$B-B'-U$ модель Хаббарда в приближении статических флуктуаций

© Г.И. Миронов

Марийский государственный педагогический институт,
424002 Йошкар-Ола, Россия

(Поступила в Редакцию 20 июля 1998 г.)

В рамках приближения статических флуктуаций исследуется влияние учета переноса электронов от узла ко второму ближайшему соседнему узлу на энергетический спектр двухподрешеточной двухмерной модели Хаббарда и на зависимость намагниченности от параметров системы.

Для объяснения некоторых свойств высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) как в сверхпроводящем, так и в нормальном состояниях возникает необходимость учета, кроме медно-кислородных интегралов перескока, еще и интегралов перескока между ближайшими кислородными атомами [1–4]. Из качественных рассуждений понятно, что учет кислород-кислородного переноса дырок должен повлиять на вид энергетического спектра, что, в свою очередь, приведет к изменению других характеристик системы. Поэтому весьма актуальной задачей является вычисление энергетического спектра системы с учетом возможности переноса электронов (либо дырок) на следующий за ближайшим соседний узел.

Цель настоящей работы — исследование зависимости энергетического спектра и намагниченности системы от величины интеграла переноса электронов на второй по близости соседний узел в случае двухмерной бипартитной модели Хаббарда [5,6].

В [7,8] была разработана методика решения модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. По сравнению с [8] в гамильтониан Хаббарда [9] включим член, описывающий перескоки электронов подрешетки C на ближайшие узлы этой же подрешетки

$$H = H_0 + V, \tag{1}$$

$$H_0 = \sum_{\sigma,f\in A} \varepsilon_1 n_{f\sigma} + \sum_{\sigma,l\in C} \varepsilon_2 n_{l\sigma} + \sum_{\sigma,f,l} B_{fl}(a^+_{f\sigma}a_{l\sigma} + a^+_{l\sigma}a_{f\sigma}) + \sum_{\sigma,l',l} B_{l'l}a^+_{l'\sigma}a_{l\sigma}, \tag{2}$$

$$V = \frac{U_1}{2}\sum_{\sigma,f\in A} n_{f\sigma}n_{f\bar\sigma} + \frac{U_2}{2}\sum_{\sigma,l\in C} n_{l\sigma}n_{l\bar\sigma}, \tag{3}$$

где $a^+_{j\sigma}$, $a_{j\sigma}$ — ферми–операторы рождения и уничтожения электронов на узле j $(j = f, l)$ решетки со спином σ; $n_{f\sigma} = a^+_{f\sigma}a_{f\sigma}$; $\varepsilon_1(\varepsilon_2)$ — собственная энергия электрона на узле подрешетки $A(C)$; $B_{fl} = B(f-l)$, $B_{l'l} = B(l'-l)$ — интегралы переноса, описывающие перескоки электронов за счет кинетической энергии и кристаллического поля на ближайший соседний узел и на второй ближайший соседний узел по диагонали квадрата соответственно; $\bar\sigma = -\sigma$. Для того чтобы приблизить поведение системы, описываемой гамильтонианом (1), к ситуации, возникающей при движении дырок на CuO_2-плоскостях в ВТСП соединениях, полагается, что лишь электроны одной подрешетки (по аналогии с кислородом на CuO_2-плоскостях) могут переноситься по диагонали квадрата на узлы этой же подрешетки (подчеркнем, что в статье для простоты рассуждений рассматривается гипотетическая квадратная решетка).

Уравнения движения для операторов рождения электронов в представлении Гейзенберга $(j = f, l)$

$$a^+_{j\sigma}(\tau) = \exp(H\tau)a^+_{j\sigma}(0)\exp(-H\tau), \quad (\tau = it)$$

имеют вид

$$\frac{d}{d\tau}a^+_{j\sigma}(\tau) = \varepsilon_j a^+_{j\sigma}(\tau) + \sum_i B_{ij}a^+_{i\sigma}(\tau) + \sum_{j'} B_{jj'}a^+_{j'\sigma}(\tau) + U_j n_{j\bar\sigma}a^+_{j\sigma}(\tau), \tag{4}$$

где

$$\varepsilon_j = \begin{cases}\varepsilon_1, & j = f\\ \varepsilon_2, & j = l\end{cases}, \quad U_j = \begin{cases}U_1, & j = f\\ U_2, & j = l\end{cases},$$

$$B_{jj'} = \begin{cases}0, & j = f,\ j' = f'\\ B_{ll'}, & j = l,\ j' = l'\end{cases}, \quad B_{ij} = B_{fl} = B_{lf}.$$

