Физика низких температур, 1996, т. 22, № 3, с. 282–288 УДК 538.1

Приближение статических флуктуаций для модели Хаббарда

В. В. Лоскутов

Марийский государственный педагогический институт, Республика Марий Эл, 424002, г. Йошкар-Ола, ул. Коммунистическая, 44

Г. И. Миронов, Р. Р. Нигматуллин

Казанский государственный университет, Татарстан, 420008, г. Казань, ул. Ленина, 18

Статья поступила в редакцию 12 июля 1995 г., после переработки 13 ноября 1995 г.

Продемонстрировано применение метода статических флуктуаций к модели Хаббарда. Получены выражения для антикоммутаторной функции Грина, намагниченности и концентрации системы. Проведено сравнение с точным решением в атомном пределе и точным решением одномерной модели при $T = 0$.

Продемонстровано застосування методу статичних флуктуацій до моделі Хаббарда. Отримано вирази для антикомутаторної функції Гріна, намагніченості та концентрації системи. Проведено порівняння з точним рішенням в атомній границі та точним рішенням одновимірної моделі при $T = 0$.

В связи с поисками нефононных механизмов сверхпроводимости в купратах значительно возрос интерес к исследованию сильно коррелированных систем, которые наиболее полно могут быть исследованы в рамках модели Хаббарда [1,2]. Поэтому изучение модели Хаббарда является одной из самых актуальных проблем теории твердого тела. При изучении этой модели обычно рассматриваются два предела: во-первых, случай слабого кулоновского взаимодействия, когда его характерная энергия U удовлетворяет неравенству $U << 2D$, где $2D$ — ширина зоны проводимости электронов, и, во-вторых, случай сильно коррелированной системы, при котором $U >> 2D$.

Однако эти предельные случаи не могут надежно предсказать поведение системы при $U \sim 2D$, поэтому необходим поиск методик решения проблемы Хаббарда, позволяющих исследовать эту систему вблизи $U \sim 2D$ в пределах контролируемых погрешностей вычисления тех или иных физических величин.

Целью данной работы является изучение модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций, предложенном в работах [3,4], и сравнение полученных нами результатов в рамках данного приближения с точными решениями одномерной модели Хаббарда [5] и модели Хаббарда в атомном пределе [1]. В данном приближении, являющемся, по сути, модификацией метода Хартри—Фока, при расцеплении уравнений движения используется применительно к модели Хаббарда схема $n_{f\sigma} = \langle n_{f\sigma} \rangle + \Delta n_{f\sigma}$, где $\Delta n_{f\sigma}$ — оператор флуктуаций числа частиц (предполагается, что $\Delta n_{f\sigma}$ не зависит от времени); $n_{f\sigma}$ — оператор числа электронов со спином σ на узле f решетки; σ — спин.

В модели Хаббарда гамильтониан можно представить в виде [1]

$$H = \sum_{f\sigma} \varepsilon_\sigma n_{f\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{f\sigma} n_{f\sigma} n_{f\bar{\sigma}} + \sum_{f, f', \sigma} B_{ff'} a^+_{f\sigma} a_{f'\sigma}, \tag{1}$$

где $a^+_{f\sigma}$ и $a_{f\sigma}$ — ферми-операторы рождения и уничтожения электронов на узле f решетки со спином σ; $n_{f\sigma} = a^+_{f\sigma} a_{f\sigma}$; $\varepsilon_\sigma = \varepsilon + \sigma\omega_e/2$, ε — энергия одноэлектронного атомного состояния, ω_e — зеемановская энергия электронов в статическом магнитном поле; U — энергия кулоновского отталкивания электронов с противоположными спинами на одной орбитали; $B_{ff'} = B(f - f')$ — интеграл переноса, описывающий перескоки электрона от атома к атому за счет кинетической энергии и кристаллического поля ($B_{ff} = B(0) = 0$); $\bar{\sigma} = -\sigma$.

1. Рассмотрим атомный предел, когда $B_{ff'} = B(f - f') = 0$. Для получения уравнения для корреляционной функции в атомном пределе рассмотрим уравнение движения для оператора $a^+_{f\sigma}$:

$$\frac{d}{d\tau} a^+_{f\sigma}(\tau) = \left[H, a^+_{f\sigma}(\tau)\right], \quad \tau = it \tag{2}$$

с гамильтонианом

© В. В. Лоскутов, Г. И. Миронов, Р. Р. Нигматуллин, 1996

$$H = \sum_{f\sigma} \varepsilon_\sigma a^+_{f\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{f\sigma} n_{f\sigma} n_{f\bar{\sigma}} \ . \qquad (3)$$

Вычислив соответствующие коммутаторы в (2), уравнение движения для оператора $a^+_{f\sigma}$ можно записать в виде

$$\frac{d}{d\tau} a^+_{f\sigma}(\tau) = \varepsilon_\sigma a^+_{f\sigma} + U n_{f\bar{\sigma}} a^+_{f\sigma} \ . \qquad (4)$$

