Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

И. В. Стасюк, О. Б. Гера, Асимметричная модель Хаббарда в методе производящего функционала: спектральные функции в пределе Фаликова–Кимбала, *ТМФ*, 2008, том 154, номер 1, 164–182

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6158>

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: 18.207.199.55

26 апреля 2023 г., 15:10:09

© 2008 г.

И. В. Стасюк*, О. Б. Гера*

АСИММЕТРИЧНАЯ МОДЕЛЬ ХАББАРДА В МЕТОДЕ ПРОИЗВОДЯЩЕГО ФУНКЦИОНАЛА: СПЕКТРАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ В ПРЕДЕЛЕ ФАЛИКОВА–КИМБАЛА

В рамках теории динамического среднего поля исследованы плотности состояний фермионной и бозонной ветвей спектра асимметричной модели Хаббарда, которая применяется для описания сильно коррелированной двухсортной (A, B) -системы ферми-частиц (электронов). Для решения эффективной одноузельной задачи развит приближенный аналитический подход, который базируется на методе производящего функционала Каданова–Бейма. Данная методика позволяет построить неприводимую часть (массовый оператор) функции Грина частиц в виде формального разложения по степеням когерентного потенциала. В первом порядке схема воспроизводит так называемое обобщенное приближение Хаббард–III. С целью ее улучшения развит самосогласованный способ расчета как фермионной, так и бозонной функций Грина. При $U \rightarrow \infty$ в пределе Фаликова–Кимбала асимметричной модели Хаббарда, когда частицы сорта B становятся локализованными, найдены спектральные плотности состояний ρ_B и ρ_{AB} обеих ветвей, рассмотрено изменение их формы в зависимости от температуры и концентраций частиц. Путем сравнения с точными термодинамическими зависимостями $\mu_B(n_B)$ установлены пределы применимости самосогласованного обобщенного приближения Хаббард–III.

Ключевые слова: сильно коррелированные системы, асимметричная модель Хаббарда, динамическое среднее поле, производящий функционал, спектральные функции.

1. ВВЕДЕНИЕ

Решеточные модели с хаббардовскими короткодействующими взаимодействиями используются для исследования физических свойств сильно коррелированных электронных систем; однозонную модель Хаббарда и бесспиновую модель Фаликова–Кимбала (ФК) можно рассматривать как простейшие модели такого типа (см., например, [1]–[3]). В настоящей работе эти модели объединены в единую асимметричную модель Хаббарда (АМХ) с разными параметрами переноса и разными значениями химических потенциалов, которая описывает систему с двумя сортами подвижных частиц (электронов, ионов и т.п.). Данная модель может применяться

*Институт физики конденсированных систем НАН Украины, Львов, Украина.
E-mail: ista@icmp.lviv.ua, hera@icmp.lviv.ua

к системам со смешанной валентностью [4], а также к ионным проводникам. Гамильтониан модели имеет следующий вид:

$$\hat{H} = \sum_i \hat{H}_i + \sum_{ij\sigma} t_{ij}^\sigma a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma}, \quad (1)$$

где

$$\hat{H}_i = U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \sum_{\sigma \in \{\downarrow, \uparrow\}} \mu_\sigma n_{i\sigma}. \quad (2)$$

Здесь электронный перенос (перенос частиц) описывается на языке фермионных операторов рождения и уничтожения $a_{i\sigma}^\dagger$, $a_{j\sigma}$ и характеризуется параметром t_{ij}^σ , зависящим от спинного индекса σ . Одноузельная часть оператора $\hat{H}_i$ содержит локальное отталкивание U и энергию электронов в локализованных состояниях, включенную в химические потенциалы μ_σ ($n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$). При использовании модели для описания систем с двумя сортами ферми-квазичастиц спинные индексы $\sigma = \uparrow, \downarrow$ заменяются индексами сорта частиц $\sigma = A, B$. Основное отличие АМХ от обычной модели Хаббарда состоит в том, что интегралы переноса и химические потенциалы зависят от сорта частиц ($t_{ij}^A \neq t_{ij}^B$, $\mu_A \neq \mu_B$). При предельном переходе $t_{ij}^B \rightarrow 0$, когда частицы сорта B становятся неподвижными, модель (1) переходит в ФК-модель. При этом, если модель применяется к электронам в различных орбитальных состояниях, часто вводят единый химический потенциал, положив $\mu_A = \mu - \varepsilon_A$; $\mu_B = \mu - \varepsilon_B$ [3].

К настоящему времени исследованы только некоторые частные случаи АМХ. Можно отметить анализ основного состояния модели с точки зрения неустойчивости однородной фазы [5]. Рассматривался также случай сильного одноузельного отталкивания U , в рамках которого можно свести гамильтониан исходной модели к эффективному гамильтониану анизотропной модели Гейзенберга с антиферромагнитным взаимодействием [4], [6], [7]. Некоторые термодинамические свойства модели исследовались в одномерном случае [7], [8], а в пределе бесконечной размерности пространства ($d \rightarrow \infty$) проводились расчеты одночастичной плотности состояний с использованием метода уравнений движения для функций Грина [9], рассматривались также критерии перехода металл–диэлектрик [10].

В настоящей работе мы продолжим исследование АМХ при $d \rightarrow \infty$ в рамках метода динамического среднего поля (который является точным в этом пределе). В этом случае полная неприводимая часть $\Xi_\sigma(\omega_n)$ одночастичной функции Грина не зависит от волнового вектора, и ее нахождение для кристаллической решетки сводится к одноузельной задаче [11]. Решение этой задачи дополняется соотношением

$$G_\sigma(\omega_n) = \frac{1}{\Xi_\sigma^{-1}(\omega_n) - J_\sigma(\omega_n)}, \quad (3)$$

вытекающим из уравнения Ларкина (здесь $G_\sigma(\omega_n)$ – одноузельная функция Грина, $J_\sigma(\omega_n)$ – когерентный потенциал), а также условием совпадения решеточной G_{ii}^σ и одноузельной функций Грина:

$$G_\sigma(\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt \rho_\sigma^0(t)}{\Xi_\sigma^{-1}(\omega_n) - t}, \quad (4)$$

где $\rho_\sigma^0(t)$ – невозмущенная плотность зонных состояний.

Известен ряд численных методов решения одноузельной задачи (например, квантовый метод Монте-Карло [12]–[14], метод точной диагонализации [15], [16], метод численной ренормгруппы [17]). Однако эти подходы обладают рядом ограничений, и в связи с развитием в последнее время методик расчета электронной структуры на основе метода функционала плотности [18], [19] возникает необходимость разработки новых быстрых алгоритмов. Такими являются, в частности, аналитические аппроксимации для функций Грина [20]–[25].

Мы базируемся на работе [26], в которой для улучшения аналитического подхода развивалась методика производящего функционала в применении к одноузельной задаче. Основу этой методики составляет схема Каданова–Бейма [27], развитая и переформулированная Изюмовым и Чапиным [28]–[31] в применении к решеточным системам с сильными корреляциями (описываемым, в частности, моделями Гейзенберга и Хаббарда). Данная методика позволяет получать замкнутое уравнение в функциональных производных для неприводимой части функции Грина. Его решение строится итерационным методом в виде разложения по степеням когерентного потенциала J_σ . Как показано в [26], уже первая итерация приводит после некоторых упрощений к так называемому обобщенному приближению Хаббард-III (GH3), которое было получено ранее с помощью процедуры разновременных расщеплений неприводимых функций Грина в методе уравнений движения [9], [32] (при половинном заполнении и в симметричном случае GH3-приближение сводится к обычному приближению Хаббард-III).

