Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. С. Капитонов, П. А. Севастьянов, Интегрирование по супералгебре в модели Хаббарда с сильной корреляцией, *ТМФ*, 1996, том 107, номер 2, 269–287

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1155>

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: 54.198.55.26

26 апреля 2023 г., 13:12:23

В. С. Капитонов, П. А. Севастьянов

ИНТЕГРИРОВАНИЕ ПО СУПЕРАЛГЕБРЕ В МОДЕЛИ ХАББАРДА С СИЛЬНОЙ КОРРЕЛЯЦИЕЙ

Получено представление для статистической суммы модели Хаббарда с сильным кулоновским отталкиванием в виде функционального интеграла по вспомогательным грасмановым переменным. Приближенное изучение фазовых переходов показывает: 1) при малой величине допирования δ система является антиферромагнитным диэлектриком; 2) для значений $\delta \geq t/U$ система является ферромагнитным металлом при $U/t > 10$ и сверхпроводящим металлом при $U/t \lesssim 10$.

Одной из важнейших задач при построении теории высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) является описание сильных электронных корреляций в CuO-слоях ВТСП-материалов. С 1987 года [1] наиболее популярной и простой моделью сильно-коррелированных сверхпроводящих систем является модель Хаббарда [2]. Результаты исследования этой модели, полученные до открытия ВТСП, изложены в работах [3, 4]. Обзор работ, использующих модель Хаббарда для описания свойств ВТСП-материалов, дан в [5, 6]. В работе [6] содержатся результаты, относящиеся к наиболее интересному случаю – модели Хаббарда в режиме сильной связи, которая описывает сильно-коррелированную систему электронов. Данная работа также посвящена исследованию свойств модели Хаббарда в режиме сильной связи, т.е. в случае сильного кулоновского отталкивания на узлах решетки, которое приводит к локализации магнитных состояний, в отличие от предела слабой связи, в котором системе свойствен коллективизированный магнетизм (последний случай рассматриваться не будет). Перечислим кратко основные подходы к решению проблемы сильных электронных корреляций в модели Хаббарда и полученные в этой области за последнее время результаты.

Основным регулярным методом исследования модели Хаббарда в режиме сильной связи является диаграммная техника теории возмущений по малому параметру t/U (t – интеграл перескоков, U – кулоновская константа связи), развитая на основе алгебры операторов Хаббарда [7, 8]. Главным недостатком этого метода является сложность диаграммной техники, значительно отличающейся от обычной теории возмущений для ферми- или бозе-систем, что приводит к громоздким вычислениям. Например, в работе [9], где вычисляется корреляционная функция токов во втором порядке теории возмущений, отмечается, что учет третьего порядка потребовал бы вычисления около 250 диаграмм.

Одним из основных методов исследования квантово-статистических систем является метод функционального интегрирования [10]. Первые успешные теории магнитного поведения модели Хаббарда в широком интервале параметров U и n (концентрация электронов) основывались на представлении статистической суммы Z в виде функционального интеграла и использовании в нем статического приближения [11–14]. Статическое приближение хорошо работает при высоких температурах и приводит к трудностям при низких, а также не включает спин-волновые возбуждения и переоценивает разницу в энергии ферромагнитного и парамагнитного состояний из-за пренебрежения корреляциями. В статье [13] вычисляются намагниченность подрешетки и локализованный момент при $n = 1$, $T = 0$ (в зависимости от U) в статическом приближении, в [14] – те же величины с учетом динамических поправок по вариационному методу (эти результаты подтверждают локализованный характер моментов при больших U).

Современное развитие функционального подхода к модели Хаббарда тесно связано с методом вспомогательных бозонов и фермионов. Предложенный впервые для других моделей [15, 16], этот метод был применен к хаббардовскому магнетизму Зу и Андерсоном [17]. Идея метода состоит во введении дополнительных состояний на узлах, что позволяет выразить операторы Хаббарда через произведения обычных ферми- и бозе-операторов. При этом должны выполняться условия (связи), гарантирующие устранение нефизических состояний. Такой подход получил свое развитие применительно к модели Хаббарда в ряде работ последнего времени [18–22]. Для учета связей в этих работах использовалось приближение стационарной фазы, которое является асимптотически точным лишь в пределе $N \rightarrow \infty$, где N – число состояний на узле [22]. Кроме того, обычно при этом подходе предполагается отсутствие двойного заполнения [22], что является основой перехода к t – J -модели, исследование которой представляет из себя самостоятельное направление в теории сильнокоррелированных систем [23–28].

Здесь уместно отметить такое важное направление в изучении конденсированного состояния вещества, как вычисление спектров магнитных возбуждений. Следует оговорить, что хотя последовательная теория электронных корреляций в CuO-слоях должна основываться на многозонной модели, в работах [1, 29] было показано, что низколежащие возбуждения могут рассматриваться в рамках однозонной модели Хаббарда. Исследования возбуждений в сильнокоррелированном случае сводятся, как правило, к пределу t – J -модели [26, 23, 24], а также модели Гейзенберга (предел $U \rightarrow \infty$), применения которой к проблеме магнитных свойств CuO-плоскостей рассматриваются в работе [30]. Необходимо отметить также расчеты на малых кластерах квантовым методом Монте-Карло [31–33].

Данная работа посвящена однозонной модели Хаббарда в пределе сильной связи. Многозонная модель является предметом дальнейших исследований и пока не обсуждается. Рассматривается квазидвумерный случай (взаимодействие между слоями мало), что приводит, однако, к малому отличию результатов от случая плоской решетки (подробное обсуждение влияния размерности системы на ее магнитные свойства и фазовые переходы, а также роли флуктуаций содержится в [30]). Цель работы – построить теорию возмущений без использования операторов Хаббарда и на основе этого исследовать фазовые переходы и коллективные возбуждения в системе. В основе предложенного ме-

тогда лежат техника вспомогательных бозонов и фермионов и формализм функционального интеграла. Главное отличие от работ [18–22] состоит в интегрировании по супералгебре [34] и использовании проекционного оператора на пространство физических состояний.

Следует отметить, что родственный подход к исследованию модели Хаббарда был предложен в работах [35–37], где авторы использовали обобщенную теорему Вика и представление Коулмана [16]. В нашем подходе не возникает проблем с обобщением теоремы Вика, что достигается путем интегрирования по супералгебре.

Статья построена следующим образом. В разделе 1 получено точное представление для статистической суммы модели Хаббарда в виде функционального интеграла по вспомогательным грассмановым переменным. В разделе 2 приближенное выражение для действия (с точностью до членов порядка t^4) использовано для исследования фазовых переходов. Основные результаты таковы. При малой величине допирования δ система является антиферромагнитным диэлектриком. С увеличением δ система металлизуется и для значений $\delta \gtrsim t/U$ переходит в ферромагнитное состояние при $U/t > 10$, а при $U/t \lesssim 10$ – в сверхпроводящее состояние. Поскольку малым параметром в теории является отношение $4t/U$, то основной результат можно сформулировать так: в модели Хаббарда при $6 \lesssim U/t \lesssim 10$ и величине допирования $\delta \gtrsim t/U$ возможно сверхпроводящее состояние. В заключении обсуждаются полученные результаты (а также предварительные соображения о характере коллективных возбуждений, изучение которых составит предмет дальнейшего исследования). Приближенное выражение для эффективного взаимодействия получено в приложении.

1. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ

Исходный гамильтониан модели Хаббарда имеет вид

$$H = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} - h \sum_i (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) + H', \quad (1)$$

где H' учитывает гибридизацию электронов,

$$H' = -t \sum_{i \neq j, \sigma} v_{ij} \psi_{i\sigma}^+ \psi_{j\sigma}, \quad n_{i\sigma} = \psi_{i\sigma}^+ \psi_{i\sigma}. \quad (2)$$

Здесь $\psi_{j\sigma}$, $\psi_{j\sigma}^+$ – операторы уничтожения и рождения электрона с проекцией спина σ в узле j , μ – химический потенциал, U – константа кулоновского отталкивания, tv_{ij} – амплитуда перескока электрона с узла i на узел j , h – внешнее магнитное поле. Для простоты мы будем в дальнейшем в конкретных расчетах использовать приближение ближайших соседей. Представление Коулмана основано на формуле для оператора электронного поля

$$\psi_{i\sigma} = e_i^+ p_{i\sigma} + \text{sign } \sigma p_{i-\sigma}^+ d_i, \quad (3)$$

где e_i^+ – оператор рождения бозона (дырки) в узле i , $p_{i\sigma}^+$ – оператор рождения фермиона (спинона) с проекцией спина σ в узле i , d_i^+ – оператор рождения бозона (дважды

занятое состояние) в узле i . Фактически мы будем использовать новое пространство состояний, в котором каждому из четырех возможных состояний узла соответствует свое поле. Физические состояния в этом пространстве подчиняются уравнению связи в каждом узле i

$$\hat{Q}_i = \sum_{\sigma} p_{i\sigma}^+ p_{i\sigma} + e_i^+ e_i + d_i^+ d_i = 1. \quad (4)$$

Гамильтониан (1) в новом пространстве состояний будет иметь вид

$$H = \sum_i b_i^+ \left(\frac{U}{2} - \nu \sigma^3 \right) b_i - h \sum_i f_i^+ \sigma^3 f_i - \left(\frac{U}{2} - \nu \right) N + H', \quad (5)$$

где использованы обозначения

$$b_i^+ = (e_i^+, d_i^+), \quad f_i^+ = (p_{i\uparrow}^+, p_{i\downarrow}^+),$$

σ^3 – матрица Паули, $\nu = \frac{U}{2} - \mu$, N – число узлов решетки. Оператор H' определяется формулой (2) с учетом выражения для оператора электронного поля (3). Чтобы учесть уравнение связи (4), воспользуемся проекционным оператором на пространство физических состояний

$$\hat{P} = \prod_i \lim_{\lambda_i \rightarrow +\infty} \hat{Q}_i \exp(\beta \lambda_i (1 - \hat{Q}_i)) = \prod_i \lim_{\lambda_i \rightarrow +\infty} \frac{\partial e^{-\beta \lambda_i \hat{Q}_i}}{\partial (e^{-\beta \lambda_i})}.$$

Так как оператор $\hat{Q}_i$ коммутирует с гамильтонианом (5), то выражение для статистической суммы можно написать в виде

$$Z = \prod_i \hat{P}_i Z_{\lambda}, \quad \hat{P}_i = \lim_{\lambda_i \rightarrow +\infty} \frac{\partial}{\partial (e^{-\beta \lambda_i})}, \quad Z_{\lambda} = \text{Tr} \exp \left(-\beta \left(H + \sum_i \lambda_i \hat{Q}_i \right) \right). \quad (6)$$

Воспользуемся теперь методом функционального интегрирования для представления статистической суммы Z_{λ} :

$$\begin{aligned} Z_{\lambda} &= \int \exp S_{\lambda} D(f, b), \\ S_{\lambda} &= \int_0^{\beta} d\tau \left[\sum_i b_i^* \left(-\partial_{\tau} - \frac{U}{2} - \lambda_i + \nu \sigma^3 \right) b_i + \right. \\ &\quad \left. + \sum_i f_i^* (-\partial_{\tau} - \lambda_i + h \sigma^3) f_i - H'(\tau) \right] + \beta \left(\frac{U}{2} - \nu \right) N, \end{aligned}$$

где b_i^* – коммутирующие, а f_i^* – антикоммутирующие переменные. В действии S_{λ} кинетический член $H'(\tau)$ является формой четвертой степени по новым переменным и определяет их взаимодействие. Чтобы избавиться от формы четвертой степени, воспользуемся преобразованием Хаббарда–Стратоновича для грассмановых переменных. С этой

целью умножим и разделим выражение для статистической суммы Z_λ на интеграл от $\exp S_0(c^*, c)$ по вспомогательным грассмановым переменным c^*, c , где S_0 определяется формулой

$$S_0(c^*, c) = -t \int_0^\beta d\tau \sum_{ij, \sigma} c_{i\sigma}^*(\tau) v_{ij}^{-1} c_{j\sigma}(\tau),$$

здесь v_{ij}^{-1} — обратная матрица для v_{ij} . В числителе полученного выражения для статистической суммы Z_λ сделаем сдвиг

$$c_{i\sigma}(\tau) \rightarrow c_{i\sigma}(\tau) + \sum_k v_{ik} \psi_{k\sigma}(\tau), \quad c_{i\sigma}^*(\tau) \rightarrow c_{i\sigma}^*(\tau) + \sum_k \psi_{k\sigma}^*(\tau) v_{ki}, \quad (7)$$

уничтожающий кинетический член в действии S_λ . После преобразования (7) для суммарного действия $S_{1\lambda} = S_\lambda + S_0$ получим выражение

$$S_{1\lambda} = S_0(c^*, c) + \beta \left(\frac{U}{2} - \nu \right) N + S_0(b^*, b) + S_0(f^*, f) - \\ - t \int_0^\beta d\tau \sum_{i, \sigma} (c_{i\sigma}^*(\tau) \psi_{i\sigma}(\tau) + \psi_{i\sigma}^*(\tau) c_{i\sigma}(\tau)). \quad (8)$$

В формуле (8) через $S_0(b^*, b)$ и $S_0(f^*, f)$ мы обозначили квадратичные формы соответствующих полей из S_λ . Последнее слагаемое в (8) можно переписать в виде

$$\sum_\sigma (c_{i\sigma}^* \psi_{i\sigma} + \psi_{i\sigma}^* c_{i\sigma}) = f_i^* \hat{C}_i b_i + b_i^* \hat{C}_i^* f_i, \quad (9)$$

где $\hat{C}_i$ и $\hat{C}_i^*$ — сопряженные матрицы

$$\hat{C}_i = \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} & c_{i\downarrow}^* \\ c_{i\downarrow} & -c_{i\uparrow}^* \end{pmatrix}, \quad \hat{C}_i^* = \begin{pmatrix} c_{i\uparrow}^* & c_{i\downarrow}^* \\ c_{i\downarrow} & -c_{i\uparrow}^* \end{pmatrix}.$$

Используя формулу (9), перепишем действие $S_{1\lambda}$ следующим образом:

$$S_{1\lambda} = S_0(c^*, c) + \beta \left(\frac{U}{2} - \nu \right) N + \Omega(b, f), \\ \Omega(b, f) = \int_0^\beta d\tau \sum_i (b_i^*, f_i^*) \begin{pmatrix} \hat{A}_i & -t\hat{C}_i^* \\ -t\hat{C}_i & \hat{B}_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_i \\ f_i \end{pmatrix},$$

здесь $\hat{A}_i = -\partial_\tau - \frac{U}{2} - \lambda_i + \nu\sigma^3$, $\hat{B}_i = -\partial_\tau - \lambda_i + h\sigma^3$. Результат интегрирования $\exp \Omega(b, f)$ по супералгебре полей b, f есть супердетерминант или березиниан [34]. Он равен произведению

$$\prod_i \frac{\text{Det } \hat{B}_i}{\text{Det } \hat{A}_i} \text{Det}^{-1} (I - t^2 \hat{A}_i^{-1} \hat{C}_i^* \hat{B}_i^{-1} \hat{C}_i). \quad (10)$$

Определитель оператора $\widehat{B}_i$ равен статистической сумме идеального газа фермионов, а определитель оператора $\widehat{A}_i$ равен обратной статистической сумме идеального газа бозонов. Соответствующие формулы имеют вид

$$\begin{aligned}\text{Det } \widehat{A}_i &= \left(1 - \exp\left(-\beta\left(\frac{U}{2} - \nu + \lambda_i\right)\right)\right) \left(1 - \exp\left(-\beta\left(\frac{U}{2} + \nu + \lambda_i\right)\right)\right), \\ \text{Det } \widehat{B}_i &= \left(1 + \exp(-\beta(\lambda_i - h))\right) \left(1 + \exp(-\beta(\lambda_i + h))\right).\end{aligned}$$

Для определителя $\text{Det}^{-1}\left(I - t^2 \widehat{M}_i\right)$, где $\widehat{M}_i = \widehat{A}_i^{-1} \widehat{C}_i^* \widehat{B}_i^{-1} \widehat{C}_i$, воспользуемся разложением в ряд по степеням t^2 :

$$\text{Det}^{-1}\left(I - t^2 \widehat{M}_i\right) = \exp(-\text{Tr} \ln(I - t^2 \widehat{M}_i)) = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^{2n}}{n} \text{Tr } \widehat{M}_i^n\right). \quad (11)$$

В показателе экспоненты (11) стоит сумма кольцевых диаграмм с четным числом внешних линий $c_{i\sigma}, c_{i\sigma}^*$ -полей. Подействуем теперь на выражение для супердетерминанта (10) проекционным оператором $\widehat{P}_i$, который определяется формулой (6). Результат можно представить в виде

$$\widehat{P}_i \exp\left(\ln \frac{\text{Det } \widehat{B}_i}{\text{Det } \widehat{A}_i} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^{2n}}{n} \text{Tr } \widehat{M}_i^n\right) = \left(2\alpha + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^{2n}}{n} \widehat{P}_i \text{Tr } \widehat{M}_i^n\right),$$

где $2\alpha = e^{-\beta\mu} Z_0$, $Z_0 = 1 + 2e^{\beta\mu} \text{ch } \beta h + e^{-2\beta\nu}$ — статистическая сумма одного узла (иона) без учета гибридизации.