Для дальнейшего анализа в уравнении (4) проведем процедуру расцепления, упомянутую выше:

$$n_{f\bar{\sigma}} \to \langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle + \Delta n_{f\bar{\sigma}} \ . \qquad (5)$$

Чтобы составить замкнутую систему уравнений движения, умножим уравнение (4) слева на $\Delta n_{f\bar{\sigma}}$, считая, что флуктуации являются статическими, т.е. не зависящими от τ. В результате система уравнений движения примет вид

$$\frac{d}{d\tau} a^+_{f\sigma}(\tau) = \left(\varepsilon_\sigma + U\langle n_{f\bar{\sigma}}\rangle\right) a^+_{f\sigma}(\tau) + U \Delta n_{f\bar{\sigma}} a^+_{f\sigma}(\tau) \ , \qquad (6)$$

$$\frac{d}{d\tau} \Delta n_{f\bar{\sigma}} a^+_{f\sigma}(\tau) = \left(\varepsilon_\sigma + U\langle n_{f\bar{\sigma}}\rangle\right) \Delta n_{f\bar{\sigma}} a^+_{f\sigma}(\tau) + U\langle (\Delta n_{f\bar{\sigma}})^2 \rangle a^+_{f\sigma}(\tau) \ . \qquad (7)$$

При получении данной системы мы произвели замену квадрата оператора $\Delta n_{f\bar{\sigma}}$ c-числом [3,4]:

$$(\Delta n_{f\bar{\sigma}})^2 \simeq \langle (\Delta n_{f\bar{\sigma}})^2 \rangle \ , \qquad (8)$$

сохраняя при этом операторную структуру $\Delta n_{f\bar{\sigma}}$.

Решение системы уравнений (6), (7) имеет вид

$$a^+_{f\sigma}(\tau) = a^+_{f\sigma}(0)\left[F^+_\sigma(\tau) + F^-_\sigma\right]/2 - \Delta n_{f\bar{\sigma}} a^+_{f\sigma}(0)\left[F^+_\sigma(\tau) + F^-_\sigma(\tau)\right]/2\langle \Delta n^{\bar{\sigma}}_q \rangle \ , \qquad (9)$$

$$\Delta n_{f\bar{\sigma}} a^+_{f\sigma}(\tau) = \Delta n_{f\bar{\sigma}} a^+_{f\sigma}(0)\left[F^+_\sigma(\tau) + F^-_\sigma(\tau)\right]/2 - a^+_{f\sigma}(0)\langle \Delta n^{\bar{\sigma}}_q \rangle \left[F^+_\sigma(\tau) + F^-_\sigma(\tau)\right]/2 \ , \qquad (10)$$

где введены обозначения

$$F^\alpha_\sigma(\tau) = \exp\left\{\left(\varepsilon_\sigma + U(\langle n^{\bar{\sigma}}\rangle + \alpha\langle \Delta n^{\bar{\sigma}}_q \rangle)\right)\tau\right\},$$

$$\alpha = \pm 1, \ \langle n^{\bar{\sigma}}\rangle = \langle n_{f\bar{\sigma}}\rangle \ ,$$

$$\langle \Delta n^{\bar{\sigma}}_q \rangle = \sqrt{\langle (\Delta n_{f\bar{\sigma}})^2 \rangle} = \sqrt{\langle n_{f\bar{\sigma}}\rangle (1 - \langle n_{f\bar{\sigma}}\rangle)} \ .$$

Определим антикоммутаторную функцию Грина [6,7] следующим образом ($\beta = 1/k_B T$):

$$\langle\langle a^+_{f\sigma} | a_{f\sigma}\rangle\rangle_t = \Theta(-t)\ \mathrm{Sp}\left\{\left[a^+_{f\sigma}(t), a_{f\sigma}\right]_+ \exp(-\beta H)\right\}, \qquad (11)$$

$$\langle\langle a^+_{f\sigma} | a_{f\sigma}\rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-iEt) \langle\langle a^+_{f\sigma} | a_{f\sigma}\rangle\rangle_t \ , \qquad (12)$$

где

$$\Theta(-t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(ixt)/(x + is) \ , \quad s \to +0 \ .$$

Подставляя решения (9), (10) в (11), (12), можно найти вид фурье-образа антикоммутаторной функции Грина:

$$\langle\langle a^+_{f\sigma} | a_{f\sigma}\rangle\rangle = \frac{i}{4\pi}\left\{\frac{1}{E - \varepsilon_\sigma - U(\langle n^{\bar{\sigma}}\rangle + \langle \Delta n^{\bar{\sigma}}_q \rangle)} + \frac{1}{E - \varepsilon_\sigma - U(\langle n^{\bar{\sigma}}\rangle - \langle \Delta n^{\bar{\sigma}}_q \rangle)}\right\} . \qquad (13)$$

Спектр элементарных возбуждений в атомном пределе в приближении статических флуктуаций будет иметь вид

$$E_1 = \varepsilon_\sigma + U(\langle n^{\bar{\sigma}}\rangle + \langle \Delta n^{\bar{\sigma}}_q \rangle) \ ,$$
$$E_2 = \varepsilon_\sigma + U(\langle n^{\bar{\sigma}}\rangle - \langle \Delta n^{\bar{\sigma}}_q \rangle) \ . \qquad (14)$$

