

# Динамическое среднее поле в модели Хаббарда

© А.М. Сарры, М.Ф. Сарры

Институт теоретической и математической физики,  
607189 Саров, Нижегородская область, Россия  
e-mail: sarry@vniief.ru

(Поступило в Редакцию 15 октября 2009 г.)

В рамках однопримесной задачи, сформулированной для невырожденного гамильтониана Хаббарда, найдены общие выражения всех основных ее корреляционных функций, а также ее запаздывающие и опережающие термодинамические (мацубаровские) функции Грина. Эти результаты анализируются для случая нулевой температуры.

## Введение

Модель Хаббарда аналитически задается гамильтонианом изучаемой системы с одной невырожденной энергетической  $s$ -зоной [1]:

$$H = \sum_{jj'\sigma} t_{jj'} \hat{C}_{j\sigma}^+ \hat{C}_{j'\sigma} + (U/2) \sum_{j\sigma} \hat{n}_{j\sigma} \hat{n}_{j(-\sigma)} \\ \equiv [t_{(jj')} \equiv t] \sum_{(jj')\sigma} \hat{C}_{j\sigma}^+ \hat{C}_{j'\sigma} + U \sum_j \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow}. \quad (1)$$

Здесь  $C$  — энергия перескока электрона с узла  $i$  на узел  $j$  (в приближении ближайших соседей эта энергия одинакова и равна  $t$ ; тогда ширина этой  $s$ -зоны есть  $L = 2zt$ , где  $z$  — число ближайших соседей),  $\sigma$  — спиновой индекс электрона,  $U$  — кулоновское взаимодействие электронов, находящихся на одном узле и имеющих разные спины.

Модель Хаббарда обычно используется для прямого (а не в среднем!) учета сильных корреляционных эффектов (второй член в (1)) в узких энергетических зонах — это  $d$ -зоны в переходных металлах ( $3d$ -,  $4d$ - и  $5d$ -зоны) и особенно  $f$ -зоны (в лантаноидах это —  $4f$ -зоны и  $5f$ -зоны — в актиноидах), поскольку часты случаи, когда корреляционное взаимодействие между электронами узла именно в этих зонах играет принципиальную роль, кардинально изменяя свойства изучаемой системы.

В расчетах свойств твердых тел идея о целесообразности введения динамического среднего поля (DMFT — dynamical mean-field theory), основой которой являются фурье-образы  $G_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n)$  по  $j_2 - j_1$  и  $\tau_2 - \tau_1$  термодинамических (мацубаровских) функций Грина (ФГ)  $G_{j_1 j_2 \sigma}(\tau_2 - \tau_1)$ , была связана с обнаруженным расчетным эффектом исчезновения зависимости решеточных значений от квазиимпульса  $\mathbf{k}$  электронов (хотя именно решеточный (периодический) потенциал как раз и порождает квазиимпульс  $\mathbf{k}$  электрона, вместо его импульса  $\mathbf{p}$  в свободном пространстве), если мерность  $d$  гиперкубических решеток стремится к бесконечности (что ведет и к стремлению числа  $z = 2d$  ближайших соседей к бесконечности). Этот эффект впервые был обнаружен авторами работ [2,3]. Таким образом, например, ФГ становятся

локальными функциями, что радикально упрощает их фактическое вычисление и DMFT, по существу, является аналитическим оформлением этой локальности. Именно благодаря методу DMFT особенно широкое распространение снова возродилось у метода ФГ.

## 1. Среднее поле

Использование понятия среднего поля в теоретической физике основано на крайне плодотворной вычислительной идее, состоящей в том, что для нахождения важных физических характеристик всей изучаемой системы взаимодействующих частиц нужно знать отнюдь не детальное поведение каждой ее частицы, а только усредненное (надлежащим образом) поведение одной или двух ее типичных частиц. Величинами, аналитически описывающими это усредненное поведение одной или двух типичных частиц системы, непосредственно оказываются именно одно- и двухчастичные ФГ — причинные, запаздывающие и опережающие, взятые при нулевой или конечной температуре и в представлении  $j-t$  ( $j-\tau$ ), или в представлении  $\mathbf{k}-\omega$  ( $\mathbf{k}-i\omega_n$ ). Основное вычислительное преимущество использования этих ФГ в расчетах свойств твердых тел связано, во-первых, с возможностью вычисления ФГ с помощью диаграммной техники, которая обладает значительными преимуществами перед теорией возмущений в ее обычной форме и, во-вторых, с особыми свойствами их фурье-образов по координате  $\mathbf{r}$  и времени  $t$  (или по  $\mathbf{r}$  и  $\tau$ ) (точнее, по их разностям) и до учета эффекта локальности.