Теперь мы можем написать в явном виде функциональное представление для статистической суммы модели Хаббарда:

$$Z = Z_0^N \left\langle \prod_i \left(1 + \frac{1}{2\alpha} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^{2n}}{n} \widehat{P}_i \text{Tr } \widehat{M}_i^n\right) \right\rangle, \quad (12)$$

где использовано обозначение

$$\langle A \rangle = \frac{\int A \exp S_0(c^*, c) D(c^*, c)}{\int \exp S_0(c^*, c) D(c^*, c)}. \quad (13)$$

Выражение для статистической суммы (12) можно записать в стандартном виде, если обозначить

$$\begin{aligned}\Delta S &= \sum_i \ln \left(1 + \frac{1}{2\alpha} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^{2n}}{n} \widehat{P}_i \text{Tr } \widehat{M}_i^n\right), \\ S(c^*, c) &= S_0(c^*, c) + \Delta S.\end{aligned} \quad (14)$$

Тогда вместо (12) для статистической суммы получим формулу

$$Z = Z_0^N \frac{\int A \exp S(c^*, c) D(c^*, c)}{\int \exp S_0(c^*, c) D(c^*, c)}. \quad (15)$$

Формулой (15) удобно пользоваться для перестройки рядов теории возмущений.

Функция Грина вспомогательных ферми-полей c^* , c просто выражается через функцию Грина исходных электронных полей ψ . Действительно, с помощью сдвига, обратного (7), найдем для функции Грина в импульсном представлении

$$\begin{aligned} G_{c\sigma}(\mathbf{k}, \omega) &= -\frac{v(\mathbf{k})}{t} + v^2(\mathbf{k}) G_{\psi\sigma}(\mathbf{k}, \omega), \\ G_{c\sigma}(\mathbf{k}, \omega) &= -\frac{\int e^{S(c^*, c)} c_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) c_{\sigma}^*(\mathbf{k}, \omega) D(c^*, c)}{\int e^{S(c^*, c)} D(c^*, c)}. \end{aligned} \quad (16)$$

Формулы (12)–(16) дают формально точные функциональные представления статистической суммы и функции Грина.

Как и в методе, основанном на использовании операторов Хаббарда [7, 8], малым параметром теории является амплитуда перескока t . В этом отличие нашего подхода от стандартных функциональных представлений [18–22].

2. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

В настоящем разделе приближенное выражение для действия c_{σ} -полей будет использовано для изучения фазовых переходов. Приближенное действие получим, разлагая ΔS (14) в ряд по степеням t^2 . С точностью до членов второго порядка будем иметь

$$\begin{aligned} \Delta S &= t^2 \Delta S_1 + t^4 \Delta S_2, \\ \Delta S_1 &= \frac{1}{2\alpha} \sum_i \hat{P}_i \operatorname{Tr} \widehat{M}_i, \\ \Delta S_2 &= \frac{1}{4\alpha} \sum_i \left(\hat{P}_i \operatorname{Tr} \widehat{M}_i^2 - \frac{1}{2\alpha} (\hat{P}_i \operatorname{Tr} \widehat{M}_i)^2 \right), \end{aligned} \quad (17)$$

ΔS_1 – квадратичная форма c_{σ} -полей, а ΔS_2 – форма четвертой степени. Выражения для них получены в приложении. Если в разложении (17) мы оставим только первое слагаемое, то получим функцию Грина в приближении Хаббард-I [2]. Действительно, как показано в приложении (П.4), выражение для ΔS_1 имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta S_1 &= -\sum_{p, \sigma} g_{\sigma}(i\omega) c_{\sigma}^*(p) c_{\sigma}(p), \\ g_{\sigma}(i\omega) &= \frac{1 - n_{\sigma}}{i\omega + \eta + h\sigma} + \frac{n_{\sigma}}{i\omega - \xi + h\sigma}, \quad n_{\sigma} = \frac{e^{-\beta\xi} + e^{-\beta h\sigma}}{2\alpha}. \end{aligned}$$

Тогда для квадратичной формы c_σ -полей, определяемой слагаемыми $S_0 + t^2 \Delta S_1$, будем иметь выражение

$$\sum_{p, \sigma} c_\sigma^*(p) G_{c\sigma}^{-1}(p) c_\sigma(p),$$

где

$$G_{c\sigma}^{-1}(p) = -t/v(\mathbf{k}) - t^2 g_\sigma(i\omega).$$

Соответственно для функции Грина электронных полей ψ_σ получим формулу

$$G_{\psi\sigma}(p) = \frac{g_\sigma(i\omega)}{1 + tv(\mathbf{k})g_\sigma(i\omega)}, \quad (18)$$

которая соответствует приближению Хаббард-I.

Рассмотрим условие металлизации системы при изменении химического потенциала (величины допирования), которое следует из формулы (18) для функции Грина. Подчеркнем, что здесь металлизация происходит не за счет уменьшения константы кулоновского отталкивания, а за счет того, что среднее число электронов на узел отлично от единицы.

Уравнение для спектра имеет вид

$$z^2 + tv(\mathbf{k})z - \frac{U}{2} \left(\frac{U}{2} + tv(\mathbf{k})(1 - 2n_\sigma) \right) = 0, \quad z = i\omega - \nu.$$

Корни этого уравнения определяют две хаббардовские подзоны:

$$z_{1,2} = -\frac{tv(\mathbf{k})}{2} \pm \frac{U}{2} \sqrt{1 + \frac{t^2 v^2(\mathbf{k})}{U^2} + \frac{2tv(\mathbf{k})}{U}(1 - 2n_\sigma)}.$$

При равной нулю амплитуде перескока t и в нулевом магнитном поле среднее число электронов на узел равно $2n_\sigma$. Однако когда амплитуда перескока значительно больше температуры (нас интересует ситуация, только когда $\beta t > 10$), среднее число электронов на узел может существенно отличаться от величины $2n_\sigma$. Поясним это подробнее. Энергии η и ξ у нас больше t , поэтому экспоненты $\exp(-\beta\eta)$ и $\exp(-\beta\xi)$ малы. Следовательно, $|n_\sigma - \frac{1}{2}| \lesssim e^{-\beta t} \sim e^{-10}$, хотя среднее число электронов на узел, как будет показано, может отличаться от единицы на величину порядка 0,1 (формула (29)).

С учетом сделанных замечаний мы будем далее использовать для энергий хаббардовских подзон приближенные формулы ($t/U \ll 1$)

$$E_+ \cong \xi - \frac{1}{2}tv(\mathbf{k}), \quad E_- \cong -\eta - \frac{1}{2}tv(\mathbf{k}).$$

Металлизация системы происходит, если $\min_{\mathbf{k}} E_+(\mathbf{k}) < 0$ или $\max_{\mathbf{k}} E_-(\mathbf{k}) > 0$. В приближении ближайших соседей на кубической решетке имеем $v(\mathbf{k}) = 2(\cos k_x + \cos k_y + \frac{t_z}{t} \cos k_z)$ (t_z — интеграл перескоков между слоями), следовательно, $\min_{\mathbf{k}} E_+(\mathbf{k}) = \frac{U}{2} + \nu - 2t - t_z$, $\max_{\mathbf{k}} E_-(\mathbf{k}) = -\frac{U}{2} + \nu + 2t + t_z$. Полагая $U/t = 8$, найдем $\nu =$