Вычислим корреляционную функцию Грина $\langle a_{f\sigma}(0) a^+_{f\sigma}(0)\rangle$. Учитывая возможность циклической перестановки под знаком шпура и используя коммутационные соотношения для фермиевских операторов, получаем

$$\langle a^+_{f\sigma}(\beta)\, a_{f\sigma}(0)\rangle = \langle a_{f\sigma}(0)\, a^+_{f\sigma}(0)\rangle = 1 - \langle a^+_{f\sigma}(0)\, a_{f\sigma}(0)\rangle \ ,$$
$$\langle \Delta n_{f\bar{\sigma}}\, a^+_{f\sigma}(\beta)\, a_{f\sigma}(0)\rangle = \langle a_{f\sigma}(0)\, \Delta n_{f\bar{\sigma}}\, a^+_{f\sigma}(0)\rangle = \langle \Delta n_{f\bar{\sigma}}\rangle - \langle \Delta n_{f\bar{\sigma}}\, a^+_{f\sigma}(0)\, a_{f\sigma}(0)\rangle = -\langle \Delta n_{f\bar{\sigma}}\, a^+_{f\sigma}(0)\, a_{f\sigma}(0)\rangle \ . \qquad (15)$$

С учетом соотношений (15) решение системы дифференциальных уравнений (6), (7) для искомой корреляционной функции $\langle a^+_{f\sigma}(0)\, a_{f\sigma}(0)\rangle$ имеет вид

$$\langle a^+_{f\sigma}(0)\, a_{f\sigma}(0)\rangle = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{1 + \exp\left((\varepsilon_\sigma + U(\langle n^{\bar{\sigma}}\rangle - \langle \Delta n^{\bar{\sigma}}_q \rangle))\beta\right)} + \right.$$

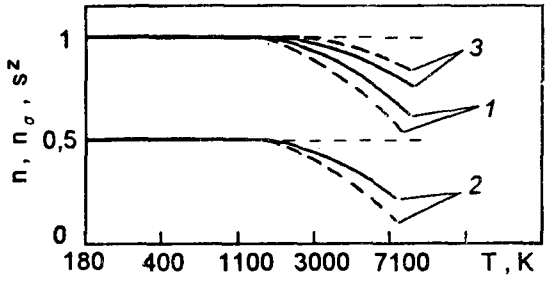

Рис. 1. Температурные зависимости числа частиц со спином $\sigma = \uparrow$ (*1*), намагниченности системы S^z (*2*), концентрации n (*3*), полученные при сравнении численных решений модели Хаббарда в приближении статических фаз (———) и точного решения в атомном пределе (– – –) (температура приведена в логарифмическом масштабе). График построен при $\varepsilon = -0{,}77$ эВ, $\omega_e = 0{,}46$ эВ, $U = 9{,}5$ эВ.

$$+ \frac{1}{1 + \exp\left((\varepsilon_\sigma + U(\langle n^{\bar\sigma}\rangle + \langle \Delta n_q^{\bar\sigma}\rangle))\beta\right)}\Bigg]. \qquad (16)$$

В дальнейшем имеется в виду, что $a^+_{f\sigma} = a^+_{f\sigma}(0)$.

Сравнительный анализ этого решения с точным решением модели Хаббарда в атомном пределе [1] приведен на рис. 1. Пунктирная линия соответствует точному решению модели Хаббарда в атомном пределе [1], а сплошные кривые — решению в пределе статических флуктуаций. Отметим, что слияние сплошных и пунктирных линий является практически полным. При концентрации $n = 1$ относительная погрешность является минимальной $((n_{asf} - n_{es})/n_{es}\cdot 100\% \cong 10^{-20}\%$, где n_{es} — значение концентрации, рассчитанное в рамках точного решения модели Хаббарда в атомном пределе; n_{asf} — значение концентрации в приближении статических флуктуаций). При отклонении концентрации от значения $n = 1$ погрешность возрастает, так что при $n = 0{,}9$ погрешность составляет порядка 3% и максимальная погрешность в диапазоне приведенных на графике температур достигает 14% при $n = 0{,}6$. Таким образом, можно предположить, что, расширяя задачу на случай включения в гамильтониан члена, описывающего перескоки электронов с узла на узел, погрешность будет минимальной в том случае, когда зона является полузаполненной.

