

**РЕШЕНИЕ $B-U-V$ МОДЕЛИ ХАББАРДА
В ПРИБЛИЖЕНИИ СТАТИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ**

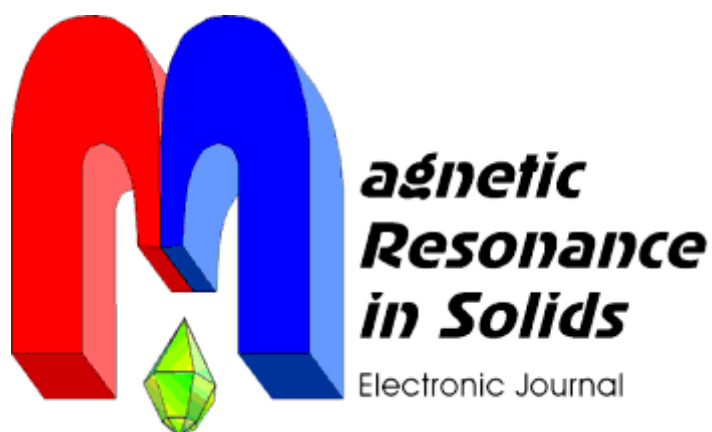
Г.И. Миронов

Марийский государственный педагогический институт, Йошкар-Ола

**THE INVESTIGATION OF THE $B-U-V$ HUBBARD MODEL
IN THE STATIC-FLUCTUATION APPROXIMATION**

G.I. Mironov

Mari State Pedagogical Institute, 424002 Ioshkar-Ola



*Volume 6, No. 1,
pages 141-153, 2004*

<http://mrsej.ksu.ru>

**РЕШЕНИЕ B-U-V МОДЕЛИ ХАББАРДА
В ПРИБЛИЖЕНИИ СТАТИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ**

Г.И. Миронов

Марийский государственный педагогический институт, Йошкар-Ола

Приведены решения модели Хаббарда, содержащей два узла кристаллической решетки, и двухмерной модели Хаббарда с учетом кулоновского взаимодействия электронов, находящихся на соседних узлах кристаллической решетки в приближении статических флуктуаций. Полученные результаты сравниваются с точным решением для димера.

**THE INVESTIGATION OF THE B-U-V HUBBARD MODEL
IN THE STATIC-FLUCTUATION APPROXIMATION**

G.I. Mironov.

Mari State Pedagogical Institute, 424002 Ioshkar-Ola

We investigate the *B-U-V* Hubbard model in the Static-Fluctuation Approximation. The first part of the article is devoted to the exact solution of the Hubbard model in the case of two sites of the crystal lattice. We got and solved system of 24 differential equations for the 24 Fermi operators. The anticommutator Green's function for dimer was derived. In the second part we calculate the anticommutator Green's function for dimer in the Static-Fluctuation Approximation. Comparison of the exact and approximate solutions shows that the Static-Fluctuation Approximation adequately describes the Hubbard model for case of two sites of the crystal lattice. The third part is concerned with the solution in the Static-Fluctuation Approximation of the two-dimensional Hubbard model. We investigate the energy spectrum of the two-dimensional Hubbard model, the numerator of the anticommutator Green's function. It should be noted that in the case of strong correlations, the ground-state energy of the antiferromagnetic phase is found to be lower than that of the paramagnetic phase.

В последнее время особенное внимание уделяется исследованию сильно коррелированных электронных систем, которые могут быть описаны в рамках модели Хаббарда [1], модели Эмери [2] или других моделей (см., например, [2-9]).

Модель Хаббарда до настоящего времени продолжает исследоваться различными методами. Были получены фундаментальные результаты о природе основного состояния, элементарных возбуждений, построены фазовые диаграммы. В работах [10-12] было разработано решение модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций с введением для фермиевских операторов «представления типа представления взаимодействия». Было показано, что в рамках выбранного приближения основное состояние системы является при точно наполовину заполненной зоне антиферромагнитным. В [12] была вычислена энергия основного состояния в случае бипартитной двухмерной модели Хаббарда, а также в частном случае получено выражение для энергии основного состояния одномерной модели Хаббарда, для которой известно точное решение [13,14], полученное с применением метода Бете [15]. Сравнение этих результатов показало, что в случаях слабой и сильной связей энергии основного состояния практически одинаковы, в случае промежуточных корреляций выражения для энергий совпадали с точностью порядка 18%. Все это позволяет надеяться, что приближение статических флуктуаций в пределах сильной и слабой корреляций может адекватно описывать поведение модели Хаббарда. Для того, чтобы удостовериться в этом, необходимо сравнение с другими точными решениями. В [16] было получено точное решение для димера (двух узлов кристаллической решетки, помещенных в термостат). Было получено аналогичное решение в приближении статических флуктуаций, сравнение точного и приближенного вычислений показало, что выбранное приближение приводит к одинаковым с точным решением результатам. Однако в [16] не учитывалось межузельное кулоновское отталкивание электронов. Целью настоящей работы является исследование модели Хаббарда с учетом кулоновского взаимодействия электронов, находящихся как на одном узле кристаллической решетки, так и на соседних узлах.

1. Точное решение двухузельной модели Хаббарда

В термостат поместим два узла кристаллической решетки, взаимодействие между узлами будем описывать гамильтонианом Хаббарда, явный вид гамильтониана, описывающего взаимодействие между узлами кристаллической решетки и термостатом, выписывать не будем. Гамильтониан системы с учетом межузельного кулоновского взаимодействия электронов соседних узлов запишем в виде ($i, j=1, 2$):

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

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

Уравнение движения для оператора $a_{i\sigma}^+(\tau)$ в представлении Гейзенберга ($\tau = it$) имеет вид:

$$\frac{d}{d\tau} a_{i\sigma}^+(\tau) = \varepsilon a_{i\sigma}^+(\tau) + U n_{i\bar{\sigma}} a_{i\sigma}^+(\tau) + V n_{j\bar{\sigma}} a_{i\sigma}^+(\tau) + B a_{j\sigma}^+(\tau), \quad (2)$$

здесь $i \neq j; i, j=1, 2$.

Написав уравнения движения для вновь появившихся в уравнении (2) операторов, мы получим систему 24 связанных дифференциальных уравнений. Ввиду громоздкости ни сами дифференциальные уравнения, ни решения системы дифференциальных уравнений выписывать не будем. (Решение этих уравнений в частном случае $V = 0$ приведено в [16]). Используя полученные решения, можно вычислить антикоммутирующие функции Грина и их фурье-образы. Можно, например, получить, что:

$$\langle\langle a_{i\sigma}^+ | a_{i\sigma} \rangle\rangle_E = -\frac{i}{2\pi} \sum_l \frac{K_l}{E - \varepsilon_l}, \quad (3)$$

где введены следующие обозначения для корреляционных функций и значений энергий:

$$K_{1,2} = \frac{1}{2} \{ 1 - \langle n_{i\sigma} \rangle - 2 \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle + X_1 + X_2 + X_{32} - X_{42} \pm Y_{11} \mp Y_{21} \mp Y_{31} \pm Y_{41} \},$$

$$K_{3,4} = \frac{1}{2} \{ \langle n_{i\sigma} \rangle - X_1 - X_2 + X_{42} \mp Y_{11} \pm Y_{21} \pm Y_{31} \mp Y_{41} \},$$

$$K_{5,6} = \frac{1}{4} \{ \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle - X_2 - X_{32} + X_{42} \mp Y_{12} \pm Y_{22} \pm Y_{31} \mp Y_{41} + Z_1 \},$$

$$K_{7,8} = \frac{1}{4} \{ \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle - X_1 - X_{32} + X_{42} \mp Y_{12} \pm Y_{21} \pm Y_{32} \mp Y_{41} + Z_2 \}$$

