Магнитные и электрические фазовые переходы в модели Хаббарда

© Е.В. Шипицын

Международный институт им. А. Богданова,
620062 Екатеринбург, Россия
E-mail: ibi@uvtb.ru

(Поступила в Редакцию 9 января 2001 г.)

В рамках модели Хаббарда при произвольных величинах кулоновского взаимодействия и электронной концентрации методом расцепления двухвременных функций Грина, составленных из X-операторов, вычислены две бозонные функции Грина, описывающие распространение коллективных возбуждений электронной системы — магнонов (состояний с одним перевернутым электронным спином) и дублонов (состояний с двумя электронами на одном узле кристаллической решетки). Обнаружена одинаковая внешняя структура магнонной и дублонной функций Грина и выявлено глубокое внутреннее сходство между этими функциями. При помощи магнонной функции Грина исследована неустойчивость парамагнитной фазы относительно появления спинового упорядочения, а благодаря дублонной функции Грина изучена неустойчивость металлической фазы относительно возникновения зарядового упорядочения. Получены критерии фазовых переходов «парамагнетик–ферромагнетик» и «металл–диэлектрик».

Одной из основных фундаментальных теоретических моделей физики твердого тела является модель Хаббарда [1]. Она предполагает, что электроны движутся по кристаллической решетке путем переходов с узла на соседний узел при наличии на каждом узле лишь одного электронного энергетического уровня (т. е. согласно принципу Паули на любом узле одновременно может находиться не более двух электронов, которые в таком случае должны обладать взаимнопротивоположными спинами); при этом имеет место кулоновское (электростатическое) взаимодействие (отталкивание) между двумя электронами, находящимися на одном узле. Электронные переходы между узлами характеризуются кинетической энергий t, а кулоновское взаимодействие между электронами — кулоновской энергией U. Еще одним параметром данной модели является электронная концентрация n, представляющая собой среднее число электронов на одном узле

$$n = \frac{N_e}{N}, \qquad (1)$$

где N и N_e — соответственно число атомов и электронов в кристалле.

В представлении вторичного квантования гамильтониан модели Хаббарда имеет вид [1]

$$H = t \sum_{\langle ll' \rangle \sigma} a^*_{l\sigma} a_{l'\sigma} + U \sum_{l} n_{l+} n_{l-}, \qquad (2)$$

где $a_{l\sigma}$ и $a^*_{l\sigma}$ — соответственно операторы уничтожения и рождения электрона со спином σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow \equiv +, -$) на узле l, $n_{l\sigma} = a^*_{l\sigma} a_{l\sigma}$ — оператор числа электронов со спином σ на узле l, а $\langle ll' \rangle$ означает суммирование по ближайшим соседям в решетке.

При $U \ll t$ модель Хаббарда описывает Ферми-жидкость, при $U \gg t$ — сильно коррелированную систему, а в области, лежащей между этими двумя пределами, — сложную систему, сочетающую в себе две противоположные тенденции, локализацию и делокализацию электронных состояний (характеризуемые соответственно параметрами U и t). Магнитные и электрические свойства систем, описываемых моделью Хаббарда, зависят от тонкого баланса этих тенденций.

Для изучения модели Хаббарда в широком интервале изменения параметра U используются самые различные методы (см., например, обзоры [2–4] и ссылки в них). Однако ни один из них не является универсальным и «самым лучшим», вследствие чего выбор конкретного метода целиком определяется поставленной физической задачей. В настоящей работе исследованы функции динамического отклика системы на внешние магнитные и электрические поля в широком интервале значений параметров n ($0 \leqslant n \leqslant 1$) и U ($U > t$), включая область сильных ($U \gg t$) и умеренных ($U \sim t$) электронных корреляций.

В теории систем со слабым кулоновским взаимодействием ($U \ll t$) для широкого интервала значений электронной концентрации ($0 \leqslant n \leqslant 1$) используется приближение хаотических фаз (RPA) [5]. Формально оно соответствует суммированию электронных петлевых диаграмм в разложении по параметру U/t. Несмотря на то что такое суммирование имеет обоснование лишь для систем с сильно вырожденными электронными состояниями, применение RPA к гамильтониану (2) дает физически правильную картину в широком интервале изменения параметров модели Хаббарда [6].

В настоящей работе мы рассмотрим случай сильного и умеренного кулоновского взаимодействия, исходя при этом из предела больших U ($U > t$), который принято называть атомным пределом в отличие от случая малых U ($U < t$), называемого зонным пределом. В атомном пределе наиболее удобными динамическими переменными являются X-операторы Хаббарда [7], действующие в пространстве одноузельных электронных состояний. Формализм X-операторов неоднократно и успешно применялся в теории сильно коррелированных электронных систем [8–23], а его детальное описание можно найти, например, в [24,25].

Для вычисления двухвременных функций Грина, составленных из X-операторов, будем использовать технику расцепления бесконечных цепочек уравнений движения этих функций [26,27]. Таким образом будут найдены две бозонных функции Грина, представляющие собой динамические отклики электронной системы. Они описывают распространение в этой системе коллективных бозевских возбуждений — магнонов (состояний с одним перевернутым электронным спином) и дублонов (состояний с двумя электронами на одном узле). Полученные общие выражения для магнонной и дублонной функций Грина будут использованы в целях определения условий возникновения магнитного и диэлектрического упорядочений электронной системы.

Приближения, введенные нами для упрощения уравнений движения упомянутых выше функций Грина, могут быть квалифицированы как RPA для модели Хаббарда вблизи атомного предела. Полученные результаты для функций динамического отклика формально напоминают обычные RPA-результаты вблизи зонного предела, однако вместо зонных электронных состояний в них теперь фигурируют сильно коррелированные электронные состояния. Последние описываются приближением «Хаббард–1» [1], которое учитывает важнейший корреляционный эффект — расщепление исходной электронной зоны на две хаббардовские подзоны. Конечно, приближение «Хаббард–1» дает завышенную оценку корреляционных эффектов, но мы и ставим задачу исследования влияния сильных корреляций на функцию динамического отклика электронной системы.

1. Вычисление функций Грина магнонов и дублонов

Напомним, что в модели Хаббарда возможны всего лишь четыре различных электронных состояния узла решетки [7,28]

$$|0\rangle,\ |+\rangle,\ |-\rangle,\ |2\rangle, \tag{3}$$

означающие соответственно отсутствие электронов, наличие одного электрона со спином $\sigma = +$ или $-$ (т. е. спином, направленным вдоль или против внешнего магнитного поля) и наличие двух электронов с взаимнопротивоположными спинами ($\sigma = +$ и $-$).

