

Наносистемы в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций

© Г.И. Миронов

Марийский государственный педагогический институт,
424002 Йошкар-Ола, Россия

E-mail: mir@mgpi.mari.ru

(Поступила в Редакцию 30 сентября 2005 г.)

В приближении статических флуктуаций вычисляются антикоммутаторные функции Грина, корреляционные функции, энергии основного состояния для наносистем, состоящих из 2, 3, 4 атомов. Проводится сравнение с результатами точных вычислений.

PACS: 71.10.Fd, 75.10.Jm

Последнее десятилетие характеризуется активным развитием атомной инженерии (см., например, [1,2]). Прогресс, достигнутый в этой области, позволяет конструировать и исследовать наносистемы (нанокластеры), состоящие из небольшого количества одинаковых атомов [3,4]. Нанокластеры показывают интересные свойства, отличающиеся от свойств массивных образцов [3,4]. В частности, эксперименты свидетельствуют о том, что энергия такой системы имеет неэкстенсивный характер, она не пропорциональна количеству атомов в системе [5]. Для теоретического анализа наносистем, состоящих из атомов переходных металлов [6,7], используется модель Хаббарда [8].

В [9,10] была разработана методика решения модели Хаббарда [8] в приближении статических флуктуаций, в [11] вычислена и исследована энергия основного состояния двухмерной бипартитной модели Хаббарда [12]. Сравнение полученных в [11] результатов с точным решением одномерной модели Хаббарда [13] показало, что приближение статических флуктуаций довольно адекватно передает поведение системы, описываемой гамильтонианом Хаббарда, в области как слабых, так и сильных корреляций. В [11] показано, что в пределах $U = 0$ и $U = \infty$ энергии основного состояния в приближении статических флуктуаций [9,10] и в случае точного решения [13] совпадают, в области промежуточных значений U имеется хорошее согласие с точным решением. Это позволяет сделать вывод о том, что приближение статических флуктуаций хорошо работает как в области слабых, так промежуточных и сильных корреляций, что особенно важно в случае слоистых купратов [12]. В [14,15] в приближении статических флуктуаций была вычислена магнитная восприимчивость двумерной двухподрешеточной модели Хаббарда. Сравнение результатов, полученных в [15], с точным решением одномерной модели Хаббарда в магнитном поле [16] выявило, что в частном случае одномерной модели Хаббарда в присутствии магнитного поля приближение статических флуктуаций и точное решение показывают почти совпадающие как качественно, так и количественно (с точностью до постоянного множителя)

результаты. Все эти результаты позволяют надеяться, что приближение статических флуктуаций можно применить и при решении „кластерных“ задач.

Цель настоящей работы — вычисление и исследование одночастичных функций Грина, термодинамических средних и энергии основного состояния в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций в случае, когда модель Хаббарда содержит 2, 3, 4 атома.

1. Нанокластер, состоящий из двух атомов (димер)

Гамильтониан Хаббарда в этом случае можно записать в виде ($i, j = 1, 2$)

$$\hat{H} = \varepsilon \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} + B \sum_{i \neq j, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}}, \quad (1)$$

здесь ε — собственная энергия электрона; U — энергия кулоновского взаимодействия электронов на одном узле с разными проекциями спинов; B — интеграл переноса, описывающий перескоки электронов с узла i на узел j за счет тепловых флуктуаций и энергии поля димера; $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$ — оператор числа частиц на узле i решетки со спином σ (проекцией спина σ), $\bar{\sigma} = -\sigma$; $a_{i\sigma}^+, a_{i\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электронов на узле i решетки со спином σ соответственно.

Ценность гамильтониана (1) заключается в том, что в этом случае задача Хаббарда решается точно, причем без использования анзаца Бете [13]. Точное решение этой задачи было произведено в [17]. Как показано в [17], Фурье-образы одночастичных функций Грина будут иметь вид ($(j = 1, 2)$, для определенности предположим, что $U > 2B$, т.е. имеем случай сильных корреляций)

$$\langle\langle a_{j\sigma}^+ | a_{j\sigma} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{1/4}{E - \varepsilon - B} + \frac{1/4}{E - \varepsilon + B} + \frac{1/4}{E - \varepsilon - U - B} + \frac{1/4}{E - \varepsilon - U + B} \right\}. \quad (2)$$

Знаменатели (полюса) функций Грина (5) определяют энергетический спектр

$$E_{1,2} = \varepsilon \pm B, \quad E_{3,4} = \varepsilon + U \pm B. \quad (3)$$

Вид энергетического спектра (3), получившегося в результате точного решения вполне понятен, атомная энергия ε и энергия $\varepsilon + U$ отдельных атомов при перекрывании волновых функций расщепляются на два подуровня (по количеству атомов в системе).

В случае когда на два атома приходится два электрона (в случае точно наполовину заполненной зоны), $\varepsilon = -U/2$ (см., например, [9]). Следовательно, спектр (3) можно переписать в виде

$$E_{1,2} = -\frac{U}{2} \pm B, \quad E_{3,4} = \frac{U}{2} \pm B. \quad (4)$$

Как было показано ранее, решение модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций довольно адекватно описывает свойства модели Хаббарда. Поэтому с методической точки зрения было бы интересно задачу о димере решить в приближении статических флуктуаций. Эта задача была решена в [18]. Было показано, что в рамках выбранного приближения

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{1\sigma}^+ | a_{1\sigma} \rangle\rangle_E = & \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{1/4}{E - \varepsilon - B} + \frac{1/4}{E - \varepsilon + B} \right. \\ & \left. + \frac{1/4}{E - \varepsilon - U - B} + \frac{1/4}{E - \varepsilon - U + B} \right\}. \quad (5) \end{aligned}$$

