

ЭЛЕКТРОННЫЕ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА

PACS numbers: 71.10.Fd, 71.10.Hf, 71.20.Be, 71.27.+a, 71.30.+h, 72.15.Eb, 72.60.+g

Эффективное поле и фазовый переход металл–диэлектрик в модели Хаббарда

Э. Е. Зубов

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36,
03142 Киев, Украина
Донецкий национальный университет имени Василя Стуса,
ул. 600-летия, 21,
21021 Винница, Украина*

В рамках модели Хаббарда с эффективным самосогласованным полем представлен возможный механизм скачкообразного фазового перехода металл–диэлектрик для полузаполненной зоны. Диаграммным методом проведено детальное исследование известного приближения Хаббард-I, а также учтены корреляционные поправки при минимальном числе параметров самосогласования. Установлены характерные параметры порядка, свойственные только металлическому состоянию или диэлектрическому. На основе анализа электронной спектральной плотности определены положения уровня химического потенциала и критическое значение величины энергии кулоновского отталкивания \tilde{U} в единицах ширины зоны, когда происходит фазовый переход металл–диэлектрик. Оценки величин внутренней энергии в случае полузаполненной зоны показали, что для $\tilde{U} < 2,1$ более устойчивым является состояние металла, тогда как при $\tilde{U} > 2,1$ устойчиво состояние диэлектрика, но только при предельном переходе по электронному допированию. Поэтому уровень химического потенциала для диэлектрика лежит у нижнего края верхней хаббардовской зоны, где спектральная плотность равна нулю. Это даёт нулевую проводимость.

Corresponding author: Eduard Evgenovych Zubov
E-mail: eezubov@ukr.net

*G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
Academician Vernadsky Blvd., Bldg. 36, UA-03142 Kyiv, Ukraine
Vasyl Stus Donetsk National University,
600-Richchya Str., Bldg. 21, 21021 Vinnytsia, Ukraine*

Please cite this article as: E. E. Zubov, Effective Field and Metal–Insulator Phase Transition in the Hubbard Model, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **38**, No. 11: 1423–1446 (2016) (in Russian), DOI: 10.15407/mfint.38.11.1423.

Конечное электронное допирование или дырочное обуславливает металлическое состояние с уровнем Ферми внутри верхней зоны или допированное диэлектрическое состояние с уровнем Ферми внутри нижней зоны соответственно. Это приводит к скачкообразному росту проводимости при фазовом переходе металл–диэлектрик.

Ключевые слова: металл, диэлектрик, фазовый переход, проводимость, химический потенциал.

В рамках Габбардового модели с эффективным самоуздоженным полем представлено возможный механизм ступенчатого фазового перехода металл–диэлектрик для наполовину заполненной зоны. Диаграммой методом проведено детальное исследование известного приближения Хаббард-I, а также введено корреляционные поправки с минимальным числом параметров самоуздожения. Встановлено характерные параметры порядка, характерные только для металлического состояния или диэлектрического. На основании анализа электронной спектральной плотности определено положение уровня химического потенциала и критическое значение величины энергии Кулоновского отталкивания \tilde{U} в единицах ширины зоны, при котором происходит фазовый переход металл–диэлектрик. Оценки величин внутренней энергии в случае наполовину заполненной зоны показали, что для $\tilde{U} < 2,1$ больше устойчивым является состояние металла, тогда как при $\tilde{U} > 2,1$ устойчивым является состояние диэлектрика, но только в предельном случае перехода по электронному допированию. Тогда уровень химического потенциала для диэлектрика лежит на нижнем крае верхней Хаббардовой зоны, где спектральная плотность равна нулю. Это дает нулевую проводимость. Скиннинг электронного допирования или дырочное обуславливает металлическое состояние с уровнем Ферми в середине верхней зоны или допированный диэлектрический стан с уровнем Ферми в середине нижней зоны соответственно. Это приводит к ступенчатому росту проводимости при фазовом переходе металл–диэлектрик.

Ключевые слова: металл, диэлектрик, фазовый переход, проводимость, химический потенциал.

In the framework of the Hubbard model with an effective self-consistent field, a possible mechanism of the stepwise metal–insulator phase transition for a half-filled band is presented. A detailed investigation of the well-known Hubbard-I approximation is carried out. In addition, the correlation corrections are accounted with a minimal number of self-consistency parameters. As determined, the typical order parameters are unique for a metal state or a dielectric one. Based on analysis of the electron spectral density, the position of the chemical-potential level and the critical value of Coulomb repulsion energy in bandwidth units at the metal–insulator phase transition are determined. The estimations of the internal-energy value for a half-filled band show a stable metal state at $\tilde{U} < 2.1$. A dielectric state is stable for $\tilde{U} > 2.1$ and only in the limit of the extremely small electron doping. That is why the chemical-potential level underlies by lower edge of the upper Hubbard band where the spectral density is equal to zero. It gives zero conductivity. The finite electron or hole dopings cause the metal state with Fermi level inside the upper band or the doped dielectric state with Fermi level inside the lower band, respectively. It results in a stepwise increasing of conductivity at the

metal–insulator phase transition.

Key words: metal, insulator, phase transition, conductivity, chemical potential.

(Получено 10 октября 2016 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование модели Хаббарда имеет полувековую историю, начиная с того момента, когда Дж. Хаббард впервые рассмотрел гамильтониан, учитывающий только зонную энергию и одноузельное кулоновское отталкивание электронов. Такое упрощение сложного гамильтониана твёрдого тела позволило описать ряд явлений, которые не укладывались в простую зонную картину без электронных корреляций, а также представить возможный механизм моттовского перехода из диэлектрического состояния в металлическое [1, 2]. Основная идея заключалась в том, что с уменьшением величины энергии кулоновского отталкивания U электронов по отношению к их зонной энергии W (к ширине зоны) диэлектрическая щель между валентной зоной и зоной проводимости уменьшалась и при $W/U = 1,15$ зоны сливались в одну, отражая фазовый переход металл–диэлектрик.

Важность гамильтониана Хаббарда возросла особенно после открытия высокотемпературной сверхпроводимости, когда стало ясно, что сильное одноузельное кулоновское отталкивание играет одну из основных ролей в механизме электронного спаривания. Не останавливаясь на тех результатах, которые были получены за это время и достаточно подробно отражены в обзоре Ю. А. Изюмова [3], обратим внимание на общие черты используемых методов и укажем на новую специфику данной работы, которая отражает более последовательное решение задачи о моттовском переходе в модели Хаббарда. Следует отметить достаточно сложную картину электронной динамики в случае, когда параметр кулоновского отталкивания $U \sim W$. В случае бесконечной размерности решётки с числом ближайших соседей $z = \infty$ задача сводится к точным уравнениям в однопримесной модели Андерсона или сплавной теории метода когерентного потенциала [3]. В рамках данных теорий по спектральной плотности при $T = 0$ К также предсказывался плавный переход от металла к диэлектрику с ростом U , что не давало объяснения наблюдаемому скачкообразному изменению числа носителей при фазовом переходе. Хотя следует отметить, что при малых конечных температурах наблюдались гистерезисные эффекты по энергии [4]. В книге [5] Мотт указывает, что модель Хаббарда, не учитывающая дальнедействующих сил, не предсказывает скачкообразного изме-

нения числа носителей, а сама задача установления его наличия или отсутствия является нерешённой и представляет большой интерес. Ряд ссылок на теории в книге [5], в основу которых положен экситонный механизм [6], связанный с перекрытием зон, подтвердил лишь достаточную сложность вопроса и неоднозначность представленных решений.

Структура работы отражает её основную идею. Она состоит в том, что мы исключаем введение дополнительных параметров согласования в виде неизвестных гриновских функций или других корреляторов по сплавной аналогии, которые традиционно используются практически в большинстве теорий [7, 8]. В качестве основных параметров самосогласования выступают вероятности электронно-дырочного и электрон-электронного узельного заполнения. Эти параметры формируются сразу в приближении Хаббард-I, которое является нулевым приближением самосогласованного поля и подробно рассматривается в разделе 2. Это приближение описывает механизм возвратного движения зарядов. Включение незамкнутых путей электронных прыжков осуществляется путём учёта однопетлевых диаграммных вкладов матрицы рассеяния в указанные комбинированные узельные заселённости и собственно-энергетический оператор. Суммирование бесконечного ряда связанных однопетлевых диаграмм позволяет получить самосогласованное уравнение для введённых неизвестных параметров, что представлено в разделе 3. В разделе 4 на основе представленной теории рассчитана функция Грина, спектральная плотность и другие характеристики электронной динамики.

Следует отметить также появление новых параметров порядка, которые свойственны диэлектрическому или металлическому состоянию. Из сравнения энергий этих состояний определяется критическое значение величины U , при которой происходит фазовый переход металл-диэлектрик. Скачкообразность данного перехода отражена на концентрационных зависимостях проводимости.

