Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. А. Москаленко, Н. М. Плакида, Динамическая спиновая восприимчивость
в модели Хаббарда, *ТМФ*, 1997, том 113, номер 1, 124–138

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1070>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и
согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.208.226.222

26 апреля 2023 г., 12:48:16

В. А. Москаленко*, Н. М. Плакида†
**ДИНАМИЧЕСКАЯ СПИНОВАЯ
ВОСПРИИМЧИВОСТЬ В МОДЕЛИ ХАББАРДА**

На основе диаграммной техники, разработанной для систем с сильными корреляциями, проведено вычисление спиновой восприимчивости для модели Хаббарда. В качестве нулевого выбирается одноузельная часть гамильтониана, а перескоки электронов рассматриваются с помощью оператора эволюции. Рассмотрен второй порядок теории возмущений, и вычислена сумма неприводимых двухчастичных одноузельных диаграмм лестничного типа. Получены уравнения для определения статической восприимчивости и спектра спиновых волн.

ВВЕДЕНИЕ

Исследование магнитной динамики систем с сильными электронными корреляциями представляет значительный интерес как с точки зрения описания магнитных фазовых переходов, наблюдающихся в узкозонных материалах, так и с точки зрения возможной связи между этой динамикой и явлением высокотемпературной сверхпроводимости в купратных соединениях. Исследование магнитной динамики возможно на основе адекватного учета как спиновых, так и зарядовых флуктуаций.

Одной из общепринятых моделей, в которых учет этих флуктуаций существен, является однозонная модель Хаббарда [1]. Именно на ее основе будут выполнены исследования спиновой восприимчивости. Гамильтониан модели Хаббарда представляется в виде суммы локальной H^0 и нелокальной H_{int} частей:

$$H = H^0 + H_{\text{int}}, \quad (1)$$

где

$$H^0 = -\mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + U \sum_{i=1}^N n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \sum_{i=1}^N H_i^0, \quad (2)$$

$$H_{\text{int}} = \sum_{ij\sigma} t(j-i) c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}.$$

Здесь $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) – оператор рождения (уничтожения) электрона со спином $\sigma = \pm 1$ на решеточном узле i , N – число узлов решетки, μ – химический потенциал системы, $t(j-i)$ –

*Институт прикладной физики АН Молдовы, Кишинев, Молдова

†Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская обл., Россия

межузельный матричный элемент перескока электрона, U — кулоновская энергия отталкивания электронов на узле.

В локальном приближении каждый узел решетки характеризуется четырьмя состояниями оператора H^0 с энергиями E_0, E_+, E_-, E_2 , где индексы 0, +1, -1 и 2 (единицу после знака + или - в нижнем индексе будем для сокращения обозначений опускать) нумеруют состояния без электронов, с одной частицей со спином вверх или вниз и двумя частицами на узле. В общем случае будем считать, что имеет место неравенство одностичных энергий E_+, E_- , что предполагает наличие внешнего магнитного поля h . Значения локальных энергий равны

$$E_0 = 0, \quad E_\sigma = -\mu - \sigma \frac{h}{2}, \quad E_2 = U + E_+ + E_-. \quad (3)$$

Кулоновское взаимодействие U считается наиболее существенным элементом динамики электронов и включается в нулевой гамильтониан. Диагонализация оператора H^0 выполняется в операторах Хаббарда X_i^{nm} [1, 2], описывающих переходы между квантовыми состояниями n, m ($n = 0, +1, -1, 2$),

$$c_{i\sigma} = X_i^{0\sigma} + \sigma X_i^{-\sigma 2}, \quad c_{i\sigma}^\dagger = X_i^{\sigma 0} + \sigma X_i^{2-\sigma}. \quad (4)$$

Исследованию модели Хаббарда в рамках формализма квантовых функций Грина было посвящено большое число работ. Часть из них использовала метод уравнений движения для функций Грина (см., например, [3, 4]). Другая часть основана на применении специальной диаграммной техники, учитывающей сильные электронные корреляции. Эта техника, очевидно, должна существенным образом отличаться от той, что разработана для систем со слабой связью. Различные варианты такой техники, опирающейся на свойства операторов Хаббарда, были предложены в работах [5–7]. Ниже используется обобщенная теорема Вика и диаграммная техника, предложенная в работах [8, 9] для модели Хаббарда и других систем с сильными корреляциями. На этой основе исследуется мацубаровская спиновая функция Грина

$$S^{+-}(x - x' | \tau - \tau') = \langle T \hat{S}_x^+(\tau) \hat{S}_{x'}^-(\tau') \rangle_H = \frac{\langle T S_x^+(\tau) S_{x'}^-(\tau') U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}, \quad (5)$$

где $\langle \dots \rangle_0$ есть среднее статистическое по ансамблю Гиббса невозмущенной системы H^0 , T — оператор хронологического упорядочения. Последнее выражение (5) использует представление взаимодействия системы, где τ — мнимое время, $0 < \tau < \beta$, $\beta = (k_B T)^{-1}$, а $U(\beta)$ — оператор эволюции, определяемый перескоками электронов между узлами решетки. Этот оператор имеет вид

$$U(\beta) = T \exp \left\{ - \int_0^\beta H_{\text{int}}(\tau) d\tau \right\} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} T \{ H_{\text{int}}(\tau_1) \dots H_{\text{int}}(\tau_n) \}. \quad (6)$$

Ниже мы вычисляем спиновую функцию Грина (5), используя диаграммную технику [8, 9].

1. ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Факторизация статистического оператора локализованной системы

$$e^{-\beta H^0} = \prod_{i=1}^N e^{-\beta H_i^0}$$

означает, что хронологические средние, содержащиеся в выражении (5), распадаются на произведения одноузельных средних. При этом данному узлу решетки могут принадлежать как одночастичная, так и многочастичная функции Грина.

Присутствие кулоновского взаимодействия U в нулевом гамильтониане приводит к тому, что нулевая многочастичная функция не распадается на произведение одночастичных функций, а заменяется на неприводимые одноузельные структуры, которые дополняют обычную вииковскую структуру. Число диаграмм, которые определяются обобщенной теоремой Вика, существенно возрастает. Диаграммы, содержащие неприводимые части, учитывают сильные электронные корреляции.

Обобщенная теорема Вика, первоначально предложенная для исследования электронного пропагатора [8, 9], в данной работе видоизменяется с тем, чтобы учесть тот факт, что операторы S^+ и S^- являются билинейными одноузельными формами фермионных операторов, и эти спинные операторы должны участвовать как целое в образовании одноузельных кумулянтов. Это изменение значительно сокращает число диаграмм в каждом порядке теории возмущений и требует нового определения неприводимости функций Грина. В новом определении участвуют только те хронологические средние, в которых операторы S^+ и S^- не расщепляются на фермионные множители. Это определение будет разъяснено на конкретных примерах.

Для вычисления нулевого спинного пропагатора (5) воспользуемся равенствами

$$S_x^+(\tau) = X_x^{1-1} e^{\tau(E_+ - E_-)}, \quad S_{x'}^-(\tau') = X_{x'}^{-11} e^{\tau'(E_- - E_+)}$$

и в результате получим

$$S_0^{+-}(x - x' | \tau - \tau') = \delta_{xx'} \frac{e^{(\tau - \tau')(E_+ - E_-)}}{Z_0} \{ \theta(\tau - \tau') e^{-\beta E_+} + \theta(\tau' - \tau) e^{-\beta E_-} \}, \quad (7)$$

где

$$Z_0 = e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_+} + e^{-\beta E_-} + e^{-\beta E_2}$$

есть одноузельная статистическая сумма локального приближения.

