

**МЕТОД ПРОИЗВОДЯЩЕГО ФУНКЦИОНАЛА
ДЛЯ МОДЕЛИ ХАББАРДА**

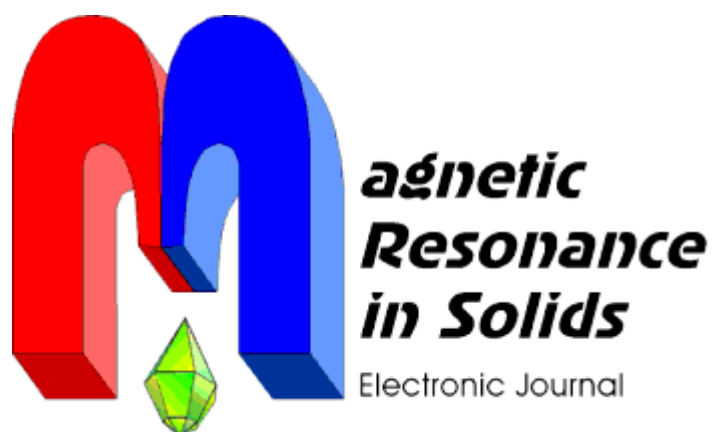
Ю.А. Изюмов, Н.И. Чащин, Д.С. Алексеев

Институт физики металлов УРО РАН, 620219 Екатеринбург

**GENERATING FUNCTIONAL APPROACH
TO THE HUBBARD MODEL**

Yu.A. Izyumov, N.I. Chaschin, D.S. Alexee

Institute for Metal Physics, S.Kovalevskoi, 18, 620219 Ekaterinburg, Russia



*Volume 6, No. 1,
pages 59-73, 2004*

<http://mrsej.ksu.ru>

МЕТОД ПРОИЗВОДЯЩЕГО ФУНКЦИОНАЛА ДЛЯ МОДЕЛИ ХАББАРДА

Ю.А. Изюмов, Н.И. Чашин, Д.С. Алексеев
Институт физики металлов УРО РАН, 620219 Екатеринбург

Для модели Хаббарда в условиях сильных корреляций развивается метод производящего функционала, позволяющий получить уравнения для электронной функции Грина с вариационными производными по флуктуирующим полям. Метод представляет обобщение подхода Каданова-Бейма, разработанного для обычных ферми-систем, к сильно коррелированным системам, описываемым операторами (X -операторами Хаббарда), не коммутирующими на c -число. В точных уравнениях для функций Грина выделены уравнения среднего поля, учитывающие вклад статических флуктуаций спина и заряда. Устанавливается связь этих уравнений с уравнениями, возникающими в методе композитных операторов. Показано, что двухполюсная функция Грина в приближении среднего поля описывает существенные черты квазичастичного спектра и его эволюцию при изменении электронной концентрации n и величины кулоновского отталкивания U на узле. При половинном заполнении с изменением U возникает фазовый переход металл-диэлектрик при критическом значении $U \approx 1.37W$, где W – ширина затравочной зоны.

GENERATING FUNCTIONAL APPROACH TO THE HUBBARD MODEL

Yu.A. Izyumov, N.I. Chaschin, D.S. Alexeev
Institute for Metal Physics, S.Kovalevskoi, 18, 620219 Ekaterinburg, Russia

Method of generating functional is developed for the Hubbard model in the case of strong electron correlations. The method is a generalization of the Kadanoff-Baym approach, suggested earlier for conventional fermi-systems, to highly correlated systems. The method deals with equations for electron Green's functions in terms of variational derivatives with respect to fluctuating fields. In the exact equations a mean-field approximation is suggested with taking into account the static fluctuations of charge and spin. Interrelation between this method and the method of composite operators is established. It is shown that a two-poles approximation for the electronic Green's function describes essential features of quasiparticle spectrum and its evolution when changing electron concentration n and on-site Coulomb interaction U . At half-filling ($n = 1$) at $U = U_c \approx 1.37W$ (W – width of the bare electron band) a phase transition metal-insulator occurs.

1. Введение

Модель Хаббарда [1] является одной из базовых моделей в теории сильно коррелированных систем. Несмотря на ее простоту (гамильтониан модели содержит лишь два параметра: ширину W затравочной электронной зоны и кулоновское отталкивание U электронов на одном узле), теоретическое исследование модели в условиях сильной корреляции ($U \geq W$) представляет очень сложную задачу. За сорок лет исследования модели предложено множество подходов: метод расщепления функций Грина (ФГ) [1], линейаризация уравнений движения [2], метод композитных операторов СОМ [3-5], метод моментов [6], вариационный метод [7] и многие другие. В последние годы успешно применяется приближение динамического среднего поля (DMFT) [8], метод вспомогательных бозонов [9] и ряд вычислительных методов: квантовый метод Монте Карло, линейаризация малых кластеров. DMFT и численные методы вскрыли основные черты квазичастичного спектра и фазовой диаграммы модели в условиях сильной корреляции. В рамках этих подходов некоторые расширения простейшей невырожденной модели Хаббарда успешно применяются для описания реальных сильно коррелированных систем.

Ни один из перечисленных аналитических методов не является универсальным, поэтому существует потребность в развитии новых подходов, которые смогли бы осветить проблему с иной стороны. Уже давно было понятно, что при $U \geq W$ удобно работать не с обычными ферми-операторами, но с некоторыми их конструкциями (композиционными операторами), описывающими движение коррелированных электронов по решетке. Одними из таких операторов являются X -операторы Хаббарда. В терминах X -операторов гамильтониан модели записывается так, что сильное кулоновское взаимодействие описывается простейшим образом, а перескок электронов по решетке – более сложным, но в условиях $U \gg W$ он может рассматриваться по теории возмущений. Таким образом, использование X -операторов удобно для формулировки "теории возмущений вблизи атомного предела".

Используя формализм X -операторов, мы развиваем метод производящего функционала (generating functional approach – GFA). Идея метода состоит в том, чтобы ввести взаимодействие с флуктуирующими полями, путем соответствующего обобщения статистической суммы. Тогда реальные ФГ модели выражаются через вариационные производные от производящего функционала (обобщенной статистической суммы) по флуктуирующим полям. В итоге для ФГ мы получаем уравнения в вариационных производных, которые можно решать с помощью итераций по параметру W/U . Наш подход представляет обобщение метода Каданова-Бейма [10], предложенного ранее для обычных ферми-систем, на сильно коррелированные системы, которые описываются операторами, не коммутирующими на c -число. Недавно мы применили такой подход к целому ряду спиновых и электронных моделей: модели Гайзенберга, sd -модели, модели двойного обмена, tJ -модели, периодической модели Андерсона и модели Хаббарда в пределе $U \rightarrow \infty$ [11-16]. В настоящей работе мы развиваем GFA для общей модели Хаббарда с произвольным U . Мы выводим уравнения для электронной ФГ в терминах вариационных производных по флуктуирующим полям. Уравнения имеют матричную структуру и сразу предусматривают возможность состояний с расщепленной электронной зоной на хаббардовские подзоны. Путем двух итераций по параметру W/U мы формулируем приближение среднего поля для электронной ФГ, которое непосредственным образом учитывает статические флуктуации заряда и спина, описывает сдвиг электронных подзон и их ширину за пределами Хаббард-I приближения. Динамические флуктуации электронов с бозонными возбуждениями приводят к поправке в собственной энергии, соответствующей самосогласованному борновскому приближению (SCBA). Численное решение уравнений среднего поля дает картину квазичастичного спектра и его эволюцию в зависимости от величины U и электронной концентрации n .

2. Производящий функционал модели

Рассмотрим стандартную невырожденную модель Хаббарда. В терминах обычных ферми-операторов гамильтониан модели записывается следующим образом:

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \tag{2.1}$$

где $c_{i\sigma} (c_{i\sigma}^+)$ – оператор уничтожения (рождения) электрона на узле i со спином σ , $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$ оператор числа электронов на узле с соответствующей проекцией спина. В условиях сильного кулоновского отталкивания на одном узле $U > zt$ (где t – матричный элемент перескока для ближайших соседей и z – координационное число) удобно выразить гамильтониан (2.1) в терминах X -операторов. Оператор X_i^{pq} для узла i описывает переходы между четырьмя возможными состояниями $p = |0\rangle, |\sigma\rangle, |\bar{\sigma}\rangle, |2\rangle$: без электрона, с одним электроном с проекцией спина σ или $-\sigma$ и состояние с парой электронов, соответственно.