2. ЭФФЕКТИВНОЕ САМОСОГЛАСОВАННОЕ ПОЛЕ В ПРИБЛИЖЕНИИ ХАББАРД-I

Гамильтониан Хаббарда обычно записывается в виде:

$$\hat{H} = \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

где операторы рождения и уничтожения электрона в узлах i и j со спином σ обозначены через $c_{i\sigma}^+$ и $c_{j\sigma}$ соответственно. Оператор концентрации электронов со спином σ в i -ом узле $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$. Одноузельное кулоновское отталкивание электронов на уровне переходного или редкоземельного иона обозначено через U , а интеграл пе-

рескока $t_{ij} = t$ отличен от нуля для z ближайших соседей и соответствует ширине зоны $W = 2zt$. Также будем рассматривать в дальнейшем простую кубическую решётку. Очевидно, что (1) соответствует однозонной модели и не составляет труда обобщить (1) на случай многозонного металла или диэлектрика. Несмотря на достаточно простой вид, гамильтониан (1) крайне сложен для теоретического исследования. Предельные случаи $U \ll t$ и $U \gg t$ описывают металлическое и диэлектрическое состояния соответственно, им посвящено огромное количество публикаций [3]. В данной работе будет представлено последовательное решение задачи в случае наиболее трудного соотношения $U \sim t$ в рамках временной теории возмущений. Чтобы получить гамильтониан нулевого приближения \hat{H}_0 из (1) выделим кулоновский член, а также добавим к нему оператор, связанный с энергией химического потенциала μ . Таким образом, можно записать

$$\hat{H}_0 = -\mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (2)$$

Стандартная процедура построения самосогласованной теории предполагает наличие эффективного поля с соответствующими параметрами самосогласования, как это обычно делается, например, в теории магнетизма. Мы считаем, что такими параметрами должны быть средние комбинированная одноэлектронная и двухэлектронная узельные заселённости коллективизированными электронами $\langle F^{\sigma 0} \rangle = 1 - n/2$ и $\langle F^{2\sigma} \rangle = n/2$, где n — электронная концентрация на узел. При этом далее рассматриваем для простоты только немагнитное состояние. Такое предположение будет очевидно после рассмотрения приближения Хаббард-I, в рамках которого на основе формализма матрицы рассеяния легко выделить указанное поле. Учёт последующих диаграммных вкладов, пропорциональных $1/z$, позволит уточнить картину электронной динамики и предсказать переход из металлического состояния в диэлектрическое. Отметим, что включение дополнительных параметров самосогласования в виде гриновских функций или других корреляторов, как это осуществлялось в большинстве работ ряда авторов [7, 8] и, в частности, в работе Хаббарда [2], где было предложено приближение Хаббард-III, описывающее мотт-хаббардовский переход, имеет ряд существенных недостатков, один из которых связан с выводом о непрерывности перехода по числу носителей заряда, что противоречит эксперименту.

При исследовании термодинамических свойств систем, описываемых гамильтонианом (1), удобно перейти к операторам Хаббарда $X^{mn} = |m\rangle\langle n|$, построенным на собственных векторах гамильтониана \hat{H}_0 нулевого приближения, где базис $\{|m\rangle\}$ включает две волновые функции $|\sigma\rangle$ для электрона со спином $\sigma = +1$ или -1 , а также

функции $|0\rangle$ и $|2\rangle$ для дырочного и двукратного заполненного состояний соответственно. Используя известные соотношения:

$$c_\sigma^+ = X^{\sigma 0} + \sigma X^{2-\sigma}, \quad c_\sigma = X^{0\sigma} + \sigma X^{-\sigma 2}, \quad (3)$$

гамильтониан нулевого приближения представляется в виде:

$$\hat{H}_0 = UX^{22} - (X^{++} + X^{--} + 2X^{22}) \quad (4)$$

с уровнями энергии $\varepsilon_\sigma = -\mu$, $\varepsilon_0 = 0$ и $\varepsilon_2 = U - 2\mu$. Аналогично записываем гамильтониан возмущения:

$$\hat{V} = -\sum_{lm\sigma} t_{lm} \left\{ X_l^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + \sigma \left(X_l^{\sigma 0} X_m^{-\sigma 2} + X_l^{2-\sigma} X_m^{0\sigma} \right) + X_l^{2-\sigma} X_m^{-\sigma 2} \right\}. \quad (5)$$

Используя формализм матрицы рассеяния, выделим эффективное самосогласованное поле, которое в нулевом приближении даёт такую же функцию Грина, как и приближение Хаббард-I, полученное на основе уравнений движения без учёта корреляционных членов. Действительно, для компонент $G_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau) = -\langle T_\tau X_i^{\alpha\beta}(\tau) X_j^{\gamma\delta}(0) \rangle$ фурье-образа функции Грина $G_\sigma(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau) = -\langle T_\tau c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^+(0) \rangle$ можно записать операторное уравнение Дайсона

$$\begin{aligned} \hat{G}_\sigma(i\omega_n, \mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} G_{0\sigma,0\sigma} & G_{0\sigma,2-\sigma} \\ G_{-\sigma 2,\sigma 0} & G_{-\sigma 2,2-\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{0\sigma}^0(i\omega_n) & 0 \\ 0 & G_{-\sigma 2}^0(i\omega_n) \end{pmatrix} + \\ + \beta t(\mathbf{k}) &\begin{pmatrix} \sum_{\sigma 0,0\sigma}(i\omega_n) & \sigma \sum_{\sigma 0,0\sigma}(i\omega_n) \\ \sigma \sum_{2-\sigma,0\sigma}(i\omega_n) & \sum_{2-\sigma,-\sigma 2}(i\omega_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{0\sigma,0\sigma}(i\omega_n, \mathbf{k}) & G_{0\sigma,2-\sigma}(i\omega_n, \mathbf{k}) \\ G_{-\sigma 2,\sigma 0}(i\omega_n, \mathbf{k}) & G_{-\sigma 2,2-\sigma}(i\omega_n, \mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (6) \end{aligned}$$

где невозмущённые функции Грина

$$G_{0\sigma}^0(i\omega_n) \equiv G_{0\sigma,0\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{\beta(i\omega_n + \mu)}, \quad (7)$$

$$G_{-\sigma 2}^0(i\omega_n) \equiv G_{-\sigma 2,2-\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{\beta(i\omega_n + \mu - U)}$$

получены из усреднения по гамильтониану \hat{H}_0 , а фурье-образ интеграла перескока для простой кубической (ПК) решётки — $t(\mathbf{k}) = -2t\{\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)\}$ с постоянной a . Остальные обозначения стандартны для мацубаровского представления: символы $\langle \dots \rangle$ и T_τ — операторы статистического усреднения по полному гамильтониану и хронологического упорядочения соответственно, $c_{i\sigma}(\tau)$ и т.д. — операторы уничтожения в представлении взаимодей-

ствия, $1/\beta = T$ — температура, $\omega_n = (2n + 1)\pi T$.

Собственно-энергетический оператор $\sum_{\alpha\beta,\gamma\delta} (i\omega_n)$ при выбранном способе суммирования диаграмм зависит только от фермиевской частоты. Легко убедиться, что в нулевом приближении самосогласованного поля компоненты собственно-энергетического оператора имеют простейший вид:

$$\tilde{\Sigma}_{\sigma}^0(i\omega_n) = \begin{pmatrix} \langle F^{\sigma 0} \rangle G_{0\sigma}^0(i\omega_n) & \langle F^{\sigma 0} \rangle G_{0\sigma}^0(i\omega_n) \\ \langle F^{2-\sigma} \rangle G_{-\sigma 2}^0(i\omega_n) & \langle F^{2-\sigma} \rangle G_{-\sigma 2}^0(i\omega_n) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где для парамагнитной фазы $\langle F^{\sigma 0} \rangle = \langle X^{\sigma\sigma} + X^{00} \rangle = 1 - n/2$ и $\langle F^{2-\sigma} \rangle = \langle X^{22} + X^{-\sigma-\sigma} \rangle = n/2$. Подставляя (8) в матричное уравнение (6), находим решения для компонент функции Грина $\tilde{G}_{\sigma}(i\omega_n, \mathbf{k})$, что даёт следующее выражение для $G_{\sigma}(i\omega_n, \mathbf{k})$ в приближении Хаббард-I:

$$G_{\sigma}^H(i\omega_n, \mathbf{k}) = \frac{\langle F^{\sigma 0} \rangle G_{0\sigma}^0(i\omega_n) + \langle F^{2-\sigma} \rangle G_{-\sigma 2}^0(i\omega_n)}{1 - \beta t(\mathbf{k}) (\langle F^{\sigma 0} \rangle G_{0\sigma}^0(i\omega_n) + \langle F^{2-\sigma} \rangle G_{-\sigma 2}^0(i\omega_n))}. \quad (9)$$

Данное выражение совпадает с тем, что получено в работе Хаббарда [1]. Полюсы (9) определяют две ветви спектра когерентных возбуждений, описывающие верхнюю и нижнюю хаббардовские зоны. Таким образом, приближение Хаббард-I не учитывает эффекты неупругого рассеяния электронов. Как следствие, в рамках этого приближения невозможно получить фазовый переход из металлического состояния в диэлектрическое, поскольку кулоновская щель, разделяющая две зоны, не исчезает при любом конечном значении U . Наличие двух ветвей спектра существенно усложняет численный анализ спектральной плотности и зависимости химпотенциала от концентрации электронов. Учитывая, что до сих пор такой анализ в литературе отсутствует, проведём его подробно, опираясь на метод обратной функции, который существенно упрощает решение данной задачи [9]. Этот метод основан на простой линейной зависимости полюса гриновской функции (9) от $t(\mathbf{k})$.