Переходя к фурье-представлению по импульсам и по дискретным частотам

$$\begin{aligned} S(x - x') &= \frac{1}{N} \sum_k S(k) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}, \\ S(\tau - \tau') &= \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega_m} S(i\Omega_m) e^{-i\Omega_m(\tau - \tau')}, \end{aligned} \quad (8)$$

видим, что

$$S_0^{+-}(k | i\Omega_m) = \frac{e^{-\beta E_-} - e^{-\beta E_+}}{Z_0(i\Omega_m + E_+ + E_-)} = \frac{e^{-\beta E_+}(e^{\beta \Delta} - 1)}{Z_0(i\Omega_m + \Delta)}, \quad (9)$$

Рис. 1. Диаграммы второго порядка теории возмущения.

где $\Delta = E_+ - E_-$. При отсутствии внешнего поля имеем

$$S_0^{+-}(i\Omega_m) = \frac{\beta \delta_{\Omega_m 0}}{Z_0} e^{-\beta E_+}, \quad (10)$$

где $\delta_{\Omega_m 0}$ – символ Кронекера от дискретной частоты, $\Omega_m = 2m\pi/\beta$.

Функция Грина $S_0^{-+}(i\Omega_m)$ получается из (9) перестановкой E_+ и E_- между собой. Поэтому для спиновой восприимчивости в этом простейшем случае получаем

$$\chi_0^{\alpha\alpha}(i\Omega) = \frac{1}{4} [S_0^{+-}(i\Omega) + S_0^{-+}(i\Omega)] = \frac{\Delta e^{-\beta E_+} (e^{\beta \Delta} - 1)}{2 Z_0 [\Omega^2 + \Delta^2]}. \quad (11)$$

Аналитическое продолжение этой функции в верхней полуплоскости ($\Omega > 0$) $i\Omega \rightarrow E + i\delta$ приводит к запаздывающей функции Грина

$$\chi_0^{\alpha\alpha}(E) = \frac{\Delta e^{-\beta E_+} (e^{\beta \Delta} - 1)}{2 Z_0 [(E + i\delta)^2 - \Delta^2]}. \quad (12)$$

Эта функция обладает полюсами в нижней полуплоскости при энергиях $\pm\Delta$, необходимых для переворота спина в магнитном поле. Уже во втором порядке теории возмущений происходит перенормировка энергий этих полюсов и наблюдается появление новых полюсов при $\Delta \pm U$, обязанных квантовым переходам между нижней и верхней подзонами модели Хаббарда.

Все дальнейшие вычисления выполнены в предположении, что магнитная фаза является парамагнитной и квазисредние Боголюбова $\langle S_x^+ \rangle$ и $\langle S_x^- \rangle$ не возникают:

$$\langle S_x^+ \rangle = \langle S_x^- \rangle = 0. \quad (13)$$

В то же время отметим, что пределы $h \rightarrow 0$ ($\Delta \rightarrow 0$) и $E \rightarrow 0$ для спиновой восприимчивости (12) непереставимы, и поэтому статическую восприимчивость $\chi^{\alpha\alpha}(E=0)$ необходимо вычислять при $h \neq 0$, переходя затем к пределу $h \rightarrow 0$.

2. ВТОРОЙ ПОРЯДОК ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Во втором порядке теории имеются две связанные диаграммы для спинового пропагатора (5), изображающие на рис. 1 локальный (а) и делокализованный (б) вклады. На

этих диаграммах штриховыми линиями, соединяющими два узла решетки, обозначены матричные элементы перескока $t(\bar{1} - 1)$, тогда как сплошная линия, соединяющая две точки, есть одночастичная функция Грина локального приближения. У функции $t(\bar{1} - 1)$ узелные индексы различны, а временные совпадают, тогда как у электронного пропагатора узелные совпадают, а временные различны. Прямоугольники, содержащие точки со стрелками, обозначают неприводимые функции Грина. Каждая такая точка обладает тремя индексами – узелным, спиновым и временным, причем у всех точек прямоугольника узелные индексы одинаковы. Стрелки, входящие в точку, изображают операторы уничтожения, выходящие – операторы рождения, а те, что проходят через точку, изображают операторы поперечных спинов. Знак диаграммы зависит от принятого порядка электронных операторов в неприводимых структурах и определяется сделанными перестановками электронных операторов s и $c^\dagger$. Вклад локальной диаграммы (рис. 1а) имеет вид

$$S_{2a}^{+-}(x - x' | \tau - \tau') = \sum_2 t(2 - x)t(x - 2)\delta_{xx'} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \times \\ \times \langle TS^+(\tau)S^-(\tau')c_{\sigma_1}(\tau_1)\bar{c}_{\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0^{\text{ir}} G_{\sigma_2 \sigma_1}^0(\tau_2 - \tau_1). \quad (14)$$

В соответствии с принятым правилом образования неприводимых функций и условием (13) имеем, что

$$\langle TS^+(\tau)S^-(\tau')c_{\sigma_1}(\tau_1)\bar{c}_{\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0^{\text{ir}} = \langle TS^+(\tau)S^-(\tau')c_{\sigma_1}(\tau_1)\bar{c}_{\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0 + \\ + \langle TS^+(\tau)S^-(\tau') \rangle_0 G_{\sigma_1 \sigma_2}^0(\tau_1 - \tau_2), \quad (15)$$

где $G_{\sigma\sigma'}^0$ есть одночастичная маубаровская функция Грина локального приближения:

$$G_{\sigma_1 \sigma_2}^0(\tau_1 - \tau_2) = -\langle Tc_{\sigma_1}(\tau_1)\bar{c}_{\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0. \quad (16)$$

Как следует из определения (15), для образования неприводимой функции Грина необходимо вычесть (с учетом знака перестановки ферми-операторов) произведения более простых функций Грина, соблюдая условия нерасщепления билинейных форм S^+ и S^- . В неприводимых функциях Грина узелные индексы опущены, так как все они совпадают.

Перейдем в (15) к операторам Хаббарда на основании (4). В результате вычислений получаем

$$\langle TS^+(\tau)S^-(\tau')c_{\sigma_1}(\tau_1)\bar{c}_{\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0 = \delta_{\sigma_1 \sigma_2} [\delta_{\sigma_1 1} R_\uparrow(\tau, \tau', \tau_1, \tau_2) + \delta_{\sigma_1 -1} R_\downarrow(\tau, \tau', \tau_1, \tau_2)], \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned}
 R_{\uparrow}(\tau, \tau', \tau_1, \tau_2) = \frac{e^{\Delta(\tau-\tau')}}{Z_0} \Big\{ & e^{-\beta E_+} [-\theta(\tau-\tau')\theta(\tau'-\tau_2)\theta(\tau_2-\tau_1)e^{(\tau_1-\tau_2)(E_0-E_+)} + \\
 & + \theta(\tau-\tau_1)\theta(\tau_1-\tau_2)\theta(\tau_2-\tau')e^{(\tau_1-\tau_2)(E_- - E_2)} + \\
 & + \theta(\tau_2-\tau_1)\theta(\tau_1-\tau)\theta(\tau-\tau')e^{(\tau_1-\tau_2)(E_0-E_+)}] + \\
 & + e^{-\beta E_-} [\theta(\tau'-\tau)\theta(\tau-\tau_1)\theta(\tau_1-\tau_2)e^{(\tau_1-\tau_2)(E_- - E_2)} - \\
 & - \theta(\tau'-\tau_2)\theta(\tau_2-\tau_1)\theta(\tau_1-\tau)e^{(\tau_1-\tau_2)(E_0-E_+)} + \\
 & + \theta(\tau_1-\tau_2)\theta(\tau_2-\tau')\theta(\tau'-\tau)e^{(\tau_1-\tau_2)(E_- - E_2)}] + \\
 & + e^{-\beta E_0}\theta(\tau_1-\tau)\theta(\tau-\tau')\theta(\tau'-\tau_2)e^{(\tau_1-\tau_2)(E_0-E_+)} - \\
 & - e^{-\beta E_2}\theta(\tau_2-\tau')\theta(\tau'-\tau)\theta(\tau-\tau_1)e^{(\tau_1-\tau_2)(E_- - E_2)} \Big\}. \quad (18)
 \end{aligned}$$