2. Теперь перейдем к расчету корреляционной функции для гамильтониана (1). Уравнение движения для оператора $a^+_{f\sigma}(\tau)$ будет иметь вид

$$\frac{d}{d\tau} a^+_{f\sigma}(\tau) = \varepsilon_\sigma a^+_{f\sigma} + \sum_{f'} B_{ff'} a^+_{f'\sigma} + Un_{f\bar\sigma} a^+_{f\sigma}. \qquad (17)$$

Для составления замкнутой системы уравнений формально проведем расцепление (8), при этом аналогично (6),(7) можно получить следующую систему уравнений:

$$\frac{d}{d\tau} a^+_{f\sigma}(\tau) = \varepsilon_\sigma a^+_{f\sigma} + \sum_{f'} B_{ff'} a^+_{f'\sigma} +$$

$$+ U\langle n^{\bar\sigma}\rangle a^+_{f\sigma} + U\Delta n_{f\bar\sigma} a^+_{f\sigma}, \qquad (18)$$

$$\frac{d}{d\tau} \Delta n_{f\bar\sigma} a^+_{f\sigma}(\tau) = \varepsilon_\sigma \Delta n_{f\bar\sigma} a^+_{f\sigma} + \sum_{f'} B_{ff'} \Delta n_{f\bar\sigma} a^+_{f'\sigma} +$$

$$+ U\langle n^{\bar\sigma}\rangle \Delta n_{f\bar\sigma} a^+_{f\sigma} + U\langle \Delta n_q^{\bar\sigma}\rangle^2 a^+_{f\sigma}. \qquad (19)$$

После проведения фурье-преобразования

$$a^+_{f\sigma} = N^{-1/2} \sum_k a^+_{k\sigma} \exp(-ikr_f),$$

$$a_{f\sigma} = N^{-1/2} \sum_k a_{k\sigma} \exp(ikr_f),$$

уравнения (18), (19) можно записать в виде

$$\frac{d}{d\tau} a^+_{k\sigma}(\tau) = \left(\varepsilon_\sigma + B(k) + U\langle n^{\bar\sigma}\rangle\right) a^+_{k\sigma} + U\Delta n_{k\bar\sigma} a^+_{k\sigma}, \qquad (20)$$

$$\frac{d}{d\tau} \Delta n_{k\bar\sigma} a^+_{k\sigma}(\tau) = U\langle \Delta n_q^{\bar\sigma}\rangle^2 a^+_{k\sigma} +$$

$$+ \left(\varepsilon_\sigma + B(k) + U\langle n^{\bar\sigma}\rangle\right) \Delta n_{k\bar\sigma} a^+_{k\sigma}, \qquad (21)$$

где $B(k)$ — фурье-образ $B_{ff'}$. Решение системы уравнений (21), (22) может быть записано в виде

$$a^+_{f\sigma}(\tau) = a^+_{f\sigma}(0)\left[F^+_\sigma(k,\tau) + F^-_\sigma(k,\tau)\right]/2 -$$

$$- \Delta n_{f\bar\sigma} a^+_{f\sigma}(0)\left[F^+_\sigma(k,\tau) + F^-_\sigma(k,\tau)\right]/2\langle \Delta n_q^{\bar\sigma}\rangle,$$

$$\Delta n_{f\bar\sigma} a^+_{f\sigma}(\tau) = \Delta n_{f\bar\sigma} a^+_{f\sigma}(0)\left[F^+_\sigma(k,\tau) + F^-_\sigma(k,\tau)\right]/2 -$$

$$- a^+_{f\sigma}(0)\langle \Delta n_q^{\bar\sigma}\rangle\left[F^+_\sigma(k,\tau) + F^-_\sigma(k,\tau)\right]/2,$$

где

$$F^\alpha_\sigma(k,\tau) = \exp\left\{\left(\varepsilon_\sigma + B(k) + U(\langle n^{\bar\sigma}\rangle + \alpha\langle \Delta n_q^{\bar\sigma}\rangle)\right)\tau\right\}.$$

Аналогично (13) антикоммутаторная функция Грина будет иметь вид

$$\langle\langle a^+_{k\sigma} | a_{k\sigma}\rangle\rangle_E = \frac{i}{4\pi}\left\{\frac{1}{E - \varepsilon_\sigma - B(k) - U(\langle n^{\bar\sigma}\rangle + \langle \Delta n_q^{\bar\sigma}\rangle)} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{E - \varepsilon_\sigma - B(k) - U(\langle n^{\bar\sigma}\rangle - \langle \Delta n_q^{\bar\sigma}\rangle)}\right\}.$$