Для расчёта спектральной плотности $A_{\sigma}(\Omega, \mathbf{q})$ необходимо в (9) осуществить аналитическое продолжение $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$. С учётом общего определения $A_{\sigma}(\Omega, \mathbf{q}) = -2\beta \text{Im} G_{\sigma}(\Omega + i\delta, \mathbf{q})$ имеем следующее выражение для спектральной плотности в приближении Хаббард-I:

$$A_{\sigma}^{\text{Hubb}}(\Omega, \mathbf{q}) = -2\pi \sum_{n=1}^2 \frac{\beta \tilde{G}_{\sigma}(\Omega)}{t(\mathbf{q}) \left. \frac{d\beta \tilde{G}_{\sigma}(\Omega)}{d\Omega} \right|_{\Omega=E_{n\mathbf{q}\sigma}}} \delta(\Omega - E_{n\mathbf{q}\sigma}), \quad (10)$$

где $\tilde{G}_{\sigma}(\Omega) = \langle F^{\sigma 0} \rangle G_{0\sigma}^0(\Omega) + \langle F^{2-\sigma} \rangle G_{-\sigma 2}^0(\Omega)$, $E_{n\mathbf{q}\sigma}$ — резонансные

частоты и $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака. Выполняя суммирование по волновым векторам, имеем для однородной спектральной плотности

$$R_{\sigma}^{\text{Hubb}}(\Omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} A_{\sigma}^{\text{Hubb}}(\Omega, \mathbf{q}) = \frac{12\pi}{W} D_c \left(\frac{6}{F(\tilde{\Omega})} \right), \quad (11)$$

где $F(\tilde{\Omega}) = \frac{1-n/2}{\tilde{\Omega} + \tilde{\mu}} + \frac{n/2}{\tilde{\Omega} + \tilde{\mu} - \tilde{U}}$, и знак тильда далее обозначает, что

указанные параметры взяты в единицах ширины W зоны. Электронная плотность состояний $D_c(x)$ для ПК-решётки выражается через мнимую часть аналитически продолженной в нижнюю комплексную плоскость решёточной функции Грина $G(t)$ [10], для которой в работе [11] представлено точное выражение:

$$G(t) = P(3/t) / t, \quad (12)$$

где

$$P(z) = -\frac{\sqrt{1-0,75x_1}}{1-x_1} \left(\frac{2}{\pi} \right)^2 K(k_+) K(k_-),$$

$$z = \frac{3}{t}, \quad x_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{6} z^2 - \frac{1}{2} \sqrt{1-z^2} \sqrt{1-\frac{1}{9}z^2}, \quad x_2 = \frac{x_1}{x_1-1}, \quad (13)$$

$$k_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{4} x_2 \sqrt{4-x_2} - \frac{1}{4} (2-x_2) \sqrt{1-x_2}.$$

Здесь $K(x)$ — полные эллиптические интегралы 1-го рода. Для вычисления полных эллиптических интегралов с комплексным модулем использовался алгоритм расчёта арифметико-геометрического среднего, предложенный в работе [12].

Зная спектральную плотность, легко найти среднюю узельную заселённость электроном со спином σ в соответствии с основным выражением:

$$\begin{aligned} \langle n_{\sigma} \rangle &= \langle F^{2\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}\sigma} = \frac{1}{2\pi N} \sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{+\infty} A_{\sigma}^{\text{Hubb}}(\Omega, \mathbf{q}) f(\Omega) d\Omega = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R_{\sigma}^{\text{Hubb}}(\Omega) f(\Omega) d\Omega, \end{aligned} \quad (14)$$

где $f(\Omega) = 1 / (e^{\beta\Omega} + 1)$ — фермиевская функция распределения. Принимая во внимание, что при $T = 0$ К в основном состоянии реализуется парамагнитная фаза с $\langle n_{\sigma} \rangle = n / 2$, имеем следующее ин-

тегральное уравнение на химпотенциал:

$$\int_{w_{1d}}^{\tilde{\mu}} D_c \left(\frac{6w(w - \tilde{U})}{w - (1 - 0,5n)\tilde{U}} \right) dw = \frac{n}{12}. \quad (15)$$

В подынтегральном выражение сделана замена переменных $w = (\Omega + \mu) / W$. В уравнении (15) нижний предел интеграла определяется нижней границей нижней (нижний знак) хаббардовской зоны. В общем случае нижняя и верхняя границы нижней (индексы $1d$ и $1u$ соответственно) и верхней (индексы $2d$ и $2u$ соответственно) хаббардовских зон определяются выражениями:

$$w_{1d,1u} = \frac{1}{4} \left(2\tilde{U} \pm 1 - \sqrt{(2\tilde{U} \mp 1)^2 \mp 8\tilde{U}(1 - 0,5n)} \right),$$

$$w_{2d,2u} = \frac{1}{4} \left(2\tilde{U} \pm 1 + \sqrt{(2\tilde{U} \mp 1)^2 \mp 8\tilde{U}(1 - 0,5n)} \right). \quad (16)$$

Таким образом, выражения (11) и (15) позволяют численно рассчитать химический потенциал и спектральную плотность в приближении Хаббард-I.

На рисунке 1 представлена концентрационная зависимость хим-

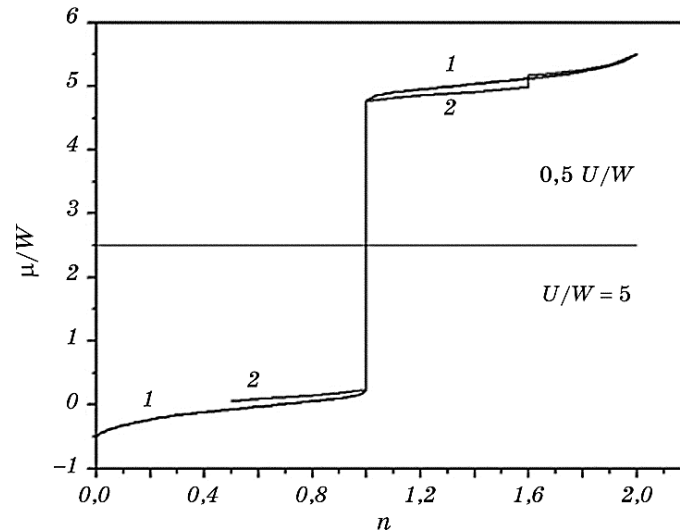


Рис. 1. Концентрационные зависимости химпотенциала в парамагнитной фазе при $T = 0$ К и $\tilde{U} = 5$ в приближении Хаббард-I (кривая 1) и с учётом электронных корреляций (кривая 2).

Fig. 1. The concentration dependences of the chemical potential in paramagnetic phase at $T = 0$ K and $\tilde{U} = 5$ in Hubbard-I approximation (curve 1) and with account for electron correlations (curve 2).

потенциала в приближении Хаббард-I (кривая 1) при $\tilde{U} = 5$. Из рисунка видно, что в случае полузаполненной зоны ($n = 1$) $\tilde{\mu}$ как функция n терпит разрыв. С уменьшением кулоновского отталкивания \tilde{U} этот разрыв уменьшается. Действительно, легко найти величины химпотенциалов $\tilde{\mu}_L$ и $\tilde{\mu}_H$ при предельных переходах $n \rightarrow 1 - \delta$ и $n \rightarrow 1 + \delta$ ($\delta \rightarrow 0$) соответственно:

$$\tilde{\mu}_L = \frac{1}{4} \left(2\tilde{U} + 1 - \sqrt{4\tilde{U}^2 + 1} \right), \quad \tilde{\mu}_H = \frac{1}{4} \left(2\tilde{U} - 1 + \sqrt{4\tilde{U}^2 + 1} \right). \quad (17)$$

Очевидно, что $\tilde{\mu}_H - \tilde{\mu}_L \rightarrow 0$ при $\tilde{U} \rightarrow 0$ и $\tilde{\mu}_H - \tilde{\mu}_L \rightarrow \tilde{U}$ при $\tilde{U} \rightarrow \infty$. Также из (17) следует, что в случае металла $\tilde{U} = 0$ имеем $\tilde{\mu}_H = \tilde{\mu}_L = 0$, т.е. для полузаполненной зоны химпотенциал лежит посередине её. Для сильно коррелированной ($\tilde{U} \rightarrow \infty$) слабо допированной дырками ($n \rightarrow 1 - \delta$) электронной системы химпотенциал $\tilde{\mu} \rightarrow \tilde{\mu}_L = 1/4$, т.е. электроны парамагнитной фазы заполняют всего четверть зоны W .

На рисунке 2 представлена нормированная спектральная плотность

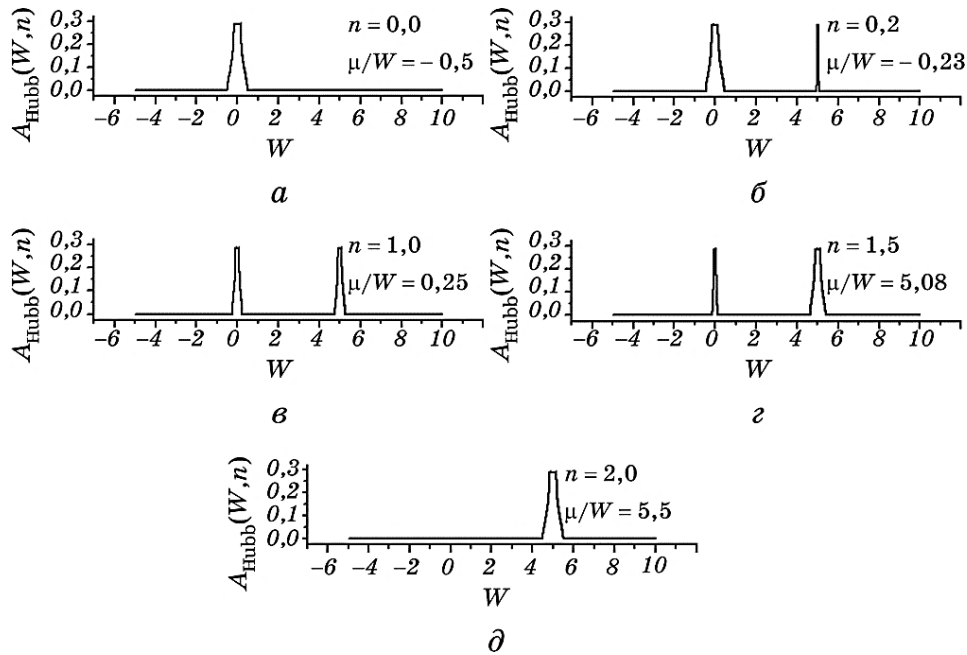


Рис. 2. Нормированная спектральная плотность при $\tilde{U} = 5$ для различных концентраций электронов.