Выражение для $R_{\downarrow}(\tau, \tau', \tau_1, \tau_2)$ получается из (18) при замене τ на τ' и E_+ на E_- .

На основании (17) и (18) можно вычислить функцию

$$W_{\uparrow}(\tau - \tau') = \int_0^{\beta} \int_0^{\beta} d\tau_1 d\tau_2 \langle TS^+(\tau)S^-(\tau')c_{\uparrow}(\tau_1)\bar{c}_{\uparrow}(\tau_2) \rangle_0 G_{\uparrow}^0(\tau_2 - \tau_1) \quad (19)$$

и ее фурье-образ. Последний имеет вид

$$\begin{aligned}
 W_{\uparrow}(i\Omega) = \frac{1}{Z_0^2} \Big\{ & \frac{e^{-2\beta E_+} - e^{-2\beta E_-}}{U^2(i\Omega + \Delta)} + \frac{(e^{-\beta E_-} - e^{-\beta E_+})^2}{U(i\Omega + \Delta)^2} + \\
 & + \frac{e^{-\beta(E_- + E_+)}(e^{\beta\Delta} - e^{-\beta U})}{U^2(i\Omega + \Delta + U)} + \frac{e^{-\beta(E_- + E_+)}(e^{-\beta U} - e^{-\beta\Delta})}{U^2(i\Omega + \Delta - U)} + \\
 & + e^{-\beta E_0} \left[-\frac{\beta^2 e^{-\beta E_+}}{2(i\Omega + \Delta)} - \frac{\beta e^{-\beta E_+}}{(i\Omega + \Delta)^2} + \frac{(e^{-\beta E_-} - e^{-\beta E_+})}{(i\Omega + \Delta)^3} \right] + \\
 & + e^{-\beta E_2} \left[\frac{\beta^2 e^{-\beta E_-}}{2(i\Omega + \Delta)} - \frac{\beta e^{-\beta E_-}}{(i\Omega + \Delta)^2} + \frac{(e^{-\beta E_-} - e^{-\beta E_+})}{(i\Omega + \Delta)^3} \right] \Big\}. \quad (20)
 \end{aligned}$$

Выражение для $W_{\downarrow}(i\Omega)$ получается из (20) перестановкой местами E_0 и E_2 .

Временная зависимость диаграммы $S_{2a}^{+-}(\tau - \tau')$, таким образом, равна

$$W_{\uparrow}(\tau - \tau') + W_{\downarrow}(\tau - \tau') + \langle TS^+(\tau)S^-(\tau') \rangle_0 \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} \int_0^{\beta} d\tau_1 d\tau_2 G_{\sigma}^0(\tau_1 - \tau_2) G_{\sigma}^0(\tau_2 - \tau_1). \quad (21)$$

Последнее слагаемое указывает на возникновение дополнительного множителя к нулевой функции (10), что соответствует перенормировке вычета в полюсе этой функции.

Найдем теперь фурье-образ выражения (21). Для этого воспользуемся фурье-образами функций $W_{\uparrow}$, $W_{\downarrow}$ и G_{σ}^0 . Последний имеет вид [7]

$$\begin{aligned}
 G_{\sigma}^0(i\omega_n) &= \frac{1}{Z_0} \left[\frac{e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_{\sigma}}}{\lambda_{\sigma}(i\omega_n)} + \frac{e^{-\beta E_{-\sigma}} + e^{-\beta E_2}}{\bar{\lambda}_{-\sigma}(i\omega_n)} \right], \\
 \lambda_{\sigma}(i\omega_n) &= i\omega_n + E_0 - E_{\sigma}, \quad \bar{\lambda}_{\sigma}(i\omega_n) = i\omega_n + E_{\sigma} - E_2, \quad \omega_n = (2n+1)\frac{\pi}{\beta}. \quad (22)
 \end{aligned}$$

Наконец, для того чтобы написать фурье-образ диаграммы рис. 1а, определим зонную энергию свободных электронов $\varepsilon(k)$ и второй ее момент $\varepsilon_2(k)$:

$$t(x) = \frac{1}{N} \sum_k \varepsilon(k) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}, \quad \varepsilon_2(k) = \frac{1}{N} \sum_q \varepsilon(\mathbf{q}) \varepsilon(\mathbf{q} - \mathbf{k}). \quad (23)$$

В результате получаем следующий вклад локальной диаграммы:

$$\begin{aligned} S_{2a}^{+-}(k | i\Omega) = & \frac{2\varepsilon_2(0)}{Z_0^2} \left\{ \frac{e^{-2\beta E_-} - e^{-2\beta E_+}}{(i\Omega + \Delta)[(i\Omega + \Delta)^2 - U^2]} - \frac{U(e^{-\beta E_+} - e^{-\beta E_-})^2}{(i\Omega + \Delta)^2[(i\Omega + \Delta)^2 - U^2]} + \right. \\ & + \frac{2(e^{-\beta U} - 1)e^{-\beta(E_+ + E_-)}}{U[(i\Omega + \Delta)^2 - U^2]} + \frac{2\beta(1 - e^{-\beta U})e^{-\beta(E_+ + E_-)}}{Z_0 U(i\Omega + \Delta)} (e^{-\beta E_+} - e^{-\beta E_-}) + \\ & + \frac{\beta^2(e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_2})(e^{-2\beta E_+} - e^{-2\beta E_-})}{2Z_0(i\Omega + \Delta)} + \frac{(e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_2})}{2} \times \\ & \times \left[\frac{\beta^2(e^{-\beta E_-} - e^{-\beta E_+})}{2(i\Omega + \Delta)} - \frac{\beta(e^{-\beta E_-} + e^{-\beta E_+})}{(i\Omega + \Delta)^2} + \frac{2(e^{-\beta E_-} - e^{-\beta E_+})}{(i\Omega + \Delta)^3} \right] \Big\}. \end{aligned} \quad (24)$$