Операторы $n_{j\bar\sigma}$ в (4) представим следующим образом [7,8]:

$$n_{j\bar\sigma} = \langle n_{j\bar\sigma}\rangle + \Delta n_{j\bar\sigma}. \tag{5}$$

Термодинамические средние $\langle n_{j\bar\sigma}\rangle = \mathrm{Sp}\{n_{j\bar\sigma}\exp(-\beta H)\}$ предлагаются независящими от номера узла j в каждой из подрешеток, $\Delta n_{j\bar\sigma} = \Delta n_{j\bar\sigma}(\tau)$ — оператор флуктуации числа частиц в представлении Гейзенберга.

Корреляционные функции $\langle n_{j\bar\sigma}\rangle$ выразим через среднее значение проекции спина узла $S = \langle S^z_f\rangle = -\langle S^z_{f+\Delta}\rangle$, где вектор Δ соединяет соседние атомы, и концентрацию n (нас интересует случай $n = 1$) следующим образом [8]:

$$\langle n_{f\bar\sigma}\rangle = \langle n_{l\sigma}\rangle = 1/2 + S, \tag{6}$$

$$\langle n_{f\sigma}\rangle = \langle n_{l\bar\sigma}\rangle = 1/2 - S. \tag{7}$$

С учетом (5)–(7) дифференциальное уравнение (4) перепишем в виде

$$\frac{d}{d\tau}a^+_{j\sigma}(\tau) = \varepsilon'_j a^+_{j\sigma}(\tau) + \sum_i B_{ij} a^+_{i\sigma}(\tau) + \sum_{j'} B_{jj'} a^+_{j'\sigma}(\tau) + U_j \Delta n_{j\bar\sigma} a^+_{j\sigma}(\tau), \quad (8)$$

где $\varepsilon'_1 = \varepsilon_1 + U_1/2 + SU_1$, $\varepsilon'_2 = \varepsilon_2 + U_2/2 - SU_2$.

Гейзенберговские операторы представим следующим образом [8,10,11]:

$$a^+_{j\sigma}(\tau) = \exp(H_0\tau)\tilde a^+_{j\sigma}(\tau)\exp(-H_0\tau), \quad (9)$$

где H_0 — гамильтониан, входящий в (1), с учетом перенормировок собственных энергий электронов (замен $\varepsilon_1 \to \varepsilon'_1$, $\varepsilon_2 \to \varepsilon'_2$). Оператор $\tilde a^+_{j\sigma}(\tau)$ определяется следующим образом:

$$\tilde a^+_{j\sigma}(\tau) = \exp(-H_0\tau)\exp(H\tau)a^+_{j\sigma}(0)\exp(H\tau)\exp(H_0\tau).$$

В этом случае будем иметь два уравнения для неизвестных операторов ($j = f, l$)

$$\frac{d}{d\tau}\tilde a^+_{j\sigma}(\tau) = U_j \Delta\tilde n_{j\bar\sigma}(\tau)\tilde a^+_{j\sigma}(\tau), \quad (10)$$

где $\Delta\tilde n_{j\bar\sigma}(\tau) = \exp(-H_0\tau)\Delta n_{j\bar\sigma}(\tau)\exp(H_0\tau)$, $\Delta n_{j\bar\sigma}(\tau)$ — оператор флуктуации числа частиц в представлении Гейзенберга. Уравнение движения для оператора $\Delta\tilde n_{j\bar\sigma}(\tau)$ имеет вид

$$\frac{d}{d\tau}\Delta\tilde n_{j\bar\sigma} = 0.$$

Таким образом, $\Delta\tilde n_{j\bar\sigma}(\tau)$ является интегралом движения: $\Delta\tilde n_{j\bar\sigma}(\tau) = \Delta n_{j\bar\sigma}(0)$.

Для того чтобы получить замкнутую систему дифференциальных уравнений, умножим уравнение (10) на оператор флуктуации $\Delta n_{j\bar\sigma} = \Delta n_{j\bar\sigma}(0)$ и ограничимся приближением (см. Приложение 1)

$$\Delta n^2_{j\bar\sigma} = \langle \Delta n^2_{j\bar\sigma}\rangle, \quad (j = f, l).$$

В этом случае получим следующие уравнения движения:

$$\frac{d}{d\tau}\Delta n_{j\bar\sigma}\tilde a^+_{j\sigma}(\tau) = U_j \langle\Delta n^2_{j\bar\sigma}\rangle \tilde a^+_{j\sigma}(\tau). \quad (11)$$