В соответствии с (3) можно ввести X-операторы Хаббарда X_l^{pq}, физический смысл которых заключается в переводе l-го узла из состояния $|q\rangle$ в состояние $|p\rangle$ [7]. Среди шестнадцати возникающих таким образом одноузельных операторов Хаббарда X_l^{pq} $(p, q, = 0, +, -, 2)$ имеется восемь ферми-подобных $(X_l^{0\sigma}, X_l^{\sigma 2})$ и сопряженные к ним $X_l^{\sigma 0}, X_l^{2\sigma})$, четыре бозе-подобных $(X_l^{+-}, X_l^{02}$ и сопряженные к ним $X_l^{-+}, X_l^{20})$ и четыре диагональных $(X_l^{00},\ X_l^{\sigma\sigma},\ X_l^{22})$, причем ферми-подобные операторы удобно заменить составленными из них двухкомпонентными спинорами [28]

$$\Psi_{\sigma l} = \begin{pmatrix} X_l^{0\sigma} \\ \sigma X_l^{\bar\sigma 2} \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \Phi^*_{\sigma l} = \left(X_l^{\sigma 0}\ \sigma X_l^{2\bar\sigma}\right), \tag{4}$$

где $\bar\sigma = -\sigma$ $(\sigma = +, -)$. В терминах введенных X-операторов гамильтониан модели Хаббарда представляется в виде совокупности линейной и квадратичной форм [28]

$$H = \sum_l \sum_{p=0,+,-,2} \varepsilon_p X_l^{pp} + t \sum_{\langle ll'\rangle} \sum_{\sigma=+,-} \Psi^*_{\sigma l} R\, \Phi_{\sigma l'}. \tag{5}$$

Здесь

$$\varepsilon_0 = 0, \quad \varepsilon_\pm = \mp\frac{h}{2} - \mu, \quad \varepsilon_2 = U - 2\mu, \tag{6}$$

$$R = r_0 + r_1 \equiv \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \tag{7}$$

где h — внешнее магнитное поле, μ — одноэлектронный химпотенциал, а r_j $(j = 0, 1, 2, 3)$ — матрицы Паули

$$r_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad r_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad r_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

$$r_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{8}$$

Для дальнейшего исследования воспользуемся методом двухвременных запаздывающих функций Грина [26,27]. Введем три такие функции: одну матричную (антикоммутаторную) и две скалярные (коммутаторные)

$$G_\sigma = (l - l', \tau - \tau') = \langle\langle \Psi_{\sigma l}(\tau) | \Psi^*_{\sigma l'}(\tau')\rangle\rangle, \tag{9}$$

$$F_{+-}(l - l', \tau - \tau') = \langle\langle X_l^{+-}(\tau)\,|\,X_{l'}^{-+}(\tau')\rangle\rangle, \tag{10}$$

$$F_{02}(l - l', \tau - \tau') = \langle\langle X_l^{02}(\tau)\,|\,X_{l'}^{20}(\tau')\rangle\rangle, \tag{11}$$

где все обозначения стандартные [26,27], причем τ и τ' — соответственно начальный и конечный моменты времени. Функция (9) описывает движение электронов, а функции (10) и (11) характеризуют распространение коллективных бозевских возбуждений электронной системы — магнонов (состояний с одним перевернутым электронным спином) и дублонов (состояний с двумя электронами на одном узле) соответственно.

Отметим, что, поскольку составляющие магнонную функцию Грина (10) операторы Хаббарда описывают процессы, в ходе которых изменяется спин и сохраняется заряд, а образующие дублонную функцию Грина (11) операторы Хаббарда характеризуют процессы, в ходе которых, напротив, изменяется заряд и сохраняется спин, первая из этих функций описывает магнитные свойства твердого тела, а вторая — электрические. Иначе говоря, из магнонной и дублонной функций Грина можно получить соответственно критерии магнитных и электрических фазовых переходов [29].

Для каждой введенной нами функции Грина (9)–(11) можно составить бесконечную цепочку уравнений движения (путем дифференцирования ее по времени τ с использованием гамильтониана (5)) [26,27]. Вычислим теперь все три функции Грина (электронную, магнонную и дублонную) в рамках единого приближения, суть которого состоит в том, что мы обрываем бесконечную цепочку уравнений движения на первом же уравнении из числа тех, в которых все вновь возникающие функции посредством расцепления удается выразить через те функции, которые уже возникли ранее; таким образом, бесконечная цепочка уравнений превращается у нас в конечную и замкнутую систему уравнений.

Для электронной функции Грина (которая в нашей задаче носит вспомогательный характер) расцепление цепочки удается осуществить уже в первом уравнении, которое после двойного Фурье-преобразования (перехода от пространственных координат к импульсам и от времен к частотам) [26,27] принимает вид

$$L_\sigma(\mathbf{k},\omega)G_\sigma(\mathbf{k},\omega) = M_\sigma. \tag{12}$$

Здесь

$$L_\sigma(\mathbf{k},\omega) = \begin{pmatrix} \omega-\varepsilon_\sigma-(1-n_{\bar\sigma})\varepsilon(\mathbf{k}) & -(1-n_{\bar\sigma})\varepsilon(\mathbf{k}) \\ -n_{\bar\sigma}\varepsilon(\mathbf{k}) & \omega-\varepsilon_\sigma-n_{\bar\sigma}\varepsilon(\mathbf{k})-U \end{pmatrix}, \tag{13}$$

$$M_\sigma = \begin{pmatrix} 1-n_{\bar\sigma} & 0 \\ 0 & n_{\bar\sigma} \end{pmatrix}, \tag{14}$$

где $\mathbf{k}$ — волновый вектор (импульс), ω — частота, $\varepsilon(\mathbf{k})$ — затравочный спектр свободных электронов в решетке (при $U=0$)

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = t\sum_{\boldsymbol{\Delta}}\exp(i\,\mathbf{k}\boldsymbol{\Delta}), \tag{15}$$

($\boldsymbol{\Delta}$ — нумерует ближайших соседей произвольного фиксированного узла решетки), n_σ — среднее число электронов со спином σ на одном узле, причем

$$n_+ + n_- = n. \tag{16}$$

Решение уравнения (12) можно представить в виде

$$G_\sigma(\mathbf{k},\omega) = \frac{P^{\sigma1}(\mathbf{k})}{\omega+\mu-E_1^\sigma(\mathbf{k})} + \frac{P^{\sigma2}(\mathbf{k})}{\omega+\mu-E_2^\sigma(\mathbf{k})}, \tag{17}$$

