Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. А. Изюмов, Н. И. Чащин, Исследование модели Хаббарда при половинном заполнении зоны, *ТМФ*, 2008, том 154, номер 1, 63–76

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6151>

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: 54.92.164.108

26 апреля 2023 г., 15:42:15

© 2008 г.

Ю. А. Изюмов*, Н. И. Чашин*

ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛИ ХАББАРДА ПРИ ПОЛОВИННОМ ЗАПОЛНЕНИИ ЗОНЫ

В условиях сильного кулоновского отталкивания электронов на узле решетки исследованы уравнения для собственно-энергетической части электронной функции Грина, выведенные авторами ранее методом производящего функционала. Эти уравнения имеют форму, близкую к той, которая соответствует самосогласованному борновскому приближению в теории слабой связи. В полученных уравнениях далее опускается зависимость собственной энергии от импульса, что соответствует пределу бесконечной размерности пространства. Численное решение интегральных уравнений, где все величины зависят только от частоты, приводит к результатам, согласующимся с данными теории динамического среднего поля. Показано, в частности, что при увеличении кулоновского отталкивания трехпиковая структура квазичастичного спектра сменяется двухпиковой и имеет место фазовый переход металл–диэлектрик. Предложенный метод может быть применен при исследовании других моделей теории сильно коррелированных систем.

Ключевые слова: сильно коррелированные системы, модель Хаббарда, фазовый переход металл–изолятор.

1. ВВЕДЕНИЕ

Модель Хаббарда является одной из фундаментальных моделей в теории сильно коррелированных систем. Привлекательными являются ее простота и минимальная достаточность физического содержания. Действительно, гамильтониан содержит два слагаемых: один член описывает свободный перенос электрона по решетке, другой – кулоновское отталкивание электронов на одном узле. В представлении ферми-операторов рождения и уничтожения электронов гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (1.1)$$

Здесь $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ – число электронов на узле i со спином $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

Модель содержит фактически два параметра: ширину затравочной зоны W и кулоновский потенциал на узле U . В условиях сильной связи ($U \gtrsim W$) два члена

*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург. E-mail: Yuri.Izyumov@imp.uran.ru

гамильтониана отвечают за противоположные тенденции: к делокализации и локализации электронных состояний, и в зависимости от соотношения между U и W возможно образование либо металлического, либо диэлектрического состояния. Разумеется, в модели присутствует еще один параметр – концентрация электронов n , которая сильно влияет на реализацию фазового перехода в системе металл–изолятор. Известно, что наиболее благоприятные условия для такого фазового перехода возникают при половинном заполнении зоны ($n = 1$). В этом случае имеет место электронно-дырочная симметрия, и химический потенциал равен $\mu = U/2$.

Модель Хаббарда в условиях сильной корреляции исследовалась многими способами. Особенно интересные результаты были получены в рамках теории динамического среднего поля (ТДСП), (см., например, обзор [1]), однако этот метод, игнорирующий пространственные корреляции и учитывающий только временные, имеет два недостатка. Сводя задачу о движении электрона на решетке к однопримесной проблеме, он требует значительных вычислительных ресурсов для решения последней. Другой недостаток проявляется, если в системе существенны пространственные корреляции; тогда необходимо разрабатывать расширенные схемы ТДСП. В силу отмеченных особенностей ТДСП определенную ценность имеют и другие подходы, например, использование уравнений движения для электронных функций Грина (ФГ) в формализме X -операторов Хаббарда. Здесь можно отметить работы Плакиды с соавторами [2]–[4], в которых использовался метод Мори в статистической механике, и работы [5]–[7], опирающиеся на формализм Каданова и Бейма. Оба подхода используют самосогласованную теорию возмущений по электронному хоппингу и приводят к близким результатам, напоминающим схему самосогласованного борновского приближения (ССБП).

Недавно Плакида и Удовенко [4] провели численное решение уравнений ССБП для модели Хаббарда в представлении X -операторов для электронных концентраций за пределами половинного заполнения зоны с целью анализа электронных состояний в сверхпроводящих купратах. Следует отметить два интересных результата: был получен узкий квазичастичный пик в окрестности уровня Ферми между хаббардовскими подзонами и обнаружено частичное разрушение ферми-поверхности за счет образования псевдощелевого состояния. Эта работа показывает, что ССБП содержит эффекты пространственных корреляций, которые учитываются в ТДСП только при специальных расширениях метода.

Целью нашей работы является исследование модели Хаббарда при половинном заполнении зоны. Мы покажем, что в рамках приближения, близкого к ССБП, игнорируя пространственные корреляции, легко можно получить трехпиковую структуру спектра, которая была одним из первых достижений ТДСП; при этом достаточно использовать весьма скромные вычислительные ресурсы. При таком подходе становится весьма прозрачной физика системы, приводящая к эволюции от трехпиковой структуры спектра к двухпиковой при изменении кулоновского параметра U .