С учетом (5)–(7) и свойства $n^2_{j\bar\sigma} = n_{j\bar\sigma}$ можно получить, что

$$\Phi^2 = \langle\Delta n^2_{f\bar\sigma}\rangle = \langle\Delta n^2_{l\bar\sigma}\rangle = 1/4 - S^2. \quad (12)$$

Решение системы уравнений (10), (11) имеют вид ($\tilde a^+_{j\sigma}(0) = a^+_{j\sigma}(0)$)

$$\tilde a^+_{j\sigma}(\tau) = a^+_{j\sigma}(0)\,\mathrm{ch}(U_j\Phi\tau) + \Delta n_{j\bar\sigma} a_{j\sigma}(0)\,\mathrm{sh}(U_j\Phi\tau)/\Phi, \quad (13)$$

$$\Delta n_{j\bar\sigma}\tilde a^+_{j\sigma}(\tau) = \Delta n_{j\bar\sigma} a^+_{j\sigma}(0)\,\mathrm{ch}(U_j\Phi\tau) + \Phi a^+_{j\sigma}(0)\,\mathrm{sh}(U_j\Phi\tau), \quad (14)$$

где $\mathrm{sh}(x)$, $\mathrm{ch}(x)$ — гиперболические функции.

Тогда общее решение (9) имеет вид

$$a^+_{j\sigma}(\tau) = \exp(H_0\tau)a^+_{j\sigma}(0)\exp(-H_{0\tau})\,\mathrm{ch}(U_j\Phi\tau) + \Delta n_{j\bar\sigma}\exp(H_0\tau)a^+_{j\sigma}(0)\exp(-H_0\tau)\,\mathrm{sh}(U_j\Phi\tau)/\Phi. \quad (15)$$

Вычислим оператор $\bar a^+_{f\sigma}(\tau) = \exp(H_0\tau)a^+_{f\sigma}(0)\exp(-H_0\tau)$, входящий в решение (15). Оператор $\bar a^+_{f\sigma}(\tau)$ подчиняется следующему уравнению:

$$\frac{d}{d\tau}\bar a^+_{f\sigma}(\tau) = \varepsilon'_1 \bar a^+_{f\sigma}(\tau) + \sum_l B_{fl}\bar a^+_{l\sigma}(\tau). \quad (16)$$

Аналогичным образом для оператора $\bar a^+_{l\sigma}(\tau)$ другой подсистемы можно получить следующее уравнение движения:

$$\frac{d}{d\tau}\bar a^+_{l\sigma}(\tau) = \varepsilon'_2 \bar a^+_{l\sigma}(\tau) + \sum_f B_{fl}\bar a^+_{f\sigma}(\tau) + \sum_{l'} B'_{ll'}\bar a^+_{l'\sigma}(\tau). \quad (17)$$

После преобразования Фурье [12]

$$a^+_{f\sigma} = \sqrt{2/N}\sum_k a^+_{k\sigma}\exp(-ikr_f),$$

$$a^+_{l\sigma} = \sqrt{2/N}\sum_k b^+_{k\sigma}\exp(-ikr_l),$$

из уравнений (16), (17) получим

$$\frac{d}{d\tau}\bar a^+_{k\sigma}(\tau) = \varepsilon'_1 \bar a^+_{k\sigma}(\tau) + B_k \bar b^+_{k\sigma}(\tau), \quad (18)$$

$$\frac{d}{d\tau}\bar b^+_{k\sigma}(\tau) = \varepsilon'_{2k}\bar b^+_{k\sigma}(\tau) + B_k \bar a^+_{k\sigma}(\tau), \quad (19)$$

где ε'_{2k}, B_k определяются следующим образом ($d = 2$):

$$\varepsilon'_{2k} = \varepsilon'_2 + B'_k, \quad B'_k = -4B'\cos(k_x a)\cos(k_y a),$$

$$B_k = -2B\left[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)\right].$$

Уравнения (18), (19) имеют решения ($\bar a^+_{k\sigma}(0) = a^+_{k\sigma}(0)$, $\bar b^+_{k\sigma}(0) = b^+_{k\sigma}(0)$)

$$\bar a^+_{k\sigma}(\tau) = a^+_{k\sigma}(0)\left[\left((\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k\right)\mathrm{sh}(t_k\tau) + \mathrm{ch}(t_k\tau)\right] \times \exp\left(\tau(\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2\right) + b^+_{k\sigma}(0)\,\mathrm{sh}(t_k\tau) \times \exp\left(\tau(\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2\right)B_k/t_k, \quad (20)$$

$$\bar b^+_{k\sigma}(\tau) = b^+_{k\sigma}(0)\left[\left((\varepsilon'_{2k} - \varepsilon'_1)/2t_k\right)\mathrm{sh}(t_k\tau) + \mathrm{ch}(t_k\tau)\right] \times \exp\left(\tau(\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2\right) + a^+_{k\sigma}(0)\,\mathrm{sh}(t_k\tau) \times \exp\left(\tau(\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2\right)B_k/t_k, \quad (21)$$

где $t_k = \sqrt{\left((\varepsilon'_{2k} - \varepsilon'_1)/2\right)^2 + B_k^2}$.