Аналогичное выражение было получено и для второго узла димера. Сравнение приближенного решения (5) и точного решения (2) показывает, что функции Грина совпадают. Таким образом, приближение статических флуктуаций при решении двухузельной задачи дает решение, совпадающее с точным решением, что еще раз подчеркивает, что приближение статических флуктуаций является весьма удачным и плодотворным. Используя решения, полученные для операторов рождения частиц в [18], можно получить следующее выражение для средней энергии системы, описываемой гамильтонианом (1):

$$E_0 = -U(\langle n_{1\uparrow} \rangle + \langle n_{1\downarrow} \rangle) + BF_{12} + 2U\langle n_{1\uparrow}n_{1\downarrow} \rangle, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} \langle n_{1\uparrow} \rangle = & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - S \right) \left[\left(1 - \frac{SU}{t_B} \right) f^+ \left(\frac{U}{2} + SU + t_B \right) \right. \\ & \left. + \left(1 + \frac{SU}{t_B} \right) f^+ \left(\frac{U}{2} + SU - t_B \right) \right] \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + S \right) \left[\left(1 - \frac{SU}{t_B} \right) f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU + t_B \right) \right. \\ & \left. + \left(1 + \frac{SU}{t_B} \right) f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU - t_B \right) \right], \quad (7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle n_{1\downarrow} \rangle = & \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + S \right) \left[\left(1 + \frac{SU}{t_B} \right) f^- \left(-\frac{U}{2} + SU - t_B \right) \right. \\ & \left. + \left(1 - \frac{SU}{t_B} \right) f^- \left(-\frac{U}{2} + SU + t_B \right) \right] \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - S \right) \left[\left(1 + \frac{SU}{t_B} \right) f^- \left(\frac{U}{2} + SU - t_B \right) \right. \\ & \left. + \left(1 - \frac{SU}{t_B} \right) f^- \left(\frac{U}{2} + SU + t_B \right) \right], \quad (8) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_{12} = & \frac{2B}{t_B} \left\{ \left(\frac{1}{2} - S \right) \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + SU + t_B \right) \right. \right. \\ & \left. \left. - f^+ \left(\frac{U}{2} + SU - t_B \right) \right] + \left(\frac{1}{2} + S \right) \right\} \\ & \times \left[f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU + t_B \right) - f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU - t_B \right) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle n_{1\uparrow}n_{1\downarrow} \rangle = & \langle n_{1\uparrow} \rangle \langle n_{1\downarrow} \rangle - \frac{1}{4} \left(\frac{1}{4} - S^2 \right) \left\{ \left(1 + \frac{SU}{t_B} \right) \right. \\ & \times \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + SU - t_B \right) - f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU - t_B \right) \right] + \left(1 - \frac{SU}{t_B} \right) \\ & \times \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + SU + t_B \right) - f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU + t_B \right) \right] \left. \right\}^2, \end{aligned}$$

$$t_B = \sqrt{(SU)^2 + B^2},$$

$$f^\pm(x) = (1 + \exp(\pm\beta x))^{-1}, \quad \beta = 1/kT.$$

Формула (6) будет представлять собой формулу для вычисления энергии основного состояния, если в (6) температуру $T \rightarrow 0$. Отметим, что выражение (6) получено для случая, когда на два узла кристаллической решетки приходится два электрона. Проекция спина S в (7), (8) и далее определена следующим образом:

$$S = (\langle n_{1\uparrow} \rangle - \langle n_{1\downarrow} \rangle) / 2. \quad (9)$$

Подставляя в (9) формулы (7), (8), мы получим самосогласованное уравнение для определения проекции спина S . В случае двух узлов решетки это самосогласованное уравнение будет иметь при $T = 0$ и при низких температурах единственное решение $S = 0$. Анализ энергии основного состояния проведем далее, заметим лишь, что основное состояние решетки из двух узлов с двумя электронами с энергией (6) является антиферромагнитным.

2. Нанокластер, состоящий из трех атомов в цепочке

Гамильтониан наносистемы, состоящей из трех атомов, представим в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = \varepsilon \sum_{i=1}^3 (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + B \sum_{\sigma} (a_{2\sigma}^+ a_{1\sigma} + a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma} \\ + a_{3\sigma}^+ a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^+ a_{3\sigma}), \\ \hat{V} = U \sum_{i=1}^3 n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \end{aligned} \quad (10)$$

Первое слагаемое в \hat{H}_0 описывает собственную энергию электронов, второе слагаемое — перескоки электронов с узла на узел, причем электроны с первого и третьего узлов могут перейти только на второй узел, а со второго узла — либо на первый, либо на третий узел. Слагаемое \hat{V} описывает кулоновское отталкивание электронов, оказавшихся на одном узле кристаллической решетки. Проекция спина σ в (10) принимает два значения, $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

Записав уравнение движения для операторов рождения, решив получившуюся систему уравнений в приближении статических флуктуаций, получим следующее выражение для Фурье-образа антикоммуляторной функции Грина:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{1\uparrow}^+ | a_{1\uparrow} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2} \left\{ \frac{\frac{1}{2} - S}{E - \varepsilon - U} \right. \\ + \frac{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} - S)(1 + \frac{SU}{\sqrt{S^2U^2 + 2B^2}})}{E - \varepsilon - U - SU + \sqrt{S^2U^2 + 2B^2}} \\ + \frac{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} - S)(1 - \frac{SU}{\sqrt{S^2U^2 + 2B^2}})}{E - \varepsilon - U - SU - \sqrt{S^2U^2 + 2B^2}} \\ + \frac{\frac{1}{2} + S}{E - \varepsilon} + \frac{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + S)(1 + \frac{SU}{\sqrt{S^2U^2 + 2B^2}})}{E - \varepsilon - SU + \sqrt{S^2U^2 + 2B^2}} \\ \left. + \frac{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + S)(1 - \frac{SU}{\sqrt{S^2U^2 + 2B^2}})}{E - \varepsilon - SU - \sqrt{S^2U^2 + 2B^2}} \right\}, \end{aligned} \quad (11)$$

где S — среднее значение проекции спина на узле решетки. Функция Грина (11) справедлива для общего случая произвольного значения числа электронов n , приходящихся на узел решетки ($0 \leq n \leq 2$).