Вначале мы напомним, как вводится формализм X -операторов в модели Хаббарда. В условиях сильной корреляции гамильтониан (1.1) полезно выразить в терминах X -операторов (см., например, книгу [7]) и записать его в виде $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$,

где

$$\mathcal{H}_0 = U \sum_i X_i^{22}, \quad (1.2)$$

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{ij\sigma} t_{ij} (X_i^{\sigma 0} - \sigma X_i^{2\bar{\sigma}}) (X_i^{0\sigma} - \sigma X_i^{\bar{\sigma} 2}). \quad (1.3)$$

В этом представлении большой кулоновский член – одноузельный, что позволяет построить теорию возмущений вблизи атомного предела. Ферми-подобные операторы $X_i^{\sigma 0}$ и $X_i^{2\bar{\sigma}}$ описывают рождение электрона на узле i , когда на нем не было электрона ($X_i^{\sigma 0}$) и когда на узле был электрон с противоположным спином ($X_i^{2\bar{\sigma}}$), поэтому естественно ввести двухкомпонентные спиноры из этих операторов:

$$\Psi(i\sigma) = \begin{pmatrix} X_i^{0\sigma} \\ \bar{\sigma} X_i^{2\bar{\sigma}} \end{pmatrix}, \quad \Psi^\dagger(i\sigma) = (X_i^{\sigma 0}, \bar{\sigma} X_i^{\bar{\sigma} 2}). \quad (1.4)$$

Тогда хоппинговый член гамильтониана записывается в компактном виде:

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{ij\sigma} \sum_{\alpha\beta} \Psi_\alpha^\dagger(i\sigma) t_{\alpha\beta}(ij) \Psi_\beta(i\sigma). \quad (1.5)$$

Здесь $\Psi_\alpha^\dagger(i\sigma)$ представляет компоненту спинора ($\alpha = 1, 2$), а

$$t_{\alpha\beta}(ij) = t_{ij} \mathbb{T}_{\alpha\beta}, \quad \mathbb{T} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.6)$$

Мы видим, что в X -представлении теория имеет матричный характер по спинорным индексам, которые с самого начала отражают возможность возникновения двух хаббардовских подзон. Такой формализм широко используется в литературе.

В следующем разделе 2 вводится одночастичная электронная ФГ, построенная на Ψ -операторах, и приведены уравнения для неприводимой собственно-энергетической и концевой частей, полученные нами ранее в работах [5]–[7] в рамках теории возмущений вблизи атомного предела. Эти уравнения по своей структуре близки к уравнениям типа ССБП. Далее рассматривается случай половинного заполнения и налагается требование электронно-дырочной симметрии. Полученные итерациями уравнения упрощаются в духе приближения, возникающего в пределе бесконечной размерности пространства ($d \rightarrow \infty$), а именно опускается зависимость собственной энергии от волнового вектора. Тогда получающаяся система нелинейных интегральных уравнений легко решается простыми численными методами. В разделе 3 вычисляется электронная плотность, которая показывает эволюцию от трехпиковой структуры к двухпиковой при увеличении U . Оцениваются вклады от поправок к членам ССБП-типа, а также проверяется правильность аналитических свойств электронной ФГ в условиях сильной корреляции.

2. ЭЛЕКТРОННАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА В ТЕРМИНАХ X -ОПЕРАТОРОВ

Информацию об одночастичных состояниях системы содержит электронная температурная ФГ

$$g(1\sigma_1, 2\sigma_2) = -\langle T c_{1\sigma_1} c_{2\sigma_2}^\dagger \rangle. \quad (2.1)$$

Здесь все обозначения стандартные: цифрами обозначены совокупные индексы, включающие узел и мапубаровское время, например, $1 = (i_1, \tau_1)$; T – оператор временного упорядочения, а $\langle \dots \rangle$ – символ статистического усреднения с гамильтонианом $\mathcal{H}$.

В условиях сильной корреляции для вычисления ФГ (2.1) удобно ввести вспомогательную матричную ФГ, построенную на X -операторах:

$$\mathcal{G}(1\sigma_1, 2\sigma_2) = -\langle T\Psi(1\sigma_1)\Psi^\dagger(2\sigma_2) \rangle. \quad (2.2)$$

В работах [5]–[7] разработана техника вычисления таких ФГ, основанная на уравнениях движения в терминах функциональных производных. Решение этих уравнений представляется в виде произведения двух величин:

$$\mathcal{G} = G\Lambda, \quad (2.3)$$

где G принято называть пропагаторной частью, а Λ – концевой. Величина G удовлетворяет уравнению Дайсона

$$G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma, \quad (2.4)$$

где собственно-энергетическую часть можно представить в виде двух вкладов:

$$\Sigma = \Sigma' + \Lambda\mathcal{T}. \quad (2.5)$$

Для величин Σ' и Λ выведены уравнения в функциональных производных, итерации в которых по хоппингу порождают теорию возмущений вблизи атомного предела, поскольку большое кулоновское взаимодействие полностью содержится в величине G_0^{-1} .

