xi \int_{-1}^m \frac{\omega D(\omega) d\omega}{(ax - \omega)^2 + b^2(1 - x^2)} = \frac{c}{\alpha} x \quad (77)$$

вычисляется непосредственно. Из (76) и (77) следует ( $z = 4$ )

$$\varepsilon_0(n) = \frac{c}{\alpha} \varepsilon_0^{(1)}(n),$$

$$\alpha^2 = c^2 + n(1-n)/c, \quad c = 1 - (n/2), \quad (78)$$

где  $\varepsilon_0^{(1)}(n)$  — энергия N-состояния в одночастичном приближении для ЭПС,

$$\varepsilon_0^{(1)}(n) = (2-n) \int_{-1}^m x D(x) dx = -\frac{2}{1+g(m)} \frac{2}{3\pi} (1-m^2)^{3/2}. \quad (79)$$

Вычисленную энергию  $\varepsilon_0(n)$  сравним с энергией насыщенного FM-состояния, которая для ЭПС равна

$$\varepsilon_{FM}(n) = -\frac{2}{3\pi} (1 - m_{FM}^2)^{3/2}, \quad n = g(m_{FM}), \quad (80)$$

где функция  $g(m)$  определена соотношением (75). В результате получаем

$$\varepsilon_0(n) < \varepsilon_{FM}(n) \quad (81)$$

для всех электронных концентраций  $0 < n < 1$ . Таким образом, в рамках принятых аппроксимаций основным состоянием системы является нормальное (синглетное) состояние (рис. 2).

4) Функция распределения (15) в нормальном сильно коррелированном состоянии при найденном значении химического потенциала  $m = m(n)$  в рассматриваемом случае равна ( $c = 1 - (n/2)$ )

$$n_{\mathbf{k}} \equiv cf(\omega_{\mathbf{k}}, n), \quad f(\omega_{\mathbf{k}}, n) = \int_{-1}^m \xi \frac{D(x) dx}{(ax - \omega_{\mathbf{k}})^2 + b^2(1-x^2)} \quad (82)$$

и представлена на рис. 5 в зависимости от концентрации электронов  $n$ . При любых конечных концентрациях скачок в окрестности химического потенциала

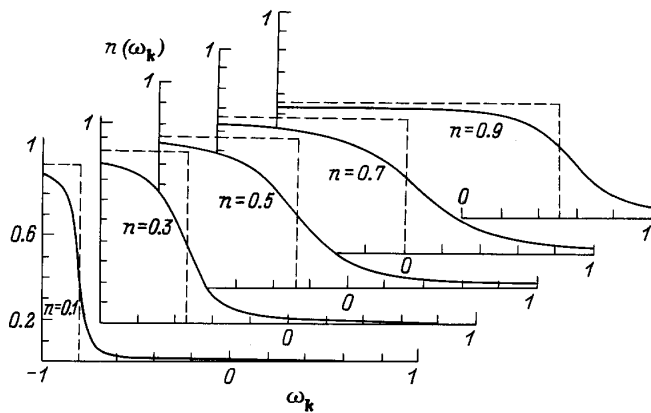


Рис. 5. Функция распределения электронов при  $T = 0$  в сильно коррелированном N-состоянии для различных концентраций  $n$ . Штриховыми линиями обозначена ферми-ступенька, соответствующая одночастичному приближению.

$m$  отсутствует. Характер "размазывания" функции распределения по энергетическому спектру определяется параметром кинематического взаимодействия  $\lambda(n) \propto n(1-n)$ . Таким образом, при наличии предельно сильных корреляций ( $U = \infty$ ) функция распределения электронов при  $T = 0$  существенно отличается от фермиевской.

### 7. Обсуждение результатов

В работе представлена теоретическая версия описания сильно коррелированного нормального (синглетного) N-состояния электронной системы в модели Хаббарда при бесконечной величине одноузельного отталкивания ( $U = \infty$ ). Дискуссионная проблема основного состояния представлена как альтернатива между нормальным (синглетным) и насыщенным ферромагнитным состояниями электронной системы в термодинамическом пределе.

1) Показано, что в любом одночастичном приближении (например, в ОПХФ) энергия N-состояния  $\varepsilon_0^{(1)}(n)$  ниже точной энергии насыщенного FM-состояния  $\varepsilon_{FM}(n)$  при произвольной электронной концентрации  $n \leq 1$ .

2) Расчет динамической магнитной восприимчивости в ПСФ показывает, что N-состояние устойчиво относительно возникновения ферромагнетизма (статическая восприимчивость при  $\mathbf{q} \rightarrow 0$  расходимости не имеет для всех допустимых концентраций).

3) Для массового оператора  $M_{\mathbf{k}}(E)$  одночастичной функции Грина, учитывающего все кинематические корреляционные эффекты вне рамок ОПХФ, предложена аппроксимация

$$M_{\mathbf{k}}(E) \rightarrow \lambda F(E), \quad \lambda = \frac{1}{z} \frac{n(1-n)}{1-(n/2)},$$

$\lambda$  — параметр кинематического взаимодействия,  $F(E)$  — полная одноузельная функция Грина. Концентрационная зависимость параметра  $\lambda$  отличается от использованной в работе [28]. Самосогласованное точное вычисление  $F(E)$  для эллиптической плотности электронных состояний приводит к нетривиальному виду спектральной интенсивности, для которой строго выполняется фундаментальное правило сумм. Кинематические корреляции, как и следовало ожидать, повышают энергию N-состояния по сравнению с одночастичным приближением, тем не менее энергия сильно коррелированного N-состояния  $\varepsilon(n)$  ниже энергии FM-состояния

$$\varepsilon_0^{(1)}(n) < \varepsilon_0(n) < \varepsilon_{FM}(n).$$

4) Получена "размазанная" по спектру  $\omega_{\mathbf{k}}$  функция распределения электронов при  $T = 0$ , свидетельствующая о неферми-жидкостном поведении сильно коррелированной электронной системы.