После преобразования Фурье общее решение (15) с учетом (20) и (21) будет иметь вид

$$a^{+}_{k\sigma}(\tau)=\Big\{\Big[a^{+}_{k\sigma}(0)\big[\big((\varepsilon'_1-\varepsilon'_{2k})/2t_k\big)\operatorname{sh}(t_k\tau)+\operatorname{ch}(t_k\tau)\big]$$
$$+\,b^{+}_{k\sigma}(0)\operatorname{sh}(t_k\tau)B_k/t_k\Big]\operatorname{ch}(U_1\Phi\tau)$$
$$+\Big[\Delta n_{1\bar\sigma}a^{+}_{k\sigma}(0)\big[\big((\varepsilon'_1-\varepsilon'_{2k})/2t_k\big)\operatorname{sh}(t_k\tau)$$
$$+\operatorname{ch}(t_k\tau)\big]+\Delta n_{1\bar\sigma}b^{+}_{k\sigma}(0)\operatorname{sh}(t_k\tau)B_k/t_k\Big]$$
$$\times\operatorname{sh}(U_1\Phi\tau)/\Phi\Big\}\exp\big(\tau(\varepsilon'_1+\varepsilon'_{2k})/2\big),\qquad(22)$$

где $\Delta n_{1\bar\sigma}$ — оператор однородной флуктуации числа в подрешетке A [8]. Для электронов другой подрешетки

$$b^{+}_{k\sigma}(\tau)=\Big\{\Big[b^{+}_{k\sigma}(0)\big[\big((\varepsilon'_{2k}-\varepsilon'_1)/2t_k\big)\operatorname{sh}(t_k\tau)+\operatorname{ch}(t_k\tau)\big]$$
$$+\,a^{+}_{k\sigma}(0)\operatorname{sh}(t_k\tau)B_k/t_k\Big]\operatorname{ch}(U_2\Phi\tau)$$
$$+\Big[\Delta n_{2\bar\sigma}b^{+}_{k\sigma}(0)\big[\big((\varepsilon'_{2k}-\varepsilon'_1)/2t_k\big)\operatorname{sh}(t_k\tau)$$
$$+\operatorname{ch}(t_k\tau)\big]+\Delta n_{2\bar\sigma}a^{+}_{k\sigma}(0)\operatorname{sh}(t_k\tau)B_k/t_k\Big]$$
$$\times\operatorname{sh}(U_2\Phi\tau)/\Phi\Big\}\exp\big(\tau(\varepsilon'_1+\varepsilon'_{2k})/2\big).\qquad(23)$$

Оператор однородной флуктуации числа частиц в подрешетке C $\Delta n_{2\bar\sigma}$ определяется аналогично оператору $\Delta n_{1\bar\sigma}$ [8].

В (22) и (23) заключена вся информация о физических свойствах модели Хаббарда в рамках выбранного приближения. Нас в первую очередь интересует спектр элементарных возбуждений в системе. Как следует из (22) и (23), фурье-образы антикоммутаторных функций Грина равны соответственно

$$\langle a^{+}_{k\sigma}|a_{k\sigma}\rangle_E=\frac{i}{2\pi}\frac{1}{4}\Big\{\frac{1+(\varepsilon'_1-\varepsilon'_{2k})/2t_k}{E-U_1\Phi-t_k-(\varepsilon'_1+\varepsilon'_{2k})/2}$$
$$+\frac{1+(\varepsilon'_1-\varepsilon'_{2k})/2t_k}{E+U_1\Phi-t_k-(\varepsilon'_1+\varepsilon'_{2k})/2}$$
$$+\frac{1-(\varepsilon'_1-\varepsilon'_{2k})/2t_k}{E-U_1\Phi+t_k-(\varepsilon'_1+\varepsilon'_{2k})/2}$$
$$+\frac{1-(\varepsilon'_1-\varepsilon'_{2k})/2t_k}{E+U_1\Phi+t_k-(\varepsilon'_1+\varepsilon'_{2k})/2}\Big\},\qquad(24)$$