Приведем результаты вычисления Λ и Σ' в пределах двух первых порядков по t [6], [7], которые будут отправной точкой нашего исследования. Имеем для концевой части $\Lambda = \Lambda_0 + \Lambda_1$, где

$$\Lambda_0^\sigma(k) = \begin{pmatrix} 1 - \langle n^{\bar{\sigma}} \rangle & 0 \\ 0 & \langle n^{\bar{\sigma}} \rangle \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

$$\Lambda_1^\sigma(k) = \begin{pmatrix} \lambda_1^\sigma(k) & \lambda_2^\sigma(k) \\ -\lambda_1^\sigma(k) & -\lambda_2^\sigma(k) \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} \lambda_1^\sigma(k) = & - \sum_q \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} [(G_{11}^\sigma + G_{21}^\sigma)(k+q)\mathcal{N}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(q) + \\ & + (G_{11}^{\bar{\sigma}} + G_{21}^{\bar{\sigma}})(k+q)\mathcal{D}^{\sigma\bar{\sigma}}(q) + (G_{21}^{\bar{\sigma}} + G_{22}^{\bar{\sigma}})(-k-q)\mathcal{D}^{02}(q)], \end{aligned} \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} \lambda_2^\sigma(k) = & \sum_q \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} [(G_{12}^\sigma + G_{22}^\sigma)(k+q)\mathcal{N}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(q) + \\ & + (G_{12}^{\bar{\sigma}} + G_{22}^{\bar{\sigma}})(k+q)\mathcal{D}^{\sigma\bar{\sigma}}(q) + (G_{11}^{\bar{\sigma}} + G_{12}^{\bar{\sigma}})(-k-q)\mathcal{D}^{02}(q)]. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Величины $\mathcal{N}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(k)$, $\mathcal{D}^{\sigma\bar{\sigma}}(k)$ и $\mathcal{D}^{02}(k)$ представляют собой фурье-компоненты бозонных $\Phi\Gamma$:

$$\begin{aligned}\mathcal{N}^{\sigma_1\sigma_2}(12) &= -\langle T(n_1^{\sigma_1} - \langle n_1^{\sigma_1} \rangle)(n_2^{\sigma_2} - \langle n_2^{\sigma_2} \rangle) \rangle, \\ \mathcal{D}^{\sigma\bar{\sigma}}(12) &= -\langle TX_1^{\sigma\bar{\sigma}}X_2^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle, \\ \mathcal{D}^{02}(12) &= -\langle TX_1^{02}X_2^{20} \rangle.\end{aligned}\quad (2.10)$$

В выражениях (2.6)–(2.10) k и q – 4-импульсы, например, $k = (\mathbf{k}, i\omega_n)$; $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ – фурье-компонента $t_{i_1i_2}$, представляющая энергию электрона в затравочной полосе; $n_1^{\sigma} = X_1^{\sigma\sigma} + X_1^{22}$.

Неприводимая собственно-энергетическая часть Σ' определяется выражением

$$\Sigma'^{\sigma}(k) = - \begin{pmatrix} \eta_1^{\sigma} + \varphi_1^{\sigma}(k) & \eta_2^{\sigma} + \varphi_2^{\sigma}(k) \\ -\eta_1^{\sigma} - \varphi_1^{\sigma}(k) & -\eta_2^{\sigma} - \varphi_2^{\sigma}(k) \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Здесь η_1^{σ} и η_2^{σ} являются величинами первого порядка по хоппингу t , не зависящими от 4-импульса ¹⁾:

$$\begin{aligned}\eta_1^{\sigma} &= \sum_k \varepsilon_{\mathbf{k}} [G_{11}^{\sigma}(k) + G_{21}^{\sigma}(k) - G_{12}^{\sigma}(-k) - G_{22}^{\sigma}(-k)], \\ \eta_2^{\sigma} &= \sum_k \varepsilon_{\mathbf{k}} [G_{22}^{\sigma}(k) + G_{12}^{\sigma}(k) - G_{21}^{\sigma}(-k) - G_{11}^{\sigma}(-k)].\end{aligned}\quad (2.12)$$

Величины $\varphi_1^{\sigma}(k)$ и $\varphi_2^{\sigma}(k)$ представляют собой поправку второго порядка по t :

$$\begin{aligned}\varphi_1^{\sigma}(k) &= \sum_q \sum_{k_1} \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \varepsilon_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}} \left[G_{11}^{\sigma}(k_1) \bar{G}^{\bar{\sigma}}(k+q) G_{11}^{\bar{\sigma}}(k_1+q) + \right. \\ &\quad \left. + G_{11}^{\bar{\sigma}}(k_1) \bar{G}^{\sigma}(k+q) G_{11}^{\sigma}(k_1+q) - \sum_{\sigma'} G_{22}^{\bar{\sigma}}(-k_1) \bar{G}^{\sigma'}(k+q) G_{22}^{\bar{\sigma}'}(-k_1-q) \right],\end{aligned}\quad (2.13)$$

а $\varphi_2^{\sigma}(k)$ получается заменой спинорных индексов в выражении (2.13): $1 \leftrightarrow 2$. Здесь $\bar{G}^{\sigma}(k)$ – линейная комбинация матричных элементов пропагаторной $\Phi\Gamma$:

$$\bar{G}^{\sigma}(k) = G_{11}^{\sigma}(k) + G_{21}^{\sigma}(k) - G_{12}^{\sigma}(k) - G_{22}^{\sigma}(k). \quad (2.14)$$

Разрезаемая (по линии t_{ij}) часть Σ представляет собой матрицу

$$\Lambda^{\sigma}\mathcal{T} = \lambda^{\sigma}(k) \varepsilon_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.15)$$