$$\begin{aligned}
 K_{9,10} &= \frac{1}{4} \{ X_1 - X_{42} \mp Y_{21} \pm Y_{22} \pm Y_{41} + Z_1 \}, \\
 K_{11,12} &= \frac{1}{4} \{ X_2 - X_{42} \mp Y_{31} \pm Y_{32} \pm Y_{41} + Z_2 \}, \\
 K_{13,14} &= \frac{1}{2} \{ X_{32} - X_{42} \pm Y_{41} \}, \quad K_{15,16} = \frac{1}{2} \{ X_{42} \mp Y_{41} \}, \\
 K_{17} &= \frac{1}{8\gamma} \left\{ \frac{U-V}{2} L_1 + (\gamma+2B)L_2 \right\}, \quad K_{18} = \frac{1}{8\gamma} \left\{ \frac{U-V}{2} L_3 + (\gamma-2B)L_4 \right\}, \\
 K_{19} &= -\frac{1}{8\gamma} \left\{ \frac{U-V}{2} L_1 + (\gamma-2B)L_2 \right\}, \quad K_{20} = -\frac{1}{8\gamma} \left\{ \frac{U-V}{2} L_3 + (\gamma+2B)L_4 \right\}, \\
 K_{21} &= \frac{1}{8\gamma} \left\{ -\frac{U-V}{2} L_1 + (\gamma+2B)L_5 \right\}, \quad K_{22} = \frac{1}{8\gamma} \left\{ -\frac{U-V}{2} L_3 + (\gamma-2B)L_6 \right\}, \\
 K_{23} &= \frac{1}{8\gamma} \left\{ \frac{U-V}{2} L_1 - (\gamma-2B)L_5 \right\}, \quad K_{24} = \frac{1}{8\gamma} \left\{ \frac{U-V}{2} L_3 - (\gamma+2B)L_6 \right\}, \\
 L_{1,3} &= -X_1 + X_2 \pm Y_{21} \pm Y_{22} \mp Y_{31} \mp Y_{32} + Z_1 - Z_2, \\
 L_{2,4} &= 2 \langle n_{i\sigma}^- \rangle - X_1 - X_2 - 2X_{32} + 2X_{42} \pm 2Y_{12} \pm Y_{21} \mp Y_{22} \pm Y_{31} \mp Y_{32} \mp 2Y_{41} - Z_1 - Z_2, \\
 L_{5,6} &= X_1 + X_2 - 2X_{42} \mp Y_{21} \mp Y_{22} \mp Y_{31} \mp Y_{32} \pm 2Y_{41} - Z_1 - Z_2, \\
 X_1 &= \langle n_{i\sigma}^- n_{j\sigma} \rangle, \quad X_2 = \langle n_{i\sigma}^- n_{i\sigma}^- \rangle, \quad X_{31} = \langle n_{i\sigma}^- n_{j\sigma} \rangle, \quad X_{32} = \langle n_{i\sigma}^- n_{j\sigma}^- \rangle, \\
 X_{41} &= \langle n_{j\sigma}^- n_{j\sigma}^- n_{i\sigma} \rangle, \quad X_{42} = \langle n_{j\sigma}^- n_{j\sigma}^- n_{i\sigma}^- \rangle, \quad X_5 = \langle n_{j\sigma}^- n_{j\sigma}^- n_{i\sigma}^- n_{i\sigma} \rangle, \\
 Y_{11} &= \langle a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma} \rangle, \quad Y_{12} = \langle a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}^- \rangle, \quad Y_{21} = \langle n_{j\sigma}^- a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma} \rangle, \quad Y_{22} = \langle n_{j\sigma}^- a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}^- \rangle, \\
 Y_{31} &= \langle n_{i\sigma}^- a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma} \rangle, \quad Y_{32} = \langle n_{i\sigma}^- a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}^- \rangle, \quad Y_{41} = \langle n_{j\sigma}^- a_{j\sigma}^+ n_{i\sigma}^- a_{i\sigma} \rangle, \\
 Y_{42} &= \langle n_{j\sigma}^- a_{j\sigma}^+ n_{i\sigma}^- a_{i\sigma}^- \rangle, \quad Z_1 = \langle a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma}^- a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} \rangle, \quad Z_2 = \langle a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma}^- a_{i\sigma}^- a_{i\sigma} \rangle. \\
 \varepsilon_{1,2} &= \varepsilon \pm B, \quad \varepsilon_{3,4} = \varepsilon \pm B, \quad \varepsilon_{5,6} = \varepsilon + V \pm B, \quad \varepsilon_{7,8} = \varepsilon + U \pm B, \\
 \varepsilon_{9,10} &= \varepsilon + U \pm B, \quad \varepsilon_{11,12} = \varepsilon + V \pm B, \quad \varepsilon_{13,14} = \varepsilon + U + V \pm B, \\
 \varepsilon_{15,16} &= \varepsilon + U + V \pm B, \quad \varepsilon_{17,18} = \varepsilon + \frac{U+V}{2} + \gamma \mp B, \\
 \varepsilon_{19,20} &= \varepsilon + \frac{U+V}{2} - \gamma \mp B, \quad \varepsilon_{21,22} = \varepsilon + \frac{U+V}{2} + \gamma \mp B, \\
 \varepsilon_{23,24} &= \varepsilon + \frac{U+V}{2} - \gamma \mp B, \quad \gamma = \sqrt{\left(\frac{U-V}{2}\right)^2 + 4B^2}
 \end{aligned}$$

верхний знак в приведенных выше выражениях соответствует первому индексу, нижний – второму.

Полюса функции Грина (3) определяют возможный энергетический спектр системы – всего мы имеем 24 корня с ε_1 по ε_{24} , некоторые энергетические уровни являются вырожденными. Для того, чтобы установить какие корни соответствуют полюсам функции Грина, необходимо вычислить значения числителей соответствующих дробей, которые определяют «емкости» энергетических уровней (вероятности пребывания электронов на соответствующих уровнях энергии). Для того, чтобы вычислить значения термодинамических средних (корреляционных функций) в (3) необходимо с помощью флуктуационно-диссипационной теоремы [17] от функций Грина перейти к термодинамическим средним, написать соответствующее количество уравнений и решить эту систему уравнений. Нас интересует случай, когда на каждый узел кристаллической решетки приходится один электрон.

Решение системы уравнений для корреляционных функций при температуре $T=0$ и концентрации $n = \langle n_{i\uparrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle = 1$ приводит к следующим результатам ($U > B, V$):

$$\begin{aligned}
 \varepsilon &= -(U+V)/2, \\
 \langle n_{i\sigma} \rangle &= 1/2, \quad \langle n_{i\sigma}^- \rangle = 1/2, \quad X_1 = \langle n_{i\sigma}^- n_{j\sigma} \rangle = 1/2, \quad X_2 = \langle n_{i\sigma}^- n_{i\sigma}^- \rangle = 0, \\
 X_{31} &= \langle n_{i\sigma}^- n_{j\sigma} \rangle = 0, \quad X_{32} = \langle n_{i\sigma}^- n_{j\sigma}^- \rangle = 0, \quad X_{41} = \langle n_{j\sigma}^- n_{j\sigma}^- n_{i\sigma} \rangle = 0,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 X_{42} &= \langle n_{j\sigma}^- n_{j\sigma} n_{i\sigma}^- \rangle = 0, & X_5 &= \langle n_{j\sigma}^- n_{j\sigma} n_{i\sigma}^- n_{i\sigma} \rangle = 0, \\
 Y_{11} &= \langle a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma} \rangle = 0, & Y_{12} &= \langle a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}^- \rangle = 0, \\
 Y_{21} &= \langle n_{j\sigma}^- a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma} \rangle = 0, & Y_{22} &= \langle n_{j\sigma}^- a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}^- \rangle = 0, \\
 Y_{31} &= \langle n_{i\sigma}^- a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma} \rangle = 0, & Y_{32} &= \langle n_{i\sigma}^- a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}^- \rangle = 0, \\
 Y_{41} &= \langle n_{j\sigma}^- a_{j\sigma}^+ n_{i\sigma}^- a_{i\sigma} \rangle = 0, & Y_{42} &= \langle n_{j\sigma}^- a_{j\sigma}^+ n_{i\sigma}^- a_{i\sigma}^- \rangle = 0, \\
 Z_1 &= \langle a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma}^- a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} \rangle = 1/2, & Z_2 &= \langle a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma}^- a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}^- \rangle = 0.
 \end{aligned}$$