Нас в первую очередь интересует случай, когда на каждый узел „решетки“ в среднем приходится один электрон (три узла нанокластера содержат три электрона). Воспользовавшись флуктуационно-диссипационной теоремой [19], можно показать, что в этом случае $\varepsilon = -U/2$, $S = 0$. Подставляя полученные выражения в (11), получим

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{1\uparrow}^+ | a_{1\uparrow} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{1/4}{E - \frac{U}{2}} + \frac{1/8}{E - \frac{U}{2} + \sqrt{2}|B|} \right. \\ + \frac{1/8}{E - \frac{U}{2} - \sqrt{2}|B|} + \frac{1/4}{E + \frac{U}{2}} \\ \left. + \frac{1/8}{E + \frac{U}{2} + \sqrt{2}|B|} + \frac{1/8}{E + \frac{U}{2} - \sqrt{2}|B|} \right\}. \end{aligned} \quad (12)$$

Полюса функции Грина (12) характеризуют энергетический спектр системы. Интересно отметить, что уровень энергии $-U/2$ расщепляется на три подуровня (по количеству атомов в квантовой системе) $-U/2 - \sqrt{2}|B|$, $-U/2$, $-U/2 + \sqrt{2}|B|$, подуровни находятся на расстоянии $\sqrt{2}|B|$ друг от друга. Интересно, что на центральном подуровне электрон может находиться с вероятностью $1/4$, а на подуровнях выше и ниже с вероятностью два раза меньше — $1/8$. Подуровень энергии $+U/2$ аналогичным образом расщепляется также на три подуровня. Отметим, что функция Грина для третьего узла будет аналогична (12). В случае же второго узла

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{2\uparrow}^+ | a_{2\uparrow} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2} \left\{ \frac{(\frac{1}{2} + S)(1 - \frac{SU}{\sqrt{S^2U^2 + 2B^2}})}{E - \varepsilon - U + SU + \sqrt{S^2U^2 + 2B^2}} \right. \\ + \frac{(\frac{1}{2} + S)(1 + \frac{SU}{\sqrt{S^2U^2 + 2B^2}})}{E - \varepsilon - U + SU - \sqrt{S^2U^2 + 2B^2}} \\ + \frac{(\frac{1}{2} - S)(1 - \frac{SU}{\sqrt{S^2U^2 + 2B^2}})}{E - \varepsilon + SU + \sqrt{S^2U^2 + 2B^2}} \\ + \frac{(\frac{1}{2} - S)(1 + \frac{SU}{\sqrt{S^2U^2 + 2B^2}})}{E - \varepsilon + SU - \sqrt{S^2U^2 + 2B^2}} \left. \right\}. \end{aligned} \quad (13)$$

Подставив в (14) $\varepsilon = -U/2$, $S = 0$, получим

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{2\uparrow}^+ | a_{2\uparrow} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{4} \left\{ \frac{1}{E - U/2 + \sqrt{2}|B|} \right. \\ + \frac{1}{E - U/2 + \sqrt{2}|B|} + \frac{1}{E + U/2 + \sqrt{2}|B|} \\ \left. + \frac{1}{E + U/2 + \sqrt{2}|B|} \right\}. \end{aligned} \quad (14)$$

Поведение функции Грина (14) на втором узле существенно образом отличается от (12). Отличие, по-видимому, обусловлено тем, что на второй атом могут переходить электроны как с первого, так и с третьего узла, по этой причине не могут реализоваться устойчивые одночастичное состояние с энергией $-U/2$ и двухчастичное состояние с энергией $+U/2$, тогда как в случае крайних атомов такие состояния могут реализоваться. Таким образом, для электронов на втором узле нанокластера энергетический спектр представляет собой совокупность четырех подуровней энергии: уровень энергии $-U/2$ подразделяется на два подуровня $-U/2 - \sqrt{2}|B|$, $-U/2 + \sqrt{2}|B|$, уровень энергии $+U/2$ подразделяется на подуровни $U/2 - \sqrt{2}|B|$, $U/2 + \sqrt{2}|B|$. Несимметричность (по возможности перехода электронов на соседние атомы) в расположении атомов в цепи сказывается на спектре элементарных возбуждений электронов, находящихся на центральном узле и на периферийных узлах.

Среднее значение энергии наносистемы, состоящей из трех атомов в виде цепи, будет выражаться следующим образом:

$$E_0 = -\frac{U}{2} (2\langle n_{1\uparrow} \rangle + 2\langle n_{1\downarrow} \rangle + \langle n_{2\uparrow} \rangle + \langle n_{2\downarrow} \rangle) + BF_{12} + U(2\langle n_{1\uparrow}n_{1\downarrow} \rangle + \langle n_{2\uparrow}n_{2\downarrow} \rangle), \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} \langle n_{1\sigma} \rangle &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - \sigma S \right) f^+ \left(\frac{U}{2} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + \sigma S \right) f^- \left(\frac{U}{2} \right) \\ &+ \frac{1}{4} \left(1 + \frac{\sigma SU}{t'_B} \right) \left[\left(\frac{1}{2} - \sigma S \right) f^+ \left(\frac{U}{2} + \sigma SU - t'_B \right) \right. \\ &+ \left. \left(\frac{1}{2} + \sigma S \right) f^+ \left(-\frac{U}{2} + \sigma SU - t'_B \right) \right] \\ &+ \frac{1}{4} \left(1 - \frac{\sigma SU}{t'_B} \right) \left[\left(\frac{1}{2} - \sigma S \right) f^+ \left(\frac{U}{2} + \sigma SU + t'_B \right) \right. \\ &+ \left. \left(\frac{1}{2} + \sigma S \right) f^+ \left(-\frac{U}{2} + \sigma SU + t'_B \right) \right], \quad (16) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle n_{2\sigma} \rangle &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + \sigma S \right) \left[\left(1 - \frac{\sigma SU}{t'_B} \right) f^+ \left(\frac{U}{2} - \sigma SU - t'_B \right) \right. \\ &+ \left. \left(1 + \frac{\sigma SU}{t'_B} \right) f^+ \left(\frac{U}{2} - \sigma SU + t'_B \right) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - \sigma S \right) \left[\left(1 - \frac{\sigma SU}{t'_B} \right) f^+ \left(-\frac{U}{2} - \sigma SU - t'_B \right) \right. \\ &+ \left. \left(1 + \frac{\sigma SU}{t'_B} \right) f^+ \left(-\frac{U}{2} - \sigma SU + t'_B \right) \right], \quad (17) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_{12} &= \frac{4B}{t'_B} \left\{ \left(\frac{1}{2} - S \right) \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + SU + t'_B \right) \right. \right. \\ &- \left. \left. f^+ \left(\frac{U}{2} + SU - t'_B \right) \right] + \left(\frac{1}{2} + S \right) \right\} \\ &\times \left[f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU + t'_B \right) - f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU - t'_B \right) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle n_{1\uparrow}n_{1\downarrow} \rangle &= \langle n_{1\uparrow} \rangle \langle n_{1\downarrow} \rangle - \frac{1}{4} \left(\frac{1}{4} - S^2 \right) \left\{ 2f^+ \left(\frac{U}{2} \right) - 1 \right. \\ &+ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{SU}{t'_B} \right) \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + SU - t'_B \right) \right. \\ &- \left. \left. f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU - t'_B \right) \right] + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{SU}{t'_B} \right) \right. \\ &\times \left. \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + SU + t'_B \right) - f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU + t'_B \right) \right] \right\}^2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle n_{2\uparrow}n_{2\downarrow} \rangle &= \langle n_{2\uparrow} \rangle \langle n_{2\downarrow} \rangle - \frac{1}{4} \left(\frac{1}{4} - S^2 \right) \left\{ \left(1 + \frac{SU}{t'_B} \right) \right. \\ &\times \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + SU - t'_B \right) - f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU - t'_B \right) \right] + \left(1 - \frac{SU}{t'_B} \right) \\ &\times \left. \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + SU + t'_B \right) - f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU + t'_B \right) \right] \right\}^2, \end{aligned}$$

$$t'_B = \sqrt{(SU)^2 + 2B^2}.$$

В формулах (16), (17) для множителя σ на правой стороне равенств выполняется правило

$$\sigma = \begin{cases} +1, & \sigma = \uparrow \\ -1, & \sigma = \downarrow \end{cases}.$$

В формулах (15)–(17) и далее проекция спина S определяется равенством (9). Формула (15) для энергии основного состояния получена для случая $n = 1$ — на три узла решетки приходится три электрона. Если в формулу (9) подставить выражения, вытекающие из (16), то мы получим самосогласованное уравнение для определения проекции спина S . Отметим, что, как и в случае двух узлов решетки (см. выше), существует единственное решение $S = 0$. Анализ формулы (15) проведем далее, отметим лишь, что основным состоянием наносистемы в виде цепи, состоящей из трех атомов, является антиферромагнитное состояние.

3. Нанокластер, состоящий из четырех атомов в цепочке

Гамильтониан системы, состоящей из четырех атомов, запишем в виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \varepsilon \sum_{i=1}^4 (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + B \sum_{\sigma} (a_{2\sigma}^+ a_{1\sigma} + a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma} + a_{3\sigma}^+ a_{2\sigma} \\ &+ a_{2\sigma}^+ a_{3\sigma} + a_{4\sigma}^+ a_{3\sigma} + a_{3\sigma}^+ a_{4\sigma}), \\ \hat{V} &= U \sum_{i=1}^4 n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (18) \end{aligned}$$

Слагаемое \hat{H}_0 в (18) описывает одночастичное состояние электрона на узле решетки и перескоки электронов с узла на узел за счет энергии „кристаллического“ поля наносистемы и энергии тепловых флуктуаций, слагаемое \hat{V} — кулоновское взаимодействие электронов, оказавшихся на одном атоме.

Фурье-образ антикоммутирующей функции Грина для первого атома в приближении статических флуктуаций имеет вид (из-за громоздкости формулы рассмотрим

частный случай, когда на четыре узла приходится четыре электрона)

$$\begin{aligned} \langle \langle a_{1\uparrow}^+ | a_{1\uparrow} \rangle \rangle_E = & \frac{i}{2\pi} \frac{1}{8} \left\{ \frac{1 + 1/\sqrt{5}}{E - U/2 - \sqrt{6 - 2\sqrt{5}}|B|/2} \right. \\ & + \frac{1 + 1/\sqrt{5}}{E + U/2 - \sqrt{6 - 2\sqrt{5}}|B|/2} + \frac{1 + 1/\sqrt{5}}{E - U/2 + \sqrt{6 - 2\sqrt{5}}|B|/2} \\ & + \frac{1 + 1/\sqrt{5}}{E + U/2 + \sqrt{6 - 2\sqrt{5}}|B|/2} + \frac{1 - 1/\sqrt{5}}{E - U/2 - \sqrt{6 + 2\sqrt{5}}|B|/2} \\ & + \frac{1 - 1/\sqrt{5}}{E + U/2 - \sqrt{6 + 2\sqrt{5}}|B|/2} + \frac{1 - 1/\sqrt{5}}{E - U/2 + \sqrt{6 + 2\sqrt{5}}|B|/2} \\ & \left. + \frac{1 - 1/\sqrt{5}}{E + U/2 + \sqrt{6 + 2\sqrt{5}}|B|/2} \right\}. \quad (19) \end{aligned}$$