Выход за пределы GH3-приближения в рамках используемого подхода может быть осуществлен путем более строгого расчета одноузельной функции Грина, построенной на бозонных операторах Хаббарда. Следуя идее, изложенной в [31], в настоящей работе уравнения для такой функции мы получаем путем функционального дифференцирования средних от бозонных X -операторов по фиктивным полям. Связанная с этим неопределенность аналогична тому или иному выбору приоритетов спариваний в стандартной диаграммной технике, что приводит к различному виду получаемых уравнений. Для решения этой проблемы проанализированы результаты, которые соответствуют различным исходным средним; использована также процедура симметризации [31]. Бозонные функции Грина определяются приближенно с точностью до первого порядка по когерентному потенциалу.

Определение бозонной и фермионной функций Грина на основе полученной системы уравнений позволяет улучшить GH3-приближение, делая его самосогласованным. С целью обоснования и апробации развиваемого подхода в настоящей работе проводится расчет зависимостей химического потенциала μ_B от концентрации n_B локализованных частиц АМХ в ФК-пределе ($t_B = 0$) при разных температурах и различных значениях химического потенциала μ_A . Полученные кривые сравниваются с результатами, вытекающими из точного выражения для термодинамического потенциала в этом пределе [32], а также с зависимостями, найденными в других приближениях, включая обычное GH3-приближение [9]. В той области значений параметров, где самосогласованное GH3-приближение является удовлетвори-

ным, рассчитаны бозонные и фермионные спектральные функции (плотности состояний ρ_{AB} и ρ_B), проанализированы зависимости спектра возбуждений от концентраций частиц и температуры.

2. ЭФФЕКТИВНАЯ ОДНОУЗЕЛЬНАЯ ЗАДАЧА В РАМКАХ ПОДХОДА ПРОИЗВОДЯЩЕГО ФУНКЦИОНАЛА

Одноузельная задача для определения электронной функции Грина в методе динамического среднего поля формулируется обычно на языке эффективного статистического оператора

$$e^{-\beta \hat{H}_{\text{eff}}} = e^{-\beta \hat{H}_0} \mathcal{T}_\tau \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma J_\sigma(\tau - \tau') a_\sigma^\dagger(\tau) a_\sigma(\tau') \right] \equiv e^{-\beta \hat{H}_0} \hat{\sigma}(\beta), \quad (5)$$

где H_0 – одноузельная часть гамильтониана (1), $J_\sigma(\tau - \tau')$ – когерентный потенциал. Целью расчета функции Грина

$$G_\sigma = \langle \mathcal{T}_\tau a_\sigma^\dagger(\tau) a_\sigma(\tau') \rangle \quad (6)$$

является установление функциональной связи между функцией G_σ и потенциалом J_σ , которая вместе с (3) и (4) позволяет получить замкнутую систему уравнений.

Воспользуемся представлением операторов рождения и уничтожения фермионов через операторы Хаббарда:

$$a_\sigma = X^{0\sigma} + \zeta X^{\bar{\sigma}2}, \quad a_\sigma^\dagger = X^{\sigma 0} + \zeta X^{2\bar{\sigma}}; \quad (7)$$

здесь индексы и знаки определены следующим образом: $\bar{\sigma} = B$, $\zeta = +$ для $\sigma = A$; $\bar{\sigma} = A$, $\zeta = -$ для $\sigma = B$; индексы 0 и 2 обозначают соответственно незанятое и двукратно занятое состояние узла. Тогда

$$H_0 = U X^{22} - \sum_\sigma \mu_\sigma (X^{\sigma\sigma} + X^{22}), \quad (8)$$

и функция Грина (8) приобретает вид суммы четырех слагаемых:

$$G_\sigma(\tau - \tau') = \langle \mathcal{T}_\tau X^{\sigma 0}(\tau) X^{0\sigma}(\tau') \rangle + \zeta \langle \mathcal{T}_\tau X^{\sigma 0}(\tau) X^{\bar{\sigma}2}(\tau') \rangle + \langle \mathcal{T}_\tau X^{2\bar{\sigma}}(\tau) X^{\bar{\sigma}2}(\tau') \rangle + \zeta \langle \mathcal{T}_\tau X^{2\bar{\sigma}}(\tau) X^{0\sigma}(\tau') \rangle. \quad (9)$$

Для расчета функции (9), построенной на X -операторах, можно применить температурную теорию возмущений, разлагая по степеням когерентного потенциала J_σ . Такой подход соответствует приближению сильной связи, которое для систем с хаббардовским взаимодействием использовалось в ряде работ (см., например, [33]). В методе производящего функционала данному разложению соответствует упомянутая выше итерационная процедура определения неприводимой по Ларкину части Ξ_σ функции Грина [26], [28]–[31].

С целью упрощения дальнейшего изложения мы рассмотрим предельный случай $U \rightarrow \infty$, в рамках которого исключаются двукратно занятые состояния узлов, и задача сводится к определению функции Грина $G^{\sigma 0, 0\sigma} \equiv \langle \mathcal{T}_\tau X^{\sigma 0}(\tau) X^{0\sigma}(\tau') \rangle$.

Введем зависящие от времени флуктуирующие поля $v_\gamma(\tau)$, сопряженные величинам, описываемым бозонными операторами X^γ ($\gamma = 00, \sigma\sigma, \sigma\bar{\sigma}$). Статистическая сумма одноузельной задачи запишется при этом в виде

$$Z \rightarrow Z_V = \text{Sp}(e^{-\beta H_{\text{eff}}} \mathcal{T}_\tau e^{-V}), \quad (10)$$

где

$$V = \int_0^\beta d\tau V(\tau) = \int_0^\beta d\tau \sum_\gamma v_\gamma(\tau) X^\gamma(\tau), \quad (11)$$

а вычисление средних от произведений X -операторов осуществляется согласно формуле

$$\langle \dots \rangle_V = \frac{\text{Sp}(\mathcal{T}_\tau e^{-\beta H_{\text{eff}}} \dots e^{-V})}{\text{Sp}(\mathcal{T}_\tau e^{-\beta H_{\text{eff}}} e^{-V})}. \quad (12)$$

Средние значения бозонных операторов X^γ выражаются как функциональные производные по соответствующим полям v_γ от производящего функционала $\Phi_V = \ln Z_V$, $\langle X^\gamma \rangle = -\delta \Phi_V / \delta v_\gamma(\tau)|_{v \rightarrow 0}$. Чтобы получить средние для системы с исходным гамильтонианом, поля v_γ полагаются после дифференцирования равными нулю.