где матрицы $P^{\sigma1}(\mathbf{k})$ и $P^{\sigma2}(\mathbf{k})$ определяются своими элементами

$$P_{11}^{\sigma1,2}(\mathbf{k}) = \frac{(1-n_{\bar\sigma})}{2}\left[1\mp\frac{(1-2n_{\bar\sigma})\varepsilon(\mathbf{k})-U}{Y_\sigma(\mathbf{k})}\right],$$

$$P_{22}^{\sigma1,2}(\mathbf{k}) = \frac{n_{\bar\sigma}}{2}\left[1\pm\frac{(1-2n_{\bar\sigma})\varepsilon(\mathbf{k})-U}{Y_\sigma(\mathbf{k})}\right],$$

$$P_{12}^{\sigma1,2}(\mathbf{k}) = P_{21}^{\sigma1,2}(\mathbf{k}) = \mp\frac{n_{\bar\sigma}(1-n_{\bar\sigma})\varepsilon(\mathbf{k})}{Y_\sigma(\mathbf{k})}, \tag{18}$$

а зоны электронного спектра $E_1^\sigma(\mathbf{k})$ и $E_2^\sigma(\mathbf{k})$ задаются выражением

$$E_{1,2}^\sigma(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\left[\varepsilon(\mathbf{k})+U-\sigma h\mp Y_\sigma(\mathbf{k})\right], \tag{19}$$

где

$$Y_\sigma(\mathbf{k}) = \left[\varepsilon^2(\mathbf{k})-2(1-2n_{\bar\sigma})\varepsilon(\mathbf{k})U+U^2\right]^{1/2}. \tag{20}$$

Заметим, что результат (17) соответствует приближению «Хаббард–1» [1].

Расцепление бесконечных цепочек уравнений для магнонной и дублонной функций Грина удается осуществить лишь во вторых уравнениях, в результате чего каждую их этих функций приходится искать путем решения системы двух уравнений (одного скалярного и одного матричного). После осуществления Фурье-преобразования система уравнений для магнонной функции Грина $F_{+-}(\mathbf{k},\omega)$ принимает вид

$$\left[\omega+(\varepsilon_+-\varepsilon_-)\right]F_{+-}(\mathbf{k},\omega) = \left[\langle X^{++}\rangle-\langle X^{--}\rangle\right] - \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{p}}\left[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})-\varepsilon(\mathbf{p})\right]\mathrm{Sp}\left\{R\Gamma_{+-}(\mathbf{k},\omega\,|\,\mathbf{p})\right\}, \tag{21}$$

$$\begin{aligned}\omega\Gamma_{+-}(\mathbf{k},\omega\,|\,\mathbf{p}) &= \left[K_+(\mathbf{k}+\mathbf{p})r_0-r_0K_-(\mathbf{p})\right] \\ &+ \left[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})K_+(\mathbf{k}+\mathbf{p})Rr_3-\varepsilon(\mathbf{p})\tilde r_3RK_-(\mathbf{p})\right]F_{+-}(\mathbf{k},\omega) \\ &+ \left[L_+(\mathbf{k}+\mathbf{p})\Gamma_{+-}(\mathbf{k},\omega\,|\,\mathbf{p})-\Gamma_{+-}(\mathbf{k},\omega\,|\,\mathbf{p})\tilde L_-(\mathbf{p})\right],\end{aligned} \tag{22}$$

а система уравнений для дублонной функции Грина $F_{02}(\mathbf{k},\omega)$ — вид

$$\left[\omega+(\varepsilon_0-\varepsilon_2)\right]F_{02}(\mathbf{k},\omega) = \left[\langle X^{00}\rangle-\langle X^{22}\rangle\right] - \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{p}}\left[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})+\varepsilon(\mathbf{p})\right]\mathrm{Sp}\left\{R\Gamma_{02}(\mathbf{k},\omega\,|\,\mathbf{p})\right\}, \tag{23}$$

$$\begin{aligned}\omega\Gamma_{02}(\mathbf{k},\omega\,|\,\mathbf{p}) &= -\left[K_+(\mathbf{k}+\mathbf{p})r_1+r_1K_-(\mathbf{p})\right] \\ &- \left[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})K_+(\mathbf{k}+\mathbf{p})R(ir_2)+\varepsilon(\mathbf{p})(i\tilde r_2)RK_-(\mathbf{p})\right]F_{02}(\mathbf{k},\omega) \\ &- \left[L_+(\mathbf{k}+\mathbf{p})\Gamma_{02}(\mathbf{k},\omega\,|\,\mathbf{p})+\Gamma_{02}(\mathbf{k},\omega\,|\,\mathbf{p})\tilde L_-(\mathbf{p})\right].\end{aligned} \tag{24}$$

Здесь $K_\sigma(\mathbf{k})$ — Фурье-образ электронного коррелятора $\langle\Psi^*_{\sigma l}\Psi_{\sigma l'}\rangle$, выражаемый через электронную функцию Грина [26,27]

$$K_\sigma(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega+\mu)\lim_{\delta\to0}\left[\mathrm{Im}\,G_\sigma(\mathbf{k},\omega+i\delta)\right]d\omega, \tag{25}$$

$$f(x) = \left[1+\exp\left(\frac{x-\mu}{T}\right)\right]^{-1} \tag{26}$$

— функция Ферми, T — абсолютная температура, $\Gamma_{+-}(\mathbf{k},\omega\,|\,\mathbf{p})$ и $\Gamma_{02}(\mathbf{k},\omega\,|\,\mathbf{p})$ — вспомогательные неизвестные функции, знак Sp (шпур) подразумевает суммирование диагональных матричных элементов, знак $\sim$ означает транспонирование матрицы, а знак $\langle \ldots \rangle$ — статистическое усреднение с гамильтонианом (5) [26–28].