X -операторы могут быть выражены через обычные ферми-операторы с помощью соотношений

$$\begin{aligned} X_i^{\sigma 0} &= c_{i\sigma}^+ (1 - n_{i\bar{\sigma}}), & X_i^{2\sigma} &= \sigma c_{i\bar{\sigma}}^+ n_{i\sigma}, \\ X_i^{\sigma\bar{\sigma}} &= c_{i\sigma}^+ c_{i\bar{\sigma}}, & X_i^{20} &= \sigma c_{i\bar{\sigma}}^+ c_{i\sigma}^+, \\ X_i^{\sigma\sigma} &= n_{i\sigma} (1 - n_{i\bar{\sigma}}), & X_i^{22} &= n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}}, \\ X_i^{00} &= (1 - n_{i\sigma})(1 - n_{i\bar{\sigma}}). \end{aligned} \tag{2.2}$$

Операторы $X_i^{\sigma 0}$ и $X_i^{2\sigma}$ описывают коррелированное рождение электрона и являются ферми-подобными f -операторами; $X_i^{\sigma\bar{\sigma}}$ и X_i^{20} описывают переворот спина на узле и рождение пары (бозе-подобные b -операторы). В последних двух строчках представлены диагональные в пространстве узельных состояний X -операторы. Заметим, что эрмитово-сопряженные операторы определяются соотношением $(X_i^{pq})^+ = X_i^{qp}$. Таким образом, имеется шестнадцать X -операторов, действующих в пространстве узельных состояний. Алгебра X -операторов задается соотношением

$$X_i^{rs} X_i^{pq} = \delta_{sp} X_i^{rq}, \quad (2.3)$$

а также перестановочными соотношениями антикоммутаторного типа для f -операторов и коммутаторного для b -операторов. Обычные электронные операторы являются линейными комбинациями ферми-подобных X -операторов

$$c_{i\sigma}^+ = X_i^{\sigma 0} - \sigma X_i^{2\bar{\sigma}}, \quad c_{i\sigma} = X_i^{0\sigma} - \sigma X_i^{\bar{\sigma} 2}. \quad (2.4)$$

Данные выражения отражают коррелированный характер движения электронов в двух хаббардовских подзонах.

Удобно ввести двухкомпонентные спиноры из f -операторов:

$$\Psi(i\sigma) = \begin{pmatrix} X_i^{0\sigma} \\ \bar{\sigma} X_i^{\bar{\sigma} 2} \end{pmatrix}, \quad \Psi^+(i\sigma) = (X_i^{\sigma 0} \quad \bar{\sigma} X_i^{2\bar{\sigma}}). \quad (2.5)$$

Тогда гамильтониан (2.1) представляется в виде $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$, где

$$\mathcal{H}_0 = \sum_i \left(\sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma} + \varepsilon_2 X_i^{22} \right), \quad (2.6)$$

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{ij} \sum_{\sigma} \sum_{\alpha_1 \alpha_2} \Psi_{\alpha_1}^+(i\sigma) t_{\alpha_1 \alpha_2}(ij) \Psi_{\alpha_2}(j\sigma). \quad (2.7)$$

Здесь мы добавили в определение гамильтониана (2.1) член $-\mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}$, где μ – химический потенциал; с учетом

этого обстоятельства получим: $\varepsilon_{\sigma} = -\sigma h/2 - \mu$, $\varepsilon_2 = U - 2\mu$. В квадратичной форме (2.7) $\Psi_{\alpha}(i\sigma)$ представляет компоненту спинора $\Psi(i\sigma)$, ($\alpha = 1, 2$), кроме того мы ввели матрицу

$$t_{\alpha\beta}(ij) = t_{ij} \mathfrak{T}_{\alpha\beta}, \quad \mathfrak{T} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

Спинорный индекс α указывает номер хаббардовской подзоны. С помощью известного правила умножения (2.3) X -операторов легко записать перестановочные соотношения для спинорных f -операторов:

$$\left. \begin{aligned} [\Psi(i\sigma) \otimes \Psi^+(j\sigma)]_+ &= \delta_{ij} F_i^{\sigma} \\ [\Psi(i\sigma) \otimes \Psi^+(j\bar{\sigma})]_+ &= \delta_{ij} X_i^{\bar{\sigma}\sigma} \tau^z \\ [\Psi(i\sigma) \otimes \Psi(j\bar{\sigma})]_+ &= \delta_{ij} \sigma X_i^{02} (i\tau^y) \end{aligned} \right\}, \quad (2.9)$$

где τ^x, τ^y, τ^z – матрицы Паули, а F_i^{σ} – двухрядная матрица, составленная из диагональных X -операторов:

$$F_i^{\sigma} = \begin{pmatrix} X_i^{00} + X_i^{\sigma\sigma} & 0 \\ 0 & X_i^{22} + X_i^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

Перестановочные соотношения между f - и b -операторами имеют коммутаторный характер,

$$\left. \begin{aligned} [\Psi(i\sigma_1), X_i^{\sigma_2 \bar{\sigma}_2}]_- &= \delta_{ij} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \Psi(i\bar{\sigma}_1) \\ [\Psi(i\sigma_1), X_i^{20}]_- &= \delta_{ij} \bar{\sigma}_1 \Psi^+(i\bar{\sigma}_1) \tau^x \end{aligned} \right\}. \quad (2.11)$$

Другие варианты перестановочных соотношений типа (2.9) и (2.11) дают нуль.

Таким образом, антикоммутаторы двух Ψ -операторов выражаются через диагональные или b -операторы, а коммутаторы Ψ - и b -операторов представляют, естественно, Ψ -операторы. Отметим попутно два соотношения

$$(X_i^{pq})^+ = X_i^{qp}, \quad (2.12)$$

$$X_i^{00} + X_i^{\sigma\sigma} + X_i^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} + X_i^{22} = 1, \quad (2.13)$$

которые дополняют алгебру X -операторов.

Запишем уравнения движения для f -операторов. Для термодинамического времени τ ($-\beta \leq \tau \leq \beta$, $\beta = 1/kT$) исходим из уравнения Гейзенберга

$$\dot{\Psi}(1\sigma) = -[\Psi(1\sigma), \mathcal{H}],$$

которое в случае гамильтониана (2.6)–(2.7) можно записать в следующем виде

$$\begin{aligned} \dot{\Psi}(1\sigma_1) = & -E_1^{\sigma_1} \Psi(1\sigma_1) - F_1^{\sigma_1} \hat{i}(11') \Psi(1'\sigma_1) - \\ & - X_1^{\bar{\sigma}_1 \sigma_1} \tau^z \hat{i}(11') \Psi(1'\bar{\sigma}_1) + \bar{\sigma}_1 \Psi^+(1'\bar{\sigma}_1) \hat{i}(1'1) i\tau^y X_1^{02}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Здесь введена двухрядная матрица по спинорным индексам

$$E_1^{\sigma} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\sigma} & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\sigma} + U \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Цифровые индексы здесь и далее означают четырехмерную координату, включающую узел и время τ , т.е. $l = (i, \tau_1), \dots$; по штрихованным индексам подразумевается суммирование (суммирование по узлам i и интегрирование по времени τ). Наконец, введена величина

$$\hat{i}(11') = \delta(\tau_1 - \tau_1') t_{i\bar{i}i'} \mathfrak{S} \equiv t(11') \mathfrak{S} \quad (2.16)$$

представляющая матрицу по спинорным индексам (последний факт отмечен символом \hat{i}).

Таким образом оператор $\dot{\Psi}$ представляет линейную комбинацию f -операторов, коэффициентами в которой являются бозе-подобные b -операторы, а также матрицы E и \hat{i} . Аналогичное уравнение движения можно записать для эрмитово-сопряженного оператора

$$\begin{aligned} \dot{\Psi}^+(1\sigma_1) = & E_1^{\sigma_1} \Psi^+(1\sigma_1) + \Psi^+(1'\sigma_1) \hat{i}(1'1) F_1^{\sigma_1} + \\ & + \Psi^+(1'\bar{\sigma}_1) \hat{i}(1'1) \tau^z X_1^{\sigma_1 \bar{\sigma}_1} + \bar{\sigma}_1 X_1^{20} i\tau^y \hat{i}(1'1) \Psi(1'\bar{\sigma}_1). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Следуя методу, многократно примененному нами к разным квантовым моделям [11–15], введем производящий функционал

$$Z[V] = \text{Tr} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} T e^{-V} \right), \quad (2.18)$$

где T – символ хронологического упорядочения, и след берется по всем возможным состояниям системы.

Для гамильтониана (2.6) – (2.7) оператор V следует выбрать в виде

$$V = v_1^{00} X_1^{00} + v_1^{22} X_1^{22} + v_i^{\sigma\sigma'} X_i^{\sigma\sigma'} + v_i^{\sigma\bar{\sigma}'} X_i^{\sigma\bar{\sigma}'} + v_1^{02} X_1^{20} + v_1^{20} X_1^{02}. \quad (2.19)$$

Он представляет линейную комбинацию всех диагональных и b -операторов с одноточечными полями v . Таким образом, дифференцируя выражение $Z[V]$ по разным v , мы можем выразить различные ФГ через вариационные производные по соответствующим полям. Например, для одночастичных бозеподобных ФГ – плазмонов, магнов и дублонов – имеем выражения:

$$\mathcal{N}^{\sigma_1 \sigma_2}(12) = -\langle T X_1^{\sigma_1 \sigma_1} X_2^{\sigma_2 \sigma_2} \rangle_V = -\frac{1}{Z[V]} \frac{\delta^2 Z[V]}{\delta v_1^{\sigma_1 \sigma_1} \delta v_2^{\sigma_2 \sigma_2}}, \quad (2.20)$$

$$\mathcal{D}^{\sigma\bar{\sigma}}(12) = -\langle T X_1^{\sigma\bar{\sigma}} X_2^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle_V = -\frac{1}{Z[V]} \frac{\delta^2 Z[V]}{\delta v_1^{\sigma\bar{\sigma}} \delta v_2^{\bar{\sigma}\sigma}}, \quad (2.21)$$

$$\mathcal{D}^{02}(12) = -\langle T X_1^{02} X_2^{20} \rangle_V = -\frac{1}{Z[V]} \frac{\delta^2 Z[V]}{\delta v_1^{02} \delta v_2^{20}}. \quad (2.22)$$

Введенные таким образом ФГ являются функционалами от флуктуирующих полей. Если после взятия вариационных производных устремить эти поля к нулю, мы получим реальные ФГ, описывающие нашу систему. Фермионные ФГ не могут быть получены дифференцированием $Z[V]$ по одноточечным полям, и необходимо для них составить уравнение движения.