где

$$\begin{aligned}\lambda^{\sigma}(k) &= \lambda_1^{\sigma}(k) + \lambda_2^{\sigma}(k) = \\ &= - \sum_q \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \left[\bar{G}^{\sigma}(k+q) \mathcal{N}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(q) + \bar{G}^{\bar{\sigma}}(k+q) \mathcal{D}^{\sigma\bar{\sigma}}(q) - \bar{G}^{\bar{\sigma}}(-k-q) \mathcal{D}^{02}(q) \right].\end{aligned}\quad (2.16)$$

¹⁾В работах [6], [7] ошибочно сокращены недиагональные члены и приводится соотношение $\eta_2^{\sigma} = -\eta_1^{\sigma} = \sum_k \varepsilon_{\mathbf{k}} [G_{22}^{\sigma}(k) - G_{11}^{\sigma}(k)]$.

Имея выражения (2.8)–(2.16), можно записать в явном виде пропагаторную ФГ:

$$G^\sigma(k) = (G_0^{-1}(k) - \Sigma'^\sigma(k) - \Lambda^\sigma T)^{-1}, \quad (2.17)$$

где

$$G_0^{-1}(k) = \begin{pmatrix} i\omega_n + \mu & 0 \\ 0 & i\omega_n + \mu - U \end{pmatrix}.$$

Полную электронную ФГ $\mathcal{G}$, определяемую соотношением (2.2), получаем, согласно (2.3), перемножая матрицы (2.17) и (2.6), (2.7). Электронную ФГ g , построенную на c -операторах, можно теперь вычислить с помощью соотношения

$$g^\sigma(k) = \sum_{\alpha\beta} \mathcal{G}_{\alpha\beta}^\sigma(k). \quad (2.18)$$

Эти результаты согласуются с результатами Плакиды с соавторами [2]–[4], полученными в рамках приближения Мори. Действительно, вклад в разрезаемую собственно-энергетическую часть, даваемый выражениями (2.15), (2.16), совпадает по форме с представленным в этих работах и соответствует ССБП; различие заключается в члене Σ' . Вклад первого порядка по t , определяющийся величинами η_1^σ и η_2^σ , соответствует фоковскому члену приближения среднего поля (хартриевский член $\Lambda_0 T$ определяет приближение “Хаббард-I”, если использовать терминологию теории возмущений по кулоновскому взаимодействию). В работах [2]–[4] также имеются поправки первого порядка к среднему полю, возникающие за счет статических флуктуаций заряда и спина; члены второго порядка по t , содержащие $\varphi_1^\sigma(k)$ и $\varphi_2^\sigma(k)$, отсутствуют. Если величины $\lambda^\sigma(k)$, соответствующие ССБП, учитывают взаимодействие фермиевских квазичастиц с бозонными (коллективными) степенями свободы, то член с $\varphi_1^\sigma(k)$ и $\varphi_2^\sigma(k)$ учитывает прямое взаимодействие фермионов друг с другом. Роль величин $\varphi_1^\sigma(k)$ и $\varphi_2^\sigma(k)$ будет выяснена позже.

3. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПАРАМАГНИТНОГО МЕТАЛЛА ПРИ ПОЛОВИННОМ ЗАПОЛНЕНИИ ЗОНЫ

Рассмотрим далее парамагнитное состояние с половинным заполнением зоны ($n = 1$), для которого $\mu = U/2$. Разрешив матричное уравнение (2.17), получим явное выражение для пропагаторной части электронной ФГ:

$$G(k) = \frac{1}{d(k)} \begin{pmatrix} i\omega_n - \frac{U}{2} - \eta_2 - \varphi_2 - (\frac{1}{2} - \lambda)\varepsilon_{\mathbf{k}} & -\eta_2 - \varphi_2 + (\frac{1}{2} + \lambda)\varepsilon_{\mathbf{k}} \\ \eta_1 + \varphi_1 + (\frac{1}{2} - \lambda)\varepsilon_{\mathbf{k}} & i\omega_n + \frac{U}{2} + \eta_1 + \varphi_1 - (\frac{1}{2} + \lambda)\varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

где знаменатель определяется выражением

$$d(k) = (i\omega_n)^2 - \left(\frac{U}{2}\right)^2 + (\eta^- + \varphi^-)i\omega_n - \frac{U}{2}(\eta^+ + \varphi^+) - (i\omega_n - U\lambda + \eta^- + \varphi^-)\varepsilon_{\mathbf{k}}. \quad (3.2)$$

Мы обозначили $\eta^\pm = \eta_1 \pm \eta_2$, $\varphi^\pm = \varphi_1 \pm \varphi_2$ и опустили аргумент k у величин $\varphi^\pm(k)$ и $\lambda(k)$; величины $\eta^\pm$ не зависят от k .