Особо отметим, что $\langle a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma}^- a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} \rangle = 1/2$ – вероятность взаимного перехода электронов с противоположными ориентациями проекций спинов с одного узла на другой равна 1/2. Оказывается, что хотя мы в гамильтониане (1) не учитываем парные перескоки, они возникают при точном решении. Таким образом, понижение энергии основного состояния системы, описываемой гамильтонианом Хаббарда, происходит не только за счет косвенного обмена (суперобмена) (см. например, [17], стр. 36), когда электрон под действием гамильтониана, описывающего перескоки, переходит на соседний центр, а затем под действием того же гамильтониана возвращается обратно, но и за счет парного перескока. Как и в случае косвенного обмена, при парном перескоке понижение энергии основного состояния обусловлено выигрышем в энергии за счет дополнительной делокализации электронов. По-видимому, именно парные перескоки в случае димера имеют определяющее значение при формировании структуры основного состояния. Также отметим, что $\langle n_{1\sigma} n_{2\bar{\sigma}} \rangle = \langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\sigma} \rangle = 1/2$ – основное состояние димера является антиферромагнитным. При этом, если ввести понятие среднего значения проекции спина S (см., например, формулы (9)–(12)), то оказывается, что на каждом узле димера $S = 0$ ($\langle n_{i\sigma} \rangle = \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle = 1/2$). Функция Грина (3) при этом принимает вид:

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

Таким образом, «емкости» лишь четырех энергетических уровней из двадцати четырех не равны нулю. Полюса функции Грина (4) определяют энергетический спектр системы:

$$E_{1-4} = \pm(U - V) / 2 \pm B . \quad (5)$$

В случае заполнения двух узлов двумя электронами в энергетическом спектре имеются всего четыре одно-электронных уровня: два верхних и два нижних, разделенных энергией $U - V$, вероятность их заполнения равна 1/4. Учет кулоновского взаимодействия электронов, находящихся на разных узлах кристаллической решетки, приводит к перенормировке кулоновской энергии взаимодействия электронов, находящихся на одной орбитали, и к перенормировке химпотенциала. Основное состояние системы оказалось антиферромагнитным, что соответствует теореме Либя–Маттиса [19].

Отметим, что спектр димера (5) несколько отличается от полученных ранее результатов (см., например, [20,21]). Дело, по-видимому, в том, в работах [20,21] ограничиваются диагонализацией матрицы энергии размером 6×6 , при этом пренебрегают многими процессами, происходящими в системе, описываемой гамильтонианом (1), например, процессом взаимного перехода электронов с противоположными ориентациями спинов с одного узла на другой – парными перескоками. При точной диагонализации нами учтены все эти процессы, при этом получается матрица энергии 24×24 (если в гамильтониане (1) для сравнения с работами [20,21] положить $V = 0$, то матрица энергии получается размерности 22×22).

Полученный результат для энергетического спектра модели Хаббарда объясняется довольно просто. Нижние уровни энергии $E_{1,2}$ равны $\varepsilon + V \pm B$ – уровень энергии, складывающийся из собственной энергии электрона и энергии кулоновского отталкивания электрона от электрона, находящегося на соседнем узле, “размывается” на два подуровня (по числу узлов). Вышележащие уровни энергии $E_{3,4}$ равны $\varepsilon + U \pm B$ – когда оба электрона находятся на одном узле, уровень энергии, получающийся в результате сложения собственной энергии и энергии кулоновского отталкивания электронов, “размывается” также на два подуровня. Отметим в связи с вышесказанным, что $\varepsilon = -(U + V) / 2$.

2. Решение двухузельной модели Хаббарда методом спиновых флуктуаций

Гамильтониан Хаббарда (1) представим в виде:

$$\begin{aligned}
 H &= H_0 + H_1 , & (6) \\
 H_0 &= \varepsilon \sum_{\sigma} (n_{1\sigma} + n_{2\sigma}) + B \sum_{\sigma} (a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^+ a_{1\sigma}), \\
 H_1 &= U(n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow} n_{2\downarrow}) + V(n_{1\uparrow} n_{2\downarrow} + n_{1\downarrow} n_{2\uparrow}).
 \end{aligned}$$

Согласно полученному выше результату основное состояние димера – антиферромагнитное. Для решения гамильтониана (9) методом спиновых флуктуаций предположим теперь, что в системе есть антиферромагнитное упорядочение. Тогда концентрацию n и среднее значение проекции спина S выразим следующим образом [18]:

$$n = \langle n_{1\sigma} \rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \langle n_{2\sigma} \rangle + \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle, \quad (7)$$

$$2S = \langle n_{1\sigma} \rangle - \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \langle n_{2\sigma} \rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle. \quad (8)$$

Из (7)-(8) при $n = 1$ следует, что

$$\langle n_{1\sigma} \rangle = 1/2 + S, \quad (9)$$

$$\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle = 1/2 - S, \quad (10)$$

где $S = \langle S_1^z \rangle = -\langle S_2^z \rangle$ (равенство $\langle S_1^z \rangle = -\langle S_2^z \rangle$ означает, что спин электрона на одном узле ориентирован преимущественно в одну сторону, а спин электрона на соседнем узле – в другую сторону). Следовательно,

$$\langle n_{2\sigma} \rangle = 1/2 - S, \quad (11)$$

$$\langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle = 1/2 + S. \quad (12)$$

Для того, чтобы учесть спиновые флуктуации, введем оператор флуктуации проекции спина $\Delta S = \Delta S^z$ следующим образом (см. формулы (10), (12)):

$$n_{1\bar{\sigma}} = 1/2 - S - \Delta S, \quad (13)$$

$$n_{2\bar{\sigma}} = 1/2 + S + \Delta S. \quad (14)$$

В (13) -(14) мы предположили, что оператор флуктуации проекции спина не зависит от номера узла. Используя формулы (16), (17), уравнения движения (2), запишем в виде:

$$\frac{d}{d\tau} a_{1\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_1 a_{1\sigma}^+(\tau) + B a_{2\sigma}^+(\tau) - U' \Delta S a_{1\sigma}^+(\tau), \quad (15)$$

$$\frac{d}{d\tau} a_{2\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_2 a_{2\sigma}^+(\tau) + B a_{1\sigma}^+(\tau) + U' \Delta S a_{2\sigma}^+(\tau), \quad (16)$$

где $\varepsilon_1 = \varepsilon + U(1/2 - S) + V(1/2 + S)$, $\varepsilon_2 = \varepsilon + U(1/2 + S) + V(1/2 - S)$, $U' = U - V$.