3. Уравнение движения для электронной функции Грина

Воспользуемся общим уравнением движения (см. приложение в [15]) и запишем его для выражения $((T\Psi_1\Psi_2^+))$, определяющего электронную ФГ:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau_1} ((T\Psi_{\alpha 1}(1\sigma_1)\Psi_{\alpha 2}^+(2\sigma_2)e^{-V})) = & ((T\{\Psi_{\alpha 1}(1\sigma_1), \Psi_{\alpha 2}^+(2\sigma_2)\}_+ e^{-V})) + \\ & + ((T\dot{\Psi}_{\alpha 1}(1\sigma_1)\Psi_{\alpha 2}^+(2\sigma_2)e^{-V})) - ((T\{\Psi_{\alpha 1}(1\sigma_1), V\}_- \Psi_{\alpha 2}^+(2\sigma_2)e^{-V})) \end{aligned} \quad (3.1)$$

Вычислим антикоммутатор и коммутатор от Ψ -операторов в (3.1). Учитывая соотношения (2.9) и (2.11), получим:

$$\{\Psi_{\alpha_1}(1\sigma_1), \Psi_{\alpha_2}^+(2\sigma_2)\}_+ = \delta_{12} \left(\delta_{\sigma_1\sigma_2} (F_1^{\sigma_1})_{\alpha_1\alpha_2} + \delta_{\bar{\sigma}_1\sigma_2} \tau^z (X_1^{\bar{\sigma}_1\sigma_1})_{\alpha_1\alpha_2} \right), \quad (3.2)$$

$$\{\Psi(1\sigma_1), V\}_- = W_1^{\sigma_1} \Psi(1\sigma_1) + v_1^{\bar{\sigma}_1\sigma_1} \Psi(1\bar{\sigma}_1) + \bar{\sigma}_1 v_1^{02} \Psi^+(1\bar{\sigma}_1) \tau^x, \quad (3.3)$$

здесь W – двухрядная матрица, составленная из флуктуирующих полей:

$$W_1^{\sigma} = \begin{pmatrix} v_1^{\sigma\sigma} - v_1^{00} & 0 \\ 0 & v_1^{22} - v_1^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

После подстановки выражений (2.14) и коммутаторов в уравнение (3.1) его можно представить в виде:

$$\begin{aligned} G_{0V}^{-1}(1\sigma_1, 1'\sigma_1')((T\Psi(1'\sigma_1')\Psi^+(2\sigma_2)e^{-V})) = \\ = -\delta_{12} \left[\delta_{\sigma_1\sigma_2} ((TF_1^{\sigma_1}e^{-V})) + \delta_{\bar{\sigma}_1\sigma_2} \tau^z ((TX_1^{\bar{\sigma}_1\sigma_1}e^{-V})) \right] + \\ + \bar{\sigma}_1 v_1^{02} \tau^x ((T\Psi^+(1\bar{\sigma}_1)\Psi^+(2\sigma_2)e^{-V})) + \\ + ((TF_1^{\sigma_1} \hat{i}(11')\Psi(1'\sigma_1)\Psi^+(2\sigma_2)e^{-V})) + \\ + \tau^z \hat{i}(11')((TX_1^{\bar{\sigma}_1\sigma_1}\Psi(1'\bar{\sigma}_1)\Psi^+(2\sigma_2)e^{-V})) + \\ + \sigma_1 ((TX_1^{02}\Psi^+(1'\bar{\sigma}_1)\Psi^+(2\sigma_2)e^{-V})) \hat{i}(1'1) i\tau^y \end{aligned} \quad (3.5)$$

Здесь введена величина

$$G_{0V}^{-1}(1\sigma_1, 2\sigma_2) = \left\{ \left(-\frac{\partial}{\partial \tau_1} - E_1^{\sigma_1} \right) \delta_{\sigma_1\sigma_2} - W_1^{\sigma_1} \delta_{\sigma_1\sigma_2} - v_1^{\bar{\sigma}_1\sigma_1} \tau^0 \delta_{\bar{\sigma}_1\sigma_2} \right\} \delta_{12}, \quad (3.6)$$

которая определяет электронный пропагатор нулевого (по отношению к перескокам) приближения во флуктуирующих одноточечных полях. Эта величина является матрицей 2×2 по отношению к спинорным индексам. Выражая смешанные ФГ через вариационные производные от $Z[V]$, можем представить полученное уравнение в виде

$$\begin{aligned} G_{0V}^{-1}(1\sigma_1, 1'\sigma_1')((T\Psi(1'\sigma_1')\Psi^+(2\sigma_2)e^{-V})) = \\ = -\delta_{12} \hat{a}_1(\sigma_1\sigma_2) Z[V] + \hat{a}_1(\sigma_1\sigma_1') \hat{i}(11')((T\Psi(1'\sigma_1')\Psi^+(2\sigma_2)e^{-V})) - \\ - \sigma_1 \left[v_1^{02} \tau^x \delta_{11'} - i\tau^y \hat{i}(11') \frac{\delta}{\delta v_1^{02}} \right] ((T\Psi^+(1'\bar{\sigma}_1)\Psi^+(2\sigma_2)e^{-V})) \end{aligned} \quad (3.7)$$

Здесь введена двухрядная матрица, являющаяся дифференциальным оператором по одноточечным флуктуирующим полям:

$$\hat{a}_1(\sigma_1\sigma_2) = \left(\delta_{\sigma_1\sigma_2} \hat{F}_1^{\sigma_1} - \delta_{\bar{\sigma}_1\sigma_2} \tau^z \frac{\delta}{\delta v_1^{\bar{\sigma}_1\sigma_1}} \right), \quad (3.8)$$

где

$$\hat{F}_1^{\sigma} = \begin{pmatrix} \frac{\delta}{\delta v_1^{00}} + \frac{\delta}{\delta v_1^{\sigma\sigma}} & 0 \\ 0 & \frac{\delta}{\delta v_1^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}} + \frac{\delta}{\delta v_1^{22}} \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Отметим также, что \hat{i} является транспонированной матрицей \hat{i} .

Как обычно переходим от функционала $Z[V]$ к функционалу $\Phi[V]$ с помощью подстановки:

$$Z[V] = e^{\Phi[V]}. \quad (3.10)$$

Тогда уравнение (3.5) непосредственно приводит к уравнению для электронной ФГ:

$$\begin{aligned} \left[G_{0V}^{-1}(1\sigma_1, 1'\sigma_1') - (\hat{a}_1(\sigma_1\sigma_1')\Phi) \hat{i}(11') - \right. \\ \left. - \hat{a}_1(\sigma_1\sigma_1') \hat{i}(11') \right] \langle T\Psi(1'\sigma_1')\Psi^+(2\sigma_2)e^{-V} \rangle = \\ = -\delta_{12} (\hat{a}_1(\sigma_1\sigma_2)\Phi) - \sigma_1 \delta_{11'} v_1^{02} \langle T\Psi^+(1'\bar{\sigma}_1)\tau^x\Psi^+(2\sigma_2)e^{-V} \rangle - \\ - \sigma_1 \left(\frac{\delta\Phi}{\delta v_1^{02}} + \frac{\delta}{\delta v_1^{02}} \right) \langle T\Psi^+(1'\bar{\sigma}_1) \hat{i}(1'1) i\tau^y\Psi^+(2\sigma_2)e^{-V} \rangle \end{aligned} \quad (3.11)$$

Мы видим, что уравнение для ФГ $\langle T\Psi\Psi^+e^{-V} \rangle$ включает в себя аномальную ФГ $\langle T\Psi^+\Psi^+e^{-V} \rangle$, поэтому необходимо написать уравнение и для нее.

Введем матрицу ФГ

$$\mathcal{L}(\underline{1}\underline{2}) = - \begin{pmatrix} \langle T\Psi(1\sigma_1)\Psi^+(2\sigma_2)e^{-V} \rangle & \langle T\Psi(1\sigma_1)\Psi(2\sigma_2)e^{-V} \rangle \\ \langle T\Psi^+(1\sigma_1)\Psi^+(2\sigma_2)e^{-V} \rangle & \langle T\Psi^+(1\sigma_1)\Psi(2\sigma_2)e^{-V} \rangle \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

В левой части цифровой подчеркнутый индекс $\underline{1}$ представляет совокупный индекс, включающий пространственно-временную точку 1, спин σ_1 , спиновый индекс α_1 и еще один индекс ν_1 , принимающий два значения, нумерующие матричные элементы (3.12), так что

$$\underline{1} = \{1\sigma_1\alpha_1\nu_1\}. \quad (3.13)$$

Матрица $\mathcal{L}(\underline{1}\underline{2})$ является по совокупности дискретных индексов матрицей 8×8 . Именно такого ранга матрицы автоматически возникают в модели Хаббарда. Их появление описывает не только состояния с куперовскими парами, но и с другими нарушениями симметрии.