Пользуясь выражениями для производных от функционала Φ_V , легко получить соотношения, с помощью которых записывается произвольный коррелятор (функция Грина) высшего порядка, содержащий бозонный оператор Хаббарда:

$$\langle \mathcal{T}_\tau X^\alpha(\tau_1) \dots \rangle_V = -\frac{\delta \langle \mathcal{T}_\tau \dots \rangle_V}{\delta v_\alpha(\tau_1)} + \langle \mathcal{T}_\tau \dots \rangle_V \langle \mathcal{T}_\tau X^\alpha(\tau_1) \rangle_V. \quad (13)$$

При переходе к усреднению с гамильтонианом H_0 ,

$$\langle \mathcal{T}_\tau \dots \rangle_V = \frac{\langle \mathcal{T}_\tau \dots \hat{\sigma}(\beta) e^{-V} \rangle_0}{\langle \hat{\sigma}(\beta) e^{-V} \rangle_0}, \quad (14)$$

и при разложении в ряд $\mathcal{T}_\tau$ -экспоненты возникают, как обычно, средние от произведений X -операторов. Вычислим их, используя предложенную в [26] так называемую рекуррентную форму теоремы Вика. В соответствии с [26] результат спаривания произвольно взятого недиагонального оператора $X^{\sigma 0}(\tau)$ с остальными (при возвращении к усреднению с полным гамильтонианом) задается соотношением

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{T}_\tau X^{\sigma 0}(\tau) X^{\gamma_1}(\tau_1) \dots X^{\gamma_n}(\tau_n) \rangle = \\ = \sum_i g^{\sigma 0}(\tau - \tau_i) \langle \mathcal{T}_\tau X^{\gamma_1}(\tau_1) \dots [X^{\sigma 0}, X^{\gamma_i}]_{\tau_i}^\pm \dots X^{\gamma_n}(\tau_n) \rangle (-1)^{p_i} + \\ + \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta d\tau'' \sum_{\sigma_1} J_{\sigma_1}(\tau' - \tau'') \langle \mathcal{T}_\tau X^{\gamma_1}(\tau_1) \dots X^{\gamma_n}(\tau_n) \{ g^{\sigma 0}(\tau - \tau'') \times \\ \times [X^{\sigma 0}, a_{\sigma_1}^\dagger]_{\tau'}^+ a_{\sigma_1}(\tau'') - g^{\sigma 0}(\tau - \tau'') a_{\sigma_1}^\dagger(\tau') [X^{\sigma 0}, a_{\sigma_1}]_{\tau''}^+ \} \rangle + \end{aligned}$$

$$+ \int_0^\beta d\tau' g^{\sigma 0}(\tau - \tau') \langle \mathcal{T}_\tau X^{\gamma_1}(\tau_1) \dots X^{\gamma_n}(\tau_n) [X^{\sigma 0}, \widehat{V}]_{\tau'}^- \rangle. \quad (15)$$

Здесь множитель $(-1)^{p_i}$ определяется числом ферми-перестановок p_i оператора $X^{\sigma 0}(\tau)$ из исходного положения в положение непосредственно слева от оператора, с которым совершается спаривание; $g^{\sigma 0}(\tau)$ – невозмущенная функция Грина (в частотном представлении $g^{\sigma 0}(\omega_n) = (i\omega_n + \mu_\sigma)^{-1}$).

Соотношение (15) имеет смысл уравнения, связывающего средние от произведений X -операторов (в том числе функции Грина) с функциями высших порядков. Такого типа уравнения, характерные как для мацубаровских, так и для зубаревских двухвременных функций Грина (где они формируют известную, в частности, еще с работы Зубарева [34] бесконечную цепочку уравнений), получаются обычно в методе уравнений движения.

3. ОДНОУЗЕЛЬНАЯ ФЕРМИОННАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА

Применим соотношение (15) к функции Грина $\langle \mathcal{T}_\tau X^{\sigma 0}(\tau) X^{0\eta}(\tau') \rangle_V$ (здесь индексы σ и η могут принимать значения A или B). Используем явные выражения для коммутаторов (антикоммутаторов) и примем во внимание, что $[X^{\sigma 0}, a_{\sigma 1}^\dagger]^+ \rightarrow 0$ в отсутствии двукратно заполненных состояний (здесь $v_0 \equiv v_{00}$, $v_\sigma \equiv v_{\sigma\sigma}$, $v \equiv v_{BA}$, $\bar{v} \equiv v_{AB}$). Выражая корреляторы $\langle \mathcal{T}_\tau X^{\sigma 0}(\tau_1) (X^{00} + X^{\sigma\sigma})_{\tau_2} X^{0\eta}(\tau') \rangle$ и $\langle \mathcal{T}_\tau X^{\sigma\bar{\sigma}}(\tau_1) \times X^{\sigma\bar{\sigma}}(\tau_2) X^{0\eta}(\tau') \rangle$ через исходную функцию Грина с помощью функциональных производных по полям v_γ , получим для нее уравнение (см. [26]), которое в матричном представлении имеет простой вид

$$\hat{g}^{-1} \widehat{G} + \hat{A}_0 \hat{J} \widehat{G} + \hat{A}' \hat{J} \widehat{G} = -\hat{A}_0. \quad (16)$$

Здесь

$$\widehat{G}(\tau, \tau') = \begin{pmatrix} G_V^{B0,0B} & G_V^{B0,0A} \\ G_V^{A0,0B} & G_V^{A0,0A} \end{pmatrix}, \quad \hat{J}(\tau, \tau') = \begin{pmatrix} J_B(\tau - \tau') & 0 \\ 0 & J_A(\tau - \tau') \end{pmatrix}, \quad (17)$$

$G_V^{\sigma 0, 0\eta}(\tau, \tau') \equiv \langle \mathcal{T}_\tau X^{\sigma 0}(\tau) X^{0\eta}(\tau') \rangle_V$, $\hat{A}'$ – дифференциальный оператор,

$$\hat{A}'(\tau, \tau') = \delta(\tau - \tau') \begin{pmatrix} \frac{\delta}{\delta v_{0B}(\tau)} & \frac{\delta}{\delta v(\tau)} \\ \frac{\delta}{\delta \bar{v}(\tau)} & \frac{\delta}{\delta v_{0A}(\tau)} \end{pmatrix}, \quad \frac{\delta}{\delta v_{0\sigma}} = \frac{\delta}{\delta v_0} + \frac{\delta}{\delta v_\sigma}; \quad (18)$$

матрица $\hat{A}_0 = \hat{A}' \Phi_V$ является результатом действия оператора $\hat{A}'$ на производящий функционал Φ_V . Введена также матрица обратной невозмущенной функции Грина

$$\begin{aligned} \hat{g}^{-1}(\tau, \tau') = & \begin{pmatrix} (g^{B0})^{-1}(\tau - \tau') & 0 \\ 0 & (g^{A0})^{-1}(\tau - \tau') \end{pmatrix} + \\ & + \begin{pmatrix} v_0(\tau) - v_B(\tau) & -\bar{v}(\tau) \\ -v(\tau) & v_0(\tau) - v_A(\tau) \end{pmatrix} \delta(\tau - \tau'). \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь (и ниже) произведение матриц содержит интегрирование по внутреннему временному аргументу.

Перейдем по аналогии с функцией (3) от функции Грина $\widehat{G}$ к ее неприводимой по Ларкину части $\widehat{\Xi}$. Переписывая уравнение (16) в форме функционального дифференциального уравнения, где оператор $\hat{A}'$ действует на обратную матричную функцию Грина $\widehat{G}^{-1}$, мы можем получить уравнение для обратной неприводимой части [26]

$$\widehat{\Xi}^{-1} = \widehat{G}_0^{-1} + \hat{A}_0^{-1} \overrightarrow{\hat{A}' \hat{J} \widehat{G} \widehat{\Xi}^{-1}}, \quad (20)$$

где $\widehat{G}_0^{-1} = -\hat{A}_0^{-1} \hat{g}^{-1}$ (здесь линия со стрелкой указывает матричную функцию, на которую действует дифференциальный оператор).

Уравнение (20) по своей структуре соответствует подобным уравнениям в методе производящего функционала для неприводимых частей функций Грина для моделей магнетиков или сильно коррелированных электронных систем [28]–[31]. Его решение можно искать, используя итерационную процедуру, в виде разложения, в котором слагаемые содержат разное число множителей $\hat{J}$.