Введем для операторов представление "типа представления взаимодействия" следующим образом ($f = 1, 2$):

$$a_{f\sigma}^+(\tau) = \exp(H_0\tau) \exp(-H_0\tau) a_{f\sigma}^+(\tau) \exp(H_0\tau) \exp(-H_0\tau) = \exp(H_0\tau) \tilde{a}_{f\sigma}^+(\tau) \exp(-H_0\tau), \quad (17)$$

где H_0 – гамильтониан, входящий в (6) с учетом перенормировок $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_1$, $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_2$. С учетом (17) из уравнений движения (15), (16) можно получить следующие уравнения для неизвестных операторов:

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) = -U' \Delta \tilde{S}(\tau) \tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau), \quad (18)$$

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{a}_{2\sigma}^+(\tau) = U' \Delta \tilde{S}(\tau) \tilde{a}_{2\sigma}^+(\tau), \quad (19)$$

где $\Delta \tilde{S}(\tau) = \exp(-H_0\tau) \Delta S(\tau) \exp(H_0\tau)$, ($\Delta S(\tau)$ – оператор флуктуации проекции спина в представлении Гейзенберга). Отметим, что уравнения движения (18), (19) также, как и (15), (16), являются точными. Так как

$$\frac{d}{d\tau} n_{1\bar{\sigma}}(\tau) = B \left(a_{2\bar{\sigma}}^+(\tau) a_{1\bar{\sigma}}(\tau) - a_{1\bar{\sigma}}^+(\tau) a_{2\bar{\sigma}}(\tau) \right),$$

из (13) то получается следующее уравнение движения для оператора $\Delta S(\tau)$:

$$\frac{d}{d\tau} \Delta S(\tau) = -B \left(a_{2\bar{\sigma}}^+(\tau) a_{1\bar{\sigma}}(\tau) - a_{1\bar{\sigma}}^+(\tau) a_{2\bar{\sigma}}(\tau) \right).$$

Уравнение движения для оператора $\Delta \tilde{S}(\tau)$ будет иметь вид:

$$\frac{d}{d\tau} \Delta \tilde{S}(\tau) = 0,$$

следовательно, оператор $\Delta \tilde{S}(\tau)$ является интегралом движения: $\Delta \tilde{S}(\tau) = \Delta S(0)$.

Уравнение движения для оператора $\Delta S(0) \tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau)$:

$$\frac{d}{d\tau} \Delta S(0) \tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) = -U' \Delta S^2(0) \tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) . \quad (20)$$

Из равенства $n_{1\bar{\sigma}} n_{1\sigma} = n_{1\bar{\sigma}}$ и определения (13) можно получить, что

$$\Delta S^2 = 1/4 - S^2 - 2S \Delta S . \quad (21)$$

Из (18)-(21) вытекает следующая система замкнутых дифференциальных уравнений ($\Phi^2 = 1/4 - S^2$):

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) = -U' \Delta S(0) \tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) , \quad (22)$$

$$\frac{d}{d\tau} \Delta S(0) \tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) = 2SU' \Delta S(0) \tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) - U' \Phi^2 \tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) . \quad (23)$$

Решения системы (22)-(23) равны:

$$\tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) = \left\{ a_{1\sigma}^+(0) \left[\operatorname{ch}(U'\tau/2) - 2S \operatorname{sh}(U'\tau/2) \right] - 2\Delta S(0) a_{1\sigma}^+(0) \operatorname{sh}(U'\tau/2) \right\} \cdot \exp(U'S\tau) , \quad (24)$$

$$\Delta S(0) \tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) = \left\{ -a_{1\sigma}^+(0) \Phi^2 2 \operatorname{sh}(U'\tau/2) + \Delta S(0) a_{1\sigma}^+(0) \left[\operatorname{ch}(U'\tau/2) + 2S \operatorname{sh}(U'\tau/2) \right] \right\} \exp(U'S\tau) \quad (25)$$

В случае второго узла получим

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{a}_{2\sigma}^+(\tau) = U' \Delta S(0) \tilde{a}_{2\sigma}^+(\tau) , \quad (26)$$

$$\frac{d}{d\tau} \Delta S(0) \tilde{a}_{2\sigma}^+(\tau) = -2SU' \Delta S(0) \tilde{a}_{2\sigma}^+(\tau) + U' \Phi^2 \tilde{a}_{2\sigma}^+(\tau) . \quad (27)$$

Решения дифференциальных уравнений (26), (27) равны:

$$\tilde{a}_{2\sigma}^+(\tau) = \left\{ a_{2\sigma}^+(0) \left[\operatorname{ch}(U'\tau/2) + 2S \operatorname{sh}(U'\tau/2) \right] + \Delta S(0) a_{2\sigma}^+(0) 2 \operatorname{sh}(U'\tau/2) \right\} \cdot \exp(-U'S\tau) \quad (28)$$

$$\Delta S(0) \tilde{a}_{2\sigma}^+(\tau) = \left\{ a_{2\sigma}^+(0) \Phi^2 2 \operatorname{sh}(U'\tau/2) + \Delta S(0) a_{2\sigma}^+(0) \left[\operatorname{ch}(U'\tau/2) - 2S \operatorname{sh}(U'\tau/2) \right] \right\} \cdot \exp(-U'S\tau) . \quad (29)$$

Согласно определению (17) общее решение, например, для оператора $a_{1\sigma}^+(\tau)$ имеет вид:

$$\begin{aligned} a_{1\sigma}^+(\tau) &= \exp(H_0\tau) \tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) \exp(-H_0\tau) = \exp(H_0\tau) a_{1\sigma}^+(0) \exp(-H_0\tau) \cdot \\ &\cdot \left[\operatorname{ch}\left(\frac{U'}{2}\tau\right) - 2S \operatorname{sh}\left(\frac{U'}{2}\tau\right) \right] \exp(U'S\tau) - 2 \exp(H_0\tau) \Delta S(0) \exp(-H_0\tau) \cdot \\ &\cdot \exp(H_0\tau) a_{1\sigma}^+(0) \exp(H_0\tau) \operatorname{sh}\left(\frac{U'}{2}\tau\right) \exp(U'S\tau) . \end{aligned} \quad (30)$$

Введем следующее обозначение для операторов:

$$\bar{a}_{f\sigma}^+(\tau) = \exp(H_0\tau) a_{f\sigma}^+(0) \exp(-H_0\tau), \quad f = 1, 2 . \quad (31)$$

Уравнения движения для введенных нами операторов (31) имеют вид

$$\frac{d}{d\tau} \bar{a}_{1\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_1 \bar{a}_{1\sigma}^+(\tau) + B \bar{a}_{2\sigma}^+(\tau) , \quad (32)$$

$$\frac{d}{d\tau} \bar{a}_{2\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_2 \bar{a}_{2\sigma}^+(\tau) + B \bar{a}_{1\sigma}^+(\tau) . \quad (33)$$

Решение для системы (32)-(33) равно ($\bar{a}_{1\sigma}^+(0) = a_{1\sigma}^+(0)$, $\bar{a}_{2\sigma}^+(0) = a_{2\sigma}^+(0)$):

$$\bar{a}_{1\sigma}^+(\tau) = a_{1\sigma}^+(0) \left[\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2t_B} \operatorname{sh}(t_B\tau) + \operatorname{ch}(t_B\tau) \right] \exp(\tau(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2) + a_{2\sigma}^+(0) \frac{B}{t_B} \operatorname{sh}(t_B\tau) \exp(\tau(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2) , \quad (34)$$

$$\bar{a}_{2\sigma}^+(\tau) = a_{2\sigma}^+(0) \left[\frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{2t_B} \operatorname{sh}(t_B\tau) + \operatorname{ch}(t_B\tau) \right] \exp(\tau(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2) + a_{1\sigma}^+(0) \frac{B}{t_B} \operatorname{sh}(t_B\tau) \exp(\tau(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2) , \quad (35)$$

где $t_B = (((\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/2)^2 + B^2)^{1/2}$.