Спектр элементарных возбуждений в этом случае соответствует энергиям

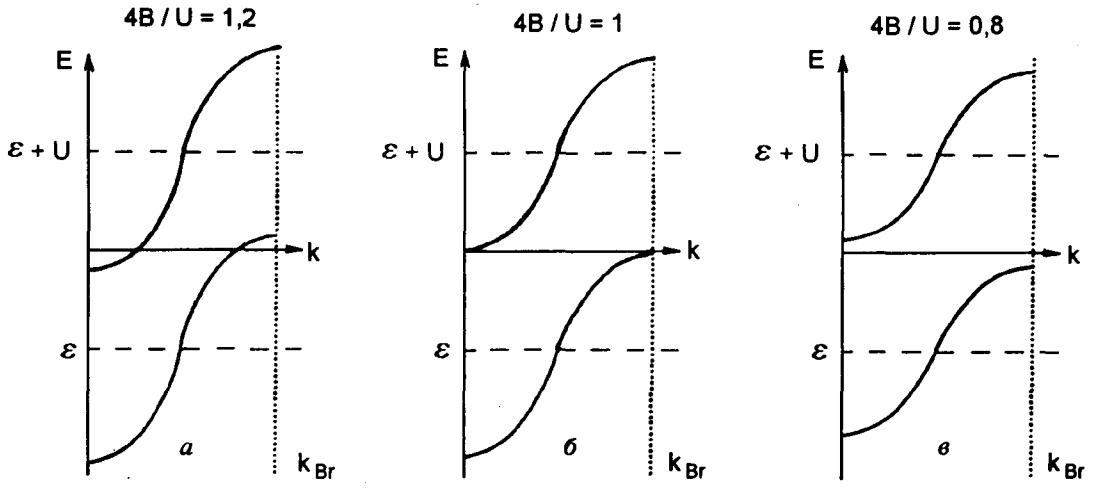

Рис. 2. Спектр квазичастиц в одномерной модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций в случае почти полузаполненной зоны при $\varepsilon = -7{,}5$ эВ, $U = 15$ эВ, $\omega_e = 0$ при различных B, эВ: 4,5 (*а*); 3,75 (*б*); 3 (*в*).

$$E_1 = \varepsilon_\sigma + B(k) + U(\langle n^{\bar{\sigma}}\rangle + \langle \Delta n_q^{\bar{\sigma}}\rangle) \,.$$
$$E_2 = \varepsilon_\sigma + B(k) + U(\langle n^{\bar{\sigma}}\rangle - \langle \Delta n_q^{\bar{\sigma}}\rangle) \,. \qquad (22)$$

Как и следовало ожидать, при $B(k) \to 0$ решения этого уравнения переходят в (14).

Рассмотрим одномерную модель Хаббарда. В этом случае

$$B(k) = -2B\cos(ka) \,. \qquad (23)$$

(a — постоянная решетки). Решение уравнения (22) в одномерной модели Хаббарда изображено на рис. 2 для случая полузаполненной зоны. Три решения, изображенные на рис. 2 и 3, отвечают условиям возникновения и изчезновения энергетической щели между подзонами в случае почти полузаполненной зоны (рис. 2) и в случае полузаполненной зоны (рис. 3). Из (22) и рис. 2 следует, что при $n \neq 1$ (концентрация близка к единице) одномерная модель Хаббарда ($d = 1$) является проводящей, как и следовало ожидать [5]. Однако в случае точно наполовину заполненной зоны $N_e = N$ (N_e — общее число электронов) на уровне Ферми образуется энергетическая щель, поскольку одномерная система всегда неустойчива относительно удвоения периода. Так что при указанных значениях параметров система будет диэлектрической. Удвоение периода и появление щели связано с возникновением антиферромагнетизма. Решения (22) обобщены на рис. 4, показывающем зависи-

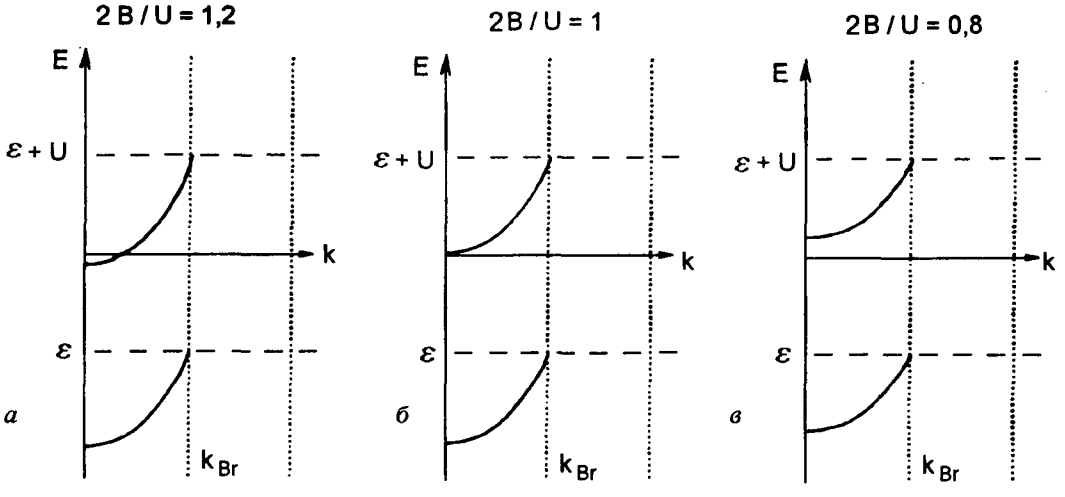

Рис. 3. Спектр квазичастиц в одномерной модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций в случае полузаполненной зоны ($n = 1$) при $\varepsilon = -7{,}5$ эВ, $U = 15$ эВ, $\omega_e = 0$.