Учитывая соотношение (2.18), связывающее ФГ g с ФГ $\mathcal{G}$, построенной на X -операторах, представим электронную ФГ в локаторной форме:

$$g(k) = \frac{1}{F(k) - \varepsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (3.3)$$

где локатор

$$F(k) = \frac{(i\omega_n)^2 - (U/2)^2 + (\eta^- + \varphi^-)i\omega_n - (U/2)(\eta^+ + \varphi^+)}{i\omega_n - U\lambda + \eta^- + \varphi^-}. \quad (3.4)$$

С помощью спектрального представления для электронных и бозонных ФГ проведем суммирование по мацубаровским частотам в выражениях для η , λ и φ и сделаем аналитическое продолжение $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$ к запаздывающим ФГ [8]. Тогда η_1 можно записать в виде

$$\begin{aligned} \eta_1 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (\text{Im}[G_{11}(\mathbf{k}, \omega) + G_{12}(\mathbf{k}, \omega)]f(\omega) + \\ + \text{Im}[G_{22}(\mathbf{k}, \omega) + G_{21}(\mathbf{k}, \omega)]f(-\omega)). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Формула для η_2 получается из (3.5) заменой спинорных индексов: $1 \leftrightarrow 2$.

Выпишем выражения для мнимых частей функций $\lambda(k)$ и $\varphi^{\pm}(k)$:

$$\begin{aligned} \text{Im } \lambda(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{2}{\pi} \sum_{\mathbf{q}} \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega \text{Im } \overline{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \omega + \Omega) \text{Im } \mathcal{D}(\mathbf{q}, \Omega) \times \\ \times [f(\omega + \Omega) + N(\Omega)], \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} \text{Im } \varphi^{\pm}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{q}} \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega \text{Im } \overline{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \omega + \Omega) \text{Im } m^{\pm}(\mathbf{q}, \Omega) \times \\ \times [f(\omega + \Omega) + N(\Omega)], \end{aligned} \quad (3.7)$$

где $f(\omega)$ и $N(\Omega)$ – функции Ферми и Бозе, соответственно. В последнем выражении введена величина, аналогичная мнимой части бозонной ФГ $\mathcal{D}(\mathbf{q}, \Omega)$:

$$\begin{aligned} \text{Im } m^{\pm}(\mathbf{q}, \Omega) = \frac{2}{\pi} \sum_{\mathbf{k}'} \varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' [\text{Im } G_{11}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \omega' + \Omega) \text{Im } G_{11}(\mathbf{k}', \omega') \pm \\ \pm \text{Im } G_{22}(\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \omega' + \Omega) \text{Im } G_{22}(\mathbf{k}', \omega')] [f(\omega' + \Omega) - f(\omega')]. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Реальные части величин $\lambda(\mathbf{k}, \omega)$ и $\varphi^{\pm}(\mathbf{k}, \omega)$ могут быть найдены из мнимых частей с помощью дисперсионных соотношений.

Уравнения (3.6) и (3.7) являются интегральными по частотам и импульсам. Мы упростим их, используя основную идею ТДСП о том, что в пределе $d \rightarrow \infty$ собственно-энергетическая часть одночастичной ФГ не зависит от импульса. В данном приближении это означает, что величины $\lambda(\mathbf{k}, \omega)$ и $\varphi^{\pm}(\mathbf{k}, \omega)$ не зависят от импульса $\mathbf{k}$, но зависят от частоты ω . Уравнения для $\lambda(\omega)$ и $\varphi^{\pm}(\omega)$ можно получить, если просуммировать выражения (3.6) и (3.7) по $\mathbf{k}$, а выражение (3.8) – по $\mathbf{q}$. Таким образом, из (3.6) получаем

$$\text{Im } \lambda(\omega) = -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega \text{Im } \overline{G}^{[1]}(\omega + \Omega) \text{Im } \mathcal{D}(\Omega) [f(\omega + \Omega) + N(\Omega)], \quad (3.9)$$

где

$$\mathcal{D}(\Omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{D}(\mathbf{q}, \Omega), \quad (3.10)$$

$$\bar{G}^{[1]}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \bar{G}(\mathbf{k}, \omega). \quad (3.11)$$

Уравнение аналогичного типа возникает, если просуммировать (3.7) по $\mathbf{k}$:

$$\text{Im } \varphi^{\pm}(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega \text{Im } \bar{G}^{[1]}(\omega + \Omega) \text{Im } m^{\pm}(\Omega) [f(\omega + \Omega) + N(\Omega)], \quad (3.12)$$

где

$$\begin{aligned} \text{Im } m^{\pm}(\Omega) = & \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega [\text{Im } G_{11}^{[1]}(\omega + \Omega) \text{Im } G_{11}(\omega) \pm \text{Im } G_{22}^{[1]}(\omega + \Omega) \text{Im } G_{22}(\omega)] \times \\ & \times [f(\omega + \Omega) - f(\omega)]. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Здесь

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega), \quad G_{\alpha\beta}^{[1]}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega). \quad (3.14)$$

Из формул (3.9) и (3.13) следуют условия симметрии для величин $\lambda(\omega)$ и $\varphi^{\pm}(\omega)$:

$$\begin{aligned} \text{Im } \lambda(-\omega) &= \text{Im } \lambda(\omega), & \text{Im } \varphi^{\pm}(-\omega) &= \mp \text{Im } \varphi^{\pm}(\omega), \\ \text{Re } \lambda(-\omega) &= -\text{Re } \lambda(\omega), & \text{Re } \varphi^{\pm}(-\omega) &= \pm \text{Im } \varphi^{\pm}(\omega). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Они выполняются, разумеется, только для половинного заполнения и являются следствием электронно-дырочной симметрии. Легко показать, что из требований электронно-дырочной симметрии $\eta_1 = \eta_2 = 0$.