Решая полученные нами системы уравнений (21)–(22) и (23)–(24), с учетом (6)–(8), (13), (16), (17), (25) и соотношений [25,28]

$$\langle X^{\sigma\sigma} \rangle = n_\sigma, \quad \langle X^{00} \rangle = (1-n_+)(1-n_-), \quad \langle X^{22} \rangle = n_+ n_- \tag{27}$$

приходим к окончательным выражениям для магнонной и дублонной функций Грина

$$F_{+-}(\mathbf{k},\omega) = \frac{[n_+ - n_-] + \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{p}}[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p})]\sum_{\alpha=1}^{4}\frac{A_\alpha}{\omega + x_\alpha}}{[\omega - h] - \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{p}}[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p})]\sum_{\alpha=1}^{4}\frac{B_\alpha}{\omega + x_\alpha}} \tag{28}$$

и

$$F_{02}(\mathbf{k},\omega) = \frac{[1-n] + \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{p}}[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \varepsilon(\mathbf{p})]\sum_{\alpha=1}^{4}\frac{C_\alpha}{(\omega+2\mu) - y_\alpha}}{[(\omega+2\mu) - U] - \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{p}}[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \varepsilon(\mathbf{p})]\sum_{\alpha=1}^{4}\frac{D_\alpha}{(\omega+2\mu) - y_\alpha}}, \tag{29}$$

где

$$A_\alpha = u_\alpha \sum_{\beta=0}^{3} a_\beta x_\alpha^\beta, \quad B_\alpha = u_\alpha \sum_{\beta=0}^{2} b_\beta x_\alpha^\beta, \tag{30}$$

$$C_\alpha = v_\alpha \sum_{\beta=0}^{3} c_\beta y_\alpha^\beta, \quad D_\alpha = v_\alpha \sum_{\beta=0}^{2} d_\beta y_\alpha^\beta, \tag{31}$$

$$u_{1,4} = \pm\big[(x_1 - x_4)(x_1x_4 - x_2x_3)\big]^{-1}, \quad u_{2,3} = \mp\big[(x_2 - x_3)(x_1x_4 - x_2x_3)\big]^{-1}, \tag{32}$$

$$v_{1,4} = \pm\big[(y_1 - y_4)(y_1y_4 - y_2y_3)\big]^{-1}, \quad v_{2,3} = \mp\big[(y_2 - y_3)(y_1y_4 - y_2y_3)\big]^{-1}, \tag{33}$$

$$x_{1,4} = E^+_{1,2}(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - E^-_{1,2}(\mathbf{p}), \quad x_{2,3} = E^+_{1,2}(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - E^-_{2,1}(\mathbf{p}), \tag{34}$$

$$y_{1,4} = E^+_{1,2}(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + E^-_{1,2}(\mathbf{p}), \quad y_{2,3} = F^+_{1,2}(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + E^-_{2,1}(\mathbf{p}), \tag{35}$$

$$\begin{aligned}
a_0 = {} & -U(n_+ - n_-)\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\varepsilon(\mathbf{p})\big[\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \lambda_0^-(\mathbf{p})\big] \\
& - \frac{U^2}{2}\Big\{\big[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p})\big]\big[\lambda_1^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \lambda_1^-(\mathbf{p})\big] \\
& - \big[(1-2n_-)\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - (1-2n_+)\varepsilon(\mathbf{p})\big] \\
& \times \big[\lambda_2^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \lambda_2^-(\mathbf{p})\big]\Big\}, \\
a_1 = {} & -\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\varepsilon(\mathbf{p})\big[\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \lambda_0^-(\mathbf{p})\big] \\
& + U\Big\{\big[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \varepsilon(\mathbf{p})\big]\big[\lambda_3^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \lambda_3^-(\mathbf{p})\big] \\
& - \big[n_-\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + n_+\varepsilon(\mathbf{p})\big]\big[\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \lambda_0^-(\mathbf{p})\big]\Big\} \\
& - U^2\big[\lambda_1^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \lambda_1^-(\mathbf{p})\big], \\
a_2 = {} & \big[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p})\big]\big[\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \lambda_0^-(\mathbf{p})\big], \\
a_3 = {} & \lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \lambda_0^-(\mathbf{p}),
\end{aligned} \tag{36}$$

$$\begin{aligned}
b_0 = {} & U^2\Big\{\big[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p})\big]\big[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\lambda_4^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) \\
& - \varepsilon(\mathbf{p})\lambda_4^-(\mathbf{p})\big] - \big[n_-\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - n_+\varepsilon(\mathbf{p})\big] \\
& \times \big[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p})\lambda_0^-(\mathbf{p})\big]\Big\}, \\
b_1 = {} & U\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\varepsilon(\mathbf{p})\big[\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \lambda_0^-(\mathbf{p})\big] \\
& - U^2\big[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\lambda_2^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p})\lambda_2^-(\mathbf{p})\big], \\
b_2 = {} & -U\big[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{p})\lambda_0^-(\mathbf{p})\big],
\end{aligned} \tag{37}$$

$$\begin{aligned}
c_0 = {} & -U(2-n)\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\varepsilon(\mathbf{p})\big[\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \lambda_0^-(\mathbf{p})\big] \\
& - \frac{U^2}{2}\Big\{\big[(1-n_-)\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + (1-n_+)\varepsilon(\mathbf{p})\big] \\
& \times \Big(\big[\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_0^-(\mathbf{p})\big] - \big[\lambda_1^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_1^-(\mathbf{p})\big]\Big) \\
& + 4\Big((1-n_-)\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\big[\lambda_3^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_4^-(\mathbf{p})\big] \\
& + (1-n_+)\varepsilon(\mathbf{p})\big[\lambda_4^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_3^-(\mathbf{p})\big]\Big)\Big\} \\
& - U^3\Big\{\big[\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_0^-(\mathbf{p})\big] - \big[\lambda_1^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_1^-(\mathbf{p})\big]\Big\}, \\
c_1 = {} & \varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\varepsilon(\mathbf{p})\big[\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_0^-(\mathbf{p})\big] \\
& + U\Big\{\big[(1-2n_-)\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + (1-2n_+)\varepsilon(\mathbf{p})\big] \\
& \times \big[\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_0^-(\mathbf{p})\big] + \varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\big[\lambda_3^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_4^-(\mathbf{p})\big] \\
& + \varepsilon(\mathbf{p})\big[\lambda_4^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_3^-(\mathbf{p})\big]\Big\} \\
& + U^2\Big\{3\big[\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_0^-(\mathbf{p})\big] - \big[\lambda_1^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_1^-(\mathbf{p})\big]\Big\}, \\
c_2 = {} & -\big[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \varepsilon(\mathbf{p})\big]\big[\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_0^-(\mathbf{p})\big] \\
& - 3U\big[\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_0^-(\mathbf{p})\big], \\
c_3 = {} & \lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_0^-(\mathbf{p}),
\end{aligned} \tag{38}$$