Значение этой диаграммы при $E_+ = E_-$ следует рассмотреть отдельно для $\Omega = 0$ и $\Omega \neq 0$. В отсутствие внешнего поля

$$\begin{aligned} S_{2a}^{+-}(k | i\Omega) = & \frac{2\varepsilon_2(0)}{Z_0^2} \delta_{\Omega 0} \left\{ 2e^{-2\beta E_+} \left[\frac{1 - e^{-\beta U}}{U^3} + \frac{\beta^2}{2U} - \frac{\beta}{U^2} \right] - \right. \\ & - \frac{2\beta^2 e^{-3\beta E_+}}{Z_0 U} (1 - e^{-\beta U}) + \frac{\beta^3 e^{-\beta E_+}}{6} (e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_2}) \left[1 - \frac{6}{Z_0} e^{-\beta E_+} \right] \Big\} + \\ & + \frac{2(1 - \delta_{\Omega 0})}{Z_0^2} e^{-\beta E_+} \varepsilon_2(0) \left\{ \frac{\beta}{\Omega^2} (e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_2}) + \frac{2e^{-\beta E_+} (1 - e^{-\beta U})}{U(U^2 + \Omega^2)} \right\}. \end{aligned} \quad (25)$$

Перейдем теперь к анализу нелокального вклада, определяемого диаграммой рис. 1б:

$$\begin{aligned} S_{2b}^{+-}(x - x' | \tau - \tau') = & -t(x - x') t(x' - x) \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \times \\ & \times \langle TS^+(\tau) c_{\sigma_1}(\tau_1) \bar{c}_{\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0^{\text{ir}} \langle TS^-(\tau') c_{\sigma_2}(\tau_2) \bar{c}_{\sigma_1}(\tau_1) \rangle_0^{\text{ir}}. \end{aligned} \quad (26)$$

В этом выражении знак неприводимости можно опустить, так как в силу предположения (13) вычитаемые члены равны нулю. Непосредственное вычисление дает

$$\begin{aligned} \langle TS^+(\tau) c_{\sigma_1}(\tau_1) \bar{c}_{\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0 &= \delta_{\sigma_1 1} \delta_{\sigma_2 -1} \langle TS^+(\tau) c_\uparrow(\tau_1) \bar{c}_\downarrow(\tau_2) \rangle_0, \\ \langle TS^-(\tau') c_{\sigma_2}(\tau_2) \bar{c}_{\sigma_1}(\tau_1) \rangle_0 &= \delta_{\sigma_1 1} \delta_{\sigma_2 -1} \langle TS^-(\tau') c_\downarrow(\tau_2) \bar{c}_\uparrow(\tau_1) \rangle_0, \end{aligned} \quad (27)$$

где

$$\begin{aligned}
\langle TS^+(\tau)c_\uparrow(\tau_1)\bar{c}_\downarrow(\tau_2)\rangle_0 = & \\
= -\frac{e^{\tau\Delta}}{Z_0} \Big\{ & \theta(\tau - \tau_1)\theta(\tau_1 - \tau_2) \exp[-\beta E_+ + \tau_1(E_- - E_2) + \tau_2(E_2 - E_+)] + \\
& + \theta(\tau - \tau_2)\theta(\tau_2 - \tau_1) \exp[-\beta E_+ + \tau_1(E_0 - E_+) + \tau_2(E_- - E_0)] + \\
& + \theta(\tau_1 - \tau_2)\theta(\tau_2 - \tau) \exp[-\beta E_- + \tau_1(E_- - E_2) + \tau_2(E_2 - E_+)] + \\
& + \theta(\tau_2 - \tau_1)\theta(\tau_1 - \tau) \exp[-\beta E_- + \tau_1(E_0 - E_+) + \tau_2(E_- - E_0)] - \\
& - \theta(\tau_1 - \tau)\theta(\tau - \tau_2) \exp[-\beta E_0 + \tau_1(E_0 - E_+) + \tau_2(E_- - E_0)] - \\
& - \theta(\tau_2 - \tau)\theta(\tau - \tau_1) \exp[-\beta E_2 + \tau_1(E_- - E_2) + \tau_2(E_2 - E_+)] \Big\}. \quad (28)
\end{aligned}$$

Аналогичное выражение для функции $\langle TS^-(\tau)c_\downarrow(\tau_2)\bar{c}_\uparrow(\tau_1)\rangle_0$ получается из вышеприведенного заменой τ на τ' , перестановкой τ_1 и τ_2 , а также E_+ и E_- между собой.

Зная эти функции, мы можем найти правую часть (26) и фурье-образ этой диаграммы:

$$\begin{aligned}
S_{2b}^{+-}(k | i\Omega) = & -\frac{2\varepsilon_2(k)}{Z_0^2} \left\{ \frac{1}{[(i\Omega + \Delta)^2 - U^2]} \left[\frac{e^{-2\beta E_-} - e^{-2\beta E_+}}{i\Omega + \Delta} - \right. \right. \\
& - \frac{U(e^{-\beta E_+} - e^{-\beta E_-})^2}{(i\Omega + \Delta)^2} - \frac{2(1 - e^{-\beta U})}{U} e^{-\beta(E_+ + E_-)} \Big] - \\
& \left. - (e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_2}) \left[\frac{\beta(e^{-\beta E_-} + e^{-\beta E_+})}{2(i\Omega + \Delta)^2} + \frac{(e^{-\beta E_+} - e^{-\beta E_-})}{(i\omega + \Delta)^3} \right] \right\}. \quad (29)
\end{aligned}$$

При устремлении внешнего поля к нулю вклад этой диаграммы есть

$$\begin{aligned}
S_{2b}^{+-}(k | i\Omega) = & -\frac{2\varepsilon_2(k)e^{-\beta E_+}}{Z_0^2} \left\{ \delta_{\Omega 0} \left[2e^{-\beta E_+} \left(\frac{1 - e^{-\beta U}}{U^3} + \frac{\beta^2}{2U} - \frac{\beta}{U^2} \right) - \right. \right. \\
& - \frac{\beta^3}{12} (e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_2}) \Big] + \\
& \left. + (1 - \delta_{\Omega 0}) \left[\frac{\beta(e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_2})}{\Omega^2} + \frac{2(1 - e^{-\beta U})e^{-\beta E_+}}{U(U^2 + \Omega^2)} \right] \right\}. \quad (30)
\end{aligned}$$

Собирая вместе результаты вычислений, получаем во втором порядке термодинамической теории возмущений следующее выражение для спиновой функции Грина:

$$\begin{aligned}
S_2^{+-}(k | i\Omega) = & \frac{e^{-\beta E_-} - e^{-\beta E_+}}{Z_0(i\Omega + \Delta)} + \frac{2\varepsilon_2(0)(e^{-\beta E_-} - e^{-\beta E_+})}{Z_0^2(i\Omega + \Delta)} \left[\frac{\beta^2}{4} (e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_2}) - \right. \\
& - \frac{\beta^2}{2Z_0} (e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_2})(e^{-\beta E_+} + e^{-\beta E_-}) - \frac{2\beta(1 - e^{-\beta U})}{Z_0 U} e^{-\beta(E_+ + E_-)} \Big] + \\
& + \frac{2(\varepsilon_2(0) - \varepsilon_2(k))}{Z_0^2} \left\{ \frac{1}{[(i\Omega + \Delta)^2 - U^2]} \left[\frac{e^{-2\beta E_-} - e^{-2\beta E_+}}{i\Omega + \Delta} - \right. \right. \\
& - \frac{U(e^{-\beta E_+} - e^{-\beta E_-})^2}{(i\Omega + \Delta)^2} - \frac{2(1 - e^{-\beta U})}{U} e^{-\beta(E_+ + E_-)} \Big] - \\
& \left. - (e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_2}) \left[\frac{\beta(e^{-\beta E_-} + e^{-\beta E_+})}{2(i\Omega + \Delta)^2} + \frac{(e^{-\beta E_+} - e^{-\beta E_-})}{(i\Omega + \Delta)^3} \right] \right\}. \quad (31)
\end{aligned}$$