Таким образом, мы имеем систему интегральных уравнений для $\lambda(\omega)$ и $\varphi^{\pm}(\omega)$, в которых предполагается, что $\text{Im } \mathcal{D}(\Omega)$ задается отдельно. Эти уравнения нелинейные, поскольку пропагаторная ФГ $G(k)$ содержит $\lambda(\omega)$ и $\varphi^{\pm}(\omega)$ в знаменателе $d(k)$. Ниже будет показано, что величины $\varphi^{\pm}(\omega)$ малы по сравнению с $U\lambda$, поэтому сейчас мы пренебрежем ими во всех уравнениях. В этом приближении уравнение (3.9) для $\lambda(\omega)$ можно записать в виде

$$\text{Im } \lambda(\omega) = U^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega \text{Im } \lambda(\omega + \Omega) Q(\omega + \Omega) \frac{1}{\pi} \text{Im } \mathcal{D}(\Omega) [f(\omega + \Omega) + N(\Omega)], \quad (3.16)$$

где

$$Q(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2}{\text{Re}^2 d(\omega, \varepsilon_{\mathbf{k}}) + \text{Im}^2 d(\omega, \varepsilon_{\mathbf{k}})}, \quad (3.17)$$

$$\text{Re } d(\omega, \varepsilon_{\mathbf{k}}) = \omega^2 - \left(\frac{U}{2}\right)^2 - [\omega - U \text{Re } \lambda(\omega)] \varepsilon_{\mathbf{k}}, \quad (3.18)$$

$$\text{Im } d(\omega, \varepsilon_{\mathbf{k}}) = U \text{Im } \lambda(\omega) \varepsilon_{\mathbf{k}}.$$

При переходе от уравнения (3.9) к (3.16) мы учли, что $\bar{G}(k) = -U/d(k)$.

К уравнению (3.16) следует добавить дисперсионное соотношение, связывающее реальную и мнимую части величины $\lambda(\omega)$:

$$\operatorname{Re} \lambda(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Im} \lambda(\omega')}{\omega - \omega'}. \quad (3.19)$$

Уравнения (3.16) и (3.19) представляют собой замкнутую систему уравнений для величин $\operatorname{Im} \lambda(\omega')$ и $\operatorname{Re} \lambda(\omega')$ при условии, что задана спектральная плотность спиновых флуктуаций $(1/\pi) D(\Omega)$.

Получим теперь выражение для плотности электронных состояний (на одну проекцию спина):

$$\rho(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \left[-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} g(\varepsilon_{\mathbf{k}}, \omega) \right]. \quad (3.20)$$

Согласно формуле (3.3)

$$g(\varepsilon_{\mathbf{k}}, \omega) = \frac{1}{F_1(\omega) + iF_2(\omega) - \varepsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (3.21)$$

где $F_1(\omega)$ и $F_2(\omega)$ – вещественная и мнимая части локатора (3.4), который при условии $\eta_1 = \eta_2 = 0$ и при пренебрежении величинами $\varphi^{\pm}(\omega)$ оказывается равным

$$F(\omega) = \frac{\omega^2 - (U/2)^2}{\omega - U\lambda(\omega)}. \quad (3.22)$$

С другой стороны, одночастичная электронная ФГ (2.1) представима через собственно-энергетическую часть Σ :

$$g(\varepsilon_{\mathbf{k}}, \omega) = \frac{1}{\omega - \Sigma(\varepsilon_{\mathbf{k}}, \omega) + \mu}. \quad (3.23)$$

Сравнивая соотношения (3.21) и (3.23), можно найти выражение для $\Sigma(\omega)$ через $\lambda(\omega)$; выпишем его для мнимой части $\Sigma(\omega)$:

$$\operatorname{Im} \Sigma(\omega) = -F_2(\omega) = -\frac{(\omega^2 - (U/2)^2)U \operatorname{Im} \lambda(\omega)}{[\omega - U \operatorname{Re} \lambda(\omega)]^2 + [U \operatorname{Im} \lambda(\omega)]^2}. \quad (3.24)$$

Для запаздывающей ФГ $\operatorname{Im} \Sigma(\omega) < 0$, поэтому для выполнения аналитических свойств электронной ФГ из выражения (3.24) следует необходимость неравенства

$$\left(\omega^2 - \left(\frac{U}{2} \right)^2 \right) U \operatorname{Im} \lambda(\omega) > 0, \quad (3.25)$$

т.е. $\operatorname{Im} \lambda(\omega)$ должна менять знак в точках $\omega = \pm U/2$, которые соответствуют положению атомных уровней при наличии кулоновского взаимодействия электронов. Условие (3.25) обеспечивает положительную определенность электронной плотности состояний. В случае прямоугольной затравочной полосы шириной W

$$\rho_0(\omega) = \begin{cases} 1, & \text{если } |\omega| < W/2, \\ 0, & \text{если } |\omega| > W/2; \end{cases} \quad (3.26)$$

интегрирование по ε в формуле (3.20) приводит к выражению

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\pi} \left[\operatorname{arctg} \frac{1 + 2F_1(\omega)}{2F_2(\omega)} + \operatorname{arctg} \frac{1 - 2F_1(\omega)}{2F_2(\omega)} \right]. \quad (3.27)$$

Нетрудно видеть, что $\rho(\omega)$ – четная функция ω , т.е. при половинном заполнении имеет место электронно-дырочная симметрия.