С точки зрения строгой обоснованности предложенная аппроксимация массового оператора является уязвимым местом теории (как и других теорий, имеющих дело с процедурой расщепления). Так, например, в приближении "Хаббард-III" [1] для модели с конечным  $U$  массовый оператор также не зависит от импульса, а затухание пропорционально  $\text{Im } C_{11}(E)$ , как и в данной работе. Это приводит к отсутствию скачка в функции распределения электронов, т.е. к отсутствию как таковой ферми-поверхности. Подобного рода режим был получен в ряде работ (см. обзор [5]) и на сегодняшний день уже не является откровением в связи с исследованиями по латтинжеровской [30] и маргинальной [31–33] электронным жидкостям.

Окончательный вывод об основном синглетном состоянии системы в модели с  $U = \infty$  при всех электронных концентрациях делать еще рано, тем не менее эта работа указывает на такую возможность. Необходимы численные расчеты для реальных плотностей состояний, соответствующих альтернативным решеткам. Поскольку кинематические корреляции существенно уменьшаются в высококонцентрационной области (именно там, где можно подозревать существование ферромагнетизма), можно надеяться на то, что прогноз об основном синглетном состоянии оправдается. Уместно отметить, что все расчеты проведены в термодинамическом пределе, и поэтому тонкие квантово-механические эффекты для конечного числа дырок (включая теорему Нагаока) в этом пределе исчезают.

Автор благодарен В.В. Валькову, В.И. Зиненко и А.Л. Панتيкиорову за полезные дискуссии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Центра фундаментального естествознания (Санкт-Петербургский государственный университет) (гранты 94-5.1077, 96-0-7.4-55) и Научного совета по проблеме высокотемпературной сверхпроводимости (грант № 93237).

## Список литературы

- [1] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. **A.276**, 238 (1963); **277**, 237 (1964); **281**, 401 (1964).
- [2] Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. М. (1987). 264 с.
- [3] Ю.А. Изюмов, М.И. Кацнельсон, Ю.Н. Скрябин. Магнетизм коллективизированных электронов. М. (1994). 368 с.
- [4] Ю.А. Изюмов. УФН **161**, 11, 1 (1991).
- [5] Ю.А. Изюмов. УФН **165**, 4, 403 (1995).
- [6] E.H. Lieb. Proc. Conf. "Advances in Dynamical Systems and Quantum Physics" (Capri. May, 1993). World Scient. (1993). P. 1–19.
- [7] E.H. Lieb, F.Y. Wu. Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
- [8] Y. Nagaoka. Phys. Rev. **147**, 392 (1966).
- [9] G.S. Tian. J. Phys. **A23**, 2231 (1993).
- [10] B. Doucot, X.G. Wen. Phys. Rev. **B40**, 2719 (1989).
- [11] Y. Fang, A.E. Ruckenstein, E. Dagotto, S. Schmitt-Rink. Phys. Rev. **B40**, 7406 (1989).
- [12] A. Sütó. Commun. Math. Phys. **140**, 43 (1991).
- [13] B. Toth. Lett. Math. Phys. **22**, 321 (1991).
- [14] Е.В. Кузьмин. Письма в ЖЭТФ **57**, 9, 575 (1993).
- [15] M. Takahashi. J. Phys. Soc. Jap. **47**, 4, 47 (1989).
- [16] J. Callaway, D.R. Chen, R. Tang. Phys. Rev. **B35**, 3705 (1987).
- [17] J.A. Riera, A.P. Young. Phys. Rev. **B40**, 5285 (1989).
- [18] B.S. Shastry, H.R. Krishnamurthy, P.W. Anderson. Phys. Rev. **B41**, 2375 (1990).
- [19] W. von der Linden, D.M. Edwards. J. Phys. Cond. Matt. **3**, 4917 (1991).
- [20] Th. Hanish, E. Müller-Hartmann. Ann. Phys. **2**, 381 (1993).
- [21] Н.Н. Боголюбов. Избранные труды. Киев (1971). Т. 3. 488 с.
- [22] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. М. (1975). 528 с.
- [23] E.G. Goryachev, E.V. Kuzmin. Phys. Lett. **137**, 7, 423 (1989); Phys. Lett. **149**, 1, 60 (1990).
- [24] Е.Г. Горячев, Е.В. Кузьмин. ТМФ **85**, 3, 412 (1990).
- [25] Е.Г. Горячев, Е.В. Кузьмин. Письма в ЖЭТФ **52**, 6, 949 (1990).
- [26] Д.Н. Зубарев, Ю.Г. Рудой. УФН **163**, 3, 103 (1993).
- [27] J. Hubbard, K.P. Jain. J. Phys. C, Ser. 2, **1**, 1650 (1968).
- [28] Е.В. Кузьмин ФММ **81**, 5, 33 (1996).
- [29] Д. Пайнс, Ф. Нозьер. Теория квантовых жидкостей. М. (1967). 382 с.
- [30] F.D. Haldane. J. Phys. **C14**, 2585 (1981).
- [31] P.W. Anderson. Phys. Rev. Lett., **64**, 15, 1839 (1990).
- [32] C. Varma, P. Littlewood, S. Schmitt-Rink et al. Phys. Rev. Lett. **63**, 18, 1996 (1989).
- [33] Г.Е. Воловик. Письма в ЖЭТФ **53**, 4, 208 (1991).