Совокупность четырех уравнений для ФГ в (3.12) можно записать в виде одного матричного уравнения:

$$\left[L_{0V}^{-1}(\underline{1}\underline{1}') - (\hat{A}\Phi Y)(\underline{1}\underline{1}') - (\hat{A}Y)(\underline{1}\underline{1}') \right] \mathcal{L}(\underline{1}\underline{2}) = (\hat{A}\Phi)(\underline{1}\underline{2}) \quad (3.14)$$

Здесь введена операторная матрица

$$\hat{A}(\underline{1}\underline{2}) = \delta_{12} \begin{pmatrix} \hat{a}_1(\sigma_1\sigma_2) & -\sigma_1\delta_{\bar{\sigma}_1\sigma_2}i\tau^y \frac{\delta}{\delta v_1^{02}} \\ -\sigma_1\delta_{\bar{\sigma}_1\sigma_2}i\tau^y \frac{\delta}{\delta v_1^{20}} & \hat{a}_1(\sigma_2\sigma_1) \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

в которой каждый элемент представляет матрицу 2×2 по спиновым индексам, скрытым в матрицах Паули и в матрице \hat{a}_1 , причем элементами ее являются вариационные производные по всем флуктуирующим полям. Кроме того в уравнение (3.14) входит матрица

$$Y(\underline{1}\underline{2}) = \begin{pmatrix} \hat{i}(12) & 0 \\ 0 & -\hat{i}(12) \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

Величина L_{0V}^{-1} представляет двухрядную матрицу

$$L_{0V}^{-1}(\underline{1}\underline{1}') = \delta_{12} \begin{pmatrix} G_{0V}^{-1}(1\sigma_1, 2\sigma_2) & \sigma_1\delta_{\bar{\sigma}_1\sigma_2}\delta_{12}\tau^x v_1^{02} \\ -\sigma_1\delta_{\bar{\sigma}_1\sigma_2}\delta_{12}\tau^x v_1^{20} & \tilde{G}_{0V}^{-1}(\sigma_1, \sigma_2) \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

в которой G_{0V}^{-1} дается выражением (3.6), и \tilde{G}_{0V}^{-1} – транспонированным к нему:

$$\tilde{G}_{0V}^{-1}(1\sigma_1, 2\sigma_2) = \left\{ \left(-\frac{\partial}{\partial \tau_1} + E_1^{\sigma_1} \right) \delta_{\sigma_1\sigma_2} + W_1^{\sigma_1} \delta_{\sigma_1\sigma_2} + v_1^{\sigma_1\bar{\sigma}_1} \tau^0 \delta_{\bar{\sigma}_1\sigma_2} \right\} \delta_{12}.$$

Уравнение (3.14) того же типа, что уравнения для одночастичной ФГ, выведенные нами для модели Хаббарда в пределе $U = \infty$ [11,15] и модели Гейзенберга. В перечисленных моделях матрица \hat{A} вырождается в скаляр, но в данной работе это матрица, определяемая дискретными индексами α и ν , как и другие величины в (3.14). В силу отмеченного сходства уравнения (3.14) с соответствующими уравнениями ранее рассмотренных моделей, мы можем ожидать той же структуры в решениях этих уравнений, в частности мультипликативного характера электронной ФГ. Представим ее в виде произведения пропагаторной L и конечной Π частей, а именно:

$$\mathcal{L}(\underline{1}\underline{2}) = L(\underline{1}\underline{1}')\Pi(\underline{1}'\underline{2}). \quad (3.18)$$

Пропагаторная часть удовлетворяет уравнению Дайсона

$$L^{-1}(\underline{1}\underline{2}) = L_{0V}^{-1}(\underline{1}\underline{2}) - \Sigma(\underline{1}\underline{2}). \quad (3.19)$$

Представим выражения для собственно-энергетической части в виде суммы двух членов:

$$\Sigma(\underline{1}\underline{2}) = \Sigma'(\underline{1}\underline{2}) + (\Pi Y)(\underline{1}\underline{2}), \quad (3.20)$$

что имело место для ранее рассмотренных моделей. Тогда подставляя (3.18) в (3.14) и необходимые дифференцирования, после сравнения левой и правой частей мы можем получить два уравнения на Π и Σ' :

$$\Pi(\underline{1}\underline{2}) = (\hat{A}\Phi)(\underline{1}\underline{2}) + (YL)(\underline{4}'\underline{3}')\hat{A}(\underline{1}\underline{4}')\Pi(\underline{3}'\underline{2}), \quad (3.21)$$

$$\Sigma'(\underline{1}\underline{2}) = -(YL)(\underline{4}'\underline{3}')\hat{A}(\underline{1}\underline{4}')\left(L_{0V}^{-1}(\underline{3}'\underline{2}) - \Sigma'(\underline{3}'\underline{2}) \right). \quad (3.22)$$

При получении этих уравнений мы учли тождество

$$(\hat{A}L)(\underline{1}\underline{2}) = -L(\underline{1}'\underline{2}') \left[\hat{A}(\underline{1}\underline{1}')L^{-1}(\underline{2}'\underline{3}') \right] L(\underline{3}'\underline{2}), \quad (3.23)$$

являющееся обобщением известного тождества, выражающего функциональную производную пропагаторной ФГ через производную обратной к ней ФГ:

$$\frac{\delta G}{\delta v} = -G \frac{\delta G^{-1}}{\delta v} G.$$

Уравнения (3.21) и (3.22) для концевой и собственно-энергетической частей ФГ по структуре аналогичны соответствующим уравнениям других моделей. Это уравнения в вариационных производных для Π и Σ' . Вклад Σ' в собственно энергетическую часть Σ не разрезаем по "линии взаимодействия", представляющей величину Y . Разрезаемая часть Σ уже выделена в выражении (3.20) в виде второго слагаемого.

Из совокупности уравнений (3.18)-(3.20) вытекает одно важное следствие, которое можно представить в форме следующего уравнения на ФГ \mathcal{L} :

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}' + \mathcal{L}'Y\mathcal{L}. \quad (3.24)$$

Здесь величина \mathcal{L}' определяется двумя соотношениями:

$$\mathcal{L}' = L'\Pi, \quad L'^{-1} = L_{0v}^{-1} - \Sigma'.$$

Решение уравнения (3.24) можно записать в виде:

$$\mathcal{L}(\underline{1}\underline{2}) = \left[\mathcal{L}'^{-1} - Y \right]^{-1}(\underline{1}\underline{2}), \quad (3.25)$$

где

$$\mathcal{L}'^{-1} = \Pi^{-1} \left(L_{0v}^{-1} - \Sigma' \right). \quad (3.26)$$

Величина \mathcal{L}' , как следует из определения, не разрезаема по линии Y , поэтому уравнение (3.24) для ФГ является уравнением Ларкина, выражающим ФГ через неприводимую (по линии "взаимодействия") часть. Из этого же уравнения следует "локаторное" представление (3.25) для электронной ФГ.

Уравнения (3.21) и (3.22) можно решать путем итераций. Так в первых порядках по Y получаем:

$$\Pi(\underline{1}\underline{2}) = \hat{A}(\underline{1}\underline{2})\Phi + (YL)(\underline{4}'\underline{3}')\hat{A}(\underline{1}\underline{4}')\hat{A}(\underline{3}'\underline{2}')\Phi + \dots, \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} \Sigma'(\underline{1}\underline{2}) = & -(YL)(\underline{4}'\underline{3}') \left[\hat{A}(\underline{1}\underline{4}')L_{0v}^{-1}(\underline{3}'\underline{2}') \right] + \\ & + (YL)(\underline{4}'\underline{3}') (YL)(\underline{6}'\underline{1}') \left[\hat{A}(\underline{1}\underline{4}')L_{0v}^{-1}(\underline{1}'\underline{2}') \right] L(\underline{2}'\underline{5}') \left[\hat{A}(\underline{3}'\underline{6}')L_{0v}^{-1}(\underline{5}'\underline{2}') \right] + \dots \end{aligned} \quad (3.28)$$

В (3.27) оператор \hat{A} , действуя на Φ , дает среднее значение от диагональных и b -операторов; повторное действие оператора \hat{A} приведет, очевидно, к бозонным ФГ различных типов. Действие оператора на L_v^{-1} приведет к выражениям, состоящим из различных δ -символов. Проблема заключается в перемножении матриц в выражениях (3.27) и (3.28) с учетом того факта, что матрица $\hat{A}(\underline{1}\underline{2})$ содержит производные, которые должны действовать на соответствующие величины. Чтобы выполнить матричное умножение с учетом операторного характера отдельных множителей мы перепишем выражения (3.27) и (3.28) в другой форме:

$$\Pi(\underline{1}\underline{2}) = \hat{A}(\underline{1}\underline{2})\Phi + \hat{A}(\underline{1}\underline{4}') (YL)(\underline{4}'\underline{3}') \hat{A}(\underline{3}'\underline{2}')\Phi + \dots, \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \Sigma'(\underline{1}\underline{2}) = & -\hat{A}(\underline{1}\underline{4}') (YL)(\underline{4}'\underline{3}') L_v^{-1}(\underline{3}'\underline{2}') + \\ & + \hat{A}(\underline{1}\underline{4}') (YL)(\underline{4}'\underline{3}') \hat{A}(\underline{3}'\underline{6}') (YL)(\underline{6}'\underline{1}') L_v^{-1}(\underline{1}'\underline{2}') L(\underline{2}'\underline{5}') L_v^{-1}(\underline{5}'\underline{2}') + \dots \end{aligned} \quad (3.28)$$

В этих выражениях все множители стоят в порядке матричного умножения, но нужно помнить: на какой множитель действуют производные, стоящие в операторе \hat{A} . Таким образом, можно перемножить все матрицы, а потом поставить символ производных непосредственно перед элементами матриц L_{0v}^{-1} или перед Φ , на которые они должны действовать.