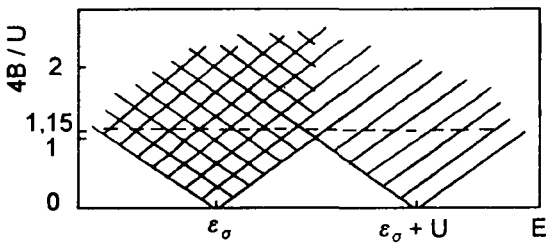

Рис. 4. Зависимость псевдочастичного спектра от отношения $4B/U$. Пунктирная прямая соответствует критическому значению $(4B/U)_{cr} = 1{,}15$, полученному в работах [2,8].

мость псевдочастичного спектра от отношения $4B/U$. Если в случае полузаполненной зоны значение $4B/U$ меньше критического, то система ведет себя как изолятор или полупроводник, но для значений $4B/U > (4B/U)_{cr}$ система является проводником. Кроме того, на рис. 4 пунктирной линией отмечено критическое значение $(4B/U)_{cr} = 1{,}15$, полученное в работе [2]. Если же рассмотреть случай $d = 3$, т.е. когда

$$B(k) = -2B\left(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)\right), \tag{24}$$

можно сделать вывод, что в рамках данного приближения при $d \geq 2$ подтверждается заключение, сделанное Моттом [8] из качественных рассуждений о возможности перехода металл—диэлектрик при определенном соотношении между B и U.

Проведя процедуру, аналогичную использованной при вычислении уравнений (6), (7), запишем полученное решение системы (20), (21) для корреляционной функции $\langle a^+_{k\sigma} a_{k\sigma}\rangle$ в виде

$$\langle a^+_{k\sigma} a_{k\sigma}\rangle = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{1 + \exp\left((\varepsilon_\sigma + B(k) + U(\langle n^{\bar\sigma}\rangle - \langle \Delta n^{\bar\sigma}_q\rangle)\beta\right)} + \frac{1}{1 + \exp\left((\varepsilon_\sigma + B(k) + U(\langle n^{\bar\sigma}\rangle + \langle \Delta n^{\bar\sigma}_q\rangle)\beta\right)}\right]. \tag{25}$$

Обозначим общее число электронов со спином σ

$$N_{e\sigma} = \sum_k \langle a^+_{k\sigma} a_{k\sigma}\rangle$$

и перейдем от суммирования по импульсам со сложным законом дисперсии к интегрированию по B в пределах от $-D$ до $+D$. Для простоты дальнейших рассуждений предположим, что плотность состояния ρ в пределах подзон постоянна [1,8]. При этом, аналогично [10], вместо трехмерного интеграла по k получается одномерный интеграл по энергии. Тогда $N_{e\sigma}$ будет определяться выражением

$$N_{e\sigma} = \frac{\rho}{2N\beta}\ln\left\{\left[1 + \exp\left((D - \varepsilon_\sigma - U(\langle n^{\bar\sigma}\rangle - \langle \Delta n^{\bar\sigma}_q\rangle))\beta\right)\right]\left[1 + \exp\left((D - \varepsilon_\sigma - U(\langle n^{\bar\sigma}\rangle + \langle \Delta n^{\bar\sigma}_q\rangle))\beta\right)\right] \times \right.$$
$$\left. \times \left[1 + \exp\left((-D - \varepsilon_\sigma - U(\langle n^{\bar\sigma}\rangle - \langle \Delta n^{\bar\sigma}_q\rangle))\beta\right)\right]^{-1}\left[1 + \exp\left((-D - \varepsilon_\sigma - U(\langle n^{\bar\sigma}\rangle + \langle \Delta n^{\bar\sigma}_q\rangle))\beta\right)\right]^{-1}\right\} \tag{26}$$

Или, если ввести обозначение

$$f^{\alpha\gamma}_\sigma = 1 + \exp\left((\alpha D - \varepsilon_\sigma - U(\langle n^{\bar\sigma}\rangle + \gamma\langle \Delta n^{\bar\sigma}_q\rangle))\beta\right)$$

где $\alpha, \gamma = \{+, -\}$, можно получить выражения для намагниченности системы

$$2\langle S_Z\rangle = N_{e\uparrow} - N_{e\downarrow} = \frac{\rho}{2N\beta}\ln\left\{\frac{f^{+-}_\sigma f^{++}_\sigma f^{--}_{\bar\sigma} F^{-+}_{\bar\sigma}}{f^{--}_\sigma f^{-+}_\sigma f^{+-}_{\bar\sigma} F^{++}_{\bar\sigma}}\right\} \tag{27}$$

и концентрации

$$n = \left(N_{e\uparrow} + N_{e\downarrow}\right)/N = \frac{\rho}{2N\beta}\ln\left\{\frac{f^{+-}_\sigma f^{++}_\sigma f^{+-}_{\bar\sigma} F^{++}_{\bar\sigma}}{f^{--}_\sigma f^{-+}_\sigma f^{--}_{\bar\sigma} F^{-+}_{\bar\sigma}}\right\}. \tag{28}$$

Численное решение этих уравнений приведено на рис. 5.