Рассмотрим более детально первую итерацию. В этом случае

$$\widehat{\Xi}^{-1} = \widehat{G}_0^{-1} + \hat{A}_0^{-1} \overrightarrow{\hat{A}' \hat{J} \widehat{G} \widehat{G}_0^{-1}}. \quad (21)$$

Полагая в конечном результате флуктуирующие поля равными нулю ($v_\gamma \rightarrow 0$), для функции $(\widehat{\Xi}^{-1})_{11}$ в частотном представлении получаем

$$(\widehat{\Xi}^{-1})_{11}(\omega_n) = \frac{1}{A_{0B}} \left\{ (g^{B0})^{-1}(\omega_n) [1 - Q_B(\omega_n) - N_B(\omega_n)] + \frac{1}{A_{0A}} \tilde{S}_B \right\}. \quad (22)$$

Здесь

$$Q_B(\omega_n) = \left(\frac{\delta \Phi_V}{\delta v_{0A}} \right)^{-2} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} e^{i\omega_m 0^+} J_B(\omega_m) G_c^{0B}(\omega_m - \omega_n), \quad (23)$$

$$N_B(\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} e^{i\omega_m 0^+} J_A(\omega_m) G_A(\omega_m) G^{AB}(\omega_m - \omega_n) \frac{1}{D}, \quad (24)$$

$$\tilde{S}_B = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} e^{i\omega_m 0^+} J_A(\omega_m) G_A(\omega_m), \quad (25)$$

причем $D = D(\tau)|_{v=0}$, где

$$D(\tau) = \frac{\delta \Phi_V}{\delta v_{0B}(\tau)} \frac{\delta \Phi_V}{\delta v_{0A}(\tau)} - \frac{\delta \Phi_V}{\delta v(\tau)} \frac{\delta \Phi_V}{\delta \bar{v}(\tau)}. \quad (26)$$

Бозонная функция Грина G^{AB} магнного типа и кумулянтная функция G_c^{0B} суть вторые производные функционала Φ_V :

$$\frac{\delta^2 \Phi_V}{\delta \bar{v}(\tau) \delta v(\tau_2)} = G^{AB}(\tau - \tau_2) \equiv \langle \mathcal{T}_\tau X^{AB}(\tau) X^{BA}(\tau_2) \rangle, \quad (27)$$

$$\left. \frac{\delta^2 \Phi_V}{\delta v_{0B}(\tau) \delta v_{0B}(\tau_4)} \right|_{v=0} = \langle \mathcal{T}_\tau (X^{00} + X^{BB})_\tau (X^{00} + X^{BB})_{\tau_4} \rangle -$$

$$- \langle \mathcal{T}_\tau (X^{00} + X^{BB})_{\tau} \rangle \langle \mathcal{T}_\tau (X^{00} + X^{BB})_{\tau_4} \rangle \equiv G_c^{0B}(\tau - \tau_4). \quad (28)$$

Выражение (22) для $\hat{\Xi}^{-1}$, полученное в результате первой итерации, содержит формально слагаемые первого порядка по J . Вместе с тем в них входят полные бозонные функции G^{AB} , G_c^{0B} и фермионная функция $G_A \equiv G_V^{A0,0A}|_{v \rightarrow 0}$, которые должны определяться самосогласованно с использованием уравнений (3) и (4). Чтобы замкнуть систему уравнений, необходимо дополнить ее выражениями для бозонных функций G^{AB} , G_c^{0B} ; эти выражения дают функциональную связь бозонных функций с фермионными функциями и когерентным потенциалом. На процедуре расчета бозонной функции G^{AB} в используемом подходе мы остановимся ниже (раздел 5), а сначала рассмотрим упрощенную схему, которая приводит к предложенному ранее в [9], [32] ГНЗ-приближению, являющемуся обобщением известного приближения Хаббард-III [35].

4. ГНЗ-ПРИБЛИЖЕНИЕ

В этом разделе мы покажем, как перейти от первой итерации для $\hat{\Xi}^{-1}$ в методе производящего функционала к ГНЗ-приближению и к соответствующему выражению для одноузельной функции Грина $G_B \equiv G_V^{B0,0B}|_{v \rightarrow 0}$, полученному при использовании метода уравнений движения и разновременных расщеплений [9], [32].

С этой целью возьмем в (22) фермионные и бозонные функции в нулевом приближении:

$$\begin{aligned} G^{AB}(\omega_m) &\approx \langle X^{AA} - X^{BB} \rangle g^{AB}(\omega_m), \\ G_c^{0B}(\omega_m) &\approx \beta \delta(\omega_m) A_{0B} (1 - A_{0B}), \end{aligned} \quad (29)$$

$$G_A(\omega_m) \approx A_{0A} g^{A0}(\omega_m), \quad G_B(\omega_m) \approx A_{0B} g^{B0}(\omega_m), \quad (30)$$

$$g^{pq} = \frac{1}{i\omega - \lambda_{pq}}, \quad \lambda_{pq} = \lambda_p - \lambda_q, \quad (31)$$

где λ_p , λ_q – собственные значения невозмущенного одноузельного гамильтониана; $A_{0\sigma} = \langle X^{00} + X^{\sigma\sigma} \rangle$. Путем несложных преобразований получим приближенное выражение для $(\hat{\Xi})_{11}^{-1}$, а затем в соответствии с (3) и одноузельную функцию Грина G_B [26]:

$$G_B(\omega_n) = \frac{A_{0B}}{(g^{B0})^{-1}(\omega_n) - \frac{P_B(\omega_n)}{A_{0B}} + \frac{\tilde{S}_B}{A_{0B}} - J_B(\omega_n)}. \quad (32)$$

Здесь

$$P_B(\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} e^{i\omega_m 0^+} J_A(\omega_m) \frac{\langle X^{AA} - X^{BB} \rangle}{i\omega_m - i\omega_n - \lambda_{AB}} \quad (33)$$

– функция, которая в диаграммном изображении соответствует петле, содержащей линии когерентного потенциала J_A и невозмущенной бозонной функции g^{AB} , идущие в противоположных направлениях:

$$P_B(\omega_n) = \langle X^{AA} - X^{BB} \rangle \times \text{---} \bullet \begin{array}{c} \xrightarrow{J_A} \\ \text{---} \triangle_{AB} \text{---} \\ \xleftarrow{\quad} \end{array} \bullet \text{---} . \quad (34)$$

Здесь линия со стрелкой – когерентный потенциал J_A , линия с треугольником – невозмущенная функция g^{AB} .

Записывая когерентный потенциал J_σ в представлении Лемана,

$$J_\sigma(\omega_n) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im } J_\sigma(\omega' + i\eta) d\omega'}{i\omega_n - \omega'}, \quad (35)$$

и суммируя по частоте ω_m , получим

$$\begin{aligned} P_B(\omega_n) &= \frac{\langle X^{AA} + X^{BB} \rangle}{2} J_A(i\omega_n + \lambda_{AB}) + \frac{\langle X^{AA} - X^{BB} \rangle}{2} Y_B(\omega_n), \\ Y_B(\omega_n) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{[-2 \text{Im } J_A(\omega' + i0^+)]}{i\omega_n - \omega' + \lambda_{AB}} \text{th } \frac{\beta\omega'}{2}. \end{aligned} \quad (36)$$

Формула (32), в которую подставлены формулы (36), совпадает с выражением для функции G_B , полученным в ГНЗ-приближении в работе [9] (имеется соответствие $P_B(\omega_n) \leftrightarrow -R_B(\omega)$; $\tilde{S}_B \leftrightarrow -V_A \varphi_B$ в принятых там обозначениях). Если пренебречь функцией P_B , выражение (32) сводится к приближению модифицированного сплава (см. работу [36]).

5. БОЗОННАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА

Процедура расчета обратной неприводимой части $\hat{\Xi}^{-1}$ согласно формуле (22) включает определение бозонной функции Грина $G^{AB}(\omega_n)$. При переходе к ГНЗ-приближению используется невозмущенная функция $G_0^{AB}(\omega_n)$. Более строгий подход может базироваться на получении этой функции в виде функционала, зависящего от когерентного потенциала и фермионной функции Грина, с последующим самосогласованным ее расчетом. В методе производящего функционала можно использовать для этой цели способ, предложенный в [31], в основе которого лежит дифференцирование по полям средних от соответствующих бозонных операторов Хаббарда.

Для среднего $\langle T_\tau X^{AB}(\tau) \rangle$ используем рекуррентную форму (типа (15)) теоремы Вика. Действуя с левой стороны обратной функцией $(g^{AB})^{-1}(\tau'' - \tau)$, дифференцируя по полю $v(\tau')$ и полагая после этого фиктивные поля равными нулю, придем к уравнению

$$\begin{aligned} \int_0^\beta d\tau (g^{AB})^{-1}(\tau'' - \tau) \langle T_\tau X^{AB}(\tau) X^{BA}(\tau') \rangle &= \delta(\tau'' - \tau') \langle T_\tau (X^{AA} - X^{BB})_{\tau''} \rangle + \\ &+ \int_0^\beta d\tau_2 J_B(\tau_2 - \tau'') \frac{\delta}{v(\tau')} \langle T_\tau X^{A0}(\tau'') X^{0B}(\tau_2) \rangle \Big|_{v \rightarrow 0} - \\ &- \int_0^\beta d\tau_2 J_A(\tau'' - \tau_2) \frac{\delta}{v(\tau')} \langle T_\tau X^{A0}(\tau_2) X^{0B}(\tau'') \rangle \Big|_{v \rightarrow 0}. \end{aligned} \quad (37)$$

С другой стороны, уравнение для этой же функции $\langle T_\tau X^{AB}(\tau) X^{BA}(\tau') \rangle$ можно получить, дифференцируя среднее от оператора $\langle T_\tau X^{BA}(\tau') \rangle$ по полю $\bar{v}(\tau)$. В этом случае будем иметь

$$\int_0^\beta d\tau' \langle T_\tau X^{AB}(\tau) X^{BA}(\tau') \rangle (g^{AB})^{-1}(\tau' - \tau'') = \delta(\tau'' - \tau) \langle T_\tau (X^{AA} - X^{BB})_{\tau''} \rangle -$$

$$\begin{aligned}
& - \int_0^\beta d\tau_2 J_A(\tau_2 - \tau'') \frac{\delta}{\bar{v}(\tau)} \langle \mathcal{T}_\tau X^{B0}(\tau'') X^{0A}(\tau_2) \rangle \Big|_{V \rightarrow 0} + \\
& + \int_0^\beta d\tau_2 J_B(\tau'' - \tau_2) \frac{\delta}{\bar{v}(\tau)} \langle \mathcal{T}_\tau X^{B0}(\tau_2) X^{0A}(\tau'') \rangle \Big|_{V \rightarrow 0}.
\end{aligned} \quad (38)$$

Решения уравнений (37) и (38) совпадают, если вариационные производные по фиктивным полям найдены точно. Если используются аппроксимации, результат в общем случае зависит от выбора под знаком среднего исходного недиагонального оператора.

Перенесем операцию дифференцирования в (37) или (38) на обратную фермионную функцию Грина $\hat{G}^{-1}$ (как это сделано в [28]–[30], см. также [31]) и воспользуемся тем, что в нулевом по $\hat{J}$ приближении

$$\frac{\delta}{\delta v} (\hat{\Xi}^{-1})_{21} = -[\hat{A}'_{12}(\hat{A}_0^{-1})_{21}](\hat{g}^{-1})_{11} - (\hat{A}_0^{-1})_{22}[\hat{A}'_{12}(\hat{g}^{-1})_{21}]. \quad (39)$$

В результате получим

$$\begin{aligned}
& \int_0^\beta d\tau_2 J_A(\tau'' - \tau_2) \frac{\delta}{v(\tau')} \langle \mathcal{T}_\tau X^{A0}(\tau_2) X^{0B}(\tau'') \rangle \approx \\
& \approx \int_0^\beta \frac{d\tau_2 d\tau_3 d\tau_4}{D} J_A(\tau'' - \tau_2) G^{A0}(\tau_2 - \tau_3) G^{AB}(\tau_3 - \tau') \times \\
& \quad \times (g^{B0})^{-1}(\tau_3 - \tau_4) G^{B0}(\tau_4 - \tau'') - \\
& \quad - \int_0^\beta d\tau_2 d\tau_3 d\tau_4 J_A(\tau'' - \tau_2) G^{A0}(\tau_2 - \tau_3) \delta(\tau_3 - \tau') \delta(\tau_3 - \tau_4) \times \\
& \quad \times G^{B0}(\tau_4 - \tau'') \frac{\langle X^{00} + X^{BB} \rangle}{D}, \quad G^{\sigma 0} \equiv G_\sigma.
\end{aligned} \quad (40)$$

Используя данный прием в уравнениях (37) и (38) и переходя к частотному представлению, мы можем легко найти их решения и представить искомую функцию Грина в виде

$$G^{AB}(\omega_n) = \frac{\langle X^{AA} - X^{BB} \rangle - R(\omega_n)}{(g^{AB})^{-1} - M(\omega_n)}, \quad (41)$$

где функция $R(\omega_n)$ в числителе имеет смысл концевой части, а $M(\omega_n)$ – массовый оператор. Явный вид этих функций зависит от приближения и выбора исходного оператора при записи уравнений. Ниже мы приводим полученные результаты для случая $J_B = 0$ (ФК-предел), рассматривая оба варианта; при этом используется диаграммное представление.

1. Уравнение (37); исходное среднее $\langle \mathcal{T}_\tau X^{AB} \rangle$:

$$R^{(1)}(\omega_n) = \frac{1}{A_{0A}} \times \left[\text{Diagram} \right], \quad (42)$$

$$M^{(1)}(\omega_n) = \frac{1}{A_{0A}A_{0B}} \times \left[\text{Diagram} \right]. \quad (43)$$

2. Уравнение (38); исходное среднее $\langle T_\tau X^{BA} \rangle$:

$$R^{(2)}(\omega_n) = \frac{1}{A_{0B}} \times \left[\text{Diagram} \right], \quad (44)$$

$$M^{(2)}(\omega_n) = \frac{1}{A_{0A}A_{0B}} \times \left[\text{Diagram} \right]. \quad (45)$$

На приведенных диаграммах двойные линии соответствуют полным функциям Грина (их конкретный вид указан в треугольнике); пунктирные линии обозначают обратную невозмущенную функцию g^{-1} .

Два набора функций $R^{(1)}$, $M^{(1)}$ и $R^{(2)}$, $M^{(2)}$ формируют несколько разные приближения. Аналогично [31] можно также использовать следующие симметризированные выражения для $R(\omega_n)$ и $M(\omega_n)$:

$$M(\omega_n) = \frac{M^{(1)}(\omega_n) + M^{(2)}(\omega_n)}{2}, \quad R(\omega_n) = \frac{R^{(1)}(\omega_n) + R^{(2)}(\omega_n)}{2}. \quad (46)$$

6. СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПЛОТНОСТИ

ρ_B И ρ_{AB} В ФК-ПРЕДЕЛЕ ($t_B = 0$)

Мы рассчитываем спектральные функции, выражающиеся через мнимые части соответствующих функций Грина, для фермионной и бозонной ветвей спектра численно на основании полученных выше уравнений. Расчет выполняется на действительных непрерывных частотах, для этого используется аналитическое продолжение $i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$.