4. Итерации в уравнениях для собственно-энергетической и концевой частей

Согласно определению (3.12), электронная ФГ \mathcal{L} учитывает возможность состояний со спариванием электронов. В данной работе мы будем рассматривать нормальную систему, полностью описываемую матричным элементом полной электронной ФГ $\mathcal{L}(\underline{1}\underline{2})$, а именно

$$\mathcal{G}(1\sigma_1 2\sigma_2) \equiv \mathcal{L}^{11}(1\sigma_1 2\sigma_2) = -\langle T\Psi(1\sigma_1)\Psi^+(2\sigma_2)e^{-V} \rangle. \quad (4.1)$$

Здесь верхние цифровые индексы соответствуют индексам ν в (3.13) и нумеруют матричные элементы электронной ФГ (3.12).

Даже в случае нормальной фазы, в которой аномальные ФГ \mathcal{L}^{12} и \mathcal{L}^{21} равны нулю, уравнение для \mathcal{L}^{11} завязано с ними, поскольку оператор \hat{A} содержит вариационные производные по полям v_1^{02} и v_1^{20} , так что их действие на \mathcal{L}^{12} и \mathcal{L}^{21} дает не нулевой результат, даже если мы затем положим эти поля равными нулю. Нормальную электронную ФГ \mathcal{G} можно искать в стандартном мультипликативном виде

$$\mathcal{G} = G A, \quad (4.2)$$

причем G удовлетворяет уравнению Дайсона

$$G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma, \quad (4.3)$$

а собственно-энергетическую часть можно представить в виде неразрезаемого Σ' и разрезаемого вкладов:

$$\Sigma = \Sigma' + \Lambda \hat{t}. \quad (4.4)$$

В соотношениях (4.2)-(4.4) все величины являются двухрядными матрицами по спинорным индексам с аргументами типа $\mathcal{G}(1\sigma_1 2\sigma_2)$.

Итерации в общих уравнениях (3.21) и (3.22) позволяют получить ряды для величин Σ' и Λ , определенных уравнениями (4.2)-(4.4). В первых двух порядках по t получим следующие выражения для концевой части:

$$A_0^\sigma(k) = \begin{pmatrix} 1 - \langle n^\sigma \rangle & 0 \\ 0 & \langle n^\sigma \rangle \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

где

$$\langle n^\sigma \rangle = \langle X_i^{\sigma\sigma} + X_i^{22} \rangle = \langle c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} \rangle \quad (4.6)$$

среднее число электронов на узле со спином σ , и

$$A_1^\sigma(k) = \begin{pmatrix} \lambda_1^\sigma(k) & \lambda_2^\sigma(k) \\ -\lambda_1^\sigma(k) & -\lambda_2^\sigma(k) \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

где

$$\lambda_1^\sigma(k) = -\sum_q \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \left[(G_{11}^\sigma + G_{21}^\sigma)(k+q) \mathcal{N}^{\sigma\bar{\sigma}}(q) + (G_{11}^{\bar{\sigma}} + G_{21}^{\bar{\sigma}})(k+q) \mathcal{D}^{\sigma\bar{\sigma}}(q) + (G_{21}^{\bar{\sigma}} + G_{22}^{\bar{\sigma}})(-k-q) \mathcal{D}^{02}(q) \right], \quad (4.8)$$

$$\lambda_2^\sigma(k) = -\sum_q \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \left[(G_{12}^\sigma + G_{22}^\sigma)(k+q) \mathcal{N}^{\sigma\bar{\sigma}}(q) + (G_{12}^{\bar{\sigma}} + G_{22}^{\bar{\sigma}})(k+q) \mathcal{D}^{\sigma\bar{\sigma}}(q) + (G_{11}^{\bar{\sigma}} + G_{12}^{\bar{\sigma}})(-k-q) \mathcal{D}^{02}(q) \right]. \quad (4.9)$$

Величины $\mathcal{N}^{\sigma\bar{\sigma}}(k)$, $\mathcal{D}^{\sigma\bar{\sigma}}(k)$ и $\mathcal{D}^{02}(k)$ представляют фурье-компоненты бозонных ФГ, определенных соотношениями (2.20)–(2.22) с 4-импульсом q . Здесь $\varepsilon(k)$, фурье-компонента t_{i_i} , представляет энергию в затравочной зоне.

Вклад первого порядка в неразрезаемую собственную энергию Σ' определяется выражением:

$$\Sigma_1'^\sigma(k) = -\eta^\sigma \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

где

$$\eta^\sigma = \sum_k \varepsilon(\mathbf{k}) \left[G_{11}^{\bar{\sigma}}(k) - G_{22}^{\bar{\sigma}}(k) \right]. \quad (4.11)$$

Поправка второго порядка равна:

$$\Sigma_2'^\sigma(k) = \begin{pmatrix} \varphi_1^\sigma(k) & \varphi_2^\sigma(k) \\ -\varphi_1^\sigma(k) & -\varphi_2^\sigma(k) \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

где

$$\varphi_1^\sigma(k) = -\sum_q \sum_{k_1} \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \varepsilon(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}) \left[G_{11}^\sigma(k_1) g^{\bar{\sigma}}(k+q) G_{11}^{\bar{\sigma}}(k_1+q) + G_{11}^{\bar{\sigma}}(k_1) g^\sigma(k+q) G_{11}^{\bar{\sigma}}(k_1+q) + \sum_{\sigma'} G_{22}^{\bar{\sigma}}(-k_1) g^{\sigma'}(k+q) G_{11}^{\bar{\sigma}}(-k_1-q) \right] \quad (4.13)$$

а величина $\varphi_2^\sigma(k)$ получается заменой спинорных индексов в выражении (4.13) $1 \leftrightarrow 2$. Здесь $g^\sigma(k)$ представляет линейную комбинацию матричных элементов пропагаторной ФГ:

$$g^\sigma(k) = G_{11}^\sigma(k) + G_{21}^\sigma(k) - G_{12}^\sigma(k) - G_{22}^\sigma(k) = -\frac{U}{[i\omega_n - E_1^\sigma(\mathbf{k})][i\omega_n - E_2^\sigma(\mathbf{k})]}, \quad (4.14)$$

Наконец, выпишем поправку второго порядка в разрезаемую часть Σ , т.е. выражение для $\Sigma_{red}^\sigma \equiv A^\sigma \hat{t}^\sigma$. Учитывая, что в импульсном представлении \hat{t}^σ есть $\varepsilon(k)\mathfrak{Z}$, где \mathfrak{Z} – двухрядная матрица, определенная в (2.8), и выражение (4.8) для $A_1^\sigma(k)$, получим:

$$\Sigma_{red}^\sigma = \lambda^\sigma(k)\varepsilon(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

где

$$\lambda^\sigma(k) = \lambda_1^\sigma(k) + \lambda_2^\sigma(k) = -\sum_q \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \left[g^\sigma(k+q)\mathcal{N}^{\sigma\bar{\sigma}}(q) + g^{\bar{\sigma}}(k+q)\mathcal{D}^{\sigma\bar{\sigma}}(q) + \tilde{g}^{\bar{\sigma}}(k+q)\mathcal{D}^{02}(q) \right], \quad (4.13)$$

$$\tilde{g}^\sigma(k) = G_{21}^\sigma(-k) + G_{22}^\sigma(-k) - G_{11}^\sigma(-k) - G_{12}^\sigma(-k), \quad (4.14)$$

причем

$$\tilde{g}^\sigma(k) = -g^\sigma(-k).$$

Мы видим, что $\Sigma_1^{\prime\sigma}$ не зависит ни от импульса, ни от частоты и определяет лишь энергетический сдвиг, зависящий от спина. Поправки второго порядка $\Sigma_2^{\prime\sigma}(k)$ и $\Sigma_{red}^\sigma(k)$ зависят от импульса и частоты. Из выражения (4.16) видно, что вклад в Σ_{red}^σ определяется взаимодействием электронов с бозевскими возбуждениями, тогда как $\Sigma_2^{\prime\sigma}$ определяется только электронными ФГ.

5. Приближение среднего поля

Простейшим приближением типа среднего поля является приближение Хаббард-I, учитывающее вклад в Σ равный $A_0 \hat{t}$. К нему может быть добавлен вклад первого порядка Σ_1' , не зависящий от частоты и импульса. Поправка второго порядка Σ_2' зависит от частоты, однако мы попытаемся извлечь из нее статическую часть, используя следующий анзац.