Тогда решение (30) будет равно:

$$\begin{aligned}
 a_{1\sigma}^+(\tau) = & \left\{ a_{1\sigma}^+(0) \left[\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2t_B} \operatorname{sh}(t_B \tau) + \operatorname{ch}(t_B \tau) \right] + a_{2\sigma}^+(0) \frac{B}{t_B} \operatorname{sh}(t_B \tau) \right\} \times \\
 & \times \left[\operatorname{ch} \left(\frac{U'}{2} \tau \right) - 2S \operatorname{sh} \left(\frac{U'}{2} \tau \right) \right] \exp(U'S\tau) \exp(\tau(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2) - \\
 & - \Delta S(\tau) \left\{ a_{1\sigma}^+(0) \left[\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2t_B} \operatorname{sh}(t_B \tau) + \operatorname{ch}(t_B \tau) \right] + a_{2\sigma}^+(0) \frac{B}{t_B} \operatorname{sh}(t_B \tau) \right\} \times \\
 & \times 2 \operatorname{sh} \left(\frac{U'}{2} \tau \right) \exp(U'S\tau) \exp(\tau(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2)
 \end{aligned} \tag{36}$$

где $\Delta S(\tau)$ – оператор в представлении Гейзенберга. Вычислим антикоммутирующую функцию Грина, имея решение (36), по методике, изложенной в [12]. Получим, что

$$\begin{aligned}
 \langle\langle a_{1\sigma}^+ | a_{1\sigma} \rangle\rangle_E = & \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - S \right) \left(1 - \frac{SU'}{t_B} \right)}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - U' \left(S + \frac{1}{2} \right) - t_B} + \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - S \right) \left(1 + \frac{SU'}{t_B} \right)}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - U' \left(S + \frac{1}{2} \right) + t_B} + \right. \\
 & \left. + \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + S \right) \left(1 - \frac{SU'}{t_B} \right)}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - U' \left(S - \frac{1}{2} \right) - t_B} + \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + S \right) \left(1 + \frac{SU'}{t_B} \right)}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - U' \left(S - \frac{1}{2} \right) + t_B} \right\} .
 \end{aligned} \tag{37}$$

С помощью спектральной теоремы [17] из (37) можно написать уравнение для определения $\langle n_{1\sigma} \rangle$. Аналогичным образом мы можем получить уравнение для $\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle$. С помощью этих уравнений можно написать уравнение для химпотенциала μ ($\mu = -\varepsilon$) и для намагниченности $2S$. Из этих уравнений следует, что при температуре $T=0$ условию $n=1$ соответствует равенство $\varepsilon = -(U+V)/2$. Из уравнения же для намагниченности следует, что при $n=1$ величина проекции спина $S=0$. Полагая, что $S=0$ при $n=1$ из (37) получим:

$$\begin{aligned}
 \langle a_{1\sigma}^+ | a_{1\sigma} \rangle_E = & \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{1/4}{E - U'/2 - B} + \frac{1/4}{E - U'/2 + B} + \right. \\
 & \left. + \frac{1/4}{E + U'/2 - B} + \frac{1/4}{E + U'/2 + B} \right\} .
 \end{aligned} \tag{38}$$

Антикоммутирующая функция Грина (38) совпадает с антикоммутирующей функцией Грина (4), вычисленной при $T=0$ точно. Таким образом, в случае двух узлов развитая в этой главе методика расчета приводит при $T=0$ к совпадению с точным результатом. Это позволяет надеяться, что данную методику можно применять, по-видимому, и для расчета соответствующих величин в случае двух и трех измерений.

3. Энергетический спектр двумерной модели Хаббарда

Гамильтониан Хаббарда запишем с учетом отталкивания электронов, находящихся на соседних узлах кристаллической решетки:

$$\begin{aligned}
 H = H_0 + H_1 , \\
 H_0 = \varepsilon \sum_{f,\sigma} n_{f\sigma} + \sum_{f \neq l, \sigma} B_{f,l} a_{f\sigma}^+ a_{l\sigma} , \\
 H_1 = \frac{U}{2} \sum_{f,\sigma} n_{f\sigma} n_{f\bar{\sigma}} + \frac{V}{2} \sum_{f \neq l, \sigma} n_{f\sigma} n_{l\bar{\sigma}} + \frac{V}{2} \sum_{f \neq l, \sigma} n_{f\sigma} n_{l\sigma} .
 \end{aligned} \tag{39}$$

В гамильтониан (39) мы дополнительно ввели слагаемое, описывающее кулоновское отталкивание электронов с одинаковыми проекциями спинов, находящихся на соседних узлах решетки, потому что в отличие от димера на соседних узлах кристаллической решетки из-за перескоков могут оказаться электроны с различными ориентациями спинов (как $\uparrow\downarrow$, так и $\uparrow\uparrow$, $\downarrow\downarrow$).

Введя представления о подрешетках в системе, характеризуемой гамильтонианом (39), можно получить следующие уравнения движения для операторов рождения частиц разных подрешеток в представлении Гейзенберга:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} a_{f\sigma}^+ &= \varepsilon a_{f\sigma}^+ + \sum_l B_{f,l} a_{l\sigma}^+ + U n_{f\bar{\sigma}} a_{f\sigma}^+ + V \sum_l n_{l\bar{\sigma}} a_{f\sigma}^+ + V \sum_l n_{l\sigma} a_{f\sigma}^+, \\ \frac{d}{d\tau} a_{l\sigma}^+ &= \varepsilon a_{l\sigma}^+ + \sum_f B_{f,l} a_{f\sigma}^+ + U n_{l\bar{\sigma}} a_{l\sigma}^+ + V \sum_f n_{f\bar{\sigma}} a_{l\sigma}^+ + V \sum_f n_{f\sigma} a_{l\sigma}^+. \end{aligned} \quad (40)$$

Полагая, аналогично (13), (14):

$$n_{f\bar{\sigma}} = 1/2 - S - \Delta S, \quad n_{f\sigma} = 1/2 + S + \Delta S, \quad (41)$$

$$n_{l\bar{\sigma}} = 1/2 + S + \Delta S, \quad n_{l\sigma} = 1/2 - S - \Delta S, \quad (42)$$

где $S = \langle S_f^z \rangle = -\langle S_l^z \rangle$ ($l = f + \Delta$, вектор Δ соединяет соседние атомы [18]), $n = 1$, оператор флуктуации проекции спина $\Delta S = \Delta S_z$ по нашему предположению является однородным в каждой из подрешеток и не зависит от номера узла.

С учетом (41), (42) дифференциальные уравнения (40) напишем в виде:

$$\frac{d}{d\tau} a_{f\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_1 a_{f\sigma}^+(\tau) + \sum_l B_{f,l} a_{l\sigma}^+(\tau) - U \Delta S a_{f\sigma}^+(\tau), \quad (43)$$

$$\frac{d}{d\tau} a_{l\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_2 a_{l\sigma}^+(\tau) + \sum_f B_{f,l} a_{f\sigma}^+(\tau) + U \Delta S a_{l\sigma}^+(\tau) \quad (44)$$

где

$$\varepsilon_1 = \varepsilon + U(1/2 - S) + 4V(1/2 + S) + 4V(1/2 - S),$$

$$\varepsilon_2 = \varepsilon + U(1/2 + S) + 4V(1/2 - S) + 4V(1/2 + S),$$

Введя представление “типа представления взаимодействия”:

$$a_{j\sigma}^+(\tau) = \exp(H_0 \tau) \tilde{a}_{j\sigma}^+(\tau) \exp(-H_0 \tau), \quad (j=f,l), \quad (45)$$

где H_0 – гамильтониан в (39) с учетом перенормировок собственных энергий электронов ($\varepsilon \rightarrow \varepsilon_1$, $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_2$). В этом случае получим следующие уравнения для неизвестных операторов:

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{a}_{f\sigma}^+(\tau) = -U \Delta \tilde{S}(\tau) \tilde{a}_{f\sigma}^+(\tau), \quad (46)$$

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{a}_{l\sigma}^+(\tau) = U \Delta \tilde{S}(\tau) \tilde{a}_{l\sigma}^+(\tau), \quad (47)$$

где $\Delta \tilde{S}(\tau) = \exp(-H_0 \tau) \Delta S(\tau) \exp(H_0 \tau)$, $\Delta S(\tau)$ – оператор флуктуации спина в представлении Гейзенберга.

Уравнение движения для оператора $\Delta \tilde{S}(\tau)$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \Delta \tilde{S}(\tau) &= \frac{d}{d\tau} \exp(-H_0 \tau) \Delta S(\tau) \exp(H_0 \tau) = \\ &= [H_0, \Delta \tilde{S}(\tau)] + \exp(-H_0 \tau) \frac{d\Delta S(\tau)}{d\tau} \exp(H_0 \tau) \\ &= \sum_l B_{fl} (\tilde{a}_{l\bar{\sigma}}^+ \tilde{a}_{f\sigma} - \tilde{a}_{f\bar{\sigma}}^+ \tilde{a}_{l\sigma}) - \sum_l B_{fl} (\tilde{a}_{l\bar{\sigma}}^+ \tilde{a}_{f\sigma} - \tilde{a}_{f\bar{\sigma}}^+ \tilde{a}_{l\sigma}) = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, оператор $\Delta \tilde{S}(\tau)$ является интегралом движения: $\Delta \tilde{S}(\tau) = \Delta S(0)$. В этом смысле выбранное нами приближение при решении модели Хаббарда будем называть приближением статических флуктуаций [10].