Fig. 2. The normalized spectral density at $\tilde{U} = 5$ for different electron concentrations.

$$A_{\text{Hubb}}(w) = D_c \left(\frac{6w(w - \tilde{U})}{w - (1 - 0,5n)\tilde{U}} \right) \quad (18)$$

при $\tilde{U} = 5$ для различных концентраций электронов. Значение $w = \tilde{\mu}$ соответствует уровню химпотенциала. Из рисунка видно, что с ростом n ширина нижней зоны уменьшается, а верхней — увеличивается. При $n = 1$ ширины зон равны, а при $n = 2$ нижняя зона исчезает.

Таким образом, из-за наличия разрыва химпотенциала в случае полузаполненной зоны при любом конечном значении кулоновского отталкивания в приближении Хаббард-I всегда реализуется только диэлектрическая фаза.

В последующих работах Хаббарда [2] и других авторов [3–8] были предложены приближения, которые учитывали корреляционные эффекты. В рамках этих теорий предсказывался переход из диэлектрического состояния в металлическое при некотором критическом значении отношения U/W . Однако их ограниченность связана с тем, что вводился дополнительный параметр самосогласования в виде разноузельных корреляторов или гриновских функций, что не позволяет учитывать более тонкие корреляционные эффекты и связанные с ними скачкообразные переходы между термодинамически устойчивыми состояниями. Поэтому ниже представим последовательный учёт диаграммных однопетлевых вкладов к рассмотренному выше эффективному полю в приближении Хаббард-I.

3. УЧЁТ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ

В данном разделе рассмотрим влияние неупругих кинематических и одноузельных кулоновских взаимодействий электронов на основное состояние хаббардовского парамагнетика. Для решения данной проблемы необходимо иметь уравнение на химпотенциал. На первый взгляд, задача состоит в получении выражения для спектральной плотности $R_\sigma(\Omega)$, как это было сделано в предыдущем разделе, а затем по аналогии с выражением (15) в расчёте химпотенциала. Однако данный план не сработает, поскольку в этом случае мы сможем просуммировать только конечное число диаграмм, среди которых некоторые диаграммы пропорциональны $1/T$, что при $T \rightarrow 0$ К порождает расходимости. Поэтому рассчитаем сначала непосредственно среднее $\langle F^{\sigma^0} \rangle = \langle X^{\sigma\sigma} + X^{00} \rangle$, что позволит нам избежать указанные расходимости. В первом порядке по обратному эффективному радиусу взаимодействия можно записать:

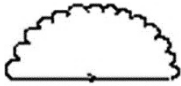
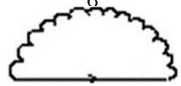
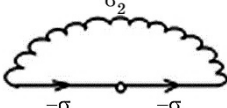
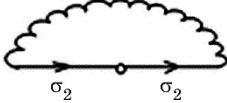
$$\langle X_p^{\sigma\sigma} + X_p^{00} \rangle = \langle X_p^{\sigma\sigma} + X_p^{00} \rangle_0 - \int_0^\beta d\tau_l \int_0^\beta d\tau_m \sum_{lm\sigma_1} \langle T_\tau (X_p^{\sigma\sigma} + X_p^{00}) \times$$

$$\begin{aligned} & \times \left[X_l^{\sigma_1 0}(\tau_l) X_m^{0 \sigma_1}(\tau_m) \frac{1}{\beta} B^{0 \sigma_1, \sigma_1 0}(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m, \tau_l - \tau_m) + \right. \\ & \left. + X_l^{2 - \sigma_1}(\tau_l) X_m^{-\sigma_1 2}(\tau_m) \frac{1}{\beta} B^{-\sigma_1 2, 2 - \sigma_1}(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m, \tau_l - \tau_m) \right] >_0 \end{aligned} \quad (19)$$

где $B^{\alpha\beta, \beta\alpha}(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m, \tau_l - \tau_m)$ — линия эффективного кинематического взаимодействия в приближении Хаббард-I и символ $\langle \dots \rangle_0$ обозначает статистическое усреднение по невозмущённому гамильтониану \hat{H}_0 . При этом

$$\langle F^{\sigma 0} \rangle_0 = \frac{e^{\beta\bar{\mu}} + 1}{1 + 2e^{\beta\bar{\mu}} + e^{\beta(2\bar{\mu} - \bar{U})}}, \quad \langle F^{2\sigma} \rangle_0 = \frac{e^{\beta\bar{\mu}} + e^{\beta(2\bar{\mu} - \bar{U})}}{1 + 2e^{\beta\bar{\mu}} + e^{\beta(2\bar{\mu} - \bar{U})}}. \quad (20)$$

Используя теорему Вика для хаббардовских операторов, не составляет труда рассчитать все корреляторы, входящие в (19). Оказывается, что имеется всего четыре различных вклада, которым можно сопоставить следующие диаграммы:

	$\beta\delta\mu_\sigma = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\omega_n} \beta B^{0\sigma, \sigma 0}(\mathbf{q}, i\omega_n) G_{0\sigma}(i\omega_n)$	(21)
	$\beta\delta\mu_{2\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\omega_n} \beta B^{\sigma 2, 2\sigma}(\mathbf{q}, i\omega_n) G_{\sigma 2}(i\omega_n)$	
	$v_{0-\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\omega_n} \beta B^{0-\sigma, -\sigma 0}(\mathbf{q}, i\omega_n) (G_{0-\sigma}(i\omega_n))^2$	
	$v_{2\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\omega_n} \beta B^{\sigma 2, 2\sigma}(\mathbf{q}, i\omega_n) (G_{\sigma 2}(i\omega_n))^2$	

Как видно из (21), первые две диаграммы порождают расходимость $1/T$ при $T \rightarrow 0$ К. Оказывается, что данную расходимость можно избежать, если просуммировать бесконечную совокупность таких однотипных диаграмм. Это легко сделать, учитывая, что вклады от указанных диаграмм образуют ряд Тейлора, который легко суммируется.

С учётом сказанного, на рис. 3 представлены все диаграммные вклады в $\langle F^{\sigma 0} \rangle = \langle X^{\sigma\sigma} + X^{00} \rangle$. Светлые точки на рисунке обозначают $\langle F^{\sigma 0} \rangle_0$ или $\langle F^{2\sigma} \rangle_0$ в соответствии с видом диаграммы, а тёмные — индексные свёртки для связанных диаграмм, которые указывают на производные указанных средних по параметрам гамильтониана \hat{H}_0 .

Ряд на рисунке 3 представляется в аналитическом виде:

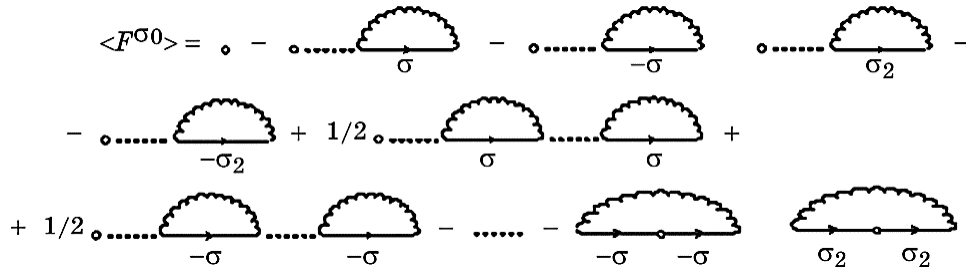


Рис. 3. Диаграммные вклады в комбинированную узельную заселённость $\langle F^{\sigma_0} \rangle$ электронами.