Обратим внимание на то, что в выражения, определяющие матричные элементы вклада Σ_2' под знаком суммирования по импульсу \mathbf{q} входит величина $\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})$, которая может быть факторизована, и в приближении ближайших соседей для кубической решетки может быть выделен фактор $\varepsilon(\mathbf{k})$ из статической ее составляющей. Таким образом, в статическом приближении Σ_2' может быть аппроксимирована выражением

$$\Sigma_2'(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} p_1^\sigma & p_2^\sigma \\ -p_1^\sigma & -p_2^\sigma \end{pmatrix} \varepsilon(\mathbf{k}), \quad (5.1)$$

где p_1^σ и p_2^σ некоторые константы, зависящие от спина. Выражения для них могут быть выписаны, но мы этого делать не будем, поскольку попытаемся не вычислять их согласно определению, а найти из некоторых общих требований, которым должна удовлетворять электронная ФГ. Такое требование было сформулировано в работах Манчини и его сотрудников (см. ссылки в обобщающей статье [5]), использовавших метод Рот – метод линеаризации уравнений движения для композитных операторов – в модели Хаббарда. Оно состоит в том, чтобы ФГ G_{12} при совпадающих пространственно-временных аргументах обращалась в нуль. Ниже мы используем эту идею для определения параметров p_1^σ и p_2^σ .

Запишем собственно-энергетическую часть электронной ФГ в приближении, учитывающем поправку "Хаббард-I", поправку первого порядка в Σ' (4.10) и второго порядка в форме (5.1). В сумме они составляют Σ_{MF}^σ , соответствующую приближению среднего поля. Таким образом, имеем

$$\Sigma_{MF}^\sigma(\mathbf{k}) = -\eta^\sigma \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 - \langle n^{\bar{\sigma}} \rangle + p_1^\sigma & 1 - \langle n^{\bar{\sigma}} \rangle + p_2^\sigma \\ \langle n^{\bar{\sigma}} \rangle - p_1^\sigma & \langle n^{\bar{\sigma}} \rangle - p_2^\sigma \end{pmatrix} \varepsilon(\mathbf{k}). \quad (5.2)$$

Ясно, что первый член ответственен за сдвиг хаббардовских подзон, а второй – за перенормировку их ширины.

Пропагаторная ФГ в приближении среднего поля определяется матричным уравнением

$$[G^\sigma(k)]^{-1} = [G_0^\sigma(k)]^{-1} - \Sigma_{MF}^\sigma(k),$$

решение которого представим в виде

$$G_{\alpha\beta}^{\sigma}(k) = \frac{(\mathcal{P}_1^{\sigma})_{\alpha\beta}(\mathbf{k})}{i\omega_n - E_1^{\sigma}(\mathbf{k})} + \frac{(\mathcal{P}_2^{\sigma})_{\alpha\beta}(\mathbf{k})}{i\omega_n - E_2^{\sigma}(\mathbf{k})}. \quad (5.3)$$

Полюса $E_m^{\sigma}(\mathbf{k})$ и вычеты $(\mathcal{P}_m^{\sigma})_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ даются выражениями:

$$\left. \begin{aligned} (\mathcal{P}_{1,2}^{\sigma})_{11}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{r^{\sigma}(\mathbf{k})}{2Q^{\sigma}(\mathbf{k})} \right] \\ (\mathcal{P}_{1,2}^{\sigma})_{22}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \left[1 \mp \frac{r^{\sigma}(\mathbf{k})}{2Q^{\sigma}(\mathbf{k})} \right] \\ (\mathcal{P}_{1,2}^{\sigma})_{12}(\mathbf{k}) &= \mp \frac{\eta^{\sigma} + (1 - \langle n^{\bar{\sigma}} \rangle + p_2^{\sigma})\varepsilon(\mathbf{k})}{2Q^{\sigma}(\mathbf{k})} \\ (\mathcal{P}_{1,2}^{\sigma})_{21}(\mathbf{k}) &= \mp \frac{\eta^{\sigma} + (\langle n^{\bar{\sigma}} \rangle - p_1^{\sigma})\varepsilon(\mathbf{k})}{2Q^{\sigma}(\mathbf{k})} \end{aligned} \right\}, \quad (5.4)$$

$$E_{1,2}^{\sigma}(\mathbf{k}) = R^{\sigma}(\mathbf{k}) \mp Q^{\sigma}(\mathbf{k}). \quad (5.5)$$

Здесь

$$r^{\sigma}(\mathbf{k}) = U - [1 - 2\langle n^{\bar{\sigma}} \rangle + p_1^{\sigma} + p_2^{\sigma}] \varepsilon(\mathbf{k}),$$

а выражения для $R^{\sigma}(\mathbf{k})$ и $Q^{\sigma}(\mathbf{k})$ будут выписаны ниже.

Электронная ФГ G^{σ} приближения среднего поля находится с помощью общего соотношения (4.2), так что

$$\mathcal{G}^{\sigma}(k) = G^{\sigma}(k) A_0^{\sigma}(k),$$

где $A_0^{\sigma}(k)$ определяется матричным выражением (4.5).

Электронная ФГ зависит от параметров μ , η^{σ} , $\langle n^{\sigma} \rangle$, p_1^{σ} и p_2^{σ} , которые должны определяться самосогласованным образом из уравнений

$$\sum_{\sigma} \langle n_i^{\sigma} \rangle = n_i, \quad \langle n_i^{\sigma} \rangle = \sum_{\alpha\beta} \mathcal{G}_{\alpha\beta}^{\sigma}(i, \tau; i, \tau + 0),$$

а также уравнения (4.11), определяющего параметр η^{σ} . Параметры p_1^{σ} и p_2^{σ} мы определим из требования, вытекающего из свойств X -операторов, а именно:

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{G}_{12}^{\sigma}(i, \tau; i, \tau + 0) &= \langle \bar{\sigma} X_i^{2\bar{\sigma}} X_i^{0\sigma} \rangle = 0 \\ \mathcal{G}_{21}^{\sigma}(i, \tau; i, \tau + 0) &= \langle X_i^{\sigma 0} X_i^{\bar{\sigma} 2} \bar{\sigma} \rangle = 0 \end{aligned} \right\}. \quad (5.6)$$

Таким образом, полную систему уравнений для всех пяти параметров можно записать в виде

$$\langle n^{\sigma} \rangle + \langle n^{\bar{\sigma}} \rangle = n, \quad (5.7)$$

$$\langle n^{\sigma} \rangle = \sum_k [\mathcal{G}_{11}^{\sigma}(k) + \mathcal{G}_{22}^{\sigma}(k)], \quad (5.8)$$

$$\eta^{\sigma} = \sum_k \varepsilon(\mathbf{k}) [\mathcal{G}_{11}^{\bar{\sigma}}(k) - \mathcal{G}_{22}^{\bar{\sigma}}(k)], \quad (5.9)$$

$$\sum_k \mathcal{G}_{12}^{\sigma}(k) = 0, \quad (5.10)$$

$$\sum_k \mathcal{G}_{21}^{\sigma}(k) = 0. \quad (5.11)$$

(Мы предполагаем однородность состояний, поэтому все средние не зависят от номера узла).

Из сравнения двух последних уравнений находим связь между параметрами p_1^{σ} и p_2^{σ}

$$p_1^{\sigma} + p_2^{\sigma} = -(1 - 2\langle n^{\bar{\sigma}} \rangle), \quad (5.11)$$

так что параметр p_2^{σ} можно исключить из всех выражений, определяющих электронную ФГ. Таким образом, выражения (5.4) для вычетов ФГ сводятся к следующим:

$$\left. \begin{aligned} (\mathcal{P}_{1,2}^\sigma)_{11}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{U}{2Q^\sigma(\mathbf{k})} \right] \\ (\mathcal{P}_{1,2}^\sigma)_{22}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \left[1 \mp \frac{U}{2Q^\sigma(\mathbf{k})} \right] \\ (\mathcal{P}_{1,2}^\sigma)_{12}(\mathbf{k}) &= (\mathcal{P}_{1,2}^\sigma)_{21}(\mathbf{k}) = \mp \frac{\eta^\sigma + (\langle n^{\bar{\sigma}} \rangle - p_1^\sigma) \varepsilon(\mathbf{k})}{2Q^\sigma(\mathbf{k})} \end{aligned} \right\} \quad (5.13)$$

Выражения для $R^\sigma(k)$ и $Q^\sigma(k)$, определяющие полюса, оказываются теперь равными

$$\left. \begin{aligned} R^\sigma(\mathbf{k}) &= -\sigma \frac{h}{2} - \eta^\sigma + (1 + p_1^\sigma - \langle n^{\bar{\sigma}} \rangle) \varepsilon(\mathbf{k}) + \frac{U}{2} - \mu \\ Q^\sigma(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + 4[\eta^\sigma + (\langle n^{\bar{\sigma}} \rangle - p_1^\sigma) \varepsilon(\mathbf{k})]^2} \end{aligned} \right\} \quad (5.14)$$