$$\langle b^{+}_{k\sigma}|b_{k\sigma}\rangle_E=\frac{i}{2\pi}\frac{1}{4}\Big\{\frac{1-(\varepsilon'_1-\varepsilon'_{2k})/2t_k}{E-U_2\Phi-t_k-(\varepsilon'_1+\varepsilon'_{2k})/2}$$
$$+\frac{1-(\varepsilon'_1-\varepsilon'_{2k})/2t_k}{E+U_2\Phi-t_k-(\varepsilon'_1+\varepsilon'_{2k})/2}$$
$$+\frac{1+(\varepsilon'_1-\varepsilon'_{2k})/2t_k}{E-U_2\Phi+t_k-(\varepsilon'_1+\varepsilon'_{2k})/2}$$
$$+\frac{1+(\varepsilon'_1-\varepsilon'_{2k})/2t_k}{E+U_2\Phi+t_k-(\varepsilon'_1+\varepsilon'_{2k})/2}\Big\},\qquad(25)$$

где

$$\varepsilon'_1+\varepsilon'_{2k}=\varepsilon_1+\varepsilon_2+(U_1+U_2)/2$$
$$+S(U_1-U_2)-4B'\cos(k_xa)\cos(k_ya),$$
$$\varepsilon'_1-\varepsilon'_{2k}=\varepsilon_1-\varepsilon_2+(U_1-U_2)/2$$
$$+S(U_1+U_2)+4B'\cos(k_xa)\cos(k_ya).$$

Полюса функций Грина (30), (31) определяют энергетический спектр

$$E_{1-4}=\big((\varepsilon'_1+\varepsilon'_{2k})/2\big)\pm U_1\Phi\pm t_k,\qquad(26)$$

$$E_{5-8}=\big((\varepsilon'_1+\varepsilon'_{2k})/2\big)\pm U_2\Phi\pm t_k.\qquad(27)$$

На рис. 1 приведен энергетический спектр модели Хаббарда при значении спина $S=0$ (парамагнетизм). На рис. 2 и 3 приведены для сравнения энергетические спектры с учетом и без учета переноса электронов от атомов одного сорта к атомам этого же сорта по диагонали квадрата. При данном значении B' учет перескока электронов от узла к узлу по диагонали квадрата приводит к сужению нижней подзоны; при этом существенным образом изменяется вид энергетической поверхности.

Энергетические спектры, приведенные на рисунках, позволяют естественным образом объяснить переход металл–диэлектрик при изменении концентрации электронов n, тогда как применение стандартного приближения Хартри–Фока не приводит к такому результа-

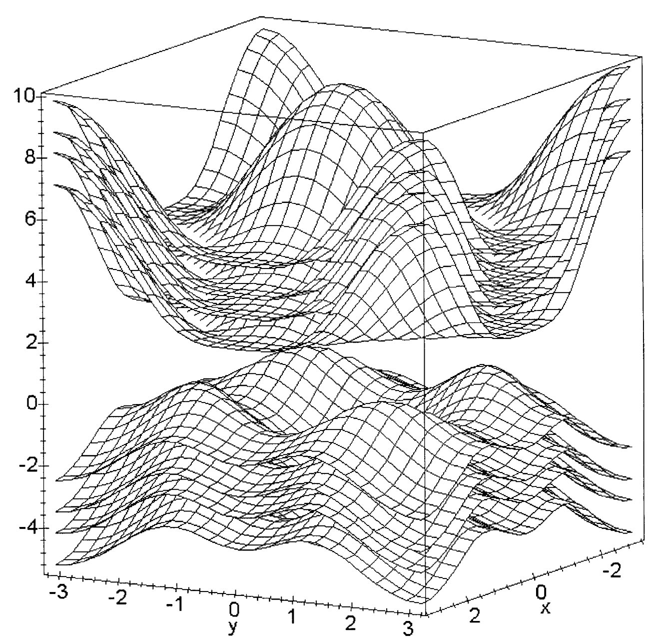

Рис. 1. Энергетический спектр модели Хаббарда при следующих значениях параметров: $\varepsilon_1=-4\,\mathrm{eV}$, $\varepsilon_2=-1\,\mathrm{eV}$, $U_1=8\,\mathrm{eV}$, $U_2=2\,\mathrm{eV}$, $B=1.5\,\mathrm{eV}$, $B'=-0.3B$, $S=0$.