Термодинамическая одноэлектронная ФГ обычно определяется так:

$$G_{\alpha'\alpha}^{\text{Matsub}}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}, \tau_2 - \tau_1) = -\langle T[\hat{\Psi}_{\alpha'}(\mathbf{r}'\tau_2)\hat{\Psi}_{\alpha}^+(\mathbf{r}\tau_1)] \rangle \\ = \begin{cases} -\langle e^{H(\tau_2 - \tau_1)} \hat{\Psi}_{\alpha'}(\mathbf{r}') e^{-H(\tau_2 - \tau_1)} \hat{\Psi}_{\alpha}^+(\mathbf{r}) \rangle; & \tau_2 - \tau_1 > 0; \\ \langle e^{-H(\tau_2 - \tau_1)} \hat{\Psi}_{\alpha}^+(\mathbf{r}) e^{H(\tau_2 - \tau_1)} \hat{\Psi}_{\alpha'}(\mathbf{r}') \rangle; & \tau_2 - \tau_1 < 0; \end{cases} \\ T[\hat{B}(\tau_2)\hat{A}(\tau_1)] \equiv \begin{cases} \hat{\mathbf{B}}(\tau_2)\hat{A}(\tau_1), & \tau_2 > \tau_1; \\ -\hat{A}(\tau_1)\hat{\mathbf{B}}(\tau_2), & \tau_2 < \tau_1, \end{cases} \quad (2)$$

если  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  — фермиевские операторы. Здесь верхнее выражение можно назвать запаздывающей частью ФГ —  $G_{\alpha'\alpha}^{\text{Mat}\cdot\tau}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}, \tau)$ , поскольку она отлична от нуля только при условии  $\tau \equiv \tau_2 - \tau_1 > 0$ , и тогда ее фурье-образ по  $\tau$

$$G_{\alpha'\alpha}^{\text{Mat}\cdot r}(z) = \int_0^\beta d\tau e^{iz\tau} G_{\alpha'\alpha}^{\text{Mat}}(\tau) = \int_{-\beta}^\beta d\tau e^{iz\tau} G_{\alpha'\alpha}^{\text{Mat}\cdot\tau}(\tau) \quad (2^a)$$

может быть определен в верхней полуплоскости комплексной переменной  $z$ , а нижнюю ее часть — опережающей частью этой ФГ —  $G_{\alpha'\alpha}^{\text{Mat}\cdot a}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}, \tau)$  и ее фурье-образ по  $\tau$

$$G_{\alpha'\alpha}^{\text{Mat}\cdot a}(z) = \int_{-\beta}^0 d\tau e^{iz\tau} G_{\alpha'\alpha}^{\text{Mat}}(\tau) = \int_{-\beta}^\beta d\tau e^{iz\tau} G_{\alpha'\alpha}^{\text{Mat}\cdot a}(\tau) \quad (2^b)$$

можно будет определить в нижней полуплоскости  $z$ .

Фурье образ термодинамической ФГ по обоим аргументам имеет вид:

$$\begin{aligned} G_{\alpha'\alpha}^{\text{Matsub}}(\mathbf{k}, i\omega_n) &= \int_0^\beta d(\tau_2 - \tau_1) e^{i\omega_n(\tau_2 - \tau_1)} \\ &\times \int_V d(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) e^{-ik(\mathbf{r}' - \mathbf{r})} G_{\alpha'\alpha}^{\text{Matsub}}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}, \tau_2 - \tau_1) \\ &= \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n)} = \frac{1}{[G_0^{\text{Matsub}}(i\omega_n)]^{-1} - \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n)}; \\ \omega_n &= \frac{(2n+1)\pi}{\beta}. \end{aligned} \quad (3)$$

В этих выражениях, как и обычно, средние значения вычисляются так:

$$\langle \dots \rangle \equiv sp[e^{-\beta(H-\mu\hat{N})} \dots] / sp[e^{-\beta(H-\mu\hat{N})}], \quad (4)$$

где  $\mu$  — химический потенциал частиц системы (например, электронов),  $\tau \equiv it$  — мнимое время, причем  $[\tau] = [\beta]$  и  $0 \leq \tau \leq \beta$ ,  $\beta \equiv (1/kT)$ .

Формально точное соотношение для фурье-образа ФГ по ее обоим аргументам

$$G_{\alpha'\alpha}^{\text{Matsub}}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n)} \quad (5)$$

обычно называют уравнением Дайсона. Здесь, и в уравнении (3), величина  $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n)$  есть сумма всех неприводимых диаграмм разложения мацубаровской (термодинамической) ФГ — так называемая неприводимая собственно энергетическая часть этого разложения. При получении выражения (3) для ФГ предполагалось, во-первых, что гамильтониан не зависит от времени (и тогда ФГ есть функция только разности времен  $t'$ ,  $t \rightarrow t' - t$  и, следовательно, мнимых времен  $\tau$  тоже), и изучаемая

система, во-вторых, трансляционно-инвариантна (и тогда ФГ есть функция только разности координат  $\mathbf{r}'$ ,  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' - \mathbf{r}$ ). Это же выполняется и в случае однородных и бесконечных в пространстве систем при отсутствии внешних полей.