Используя свойство оператора $\Delta S = \Delta S(0)$:

$$\Delta S^2 = \Phi^2 - 2S\Delta S, \quad \Phi^2 = 1/4 - S^2, \quad (48)$$

мы можем написать следующие уравнения движения:

$$\frac{d}{d\tau} \Delta S \tilde{a}_{f\sigma}^+(\tau) = 2SU \Delta S(0) \tilde{a}_{f\sigma}^+(\tau) - U \Phi^2 \tilde{a}_{f\sigma}^+(\tau), \quad (49)$$

$$\frac{d}{d\tau} \Delta S(0) \tilde{a}_{l\sigma}^+(\tau) = -2SU \Delta S(0) \tilde{a}_{l\sigma}^+(\tau) + U \Phi^2 \tilde{a}_{l\sigma}^+(\tau). \quad (50)$$

Решения системы дифференциальных уравнений (46), (49) равны:

$$\tilde{a}_{f\sigma}^+(\tau) = \exp(US\tau) \{ a_{f\sigma}^+(0) [\text{ch}(U\tau/2) - 2S \text{sh}(U\tau/2)] - 2\Delta S a_{f\sigma}^+(0) \text{sh}(U\tau/2) \}, \quad (51)$$

$$\Delta S \tilde{a}_{f\sigma}^+(\tau) = \exp(US\tau) \{ \Delta S a_{f\sigma}^+(0) [\text{ch}(U\tau/2) + 2S \text{sh}(U\tau/2)] - 2\Phi^2 a_{f\sigma}^+(0) \text{sh}(U\tau/2) \}. \quad (52)$$

Система уравнений (47), (50) имеет решения:

$$\tilde{a}_{l\sigma}^+(\tau) = \exp(-US\tau) \left\{ a_{l\sigma}^+(0) [\operatorname{ch}(U\tau/2) + 2S \operatorname{sh}(U\tau/2)] + 2\Delta S a_{l\sigma}^+(0) \operatorname{sh}(U\tau/2) \right\}, \quad (53)$$

$$\Delta S \tilde{a}_{l\sigma}^+(\tau) = \exp(-US\tau) \left\{ \Delta S a_{l\sigma}^+(0) [\operatorname{ch}(U\tau/2) - 2S \operatorname{sh}(U\tau/2)] + 2\Phi^2 a_{l\sigma}^+(0) \operatorname{sh}(U\tau/2) \right\}. \quad (54)$$

Тогда общее решение (45) будет равно:

$$a_{f\sigma}^+(\tau) = \exp(H_0\tau) \tilde{a}_{f\sigma}^+(\tau) \exp(-H_0\tau) = \exp(US\tau) \left\{ \tilde{a}_{f\sigma}^+(\tau) [\operatorname{ch}(U\tau/2) - 2S \operatorname{sh}(U\tau/2)] - 2\Delta S(\tau) \tilde{a}_{f\sigma}^+(\tau) \operatorname{sh}(U\tau/2) \right\}, \quad (55)$$

$$a_{l\sigma}^+(\tau) = \exp(-US\tau) \left\{ \tilde{a}_{l\sigma}^+(\tau) [\operatorname{ch}(U\tau/2) + 2S \operatorname{sh}(U\tau/2)] + 2\Delta S(\tau) \tilde{a}_{l\sigma}^+(\tau) \operatorname{sh}(U\tau/2) \right\}, \quad (56)$$

где $\Delta S(\tau)$ – оператор в гейзенберговском представлении (при этом мы воспользовались приближением $\Delta \tilde{S}(\tau) = \Delta S(0)$) и введены операторы:

$$\bar{a}_{j\sigma}^+(\tau) = \exp(H_0\tau) a_{j\sigma}^+(0) \exp(-H_0\tau), \quad (j = f, l). \quad (57)$$

Уравнения движения для последних, введенных нами, операторов, как следует из (43), (44), имеют вид:

$$\frac{d}{d\tau} \bar{a}_{f\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_1 \bar{a}_{f\sigma}^+(\tau) + \sum_l B_{fl} \bar{a}_{l\sigma}^+(\tau), \quad (58)$$

$$\frac{d}{d\tau} \bar{a}_{l\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_2 \bar{a}_{l\sigma}^+(\tau) + \sum_f B_{fl} \bar{a}_{f\sigma}^+(\tau). \quad (59)$$

После преобразования Фурье [22]:

$$a_{f\sigma}^+ = (2/N)^{1/2} \sum_k a_{k\sigma}^+ \exp(-ikr_f), \quad (60)$$

$$a_{l\sigma}^+ = (2/N)^{1/2} \sum_k b_{k\sigma}^+ \exp(-ikr_l), \quad (61)$$

получим следующую систему уравнений

$$\frac{d}{d\tau} \bar{a}_{k\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_1 \bar{a}_{k\sigma}^+(\tau) + B_k \bar{b}_{k\sigma}^+(\tau), \quad (62)$$

$$\frac{d}{d\tau} \bar{b}_{k\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_2 \bar{b}_{k\sigma}^+(\tau) + B_k \bar{a}_{k\sigma}^+(\tau), \quad (63)$$

где $B_k = -2B(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$, a – параметр решетки. Решения уравнений (62), (63) равны:

$$\bar{a}_{k\sigma}^+(\tau) = \exp((\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\tau/2) \left\{ a_{k\sigma}^+(0) \left[\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2t_k} \operatorname{sh}(t_k\tau) + \operatorname{ch}(t_k\tau) \right] + \frac{B_k}{t_k} b_{k\sigma}^+(0) \operatorname{sh}(t_k\tau) \right\}, \quad (64)$$

$$\bar{b}_{k\sigma}^+(\tau) = \exp((\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\tau/2) \left\{ b_{k\sigma}^+(0) \left[-\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2t_k} \operatorname{sh}(t_k\tau) + \operatorname{ch}(t_k\tau) \right] + \frac{B_k}{t_k} a_{k\sigma}^+(0) \operatorname{sh}(t_k\tau) \right\}, \quad (65)$$

где

$$t_k = (((\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/2)^2 + B_k^2)^{1/2}, \quad \bar{a}_{k\sigma}^+(0) = a_{k\sigma}^+(0), \quad \bar{b}_{k\sigma}^+(0) = b_{k\sigma}^+(0).$$

Решения (58), (59) после преобразования Фурье (63), (64) будут иметь вид:

$$a_{k\sigma}^+(\tau) = \left[a_{k\sigma}^+(0) \left[\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2t_k} \operatorname{sh}(t_k\tau) + \operatorname{ch}(t_k\tau) \right] + \frac{B_k}{t_k} b_{k\sigma}^+(0) \operatorname{sh}(t_k\tau) \right] \cdot \quad (66)$$

$$\cdot \left[\operatorname{ch}(U\tau/2) - 2(S + \Delta S(\tau)) \operatorname{sh}(U\tau/2) \right] \exp((\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\tau/2) \exp(US\tau)$$

$$b_{k\sigma}^+(\tau) = \left[b_{k\sigma}^+(0) \left[-\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2t_k} \operatorname{sh}(t_k\tau) + \operatorname{ch}(t_k\tau) \right] + \frac{B_k}{t_k} a_{k\sigma}^+(0) \operatorname{sh}(t_k\tau) \right] \cdot \quad (67)$$

$$\cdot \left[\operatorname{ch}(U\tau/2) + 2(S + \Delta S(\tau)) \operatorname{sh}(U\tau/2) \right] \exp((\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\tau/2) \exp(-US\tau)$$