В этом случае возникает более сложная ситуация, когда атомные уровни энергии $+U/2$ и $-U/2$ расщепляются на четыре подуровня каждая. Анализ функции Грина и энергетического спектра проводится аналогично тому, как это сделано в случае двух и трех узлов. Интересно отметить, что в случае второго и третьего (центральных) атомов энергетический спектр не будет отличаться от энергетического спектра периферийных атомов (первого и четвертого) в отличие от случая нанокластера, состоящего из трех узлов. Это отличие обусловлено, по-видимому, тем, что наличие двух центральных атомов успевает „перемешивать“ состояния крайних атомов, по этой причине чистые одночастичное и двухчастичное состояния в случае четырех атомов реализоваться не могут. Формулу, аналогичную (19), можно привести и для второго узла, отличие от (19) будет незначительным, поэтому выражение для Фурье-образа функции Грина для второго узла выписывать не будем. Отметим лишь один интересный момент: самым нижним энергетическим подуровнем является подуровень с энергией $-(U + \sqrt{6 + 2\sqrt{5}}|B|/2)$, рассматриваемый подуровень энергии будет заполняться на первом узле с вероятностью $(1 - 1/\sqrt{5})/8$, тогда как в случае второго узла вероятность заполнения будет несколько выше — она равна $(1 + 1/\sqrt{5})/8$. Получается так, что второй атом, имеющий большую возможность для обобществления „своего“ электрона (электрон со второго атома может перейти как на первый атом, так и на третий атом в отличие, например, от электрона первого атома, который может перейти только на второй атом), резервирует для „своего“ электрона при образовании наносистемы нижележащий уровень энергии. Среднее значение „энергетической емкости“ рассматриваемого подуровня равен $1/8$.

Среднее значение энергии квантовой системы, состоящей из четырех атомов, равно

$$\begin{aligned} E_0 = & -U(\langle n_{1\uparrow} \rangle + \langle n_{1\downarrow} \rangle + \langle n_{2\uparrow} \rangle + \langle n_{2\downarrow} \rangle) + BF_{12} \\ & + 2U(\langle n_{1\uparrow}n_{1\downarrow} \rangle + \langle n_{2\uparrow}n_{2\downarrow} \rangle), \quad (20) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \langle n_{1\sigma} \rangle = & \frac{1}{4} \left(1 + \frac{\sqrt{5}}{5} \right) \left\{ \left(1 - \frac{\sigma SU}{t_B''} \right) \left[\left(\frac{1}{2} - \sigma S \right) \right. \right. \\ & \times f^+ \left(\frac{U}{2} + \sigma SU + t_B'' \right) + \left(\frac{1}{2} + \sigma S \right) f^+ \left(-\frac{U}{2} + \sigma SU + t_B'' \right) \Big] \\ & + \left(1 + \frac{\sigma SU}{t_B''} \right) \left[\left(\frac{1}{2} - \sigma S \right) f^+ \left(\frac{U}{2} + \sigma SU - t_B'' \right) \right. \\ & \left. \left. + \left(\frac{1}{2} + \sigma S \right) f^+ \left(-\frac{U}{2} + \sigma SU - t_B'' \right) \right] \right\} + \frac{1}{4} \left(1 - \frac{\sqrt{5}}{5} \right) \\ & \times \left\{ \left(1 - \frac{\sigma SU}{t_B'''} \right) \left[\left(\frac{1}{2} - \sigma S \right) f^+ \left(\frac{U}{2} + \sigma SU + t_B''' \right) \right. \right. \\ & + \left(\frac{1}{2} + \sigma S \right) f^+ \left(-\frac{U}{2} + \sigma SU + t_B''' \right) \Big] \\ & + \left(1 + \frac{\sigma SU}{t_B'''} \right) \left[\left(\frac{1}{2} - \sigma S \right) f^+ \left(\frac{U}{2} + \sigma SU - t_B''' \right) \right. \\ & \left. \left. + \left(\frac{1}{2} + \sigma S \right) f^+ \left(-\frac{U}{2} + \sigma SU - t_B''' \right) \right] \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle n_{2\sigma} \rangle = & \frac{1}{4} \left(1 - \frac{\sqrt{5}}{5} \right) \left\{ \left(1 + \frac{\sigma SU}{t_B''} \right) \left[\left(\frac{1}{2} + \sigma S \right) \right. \right. \\ & \times f^+ \left(\frac{U}{2} - \sigma SU + t_B'' \right) + \left(\frac{1}{2} - \sigma S \right) f^+ \left(-\frac{U}{2} - \sigma SU + t_B'' \right) \Big] \\ & + \left(1 - \frac{\sigma SU}{t_B''} \right) \left[\left(\frac{1}{2} + \sigma S \right) f^+ \left(\frac{U}{2} - \sigma SU - t_B'' \right) \right. \\ & \left. \left. + \left(\frac{1}{2} - \sigma S \right) f^+ \left(-\frac{U}{2} - \sigma SU - t_B'' \right) \right] \right\} + \frac{1}{4} \left(1 + \frac{\sqrt{5}}{5} \right) \\ & \times \left\{ \left(1 + \frac{\sigma SU}{t_B'''} \right) \left[\left(\frac{1}{2} + \sigma S \right) f^+ \left(\frac{U}{2} - \sigma SU + t_B''' \right) \right. \right. \\ & + \left(\frac{1}{2} - \sigma S \right) f^+ \left(-\frac{U}{2} - \sigma SU + t_B''' \right) \Big] \\ & + \left(1 - \frac{\sigma SU}{t_B'''} \right) \left[\left(\frac{1}{2} + \sigma S \right) f^+ \left(\frac{U}{2} - \sigma SU - t_B''' \right) \right. \\ & \left. \left. + \left(\frac{1}{2} - \sigma S \right) f^+ \left(-\frac{U}{2} - \sigma SU - t_B''' \right) \right] \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_{12} = & B \frac{3 - \sqrt{5}}{t_B''} \left\{ \left(\frac{1}{2} - S \right) \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + SU + t_B'' \right) \right. \right. \\ & - f^+ \left(\frac{U}{2} + SU - t_B'' \right) \Big] + \left(\frac{1}{2} + S \right) \left[f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU + t_B'' \right) \right. \\ & \left. \left. - f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU - t_B'' \right) \right] \right\} + B \frac{3 + \sqrt{5}}{t_B'''} \left\{ \left(\frac{1}{2} - S \right) \right. \\ & \times \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + SU + t_B''' \right) - f^+ \left(\frac{U}{2} + SU - t_B''' \right) \right] \\ & \left. \left. + \left(\frac{1}{2} + S \right) \left[f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU + t_B''' \right) - f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU - t_B''' \right) \right] \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left\{ \begin{array}{l} \langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle \\ \langle n_{2\uparrow} n_{2\downarrow} \rangle \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \langle n_{1\uparrow} \rangle \\ \langle n_{2\uparrow} \rangle \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \langle n_{1\downarrow} \rangle \\ \langle n_{2\downarrow} \rangle \end{array} \right\} - \frac{1}{16} \left(\frac{1}{4} - S^2 \right) \\
& \times \left\{ \left(1 \pm \frac{1}{\sqrt{5}} \right) \left[\left(1 + \frac{SU}{t_B''} \right) \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + SU - t_B'' \right) \right. \right. \right. \\
& \left. \left. \left. - f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU - t_B'' \right) \right] + \left(1 - \frac{SU}{t_B''} \right) \right. \right. \right. \\
& \left. \left. \left. \times \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + SU + t_B'' \right) - f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU + t_B'' \right) \right] \right] \right\} \\
& + \left(1 \mp \frac{1}{\sqrt{5}} \right) \left[\left(1 + \frac{SU}{t_B'''} \right) \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + SU - t_B''' \right) \right. \right. \right. \\
& \left. \left. \left. - f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU - t_B''' \right) \right] - \left(1 - \frac{SU}{t_B'''} \right) \right. \right. \right. \\
& \left. \left. \left. \times \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + SU + t_B''' \right) - f^+ \left(-\frac{U}{2} + SU + t_B''' \right) \right] \right] \right\}^2, \\
& t_B'' = \sqrt{(6 - 2\sqrt{5})B^2 + 4S^2U^2} / 2, \\
& t_B''' = \sqrt{(6 + 2\sqrt{5})B^2 + 4S^2U^2} / 2.
\end{aligned}$$