Значки  $\langle \dots \rangle$  усреднения, кроме смысла (4), могут означать и усреднение по основному состоянию (в случае  $T = 0$ ), и тогда явный вид выражения (4) таков:

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}, t' - t; E_0, N) \\ = -\langle N, E_0 | T[\hat{\Psi}_\beta(\mathbf{r}'t') \hat{\Psi}_\alpha^+(\mathbf{r}t)] | E_0, N \rangle, \end{aligned} \quad (6)$$

т.е. ФГ в этом случае есть функция энергии  $E_0$  этого состояния системы, при заданном (фиксированном) значении числа  $N$  ее частиц. Усреднение временной температурной ФГ по большому каноническому ансамблю Гиббса с помощью статистического оператора  $\hat{\rho}_{nN} \equiv \exp[-\beta(H - \Omega - \mu\hat{N})]$  имеет вид

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}^T(\mathbf{r}' - \mathbf{r}, t' - t; T, \mu) &= - \sum_N e^{\beta(\Omega + N\mu)} \\ &\times \left\{ \sum_n e^{-\beta E_n} \langle N, E_n | T[\hat{\Psi}_\beta(\mathbf{r}'t') \hat{\Psi}_\alpha^+(\mathbf{r}t)] | E_n, N \rangle \right\} \\ &= -sp \left\{ e^{-\beta(H - \Omega - \mu\hat{N})} T[\hat{\Psi}_\beta(\mathbf{r}'t') \hat{\Psi}_\alpha^+(\mathbf{r}t)] \right\} \\ &= -sp \left\{ \hat{\rho}_{nN} T[\hat{\Psi}_\beta(\mathbf{r}'t') \hat{\Psi}_\alpha^+(\mathbf{r}t)] \right\} \end{aligned} \quad (7)$$

и теперь ФГ есть функции температуры  $T$  системы и фиксированного значения химического потенциала  $\mu$  ее электронов. Эта, последняя, ФГ называется температурной (температурные и термодинамические (т.е. мацубаровские) ФГ — это разные ФГ) — для временных температурных ФГ, как и для двухвременных температурных ФГ (последние предложены Боголюбовым и Тябликовым (БТ) еще в 1959 г. [4]), нет диаграммной техники. Поэтому при  $T \neq 0$  пользуются термодинамическими ФГ с мнимым временем  $\tau$ , для которых Мацубара [5] разработал диаграммную технику.

## 2. Вычислительные свойства фурье-образов ФГ

Как уже было отмечено выше, в случае многомерных кубических решеток существенно ослабляется, или даже вовсе исчезает, зависимость у собственно энергетической части,  $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n)$  фурье-образа (3) от квазиимпульса  $\mathbf{k}$  электрона. Таким образом, в этом случае можно положить  $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n) \rightarrow \Sigma(i\omega_n)$  и взять этот фурье-образ не в виде (3), а в сильно упрощенном виде

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}, i\omega_n) &= \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(i\omega_n)} \\ &= \frac{1}{[G_0^{\text{Matsub}}(i\omega_n)]^{-1} - \Sigma(i\omega_n)}. \end{aligned} \quad (3^a)$$

Теперь зависимость ФГ от квазиимпульса  $\mathbf{k}$  электрона связана только с зависимостью от него лишь электронной энергетической зоны  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ . В случае хаббардовского гамильтониана (1) эта энергетическая  $s$ -зоны имеет вид:

$$t_{\mathbf{k}} = t_{(jj')} \sum_{(j-j')} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})} = -2t(\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z) \equiv \varepsilon_{\mathbf{k}}, \quad \text{в ПК-решетке,} \quad (8)$$

$$t_{\mathbf{k}} = -t \cos ak_x \cos ak_y \cos ak_z \equiv \varepsilon_{\mathbf{k}}, \quad \text{в ОЦК-решетке,} \quad (9)$$

$$t_{\mathbf{k}} = -t(\cos ak_x \cos ak_y + \cos ak_x \cos ak_z + \cos ak_y \cos ak_z) \equiv \varepsilon_{\mathbf{k}}, \quad \text{в ГЦК-решетке.} \quad (10)$$

Разумеется на деле главный интерес представляют „гиперкубические“ решетки малой мерности — двумерные и трехмерные. Численные расчеты показали, что даже эти решетки можно считать решетками достаточно большой мерности.

Второе свойство уравнений Дайсона (5) состоит в том, что использование даже приближенного выражения для  $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n)$  (или для  $\Sigma(i\omega_n)$ ), а фактически только такое и возможно для собственно энергетической части, уже равнозначно суммированию бесконечной подпоследовательности членов из ряда разложения самой ФГ. Однако даже эти особенности, безусловно облегчающие проведение фактических расчетов свойств твердых тел с использованием ФГ, на деле часто оказываются совершенно недостаточными. Эта почти непробиваемая аналитически решеточная проблема многих взаимодействующих электронов в исходной решетке решается путем замены ее на задачу с одним лишь узлом, помещенным в резервуар невзаимодействующих между собой электронов из валентных электронов всех других узлов решетки, создающих динамическое среднее поле (DMFT) (поле зависит от времени, поскольку этот узел может захватывать электроны из резервуара или отдавать их туда), которое как раз и действует на электроны выделенного узла решетки, т.е. метод DMFT сводит исходную многоузельную задачу к так называемой однопримесной задаче. Как уже отмечалось, выше, именно в связи с методом DMFT особенно широкое распространение снова возродилось у метода ФГ, который в комбинации с методом DMFT достаточно сильно упрощает проблему расчета различных свойств твердых тел, поскольку метод DMFT значительно упрощает вычисление самой, теперь уже локальной, ФГ. Однако то, что задача является решеточной, т.е. ее решение строится в периодическом потенциале, отражено в форме кинетических энергий  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  (8)–(10) электрона, через которые зависит сама ФГ.