Таким образом, после исключения p_2^σ два уравнения (5.10) и (5.11) сводятся к одному уравнению, которое позволяет определить неизвестный параметр p_1^σ . Выполнив во всех уравнениях (5.8)-(5.11) суммирование по частотам, представим полученную систему уравнений в виде:

$$\langle n^\sigma \rangle = \frac{1}{2} (1 - \mathcal{K}_0^\sigma) - \frac{U}{2} \mathcal{F}_0^\sigma (1 - 2\langle n^{\bar{\sigma}} \rangle), \quad (5.15)$$

$$\eta^\sigma = -U \mathcal{F}_1^{\bar{\sigma}}, \quad (5.16)$$

$$\eta^\sigma \mathcal{F}_0^\sigma + (\langle n^{\bar{\sigma}} \rangle - p_1^\sigma) \mathcal{F}_1^\sigma = 0, \quad (5.17)$$

где обозначено (см. работу [4]):

$$\mathcal{K}_n^\sigma = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon^n(\mathbf{k}) \left[\tanh\left(\frac{E_1^\sigma(\mathbf{k})}{2T}\right) + \tanh\left(\frac{E_2^\sigma(\mathbf{k})}{2T}\right) \right], \quad (5.18)$$

$$\mathcal{F}_n^\sigma = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon^n(\mathbf{k})}{2Q^\sigma(\mathbf{k})} \left[\tanh\left(\frac{E_1^\sigma(\mathbf{k})}{2T}\right) - \tanh\left(\frac{E_2^\sigma(\mathbf{k})}{2T}\right) \right]. \quad (5.19)$$

К уравнениям (5.15)–(5.17) необходимо приписать уравнение (5.7) на химпотенциал.

Вычислим энергию системы путем усреднения гамильтониана (2.6)-(2.7) по ансамблю Гиббса. Легко выразить ее через электронные ФГ

$$\frac{1}{N} \langle \mathcal{H} \rangle = \sum_{k\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \sum_{\alpha\beta} \mathcal{G}_{\alpha\beta}^\sigma(k) + U \langle X^{22} \rangle - \mu n, \quad (5.20)$$

где

$$\langle X^{22} \rangle \equiv D = \frac{1}{2} \sum_{k\sigma} \mathcal{G}_{22}^\sigma. \quad (5.21)$$

Подставляя сюда выражения для матричных элементов $\mathcal{G}_{\alpha\beta}^\sigma$, запишем ответ в терминах величин (5.18) и (5.19)

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \langle \mathcal{H} \rangle &= U \langle X^{22} \rangle - \mu n + \\ &+ \sum_{\sigma} \left[-\eta^\sigma \langle n^\sigma \rangle - \frac{1}{2} \mathcal{K}_1^\sigma - \frac{U}{2} \mathcal{F}_1^\sigma + \eta^\sigma \mathcal{F}_1^\sigma + (\langle n^{\bar{\sigma}} \rangle - p_1^\sigma) \mathcal{F}_2^\sigma \right], \end{aligned} \quad (5.22)$$

$$\langle X^{22} \rangle = \frac{1}{4} \sum_{\sigma} \langle n^{\bar{\sigma}} \rangle (1 - \mathcal{K}_0^\sigma + U \mathcal{F}_0^\sigma). \quad (5.23)$$

Исследуем решения нашей системы нелинейных уравнений для парамагнитного случая.

На рис. 1 представлена зависимость параметров p_1 и p_2 от концентрации n и U . Представленные результаты типичны и для других фиксированных параметров. Для всех n и U величина p_1 является положительной, а p_2 – отрицательной. Никаких отрицательных решений для p_1 не обнаружено. Поведение p_1 весьма похоже на решение СОМ1 для параметра p (так авторы метода СОМ [3-5] называют решение для $p > 0$). На рис. 2 дается концентрационная зависимость химического потенциала при двух значениях U (здесь и далее все энергетические параметры приводятся в единицах ширины затравочной зоны W). Там же приводится решение СОМ1, вычисленное нами из уравнений работы [4], для двух вариантов затравочной плотности электронных состояний: соответствующей двумерной квадратной решетке (в приближении ближайших соседей) и модельной плотности состояний

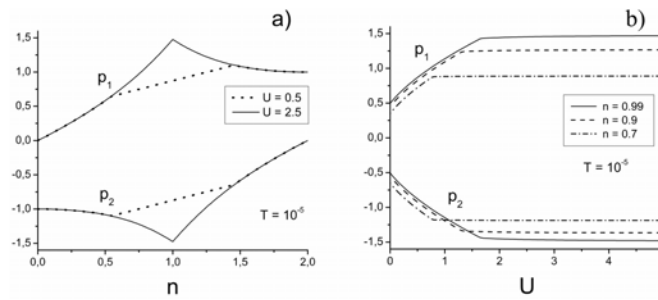


Рис.1. Зависимость параметров p_1 и p_2 от электронной концентрации n (а) и от величины кулоновского взаимодействия U (б)

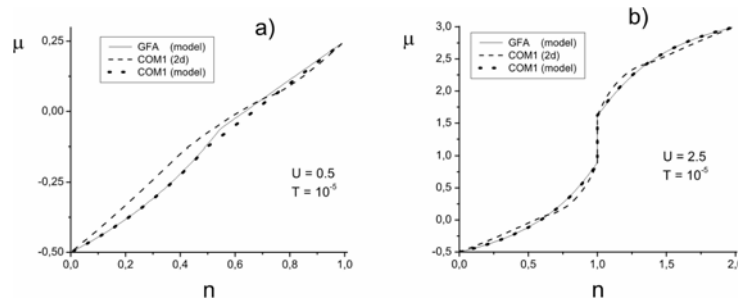


Рис.2. Химический потенциал μ как функция электронной концентрации для двух интервалов а) $0 < n < 1$ и б) $0 < n < 2$

$$\rho(\varepsilon) = \begin{cases} 1, & |\varepsilon| < W/2 \\ 0, & |\varepsilon| > W/2 \end{cases} \quad (5.24)$$

Мы видим, что COM и наш подход GFA дают близкие результаты, причем результат COM1 при использовании 2D и модельной плотностей состояний количественно также близки, поэтому во всех последующих расчетах для GFA мы будем пользоваться ради простоты модельной $\rho(\varepsilon)$.

Несколько хуже совпадение результатов для величины η (рис. 3), хотя качественное согласие расчетов COM1 и GFA имеется. Параметр зависимости двойных состояний D снова дает удовлетворительное согласие двух подходов (рис. 4). Полезно представить зависимость η от n в полном интервале электронной концентрации, при разных величинах U (рис. 5). При уменьшении U участок кривой $\eta(n)$, изображенный прерывистыми линиями, приближается к оси абсцисс, и при $U \rightarrow 0$ видно, что $\eta \rightarrow 0$, как и должно быть в случае невзаимодействующих электронов.

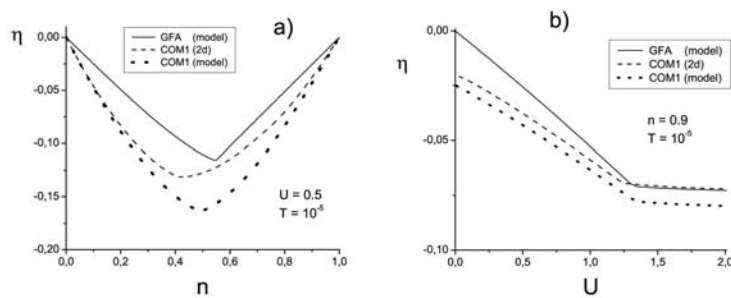


Рис.3. Параметр η как функция n и U

Расчеты показывают, что с уменьшением U величина скачка химпотенциала при $n = 1$ уменьшается и при некотором значении $U_c \approx 1.73W$ обращается в нуль. Это соответствует смыканию хаббардовских подзон и переходу диэлектрик-металл при соответствующем критическом $U_c = \sqrt{2p_1}W$. Эволюция плотности квазичастичных состояний с изменением U показана для двух модельных плотностей состояний в затравочной зоне: постоянной (5.24) – рис. 6 и полуэллиптической –

$$\rho(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{4}{\pi W} \sqrt{1 - \left(\frac{2\varepsilon}{W}\right)^2}, & |\varepsilon| < W/2 \\ 0, & |\varepsilon| > W/2 \end{cases} \quad (5.25)$$

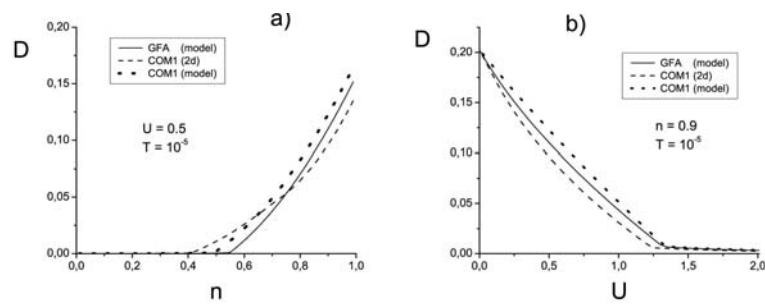


Рис.4. Параметр $D = \langle n^\sigma n^{\bar{\sigma}} \rangle$ заполнения узлов двумя электронами в зависимости от n и U