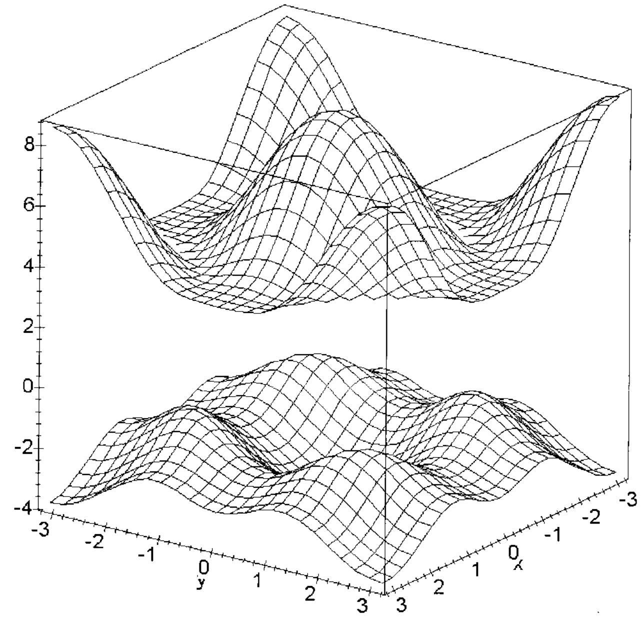

Рис. 2. То же, что на рис. 1, при: $\varepsilon_1 = -4\,\mathrm{eV}$, $\varepsilon_2 = -1\,\mathrm{eV}$, $U_1 = 8\,\mathrm{eV}$, $U_2 = 2\,\mathrm{eV}$, $B = 1.5\,\mathrm{eV}$, $B' = -0.3B$, $S = 1/2$.

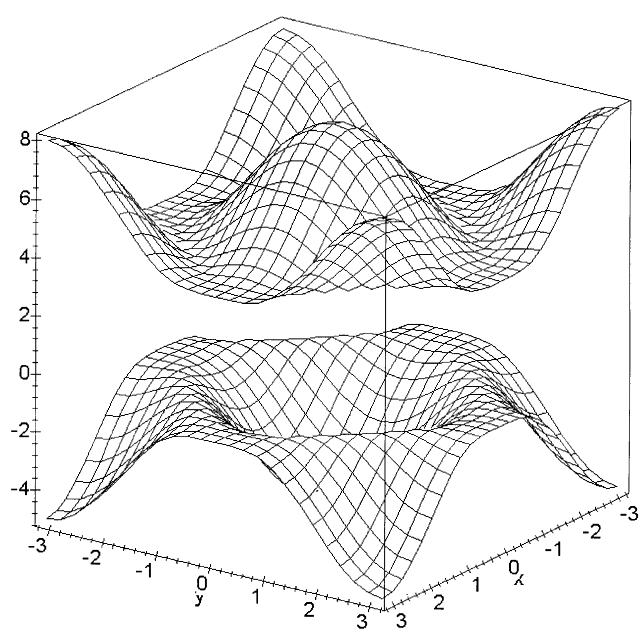

Рис. 3. То же, что на рис. 1, при: $\varepsilon_1 = -4\,\mathrm{eV}$, $\varepsilon_2 = -1\,\mathrm{eV}$, $U_1 = 8\,\mathrm{eV}$, $U_2 = 2\,\mathrm{eV}$, $B = 1.5\,\mathrm{eV}$, $B' = 0$, $S = 1/2$.

ту [13]: приходится прибегать к разного рода расцеплениям, например, типа "сплавной аналогии" [14,2]. Отметим при этом, что методика вычисления функций Грина и корреляционных функций построена таким образом, чтобы при переходе к атомному пределу получить точный результат (см. [7] и Приложение 2).

С помощью флуктуационно-диссипационной теоремы [15] из (24) можно получить, что

$$\begin{aligned}\langle a^+_{k\sigma} a_{k\sigma}\rangle = &\frac{1}{4}\left(1 + \frac{\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k}}{2t_k}\right)\left[f^+\left(U_1\Phi + t_k + \frac{\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k}}{2}\right)\right.\\ &\left.+ f^+\left(-U_1\Phi + t_k + \frac{\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k}}{2}\right)\right]\\ &+ \frac{1}{4}\left(1 - \frac{\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k}}{2t_k}\right)\left[f^+\left(U_1\Phi - t_k + \frac{\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k}}{2}\right)\right.\\ &\left.+ f^+\left(-U_1\Phi - t_k + \frac{\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k}}{2}\right)\right].\end{aligned} \quad (28)$$

Аналогичные равенства можно получить и для корреляционных функций $\langle a^+_{k\bar\sigma} a_{k\bar\sigma}\rangle$, $\langle b^+_{k\sigma} b_{k\sigma}\rangle$, $\langle b^+_{k\bar\sigma} b_{k\bar\sigma}\rangle$. Сложив получившиеся выражения и просуммировав по всем возможным значениям k в пределах первой зоны Бриллюэна, получим уравнение на химпотенциал. Отметим, что равенству $n = 1$ соответствует при $T = 0$ условие $\varepsilon_1 + U_1/2 = \varepsilon_2 + U_2/2 = 0$.