Здесь, наверное, полезно будет отметить, что, например, в приближениях Хартри или ХФ также рассматривается только один узел (одна ячейка в одноатомных кристаллах), но на границах ячейки ставятся периодические граничные условия, призванные учесть наличие

и всех других ячеек кристалла, и во внутриячеечном приближении (наиболее часто используемом) рассматриваемая ячейка вообще не „общается“ электронами с внешним миром“, т.е. они не являются однопримесными задачами.

### 3. Аналитические методы вычисления ФГ

Имеется два аналитических пути для вычисления ФГ — это либо решить уравнение движения (УД) для соответствующих ФГ, либо же воспользоваться теорией возмущений для ФГ. Оба этих подхода ведут к оперированию с бесконечными цепочками УД или с бесконечными рядами теории возмущений. Вычислительным недостатком первого подхода было отсутствие регулярного, либо же хотя бы внятного, способа расщепления бесконечной цепи. Вычислительный недостаток второго подхода — медленная сходимость рядов теории возмущений (если они вообще сходятся), что приводит к необходимости суммировать бесконечные подпоследовательности этих рядов. На практике чаще всего используется диаграммное разложение теории возмущений для ФГ (поскольку здесь, по крайней мере, совершенно четко определен каждый последующий уточняющий шаг) и поэтому в работах, связанных с их использованием, обычно фигурируют два основных понятия — неприводимая собственно энергетическая часть  $\Sigma$  ФГ (в случае одночастичной ФГ), она представляет собой бесконечную сумму всех неприводимых диаграмм (все они имеют по два свободных конца и не распадаются на две отдельные части путем разрыва лишь одной фермионной линии диаграммы), и неприводимая вершинная часть  $\Gamma$  ФГ (в случае двухчастичной ФГ) — она представляет собой такую же сумму неприводимых вершинных частей (все они имеют по четыре свободных конца и не распадаются на две отдельные части, если в такой диаграмме разорвать только две фермионные линии). Диаграммное разложение используется именно для этих частей, а не для самих ФГ, поскольку сами ФГ фактически вычисляются из интегральных уравнений для них, ядрами которых как раз и служат эти неприводимые части, либо из уравнений Дайсона, где опять ищется разложение собственно энергетической части.

О том, какую именно информацию о различных свойствах изучаемой системы можно получить, уже имея искомые ФГ, очень подробно изложено, например, в книгах [6,7].

Общие правила вычисления ФГ какой-либо однопримесной задачи, т.е. в случае использования DMFT, с конкретным гамильтонианом (к сожалению, не вполне четкие и ясные) имеются в обзорной статье [8]. Ниже предлагается, по-видимому, наиболее простой вариант построения DMFT для хаббардовского гамильтониана (1), который основан на экзотическом его усредне-

нии, впервые использованном в работе [9] для иных целей.

#### 4. Динамическое среднее поле

Для построения DMFT можно воспользоваться экзотическим усреднением хаббардовского гамильтониана (1) в виде [9]

$$t_{(jj')} \sum_{(j'')\sigma} \hat{C}_{j\sigma}^+ \hat{C}_{j''\sigma} \rightarrow t_{(jj')} \sum_{(j'')\sigma} (\hat{C}_{j\sigma}^+ \langle \hat{C}_{j''\sigma} \rangle + \langle \hat{C}_{j\sigma}^+ \rangle \hat{C}_{j''\sigma}), \quad (11)$$

которое затрагивает только его первую часть. Здесь усреднение можно вести по основному состоянию (или по распределению Гиббса). Поскольку средние типа  $\langle \hat{C}_{j\sigma}^\pm \rangle$  в правильной решетке не должны зависеть от номера  $j$  узла, т.е.  $\langle \hat{C}_{j\sigma}^\pm \rangle = C_\sigma^\pm$ , то эта задача после усреднения сводится к рассмотрению системы, состоящей из резервуара электронов и одного выделенного ( $j$ -го) узла решетки, описываемой гамильтонианом:

$$H_j = \left[ z t_{(jj')} \sum_{\sigma} (\hat{C}_{j\sigma}^+ \langle \hat{C}_{j\sigma} \rangle + \langle \hat{C}_{j\sigma}^+ \rangle \hat{C}_{j\sigma}) \right] + \left[ \sum_{\sigma} \hat{n}_{j\sigma} \{ (U/2) \hat{n}_{j(-\sigma)} - \mu \} \right] \equiv H'_j + H_j^0. \quad (12)$$

Здесь  $z$  — число ближайших соседей узла  $j$ , а  $\mu$  — химический потенциал электронов. Экзотические средние величины  $\langle \hat{C}_{j\sigma}^\pm \rangle$  вычисляются по общей формуле (4). Такие средние величины для полного гамильтониана (1) обратились бы в нуль тождественно.

Гамильтониан (12), разумеется, описывает поведение каждого узла решетки, как и все результаты, получаемые с его помощью, относятся к любому ее узлу, т.е. исходная задача сведена к совокупности (по исходному числу узлов) задач с такими узлами.