$\pm \left(\frac{U}{2} - 2t - t_z \right) = \pm(2t - t_z)$ – условие металлизации в приближении Хаббард-I. Далее, используя приближенное выражение для статистической суммы (15), (17) и формулу для взаимодействия (П.11), исследуем возможные фазовые переходы. В импульсном представлении выражение для действия c_σ -полей имеет вид

$$\begin{aligned} S(c^*, c) = & - \sum_{p, \sigma} [tv^{-1}(\mathbf{k}) + t^2 g_\sigma(i\omega)] c_\sigma^*(p) c_\sigma(p) + \\ & + \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \frac{t^4}{4\varepsilon_\alpha} I_\alpha^+(\mathbf{k}) I_\alpha^-(\mathbf{k}) + \frac{t^4}{4U} \sum_{\mathbf{k}} n(\mathbf{k}) n(-\mathbf{k}) + \\ & + \beta \frac{t^4}{8} \sum_{\mathbf{k}} s_z(\mathbf{k}) s_z(-\mathbf{k}) + \beta \frac{t^4}{2} \sum_{\mathbf{k}} s^+(\mathbf{k}) s^-(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь использованы обозначения (П.8) и (П.10) приложения, а также обозначения

$$\begin{aligned} n(\mathbf{k}) &= N_\uparrow(\mathbf{k}) + N_\downarrow(\mathbf{k}), \\ N_\sigma(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{\beta N}} \sum_{\mathbf{k}_1, \omega_1} f(i\omega_1) c_\sigma^*(\omega_1, \mathbf{k}_1) c_\sigma(\omega_1, \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}). \end{aligned}$$

Выражение для статистической суммы (15) с действием (19) умножим и разделим на интеграл по вспомогательным бозе-полям от $\exp S_{0B}$, где

$$S_{0B} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \varphi(\mathbf{k}) \varphi(-\mathbf{k}) - \sum_{\mathbf{k}} \rho(\mathbf{k}) \rho(-\mathbf{k}) - \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \Delta_\alpha^*(\mathbf{k}) \Delta_\alpha(\mathbf{k}).$$

В числителе полученного выражения сделаем сдвиги, уничтожающие четырехфермионные слагаемые в (19):

$$\begin{aligned} \varphi_1(\mathbf{k}) &\rightarrow \varphi_1(\mathbf{k}) + \frac{t^2 \sqrt{\beta}}{2} (s^+(-\mathbf{k}) + s^-(\mathbf{k})), \\ \varphi_2(\mathbf{k}) &\rightarrow \varphi_2(\mathbf{k}) - i \frac{t^2 \sqrt{\beta}}{2} (s^+(-\mathbf{k}) - s^-(\mathbf{k})), \\ \varphi_3(\mathbf{k}) &\rightarrow \varphi_3(\mathbf{k}) + \frac{t^2 \sqrt{\beta}}{2} s_z(\mathbf{k}), \\ \rho(\mathbf{k}) &\rightarrow \rho(\mathbf{k}) + \frac{t^2}{2\sqrt{U}} n(\mathbf{k}), \\ \Delta_\alpha(\mathbf{k}) &\rightarrow \Delta_\alpha(\mathbf{k}) + \frac{t^2}{2\sqrt{\varepsilon_\alpha}} I_\alpha^-(\mathbf{k}), \\ \Delta_\alpha^*(\mathbf{k}) &\rightarrow \Delta_\alpha^*(\mathbf{k}) + \frac{t^2}{2\sqrt{\varepsilon_\alpha}} I_\alpha^+(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (20)$$

После замены переменных (20) суммарное действие $S(c^*, c) + S_{0B}$ будет иметь вид

$$\begin{aligned}
S_0(c^*, c) + S_{0B} - \sum_{\substack{p=(0, \mathbf{k}), \\ p_1=(\omega_1, \mathbf{k}_1), \sigma}} f(i\omega_1) c_\sigma^*(p_1) \times \\
\times \left[\frac{t^2}{2\sqrt{\beta N}} \varphi(\mathbf{k}) \boldsymbol{\sigma} + \frac{t^2}{\sqrt{U\beta N}} \rho(\mathbf{k}) \right] c_\sigma(p_1 - p) - \frac{t^2}{2\sqrt{\beta N}} \sum_{p_1, p, \alpha} \frac{R_\alpha(i\omega_1)}{\sqrt{\varepsilon_\alpha}} \times \\
\times (c_\uparrow^*(p_1), c_\downarrow(-p_1)) \begin{pmatrix} 0 & \Delta_\alpha(\mathbf{k}) \\ \Delta_\alpha^*(-\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_\uparrow(p_1 - p) \\ c_\downarrow^*(p - p_1) \end{pmatrix}. \quad (21)
\end{aligned}$$

Проинтегрировав экспоненту с действием (21) по грассмановым c_σ -полям, получим определитель оператора. Разлагая логарифм определителя в ряд по вспомогательным полям, найдем эффективное действие. Квадратичная форма эффективного действия имеет вид

$$\begin{aligned}
S_{0B} - \frac{t^4}{U} \frac{1}{\beta N} \sum_{p_1, p} G_c(p_1) G_c(p_1 - p) f^2(i\omega_1) \times \\
\times \left[\rho(\mathbf{k}) \rho(-\mathbf{k}) + \frac{U\beta}{4} \varphi(\mathbf{k}) \varphi(-\mathbf{k}) \right] + \frac{t^4}{4} \frac{1}{\beta N} \sum_{p_1, p} \sum_{\alpha, \gamma} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_\alpha \varepsilon_\gamma}} \times \\
\times G_c(p_1) G_c(-p_1 + p) R_\alpha(i\omega_1) R_\gamma(i\omega_1) \Delta_\alpha^*(\mathbf{k}) \Delta_\gamma(\mathbf{k}). \quad (22)
\end{aligned}$$

Первый вывод, который можно сделать из формулы (22), таков: конденсация $\rho(\mathbf{k})$ -полей может происходить только после конденсации $\varphi(\mathbf{k})$ -полей, т.е. после ферро- или антиферромагнитного фазового перехода, т.к. $U\beta/4 \gg 1$. Поэтому имеет смысл исследовать только конкуренцию магнетизма и сверхпроводимости.

В непроводящем состоянии, когда зона $E_-(\mathbf{k})$ полностью заполнена и $\max_{\mathbf{k}} E_-(\mathbf{k}) \lesssim 0$, а зона $E_+(\mathbf{k})$ пуста, т.е. $\min_{\mathbf{k}} E_+(\mathbf{k}) > 0$, для поляризационного оператора найдем

$$\begin{aligned}
\Pi_1(0, \mathbf{k}) &= \frac{t^4}{U} \frac{1}{\beta N} \sum_{\omega_1, \mathbf{k}_1} G_c(p_1) G_c(p_1 - p) f^2(i\omega_1) = \\
&= \frac{t^2 U}{\beta N} \sum_{\omega_1, \mathbf{k}_1} \frac{v \cdot v'}{(i\omega_1 - E_+)(i\omega_1 - E_-)(i\omega_1 - E'_-)(i\omega_1 - E'_+)} = \\
&= \frac{t^2}{N} \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{v \cdot v'}{\frac{1}{2}t(v' - v)} \left(\frac{n_F(E_-)}{U - \frac{1}{2}t(v' - v)} - \frac{n_F(E_- - \frac{1}{2}t(v' - v))}{U + \frac{1}{2}t(v' - v)} \right). \quad (23)
\end{aligned}$$

Здесь мы обозначили $v(\mathbf{k}_1) = v$, $v(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}) = v'$, $E_\alpha(\mathbf{k}_1) = E_\alpha$, $E_\alpha(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}) = E'_\alpha$ и положили $n_F(E_+) = 0$, а член $n_F(E_-)$ оставили, полагая, что верхний край зоны E_- близок к нулю (уровню Ферми). Полагая в формуле (23) $\mathbf{k} = 0$, получим

$$\Pi_1(0, 0) = \frac{t^2}{U} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1} \left[v^2(\mathbf{k}_1) n'_F(E_-(\mathbf{k}_1)) + \frac{2}{U} v^2(\mathbf{k}_1) n_F(E_-(\mathbf{k}_1)) \right]. \quad (24)$$

Первое слагаемое в квадратных скобках отрицательно, а второе положительно. Если $\max E_-(\mathbf{k}_1) = -\eta + 2t + t_z < 0$ и $|\eta + 2t + t_z| \gg \beta^{-1}$, то первым слагаемым можно пренебречь и, полагая $n_F(E_-) = 1$, найдем

$$\Pi_1(0, 0) = \frac{2t^2}{U^2} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1} v^2(\mathbf{k}_1) = \frac{4}{U^2} (2t^2 + t_z^2) > 0,$$

следовательно, в диэлектрическом состоянии ферромагнетизма нет.