$$\begin{aligned}
d_0 = {} & -U^2\Big\{\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\varepsilon(\mathbf{p})\Big((1-n_-)\big[2\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - \lambda_4^+(\mathbf{k}+\mathbf{p})\big] \\
& + (1-n_+)\big[2\lambda_0^-(\mathbf{p}) - \lambda_4^-(\mathbf{p})\big]\Big) - \Big((1-n_-)\varepsilon^2(\mathbf{k}+\mathbf{p}) \\
& \times \lambda_4^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + (1-n_+)\varepsilon^2(\mathbf{p})\lambda_4^-(\mathbf{p})\Big)\Big\} \\
& - 2U^3\big[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\lambda_3^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \varepsilon(\mathbf{p})\lambda_3^-(\mathbf{p})\big],
\end{aligned}$$

$$d_1 = U\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\varepsilon(\mathbf{p})\left[\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \lambda_0^-(\mathbf{p})\right] + U^2\Big\{\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\left[\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + 2\lambda_3^+(\mathbf{k}+\mathbf{p})\right] + \varepsilon(\mathbf{p})\left[\lambda_0^-(\mathbf{p}) + 2\lambda_3^-(\mathbf{p})\right]\Big\},$$

$$d_2 = -U\left[\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\lambda_0^+(\mathbf{k}+\mathbf{p}) + \varepsilon(\mathbf{p})\lambda_0^-(\mathbf{p})\right], \qquad (39)$$

$$\lambda_\gamma^\sigma(\mathbf{k}) = \sum_{\nu=1,2} V_\gamma^{\sigma\nu}(\mathbf{k}) f\left[E_\nu^\sigma(\mathbf{k})\right], \qquad (40)$$

$$V_0^{\sigma\nu}(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha,\beta=1,2} P_{\alpha\beta}^{\sigma\nu}(\mathbf{k}), \quad V_{1,2}^{\sigma\nu}(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha=1,2} (\pm 1)^{\alpha-1} P_{\alpha\alpha}^{\sigma\nu}(\mathbf{k}),$$

$$V_3^{\sigma\nu}(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha=1,2} P_{1\alpha}^{\sigma\nu}(\mathbf{k}), \quad V_4^{\sigma\nu}(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha=1,2} P_{2\alpha}^{\sigma\nu}(\mathbf{k}). \quad (41)$$

Выведенные формулы (28) и (29) необходимо дополнить уравнением для химпотенциала μ [24,27]

$$n = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathrm{Sp}\left\{RK_\sigma(\mathbf{k})\right\}, \qquad (42)$$

которое с учетом (7), (17), (25), (40) и (41) принимает вид

$$n = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}\sigma} \lambda_0^\sigma(\mathbf{k}). \qquad (43)$$

В соотношении (28) величины x_α представляют собой энергетические разности, отвечающие внутризонным (при $\alpha = 1, 4$) и межзонным (при $\alpha = 2, 3$) электронным переходам с переворотом спина, а величины A_α и B_α определяют интенсивности этих переходов. В выражении (29) величины y_α обозначают энергетические суммы, соответствующие двухчастичным состояниям в электронном спектре (19), а величины C_α и D_α храктеризуют вероятности этих состояний.

Из (28) и (29) следует, что обе вычисленные нами квазичастичные функции Грина, описывающие различные коллективные возбуждения (магноны и дублоны), определяются сложными комбинациями одноэлектронных характеристик двух образующих эти возбуждения связанных частиц — электронов со спином $+$ и $-$. Кроме того, видно глубокое внутреннее сходство (местами превращающееся в совпадение) окончательные выражений для магнонной и дублонной функции Грина (28) и (29), которое генерируется аналогичным сходством определяющих эти функции систем уравнений (21)–(22) и (23)–(24).

Что же касается различий между выражениями для магнонной и дублонной функций Грина (а также между задающими их системами уравнений), то большинство из них обусловлено лишь различной физической сущностью этих функций (вытекающей из их математических определений) и поэтому является легко предсказуемым. Действительно, целый ряд отличий соотношений (28) и (29) (а также систем уравнений (21)–(22) и (23)–(24)) можно предвидеть на основании сравнения определений (10) и (11). Кроме того, поскольку магнон представляет собой процесс ухода с узла электрона с одним спином и прихода на его место электрона с другим спином, а дублон — процесс одновременного появления или исчезновения двух электронов с разными спинами на одном узле, магнонная функция Грина описывает такое коллективное возбуждение, две составные части которого «движутся в противоположных направлениях», а дублонная функция Грина характеризует такое коллективное возбуждение, две составные части которого «движутся в одинаковых направлениях». Именно этим обстоятельством объясняется тот факт, что основное различие между выражениями (28) и (29) (а также между системами уравнений (21)–(22) и (23)–(24)) заключается в том, что в выражении (и уравнениях) для магнонной функции Грина отличающиеся друг от друга различным спином одноэлектронные характеристики разделены знаком «$-$», а в выражении (и уравнениях) для дублонной функции Грина — знаком «$+$». Последнее утверждение можно проиллюстрировать сравнением соотношений (21) и (23), (22) и (24), (34) и (35), (36) и (38), (37) и (39).

Таким образом, знание выражения для магнонной функции Грина в основном позволяют получить выражение для дублонной функции Грина (или хотя бы его общую структуру), и наоборот. Следовательно, магнонная и дублонная функции Грина в какой-то степени определяют друг друга.

Заметим, что расцепления, сделанные нами при выводе соотношений (28) и (29), идеологически соответствуют приближению хаотических фаз (RPA) [5,6], применяемому в теории Ферми-жидкости. Можно сказать, что выражения (28) и (29) в каком-то смысле представляют собой RPA-результаты для сильно коррелированных электронных систем.

В частнома случае парамагнитной фазы ($n_+ = n_- = n/2$) и сильного кулоновского взаимодействия ($U \gg t$) общие выражения для магнонной и дублонной функций Грина (28) и (29) можно представить в следующем виде:

$$F_{+-}(\mathbf{k},\omega) = \frac{\Pi(\mathbf{k},\omega) + \frac{1}{U}\frac{n}{2}\left[Q(\mathbf{k},\omega) + \Lambda(\mathbf{k},\omega) + \left(1-\frac{n}{2}\right)S_2(\mathbf{k},\omega)\right]}{1 - R(\mathbf{k},\omega) - \frac{1}{U}\left[\Phi(\mathbf{k},\omega) + \frac{n}{2}\left(1-\frac{n}{2}\right)S_3(\mathbf{k},\omega)\right]} \qquad (44)$$