У рассматриваемого узла  $j$  решетки имеется всего четыре двухэлектронных состояния:  $|0_\uparrow 0_\downarrow\rangle \equiv u_1$ ,  $|1_\uparrow 0_\downarrow\rangle \equiv u_2$ ,  $|0_\uparrow 1_\downarrow\rangle \equiv u_3$ ,  $|1_\uparrow 1_\downarrow\rangle \equiv u_4$ . Эта система  $\{u_i\}$  функций — полная и ортонормированная. Оператор  $\hat{n}_{j\sigma} = \hat{C}_{j\sigma}^+ \hat{C}_{j\sigma}$  числа электронов, в соответствии с принципом Паули, имеет лишь два собственных значения — это 0 и 1. Поэтому в представлении одноэлектронных функций  $v_1 \equiv |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

и  $v_2 \equiv |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  имеет вид:  $\hat{n}_{j\sigma} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$  и тогда

$\hat{C}_{j\sigma}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\hat{C}_{j\sigma} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ . Поэтому:  $\hat{C}_{j\sigma}^+ |0\rangle = |1\rangle$ ,

$\hat{C}_{j\sigma} |1\rangle = 0$ ,  $\hat{C}_{j\sigma} |0\rangle = 0$ ,  $\hat{C}_{j\sigma} |1\rangle = |0\rangle$ . Сами двухэлектронные функции  $u_i$  представимы в виде соответствующих произведений одноэлектронных функций  $v_{1\sigma} v_{2\sigma}$ , например,  $u_1 \equiv |0_\uparrow 0_\downarrow\rangle = v_{1\uparrow} v_{1\downarrow}$ ,  $u_2 \equiv |1_\uparrow 0_\downarrow\rangle = v_{2\uparrow} v_{1\downarrow}$  и т.д.

Имея в виду эту простую операторную алгебру, ортонормированность двухэлектронных состояний узла решетки, т.е.  $u_i^* u_i = \delta_{ii'}$  или так  $\langle n_j n_{j'} | n_i n_j \rangle = \delta_{ii'} \delta_{jj'}$ , где  $n_i, n_j = 0, 1$  — числа заполнения одноэлектронных состояний в двухэлектронных функциях  $u_i$ , и полностью двухэлектронных состояний, записываемой так:  $\sum_{\{n\}} |n_1 n_2\rangle \langle n_2 n_1| = 1$ , где суммирование идет по всем возможным парам чисел заполнения:  $\{n\} \equiv n_1 = 0, n_2 = 0$ ;  $n_1 = 0, n_2 = 1$ ;  $n_1 = 1, n_2 = 0$ ;  $n_1 = 1, n_2 = 1$ , можно вычислить всевозможные следы по двухэлектронным одноузельным состояниям. При этом полный оператор  $\exp(-\beta H_j)$  следует представить в виде произведения  $\exp(-\beta H'_j) \cdot \exp(-\beta H_j^0)$ , сохраняя их порядок. Это разбиение сильно облегчает вычисление действий этих операторов на двухэлектронные состояния  $u_i$ . Действительно, действие оператора  $\exp(-\beta H_j^0)$  таково:

$$\exp(-\beta H_j^0) u_1 = 1 u_1; \quad \exp(-\beta H_j^0) u_2 = u_2 e^{\beta \mu};$$

$$\exp(-\beta H_j^0) u_3 = u_3 e^{\beta \mu}; \quad \exp(-\beta H_j^0) u_4 = u_4 e^{-\beta(U-2\mu)}. \quad (13)$$

Для оператора  $\exp(\pm \beta H'_j)$ , в свою очередь, можно получить удобное выражение:

$$\exp(\pm \beta H'_j) = \text{ch}(\sqrt{\lambda} \beta) \pm \lambda^{-1/2} \text{sh}(\sqrt{\lambda} \beta) H'_j; \quad \lambda \equiv a_1 a_2 + a_3 a_4, \quad (14)$$

$$H'_j = z t_{(jj')} \sum_{\sigma} (\hat{C}_{j\sigma}^+ \langle \hat{C}_{j\sigma} \rangle + \langle \hat{C}_{j\sigma}^+ \rangle \hat{C}_{j\sigma}) = z t_{(jj')} [\langle \hat{C}_{j\uparrow} \rangle \hat{C}_{j\uparrow}^+ + \langle \hat{C}_{j\uparrow} \rangle \hat{C}_{j\uparrow} + \langle \hat{C}_{j\downarrow} \rangle \hat{C}_{j\downarrow}^+ + \langle \hat{C}_{j\downarrow} \rangle \hat{C}_{j\downarrow}] \equiv a_1 \hat{C}_{j\uparrow}^+ + a_2 \hat{C}_{j\uparrow} + a_3 \hat{C}_{j\downarrow}^+ + a_4 \hat{C}_{j\downarrow}. \quad (14^a)$$

Для получения выражения (14) нужно, во-первых, учесть фермионные соотношения типа  $(\hat{C}_{j\sigma}^\pm)^2 = 0$  и  $(\hat{n}_{j\sigma})^2 = \hat{n}_{j\sigma}$ , которые приводят к простым степеням гамильтониана  $H'_j$ :

$$(H'_j)^2 = a_1 a_2 + a_3 a_4 \equiv \lambda; \quad (H'_j)^3 = \lambda H'_j;$$

$$(H'_j)^4 = \lambda^2; \quad (H'_j)^5 = \lambda^2 H'_j; \quad (H'_j)^6 = \lambda^3$$

и т.д., по-вторых, разложить исходную экспоненту в степенной ряд, затем перестроить его в два ряда и найти отдельную сумму каждого нового ряда.