Воспользуемся определением (см. [10]) диагональных компонент магнитной восприимчивости в мацубаровском представлении ($\alpha = x, y$)

$$\chi^{\alpha\alpha}(x - x' \mid \tau - \tau') = \frac{\langle T \hat{S}_x^\alpha(\tau) \hat{S}_{x'}^\alpha(\tau') U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0} \quad (32)$$

и представим ее фурье-образ в виде

$$\chi^{\alpha\alpha}(k \mid i\Omega) = \chi(k \mid i\Omega) = \frac{1}{4} [S^{+-}(k \mid i\Omega) + S^{-+}(k \mid i\Omega)]. \quad (33)$$

Однако наблюдаемая магнитная восприимчивость является не причинной температурной, а запаздывающей (r) временной функцией Грина $\chi^r(k \mid E)$. Для ее определения исходим из фурье-образа функции (33), выполняем аналитическое продолжение этой мацубаровской функции с дискретного множества точек $i\Omega_m$ ($\Omega_m > 0$) на всю верхнюю полуплоскость комплексной переменной z [11] и устремляем затем эту величину сверху к вещественной оси, $z = E + i0^+$. Возникающая динамическая восприимчивость $\chi^r(k \mid E)$ обладает свойствами симметрии [10]:

$$\text{Re } \chi^r(k \mid E) = \text{Re } \chi^r(k \mid -E), \quad \text{Im } \chi^r(k \mid E) = -\text{Im } \chi^r(k \mid -E). \quad (34)$$

Учтя свойства симметрии $S^{-+}(k \mid i\Omega) = S^{+-}(-k \mid -i\Omega)$, придадим формуле (33) следующий вид:

$$\chi(k \mid i\Omega) = \frac{1}{4} [S^{+-}(k \mid i\Omega) + S^{+-}(-k \mid -i\Omega)]. \quad (35)$$

Отсюда для запаздывающей функции получаем

$$\chi^r(k \mid E) = \frac{1}{4} [S^{+-}(k \mid E + i0^+) + S^{+-}(-k \mid -E - i0^+)]. \quad (36)$$

Подстановка (31) в (36) позволяет проверить выполнение условий (34) в рассматриваемом порядке теории возмущений.

В этом приближении статическая восприимчивость равна

$$\chi_2(k \mid 0) = \frac{1}{2} S_2^{+-}(k \mid 0). \quad (37)$$

В пространственно однородном случае эта величина имеет вид

$$\chi_2(0 \mid 0) = \frac{e^{-\beta E_-} - e^{-\beta E_+}}{2Z_0\Delta} (1 + \zeta_2), \quad (38)$$

где

$$\begin{aligned} \zeta_2 = \frac{\beta^2 \varepsilon_2(0)}{Z_0} & \left[\frac{(e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_2})}{2} - \frac{(e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_2})}{Z_0} (e^{-\beta E_+} + e^{-\beta E_-}) - \right. \\ & \left. - \frac{4(1 - e^{-\beta U})}{\beta U Z_0} e^{-\beta(E_+ + E_-)} \right]. \end{aligned} \quad (39)$$

В пределах принятой точности формуле (38) можно придать вид

$$\chi_2(0 | 0) = \frac{\chi_0(0 | 0)}{1 - \zeta_2}, \quad \chi_0(0 | 0) = \frac{e^{-\beta E_+}(e^{\beta \Delta} - 1)}{2Z_0 \Delta}, \quad (40)$$

который позволяет оценить величину критической температуры T_c из условия обращения в нуль знаменателя статической восприимчивости (40): $1 - \zeta_2(T_c) = 0$.

Заметим также, что выражение (31) можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} S_2^{+-}(k | i\Omega) &= \frac{\zeta_2(e^{-\beta E_-} - e^{-\beta E_+})}{Z_0(i\Omega + \Delta)} + \frac{2(\varepsilon_2(0) - \varepsilon_2(k))}{Z_0^2[(i\Omega + \Delta)^2 - U^2]} \times \\ &\times \left\{ \frac{e^{-2\beta E_-} - e^{-2\beta E_+}}{i\Omega + \Delta} - \frac{(e^{-\beta E_-} - e^{-\beta E_+})^2}{U} - \frac{2(1 - e^{-\beta U})}{U} e^{-\beta(E_+ + E_-)} \right\} + \\ &+ \frac{(e^{-\beta E_-} - e^{-\beta E_+})}{Z_0} \left\{ i\Omega + \Delta - \frac{2(\varepsilon_2(0) - \varepsilon_2(k))}{Z_0} \times \right. \\ &\times \left. \left[e^{-\beta E_+} \frac{(e^{\beta \Delta} - 1)}{U} - (e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_2}) \left(-\frac{1}{i\Omega + \Delta} + \frac{\beta}{2} \coth \frac{\beta \Delta}{2} \right) \right] \right\}^{-1}. \end{aligned} \quad (41)$$

Из (41) следует, что перескоки электронов перенормируют спектр элементарных возбуждений при малых энергиях порядка Δ и делают его зависящим от импульса электрона, приводят к новым возбуждениям с энергией порядка энергии отталкивания U , обусловленным перескоками между хаббардовскими подзонами, и, наконец, изменяют на величину ζ_2 вычет функции Грина при энергии Δ .

3. СУММИРОВАНИЕ ДИАГРАММ

В теории систем со слабым взаимодействием хорошо известным примером суммирования диаграмм является приближение случайных фаз (ПСФ), при котором учитываются петлевые диаграммы. Их суммирование в импульсном представлении сводится к выражению

$$\chi(k | i\Omega) = \frac{\chi_0(k | i\Omega)}{1 - U\chi_0(k | i\Omega)}, \quad (42)$$

которое для рассматриваемой нами модели Хаббарда было получено в работе [12] в предположении слабого кулоновского отталкивания U .

Для систем с сильными корреляциями в работах [13, 14] было разработано обобщение ПСФ. Базой при этом служила диаграммная техника [5–7].

Ниже нами рассматривается суммирование бесконечной последовательности так называемых лестничных диаграмм (рис. 2).

На рис. 2 изображены делокализованные диаграммы 4-го и 6-го порядков теории возмущений. Высшие порядки получаются дальнейшим повторением неприводимой функции $G_2^{0 \text{ ir}}$. Начальная и конечная части этих диаграмм равны корреляторам $S^+(\tau, \uparrow \tau_1, \downarrow \tau_2)$ и $S^-(\tau', \downarrow \tau_3, \uparrow \tau_4)$, а повторяющимся элементом является неприводимая двухчастичная функция Грина $G_2^{0 \text{ ir}}(\downarrow \tau_2, \uparrow \tau_4 | \downarrow \tau_3, \uparrow \tau_1)$, определенная в работах [8, 9]. Последняя функция играет существенную роль в теории систем с сильными корреляциями. Повторяющиеся элементы диаграмм являются одноузельными,

Рис. 2. Делокализованные диаграммы 4-го и 6-го порядков теории возмущений.