Для исследования антиферромагнитного перехода положим $\mathbf{k} = \boldsymbol{\pi}$, следовательно, $v' = -v$ и для $\Pi_1(0, \boldsymbol{\pi})$ будем иметь выражение

$$\begin{aligned} \Pi_1(0, \boldsymbol{\pi}) &= 2 \frac{t}{U} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1} v \frac{n_F(E_-)}{1 + \frac{t}{U}v} \simeq \\ &\simeq 2 \frac{t}{U} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1} v(\mathbf{k}_1) n_F(E_-) - 2 \frac{t^2}{U^2} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1} v^2(\mathbf{k}_1) n_F(E_-). \end{aligned} \quad (25)$$

Здесь первое слагаемое положительно, а второе отрицательно. Если вновь считать, что параметры таковы, что система – хороший диэлектрик, и положить $n_F(E_-) = 1$, то найдем

$$\Pi_1(0, \boldsymbol{\pi}) = -\frac{4}{U^2} (2t^2 + t_z^2) < 0.$$

Таким образом, в диэлектрическом состоянии возможен антиферромагнитный фазовый переход при температуре, определяемой уравнением

$$\frac{1}{2} + \Pi_1(0, \boldsymbol{\pi}) \frac{U\beta}{4} = 0, \quad T_c = \frac{2}{U} (2t^2 + t_z^2). \quad (26)$$

Заметим, что $(4t^2 + 2t_z^2)/U$ – это лишь приближенная оценка для температуры перехода, фактически температура перехода меньше, ее можно уточнить, полагая в (25) $n_F(E_-) \approx 1 - e^{\beta E_-}$ и заново решая уравнение (26). Рассмотрим разрушение антиферромагнитного состояния допированием при нулевой температуре. Для этого выразим вначале величину допирования через химический потенциал. Число электронов на узел решетки выражается через функцию Грина:

$$\begin{aligned} n &= \frac{2}{\beta N} \sum_p G_\psi(p) e^{i\omega\varepsilon} = \frac{2}{\beta N} \sum_p e^{i\omega\varepsilon} \left[\frac{1}{v^2(\mathbf{k})} G_c(p) + \frac{1}{tv(\mathbf{k})} \right] = \\ &= \frac{2}{\beta N} \sum_p \left[\frac{1 - \frac{t}{2U}v(\mathbf{k})}{i\omega - E_+(\mathbf{k})} + \frac{1 + \frac{t}{2U}v(\mathbf{k})}{i\omega - E_-(\mathbf{k})} \right], \end{aligned}$$

где мы воспользовались формулой (16), связывающей функции Грина c - и ψ -полей. При низких температурах положим

$$n_F(E_+) = 0, \quad n_F(E_-) = \begin{cases} 0, & E_- > 0, \\ 1, & E_- < 0, \end{cases}$$

тогда

$$\begin{aligned}
 n &\approx \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, E_- < 0} \left(1 + \frac{t}{2U} v(\mathbf{k}) \right) = \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(1 + \frac{t}{2U} v(\mathbf{k}) \right) - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, E_- > 0} \left(1 + \frac{t}{2U} v(\mathbf{k}) \right) = \\
 &= 1 - \int_{|\mathbf{q}| < q_0} \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \left(1 + \frac{t}{2U} v(\pi + \mathbf{q}) \right) \approx 1 - \frac{1}{2\pi} \left(1 - \frac{2t}{U} \right) \frac{q_0^2}{2} \quad (t_z \ll t).
 \end{aligned} \tag{27}$$

Здесь q_0 определяется уравнением

$$\begin{aligned}
 E_-(\pi + \mathbf{q}) &= -\eta + t(\cos q_x + \cos q_y) \approx -\eta + 2t - \frac{q_0^2}{2} = 0, \\
 \frac{q_0^2}{2} &= \frac{2t - \eta}{t} \ll 1.
 \end{aligned} \tag{28}$$

Поскольку величина допирования δ определяется формулой $n = 1 - \delta$, то, сравнивая (27) и (28), найдем

$$\delta = \frac{1}{2\pi} \left(1 - \frac{2t}{U} \right) \frac{q_0^2}{2} = \frac{1}{2\pi} \left(1 - \frac{2t}{U} \right) \frac{2t - \eta}{t}. \tag{29}$$

Эта формула нуждается в уточнении, если $\delta \gtrsim 0, 1$. С этой целью суммы по импульсам нужно выразить через интегралы Лежандра, как это сделано в [38]. Величина допирования, разрушающая антиферромагнетизм при нулевой температуре, находится из уравнения $\Pi_1(0, \pi) = 0$. Используя формулы (25), (29) и вычисляя суммы аналогично (27), получим $\delta = t/U$.

Рассмотрим теперь конкуренцию ферромагнетизма и сверхпроводимости при $\delta \gtrsim t/U$. Из уравнения $T = -\frac{U}{2} \Pi_1(0, 0)$, используя формулу (24), получим для температуры ферромагнитного перехода выражение

$$T = \frac{4t}{\pi} \left(1 - \frac{\pi t}{U} - 2\pi\delta \right). \tag{30}$$

В нашей модели два параметра порядка Δ_η и Δ_ξ ответственны за переход металл – сверхпроводник. Приравнявая нулю определитель соответствующей квадратичной формы, получим для температуры перехода

$$T = 4\gamma t \delta \exp(-\pi/8g_0), \tag{31}$$

где $\ln \gamma = C$ – постоянная Эйлера,

$$g_0 = \left(\frac{t\xi^2}{U^2\eta} + \frac{t\eta^2}{U^2\xi} \right).$$

Формула (31) получена из уравнения

$$\begin{vmatrix} 1 - \Pi_{\eta\eta} & -\Pi_{\eta\xi} \\ -\Pi_{\eta\xi} & 1 - \Pi_{\xi\xi} \end{vmatrix} = 0,$$

где $\Pi_{\alpha\gamma}$ – поляризационные операторы, определяемые формулами

$$\Pi_{\alpha\gamma} = \frac{t^4}{4\sqrt{\varepsilon_\alpha\varepsilon_\gamma}} \frac{1}{\beta N} \sum_{p_1} G_c(p_1) G_c(-p_1 + p) R_\alpha(i\omega_1) R_\gamma(i\omega_1).$$

Функции $R_\alpha(i\omega)$ определены в приложении формулой (П.10). Всюду аргументы у $\Pi_{\alpha\gamma}$ равны нулю, $p = (0, 0)$. В частности,

$$\Pi_{\eta\eta} = t^2 \eta \frac{1}{\beta N} \sum_{\omega_1, \mathbf{k}_1} \frac{v^2(\mathbf{k}_1)(\omega_1^2 + \xi^2)}{(\omega_1^2 + \eta^2)(\omega_1^2 + E_+^2)(\omega_1^2 + E_-^2)}.$$

В сумме по частотам учитывался только вклад полюсов $\pm E_-(\mathbf{k})$, так что

$$\begin{aligned} \Pi_{\eta\eta} &= \frac{t^2 \xi^2}{U^2 \eta} L, & \Pi_{\xi\xi} &= \frac{t^2 \eta^2}{U^2 \xi} L, & \Pi_{\eta\xi} &= \frac{t^2 \sqrt{\eta\xi}}{U^2} L, \\ L &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} v^2(\mathbf{k}) \frac{\text{th} \frac{\beta E_-}{2}}{2E_-}. \end{aligned}$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Метод интегрирования по супералгебре, использованный в разделе 1, позволил нам при изучении системы с сильной корреляцией носителей избежать трудностей, связанных с применением техники операторов Хаббарда. Не возникает также необходимости в использовании обобщенной теоремы Вика [35–37], в чем заключается преимущество нашего подхода.

От исходной системы электронов с сильной корреляцией мы перешли к системе квазичастиц со слабым нелокальным взаимодействием. Сложность предложенного подхода состоит в том, что действие становится неполиномиальным, т.е. появляются вершины взаимодействия с любым четным числом c_σ -полей. Однако наличие при вершине порядка $2n$ эффективного малого множителя $(t/U)^n$ дает возможность оборвать ряд в выражении для действия c_σ -полей.

Изучение фазовых переходов на основе приближенного действия (19) согласуется с известными в литературе [6] результатами для перехода в антиферромагнитное состояние.

Предварительные результаты этой работы были изложены в [39].