Используя формулу (14) и имея в виду соотношения (13), можно достаточно просто вычислить по формуле (4), причем точно вычислить, любые средние величины, в том числе и ФГ, относящиеся к системе с гамильтонианом  $H_j$ , по состояниям этой системы. Кстати, из-за того, что у этой системы имеется всего четыре состояния, то ее ФГ, точнее, ее неприводимую собственно энергетическую часть  $\Sigma(i\omega_n)$  в формуле (3<sup>a</sup>), можно точно вычислить и по теории возмущений — этот ряд для нее сам собой оборвется уже на поправке четвертого порядка из-за наличия лишь трех промежуточных состояний.

Ниже приводятся наиболее важные средние величины:

$$\text{sp}(e^{-\beta H_j}) = [2 + e^{-\beta\mu} + e^{-\beta(U-\mu)}]e^{\beta\mu} \text{ch}(\sqrt{\lambda}\beta), \quad (15)$$

$$\langle \hat{C}_{j\sigma}^{\pm} \rangle = -\frac{a_{2(1)}\delta_{\sigma\uparrow} + a_{4(3)}\delta_{\sigma\downarrow}}{\sqrt{\lambda}} \frac{1 + e^{-\beta\mu}}{2 + e^{-\beta\mu} + e^{-\beta(U-\mu)}} \text{th}(\sqrt{\lambda}\beta), \quad (16)$$

$$\langle \hat{n}_{j\sigma} \rangle = \frac{1 + e^{-\beta(U-\mu)}}{2 + e^{-\beta\mu} + e^{-\beta(U-\mu)}}, \quad (17)$$

$$\langle \hat{n}_{j\uparrow}\hat{n}_{j\downarrow} \rangle = \frac{e^{-\beta(U-\mu)}}{2 + e^{-\beta\mu} + e^{-\beta(U-\mu)}}. \quad (18)$$

Внутренняя энергия рассматриваемой системы есть

$$\langle H_j \rangle = \frac{(U - 2\mu)e^{-\beta(U-\mu)} - \mu(e^{-\beta\mu} + 1)}{2 + e^{-\beta\mu} + e^{-\beta(U-\mu)}} - \sqrt{\lambda} \text{th} \sqrt{\lambda}\beta. \quad (19)$$

## 5. Явные выражения для термодинамических ФГ рассматриваемой задачи

Теория ФГ, в которой фигурирует одноэлектронная причинная (полная) ФГ, описывает свойства двух систем с числом электронов (в их промежуточных состояниях)  $N + 1$  и  $N - 1$  соответственно, что бывает неудобно. Однако ту же теорию ФГ можно сформулировать, используя либо только опережающую часть полной (причинной) ФГ (опережающая ФГ), либо только ее запаздывающую часть (запаздывающая ФГ).

Запаздывающая ( $\tau_1 - \tau_2 > 0$ ), или частичная, термодинамическая ФГ для одноузельного гамильтониана (12) имеет вид:

$$\begin{aligned} G_{j\sigma j\sigma'}^{\text{Mat-}r}(\tau_1 - \tau_2 > 0) &= -\langle \hat{\Psi}_{j\sigma}(\tau_1) \hat{\Psi}_{j\sigma'}^+(\tau_2) \rangle \delta_{\sigma\sigma'} \\ &= -\langle e^{H_j(\tau_1 - \tau_2)} \hat{\Psi}_{j\sigma} e^{-H_j(\tau_1 - \tau_2)} \hat{\Psi}_{j\sigma'}^+ \rangle \delta_{\sigma\sigma'}. \end{aligned} \quad (20)$$

Опережающая ( $\tau_1 - \tau_2 < 0$ ), или дырочная, термодинамическая ФГ такова:

$$\begin{aligned} G_{j\sigma j\sigma'}^{\text{Mat-}a}(\tau_1 - \tau_2 < 0) &= \langle \hat{\Psi}_{j\sigma}^+(\tau_2) \hat{\Psi}_{j\sigma'}(\tau_1) \rangle \delta_{\sigma\sigma'} \\ &= \langle e^{-H_j(\tau_1 - \tau_2)} \hat{\Psi}_{j\sigma}^+ e^{H_j(\tau_1 - \tau_2)} \hat{\Psi}_{j\sigma'} \rangle \delta_{\sigma\sigma'}. \end{aligned} \quad (21)$$

В том, что недиагональная по спиновым индексам ФГ равна нулю, легко убедиться, например, непосредственным вычислением (если это не видно и без вычислений).