С помощью (28) можно получить самосогласованное уравнение для определения намагниченности (спина S). В случае точно наполовину заполненной зоны оно будет иметь вид

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} - S = &\frac{2}{N}\sum_k \frac{1}{4}\left[1 + \frac{S(U_1 + U_2) - B'_k}{2t_k}\right]\\ &\times\left[f^+\left(U_1\Phi + t_k + \frac{S(U_1 - U_2) + B'_k}{2}\right)\right.\\ &\left.+ f^+\left(-U_1\Phi + t_k + \frac{S(U_1 - U_2) + B'_k}{2}\right)\right]\\ &+ \frac{2}{N}\sum_k \frac{1}{4}\left[1 - \frac{S(U_1 + U_2) - B'_k}{2t_k}\right]\\ &\times\left[f^+\left(U_1\Phi - t_k + \frac{S(U_1 - U_2) + B'_k}{2}\right)\right.\\ &\left.+ f^+\left(-U_1\Phi - t_k + \frac{S(U_1 - U_2) + B'_k}{2}\right)\right], \end{aligned} \quad (29)$$

где $t_k = \sqrt{\left((S(U_1 + U_2) - B')^2/4\right) + B_k^2}$. Как в области сильной связи $(U_1 + U_2)/16B \gg 1\ (S \to 1/2)$, так и в области слабой связи $(U_1 + U_2)/16B \ll 1\ (S \to 0)$ при температуре $T \to 0$ из (35) можно получить следующее уравнение согласования для спина S:

$$S = \frac{1}{2N}\sum_k \frac{S(U_1 + U_2) - B'_k}{t_k}. \quad (30)$$

В области промежуточных значений энергий кулоновского взаимодействия и интеграла перескока необходимо вести численный расчет непосредственно по формуле (29). Зависимость спина S от суммы энергий кулоновского взаимодействия приведена на рис. 4 как с учетом, так и

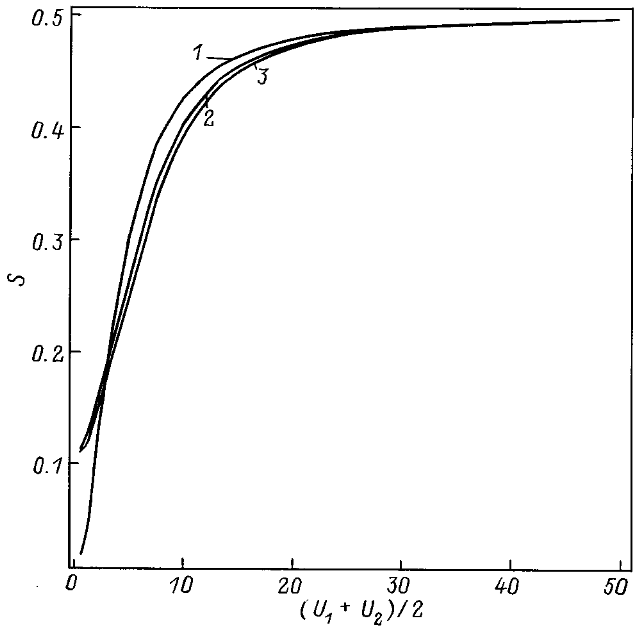

Рис. 4. Спин (намагниченность) S как функция $(U_1+U_2)/2$ при $n=1$, $B=1.5\,\mathrm{eV}$, $T=0$, $B'=0$ (*1*), $B'=-0.3B$ (*2*), $B'=-0.45B$ (*3*).

без учета интеграла переноса B' при температуре $T=0$. Если система находится в режиме сильных корреляций, учет интеграла переноса B' в случае $B'<0$ $(B>0)$ способствует делокализации электронов и, как следствие, приводит к уменьшению значения намагниченности по сравнению со случаем $B'=0$. Если же система находится в режиме слабых корреляций, то электроны являются по существу коллективизированными вследствие малости U. При этом учет интеграла переноса B' в случае $B'<0$ $(B>0)$ приводит к тенденции "локализации" электронов и по этой причине — к увеличению значения намагниченности по сравнению со случаем $B'=0$[1].