Данная работа частично поддержана грантом № R4T300 Международного научного фонда и Правительства РФ, а также грантом № 94-02-03712 Российского фонда фундаментальных исследований.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Вычисление кольцевых диаграмм. Формула для следа оператора имеет вид

$$\mathrm{Tr} \widehat{M}_i = \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \mathrm{Tr} \widehat{A}_i^{-1}(\tau_1 - \tau_2) \widehat{C}_i^*(\tau_2) \widehat{B}_i^{-1}(\tau_2 - \tau_1) \widehat{C}_i(\tau_1), \quad (\text{П.1})$$

здесь $\widehat{A}_i^{-1}(\tau_1 - \tau_2)$ и $\widehat{B}_i^{-1}(\tau_2 - \tau_1)$ – матричные функции Грина:

$$\widehat{A}_i^{-1}(\tau) = \begin{pmatrix} G_{ei}(\tau) & 0 \\ 0 & G_{di}(\tau) \end{pmatrix}, \quad \widehat{B}_i^{-1}(\tau) = \begin{pmatrix} G_{p\uparrow i}(\tau) & 0 \\ 0 & G_{p\downarrow i}(\tau) \end{pmatrix}.$$

Перемножая матрицы второго порядка в формуле (П.1), получим выражение

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr} \widehat{M}_i = \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_{\sigma} & (G_e(\tau_1 - \tau_2) G_{p\sigma}(\tau_2 - \tau_1) - \\ & - G_d(\tau_2 - \tau_1) G_{p-\sigma}(\tau_1 - \tau_2)) c_{i\sigma}^*(\tau_2) c_{i\sigma}(\tau_1). \end{aligned} \quad (\text{П.2})$$

В последней формуле мы опустили удельный индекс i у функций Грина. Перейдем в (П.2) к частотному представлению по формулам

$$\begin{aligned} G_{e,d}(\tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega=2\pi n\beta^{-1}} e^{-i\Omega\tau} G_{e,d}(\Omega), \\ G_{p\sigma}(\tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_{\omega=2\pi(n+\frac{1}{2})\beta^{-1}} e^{-i\omega\tau} G_{p\sigma}(\omega), \\ G_{i\sigma}(\tau) &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{\omega=2\pi(n+\frac{1}{2})\beta^{-1}} e^{-i\omega\tau} c_{i\sigma}(\omega). \end{aligned}$$

В результате будем иметь для $\mathrm{Tr} \widehat{M}_i$

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr} \widehat{M}_i &= \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega, \omega} \sum_{\sigma} (G_{ei}(\Omega) G_{p\sigma i}(\Omega + \omega) - \\ & - G_{di}(\Omega) G_{p-\sigma i}(\Omega - \omega)) c_{i\sigma}^*(\omega) c_{i\sigma}(\omega). \end{aligned} \quad (\text{П.3})$$

Функции Грина G_{ei} , G_{di} , $G_{p\sigma i}$ в частотном представлении определяются выражениями

$$\begin{aligned} G_{ei}(\Omega) &= \left(i\Omega - \frac{U}{2} - \lambda_i + \nu \right)^{-1}, \\ G_{di}(\Omega) &= \left(i\Omega - \frac{U}{2} - \lambda_i - \nu \right)^{-1}, \\ G_{p\sigma i}(\omega) &= (i\omega - \lambda_i + h\sigma)^{-1}, \quad \sigma = \pm 1. \end{aligned}$$

После суммирования по бозонной частоте Ω в формуле (П.3) получим

$$\begin{aligned} \text{Tr } \widehat{M}_i = & - \sum_{\omega, \sigma} \left(\frac{n_B \left(\frac{U}{2} - \nu + \lambda_i \right) + n_F(\lambda_i - h\sigma)}{i\omega + \frac{U}{2} - \nu + h\sigma} + \right. \\ & \left. + \frac{n_B \left(\frac{U}{2} + \nu + \lambda_i \right) + n_F(\lambda_i + h\sigma)}{i\omega - \frac{U}{2} - \nu + h\sigma} \right) c_{i\sigma}^*(\omega) c_{i\sigma}(\omega). \end{aligned}$$

Действие проекционного оператора $\widehat{P}_i$ осуществляется по формулам ($\widehat{P}_i$ определен в формуле (6))

$$\widehat{P}_i n_B(\eta + \lambda_i) = e^{-\beta\eta}, \quad \widehat{P}_i n_F(\lambda_i + \varepsilon) = e^{-\beta\varepsilon}.$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \widehat{P}_i \text{Tr } \widehat{M}_i = & - \sum_{\omega, \sigma} \left[\frac{e^{-\beta\eta} + e^{\beta h\sigma}}{i\omega + \eta + h\sigma} + \frac{e^{-\beta\xi} + e^{-\beta h\sigma}}{i\omega - \xi + h\sigma} \right] c_{i\sigma}^*(\omega) c_{i\sigma}(\omega) \approx \\ \approx & - \sum_{\omega, \sigma} \left[\frac{1}{i\omega + \eta} + \frac{1}{i\omega - \xi} \right] c_{i\sigma}^*(\omega) c_{i\sigma}(\omega), \end{aligned} \quad (\text{П.4})$$

здесь мы использовали обозначения $\eta = U/2 - \nu$, $\xi = U/2 + \nu$.

Аналогичным образом для $\text{Tr } \widehat{M}_i^2$ будем иметь

$$\begin{aligned} \text{Tr } \widehat{M}_i^2 = & \text{Tr} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \int_0^\beta d\tau_3 \int_0^\beta d\tau_4 \widehat{A}_i^{-1}(\tau_1 - \tau_2) \widehat{C}_i^*(\tau_2) \widehat{B}_i^{-1}(\tau_2 - \tau_3) \times \\ & \times \widehat{C}_i(\tau_3) \widehat{A}_i^{-1}(\tau_3 - \tau_4) \widehat{C}_i^*(\tau_4) \widehat{B}_i^{-1}(\tau_4 - \tau_1) \widehat{C}_i(\tau_1) = \prod_{\nu=1}^4 \left(\int_0^\beta d\tau_\nu \right) \times \\ & \times \sum_{\sigma, \sigma'} \{ G_e(\tau_1 - \tau_2) G_{p\sigma}(\tau_2 - \tau_3) G_e(\tau_3 - \tau_4) G_{p\sigma'}(\tau_4 - \tau_1) c_{i\sigma}^*(\tau_2) c_{i\sigma}(\tau_3) \times \\ & \times c_{i\sigma'}^*(\tau_4) c_{i\sigma'}(\tau_1) + G_d(\tau_1 - \tau_2) G_{p-\sigma}(\tau_2 - \tau_3) G_d(\tau_3 - \tau_4) G_{p-\sigma'}(\tau_4 - \tau_1) \times \\ & \times c_{i\sigma}(\tau_2) c_{i\sigma}^*(\tau_3) c_{i\sigma'}(\tau_4) c_{i\sigma'}^*(\tau_1) + \text{sign } \sigma \text{ sign } \sigma' [G_e(\tau_1 - \tau_2) G_{p\sigma}(\tau_2 - \tau_3) \times \\ & \times G_d(\tau_3 - \tau_4) G_{p\sigma'}(\tau_4 - \tau_1) c_{i\sigma}^*(\tau_2) c_{i-\sigma}^*(\tau_3) c_{i-\sigma'}(\tau_4) c_{i\sigma'}(\tau_1) + \\ & + G_d(\tau_1 - \tau_2) G_{p\sigma}(\tau_2 - \tau_3) G_e(\tau_3 - \tau_4) G_{p\sigma'}(\tau_4 - \tau_1) c_{i-\sigma}(\tau_2) c_{i\sigma}(\tau_3) \times \\ & \times c_{i\sigma'}^*(\tau_4) c_{i-\sigma'}(\tau_1)] \}. \end{aligned}$$

В частотном представлении (аналогично формуле (П.3)) получим выражение

$$\begin{aligned} \text{Tr } \widehat{M}_i^2 = & \frac{1}{\beta^2} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\substack{\Omega \\ \omega_1 + \omega_2 = \omega_3 + \omega_4}} \{ G_e(\Omega) G_{p\sigma}(\Omega + \omega_1) G_e(\Omega + \omega_1 - \omega_3) \times \\ & \times G_{p\sigma'}(\Omega + \omega_4) c_\sigma^*(\omega_1) c_\sigma(\omega_3) c_{\sigma'}^*(\omega_2) c_{\sigma'}(\omega_4) + G_d(\Omega) G_{p-\sigma}(\Omega + \omega_1) \times \\ & \times G_d(\Omega + \omega_1 - \omega_3) G_{p-\sigma'}(\Omega + \omega_4) c_\sigma(-\omega_1) c_\sigma^*(-\omega_3) c_{\sigma'}(-\omega_2) c_{\sigma'}^*(-\omega_4) + \\ & + \text{sign } \sigma \text{ sign } \sigma' [G_e(\Omega) G_{p\sigma}(\Omega + \omega_1) G_d(\Omega + \omega_1 - \omega_3) G_{p\sigma'}(\Omega + \omega_4) \times \\ & \times c_\sigma^*(\omega_1) c_{-\sigma}^*(-\omega_3) c_{-\sigma'}(-\omega_2) c_\sigma(\omega_4) + G_d(\Omega) G_{p\sigma}(\Omega + \omega_1) \times \\ & \times G_e(\Omega + \omega_1 - \omega_3) G_{p\sigma'}(\Omega + \omega_4) c_{-\sigma}(-\omega_1) c_\sigma(\omega_3) c_{\sigma'}^*(\omega_2) c_{-\sigma'}^*(-\omega_4)] \}. \end{aligned} \quad (\text{П.5})$$