Чтобы вычислить сумму

$$I(\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} J_A(\omega_m) G^{A0}(\omega_m) G^{B0}(\omega_m - \omega_n), \quad (47)$$

которая соответствует петле функций Грина на диаграмме (42), применим аналогично (35) представление Лемана. Разлагая затем на простые дроби и суммируя по

нечетным (фермиевским) частотам, после замены $i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$ получим

$$I(\omega + i0^+) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'' \frac{\text{Im } A(\omega + \omega'' + i0^+)}{e^{\beta(\omega + \omega'')} + 1} G^{B0}(\omega'' - i0^+) - \\ - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'' \frac{\text{Im } G^{B0}(\omega'' + i0^+)}{e^{\beta\omega''} + 1} A(\omega + \omega'' + i0^+), \quad (48)$$

где $A(\omega_m) = J_A(\omega_m)G^{A0}(\omega_m)$. Другие суммы по частотам в аналитических выражениях для диаграмм (43) и (45) преобразуются в интегралы по частотам с помощью аналогичной процедуры. При этом, чтобы ее использовать в случае (43), необходимо разбить произведение $(g^{B0})^{-1}(\omega_m)G^{B0}(\omega_m)$ на слагаемые: $(g^{B0})^{-1}G^{B0} = \langle X^{00} + X^{BB} \rangle - \widetilde{M}_B G^{B0}$, введя согласно уравнению Дайсона массовый оператор $\widetilde{M}_B$ для функции Грина G^{B0} (явное выражение для $\widetilde{M}_B$ можно получить из формулы (32)).

Для расчета фермионной функции Грина используется выражение (32), которое возникает в методе одновременных расщеплений. Однако в этом случае бозонные функции Грина, которые в [26] были взяты в нулевом приближении (34), рассчитываются на основе уравнений, полученных в методе производящего функционала. Поэтому выражение для функции $P_B(\omega_n)$ записывается в следующем виде:

$$P_B(\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} e^{i\omega_m 0^+} J_A(\omega_m) G^{AB}(\omega_m - \omega_n). \quad (49)$$

Данная функция представляется в виде интеграла по частоте аналогично (48) (с учетом бозе-распределения при суммировании по четным частотам):

$$P_B(\omega + i0^+) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'' \frac{\text{Im } J(\omega + \omega'' + i0^+)}{e^{\beta(\omega + \omega'')} + 1} G^{AB}(\omega'' - i0^+) + \\ + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'' \frac{\text{Im } G^{AB}(\omega'' + i0^+)}{e^{\beta\omega''} - 1} J_A(\omega + \omega'' + i0^+). \quad (50)$$

В результате полная система уравнений, которая решается самосогласованно, формируется уравнением для $G^{AB}(\omega)$ (41), где функции $R(\omega)$, $M(\omega)$ определяются с помощью процедуры, аналогичной (48), уравнениями для $G_A(\omega)$, $G_B(\omega)$ (32) (при этом для $G_A(\omega)$ производится замена индексов $A \leftrightarrow B$), соотношением (50) и выражением для $\widetilde{S}_B$,

$$\widetilde{S}_B = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{e^{\beta\omega} + 1} \text{Im}[J_A(\omega + i0^+)G_A(\omega + i0^+)]. \quad (51)$$

Ниже при численных расчетах мы ограничиваемся случаем $J_B = 0$ (ФК-предел); функция $G_A(\omega)$ определяется при этом простым выражением

$$G_A(\omega) = \frac{A_{0A}}{\omega + \mu_A - J_A(\omega)}, \quad (52)$$

являющимся точным [3], [9]. Систему дополняет уравнение, вытекающее из уравнений (3) и (4), которое дает общую связь одноузельной функции G_A с когерентным

потенциалом J_A ; вид этой связи зависит от типа кристаллической решетки. В случае решетки Бете с полуэллиптической плотностью состояний

$$\rho_\sigma(\varepsilon) = \frac{2}{\pi W_\sigma^2} \sqrt{W_\sigma^2 - \varepsilon^2}, \quad (53)$$

где W_σ – полуширина невозмущенной зоны, имеется простая связь $J_\sigma(\omega) = W_\sigma^2 G_\sigma/4$ (в нашем случае $W_B = 0$). Окончательно система уравнений замыкается термодинамическими соотношениями, которые определяют концентрации частиц и дают их связь с химическими потенциалами:

$$n_\sigma = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{-\operatorname{Im} G_\sigma(\omega + i0^+)}{e^{\beta\omega} + 1}. \quad (54)$$

Заметим, что в случае ФК-модели зависимости химических потенциалов от концентраций можно рассчитать, не используя соотношений (54), поскольку известно точное выражение для термодинамического потенциала [37]–[39]. На основании этого факта было выполнено детальное исследование термодинамики модели в различных термодинамических режимах [32], [40], [41] (см. также [42], где рассмотрение проводилось с использованием псевдоспинового формализма). Известно, что ФК-модель может описывать фазовые переходы, связанные с фазовым расслоением, а также с появлением модулированных фаз при конечных значениях U [3], [41]. При $U \rightarrow \infty$ модулированные фазы исчезают, и остаются только переходы между однородными фазами. В частности, точные термодинамические соотношения на языке двухсортного решеточного газа были получены в пределе $U \rightarrow \infty$ в работе [32].

С другой стороны, имеются также точные методы расчета спектральных функций ρ_B локализованных частиц для ФК-модели [3], [43]. Вместе с тем из-за их громоздкости и вычислительных трудностей рассматривается в основном лишь симметричный случай половинного заполнения [43], [44]. Мы используем развитую в настоящей работе приближенную схему для исследования плотности состояний ρ_B в более широком диапазоне параметров, а точные термодинамические соотношения привлекаются для установления области применимости подхода.

Ранее в [9] путем сравнений с точными результатами для ФК-модели было установлено, что ГНЗ-приближение дает хорошее описание термодинамики модели (зависимостей химических потенциалов от концентраций) при высоких концентрациях локализованных частиц n_B и отрицательных значениях $\mu_A \lesssim 0$ химического потенциала подвижных частиц (что соответствует их низким концентрациям n_A). Это приближение давало также лучшие результаты при повышении температуры. В настоящей работе численные расчеты охватывают диапазон температур, включающий области термодинамической неустойчивости (фазовые переходы первого рода, расслоение фаз), а также температуры выше критических. В работе [32] путем анализа точных термодинамических соотношений для ФК-модели при $U \rightarrow \infty$ было установлено, что упомянутые фазовые переходы возможны при $T < T_c \approx 0.0601W_A$. Исходя из этих данных мы провели численный расчет фермионных и бозонных спектральных функций

$$\rho_B(\omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} G_B(\omega + i0^+), \quad (55)$$

$$\rho_{AB}(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im } G^{AB}(\omega + i0^+), \quad (56)$$

при трех температурах: $T = 0.02W_A$, $T = 0.06W_A$ и $T = 0.20W_A$. Были рассмотрены также три варианта нахождения бозонной функции Грина: 1) на основе функций $R^{(1)}$, $M^{(1)}$, см. формулы (42), (43); 2) на основе $R^{(2)}$, $M^{(2)}$, см. формулы (44), (45); 3) на основе их симметризованных выражений, см. формулу (46).