и

$$F_{02}(\mathbf{k},\omega) = \frac{[1-n] + \frac{1}{U}X(\mathbf{k},\omega)}{[\omega+2\mu] - U + Y(\mathbf{k},\omega) - \frac{1}{U}Z(\mathbf{k},\omega)}, \qquad (45)$$

$$\begin{bmatrix}\Pi(\mathbf{k},\omega)\\ Q(\mathbf{k},\omega)\\ \Lambda(\mathbf{k},\omega)\\ \Phi(\mathbf{k},\omega)\end{bmatrix} = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{p}}\begin{bmatrix}1\\ \varepsilon(\mathbf{p})\\ \varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\\ \varepsilon(\mathbf{p})\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\end{bmatrix}\frac{f[E(\mathbf{k}+\mathbf{p})] - f[E(\mathbf{p})]}{\omega + E(\mathbf{k}+\mathbf{p}) - E(\mathbf{p})}, \qquad (46)$$

$$R(\mathbf{k},\omega)=\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{p}}\frac{\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})f[E(\mathbf{k}+\mathbf{p})]-\varepsilon(\mathbf{p})f[E(\mathbf{p})]}{\omega+E(\mathbf{k}+\mathbf{p})-E(\mathbf{p})},\quad(47)$$

$$S_\nu(\mathbf{k},\omega)=\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{p}}\frac{\varepsilon^\nu(\mathbf{k}+\mathbf{p})f'[E(\mathbf{k}+\mathbf{p})]-\varepsilon^\nu(\mathbf{p})f'[E(\mathbf{p})]}{\omega+E(\mathbf{k}+\mathbf{p})-E(\mathbf{p})},\quad(48)$$

$$X(\mathbf{k},\omega)=\frac{1}{N}\times\sum_{\mathbf{p}}\frac{[E(\mathbf{k}+\mathbf{p})+E(\mathbf{p})]^2\{f[E(\mathbf{k}+\mathbf{p})]+f[E(\mathbf{p})]\}}{[\omega+2\mu]-[E(\mathbf{k}+\mathbf{p})+E(\mathbf{p})]},\quad(49)$$

$$Y(\mathbf{k},\omega)=\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{p}}\frac{E(\mathbf{k}+\mathbf{p})+E(\mathbf{p})}{[\omega+2\mu]-[E(\mathbf{k}+\mathbf{p})+E(\mathbf{p})]}\times\Big\{\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})f\big[E(\mathbf{k}+\mathbf{p})\big]+\varepsilon(\mathbf{p})f\big[E(\mathbf{p})\big]\Big\},\quad(50)$$

$$Z(\mathbf{k},\omega)=\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{p}}\frac{E(\mathbf{k}+\mathbf{p})+E(\mathbf{p})}{[\omega+2\mu]-[E(\mathbf{k}+\mathbf{p})+E(\mathbf{p})]}\times\Big\{\frac{n}{2}\Big(\varepsilon^2(\mathbf{k}+\mathbf{p})f\big[E(\mathbf{k}+\mathbf{p})\big]+\varepsilon^2(\mathbf{p})f\big[E(\mathbf{p})\big]\Big)-\Big(1-\frac{n}{2}\Big)\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{p})\varepsilon(\mathbf{p})\Big(f\big[E(\mathbf{k}+\mathbf{p})\big]+f\big[E(\mathbf{p})\big]\Big)\Big\},\quad(51)$$

$$E(\mathbf{k})=\Big(1-\frac{n}{2}\Big)\varepsilon(\mathbf{k}),\quad(52)$$

а $f'(x)$ — производная функции $f(x)$ по ее аргументу x. Уравнение для химпотенциала (43) в упомянутом выше частном случае можно записать в форме

$$\frac{n}{2}=\Big(1-\frac{n}{2}\Big)\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{p}}f\big[E(\mathbf{p})\big]+\frac{1}{U}\frac{n}{2}\Big(1-\frac{n}{2}\Big)^2\times\big[2\Phi(\mathbf{k}_0,0)-\Phi(\mathbf{0},0)\big],\quad(53)$$

где

$$\mathbf{k}_0=(\pi,\pi,\pi).\quad(54)$$

Отметим, что величины (46) уже фигурировали ранее в наших работах [24,29], где они соответствовали различным электронным петлям, возникавшим при исследовании модели Хаббарда в режиме сильных электронных корреляций методом диаграммной техники для X-операторов.

В пределе бесконечно сильного кулоновского взаимодействия ($U\to\infty$) соотношение (44) принимает вид

$$F_{+-}(\mathbf{k},\omega)=\frac{\Pi(\mathbf{k},\omega)}{1-R(\mathbf{k},\omega)},\quad(55)$$

совпадающий с результатом работ [30,31]. Формула (55) очень похожа на выражение для динамической магнитной восприимчивости, полученное в теории систем со слабым кулоновским взаимодействием ($U\ll t$) в рамках RPA [5,6]. RPA-результат и выражение (55) имеют всего лишь два различия: при переходе от первого ко второму спектру свободных электронов $\varepsilon(\mathbf{k})$ заменяется на спектр сильно коррелированных электронов $E(\mathbf{k})$, а параметр U — на величину $\varepsilon(\mathbf{k})$ (которая, согласно (15), пропорциональна параметру t).

2. Исследование магнитной и диэлектрической неустойчивостей

Найденные выражения для магнонной и дублонной функций Грина позволяют получить явный вид критериев магнитных и электрических фазовых переходов (т.е. переходов «парамагнетик–ферромагнетик» и «металл–диэлектрик»). Действительно, условие неустойчивости парамагнитной фазы относительно ферромагнитного упорядочения можно записать в виде [25,29]

$$[F_{+-}(\mathbf{0},0)]^{-1}>0,\quad(56)$$

а условие неустойчивости металлической фазы относительно диэлектрического (зарядового) упорядочения как [25,29]

$$[F_{02}(\mathbf{k}_0,0)]^{-1}>0.\quad(57)$$

Подставляя (44) в (56), получаем, что при $T=0$ критерий возникновения ферромагнетизма можно представить в виде

$$\Big(1-\frac{n}{2}\Big)^2-\frac{n}{2}+\Big(1-\frac{n}{2}\Big)\bar{\mu}\bar{\rho}(\bar{\mu})+\nu\Big(1-\frac{n}{2}\Big)\Big\{\Big[1+\frac{n}{2}\Big(1+3\frac{n}{2}\Big)\Big]\bar{\mu}^2\bar{\rho}(\bar{\mu})-\frac{n}{2}\Big(1-\frac{n}{2}\Big)\bar{\mu}^3\bar{\rho}'(\bar{\mu})-nI_1(\bar{\mu})\Big\}<0,\quad(58)$$