Анализ решения (2) показывает, что в случае сильных корреляций основным состоянием наносистемы, состоящей из четырех атомов, является антиферромагнитное состояние.

4. Обсуждение результатов

На рис. 1 приведены графики зависимости $\langle n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \rangle$ в случае различных конфигураций атомов. График 1 на этом рисунке характеризует „распределение двоек“ в случае двух атомов. График имеет вид, напоминающий фермиевское распределение с учетом того, что в области слабых корреляций коррелятор $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle = \langle n_{1\uparrow} \rangle \langle n_{1\downarrow} \rangle = 0.25$; из-за малости значения кулоновского потенциала вероятность обнаружения двух электронов на одном узле максимальна. В области $U \sim 2B$ значение рассматриваемого коррелятора резко понижается, причем чем ниже температура, тем „ступенька“ оказывается резче. При высоких температурах „размытие“ коррелятора $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$ происходит менее резко, аналогично тому как размывается „ступенька“ Ферми. В области сильных корреляций $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle = 0$ — большое значение кулоновского потенциала не позволяет локализоваться двум электронам на одном узле. Поведение коррелятора на втором узле полностью повторяет поведение коррелятора на первом узле, так как узлы являются симметричными.

Рассмотрим теперь поведение аналогичных корреляторов в случае наносистемы, состоящей из трех узлов. Корреляционная функция $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$ вблизи $U = 0$ даже

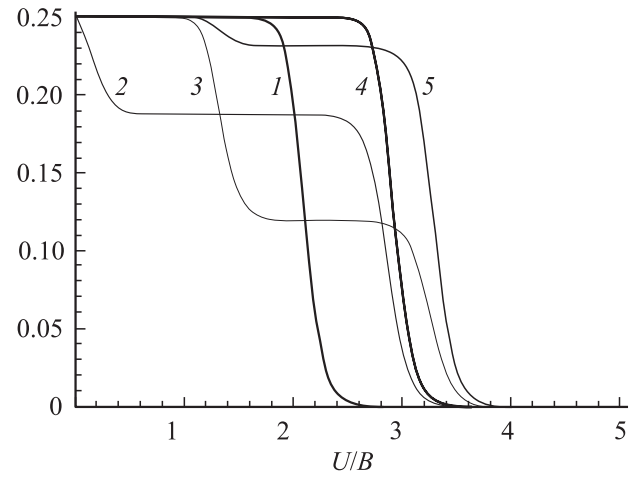


Рис. 1. Зависимость корреляционной функции $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$ — „распределения двоек“ от отношения U/B в случае $S = 0$, $B = \text{const}$, $\beta = 1/kT = 20$. График 1 — $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$ в случае двух атомов, 2 — $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$ в случае трех узлов, 3 — $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$ в случае четырех узлов, 4 — $\langle n_{2\uparrow} n_{2\downarrow} \rangle$ в случае трех узлов, 5 — $\langle n_{2\uparrow} n_{2\downarrow} \rangle$ в случае четырех узлов.