В (66), (67) заключена вся информация о физических свойствах модели Хаббарда в рамках выбранного приближения. Нас в первую очередь интересует энергетический спектр системы. С этой целью вычислим антикоммуторную функцию Грина. Как следует из (66), (67) фурье-образы антикоммуторных функций Грина равны:

$$\langle\langle a_{k\sigma}^+ | a_{k\sigma} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - S \right) \left(1 - \frac{SU}{t_k} \right)}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - U \left(\frac{1}{2} + S \right) - t_k} + \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + S \right) \left(1 - \frac{SU}{t_k} \right)}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + U \left(\frac{1}{2} - S \right) - t_k} + \right. \\ \left. + \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - S \right) \left(1 + \frac{SU}{t_k} \right)}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - U \left(\frac{1}{2} + S \right) + t_k} + \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + S \right) \left(1 + \frac{SU}{t_k} \right)}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + U \left(\frac{1}{2} - S \right) + t_k} \right\}, \quad (68)$$

$$\langle\langle b_{k\sigma}^+ | b_{k\sigma} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + S \right) \left(1 + \frac{SU}{t_k} \right)}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - U \left(\frac{1}{2} - S \right) - t_k} + \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - S \right) \left(1 + \frac{SU}{t_k} \right)}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + U \left(\frac{1}{2} + S \right) - t_k} + \right. \\ \left. + \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + S \right) \left(1 - \frac{SU}{t_k} \right)}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - U \left(\frac{1}{2} - S \right) + t_k} + \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - S \right) \left(1 - \frac{SU}{t_k} \right)}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + U \left(\frac{1}{2} + S \right) + t_k} \right\}, \quad (69)$$

где $\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} = \varepsilon + \frac{U}{2} + 4V$. Отметим, что

$$\langle\langle a_{k\sigma}^+ | a_{k\sigma} \rangle\rangle_E = \langle\langle b_{k\bar{\sigma}}^+ | b_{k\bar{\sigma}} \rangle\rangle_E, \\ \langle\langle a_{k\bar{\sigma}}^+ | a_{k\bar{\sigma}} \rangle\rangle_E = \langle\langle b_{k\sigma}^+ | b_{k\sigma} \rangle\rangle_E.$$

С помощью флуктуационно-диссипационной теоремы [17] можно получить, что

$$\langle a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \rangle = \langle b_{k\bar{\sigma}}^+ b_{k\bar{\sigma}} \rangle = \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{1}{2} - S \right) \left[\left(1 - \frac{SU}{t_k} \right) f^+ \left(\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + U \left(\frac{1}{2} + S \right) + t_k \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \left(1 + \frac{SU}{t_k} \right) f^+ \left(\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + U \left(\frac{1}{2} + S \right) - t_k \right) \right] + \left(\frac{1}{2} + S \right) \left[\left(1 - \frac{SU}{t_k} \right) \cdot \right. \right. \\ \left. \left. \cdot f^+ \left(\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - U \left(\frac{1}{2} - S \right) + t_k \right) + \left(1 + \frac{SU}{t_k} \right) f^+ \left(\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - U \left(\frac{1}{2} - S \right) - t_k \right) \right] \right\} \quad (70)$$

$$\langle a_{k\bar{\sigma}}^+ a_{k\bar{\sigma}} \rangle = \langle b_{k\sigma}^+ b_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{1}{2} + S \right) \left[\left(1 + \frac{SU}{t_k} \right) f^+ \left(\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + U \left(\frac{1}{2} - S \right) + t_k \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \left(1 - \frac{SU}{t_k} \right) f^+ \left(\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + U \left(\frac{1}{2} - S \right) - t_k \right) \right] + \left(\frac{1}{2} - S \right) \left[\left(1 + \frac{SU}{t_k} \right) \cdot \right. \right. \\ \left. \left. \cdot f^+ \left(\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + U \left(\frac{1}{2} - S \right) + t_k \right) + \left(1 - \frac{SU}{t_k} \right) f^+ \left(\frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + U \left(\frac{1}{2} - S \right) - t_k \right) \right] \right\}. \quad (71)$$

Из равенств (70), (71) можно получить уравнение на химпотенциал:

$$n = \frac{2}{N} \sum_{k,\sigma} \langle a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \rangle,$$

из которого следует, что при точно наполовину заполненной зоне ($n = 1$) собственная энергия ε (химпотенциал $\mu = -\varepsilon$) равна:

$$\varepsilon = -(U + 8V)/2. \quad (72)$$

Энергетический спектр модели Хаббарда в случае точного полузаполнения имеет вид:

$$E_{1-4} = \pm U \left(\frac{1}{2} + S \right) \pm t_k, \\ E_{5-8} = \pm U \left(\frac{1}{2} - S \right) \pm t_k. \quad (73)$$

Отметим, что спектр (73) инвариантен относительно замен как $S \rightarrow -S$, так и $B \rightarrow -B$. Спектр элементарных возбуждений в случае $S = 0.45$ показан на рис. 1. При выбранных значениях параметров модели Хаббарда в этом случае образуются три подзоны, средняя подзона состоит из шести перекрывающихся ветвей. Ветви энергетических возбуждений заполняются электронами с разными вероятностями. На рис. 2 показаны вероятности заполнения двух нижних ветвей, из рисунка следует, что «емкости» энергетических уровней нижней ветви практически не отличается от нуля. При стремлении $S \rightarrow 1/2$, как будет показано ниже, из восьми ветвей останутся только две ветви.

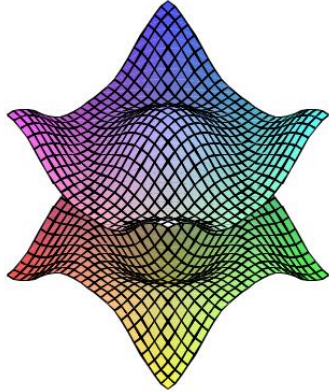


Рис. 1. Энергетический спектр двумерной модели Хаббарда при следующих значениях параметров $S = 0.45$, $U = 6eV$, $V = 1.5$, $n = 1$. Спектр состоит из восьми ветвей

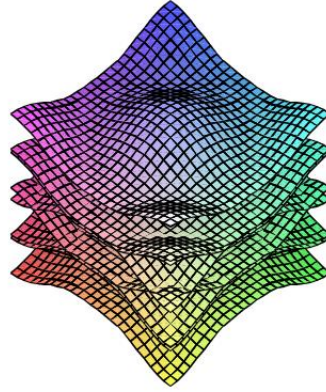


Рис. 2. Вероятности заполнения двух нижних ветвей энергетического спектра, изображенного на рис. 1 при тех же значениях параметров, что и на рис. 1. Нижний график соответствует заполнению нижней ветви, верхний график – второй снизу ветви энергетического спектра

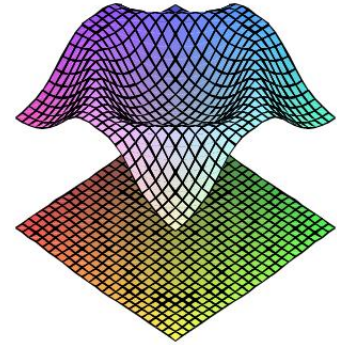


Рис. 3. Энергетический спектр двумерной модели Хаббарда в пределе сильных корреляций ($S = 1/2$, $n = 1$)

В случае сильного взаимодействия ранее было получено [11], что $S = 1/2$. В этом случае фурье-образы антикоммутирующих функций Грина (68), (69) будут определяться следующим образом:

$$\langle\langle a_{k\sigma}^+ | a_{k\sigma} \rangle\rangle_E = \langle\langle b_{k\bar{\sigma}}^+ | b_{k\bar{\sigma}} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2} \left\{ \frac{1-U/2t_k}{E-t_k} + \frac{1+U/2t_k}{E+t_k} \right\}, \quad (74)$$

$$\langle\langle a_{k\bar{\sigma}}^+ | a_{k\bar{\sigma}} \rangle\rangle_E = \langle\langle b_{k\sigma}^+ | b_{k\sigma} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2} \left\{ \frac{1+U/2t_k}{E-t_k} + \frac{1-U/2t_k}{E+t_k} \right\}. \quad (75)$$

Полуса функций Грина (74), (75) определяют энергетический спектр системы:

$$E_{1-2} = \pm \sqrt{(U/2)^2 + 4V^2 (\cos(k_x a) + \cos(k_y a))^2}. \quad (76)$$

Вид спектра (76) характерен для антиферромагнитного основного состояния модели Хаббарда [23]. Спектр (76) приведен на рис. 3. При $n = 1$ основное состояние модели Хаббарда в режиме сильных корреляций является антиферромагнитным и диэлектрическим. Отметим, что ширина подзон Хаббарда уменьшается из-за эффекта сильных корреляций по сравнению со случаем предела слабых корреляций, когда $S = 0$.