4. СТРУКТУРА ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА

Из вида уравнения (3.16) следует, что оно имеет тривиальное решение $\lambda(\omega) = 0$ и нетривиальное, причем если $\lambda(\omega)$ есть некоторое решение, то и $-\lambda(\omega)$ тоже будет решением этого уравнения. Можно также увидеть, что допускается решение, меняющее знак в точках $\omega = \pm U/2$. Именно такие решения нам необходимы для выполнения условия аналитичности запаздывающей $\Phi\Gamma$ в верхней полуплоскости, требующего удовлетворения неравенства (3.25).

Для явного решения уравнения (3.16) необходимо задать спектральную функцию спиновых флуктуаций $\operatorname{Im} \mathcal{D}(\omega)$. Мы воспользуемся модельной аппроксимацией, предложенной в работе [9] и успешно примененной к аналогичной проблеме в работе [7]:

$$\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \mathcal{D}(\Omega) = \chi_0 \frac{\operatorname{th}(\Omega/(2T))}{1 + (\Omega/\Gamma)^2}. \quad (4.1)$$

Таким образом, введены два параметра χ_0 и Γ , характеризующие интенсивность и ширину спектрального распределения, соответственно. Между ними существует связь, задаваемая тождеством

$$\langle S_i^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \mathcal{D}(\Omega) N(\Omega), \quad (4.2)$$

которая сводится к соотношению

$$\pi \chi_0 \Gamma = \frac{3}{2}. \quad (4.3)$$

Если подставить выражение (4.1), в котором $\chi_0 = 3/(2\pi\Gamma)$, в основное уравнение (3.16), то следует искать решения при заданных параметрах U и Γ . Уравнение (3.16) должно решаться совместно с уравнением (3.19). Решение этой системы интегральных уравнений находится итерациями, причем затравочное значение $\lambda(\omega)$ выбирается таким, чтобы в точках $\omega = \pm U/2$ функция $\lambda(\omega)$ меняла знак. Результаты расчета с модельной плотностью состояний (3.26) показаны на рис. 1. Мы видим трехпиковую структуру плотности состояний $\rho(\omega)$ с узким квазичастичным пиком на уровне Ферми. Заметим, что $\operatorname{Im} \Sigma(\omega)$ всюду отрицательна, как и должно быть. При увеличении U интенсивность квазичастичного пика быстро падает до нулевого значения, при этом открывается щель на уровне Ферми (рис. 2).

Рис. 1. Величины $\text{Im } \lambda(\omega)$ (а), $\text{Re } \lambda(\omega)$ (б), $\rho(\omega)$ (в) и $\text{Im } \Sigma(\omega)$ (г), рассчитанные для значений параметров $U = 1.6$, $\Gamma = 0.01$, $T = 0.001$. Все энергии выражены в единицах гиперзатравоочной зоны W . Использована прямоугольная плотность состояний в затравочной полосе.

Рис. 2. Плотность электронных состояний для значений $U = 1.7$ (а) и $U = 3.4$ (б). Остальные параметры те же, что и на рис. 1.

Рис. 3. Плотность электронных состояний на уровне Ферми в зависимости от U при значениях $\Gamma = 0.01$, $T = 0.001$.

Как видно из рис. 16, $\text{Re } \lambda(\omega)$ в окрестности уровня Ферми линейна, причем наклон ее уменьшается с ростом U так, что при критическом значении U , когда центральный пик исчезает, угол наклона меняет знак. Острые пики на кривых $\rho(\omega)$ являются следствием прямоугольной формы затравочной плотности состояний. Расчет с полуэллиптической плотностью состояний дает гладкие кривые, но очень похожие на те, которые получены с помощью прямоугольной плотности. Таким образом, модельная плотность затравочных состояний (3.26) качественно не искажает структуру спектра, но позволяет продвинуться дальше в аналитических расчетах (интегрировать по ε).

На рис. 3 показано, как уменьшается плотность состояний $\rho(0)$ на уровне Ферми в зависимости от U . Переход из металлической в диэлектрическую фазу происходит при U/W , слегка превышающем 2. Вычисления показывают, что с ростом температуры интенсивность центрального пика падает. Все отмеченные свойства спектра согласуются с результатами ТДСП, представленными в работах [10], [11] и других, где исследуется модель Хаббарда при половинном заполнении.

Обсудим теперь роль вкладов прямого электронно-электронного рассеяния, описываемых величинами $\varphi^\pm(\omega)$.