при незначительном увеличении U резко уменьшается до значения $0.25 - 0.25/4 \approx 0.187$, уменьшение обусловлено тем, что первый атом является периферийным, поэтому вероятность того, что два электрона окажутся на первом (или третьем) узле, незначительна. Наличие „плато“ в случае слабых и промежуточных корреляций, можно, по-видимому, объяснить тем, что уровни энергии в случае периферийных узлов имеют резко различающиеся „емкости“ (см. формулу (12)). В случае второго атома коррелятор $\langle n_{2\uparrow} n_{2\downarrow} \rangle$ начинает уменьшаться („размываться“) при значении энергии U , превышающем значение в случае двух узлов, поскольку вероятность нахождения двух электронов на центральном узле будет больше, чем на периферийных узлах. В случае сильных корреляций термодинамические средние $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$ и $\langle n_{2\uparrow} n_{2\downarrow} \rangle$ устремляются к нулю по той же причине, что и в случае нанокластера из двух атомов. Когда нанокластер состоит из четырех атомов, наличие двух центральных атомов позволяет перемешивать состояния периферийных атомов, поэтому „предварительный спад“ корреляторов начинается не при $U \sim 0$, корреляторы по этой же причине устремляются к нулю при больших значениях U . Наличие „плато“ в случае промежуточных корреляций обусловлено тем, что разные одночастичные уровни имеют различающиеся „емкости“, как следствие это приводит к тому, что вероятности одновременного заполнения двумя электронами на одних уровнях энергии будут конечными, на других — стремящимися к нулю. Проанализируем поведение кривых 4 и 5 при $U/B \sim 2.5$. Причина того, что в случае трех атомов термодинамическое среднее, описывающее вероятность нахождения на центральном узле, в случае трех атомов будет больше по сравнению с четырьмя узлами, заключается в том, что на центральный атом могут

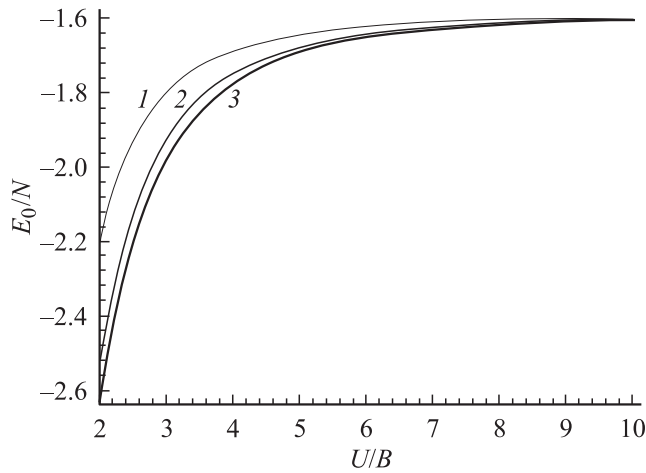


Рис. 2. Зависимость энергии основного состояния в перерасчете на один атом от отношения U/B в случае $\beta = 1/kT = 1$, $S = 0$. 1 — в случае двух атомов, 2 — в случае трех атомов, 3 — в случае четырех атомов.

переходить электроны как с первого, так и с третьего узла, тогда как в случае четырех атомов центральных узлов два — периферийные атомы не могут „насытить“ два центральных узла.

Понижение энергий основного состояния в случае модели Хаббарда обусловлено переходами электронов с узла на узел, чем „интенсивнее“ происходит перенос электронов с узла на узел, тем энергия наносистемы ниже. На рис. 2 приведены графики для энергий основного состояния в перерасчете на один атом (удельных энергий основного состояния) от отношения U/B в различных случаях. Из анализа графиков на рис. 2 следует, что с энергетической точки зрения наносистема, состоящая из четырех узлов, является более устойчивой. Энергии основного состояния в перерасчете на один атом в случае слабых и промежуточных корреляций оказались неодинаковыми, это свидетельствует о неэкстенсивном характере поведения наносистем. В случае сильных корреляций энергии для всех трех конфигураций устремляются к одному и тому же значению.

Таким образом, приближение статических флуктуаций позволяет исследовать поведение наносистем в модели Хаббарда. Вычисление энергии основного состояния свидетельствует о том, что нанокластер из четырех атомов является наиболее устойчивым по сравнению с нанокластерами из трех и двух атомов, в свою очередь энергия основного состояния наносистемы из трех атомов лежит ниже энергии основного состояния нанокластера, состоящего из двух атомов. В случае слабых и промежуточных корреляций анализ энергий основного состояния свидетельствует о неэкстенсивном характере наносистем, что находится в согласии с работой [5].