Рис. 1. Химический потенциал μ_B как функция концентрации n_B в приближении модифицированного сплава – штриховая линия, ГНЗ-приближении [9] – тонкая сплошная линия и в самосогласованном ГНЗ-приближении: вариант 1 – ■, вариант 2 – ▲, симметризованный вариант – ○; для сравнения приведен точный результат [32] – жирная сплошная линия. Параметры расчета: $\rho_\sigma^0(t)$ для решетки Бете, $W_A = 1$, $W_B = 0$.

На рис. 1 приведены зависимости $\mu_B(n_B)$, рассчитанные с помощью соотношений (54), в сравнении с точными результатами, полученными ранее термодинамическим путем [32], а также с результатами расчета $\mu_B(n_B)$ в приближении модифицированного сплава и ГНЗ-приближении [9]. Установлено, что при $\mu_A = -0.4$ наш самосогласованный расчет даже при низких температурах ($T = 0.02$) улучшает ГНЗ-приближение, и найденная зависимость $\mu_B(n_B)$ находится в хорошем соответствии с точной кривой, воспроизводя области метастабильных состояний и неустойчивости и описывая тем самым фазовый переход с достаточной точностью (заметим, что участки кривых с $\partial\mu_B/\partial n_B < 0$ на графиках при $T = 0.02$ соответствуют неустойчивости, связанной с упомянутым выше фазовым переходом первого рода, при котором изменяются скачком концентрации частиц). При $\mu_A = 0$ (что соответствует повышению концентрации подвижных частиц n_A по сравнению со случаем $\mu_A = -0.4$) остается проблема описания системы при низких концентрациях n_B . В этом случае мы имеем удовлетворительные результаты лишь при высоких температурах ($\mu_A = 0, T = 0.2$).

Кривые на рис. 2а иллюстрируют различные приближения для бозонных плотностей состояний, которые соответствуют первому или второму варианту выбора приоритетов при построении уравнений для функции G^{AB} , а также симметризованному варианту. Вид кривых в разных приближениях отличается; общим, однако, является то, что все они дают пик в окрестности $\omega + \mu_A - \mu_B = 0$. Имеется также довольно широкое фоновое размытие, соразмерное с полушириной W_A невозмущенной плотности зонных состояний. Следует также отметить, что в отличие от фермионной плотности состояний функция $\rho_{AB}(\omega)$ может менять знак.

Рис. 2. Бозонная плотность $\rho_{AB}(\omega)$ в разных приближениях: вариант 1 – тонкая сплошная линия, вариант 2 – штриховая линия, симметризованный вариант – жирная сплошная линия (а). Фермионная спектральная функция $\rho_B(\omega)$ в ГНЗ-приближении (штриховые линии) и в симметризованном варианте самосогласованного ГНЗ-приближения (сплошные линии) при разных концентрациях n_B (б).

Рис. 3. Спектральные функции $\rho_{AB}(\omega)$ и $\rho_B(\omega)$ при различных концентрациях n_B локализованных частиц (симметризованный вариант самосогласованного ГНЗ-приближения); параметры расчета: $T = 0.02$, $\mu_A = -0.4$.

Рис. 4. Спектральные функции $\rho_{AB}(\omega)$ и $\rho_B(\omega)$ при различных температурах (симметризованный вариант самосогласованного ГНЗ-приближения); параметры расчета: $n_B = 0.8$, $\mu_A = 0$.

Наилучшие термодинамические результаты дает вариант с симметризованными уравнениями (46), так как нельзя выделить, какой тип диаграмм ($M^{(1)}$ или $M^{(2)}$) является более важным; поэтому далее все результаты расчетов приводятся для симметризованного случая. На рис. 26 приведены графики для фермионной плотности $\rho_B(\omega)$ (плотности состояний неподвижных частиц), полученные путем самосогласованного расчета на основании системы уравнений (32), (41). Для сравнения показан также вид кривых $\rho_B(\omega)$ в обычном ГНЗ-приближении. Видно, что при концентрации $n_B = 0.8$, когда обычное ГНЗ-приближение дает хорошие термодинамические

результаты, кривые почти совпадают. С другой стороны, при $n_B = 0.1$ применение ГНЗ-приближения приводит для $\mu_B(n_B)$ к сильно отличающемуся от точного результату: спектр $\rho_B(\omega)$ получается сильно размытым. При этом самосогласованная схема (которую мы можем называть самосогласованным ГНЗ-приближением), улучшая существенно ход кривой $\mu_B(n_B)$ в этой области, дает одновременно узкий профиль плотности состояний ρ_B .

На основе анализа рассчитанных зависимостей $\mu_B(n_B)$ (рис. 1) можно выделить область значений параметров, при которых модифицированное ГНЗ-приближение приводит к удовлетворительным результатам (высокие температуры $T \gtrsim T_c$, не слишком низкие концентрации n_B , невысокие концентрации n_A ($\mu_A \lesssim 0$)). Выделив такие случаи, мы рассчитали поведение бозонной ρ_{AB} и фермионной ρ_B плотностей состояний при различных концентрациях n_B (рис. 3) или температурах (рис. 4). Из рис. 3 видно, что при возрастании n_B до значения 0.8 (что соответствует низкой концентрации подвижных частиц $n_A \sim 0.005$) бозонный спектр становится почти симметричным, а фермионный приближается по форме к невозмущенному спектру (дельта-пику). Однако даже в этом случае имеется, кроме резкого пика, довольно широкое фоновое размытие бозонной и фермионной функций. При уменьшении концентрации n_B (соответственно, увеличении n_A до $n_A \sim 0.22$ при $n_B = 0.1$) размытие становится больше, и спектры приобретают асимметричный вид.

Существенная асимметрия спектральных функций видна и на рис. 4, где приведены графики $\rho_{AB}(\omega)$ и $\rho_B(\omega)$ для случая $\mu_A = 0$ при различных температурах. Имеет место заметное уширение пиков и усиление фонового размытия при повышении температуры. Отметим, что приближенные плотности состояний удовлетворяют правилам сумм, а именно интеграл по частоте (площадь под кривой) равен $1 - n_A$ для фермионной функции $\rho_B(\omega)$ и равен $n_B - n_A$ для бозонной функции $\rho_{AB}(\omega)$. В отличие от фермионных плотностей состояний, знак бозонных плотностей может изменяться. В частности, при $n_B < n_A$ функция $\rho_{AB}(\omega)$ в основном отрицательна (см. рис. 3, случай $n_B = 0.1$); при этом в нулевом приближении, когда $(G^{AB})^0 = \langle X^{AA} - X^{BB} \rangle g^{AB}(\omega_n)$, функция $\rho_{AB}(\omega) \leq 0$ во всем интервале частот.

Как уже было отмечено выше, точные результаты для фермионных плотностей состояний частиц ФК-модели известны только в некоторых случаях (большинство результатов относится к симметричному случаю половинного заполнения). Это обусловлено тем, что при использовании точной схемы расчета возникают вычислительные проблемы при увеличении потенциала отталкивания U или при понижении температуры [44]. Поэтому мы можем сравнивать различные приближения с точными данными, лишь приближаясь к половинному заполнению. Такое сравнение в случае ГНЗ-приближения было сделано в [10] для АМХ-модели в ФК-пределе при конечных значениях U и $n_A = n_B = 0.5$, $\mu_A = \mu_B = U/2$. Было достигнуто лучшее согласие с точными данными работы [43] при достаточно высоких температурах и больших потенциалах U . Когда $U \rightarrow \infty$ и химические потенциалы конечны по модулю, верхняя хаббардовская подзона удаляется на бесконечность и остается лишь одна нижняя подзона; она и является предметом рассмотрения в настоящей работе.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сформулированный в работе подход к решению одноузельной задачи в методе динамического среднего поля направлен на развитие приближенной аналитической схемы расчета функций Грина электронных моделей с хаббардовскими взаимодействиями. Использование метода производящего функционала Каданова–Бейма позволяет получить систематическую итерационную процедуру определения неприводимых частей фермионных и бозонных одноузельных функций Грина путем формального разложения по степеням когерентного потенциала. При этом сами функции находятся из системы интегральных уравнений. Уже первая итерация дает результаты, которые являются обобщением полученных ранее в рамках метода уравнений движения (в картине вспомогательных фермионов) при использовании одновременного расщепления функций высшего порядка [9], [32].