Рассмотрим следствия, вытекающие из этих уравнений. При низких температурах ($T \to 0$)

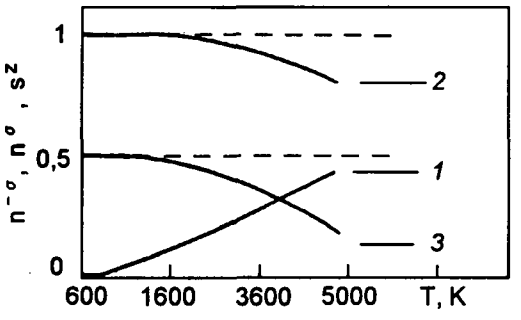

Рис. 5. Температурные зависимости $n^{-\sigma}$ (*1*), n^{σ} (*2*) и намагниченности S^z (*3*), полученные численным решением уравнений (27) и (28) при $\varepsilon = -0{,}95$ эВ; $\omega_e = 0{,}65$ эВ; $U = 1$ эВ; $D = 0{,}45$ эВ.

$$N_{e\sigma} = \frac{\rho D(1 - \varepsilon/D)}{(\rho U/N) + 1} + \frac{1}{2}\frac{\rho\sigma\omega_e}{(\rho U/N) - 1}. \quad (29)$$

Из (26) следует, что концентрация n равна

$$n = \frac{1}{N}\left(N_{e\uparrow} + N_{e\downarrow}\right) = \frac{2\rho D(1 - \varepsilon/D)}{N + \rho U}. \quad (30)$$

Намагниченность (спин) системы, как следует из (29), будет

$$S_Z = \frac{1}{2}\left(N_{e\uparrow} - N_{e\downarrow}\right) = \frac{1}{2}\frac{\rho\omega_e}{(\rho U/N) - 1}. \quad (31)$$

Очевидно, что полюс в (31) свидетельствует о возникновении ферромагнетизма в модели Хаббарда. Таким образом, можно высказать предположение, что неравенство

$$\rho U/N \geq 1$$

или с учетом (30)

$$\left(D - \varepsilon\right)/U \leq n$$

является условием возникновения ферромагнетизма в модели Хаббарда при низких температурах.

При $T = 0$ можно использовать аппроксимацию корреляционной функции (25) ступенчатой функцией, что позволяет сравнить некоторые результаты, полученные в рамках приближения статических флуктуаций, с точным решением одномерной задачи Хаббарда [5].

Перепишем уравнение для корреляционной функции $\langle a^{+}_{k\sigma} a_{k\sigma}\rangle$ (25) в приближении ближайших соседей с учетом (23) для одномерной модели в виде

$$\langle a^{+}_{k\sigma}(0)\, a_{k\sigma}(0)\rangle = \langle n_{k\sigma}\rangle =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{\alpha}\left\{1 + \exp\left[\beta(2B\cos\Theta + \varepsilon_\sigma + \right.\right.$$

$$\left.\left. + U(n^{\bar\sigma} + \alpha\Delta n^{\bar\sigma}_q))\right]\right\}^{-1}, \quad (32)$$

где $\alpha = \pm 1$, $\Theta = ka$ (a — параметр решетки).

При $T = 0$ заменим функцию (32) ступенчатой функцией, которая, в свою очередь, представляется через интеграл Фурье

$$\left(1 + e^{\beta x}\right)^{-1} = \begin{Bmatrix} 0 & \text{при} & x > 0 \\ 1/2 & \text{при} & x = 0 \\ 1 & \text{при} & x < 0 \end{Bmatrix} =$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\,\frac{\sin(\omega x)}{\omega},$$

что позволяет переписать (32) как

$$\langle n_{k\sigma}\rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi}\sum_{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\omega}\sin\left(\omega\left(-2B\cos\Theta + \xi^{\alpha}_{\bar\sigma}\right)\right), \quad (33)$$

где $\xi^{\alpha}_{\bar\sigma} = \varepsilon_\sigma + U(n^{\bar\sigma} + \alpha\Delta n^{\bar\sigma}_q)$. После перехода от суммирования по k к интегрированию по k концентрация будет определяться решением уравнения [5]

$$n = \int_{-Q}^{Q}\rho(k)\,dk, \quad (34)$$

где $\rho(k) = (4\pi)^{-1}(\langle n_{k\downarrow}\rangle + \langle n_{k\uparrow}\rangle)$, $Q = \pi/a$ при $n \neq 1$ и $Q = \pi/2a$ при $n = 1$.

Для нахождения концентрации необходимо решить самосогласованную систему уравнений для $n_\downarrow$ и $n_\uparrow$ ($n_{\downarrow,\uparrow} = N_{e\downarrow,\uparrow}/N$), которая имеет вид

$$n^{\sigma} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi}\sum_{\alpha}\arcsin\left\{\frac{(\varepsilon_\sigma + U(n^{\bar\sigma} + \alpha\Delta n^{\bar\sigma}_q)}{2B}\right\} \quad (35)$$

для $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$ (почти полузаполненная зона) и

$$n^{\sigma} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi}\sum_{\alpha}\left[\arcsin\left\{\frac{\xi^{\alpha}_{\bar\sigma}}{2B}\right\} + \frac{\xi^{\alpha}_{\bar\sigma}}{\left(4B^2 - (\xi^{\alpha}_{\bar\sigma})^2\right)^{1/2}}\right] \quad (36)$$

для $-\pi/2a \leq k \leq \pi/2a$ (полностью полузаполненная зона).