Выше было отмечено, что во всех трех случаях среднее значение проекции спина $S = 0$, следовательно, магнитные моменты атомов наносистем должны быть равны нулю, при этом не учитывались свой-

ства подложки. Результаты по измерению магнитных моментов Ni_5 , Ni_{740} , Fe_{15} , Fe_{650} (индексы обозначают число атомов в нанокластере) показали (см., например, в [3]), что магнитные моменты имеют конечные значения. Решение проблемы заключено, по-видимому, в влиянии атомов подложки на фундаментальные свойства атомов кластера. Действительно, опыты показали [3], что атомы Au_{212} на подложке из поли-аллил-амин-гидрохлорида обладают ферромагнитными свойствами, тогда как в массивных образцах атомы Au диамагнитны; если нанокластер из Co формировать на платиновой подложке, магнитный момент Co будет больше по сравнению с аналогичной величиной в случае, когда подложкой является также кобальт [3]. С теоретической точки зрения решение заключается, по-видимому, в том, что поле атома или группы атомов подложки „фиксирует“ спин атома, принадлежащего нанокластеру. Это существенным образом повлияет на свойства цепочки атомов: например, в модели Изинга удалось показать, что „фиксирование“ концевых атомов цепочки приводит к свойствам, которые отличаются от результатов точного решения одномерной модели Изинга с циклическими граничными условиями [20]. Предположим, что поле атомов подложки повлияло на атомы нанокластера так, что среднее значение проекции спина S оказалось равным $1/2$. На рис. 3 приведен график зависимости энергии основного состояния в случае $S = 1/2$. Сравнивая графики на рис. 2 и 3, можно сделать вывод о том, что энергия основного состояния в случае $S = 1/2$ ниже по сравнению со случаем $S = 0$, когда не учитываются свойства подложки. Таким образом, учет взаимодействия атомов нанокластера с атомами подложки понижает энергию наносистемы, при этом неэкстенсивный характер поведения наносистемы распространяется в некоторой мере и на область сильных корреляций. При формировании нанокластера на определенных подложках

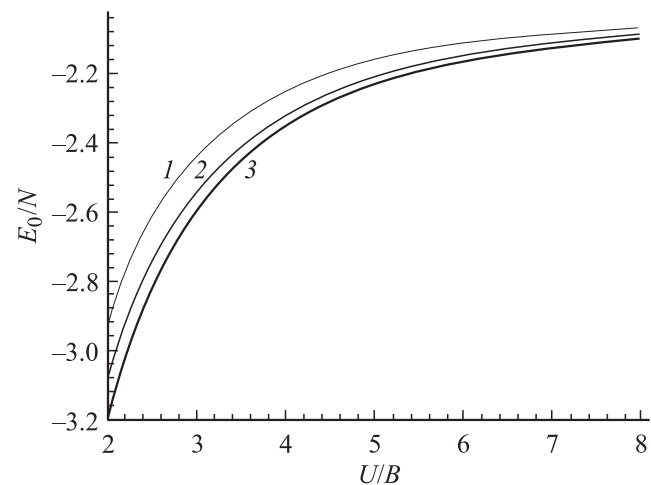


Рис. 3. Зависимость энергии основного состояния в перерасчете на один атом от отношения U/B в случае $\beta = 1/kT = 10$, $S = 1/2$. 1 — в случае двух атомов, 2 — в случае трех атомов, 3 — в случае четырех атомов.

атомам нанокластера выгоднее с энергетической точки зрения перейти в состояние с $S = 1/2$ (в общем случае с $S \neq 0$).

Предварительные результаты работы были представлены на XII Всероссийской конференции „Структура и динамика молекулярных систем“ [21].

Автор выражает благодарность Р.Р. Нигматуллину за внимание в работе и полезные советы, а также участникам XII Всероссийской конференции „Структура и динамика молекулярных систем“, принявшим активное участие в обсуждении результатов работы.

Список литературы

- [1] S.D. Bader. Surf. Sci. **500**, 172 (2002).
- [2] V.J. Luban. J. Magn. Magn. Mater. E **272–276**, 635 (2004).
- [3] H. Hasegawa. Physica A **351**, 273 (2005).
- [4] H. Hasegawa. Preprint cond-mat/0506553 (2005).
- [5] S.A. Cannas, A.C. Magalhaes, F.A. Tamarit. Phys. Rev. B **61**, 11 521 (2000).
- [6] J.P. Bucher, D.C. Douglass, L.A. Bloomfield. Phys. Rev. Lett. **66**, 3052 (1991).
- [7] S.E. Aspel, J.W. Emmert, J. Deng, L.A. Bloomfield. Phys. Rev. Lett. **76**, 1441 (1996).
- [8] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. A **276**, 1365, 238 (1963).
- [9] Г.И. Миронов. ФТТ **39**, 9, 1594 (1997).
- [10] Г.И. Миронов. ФТТ **41**, 6, 951 (1998).
- [11] Г.И. Миронов. ФТТ **44**, 2, 209 (2002).
- [12] V.J. Emery. Phys. Rev. Lett. **58**, 26, 2794 (1987).
- [13] E.H. Lieb, F.Y. Wu. Phys. Rev. Lett. **20**, 25, 1445 (1968).
- [14] Г.И. Миронов, Р.Р. Нигматуллин. Тез. докл. XXX Междунар. зимней школы физиков-теоретиков „Коуровка–2004“. Екатеринбург (2004). С. 190.
- [15] Г.И. Миронов. ФТТ **47**, 6, 1075 (2005).
- [16] C. Yang, A.N. Kocharian, Y.L. Chiang. J. Phys.: Cond. Matter. **12**, 7433 (2000).
- [17] Г.И. Миронов. Сб. статей „Структура и динамика молекулярных систем“. Казань (2003). Вып. 10. Ч. 1. С. 323.
- [18] Г.И. Миронов. Сб. статей „Актуальные проблемы физики конденсированных сред“. Казань (2004). С. 235.
- [19] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. Наука, М. (1975).
- [20] А.А. Хамзин, Р.Р. Нигматуллин. ФММ **92**, 5, 39 (2001).
- [21] Г.И. Миронов. Тез. докл. XII Всерос. конф. „Структура и динамика молекулярных систем“. Йошкар-Ола–Уфа–Казань–Москва (2005). С. 135.