Fig. 3. The diagram contributions to the combined site electron occupancy $\langle F^{\sigma_0} \rangle$.

$$\begin{aligned}
 \langle F_p^{\sigma_0} \rangle &= \langle F^{\sigma_0} \rangle_0 - \beta \delta \mu_\sigma \langle F_p^{\sigma_0} F_l^{\sigma_0} \rangle_0 - \beta \delta \mu_{-\sigma} \langle F_p^{\sigma_0} F_l^{-\sigma_0} \rangle_0 \\
 &\quad - \beta \delta \mu_{2\sigma} \langle F_p^{\sigma_0} F_l^{2\sigma} \rangle_0 - \beta \delta \mu_{2-\sigma} \langle F_p^{\sigma_0} F_l^{2-\sigma} \rangle_0 + \\
 &\quad + \frac{1}{2!} (\beta \delta \mu_\sigma)^2 \langle F_p^{\sigma_0} F_l^{\sigma_0} F_m^{\sigma_0} \rangle_0 + \frac{1}{2!} (\beta \delta \mu_{-\sigma})^2 \langle F_p^{\sigma_0} F_l^{-\sigma_0} F_m^{-\sigma_0} \rangle_0 - \dots \\
 &\quad - \nu_{0-\sigma} \langle F^{-\sigma_0} \rangle_0 - \nu_{2\sigma} \langle F^{2\sigma} \rangle_0 .
 \end{aligned} \tag{22}$$

Чтобы выполнить суммирование бесконечного ряда (22), введём производящие функционалы:

$$\begin{aligned}
 \langle F^{\sigma_0}(\varepsilon_\sigma, \varepsilon_{-\sigma}, \varepsilon_{2\sigma}, \varepsilon_{-2\sigma}, \lambda_0, \lambda_+, \lambda_-) \rangle_0 &= \partial_\sigma \ln \text{Sp}(e^{-\beta \hat{H}_0(\lambda_0, \lambda_+, \lambda_-)}), \\
 \langle F^{2\sigma}(\varepsilon_\sigma, \varepsilon_{-\sigma}, \varepsilon_{2\sigma}, \varepsilon_{-2\sigma}, \lambda_0, \lambda_+, \lambda_-) \rangle_0 &= \partial_{2\sigma} \ln \text{Sp}(e^{-\beta \hat{H}_0(\lambda_0, \lambda_+, \lambda_-)}),
 \end{aligned} \tag{23}$$

где введены обозначения $\partial_\sigma = \frac{\partial}{\partial(-\beta \varepsilon_\sigma)}$ и $\partial_{2\sigma} = \frac{\partial}{\partial(-\beta \varepsilon_{2\sigma})}$, а также \hat{H}_0

из (4) представлен в параметрической форме:

$$\hat{H}_0(\lambda_0, \lambda_+, \lambda_-) = (\lambda_0 + \varepsilon_+ + \varepsilon_-) X^{00} + \sum_\sigma (\lambda_\sigma + \varepsilon_\sigma + \varepsilon_{2\sigma}) X^{\sigma\sigma} + \sum_\sigma \varepsilon_{2\sigma} X^{22}. \tag{24}$$

Очевидно, что при $\lambda_\sigma = -\varepsilon_{2\sigma}$ и $\lambda_0 = -\varepsilon_\sigma - \varepsilon_{-\sigma}$, где $\varepsilon_\sigma = -\mu$ и $\varepsilon_{2\sigma} = U/2 - \mu$ получим исходный гамильтониан \hat{H}_0 . Тогда ряд (22) аналитически представляется следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \langle F_p^{\sigma_0} \rangle &= \langle F^{\sigma_0} \rangle_0 - \beta \delta \mu_\sigma \partial_\sigma \langle F_p^{\sigma_0} \rangle_0 - \beta \delta \mu_{-\sigma} \partial_{-\sigma} \langle F_p^{\sigma_0} \rangle_0 - \\
 &\quad - \beta \delta \mu_{2\sigma} \partial_{2\sigma} \langle F_p^{\sigma_0} \rangle_0 - \beta \delta \mu_{2-\sigma} \partial_{2-\sigma} \langle F_p^{\sigma_0} \rangle_0 + \frac{1}{2!} (\beta \delta \mu_\sigma)^2 \partial_\sigma^2 \langle F_p^{\sigma_0} \rangle_0 + \\
 &\quad + \frac{1}{2!} (\beta \delta \mu_{-\sigma})^2 \partial_{-\sigma}^2 \langle F_p^{\sigma_0} \rangle_0 - \dots - \nu_{0-\sigma} \langle F^{-\sigma_0} \rangle_0 - \nu_{2\sigma} \langle F^{2\sigma} \rangle_0 .
 \end{aligned} \tag{25}$$

Из (25) видно, что за исключением последних двух слагаемых мы имеем ряд, сумма которого есть

$$\langle F^{\sigma 0} \rangle_1 = \langle F^{\sigma 0}(\varepsilon_{\sigma} + \delta\mu_{\sigma}, \varepsilon_{-\sigma} + \delta\mu_{-\sigma}, \varepsilon_{2\sigma} + \delta\mu_{2\sigma}, \varepsilon_{-2\sigma} + \delta\mu_{-2\sigma}, \lambda_0, \lambda_+, \lambda_-) \rangle_0.$$

Окончательно получаем выражение для $\langle F^{\sigma 0} \rangle$, определяющее уравнение относительно химпотенциала:

$$\langle F^{\sigma 0} \rangle = 1 - 0,5n = \langle F^{\sigma 0} \rangle_1 - v_{\sigma}, \quad (26)$$

где с учётом выполненного суммирования по частотам в (21) и использования указанного в предыдущем разделе метода обратной функции введены следующие обозначения

$$\begin{aligned} \langle F^{\sigma 0} \rangle_1 &= \frac{e^{\beta(\tilde{\mu} + \delta\tilde{\mu})} + 1}{1 + 2e^{\beta(\tilde{\mu} + \delta\tilde{\mu})} + e^{\beta(2(\tilde{\mu} + \delta\tilde{\mu}) - \tilde{U})}}, \\ \delta\tilde{\mu} &= \delta\tilde{\mu}_{-\sigma} - \delta\tilde{\mu}_{2-\sigma} = -6\tilde{U}^2 \int_{w_{1d}/\tilde{U}}^{\tilde{\mu}/\tilde{U}} d\omega D_C \left(\frac{6\omega(\omega-1)\tilde{U}}{\omega-1+0,5n} \right) \frac{\omega(\omega-1)}{(\omega-1+0,5n)^2}, \\ v_{\sigma} &= v_{0-\sigma} \langle F^{-\sigma 0} \rangle_0 + v_{2\sigma} \langle F^{2\sigma 0} \rangle_0 = \\ &= 6\tilde{U} \int_{w_{1d}}^{\tilde{\mu}/\tilde{U}} d\omega D_C \left(\frac{6\omega(\omega-1)\tilde{U}}{\omega-1+0,5n} \right) \frac{\langle F^{-\sigma 0} \rangle_0 (\omega-1)^2 + \langle F^{2\sigma 0} \rangle_0 \omega^2}{(\omega-1+0,5n)^2}, \\ &\quad - \frac{\langle F^{-\sigma 0} \rangle_0 f(-\tilde{\mu})}{1-0,5n} - \frac{2 \langle F^{2\sigma 0} \rangle_0 f(\tilde{U} - \tilde{\mu})}{n}. \end{aligned} \quad (27)$$

Как видно из полученных выражений (26) и (27), в пределе $T \rightarrow 0$ К ранее существовавшие расходимости исчезли. Таким образом, получено уравнение (26) на химпотенциал, в котором учтены в рамках выбранного приближения корреляционные поправки. Далее рассматриваем основное состояние, т.е. полагаем $T = 0$ К. Тогда видно, что средние $\langle F^{\sigma 0} \rangle_0$, $\langle F^{2\sigma 0} \rangle_0$, $\langle F^{2\sigma 0} \rangle_0$ и $\langle F^{\sigma 0} \rangle_1$ играют роль параметров порядка, определяющих тот или иной тип термодинамического состояния электронной подсистемы. Анализ показывает, что возможны два основных состояния с положительным химпотенциалом, в зависимости от соотношения между $\tilde{\mu}$ и \tilde{U} . Отрицательные $\tilde{\mu}$ не рассматриваем, так как это — случай сильно разрежённого электронного газа.

В первом случае $\tilde{\mu} > 0$, $\tilde{\mu} < \tilde{U}$. При этом $0 < \tilde{\mu} + \delta\tilde{\mu} < \tilde{U}$ и $\langle F^{\sigma 0} \rangle_0 = \langle F^{2\sigma 0} \rangle_0 = \langle F^{\sigma 0} \rangle_1 = 1/2$. Эти параметры порядка указывают, что при динамике преимущественно идёт однократное заполнение узлов, характерное для диэлектрика.

Тогда уравнение на химпотенциал в случае диэлектрика принимает вид:

$$1 - \frac{n}{2} = \frac{1}{2} - 6\tilde{U} \int_{w_{1d}/\tilde{U}}^{\tilde{\mu}/\tilde{U}} d\omega D_c \left(\frac{6\omega(\omega-1)\tilde{U}}{\omega-1+0,5n} \right) \frac{1}{2} \frac{(\omega-1)^2 + \omega^2}{(\omega-1+0,5n)^2} + \frac{1}{2-n}. \quad (28)$$

Интеграл в уравнении (28) упрощается для $n = 1$, если осуществить замену переменных $\frac{6\omega(\omega-1)\tilde{U}}{\omega-1+0,5n} = \varepsilon$. Тогда вместо (28) получаем уравнение

$$I \left(\frac{6\tilde{\mu}(\tilde{\mu}-\tilde{U})}{\tilde{\mu}-0,5\tilde{U}} \right) = 1, \quad (29)$$

где $I(x) = \int_{-3}^x D_c(\varepsilon) d\varepsilon$, если $n \rightarrow 1 - \delta$ и $\delta \rightarrow 0$, или

$$1 + I \left(\frac{6\tilde{\mu}(\tilde{\mu}-\tilde{U})}{\tilde{\mu}-0,5\tilde{U}} \right) = 1, \quad (30)$$

если $n \rightarrow 1 + \delta$ и $\delta \rightarrow 0$. Очевидно, что в случае (29) имеем $\frac{6\tilde{\mu}(\tilde{\mu}-\tilde{U})}{\tilde{\mu}-0,5\tilde{U}} = 3$, тогда как из (30) следует, что $\frac{6\tilde{\mu}(\tilde{\mu}-\tilde{U})}{\tilde{\mu}-0,5\tilde{U}} = -3$. Решения данных уравнений для $\tilde{\mu}$ с учётом его знака и условий соотношения с \tilde{U} совпадают с хипотенциалами (17) для нижней и верхней зон в приближении Хаббард-I. Таким образом, при $n = 1$ хипотенциалы в приближении Хаббард-I и с учётом корреляций совпадают.