Суммирование по бозонной частоте Ω осуществляется по формуле

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega} G_{\alpha}(\Omega) G_{p\sigma}(\Omega + \omega_1) G_{\alpha'}(\Omega + \omega_1 - \omega_3) G_{p\sigma'}(\Omega + \omega_4) = \\ = V_{i\alpha\alpha'} = (i\omega_1 - i\omega_4 + h(\sigma - \sigma'))^{-1} \times \\ \times \left(\frac{n_F(\lambda_i - h\sigma')}{(i\omega_2 + \varepsilon_{\alpha'} + h\sigma')(i\omega_4 + \varepsilon_{\alpha} + h\sigma')} - \frac{n_F(\lambda_i - h\sigma)}{(i\omega_3 + \varepsilon_{\alpha'} + h\sigma)(i\omega_1 + \varepsilon_{\alpha} + h\sigma)} \right) + \\ + (i\omega_1 - i\omega_3 + \varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\alpha'})^{-1} \left(\frac{n_B(\lambda_i + \varepsilon_{\alpha'})}{(i\omega_3 + \varepsilon_{\alpha'} + h\sigma)(i\omega_2 + \varepsilon_{\alpha'} + h\sigma')} - \right. \\ \left. - \frac{n_B(\lambda_i + \varepsilon_{\alpha})}{(i\omega_1 + \varepsilon_{\alpha} + h\sigma)(i\omega_4 + \varepsilon_{\alpha} + h\sigma')} \right). \end{aligned} \quad (\text{П.6})$$

Здесь мы обозначили $\varepsilon_e = \eta$, $\varepsilon_d = \xi$, индексы α и α' принимают значения e и d . При низких температурах экспонентами $\exp(-\beta\varepsilon_{\alpha})$ можно пренебречь и в правой части (П.6) достаточно учесть только первое слагаемое. Если, кроме того, равно нулю внешнее магнитное поле, то выражение для $V_{i\alpha\alpha'}$ можно переписать в виде

$$\begin{aligned} V_{i\alpha\alpha'} &= V_{i\alpha\alpha'}^1 + V_{i\alpha\alpha'}^2, \\ V_{i\alpha\alpha'}^1 &= \delta_{\omega_1, \omega_4} \frac{\partial n_F(\lambda_i)}{\partial \lambda_i} \frac{1}{(i\omega_1 + \varepsilon_{\alpha})(i\omega_2 + \varepsilon_{\alpha'})}, \\ V_{i\alpha\alpha'}^2 &= n_F(\lambda_i) \frac{i\omega_1 + i\omega_2 + \varepsilon_{\alpha} + \varepsilon_{\alpha'}}{(i\omega_1 + \varepsilon_{\alpha})(i\omega_2 + \varepsilon_{\alpha'})(i\omega_3 + \varepsilon_{\alpha'})(i\omega_4 + \varepsilon_{\alpha})}. \end{aligned} \quad (\text{П.7})$$

Сгруппируем вначале слагаемые, содержащие символ Кронекера $\delta_{\omega_1, \omega_4}$ в $\text{Tr } \widehat{M}_i^2$, тогда для разности $\widehat{P}_i \text{Tr } \widehat{M}_i^2 - \frac{1}{2}(\widehat{P}_i \text{Tr } \widehat{M}_i)^2$ получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left[\sum_{\omega_1} f(i\omega_1) (c_{i\uparrow}^*(\omega_1) c_{i\uparrow}(\omega_1) - c_{i\downarrow}^*(\omega_1) c_{i\downarrow}(\omega_1)) \right]^2 + \\ + 2 \sum_{\omega_1} f(i\omega_1) c_{i\uparrow}^*(\omega_1) c_{i\downarrow}(\omega_1) \sum_{\omega_2} f(i\omega_2) c_{i\downarrow}^*(\omega_2) c_{i\uparrow}(\omega_2), \end{aligned}$$

где

$$f(i\omega_1) = (i\omega_1 + \eta)^{-1} - (i\omega_1 - \xi)^{-1}.$$

Второе слагаемое в (П.7) при подстановке в формулу (П.5) дает дополнительный вклад в $\widehat{P}_i \text{Tr } \widehat{M}_i^2$. Таким образом, в выражении для взаимодействия c_{σ} -полей

$$V = \frac{t^4}{4} \sum_i \left[\widehat{P}_i \text{Tr } \widehat{M}_i^2 - \frac{1}{2} (\widehat{P}_i \text{Tr } \widehat{M}_i)^2 \right]$$

появляются два существенно различных слагаемых. А именно,

$$V = V_1 + V_2,$$

где V_1 соответствует статическому взаимодействию,

$$\begin{aligned} V_1 &= \sum_i \left[\beta \frac{t^4}{8} s_{iz}^2 + \beta \frac{t^4}{2} s_i^+ s_i^- \right], \\ s_{iz} &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{\omega} f(i\omega) (c_{i\uparrow}^*(\omega) c_{i\uparrow}(\omega) - c_{i\downarrow}^*(\omega) c_{i\downarrow}(\omega)), \\ s_i^+ &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{\omega} f(i\omega) c_{i\uparrow}^*(\omega) c_{i\downarrow}(\omega), \quad s_i^- = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{\omega} f(i\omega) c_{i\downarrow}^*(\omega) c_{i\uparrow}(\omega), \end{aligned} \quad (\text{П.8})$$

а V_2 можно переписать в виде

$$\begin{aligned} V_2 &= \frac{t^4}{2} \sum_i \frac{1}{\beta} \left\{ \sum_{\omega_1, \omega_3, \Omega} \left[(2\eta + i\Omega) \frac{c_{i\uparrow}^*(\omega_1) c_{i\downarrow}^*(\Omega - \omega_1)}{(i\omega_1 + \eta)(i\Omega - i\omega_1 + \eta)} \times \right. \right. \\ &\quad \times \frac{c_{i\downarrow}(\Omega - \omega_3) c_{i\uparrow}(\omega_3)}{(i\omega_3 + \eta)(i\Omega - i\omega_3 + \eta)} + (2\xi - i\Omega) \frac{c_{i\uparrow}^*(\omega_1) c_{i\downarrow}^*(\omega_1 - \Omega)}{(i\omega_1 - \xi)(i\Omega - i\omega_1 - \xi)} \times \\ &\quad \times \left. \frac{c_{i\downarrow}(\Omega - \omega_3) c_{i\uparrow}(\omega_3)}{(i\omega_3 - \xi)(i\Omega - i\omega_3 - \xi)} \right] + \sum_{\omega_1, \omega_2, \Omega} \left[(U + i\Omega) \frac{c_{i\uparrow}^*(\omega_1) c_{i\uparrow}(\omega_1 - \Omega)}{(i\omega_1 + \eta)(i\omega_1 - i\Omega - \xi)} \times \right. \\ &\quad \times \frac{c_{i\downarrow}^*(\omega_2) c_{i\downarrow}(\omega_2 + \Omega)}{(i\omega_2 - \xi)(i\omega_2 + i\Omega + \eta)} + (U - i\Omega) \frac{c_{i\uparrow}^*(\omega_1) c_{i\uparrow}(\omega_1 - \Omega)}{(i\omega_1 - \xi)(i\omega_1 - i\Omega + \eta)} \times \\ &\quad \times \left. \frac{c_{i\downarrow}^*(\omega_2) c_{i\downarrow}(\omega_2 + \Omega)}{(i\omega_2 + \eta)(i\omega_2 + i\Omega - \xi)} \right] - \sum_{\omega_1, \omega_2, \Omega} \left[(U + i\Omega) \frac{c_{i\uparrow}^*(\omega_1) c_{i\downarrow}(\omega_1 - \Omega)}{(i\omega_1 + \eta)(i\omega_1 - i\Omega - \xi)} \times \right. \\ &\quad \times \frac{c_{i\downarrow}^*(\omega_2) c_{i\uparrow}(\omega_2 + \Omega)}{(i\omega_2 - \xi)(i\omega_2 + i\Omega + \eta)} + (U - i\Omega) \frac{c_{i\uparrow}^*(\omega_1) c_{i\downarrow}(\omega_1 - \Omega)}{(i\omega_1 - \xi)(i\omega_1 - i\Omega + \eta)} \times \\ &\quad \times \left. \left. \frac{c_{i\downarrow}^*(\omega_2) c_{i\uparrow}(\omega_2 + \Omega)}{(i\omega_2 + \eta)(i\omega_2 + i\Omega - \xi)} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{П.9})$$