Приведа достаточно громоздкие аналитические вычисления с использованием формул (13) и формулы (14), переписанную в более общем виде

$$\begin{aligned} \exp(\pm s H_j') &= \text{ch}(\sqrt{\lambda}s) \pm \lambda^{-1/2} \text{sh}(\sqrt{\lambda}s) H_j' \equiv A_s \pm B_s H_j'; \\ \lambda &\equiv a_1 a_2 + a_3 a_4, \end{aligned} \quad (22)$$

где  $s$  может означать одну из букв:  $s = \alpha \equiv \tau_1 - \tau_2$ ,  $\beta$ ,  $\delta \equiv \alpha + \beta$ ,  $\gamma \equiv \alpha - \beta$ , можно получить следующие

явные выражения в „ $j - \tau$ “ представлении, для запаздывающей и опережающей одноэлектронной ФГ — опережающая ФГ:

$$\begin{aligned} G_{j\sigma}^{\text{Mat}}(\alpha > 0) &= \left\{ -A_\alpha A_\gamma e^{\beta\mu} [e^{\alpha\mu} e^{-\beta\mu} + e^{-\alpha(U-\mu)}] + (a_1 a_2 \delta_{\sigma\downarrow} \right. \\ &\quad \left. + a_3 a_4 \delta_{\sigma\uparrow}) B_\alpha B_\gamma e^{\beta\mu} [1 + e^{-\beta\mu} e^{-\alpha(U-2\mu)}] \right\} / \text{sp} e^{-\beta H_j}; \end{aligned} \quad (23)$$

— „нулевая“ (т. е. при  $H_j' = 0$ ) опережающая ФГ:

$$\begin{aligned} G_{j\sigma 0}^{\text{Mat}}(\alpha > 0) &= -e^{\beta\mu} [e^{-\beta\mu} e^{\alpha\mu} + e^{-\alpha(U-\mu)}] / \text{sp} e^{-\beta H_j^0} \\ &= -[e^{\alpha\mu} e^{-\beta\mu} + e^{-\alpha(U-\mu)}] / [2 + e^{-\beta\mu} + e^{-\beta(U-\mu)}], \end{aligned} \quad (23^a)$$

здесь

$$\text{sp} e^{-\beta H_j^0} = 1 + 2e^{\beta\mu} + e^{-\beta(U-2\mu)} = [2 + e^{-\beta\mu} + e^{-\beta(U-\mu)}] e^{\beta\mu} \quad (24)$$

и это выражение можно сравнить с выражением (15);

— запаздывающая ФГ:

$$\begin{aligned} G_{j\sigma}^{\text{Mat}}(\alpha < 0) &= \left\{ A_\alpha A_\delta e^{\beta\mu} [e^{\alpha\mu} + e^{-\alpha(U-\mu)} e^{-\beta(U-\mu)}] \right. \\ &\quad \left. - (a_1 a_2 \delta_{\sigma\downarrow} + a_3 a_4 \delta_{\sigma\uparrow}) B_\alpha B_\delta \right. \\ &\quad \left. \times e^{\beta\mu} [1 + e^{-\alpha(U-2\mu)} e^{-\beta(U-\mu)}] \right\} / \text{sp} e^{-\beta H_j}; \end{aligned} \quad (25)$$

— „нулевая“ запаздывающая ФГ:

$$\begin{aligned} G_{j\sigma 0}^{\text{Mat}}(\alpha < 0) &= e^{\beta\mu} [e^{\alpha\mu} + e^{-\alpha(U-\mu)} e^{-\beta(U-\mu)}] / \text{sp} e^{-\beta H_j^0} \\ &= [e^{\alpha\mu} + e^{-\alpha(U-\mu)} e^{-\beta(U-\mu)}] / [2 + e^{-\beta\mu} + e^{-\beta(U-\mu)}]. \end{aligned} \quad (25^a)$$

Теперь из выражений (23) и (25) можно получить их фурье-образы по разности мнимых времен  $\tau_1 - \tau_2 \equiv \alpha$ , используя общую формулу такого преобразования [7]:

$$G_{j\sigma}^{\text{Mat}}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\alpha e^{i\omega_n \alpha} G_{j\sigma}^{\text{Mat}}(\alpha); \quad \omega_n = (2n + 1)\pi/\beta. \quad (26)$$

Проведем некоторые простые, но содержательные выводы, относящиеся к случаю  $T = 0$ .

а) Из выражения (16) для экзотических средних получаем в этом пределе

$$\lim_{T \rightarrow 0} \langle \hat{C}_{j\sigma}^{\pm} \rangle = -\frac{1}{2} \frac{a_{2(1)}\delta_{\sigma\uparrow} + a_{4(3)}\delta_{\sigma\downarrow}}{\sqrt{\lambda}}. \quad (27)$$

Эти величины положительны, поскольку параметр  $t$  в приближении ближайших соседей для  $s$ -зон отрицателен. Из (27) получается связь ( $\langle \hat{C}_{j\sigma} \rangle \equiv C_\sigma$ ,  $\langle \hat{C}_{j\sigma}^+ \rangle \equiv C_\sigma^*$ ):

$$|C_\uparrow|^2 + |C_\downarrow|^2 = 1/4. \quad (28)$$

Решения этого уравнения (оно легко решается графически в плоскости, например, с абсциссой  $|C_\downarrow|^2$  и

ординатой  $|C_{\uparrow}|^2$  даются точками пересечения прямых, которые получаются при поочередном решении связи (28) относительно одной из этих величин. Поскольку эти прямые всюду совпадают, то искомые величины всегда отличны от нуля, исключая только крайние точки:  $|C_{\uparrow}|^2 = 0$ , если  $|C_{\downarrow}|^2 = 1/4$ , либо наоборот.

б) Средние значения чисел заполнения состояний при нулевой температуре

$$\langle \hat{n}_{j\sigma} \rangle = \lim_{T \rightarrow 0} \left\{ [1 + e^{-\beta(U-\mu)}] / [2 + e^{-\beta\mu} + e^{-\beta(U-\mu)}] \right\} = 1/2, \quad (29)$$

и при половинном заполнении ( $n = 1$ ) имеем антиферромагнетизм.