Во втором случае, когда $\tilde{\mu} > \tilde{U} > 0$, $\tilde{\mu} + \delta\tilde{\mu} > \tilde{U}$, имеем $\langle F^{\sigma 0} \rangle_0 = \langle F^{\sigma 0} \rangle_1 = 0$ и $\langle F^{2\sigma} \rangle_0 = 1$. Таким образом, для металла заполняются узлы в основном двумя электронами. Из (25) и (26) следует, что уравнение для $\tilde{\mu}$ есть

$$1 - \frac{n}{2} = \frac{2}{n} - 6\tilde{U} \int_{w_{1d}/\tilde{U}}^{\tilde{\mu}/\tilde{U}} d\omega D_c \left(\frac{6\omega(\omega-1)\tilde{U}}{\omega-1+0,5n} \right) \frac{\omega^2}{(\omega-1+0,5n)^2}. \quad (31)$$

К сожалению, интегралы в (28) и (31) при $n \neq 1$ нельзя упростить; поэтому далее необходимо провести численные расчёты. Ниже будет показано, что металлическая фаза существует только при $n \geq 1$. В случае $n = 2$ легко получить, что $\tilde{\mu} = \tilde{U} + 1/2$.

На рисунке 4 представлены зависимости $\tilde{\mu}$ от электронной концентрации для различных величин кулоновского отталкивания. Из рисунка видно, что всегда существует разрыв на данных кривых для диэлектрика в случае половинного заполнения зоны. Также

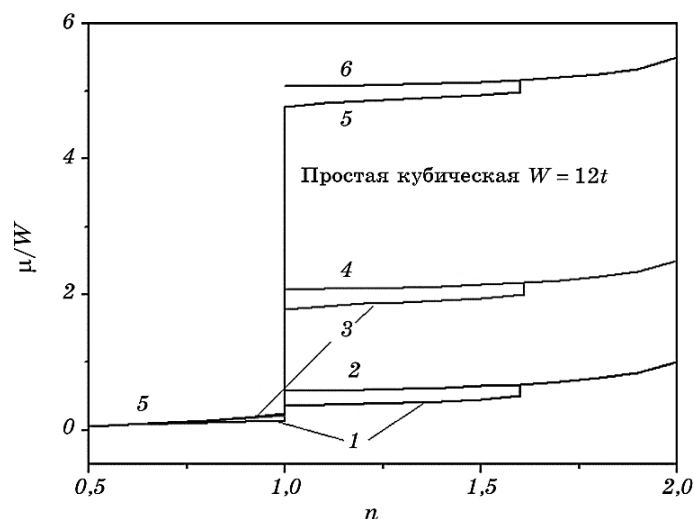


Рис. 4. Концентрационные зависимости химпотенциала для диэлектрика (кривые 1, 3 и 5) и для металла (кривые 2, 4 и 6) при $U/W = 0,5, 2$ и 5 соответственно.

Fig. 4. The concentration dependences of the chemical potential for insulator (curves 1, 3 and 5) and for metal (curves 2, 4 and 6) at $U/W = 0.5, 2$ and 5, respectively.

при $n \cong 1,6$ диэлектрическое состояние скачкообразно переходит в металлическое. К сожалению, из данных расчётов нельзя сделать вывод о том, при каких величинах \tilde{U} произойдёт переход из металлического состояния в диэлектрическое. Чтобы ответить на этот вопрос, необходимо сравнить внутренние энергии указанных состояний.

4. СПЕКТРАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ И ЭНЕРГИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

Из предыдущего раздела нам известно, что спектральная плотность $A_{\sigma}(\Omega, \mathbf{q})$ выражается через мнимую часть функции Грина $G_{\sigma}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, \tau) = -\langle T_{\tau} c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^{\dagger}(0) \rangle$. Поэтому необходимо рассчитать вклады всех однопетлевых диаграмм в данный коррелятор. В целом задача аналогична той, которая решалась в предыдущем разделе для расчёта комбинированной заселённости $\langle F^{\sigma 0} \rangle$. Поэтому, не останавливаясь на деталях вывода достаточно громоздких выражений, приведём только графические результаты для однородной суммарной спектральной плотности $R(\Omega) = (2\pi N)^{-1} \sum_{\mathbf{q}\sigma} A_{\sigma}(\Omega, \mathbf{q})$.

На рисунке 5 представлены суммарные по спину электронные спектральные плотности $R(\Omega)$ при $\tilde{U} = 0,5$ и $n = 1$ для диэлектрика (а, б) и для металла (в). Из рисунка видно, что если приближаться к половинному заполнению снизу (дырочно-допированные системы), то щель формируется выше уровня Ферми и она существенно меньше \tilde{U} . При этом на уровне Ферми спектральная плотность конечна, хотя и резко падает выше него. Такое противоречие устраняется, как будет видно ниже, из сравнения внутренних энергий для металла и диэлектрика. При половинном заполнении зоны сверху на уровне Ферми имеем небольшую квазищель. Для металла на уровне Ферми щель отсутствует.

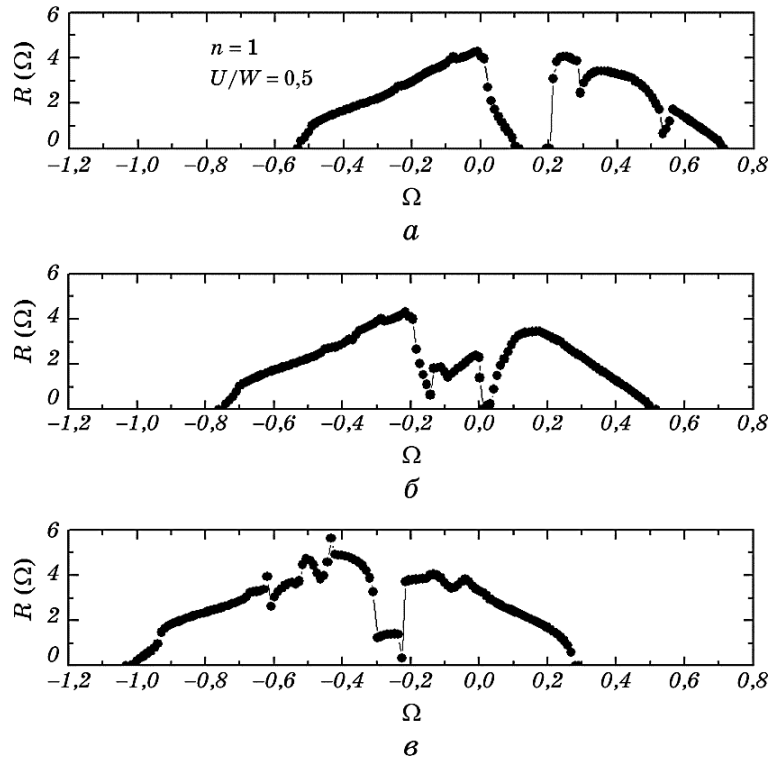


Рис. 5. Однородная суммарная электронная спектральная плотность $R(\Omega)$ при $\tilde{U} = 5$ и $W = 1$, где Ω — частота в единицах ширины W зоны, для половинного заполнения зоны в состоянии диэлектрика при $n = 1 - \delta$ (а) и $n = 1 + \delta$ (б) при $\delta \rightarrow 0$ и для металла (в). Значение $\Omega = 0$ соответствует уровню химпотенциала из рис. 4.

Fig. 5. The total uniform electron spectral density $R(\Omega)$ at $\tilde{U} = 5$, where Ω is the frequency in the units of bandwidth, for a half-filled band in the insulator state at $n = 1 - \delta$ (a) and $n = 1 + \delta$ (b) at $\delta \rightarrow 0$ and for metal (v). Value $\Omega = 0$ corresponds to a level of the chemical potential from Fig. 4.

На рисунке 6 представлены суммарные по спину электронные спектральные плотности $R(\Omega)$ при $\tilde{U} = 2$ и $n = 1$ для диэлектрика (*a*, *б*) и для металла (*в*). Из рисунка видно, что при таких \tilde{U} уже сформировались щели выше и ниже уровня Ферми при заполнении зоны снизу и сверху от $n = 1$ соответственно.