В качестве параметров порядка мы будем рассматривать суммы по фермионной частоте от дробей в формуле (П.9), поэтому при изучении фазовых переходов достаточно учесть в (П.9) слагаемые с $\Omega = 0$. После этого формула для V_2 принимает вид

$$V_2 = \frac{t^4}{2} \sum_i \left[\frac{1}{2\eta} I_{\eta i}^+ I_{\eta i}^- + \frac{1}{2\xi} I_{\xi i}^+ I_{\xi i}^- + \frac{2}{U} N_{i\uparrow} N_{i\downarrow} - \frac{2}{U} s_i^+ s_i^- \right],$$

где

$$\begin{aligned} I_{\alpha i}^- &= \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{\omega} R_{\alpha}(i\omega) c_{i\downarrow}(-\omega) c_{i\uparrow}(\omega), \quad I_{\alpha i}^+ = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{\omega} R_{\alpha}(i\omega) c_{i\uparrow}^*(\omega) c_{i\downarrow}^*(-\omega), \\ R_{\alpha}(i\omega) &= (i\omega + \varepsilon_{\alpha})^{-1} - (i\omega - \varepsilon_{\alpha})^{-1}, \quad N_{i\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{\omega} c_{i\sigma}^*(\omega) c_{i\sigma}(\omega) f(i\omega). \end{aligned} \quad (\text{П.10})$$

Окончательно, используя формулу

$$N_{i\uparrow}N_{i\downarrow} = \frac{1}{4}[(N_{i\uparrow} + N_{i\downarrow})^2 - (N_{i\uparrow} - N_{i\downarrow})^2],$$

получим для взаимодействия выражение

$$\begin{aligned} V_1 + V_2 = \sum_i \left[\sum_{\alpha=\eta,\xi} \frac{t^4}{2\alpha} I_{\alpha i}^+ I_{\alpha i}^- + \frac{t^4}{4U} (N_{i\uparrow} + N_{i\downarrow}) + \right. \\ \left. + \left(\beta \frac{t^4}{8} - \frac{t^4}{4U} \right) s_{iz}^2 + \left(\beta \frac{t^4}{2} - \frac{t^4}{U} \right) s_i^+ s_i^- \right]. \end{aligned} \quad (\text{П.11})$$

Поскольку $\beta U \gg 1$, то в последних двух слагаемых в квадратных скобках можно пренебречь t^4/U по сравнению с βt^4 .

Список литературы

- [1] *Anderson P. W.* // Science. 1987. V. 235. P. 1196.
- [2] *Habbar J.* // Proc. Roy. Soc. 1963. V. A276. P. 238; 1964. V. A277. P. 237.
- [3] *Изюмов Ю. А., Скрябин Ю. Н.* Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. М.: Наука, 1987.
- [4] *Moriya T.* Spin fluctuations in itinerant electron magnetism. Berlin: Springer-Verlag, 1985.
- [5] *Изюмов Ю. А.* // УФН. 1991. Т. 161. №11. С. 1.
- [6] *Изюмов Ю. А.* // УФН. 1995. Т. 165. №4. С. 403.
- [7] *Habbar J.* // Proc. Roy. Soc. 1965. V. A285. P. 542; 1966. V. A296. P. 82.
- [8] *Зайцев П. О.* // ЖЭТФ. 1975. Т. 68. С. 207; 1976. Т. 70. С. 1100.
- [9] *Fabian J.* // Phys. Lett. 1994. V. A186. №3. P. 269.
- [10] *Popov V. N.* Functional Integrals and Collective Excitations. Cambridge University Press, 1990.
- [11] *Cyrot M.* // J. Phys. (Paris). 1972. V. 33. P. 25.
- [12] *Takahashi Y.* // J. Phys. Soc. Jap. 1986. V. 55. P. 3553.
- [13] *Kakehashi Y., Fulde P.* // Phys. Rev. 1985. V. B32. P. 1595.
- [14] *Kakehashi Y., Hasegawa H.* // Phys. Rev. 1988. V. B37. P. 7777.
- [15] *Barnes S. E.* // J. Phys. 1976. V. F6. P. 1375.
- [16] *Coleman P.* // Phys. Rev. 1984. V. B29. P. 3035.
- [17] *Zou Z., Anderson P. W.* // Phys. Rev. 1988. V. B37. P. 627.
- [18] *Kotliar G., Ruckenstein A.* // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 57. P. 1362.
- [19] *Nagaosa N., Lee P. A.* // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64. P. 2450; 1992. V. B46. P. 5621.
- [20] *Grilli M., Kotliar G.* // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64. P. 1170.
- [21] *Feng S., Wu J. B., Su Z. B., Yu L.* // Phys. Rev. 1993. V. B47. P. 15192.
- [22] *Arrigoni E., Castellani C., Raimondi R., Strinati G. C.* // Phys. Rev. 1994. V. B50. P. 2700.
- [23] *Ioffe L. B., Larkin A. I.* // Phys. Rev. 1989. V. B39. P. 8988.
- [24] *Stemmann G., Pépin C., Lavagna M.* // Phys. Rev. 1994. V. B50. P. 4075.
- [25] *Morita T., Tanaka K.* // Phys. Lett. 1994. V. A188. P. 101.
- [26] *Sherman A.* // Phys. Lett. 1995. V. A197. P. 247.
- [27] *Ubbens M. U., Lee P. A.* // Phys. Rev. 1994. V. B49. P. 13049.
- [28] *Sigrist M., Rice T. M., Zhang F. C.* // Phys. Rev. 1994. V. B49. P. 12058.
- [29] *Zhang F. C., Rice T. M.* // Phys. Rev. 1988. V. B37. P. 3759.
- [30] *Chakravarty S., Halperin B. I., Nelson D. R.* // Phys. Rev. 1989. V. B39. P. 2344.
- [31] *Chen C., Zheng J.* // Phys. Lett. 1994. V. A189. P. 243.

- [32] *Chen F., Ying H., Xu T., Li W.* // Phys. Lett. 1994. V. A189. P. 99.
- [33] *Hetzl R. E., der Linden W., Hanke W.* // Phys. Rev. 1994. V. B50. P. 4159.
- [34] *Березин Ф. А.* Метод вторичного квантования. М.: Наука, 1986.
- [35] *Владимир М. И., Москаленко В. А.* // ТМФ. 1990. Т. 82. С. 428.
- [36] *Вакару С. И., Владимир М. И., Москаленко В. А.* // ТМФ. 1990. Т. 85. №2. С. 248.
- [37] *Москаленко В. А., Си-Фу Ван, Чжи-Син Ван, Сюе-Си И.* // ТМФ. 1995. Т. 103. №1. С. 138.
- [38] *Капитонов В. С.* // Зап. научн. семин. ЛОМИ. 1988. Т. 169. С. 68.
- [39] *Капитонов В. С.* // Зап. научн. семин. ПОМИ. 1994. Т. 209. С. 102.

Санкт-Петербургский государственный
технологический институт

Поступила в редакцию
29.VI.1996

V. S. Kapitonov, P. A. Sevastianov

**INTEGRATION OVER THE SUPERALGEBRA IN THE
HUBBARD MODEL WITH THE STRONG CORRELATION**

A functional representation of the partition function for the Hubbard model with the strong Coulomb repulsion is obtained as an integral over auxiliary Grassman variables.

The approximative study of the phase transitions shows: 1) for the small doping constant δ the system is an antiferromagnetic insulator; 2) for doping $\delta \geq t/U$ the system is a ferromagnetic metal when $U/t > 10$, and a superconductor metal when $U/t \lesssim 10$.