и поэтому суммированию по узлам подвержены лишь матричные элементы перескока. Суммирование этой последовательности диаграмм сводится к перенормировке функции $G_2^{0\text{ir}}$. При этом удобно перейти к $(k, i\omega)$ -представлению по формулам

$$\begin{aligned}
 S^+(\tau, \uparrow \tau_1, \downarrow \tau_2) &= \langle TS^+(\tau) c_{\uparrow}(\tau_1) \bar{c}_{\downarrow}(\tau_2) \rangle_0 = \\
 &= \frac{1}{\beta^3} \sum_{\Omega \omega_1 \omega_2} e^{-i(\Omega \tau + \omega_1 \tau_1 - \omega_2 \tau_2)} S^+(i\Omega, \uparrow i\omega_1, \downarrow i\omega_2), \\
 S^-(\tau', \downarrow \tau_1, \uparrow \tau_2) &= \langle TS^-(\tau') c_{\downarrow}(\tau_1) \bar{c}_{\uparrow}(\tau_2) \rangle_0 = \\
 &= \frac{1}{\beta^3} \sum_{\Omega \omega_1 \omega_2} e^{-i(\Omega \tau' + \omega_1 \tau_1 - \omega_2 \tau_2)} S^-(i\Omega, \downarrow i\omega_1, \uparrow i\omega_2), \\
 G_2^{0\text{ir}}(\downarrow \tau_1, \uparrow \tau_2 \mid \downarrow \tau_3, \uparrow \tau_4) &= \frac{1}{\beta^4} \sum_{\omega_1 \omega_2 \omega_3 \omega_4} e^{-i(\omega_1 \tau_1 + \omega_2 \tau_2 - \omega_3 \tau_3 - \omega_4 \tau_4)} \times \\
 &\quad \times G_2^{0\text{ir}}(\downarrow i\omega_1, \uparrow i\omega_2 \mid \downarrow i\omega_3, \uparrow i\omega_4),
 \end{aligned} \tag{43}$$

где $\Omega = \Omega_m$ – четные, а $\omega_i = \omega_{n_i}$ ($i = 1, \dots, 4$) – нечетные мацубаровские частоты. Частотные аргументы связаны, очевидно, законами сохранения, т.е.

$$\begin{aligned}
 S^+(i\Omega, \uparrow i\omega_1, \downarrow i\omega_2) &= \beta \delta(\Omega + \omega_1 - \omega_2) \tilde{S}^+(i\Omega, \uparrow i\omega_1, \downarrow i(\omega_1 + \Omega)), \\
 S^-(i\Omega, \downarrow i\omega_1, \uparrow i\omega_2) &= \beta \delta(\Omega + \omega_1 - \omega_2) \tilde{S}^-(i\Omega, \downarrow i\omega_1, \uparrow i(\omega_1 + \Omega)), \\
 G_2^{0\text{ir}}(\downarrow i\omega_1, \uparrow i\omega_2 \mid \downarrow i\omega_3, \uparrow i\omega_4) &= \beta \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4) \times \\
 &\quad \times \tilde{G}_2^{0\text{ir}}(\downarrow i\omega_1, \uparrow i\omega_2 \mid \downarrow i\omega_3, \uparrow i(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3)).
 \end{aligned} \tag{44}$$

На основании (28) при $E_+ \neq E_-$ получаем

$$\begin{aligned} \tilde{S}^+(i\Omega, \uparrow i\omega, \downarrow i(\omega + \Omega)) &= \tilde{S}^-(i\Omega, \downarrow i(\omega + \Omega), \uparrow i\omega) = \\ &= \frac{1}{Z_0} \left[\frac{e^{-\beta E_0}}{\lambda_+(\omega)\lambda_-(\omega + \Omega)} + \frac{e^{-\beta E_2}}{\bar{\lambda}_-(\omega)\bar{\lambda}_+(\omega + \Omega)} + \right. \\ &\quad + \left(1 - \frac{U}{(i\Omega + \Delta)}\right) \frac{e^{-\beta E_+}}{\lambda_+(\omega)\bar{\lambda}_+(\omega + \Omega)} + \\ &\quad \left. + \left(1 + \frac{U}{(i\Omega + \Delta)}\right) \frac{e^{-\beta E_-}}{\bar{\lambda}_-(\omega + \Omega)\lambda_-(\omega)} \right], \end{aligned} \quad (45)$$

где $\lambda_\sigma(\omega)$ и $\bar{\lambda}_\sigma(\omega)$ определены формулами (22).

Более сложным является вычисление двухчастичной неприводимой функции Грина. При $E_+ \neq E_-$ и при произвольном значении химического потенциала для этой функции получаем

$$\begin{aligned} Z_0 \tilde{G}_2^{0\text{ir}}(\downarrow i(\omega_1 + \Omega), \uparrow i\omega_2 \mid \downarrow i(\omega_2 + \Omega), \uparrow i\omega_1) &= \frac{\beta \delta_{\omega_1, \omega_2}}{Z_0} e^{-\beta(E_+ + E_-)} (1 - e^{\beta U}) \times \\ &\times \left(\frac{1}{\lambda_-(\omega_1 + \Omega)} - \frac{1}{\bar{\lambda}_+(\omega_1 + \Omega)} \right) \left(\frac{1}{\lambda_+(\omega_2)} - \frac{1}{\bar{\lambda}_-(\omega_2)} \right) + \\ &+ U \left[\frac{e^{-\beta E_0}}{\lambda_+(\omega_1)\lambda_-(\omega_1 + \Omega)\lambda_+(\omega_2)\lambda_-(\omega_2 + \Omega)} + \right. \\ &\quad + \frac{e^{-\beta E_2}}{\bar{\lambda}_-(\omega_1)\bar{\lambda}_+(\omega_1 + \Omega)\bar{\lambda}_-(\omega_2)\bar{\lambda}_+(\omega_2 + \Omega)} + \\ &\quad + \left(1 - \frac{U}{i\Omega + \Delta}\right) \frac{e^{-\beta E_+}}{\lambda_+(\omega_1)\bar{\lambda}_+(\omega_1 + \Omega)\lambda_+(\omega_2)\bar{\lambda}_+(\omega_2 + \Omega)} + \\ &\quad + \left(1 + \frac{U}{i\Omega + \Delta}\right) \frac{e^{-\beta E_-}}{\bar{\lambda}_-(\omega_1)\lambda_-(\omega_1 + \Omega)\bar{\lambda}_-(\omega_2)\lambda_-(\omega_2 + \Omega)} \Big] + \\ &+ \frac{U^2(e^{-\beta E_0} - e^{-\beta E_2})}{2[\lambda_-(\omega_1 + \Omega) + \bar{\lambda}_-(\omega_2)]} \left[\frac{1}{\lambda_+(\omega_1)\lambda_-(\omega_1 + \Omega)\lambda_+(\omega_2)\lambda_-(\omega_2 + \Omega)} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\bar{\lambda}_-(\omega_1)\bar{\lambda}_+(\omega_1 + \Omega)\bar{\lambda}_-(\omega_2)\bar{\lambda}_+(\omega_2 + \Omega)} \right] - \\ &- \frac{U^3(e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_2})[\lambda_+(\omega_1)\lambda_-(\omega_2 + \Omega) + \bar{\lambda}_+(\omega_1 + \Omega)\bar{\lambda}_-(\omega_2)]}{2\lambda_+(\omega_1)\lambda_-(\omega_1 + \Omega)\bar{\lambda}_-(\omega_1)\bar{\lambda}_+(\omega_1 + \Omega)\lambda_+(\omega_2)\lambda_-(\omega_2 + \Omega)\bar{\lambda}_-(\omega_2)\bar{\lambda}_+(\omega_2 + \Omega)}. \end{aligned} \quad (46)$$