Отметим, что при бесконечно малом электронном допировании полузаполненной зоны (см. рис. 6, *б*) в пределе $n = 1$ спектральная плотность на уровне Ферми равна нулю. Таким образом, в этом случае проводимость будет равна нулю, т.е. имеем диэлектрик. При этом ширина щели $\tilde{U} \cong 3/2$. В металлическом состоянии уровень Ферми лежит вблизи середины верхней хаббардовской зоны, что характерно для металла. При больших значениях \tilde{U} зависимости $R(\Omega)$ имеют подобный вид. Пока нельзя сказать, какое состояние

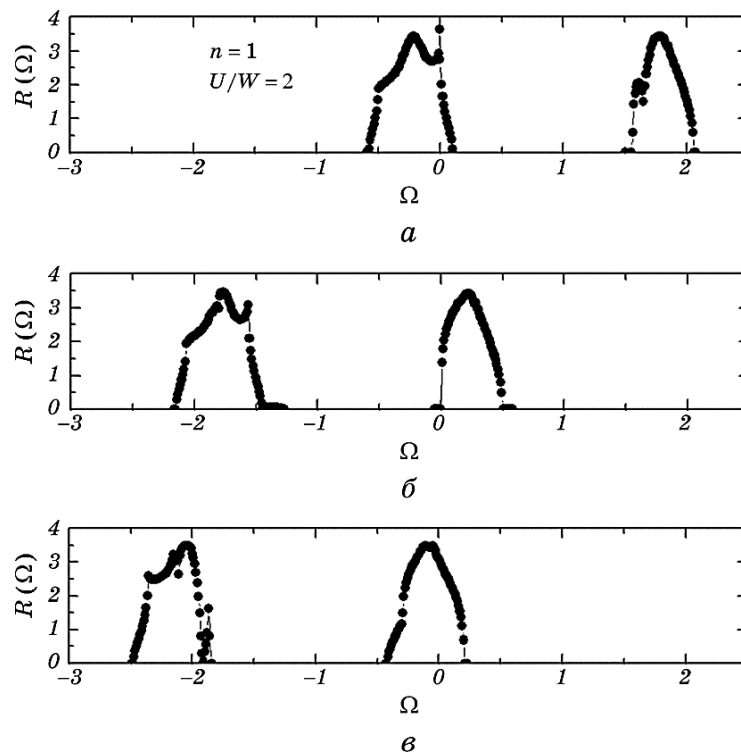


Рис. 6. Однородная суммарная электронная спектральная плотность $R(\Omega)$ при $\tilde{U} = 2$ для половинного заполнения зоны в состоянии диэлектрика при $n = 1 - \delta$ (*a*) и $n = 1 + \delta$ (*б*) при $\delta \rightarrow 0$ и для металла (*в*). Обозначения те же, что и на рис. 5.

Fig. 6. The total uniform electron spectral density $R(\Omega)$ at $\tilde{U} = 2$, for a half-filled band in the insulator state at $n = 1 - \delta$ (*a*) and $n = 1 + \delta$ (*б*) at $\delta \rightarrow 0$ and for metal (*в*). The notations are the same as in Fig. 5.

реализуется в соответствии с ранее введёнными параметрами порядка. Необходимо получить выражение для энергии основного состояния.

Для определения внутренней энергии E воспользуемся основным соотношением Калашникова–Фрадкина [13], которое позволяет выразить среднюю энергию взаимодействия $\langle \hat{V} \rangle$ из (5) через спектральную плотность:

$$\frac{1}{N} \sum_{p\sigma} \langle [\hat{H}a_{p\sigma}^+] a_{p\sigma} \rangle = \frac{1}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\omega A_{\sigma}(\omega, \mathbf{k})}{e^{\beta\omega} + 1} d\omega. \quad (32)$$

Выделив из \hat{H} невозмущённый гамильтониан \hat{H}_0 , легко найти, что

$$\langle \hat{V} \rangle = \frac{1}{2\pi N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\omega A_{\sigma}(\omega, \mathbf{k})}{e^{\beta\omega} + 1} d\omega - \sum_{\alpha} \tilde{\epsilon}_{\alpha} \langle X^{\alpha\alpha} \rangle, \quad (33)$$

где $\tilde{\epsilon}_{+} = \tilde{\epsilon}_{-} = -\tilde{\mu}$, $\tilde{\epsilon}_0 = 0$ и $\tilde{\epsilon}_2 = 2(\tilde{U} - \tilde{\mu})$. Учитывая, что $E = \mu n + \langle \hat{H}_0 \rangle + \langle \hat{V} \rangle$, окончательно получаем выражение для энергии

$$E = \mu n - U \langle X^{22} \rangle + \frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\omega A_{\sigma}(\omega, \mathbf{k})}{e^{\beta\omega} + 1} d\omega, \quad (34)$$

где вероятность $\langle X^{22} \rangle$ узельной заселённости двумя электронами имеет вид:

$$\langle X^{22} \rangle = \frac{n}{2} - \langle X^{\sigma\sigma} \rangle_1 - v_{\sigma} \langle F^{\sigma 0} \rangle_0 + v_{2\sigma} \langle F^{2\sigma} \rangle_0. \quad (35)$$

Необходимо отметить, что всегда $\langle X^{22} \rangle \geq 0$. Из уравнения (31) на химпотенциал для металла следует, что слагаемое, содержащее интеграл, которое обозначим через I , зависит только от n :

$$I = \frac{2}{n} + \frac{n}{2} - 1. \quad (36)$$

Это слагаемое входит и в уравнение (35), если учесть, что $\langle X^{\sigma\sigma} \rangle_1 = v_{\sigma} \langle F^{\sigma 0} \rangle_0 = 0$. В результате имеем очевидное соотношение

$$\langle X^{22} \rangle = n - 1 \geq 0. \quad (37)$$

Таким образом, металлическая фаза существует только для электронно-допированной системы. При $n < 1$ решения для чисто металлической фазы не существует, так как в этом случае $\langle X^{22} \rangle < 0$.

Используя (34), можно рассчитать величины энергий основного состояния полузаполненной хаббардовской системы для металла и диэлектрика. На рисунке 7 представлена зависимость энергии ос-

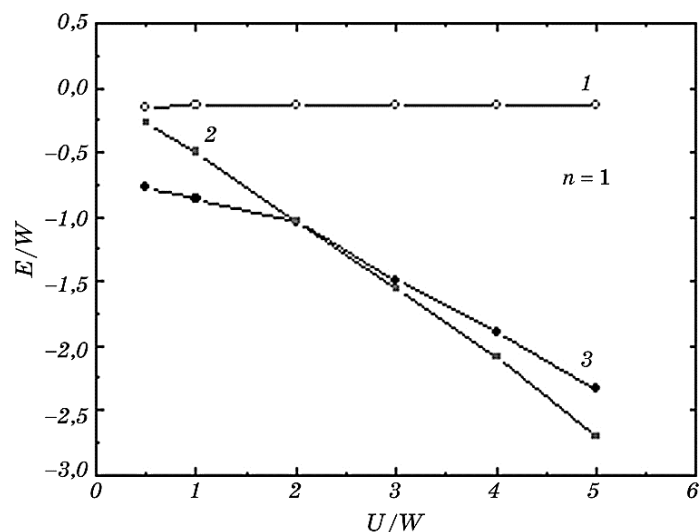


Рис. 7. Зависимость энергии основного состояния от величины одноузельного кулоновского отталкивания $\tilde{U} = U/W$ в случае половинного заполнения зоны для диэлектрика в пределах бесконечно малого числа дырок (кривая 1), бесконечно малого электронного допирования (кривая 2) и для металла (кривая 3).

Fig. 7. The dependence of the ground state energy on a parameter of the single site Coulomb repulsion $\tilde{U} = U/W$ in the case of a half-filled band for insulator in the both limits of an infinite small number of holes (curve 1) and of an infinite small electron doping (curve 2), and for a metal (curve 3).

новного состояния от величины одноузельного кулоновского отталкивания $\tilde{U} = U/W$ в случае $n = 1$ для диэлектрика в пределе бесконечно малого числа дырок (кривая 1), при бесконечно малом электронном допировании (кривая 2) и для металла (кривая 3). Из рисунка видно, что при $\tilde{U} = \tilde{U}_{cr} = 2,1$ происходит фазовый переход в металлическое состояние. Отметим, что в приближении Хаббард-III [2] критическое значение $\tilde{U}_{cr}^{Hubb} = 0,87$ что существенно меньше величины 2,1. В модели Хаббарда с бесконечной размерностью решётки, которая сводится к однопримесной модели Андерсона, получено критическое значение $\tilde{U}_{cr}^{\infty} = 3$ [4].

Следует отметить, что при $n = 1$ и $\tilde{U} > \tilde{U}_{cr}$ минимальную энергию имеет система в пределе бесконечно малого электронного допирования (кривая 2 на рис. 7). Это означает, что химпотенциал полузаполненной зоны лежит на дне верхней хаббардовской зоны, т.е. у нас случай полностью заполненной нижней зоны с энергетической щелью (см. рис. 6, б) и нулевой спектральной плотностью на уровне химпотенциала. Очевидно, что проводимость тогда равна нулю.

Уже при конечном малом дырочном допировании химпотенциал

скачком падает по величине согласно рис. 4. Величина энергии изменится от значений приближённо как на кривой 2 рис. 7 до значений, приблизительно равных величинам на кривой 1 того же рисунка. Параметр порядка для металлического состояния не реализуется, так как при $n < 1$ всегда $\langle X^{22} \rangle < 0$. При этом положение уровня химпотенциала таково, что спектральная плотность конечна, когда $\Omega = 0$, как это показано на рис. 6, а. Как будет видно ниже, это приводит к скачкообразному изменению проводимости от нулевого значения к конечной величине в согласии с экспериментом. Этот факт не могли объяснить ранее известные теории [5].