4. Обсуждение результатов

Приведенная в работе методика расчета функций Грина и корреляционных функций позволяет вычислить энергетический спектр модели Хаббарда. Точное решение в случае модели Хаббарда, содержащего два узла кристаллической решетки, показало, что основное состояние этой системы характеризуется следующими равенствами для термодинамических средних:

$$\begin{aligned} \langle n_{i\sigma} \rangle &= \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle = \langle n_{i\sigma} n_{j\bar{\sigma}} \rangle = \langle a_{j\sigma}^+ a_{j\bar{\sigma}} a_{i\bar{\sigma}}^+ a_{i\sigma} \rangle = 1/2, \\ \langle n_{i\sigma} n_{j\sigma} \rangle &= \langle n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} \rangle = 0. \end{aligned} \quad (77)$$

Решение этой же задачи в приближении статических флуктуаций показало, что антикоммутирующая функция Грина, энергетический спектр, корреляционные функции полностью совпадают с точными результатами, поэтому это приближение было применено для расчета характеристик двумерной модели Хаббарда. Получено, что в режиме сильных корреляций в системе при точно наполовину заполненной зоне основным состоянием является антиферромагнитное состояние. В рамках данной статьи мы не затрагивали такие темы, как природа основного состояния при $n \neq 1$, разрушение дальнего порядка при допировании, типы элементарных возбуждений, которые возникают в слу-

чае $n \neq 1$. По-видимому, развитая в настоящей работе методика расчета функций Грина и корреляционных позволяет исследовать и эти проблемы. Мы же отметим следующее. Из уравнения (46), после преобразования Фурье (63), (64) можно получить точное уравнение для антикоммутирующих функций Грина:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \langle [a_{k\sigma}^+(\tau), a_{k\sigma}]_+ \rangle = \\ = \varepsilon_1 \langle [a_{k\sigma}^+(\tau), a_{k\sigma}]_+ \rangle + B_k \langle [b_{k\sigma}^+(\tau), a_{k\sigma}]_+ \rangle - U \langle [\Delta S(\tau) a_{k\sigma}^+(\tau), a_{k\sigma}]_+ \rangle \end{aligned} \quad (78)$$

Аналогичное уравнение можно получить и из дифференциального уравнения (44). Антикоммутирующие функции Грина в (78), зависящие от «времени» τ , можно вычислить с помощью решений (66) и (67), в случае точного полузаполнения зоны ($n = 1$) получим:

$$\langle [a_{k\sigma}^+(\tau), a_{k\sigma}]_+ \rangle = \left[\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2t_k} \text{sh}(t_k \tau) + \text{ch}(t_k \tau) \right] [\text{ch}(U\tau/2) - 2S \text{sh}(U\tau/2)] \exp(US\tau) \exp((\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\tau/2) \quad (79)$$

$$\langle [\Delta S(\tau) a_{k\sigma}^+(\tau), a_{k\sigma}]_+ \rangle = -\Phi^2 \left[\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2t_k} \text{sh}(t_k \tau) + \text{ch}(t_k \tau) \right] 2 \text{sh}(U\tau/2) \exp(US\tau) \exp((\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\tau/2) \quad (80)$$

$$\langle [b_{k\sigma}^+(\tau), a_{k\sigma}]_+ \rangle = \frac{B_k}{t_k} \text{sh}(t_k \tau) [\text{ch}(U\tau/2) + 2S \text{sh}(U\tau/2)] \exp(-US\tau) \exp((\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\tau/2) . \quad (81)$$

Подставляя получившиеся выражения для функций Грина (79)–(81) в дифференциальное уравнение (78), можно показать, что как при $S = 0$, так и при $S = 1/2$ антикоммутирующие функции Грина (79)–(81) удовлетворяют уравнению движения (78). Таким образом, в случае точного полузаполнения зоны как при $S = 0$, так и при $S = 1/2$, функции Грина (79)–(81), по-видимому, вычислены вполне корректно. Это же самое касается и других уравнений движения. Полученные результаты позволяют надеяться, что излагаемый в работе метод спиновых флуктуаций наиболее эффективно работает вблизи $S = 0$ и $S = 1/2$.

Автор выражает благодарность Р.Р. Нигматуллину за обсуждение результатов работы.

Литература

- Hubbard J. // Proc. Roy. Soc. - 1963. - V. 276. - N. 1365. - P. 238.
- Emery V.J. // Phys. Rev. Lett. - 1987. - V. 58. - N. 26. - P. 2794.
- Изюмов Ю.А., Кацнельсон М.И., Скрябин Ю.Н. Магнетизм коллективизированных электронов.- М., Физматлит, 1994. - 366 с.
- Изюмов Ю.А., Скрябин Ю.Н. Базовые модели в квантовой теории магнетизма. - Екатеринбург, 2002. - 259 с.
- Овчинников С.Г. // УФН. - 1997.- Т. 167.- № 10. - С. 1043.
- Изюмов Ю.А. // УФН.- 1995. - Т. 165.- № 4. - С. 403.
- Изюмов Ю.А. // УФН.- 1997.- Т. 167.- № 5. - С. 465.
- Anderson P.W. // Science.- 1987. - V. 253. N. 6. - P. 1196.
- Shengelaya F., Keller H., Müller K.A., Kochelaev B.I, Conder K. // Phys. Rev. B. - 2001. - V.63. - P. 144513.
- Лоскутов В.В., Миронов Г.И., Нигматуллин Р.Р. // ФНТ. - 1997. - Т.22.- № 3. - С. 282.
- Миронов Г.И. // ФТТ. - 1999. - Т.41. - № 6. - С. 951.
- Миронов Г.И. // ФТТ. - 2002. - Т.44. -№ 2. - С. 209.
- Lieb E., Wu F.Y. // Phys. Rev. Lett. - 1968. - V.20. - N. 25. - P.1445.
- Takahashi M. // Progr. Theor. Phys. - 1972. - V.47. - N. 1. - P.69.
- Bethe H.// Zs. Phys. - 1931. - V. B71. - N. 3. - P. 205.
- Миронов Г.И. // Структура и динамика молекулярных систем. Сборник статей. Казань, 2003, С. 323.
- Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма. -М.:Наука, 1975. – 528 с.
- Хомский Д.И. // ФММ. - 1970. - Т. 29. - № 1. - С. 31.
- Mattis D.C. The theory of magnetism. - New York: Harper and Row, 1965. (Пер. с англ. под ред. И.М. Лифшица и М.И. Каганова: Маттис Д. Теория магнетизма. - М.: Мир. - 407 с.)
- Ашкрофт Н.А., Мермин Н. Физика твердого тела. Т. 2. - М.: Мир, 1979 - 422 с.
- Свирский М.С., Свирская Л.М.// ЖЭТФ. - 1990. - Т.97. -№ 2.- С.489.
- Мория Т. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами.- М.: Мир, 1988. - 287 с.
- Малышев С.Л., Попов В.Н. // ТМФ. - 1995. - Т. 105.- № 1. - С. 149.