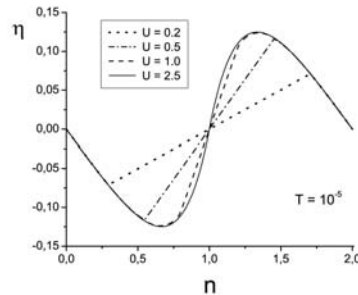


Рис.5. Концентрационная зависимость параметра η при различных значениях U

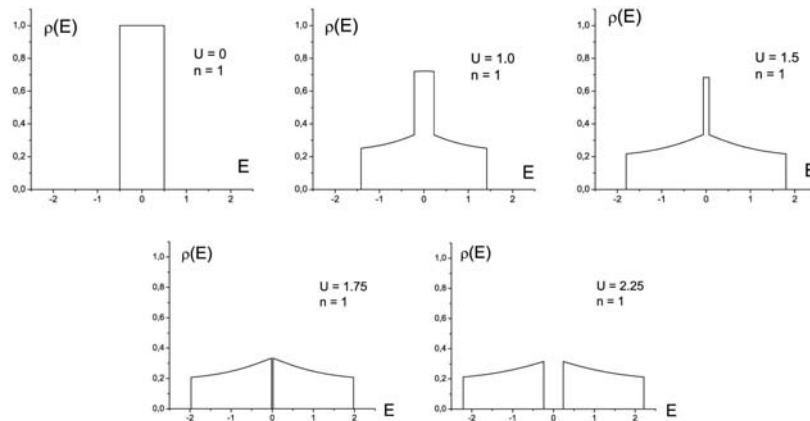


Рис.6. Эволюция квазичастичной плотности состояний при половинном заполнении в зависимости от величины U для модельной плотности состояний (5.24) в затравочной полосе на рис. 7. В методе COM критическое значение $U_c \approx 1.68W$ [4].

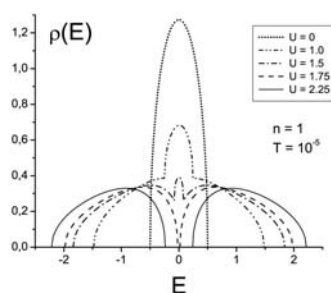


Рис.7. То же, что на рис.6, но для полуэллиптической плотности состояний (5.25).

6. Заключение

Сравним теперь два подхода к модели Хаббарда: развитый в этой статье метод производящего функционала (GFA) и метод композитных операторов [3–5]. Приближения среднего поля в пределах обоих подходов очень близки как по структуре электронной ФГ, так и по рассчитанным с ее помощью физическим свойствам. В обоих случаях имеет место двухполюсная ФГ. Подход COM содержит один параметр p , который находится из условия $\mathcal{G}_{12} = 0$. В нашем случае возникает две величины p_1 и p_2 , определяемые из аналогичных условий $\mathcal{G}_{12} = 0$ и $\mathcal{G}_{21} = 0$. Благодаря связи между этими условиями, один из этих параметров исключается, и в результате электронная ФГ содержит только один параметр p_1 .

По физическому содержанию параметры p и p_1 близки друг другу. В подходе COM параметр p появляется в результате статических флуктуаций спина и заряда. В нашем случае выражение для p_1 также содержит следы

статических флуктуаций спина и заряда. Поправки к собственной энергии электронов за счет динамического взаимодействия с бозонами в обоих подходах практически совпадают и соответствуют SCBA.

Уравнения для определения параметров μ , $\langle n^\sigma \rangle$, η , p_1 в нашем случае, и μ , $\langle n^\sigma \rangle$, Δ , p в СОМ близки друг к другу, но имеют, однако, различные решения. В СОМ при заданных значениях внешних параметров (n , U , W) имеется два решения: с $p > 0$ (СОМ1) и $p < 0$ (СОМ2), тогда как в нашем случае – только одно: с $p_1 > 0$ (второй параметр p_2 при этом всегда отрицательный, но он ничего не определяет, кроме выполнения условия $g_{12} = g_{21} = 0$ для совпадающих аргументов). Замечательным выводом, следующим из расчетов при разных наборах исходных параметров, является то, что несмотря на различия в буквенных выражениях для полюсов и вычетов электронной ФГ в GFA и в СОМ, расчеты различных электронных характеристик модели близки друг к другу, если брать только положительные решения $p > 0$ в СОМ. Остается при этом неясным, какой смысл тогда имеют решения с $p < 0$. Имеется и другая формулировка этого вопроса: какими критериями руководствоваться при выборе решений с $p > 0$ или $p < 0$ в СОМ. Авторы этого метода не дают четкого ответа на этот вопрос и руководствуются главным образом совпадением расчетов с данными численных экспериментов.

Идея нахождения параметров p в СОМ и p_1 в методе производящего функционала весьма плодотворна, но она, вообще говоря, нуждается в проверке процедурой самосогласования. В обоих случаях p и p_1 представляют вполне определенные выражения, составленные из статических спиновых и зарядовых корреляторов в СОМ и произведения трех электронных ФГ в GFA. В принципе их следовало бы непосредственно каким-то образом вычислить и сравнить с результатами подгоночной процедуры. Поскольку сделать такие расчеты пока трудно, вопрос о самосогласовании обоих подходов до конца не ясен.

Тем не менее, приближение среднего поля, включающее в себя параметр p_1 в GFA или p в СОМ, весьма содержательно, поскольку содержит эффекты статических флуктуаций. Двухполюсная ФГ этого приближения может быть использована далее для вычисления поправки к собственной энергии электрона $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ от динамических флуктуаций и для расчета бозеподобных ФГ, описывающих сами эти флуктуации. Динамические поправки к $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ могут быть вычислены в рамках приближения SCBA. Для вычисления бозонных ФГ (магнонов, плазмонов, дублонов) следует писать уравнения в вариационных производных, используя определения (2.20)-(2.22), в которые входят вариационные производные по флуктуирующим полям от собственно-энергетической части электрона Σ . Такой подход был использован нами ранее для модели Хаббарда в пределе $U \rightarrow \infty$ [11,15].

Другим направлением использования точных уравнений для электронной ФГ, выведенных нами, состоит в исследовании сверхпроводящего состояния в модели Хаббарда. Уравнения (3.14) для электронной ФГ включает в себя аномальные ФГ под знаком вариационных производных по полям v^{02} и v^{20} . Как мы показали, их следует учитывать для нормальной фазы, в которой эти производные не равны нулю, даже если сами аномальные ФГ равны нулю (как в нормальной фазе). Если последнего предположения не делать, из общего матричного уравнения (3.14) можно построить уравнения модели со сверхпроводящим параметром порядка (см. работу [17]).

Третье направление – исследование магнитоупорядоченных фаз модели, например ферромагнитной. Известно, что устойчивая ферромагнитная фаза существует в модели Хаббарда при достаточно больших U . Предварительный анализ решения уравнений (5.15)-(5.17) не обнаруживает устойчивых спин-поляризованных состояний. Для их возникновения необходимо учитывать взаимодействие электронов с динамическими спиновыми флуктуациями, содержащимися во вкладе $\Sigma_{red}(\mathbf{k}, \omega)$ (см. по этому поводу работу [18] и ссылки в ней).

Авторы благодарят Российский фонд поддержки научных школ, грант НШ-747.2003.2.

Литература

1. J. Hubbard, Proc.Roy. A 276, 238 (1963).
2. L. Roth, Phys.Rev. 184, 451 (1969).
3. F. Mancini, S. Marra, H. Matsumoto, Physica C. 244, 49 (1995).
4. A. Avella, F. Mancini, D. Villani, L. Siurakshina, V.Yu. Yushankhai, Int. J. Mod. Phys 12, 81 (1998).
5. F. Mancini, A. Avella, Cond. mat /0006377 V4 (2003).
6. W. Nolting, W. Borguel, Phys.Rev B 39, 6962 (1989).
7. M.C. Gutzwiller, Phys.Rev.Lett 10, 159 (1963).
8. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M.J. Rozenberg, Rev.Mod.Phys 68, 13 (1996).
9. S.E. Burnes, J.Phys F 6, 1375 (1976); 7, 2673 (1977).
10. G. Baym, L.P. Kadanoff, Phys.Rev 124, 287 (1961).
11. Ю.А. Изюмов, Н.И. Чащин, ФММ 92, №5, 30 (2001); 92, №6, 5 (2001); 93, №1, 23 (2002); 94, №6, 5 (2002); 94, №6, 17 (2002).
12. Ю.А. Изюмов, Н.И. Чащин, Д.С. Алексеев, ФММ 97, №2 (2004).
13. Ю.А. Изюмов, Н.И. Чащин, ФММ 97, №3 (2004).
14. Yu.A. Izuyomov, N.I. Chaschin, V.Yu. Yushankshai, Phys.Rev. B 65, 214425 (2002).
15. Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин, Базовые модели в квантовой теории магнетизма, Екатеринбург, Издательство УрО РАН (2002).
16. Yu.A. Izuyomov, in "Lectures on the Physics of highly correlated electron systems VII", AIP Conference proceedings, 678pp. 181-272 (2003).
17. N.M. Plakida, L. Anton, S. Adam, Gh. Adam, Cond.mat /0104232.
18. A.B. Зарубин, В.Ю. Ирхин, ФТТ 41, 1057 (1999)