В заключение, рассмотрим транспортные свойства хаббардовского парамагнетика в основном состоянии. Известно [14], что диагональная компонента проводимости $\sigma(\omega, T)$ в изотропном случае ПК-решётки с постоянной a выражается через спектральную плотность следующим образом

$$\sigma(\tilde{\omega}, T) = \frac{e^2}{3a\pi\hbar} \frac{W}{6} \sum_{\sigma} \int_{-3}^3 d\varepsilon \varepsilon D_{\sigma}(\varepsilon) \Phi_{\sigma}(\varepsilon, \tilde{\omega} + \tilde{\mu}), \quad (38)$$

где e — заряд электрона, а функция $\Phi(\varepsilon, \tilde{\omega} + \tilde{\mu})$ связана с неоднородной $A_{\sigma}(\tilde{\omega} + \tilde{\mu}, \mathbf{k})$ дифференциальным уравнением

$$\frac{6}{W} \frac{d\Phi_{\sigma}(\varepsilon, \tilde{\omega} + \tilde{\mu})}{d\varepsilon} = \frac{1}{4} A_{\sigma}^2(\tilde{\omega} + \tilde{\mu}, \varepsilon). \quad (39)$$

Нас интересует остаточная проводимость $\sigma(0, 0)$. Как было показано ранее, на уровне химпотенциала, когда $\tilde{\omega} = 0$, для диэлектрика при $\tilde{U} > \tilde{U}_{cr}$ спектральная плотность $A_{\sigma}(\tilde{\mu}, \varepsilon) = 0$, т.е. $\Phi_{\sigma}(\varepsilon, \tilde{\mu}) = \text{const}$, что согласно (38) даёт $\sigma(0, 0) = 0$. Решение дифференциального уравнения (39) в случае металла не представляет трудностей, т.к. зависимость функции Грина от ε очень простая

$$\beta G_{\sigma}(\tilde{\mu}, \varepsilon) = \frac{6}{W} \left\{ \frac{g_{1\sigma}(\tilde{\mu})}{\tilde{t}_{2\sigma}(\tilde{\mu}) - \varepsilon} - \frac{g_{2\sigma}(\tilde{\mu})}{\tilde{t}_{1\sigma}(\tilde{\mu}) - \varepsilon} \right\}, \quad (40)$$

где функции $g_{i\sigma}(\tilde{\mu})$ и $\tilde{t}_{i\sigma}(\tilde{\mu})$ в общем случае комплексны и определяются диаграммными вкладами и решёточной функцией Грина $G(t)$.

На рисунке 8 представлены зависимости проводимости от величины параметра одноузельного кулоновского отталкивания электронов в основном состоянии при величине постоянной ПК-решётки 5 \AA для полузаполненной зоны (а) и проводимость как функция электронной концентрации (б) для величин параметра $\tilde{U} = 2$ (кривая 1) и для $\tilde{U} = 5$ (кривая 2). Из рисунка 8, а видно, что в металлической фазе существует остаточное сопротивление, обусловленное электронно-дырочным неупругим рассеянием. При

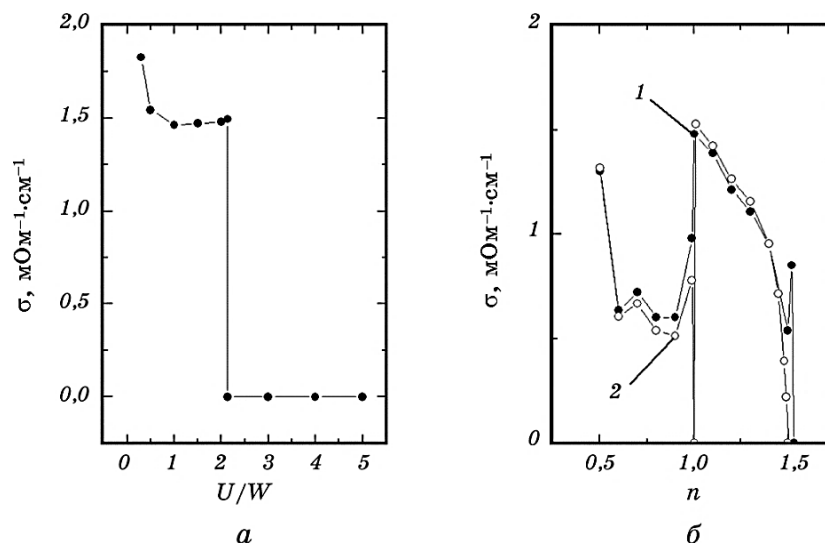


Рис. 8. Зависимость проводимости от величины параметра одноузельного кулоновского отталкивания электронов при температуре $T = 0$ К и величине постоянной ПК-решётки $a = 5$ Å для полузаполненной зоны (а) и проводимость как функция электронной концентрации (б) (дырочно-электронное допирование) для $\tilde{U} = 2$ (кривая 1) и $\tilde{U} = 5$ (кривая 2).

Fig. 8. The dependence of the conductivity on a parameter of the single site Coulomb repulsion at the temperature $T = 0$ K and simple cubic lattice constant $a = 5$ Å for a half filled band (a) and conductivity as a function of the electron concentration (б) (the hole-electron doping) for $\tilde{U} = 2$ (curve 1) and $\tilde{U} = 5$ (curve 2).

этом величина проводимости достаточно близка к металлической согласно принципу Иоффе–Регеля [5], когда минимальная средняя длина свободного пробега электрона — порядка постоянной решётки. При фазовом переходе происходит скачкообразное изменение удельного сопротивления, наблюдаемое экспериментально в металлооксидах. Данный эффект не нашёл объяснения в рамках теорий Хаббарда [1, 2], а также последующих теориях [3–8], предсказывающих непрерывную эволюцию металлической фазы в диэлектрическую.

На рисунке 8, б показано, как дырочно-электронное допирование влияет на проводимость металла (кривая 1, $\tilde{U} = 2$) и диэлектрика (кривая 2, $\tilde{U} = 5$). При этом необходимо отметить, что при $\tilde{U} = 2$ и $n < 1$ металлическое состояние не существует, а реализуется допированный дырками диэлектрик. При $n \geq 1$ кривые 1 и 2 соответствуют металлу с наименьшей внутренней энергией и с конечной проводимостью, которая стремится к нулю при $n > 1,5$. При $n > 1,5$ спектральная плотность равна 0, что может указывать на когерент-

ность возбуждений и дальнейшую электронную локализацию, обусловленную полным заполнением зоны. С другой стороны, увеличение кулоновского отталкивания до $\tilde{U} = 5$ слабо влияет на проводимость за исключением области вблизи половинного заполнения зоны. При $n = 1$ проводимость скачком падает до нуля, отражая диэлектрическое состояние, а затем скачком возрастает до $1,53 \text{ мОм}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}$ при $n = 1,01$ (см. кривая 2 на рис. 8).

5. ВЫВОДЫ

В заключение сформулируем основные выводы работы. В рамках временной теории возмущений предложен метод последовательного учёта корреляционных эффектов в модели Хаббарда. Это позволило описать состояния металла и диэлектрика соответствующими параметрами порядка, которые определяют самосогласованные вероятности заселённости узла электронами и дырками. При этом металлическое состояние реализуется только при $n \geq 1$ и величине параметра кулоновского отталкивания $\tilde{U} < 2,1$.

Установлено, что в случае половинного заполнения зоны химпотенциал системы терпит разрыв для диэлектрического состояния. При этом нижний край верхней хаббардовской зоны совпадает с уровнем химпотенциала. Таким образом, полностью заполненная нижняя хаббардовская зона отделена от уровня химпотенциала щелью, которая несколько меньше величины \tilde{U} . Поскольку на этом краю зоны спектральная плотность равна нулю, то отсюда имеем нулевую проводимость.

Конечное малое дырочное допирование диэлектрика приводит к резкому увеличению внутренней энергии из-за скачка химпотенциала. Также резко изменяется положение уровня химпотенциала в нижней хаббардовской зоне, который сдвигается от её верхнего края вовнутрь на конечную величину. Это приводит к скачкообразному изменению проводимости от нулевого значения к конечной величине, что соответствует экспериментальным данным для ряда соединений и даёт представление о природе указанного явления. Электронное допирование полузаполненной зоны показывает довольно слабую зависимость проводимости в основном состоянии от величины кулоновского отталкивания. Обнаруженное резкое уменьшение σ в области электронной концентрации $n \cong 3/2$ является предметом дальнейших исследований.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА—REFERENCES

1. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, **276**: 238 (1963).
2. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, **281**: 401 (1964).

3. Yu. A. Izyumov, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, **167**, No. 5: 465 (1997) (in Russian).
4. M. J. Rozenberg, G. Kotliar, and X. Y. Zhang, *Phys. Rev. B*, **49**, No. 15: 10181 (1994).
5. N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions* (London: Taylor & Francis: 1990).
6. W. F. Brinkman and T. M. Rice, *Phys. Rev. B*, **7**, No. 4: 1508 (1973).
7. R. O. Zaitsev, *Sov. Phys. JETP*, **48**, No. 6: 1193 (1978).
8. Yu. A. Izyumov and Yu. N. Skryabin, *Statisticheskaya Mekhanika Magnitoporyadochennykh Sistem* [Statistical Mechanics of the Magnetically Ordered Systems] (Moscow: Nauka: 1987) (in Russian).
9. E. E. Zubov, *Physica C*, **497**: 67 (2014).
10. T. Morita and T. Horiguchi, *J. Math. Phys.*, **12**, No. 6: 986 (1971).
11. G. S. Joyce, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, **273**: 583 (1973).
12. T. Morita and T. Horiguchi, *Numer. Math.*, **20**: 425 (1973).
13. O. K. Kalashnikov and E. S. Fradkin, *Teoreticheskaya i Matematicheskaya Fizika*, **5**, No. 3: 417 (1970) (in Russian).
14. D. M. Edwards, A. C. M. Green, and K. Kubo, *J. Phys.: Condens. Matter*, **11**: 2791 (1999).