в) Двойное заполнение состояния  $u_4 \equiv |1_{\uparrow}1_{\downarrow}\rangle$

$$\langle \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} \rangle = \lim_{T \rightarrow 0} \left\{ e^{-\beta(U-\mu)} / [2 + e^{-\beta\mu} + e^{-\beta(U-\mu)}] \right\} = 0 \quad (30)$$

при нулевой температуре полностью отсутствует, что находится в полном согласии с (29).

г) Внутренняя энергия при нулевой температуре имеет вид

$$\begin{aligned} \langle H_j \rangle - \lim_{T \rightarrow 0} \left[ \frac{(U - 2\mu)e^{-\beta(U-\mu)} - \mu(e^{-\beta\mu} + 1)}{2 + e^{-\beta\mu} + e^{-\beta(U-\mu)}} \right. \\ \left. - \sqrt{\lambda} \operatorname{th} \sqrt{\lambda} \beta \right] &= -[(1/2)\mu + \sqrt{\lambda}] \\ &= -[(1/2)\mu + \sqrt{(zt)^2(1/4)}] = -(1/2)(z|t| + \mu), \quad (31) \end{aligned}$$

т.е. антиферромагнитное состояние является вполне устойчивым состоянием.

д) Ввиду громоздкости этих выражений здесь приводятся фурье-образцы по формуле (26) только нулевых ФГ при нулевой температуре:

$$\begin{aligned} G_{j\sigma 0}^{\text{Mat-r}}(i\omega_n) + G_{j\sigma 0}^{\text{Mat-a}}(i\omega_n) &= G_{j\sigma 0}^{\text{Mat}}(i\omega_n) \\ &= \frac{1/2}{i\omega_n - U + \mu} + \frac{1/2}{i\omega_n + \mu}. \quad (32) \end{aligned}$$

Уходя из комплексной плоскости  $i\omega_n \equiv z$  и приближаясь к действительной оси сверху и снизу от нее, одновременно имея в виду аналитические свойства запаздывающей ФГ и опережающей ФГ, выражение (32) следует переписать так:

$$\begin{aligned} G_{j\sigma 0}^{\text{Mat-r}}(\omega) + G_{j\sigma 0}^{\text{Mat-a}}(\omega) &= G_{j\sigma 0}^{\text{Mat}}(\omega) \\ &= \lim_{\delta \rightarrow +0} \left[ \frac{1/2}{\omega - U + \mu + i\delta} + \frac{1/2}{\omega + \mu - i\delta} \right]. \quad (33) \end{aligned}$$

Для случая половинного заполнения зоны ( $n = 1$ ) это выражение примет вид:

$$G_{j\sigma 0}^{\text{Mat}}(\omega) = \lim_{\delta \rightarrow +0} \left[ \frac{1/2}{\omega - U/2 + i\delta} + \frac{1/2}{\omega + U/2 - i\delta} \right], \quad (34)$$

т.е. фактически дает спектральную плотность уединенного атома.

Наконец, приведем выражения (23) и (25) для нулевой температуры:

$$\begin{aligned} G_{j\sigma}^{\text{Mat-a}} &= (1/2)(\operatorname{sh} \sqrt{\lambda} \alpha - \operatorname{ch} \sqrt{\lambda} \alpha) \{ \exp[\alpha(\mu - U)] \operatorname{ch} \\ &\quad \times \sqrt{\lambda} \alpha + (a/\lambda) \operatorname{sh} \sqrt{\lambda} \alpha \}, \quad (35) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_{j\sigma}^{\text{Mat-r}} &= (1/2)(\operatorname{sh} \sqrt{\lambda} \alpha + \operatorname{ch} \sqrt{\lambda} \alpha) [ \exp(\alpha\mu) \operatorname{ch} \sqrt{\lambda} \alpha \\ &\quad - (a/\lambda) \operatorname{sh} \sqrt{\lambda} \alpha ], \quad (36) \end{aligned}$$

где введено обозначение:  $a \equiv a_{1a_2} \delta_{\sigma\downarrow} + a_{3a_4} \delta_{\sigma\uparrow}$ .

## Список литературы

- [1] Hubbard J. // Proc. Roy. Soc. 1963. Vol. A236. P. 238.
- [2] Metzner W., Vollhardt D. // Phys. Rev. Lett. 1989. Vol. 62. P. 324.
- [3] Muller-Hartman F. // Z. Phys. 1989. Bd B74. S. 507.
- [4] Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. // ДАН СССР. 1959. Vol. 126. С. 53.
- [5] Matsubara T. // Prog. Theor. Phys. 1955. Vol. 14. P. 351.
- [6] Бонч-Бруевич В.Л., Тябликов С.В. Метод функций Грина в статистической механике. М.: Физматгиз, 1961.
- [7] Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Физматгиз, 1962.
- [8] Georges A., Kotliar G., Krauth W. et al. // Rev. Mod. Phys. 1996. Vol. 68. N 1. P. 13.
- [9] Caron L.G., Pratt G.W. // Rev. Mod. Phys. 1968. Vol. 40. N 4. P. 802.