На рис. 4 для примера представлены рассчитанные по формулам (3.12) и (3.13) функции $\text{Im } \varphi^-(\omega)$ и $\text{Im } m^-(\Omega)$. Мы видим, что $\text{Im } m^-(\Omega)$ имеет порядок 10^{-2} , а $\text{Im } \varphi^-(\omega)$ – порядок 10^{-3} , тогда как порядок $\lambda(\omega)$ равен 1. Величины $\text{Im } \varphi^+(\omega)$ и $\text{Im } m^+(\Omega)$ с другой симметрией имеют те же порядки, что и $\text{Im } \varphi^-(\omega)$ и $\text{Im } m^-(\Omega)$, соответственно. При $\omega = 0$ все эти величины равны нулю, так что основной вес спектрального распределения для каждой из них приходится на высокие частоты ω порядка 1. В силу численной малости величин $\varphi^\pm(\omega)$ ими можно пренебречь везде в уравнениях для электронной ФГ, так что поведение системы определяется исключительно величиной $\lambda(\omega)$, описывающей взаимодействие квазичастиц со спиновыми коллективными модами.

Рис. 4. Величины $\text{Im } m^-(\Omega)$ (а) и $\text{Im } \varphi^-(\omega)$ (б) для параметров $U = 1.6$, $\Gamma = 0.01$, $T = 0.001$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основной вывод, который можно сделать на основе проведенного исследования, состоит в том, что физика модели Хаббарда при половинном заполнении может быть получена в рамках теории возмущений вблизи атомного предела с собственно-энергетической частью, описывающей взаимодействие электронов со спиновыми коллективными модами. Вклад от процессов рассеяния квазичастиц друг на друге оказывается мал, а вклад, учитывающий взаимодействие с коллективными спиновыми флуктуациями имеет форму вклада в ССБП. Если в интегральных уравнениях для собственно-энергетической части игнорировать импульсную зависимость в смысле предела $d \rightarrow \infty$, решение упрощенных интегральных уравнений воспроизводит основные результаты ТДСП. В частности, при увеличении кулоновского параметра U плотность состояний в электронном спектре эволюционирует от трехпиковой структуры к двухпиковой, обеспечивая фазовый переход металл–изолятор при $U \sim W$; при этом интенсивность центрального квазичастичного пика монотонно падает с ростом U . Поведение спектральной плотности с температурой и основными параметрами системы согласуются с основными расчетами ТДСП; основное отличие состоит в меньшей высоте квазичастичного пика.

Однако предлагаемый нами подход дает несколько другой взгляд на проблему. В ТДСП динамика электрона на решетке сводится к некоторой вспомогательной однопримесной задаче. Особенности квазичастичного спектра модели Хаббарда проявляются через спектральную плотность однопримесной модели Андерсона, и трехпиковая или двухпиковая структура решеточной модели соответствуют разным режимам вспомогательной примесной проблемы. При нашем подходе, в сущности, близком ССБП, появление центрального квазичастичного пика обусловлено рассеянием электронов на спиновых флуктуациях, в котором проявляются черты эффекта Кондо.

Заметим, что мы не решали полностью самосогласованную задачу и не вычисляли ФГ спиновых флуктуаций. Вместо этого мы использовали модельную спиновую

плотность состояний с одним свободным параметром Γ , который задавался произвольно. Конечно, ширина спектрального распределения флуктуаций зависит от U , и эта зависимость может быть получена только в самосогласованной теории. В ТДСП нет проблемы вычисления отдельно спиновой ФГ, и теория содержит только один параметр U . В этом состоит несомненное преимущество ТДСП, за которое приходится расплачиваться необходимостью численного решения однопримесной задачи.

Предложенная схема может быть использована за пределами половинного заполнения, следует помнить только, что в этом случае большую роль должны играть η_1 и η_2 – величины первого порядка по t , которые равны нулю при $n = 1$. Эти члены играют такую же роль в формировании квазичастичного спектра, что и поправки к среднему полю, учитывающие статические флуктуации заряда и спина, в подходе, предлагаемом в работе [4].

Благодарности. Данная работа поддержана Программой поддержки ведущих научных школ (грант № НШ–4640.2006.2).

Список литературы

- [1] G. Kotliar, S. V. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcoletto, C. A. Marianetti, *Rev. Mod. Phys.*, **78**:3 (2006), 865.
- [2] N. M. Plakida, V. S. Oudovenko, *Phys. Rev. B*, **59**:18 (1999), 11949.
- [3] Н. М. Плакида, Л. Антон, С. Адам, Г. Адам, *ЖЭТФ*, **124** (2003), 367.
- [4] Н. М. Плакида, В. С. Удовенко, *ЖЭТФ*, **104** (2007), 230.
- [5] Ю. А. Изюмов, Н. И. Чашин, *ФММ*, **97**:3 (2004), 5.
- [6] Yu. A. Izyumov, N. I. Chaschin, D. S. Alexeev, F. Mancini, *Eur. Phys. J. B*, **45**:1 (2005), 69.
- [7] Ю. А. Изюмов, Н. И. Чашин, Д. С. Алексеев, *Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала*, РХД, Москва–Ижевск, 2006.
- [8] Д. Н. Зубарев, *УФН*, **71** (1960), 71.
- [9] J. Jaklic, P. Prelovsek, *Phys. Rev. Lett.*, **75** (1995), 1340.
- [10] A. Georges, G. Kotliar, *Phys. Rev. B*, **45** (1992), 6479.
- [11] R. Bulla, T. A. Costi, D. Vollhardt, *Phys. Rev. B*, **64** (2001), 045103.

Поступила в редакцию 5.06.2007