Нулевое приближение по бозонной функции Грина, которая входит в неприводимую часть для фермионной функции, соответствует ГНЗ-приближению. Последнее было детально исследовано для АМХ в работах [9], [10], [32]. В ФК-пределе (когда $W_B \rightarrow 0$) мы сравнили наши результаты с результатами точных расчетов [9] при половинном заполнении. Как отмечалось выше, ГНЗ-приближение оказалось удовлетворительным при высоких T , а также при низких концентрациях n_A подвижных частиц и достаточно высоких концентрациях n_B локализованных частиц.

Самосогласованное ГНЗ-приближение основано на более полном учете вклада бозонных возбуждений (при $U \rightarrow \infty$ имеется лишь ветвь, описываемая спектральной плотностью ρ_{AB}); массовый оператор для бозонной функции Грина имеет однопетлевую структуру. Такой подход позволяет расширить область применения схемы ГНЗ-приближения. Остается тем не менее проблема описания спектра при низких T и в областях концентраций, недоступных данному приближению. Возможный путь улучшения теории может состоять, в частности, в переходе к высшим приближениям при расчете бозонной функции Грина, например, в духе обобщенного приближения хаотических фаз путем суммирования последовательностей петлевых вкладов в массовый оператор (в диаграммном представлении это может приблизить к структуре, получающейся при точном расчете одноузельной зарядовой восприимчивости в методе динамического среднего поля [45]).

Недостатком ГНЗ-приближения является также отсутствие в спектральных плотностях особенностей типа пика Кондо [10]. Попытка исправить эту ситуацию путем сложных одновременных расщеплений функций Грина была сделана Ешке и Котляром [21] в рамках метода уравнений движения. Как нами показано в [26], такой подход также можно рассматривать как обобщение ГНЗ-подхода, но иного рода: в этом случае эффективно учитываются вклады более высокого порядка по когерентному потенциалу в неприводимые части фермионных функций Грина. Систематический анализ таких вкладов является на данный момент нерешенной задачей.

Список литературы

- [1] Ю. А. Изюмов, *УФН*, **165**:4 (1995), 403.
- [2] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.*, **68** (1996), 13.

- [3] J. K. Freericks, V. Zlatić, *Rev. Mod. Phys.*, **75** (2003), 1333.
- [4] A. N. Kocharian, G. R. Reich, *J. Appl. Phys.*, **76** (1994), 6127.
- [5] D. Ueltschi, *J. Stat. Phys.*, **116** (2004), 681.
- [6] C. D. Batista, *Phys. Rev. Lett.*, **89** (2002), 166403.
- [7] G. Fáth, Z. Domański, R. Lemański, *Phys. Rev. B*, **52** (1995), 13910.
- [8] C. A. Macedo, A. M. C. de Souza, *Phys. Rev. B*, **65** (2002), 153109.
- [9] I. V. Stasyuk, O. B. Hera, *Phys. Rev. B*, **72** (2005), 045134.
- [10] I. V. Stasyuk, O. B. Hera, *Eur. Phys. J. B*, **48** (2005), 339.
- [11] W. Metzner, D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.*, **62** (1989), 324.
- [12] M. Jarrell, *Phys. Rev. Lett.*, **69** (1992), 168.
- [13] M. J. Rozenberg, X. Y. Zhang, G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.*, **69** (1992), 1236.
- [14] A. Georges, W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.*, **69** (1992), 1240.
- [15] M. Caffarel, W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.*, **72** (1994), 1545.
- [16] Q. Si, M. J. Rozenberg, G. Kotliar, A. E. Ruckenstein, *Phys. Rev. Lett.*, **72** (1994), 2761.
- [17] R. Bulla, *Adv. Solid State Phys.*, **40** (2000), 169.
- [18] K. Held, I. A. Nekrasov, G. Keller et al., *Psi-k Newsletter*, **56** (2003), 65.
- [19] A. Georges, *AIP Conf. Proc.*, **715** (2004), 3.
- [20] I. V. Stasyuk, *Condens. Matter Phys.*, **3**:2(22) (2000), 437.
- [21] H. O. Jeschke, G. Kotliar, *Phys. Rev. B*, **71** (2005), 085103.
- [22] X. Dai, K. Haule, G. Kotliar, *Phys. Rev. B*, **72** (2005), 045111.
- [23] A. M. Shvaika, *Phys. Rev. B*, **62** (2000), 2358.
- [24] N. E. Bickers, D. L. Cox, J. W. Wilkins, *Phys. Rev. B*, **36** (1987), 2036.
- [25] M. B. Zöfl, T. Pruschke, J. Keller et al., *Phys. Rev. B*, **61** (2000), 12810.
- [26] I. V. Stasyuk, O. B. Hera, *Condens. Matter Phys.*, **9**:3(47) (2006), 587.
- [27] L. P. Kadanoff, G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics*, Benjamin, New York, 1962.
- [28] Y. A. Izyumov, N. I. Chaschin, *Phys. Metals and Metallography*, **92** (2001), 451.
- [29] Y. A. Izyumov, N. I. Chaschin, *Phys. Metals and Metallography*, **92** (2001), 531.
- [30] Y. A. Izyumov, N. I. Chaschin, V. Y. Yushankhai, *Phys. Rev. B*, **65** (2002), 214425.
- [31] Y. A. Izyumov, N. I. Chaschin, D. S. Alexeev, F. Mancini, *Eur. Phys. J. B*, **45** (2005), 69.
- [32] I. V. Stasyuk, O. B. Hera, *Condens. Matter Phys.*, **6**:1(33) (2003), 127.
- [33] I. V. Stasyuk, A. M. Shvaika, *Ukr. J. Phys.*, **47** (2002), 975.
- [34] Д. Н. Зубаев, *УФН*, **71** (1960), 71.
- [35] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. Ser. A*, **281** (1964), 401.
- [36] M. Potthoff, T. Herrmann, T. Wegner, W. Nolting, *Physica Status Solidi (b)*, **210** (1998), 199.
- [37] U. Brandt, C. Mielsch, *Z. Phys. B*, **75** (1989), 365.
- [38] U. Brandt, C. Mielsch, *Z. Phys. B*, **79** (1990), 295.
- [39] U. Brandt, C. Mielsch, *Z. Phys. B*, **82** (1991), 37.
- [40] J. K. Freericks, C. Gruber, N. Macris, *Phys. Rev. B*, **60** (1999), 1617.
- [41] B. M. Letfulov, *Eur. Phys. J. B*, **11** (1999), 423.
- [42] I. V. Stasyuk, A. M. Shvaika, *J. Phys. Stud.*, **3** (1999), 177.
- [43] U. Brandt, M. P. Urbanek, *Z. Phys. B*, **89** (1992), 297.
- [44] J. K. Freericks, V. M. Turkowski, V. Zlatić, *Phys. Rev. B*, **71** (2005), 115111.
- [45] A. M. Shvaika, *Phys. C*, **341–348** (2000), 177.