а уравнение для химпотенциала (53) — в виде

$$\frac{n}{2}=\Big(1-\frac{n}{2}\Big)I_0(\bar{\mu})+\nu\frac{n}{2}\Big(1-\frac{n}{2}\Big)\Big\{\bar{\mu}^2\bar{\rho}(\bar{\mu})-2I_1(\bar{\mu})\Big\},\quad(59)$$

где введены безразмерные величины

$$\nu=\frac{W}{U},\quad(60)$$

$$\bar{\mu}=\frac{\mu}{W\left(1-\frac{n}{2}\right)},\qquad\bar{\rho}(x)=W\rho(x),\quad(61)$$

$$I_\varkappa(x)=\int_{-1}^{x}y^\varkappa\,\bar{\rho}(y)\,dy.\quad(62)$$

Здесь $\rho(x)$ — затравочная плотность электронных состояний в спектре $\varepsilon(\mathbf{k})$, $\rho'(x)$ — ее производная по аргументу x, а величина W представляет собой полуширину затравочной электронной энергетической зоны

$$W=zt,\quad(63)$$

где z — число ближайших соседей в кристаллической решетке.

В модели эллиптической плотности электронных состояний

$$\rho(x) = \frac{2}{\pi W^2}\,[W^2 - x^2]^{1/2} \tag{64}$$

в случае

$$1 - n \ll 1 \tag{65}$$

(т.е. вблизи половинного заполнения электронной зоны) уравнение для химпотенциала $\bar{\mu}$ (59) допускает точное решение, подстановка которого в (58) с учетом (61), (62), (64) и (65) позволяет получить формулу границы ферромагнитной фазы на плоскости параметров (ν, n)

$$\nu = \big[3\pi(1-n)\big]^{1/3}\Big\{\pi - 4\big[3\pi(1-n)\big]^{1/3}\Big\}. \tag{66}$$

Анализ выражения (66) показывает, что условие существования ферромагнетизма в системе $\nu > 0$ удовлетворяется на интервале $n_c < n < 1$, где

$$n_c = 1 - \frac{\pi^2}{192} \approx 0.95, \tag{67}$$

причем на концах данного интервала (при $n = n_c$ и 1) функция (66) обращается в нуль ($\nu = 0$), а в расположенной внутри этого интервала точке

$$n_f = 1 - \frac{\pi^2}{1536} \approx 0.99 \tag{68}$$

принимает свое максимальное значение

$$\nu_f = \frac{\pi^2}{16} \approx 0.62, \tag{69}$$

физический смысл которого заключается в том, что при $\nu > \nu_f$ ферромагнетизм в системе не возникает ни при каких значениях n из интервала $0 \leqslant n \leqslant 1$, т.е. величина ν_f является точкой полного исчезновения ферромагнетизма во всем допустимом интервале изменения электронной концентрации.

Подставляя (45) в (57), с учетом соотношения [25]

$$\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{k}_0) = -\varepsilon(\mathbf{k}) \tag{70}$$

получаем, что в случае $0 \leqslant n < 1$ металлическая фаза устойчива при любых значениях ν и T, а в случае $n = 1$ критерий ее неустойчивости относительно диэлектрического (зарядового) упорядочения при $T = 0$ с учетом $\mu = U/2$ [28] можно записать в виде

$$1 - \nu^2\,\frac{J_2}{J_0} > 0, \tag{71}$$

где

$$J_\varkappa = \int\limits_{-1}^{1} y^\varkappa I_1(y)dy. \tag{72}$$

В модели эллиптической плотности электронных состояний (64) выражение (71) с учетом (60)–(62) и (72) приводит к утверждению о том, что в случае $n = 1$ и $T = 0$ при выполнении условия

$$U > U_c, \tag{73}$$

где

$$U_c = \frac{W}{\sqrt{6}} \approx 0.41W, \tag{74}$$

в системе существует диэлектрическое (зарядовое) упорядочение. Таким образом, величина U_c представляет собой точку фазового перехода «металл–диэлектрик».

При рассмотрении простой кубической (ПК) решетки численный расчет по формулам (58), (59) и (71) показывает, что в этом случае не возникает никаких качественных изменений в магнитных и электрических свойствах модели Хаббарда, исследованных выше в рамках эллиптической плотности состояний (64). Критические точки в случае ПК решетки принимают следующие значения:

$$n_c \approx 0.89, \tag{75}$$

$$n_f \approx 0.96, \tag{76}$$

$$\nu_f \approx 0.74, \tag{77}$$

$$U_c \approx 0.33W. \tag{78}$$

3. Обсуждение результатов

Полученные в данной работе общие формулы (28) и (29) описывают распространение двух бозе-подобных коллективных возбуждений электронной системы — магнонов и дублонов. Первое из них соответствует движению по решетке перевернутого электронного спина, а второе — перемешиванию по кристаллу пары электронов с взаимно противоположными спинами. Видно глубокое внутреннее сходство выражений (28) и (29). В обоих случаях вклад в динамику определяется четырьмя членами (суммы по α в числителях и знаменателях упомянутых выше выражений), описывающими внутризонные и межзонные переходы электронов. Для магнона эти переходы происходят в канале «частица–дырка», а для дублона — в канале «частица–частица». Полюса функций Грина $F_{+-}(\mathbf{k}, \omega)$ и $F_{02}(\mathbf{k}, \omega)$ дают соответственно спектр магнонов и дублонов, причем затухание этих квазичастиц определяется их распадом на частицу (электрон) и дырку в первом случае и на две частицы (два электрона) во втором.

Отметим, что, согласно (28) и (29), собственно энергетические части магнонной и дублонной функций Грина обращаются в нуль на волновых векторах $\mathbf{k} = 0$ и $\mathbf{k}_0$ соответственно. Данное обстоятельство указывает на возможность существования отвечающих этим волновым векторам неустойчивостей, которые и были исследованы в настоящей работе.

Магнонная функция Грина с точностью до знака совпадает с динамической магнитной восприимчивостью и, следовательно, описывает отклик системы на внешнее магнитное поле. Динамический отклик на внешнее электрическое поле определяется диэлектрической восприимчивостью, которая связана с Фурье-образом $F_e(\mathbf{k}, \omega)$ функции Грина, составленной из диагональных X-операторов

$$F_e(l-l', \tau-\tau') = \langle\langle X_l^{22}(\tau) - X_l^{00}(\tau) \,|\, X_{l'}^{22}(\tau') - X_{l'}^{00}(\tau')\rangle\rangle. \tag{79}$$

Для дублонной функции Грина $F_{02}(\mathbf{k}, \omega)$, составленной из недиагональных операторов Хаббарда X_l^{02} и $X_{l'}^{20}$, трудно дать интерпретацию функции отклика системы на какое-либо электрическое поле; однако очевидно, что данная функция Грина описывает перераспределение заряда в системе и поэтому может быть использована для выявления диэлектрической неустойчивости.