Решение уравнения (33) приведено на рис. 6 ($\omega_e = 0$). Кривая *1* соответствует случаю почти полузаполненной зоны, кривая *2* — полностью по-

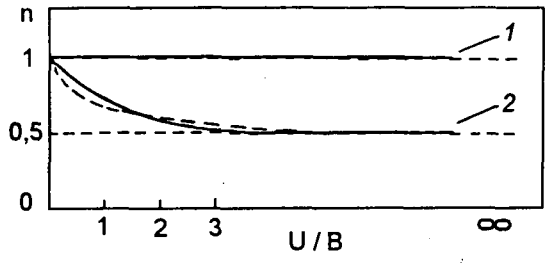

Рис. 6. Зависимость концентрации от отношения U/B в случаях $-\pi/a \le k \le \pi/a$ (*1*) и $-\pi/2a \le k \le \pi/2a$ (*2*). Пунктирной линией показана зависимость концентрации от U, рассчитанная по работе [*5*].

лузаполненной зоне, когда на уровне Ферми образуется энергетическая щель. Кроме того, на рис. 6 пунктирной линией показана зависимость электронной концентрации от U для точного одномерного решения Либа и Ву [*5*] в случае, когда $-\pi/2a \le k \le \pi/2a$. Таким образом, результаты, полученные в рамках приближения статических флуктуаций, находятся в хорошем согласии с точным решением [*5*].

Используя эту же методику, рассчитаем намагниченность

$$2\langle S_z \rangle = n_\uparrow - n_\downarrow$$

для трехмерной простой кубической решетки, закон дисперсии для которой имеет вид (24). В этом случае самосогласованная система уравнений для $n_\downarrow$ и $n_\uparrow$ имеет вид

$$n^\sigma = \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi} \sum_\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} J_0^3(2\omega B) \sin(\omega \xi_{\bar\sigma}^\alpha), \quad (35)$$

где $\xi_{\bar\sigma}^\alpha = \varepsilon_\sigma + \sigma\omega_e + U(n^{\bar\sigma} + \alpha\Delta n_q^{\bar\sigma})$; $J_0(x)$ — функция Бесселя. Зависимость намагниченности S^z от величины U/B приведена на рис. 7.

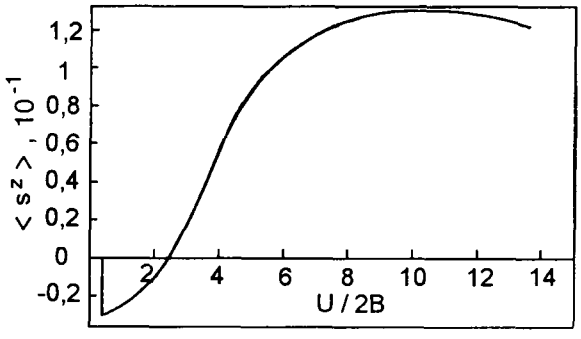

Рис. 7. Зависимость намагниченности $\langle S^z \rangle$ от $U/2B$ в случае трехмерной простой кубической решетки.

Развитая в работе схема расчета корреляционных функций позволяет рассчитывать термодинамические средние и корреляционные функции. В рамках выбранного приближения получены выражения для антикоммутаторной функции Грина, намагниченности и концентрации системы. Сравнение результатов работы с точным решением одномерной модели Хаббарда указывает на вполне приемлемый характер выбранного приближения.

1. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* **A276**, 238 (1963).
2. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* **A281**, 401 (1964).
3. Р. Р. Нигматуллин, В. А. Тобоев, *ТМФ* **68**, 88 (1986).
4. Р. Р. Нигматуллин, В. А. Тобоев, *ТМФ* **74**, 11 (1988).
5. E. Lieb and F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1445 (1968).
6. С. В Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, Москва (1965).
7. Д. И. Хомский, *ФММ* **29**, 31 (1970).
8. Н. Ф. Мотт, *Переходы металл—диэлектрик*, Наука, Москва (1975).
9. Е. В. Кузьмин, Г. А. Петраковский, Э. А. Завадский, *Физика магнитоупорядоченных веществ*, Наука, Новосибирск (1976).
10. A. M. Tcvelick and P. B. Wiegmann, *Adv. Phys.* **32**, 453 (1983).

Approximation of statical fluctuations as applied to the Hubbard model

V. V. Loskutov, G. I. Mironov, and R. R. Nigmatullin

The approximation of statistical fluctuations is considered as applied to the Hubbard model. The expressions are obtained for the Green functions, magnetization and concentration of the system. The expression are compared with exact solution in atom limit and exact solution of one-dimensional Hubbard's model when $T = 0$.