Из рис. 2 видно, что суммирование бесконечной цепочки лестничных диаграмм эквивалентно решению следующего интегрального уравнения:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_k(\downarrow i(\omega_1 + \Omega), \uparrow i(\bar{\omega}_1 - \Omega) \mid \downarrow i\bar{\omega}_1, \uparrow i\omega_1) &= \\ &= \tilde{G}_2^{0\text{ir}}(\downarrow i(\omega_1 + \Omega), \uparrow i(\bar{\omega}_1 - \Omega) \mid \downarrow i\bar{\omega}_1, \uparrow i\omega_1) - \\ &\quad - \varepsilon_2(k) \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_2} \tilde{G}_2^{0\text{ir}}(\downarrow i(\omega_1 + \Omega), \uparrow i\omega_2 \mid \downarrow i(\omega_2 + \Omega), \uparrow i\omega_1) \times \\ &\quad \times \tilde{G}_k(\downarrow i(\omega_2 + \Omega), \uparrow i(\bar{\omega}_1 - \Omega) \mid \downarrow i\bar{\omega}_1, \uparrow i\omega_2). \end{aligned} \quad (47)$$

В самом деле, итерация правой части (47) приводит к возникновению диаграмм, представленных на рис. 2. Зависимость от импульса обязана перескокам и легко прослеживается. Закон сохранения импульса выполняется для всех элементов диаграмм, так же как и законы сохранения частот и спинов; $\varepsilon_2(k)$ определено формулой (23).

Уравнения (47) легко решить в случае, когда имеет место половинное заполнение свободной электронной зоны. Для этого случая имеем

$$\begin{aligned} E_+ &= -\frac{U - \Delta}{2}, \quad E_- = -\frac{U + \Delta}{2}, \quad E_0 = E_2, \\ \mu &= \frac{U}{2}, \quad Z_0 = 2 \left(1 + \operatorname{ch} \frac{\beta \Delta}{2} \exp \frac{\beta U}{2} \right). \end{aligned} \quad (48)$$

Так как нас интересует температурная область, для которой $\beta U \gg 1$, то в дальнейшем опустим экспоненциально малые члены порядка $\beta U \exp(-\beta U/2)$ и $\exp(-\beta U/2)$. В этом приближении получаем

$$\begin{aligned} \tilde{S}^+(i\Omega, \uparrow i\omega, \downarrow i(\omega + \Omega)) &\simeq \varphi_1(\Omega) \psi_1(\omega) + \varphi_2(\Omega) \psi_2(\omega), \\ \tilde{G}_2^0 \text{ir}(\downarrow i(\omega_1 + \Omega), \uparrow i\omega_2 \mid \downarrow i(\omega_2 + \Omega), \uparrow i\omega_1) &\simeq \frac{\beta \delta_{\omega_1, \omega_2}}{4 \operatorname{ch}^2(\beta \Delta/2)} U^2 \psi_1(\omega_1) \psi_2(\omega_1) + \\ &+ \varphi_1(\Omega) \psi_1(\omega_1) \psi_1(\omega_2) + \varphi_2(\Omega) \psi_2(\omega_1) \psi_2(\omega_2), \end{aligned} \quad (49)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} \varphi_1(\Omega) &= \frac{U \exp(-\beta \Delta/2)}{2 \operatorname{ch}(\beta \Delta/2)} \left(1 - \frac{U}{i\Omega + \Delta} \right), \quad \varphi_2(\Omega) = \frac{U \exp(\beta \Delta/2)}{2 \operatorname{ch}(\beta \Delta/2)} \left(1 + \frac{U}{i\Omega + \Delta} \right), \\ \psi_1(\omega) &= \frac{1}{\lambda_+(\omega) \bar{\lambda}_+(\omega + \Omega)}, \quad \psi_2(\omega) = \frac{1}{\bar{\lambda}_-(\omega) \lambda_-(\omega + \Omega)}. \end{aligned} \quad (50)$$

Подстановка значений (48)–(50) в уравнение (47) после некоторых преобразований дает для ренормированной неприводимой функции $\tilde{G}_k$ выражение

$$\begin{aligned} \tilde{G}_k(\downarrow i(\omega_1 + \Omega), \uparrow i(\bar{\omega}_1 - \Omega) \mid \downarrow i\bar{\omega}_1, \uparrow i\omega_1) &= \frac{\beta U^2 \delta_{\omega_1 + \Omega, \bar{\omega}_1} \psi_1(\omega_1) \psi_2(\omega_1)}{4 \operatorname{ch}^2(\beta \Delta/2) d(k \mid \omega_1)} + \\ &+ \frac{1}{M(k \mid i\Omega)} \left[(1 + \varepsilon_2(k) \varphi_2(\Omega) \mathcal{D}_{22}(\Omega)) \varphi_1(\Omega) \tilde{\psi}_1(\omega_1) \tilde{\psi}_1(\bar{\omega}_1 - \Omega) - \right. \\ &- \varepsilon_2(k) \varphi_1(\Omega) \varphi_2(\Omega) \mathcal{D}_{12}(\Omega) (\tilde{\psi}_1(\omega_1) \tilde{\psi}_2(\bar{\omega}_1 - \Omega) + \tilde{\psi}_2(\omega_1) \tilde{\psi}_1(\bar{\omega}_1 - \Omega)) + \\ &\left. + (1 + \varepsilon_2(k) \varphi_1(\Omega) \mathcal{D}_{11}(\Omega)) \varphi_2(\Omega) \tilde{\psi}_2(\omega_1) \tilde{\psi}_2(\bar{\omega}_1 - \Omega) \right], \end{aligned} \quad (51)$$

где

$$\begin{aligned} d(k \mid \omega) &= \mathcal{D}(k \mid \omega) \psi_1(\omega) \psi_2(\omega), \quad \tilde{\psi}_i(\omega) = \frac{\psi_i(\omega)}{d(k \mid \omega)}, \\ \mathcal{D}(k \mid \omega) &= \lambda_+(\omega) \bar{\lambda}_+(\omega + \Omega) \bar{\lambda}_-(\omega) \lambda_-(\omega + \Omega) + \frac{\varepsilon_2(k)}{\operatorname{ch}^2(\beta \Delta/2)} \left(\frac{U}{2} \right)^2, \\ \mathcal{D}_{ij}(\Omega) &= \frac{1}{\beta} \sum_{\omega} \frac{\psi_i(\omega) \psi_j(\omega)}{d(k \mid \omega)}, \\ M(k \mid \Omega) &= (1 + \varepsilon_2(k) \varphi_1(\Omega) \mathcal{D}_{11}(\Omega)) (1 + \varepsilon_2(k) \varphi_2(\Omega) \mathcal{D}_{22}(\Omega)) - \\ &- \varepsilon_2^2(k) \varphi_1(\Omega) \varphi_2(\Omega) \mathcal{D}_{12}^2(\Omega). \end{aligned} \quad (52)$$

Сравнение выражения (51) с исходным коррелятором (49) указывает на существенные изменения, обусловленные сильными корреляциями. Так, например, изменился одноэлектронный спектр, присущий хаббардовским подзонам, который, как известно, определяется обращением в нуль функций $\lambda_\sigma(z)$, $\bar{\lambda}_\sigma(z)$, $\lambda_\sigma(z + i\Omega)$ и $\bar{\lambda}_\sigma(z + i\Omega)$ (после замены $i\omega_n$ на z). Теперь этот спектр определяется четырьмя нулями функции $\mathcal{D}(k | z)$ и зависит от импульса электрона. Он значительно сложнее, чем спектр аппроксимации “Хаббард I” [1, 2].