Анализ дублонной функции Грина в случае половинного заполнения электронной энергетической зоны $(n = 1)$ показывает, что при $U > U_c$ металлическая фаза становится неустойчивой относительно диэлектрического (зарядового) упорядочения, причем величина U_c оказывается порядка ширины зоны W. Данный результат находится в хорошем качественном согласии с выводами работ [4,28,32–34], в которых переход «металл–диэлектрик» изучался при помощи анализа электронной функции Грина.

Что же касается описываемых магнонной функцией Грина магнитных свойств модели Хаббарда, то проведенное в настоящей работе исследование ферромагнитной неустойчивости парамагнитной фазы позволяет сделать выводы, которые хорошо согласуются со многими результатами (полученными самыми различными методами) [3,29,35–40], а именно: 1) ферромагнетизм существует при сильном кулоновском взаимодействии U $(U \gg W)$ в относительно небольшой окрестности значений электронной концентрации n вблизи половинного заполнения зоны $(n < 1)$; 2) ферромагнетизм наиболее устойчив при $U \to \infty$ и постепенно подавляется с уменьшением U; 3) размер и форма области существования ферромагнетизма на плоскости параметров $(W/U, n)$ количественно (но не качественно) зависят от вида затравочной плотности электронных состояний, т. е. от типа кристаллической решетки.

В заключение автор выражает глубокую благодарность Ю.А. Изюмову.

Список литературы

[1] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. **A276**, *1365*, 238 (1963).
[2] Д.И. Хомский. ФММ **29**, *1*, 31 (1970).
[3] Ю.А. Изюмов. УФН **161**, *11*, 1 (1991).
[4] Ю.А. Изюмов. УФН **165**, *4*, 403 (1995).
[5] T. Izuyama, D. Kim, R. Kubo. J. Phys. Soc. Japan **18**, *7*, 1025 (1963).
[6] Т. Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. Мир, М. (1988). 288 с.
[7] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. **A285**, *1403*, 542 (1965).
[8] П.М. Слободян, И.В. Стасюк. ТМФ **19**, *3*, 423 (1974).
[9] Р.О. Зайцев. ЖЭТФ **70**, *3*, 1100 (1976).
[10] Р.О. Зайцев. ЖЭТФ **75**, *6*, 2362 (1978).
[11] А.В. Ведяев, М.Ю. Николаев. ТМФ **59**, *2*, 293 (1984).
[12] А.В. Ведяев, М.Ю. Николаев. Письма в ЖЭТФ **41**, *1*, 18 (1985).
[13] E.G. Goryachev, E.V. Kuzmin. Phys. Lett. **A131**, *7*, 481 (1988).
[14] Е.Г. Горячев, Е.В. Кузьмин. ЖЭТФ **98**, *5*, 1705 (1990).
[15] N.M. Plakida, V.Yu. Yushankhai, I.V. Stasyuk. Physica **C160**, *1*, 80 (1989).
[16] В.Ю. Ирхин, М.И. Кацнельсон. ФТТ **25**, *11*, 3383 (1983).
[17] В.Ю. Ирхин, М.И. Кацнельсон. ФММ **66**, *1*, 41 (1988).
[18] V.Yu. Irkhin, M.I. Katsnelson. J. Phys. **C18**, *21*, 4173 (1985).
[19] Yu.A. Izyumov, B.M. Letfulov, E.V. Shipitsyn, K.A. Chao. Int. J. Mod. Phys. **B6**, *21*, 3479 (1992).
[20] Yu.A. Izyumov, B.M. Letfulov, E.V. Shipitsyn. J. Phys.: Condens. Matter **6**, *27*, 5137 (1994).
[21] Ю.А. Изюмов, Б.М. Летфулов, Е.В. Шипицын. ЖЭТФ **105**, *5*, 1357 (1994).
[22] Е.В. Шипицын. ФТТ **38**, *9*, 2797 (1996).
[23] Е.В. Шипицын. ФТТ **39**, *9*, 1609 (1997).
[24] Yu.A. Izyumov, B.M. Letfulov, E.V. Shipitsyn, M. Bartkowiak, K.A. Chao. Phys. Rev. **B46**, *24*, 15 697 (1992).
[25] Ю.А. Изюмов, М.И. Кацнельсон, Ю.Н. Скрябин. Магнетизм коллективизированных электронов. Физматлит, М. (1994). 368 с.
[26] Д.Н. Зубарев. УФН **71**, *1*, 71 (1960).
[27] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. Физматлит, М. (1962). 444 с.
[28] Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. Наука, М. (1987). 264 с.
[29] Yu.A. Izyumov, B.M. Letfulov, E.V. Shipitsyn. J. Phys.: Condens. Matter **4**, *49*, 9955 (1992).
[30] М.И. Ауслендер, В.Ю. Ирхин, М.И. Кацнельсон. ФММ **65**, *1*, 57 (1988).
[31] M.I. Auslender, V.Yu. Irkhin, M.I. Katsnelson. J. Phys. **C21**, *32*, 5521 (1988).
[32] J. Habbard. Proc. Roy. Soc. **A281**, *1386*, 401 (1964).
[33] A.O. Anokhin, V.Yu. Irkhin. Phys. Stat. Sol. (b) **165**, *1*, 129 (1991).
[34] A.O. Anokhin, V.Yu. Irkhin, M.I. Katsnelson. J. Phys.: Condens. Matter **3**, *11*, 1475 (1991).
[35] L.M. Roth. Phys. Rev. **184**, *2*, 451 (1969).
[36] W. Nolting, W. Borgiel. Phys. Rev. **B39**, *10*, 6962 (1989).
[37] M.Yu. Nikolaev, N.V. Ryzhanova, A.V. Vedyaev, S.M. Zubritskii. Phys. Stat. Sol. (b) **128**, *2*, 513 (1985).
[38] Ю.А. Изюмов, Б.М. Летфулов, Е.В. Шипицын. ФММ **77**, *1*, 47 (1994).
[39] Ю.А. Изюмов, Б.М. Летфулов, Е.В. Шипицын. ФММ **79**, *4*, 3 (1995).
[40] А.В. Зарубин, В.Ю. Ирхин. ФТТ **41**, *6*, 1057 (1999).