Распространение коллективизированного магнитного возбуждения с частотой $i\Omega$ описывается знаменателем $M(k | i\Omega)$, свойства которого должны решающим образом определять магнитное поведение системы в данной аппроксимации.

Вклад суммы всех лестничных диаграмм, представленных на рис. 2, равен

$$\begin{aligned} S(k | i\Omega) = & \frac{\varepsilon_2^2(k)}{\beta^2} \sum_{\omega_1, \omega_2} S^+(i\Omega, \uparrow i\omega_1, \downarrow i(\omega_1 + \Omega)) \times \\ & \times \tilde{G}_k(\downarrow i(\omega_1 + \Omega), \uparrow i\omega_2 | \downarrow i(\omega_2 + \Omega), \uparrow i\omega_1) \times \\ & \times S^-(i\Omega, \downarrow i(\omega_2 + \Omega), \uparrow i\omega_2). \end{aligned} \quad (53)$$

Подставляя сюда приближенные выражения (49), получаем

$$\begin{aligned} S^{+-}(k | i\Omega) = & \frac{\varepsilon_2^2(k)U^2}{4 \operatorname{ch}^2(\beta\Delta/2)} \left[\varphi_1^2(\Omega) \mathcal{D}_{1112}(k | i\Omega) + \right. \\ & + \varphi_2^2(\Omega) \mathcal{D}_{1222}(k | i\Omega) + 2\varphi_1(\Omega)\varphi_2(\Omega) \mathcal{D}_{1122}(k | i\Omega) \left. \right] + \\ & + \frac{\varepsilon_2^2(k)}{M(k | i\Omega)} \left[\varphi_1(\Omega) (\mathcal{D}_{11}(\Omega)\varphi_1(\Omega) + \mathcal{D}_{12}(\Omega)\varphi_2(\Omega))^2 + \right. \\ & + \varphi_2(\Omega) (\mathcal{D}_{12}(\Omega)\varphi_1(\Omega) + \mathcal{D}_{22}(\Omega)\varphi_2(\Omega))^2 + \\ & + \varphi_1(\Omega)\varphi_2(\Omega)\varepsilon_2(k) (\mathcal{D}_{11}(\Omega)\mathcal{D}_{22}(\Omega) - \mathcal{D}_{12}^2(\Omega)) \times \\ & \times (\varphi_1^2(\Omega)\mathcal{D}_{11}(\Omega) + \varphi_1\varphi_2(\Omega)\mathcal{D}_{12}(\Omega) + \varphi_2^2(\Omega)\mathcal{D}_{22}(\Omega)) \left. \right], \end{aligned} \quad (54)$$

где

$$\mathcal{D}_{ijkl}(k | i\Omega) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega} \frac{\psi_i(\omega)\psi_j(\omega)\psi_k(\omega)\psi_l(\omega)}{d(k | \omega)}. \quad (55)$$

Это выражение следует сопоставить с формулой (41), вычисленной в предыдущем разделе. Согласно (54) спектр коллективных спиновых возбуждений определяется нулями функции $M(k | z)$ (52), в то время как во втором порядке теории возмущений – нулями более простого знаменателя, представленного последним множителем в фигурных скобках в формуле (41). Аналогичные суммирования следует выполнить и для локальной части восприимчивости.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой работе нами предложен новый метод вычисления спиновой динамической восприимчивости на основе диаграммной техники для систем с сильной корреляцией, развитой в [8, 9]. В основе данной техники лежат строгое вычисление одноузельных величин в представлении хаббардовских операторов и учет взаимодействия между различными узлами решетки в рамках теории возмущений.

В разделе 2 представлены результаты, полученные во втором порядке по интегралу перескока, для которых предложены аппроксимационные формулы (40) и (41), учитывающие вклад перескоков электронов в перенормировку спектра локальной восприимчивости.

Во третьем разделе выполнено суммирование диаграмм лестничного типа, представленных на рис. 2. В отличие от стандартного приближения случайных фаз (формула (42)), где суммируется последовательность петлевых диаграмм для невзаимодействующего ферми-газа, в нашем приближении суммируется последовательность одноузельных блоков, представленных неприводимой двухчастичной функцией Грина (46). В пределе $\beta U \gg 1$ сумму этих диаграмм удастся записать в виде замкнутой формулы (54).

Однако сопоставление полученных формул с результатами других вычислений спиновой восприимчивости в пределе сильных корреляций, которые, как правило, проводятся для редуцированной t - J -модели (см., например, [13–15]), представляет значительные трудности. Поэтому мы предполагаем провести исследование температурной и частотной зависимостей восприимчивости (54) с помощью численных расчетов в отдельной работе.

Авторы благодарят Г. Джакели за помощь в подготовке рукописи к публикации.

Список литературы

- [1] *J. Hubbard.* Proc. Roy. Soc. A. 1963. V. 276. P. 238.
- [2] *J. Hubbard.* Proc. Roy. Soc. A. 1967. V. 296. P. 82.
- [3] *J. Hubbard, K. P. J. Jain.* Phys. C (Proc. Phys. Soc.). Ser. 2. 1968. V. 1. P. 1650.
- [4] *W. Brenig.* Phys. Rep. 1995. V. 251. P. 154.
- [5] *П. М. Слободян, И. В. Стасюк.* ТМФ. 1974. Т. 19. С. 423.
- [6] *Р. О. Зайцев.* ЖЭТФ. 1975. Т. 68. С. 207; 1976. Т. 70. С. 1100.
- [7] *Ю. А. Изюмов, Ю. М. Скрыбин.* Статистическая механика магнитноупорядоченных систем. М.: Наука, 1987.
- [8] *М. И. Владимир, В. А. Москаленко.* ТМФ. 1990. Т. 82. С. 428.
- [9] *С. И. Вакару, М. И. Владимир, В. А. Москаленко.* ТМФ. 1990. Т. 85. С. 248.
- [10] *С. В. Тябликов.* Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975.
- [11] *А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский.* Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Физматгиз, 1962.
- [12] *T. Izuyama, D. Kim, R. Kubo.* J. Phys. Soc. Jpn. 1963. V. 18. P. 1250.
- [13] *Y. A. Izyumov, B. M. Letfulov.* J. Phys. Cond. Matter. 1990. V. 2. P. 8905.
- [14] *Y. A. Izyumov, B. M. Letfulov.* Int. J. Mod. Phys. B. 1992. V. 6. P. 311.
- [15] *F. Onufrieva, J. Rossat-Mignot.* Phys. Rev. B. 1995. V. 52. P. 7572.

Поступила в редакцию 6.VI.1997 г.

V. A. Moskalenko, N. M. Plakida

DYNAMIC SPIN SUSCEPTIBILITY IN THE HUBBARD MODEL

By employing a new diagram technique developed for systems with strong correlations, the dynamic spin susceptibility for the Hubbard model is calculated. The single-site interaction is allowed for in the zero-order approximation, while electron hopping is taken into account by the evolution operator. We consider the second order of the perturbation theory and calculate the sum of the two-particle single-site ladder-type diagrams that are irreducible. Equations determining the static susceptibility and spin wave spectrum are obtained.