Отметим в заключение, что исследование энергетического спектра проводится следующим образом: при заданных значениях параметров U_1, U_2, T с помощью уравнения (30) определяется значение спина S, затем эта величина подставляется в формулы для энергетического спектра (26), (27). Изменение температуры или других параметров системы приводит к перестройке энергетического спектра вследствие изменения при этом величины намагниченности S.

Таким образом, предложенная в работе методика расчета антикоммутаторной функции Грина и корреляционных функций позволяет исследовать как спектр элементарных возбуждений, так и вид намагниченности в зависимости от величины интеграла переноса на второй по близости соседний узел решетки. Учет интеграла переноса B' приводит к существенному изменению вида энергетического спектра и заметно влияет на зависимость намагниченности S от величины кулоновского потенциала по сравнению со случаем $B'=0$.

Автор выражает благодарность Р.Р. Нигматуллину за обсуждение результатов работы и полезные советы.

Приложение 1

Оценим условия, при которых справедливо равенство

$$\Delta n_{j\bar\sigma}^2 = \langle \Delta n_{j\bar\sigma}^2 \rangle, \quad (j=f,l).$$

В соответствии с равенством $\Delta n_{j\bar\sigma} = n_{j\bar\sigma} - \langle n_{j\bar\sigma}\rangle$, имеем

$$\left\| (\Delta n_{j\bar\sigma})^2 - \langle (\Delta n_{j\bar\sigma})^2 \rangle \right\| = \sqrt{\langle n_{j\bar\sigma}\rangle \big(1-\langle n_{j\bar\sigma}\rangle\big)}\,\big|1-2\langle n_{j\bar\sigma}\rangle\big|,$$

где $\|\hat A\| = \sqrt{Sp\{\hat A^{+}\hat A\exp(-\beta H)\}}$ — норма оператора $\hat A$, $|C|$ — модуль величины C.

Таким образом, в случаях, когда $\langle n_{j\bar\sigma}\rangle = 1/2$, $\langle n_{j\bar\sigma}\rangle = 0$, $\langle n_{j\bar\sigma}\rangle = 1$, погрешность расчетов, проведенных в рамках приближения статических флуктуаций, должна стремиться к нулю, а в областях $\langle n_{j\bar\sigma}\rangle \approx 1/2$, $\langle n_{j\bar\sigma}\rangle \approx 0$, $\langle n_{j\bar\sigma}\rangle \approx 1$ погрешность расчетов должна быть минимальной. По-видимому, приближение статических флуктуаций наиболее плодотворно работает в интересующем нас случае — вблизи точки антиферромагнитного упорядочения.

Приложение 2

Рассмотрим случай атомного предела, положив в гамильтониане (2) $B_{fl} = B_{ll'} = 0$. В этом случае задача решается точно. Например, для подрешетки A уравнения движения имеют вид

$$\frac{d}{d\tau} a_{f\sigma}^{+}(\tau) = \varepsilon_1 a_{f\sigma}^{+}(\tau) + U_1 n_{f\bar\sigma} a_{f\sigma}^{+}(\tau),$$

$$\frac{d}{d\tau} n_{f\bar\sigma} a_{f\sigma}^{+}(\tau) = (\varepsilon_1 + U_1) n_{f\bar\sigma} a_{f\sigma}^{+}(\tau). \qquad (\Pi 1)$$

Решение системы дифференциальных уравнений (П1) для оператора рождения частицы имеет вид

$$a_{f\sigma}^{+}(\tau) = \Big\{ a_{f\sigma}^{+}(0) + n_{f\bar\sigma} a_{f\sigma}^{+}(0) \times [\exp(U_1\tau) - 1] \Big\} \exp(\varepsilon_1\tau). \qquad (\Pi 2)$$

В этом случае фурье-образ антикоммутаторной функции Грина имеет вид

$$\langle a_{f\sigma}^{+} | a_{f\sigma} \rangle_E = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{1-\langle n_{f\bar\sigma}\rangle}{E-\varepsilon_1} + \frac{\langle n_{f\bar\sigma}\rangle}{E-\varepsilon_1-U_1} \right\}. \qquad (\Pi 3)$$

[1] Заметим, что величина намагниченности зависит от знака интеграла переноса B'. Если $B'>0$ $(B>0)$, возможность переноса электронов по диагонали квадрата приводит к еще большей локализации и, как следствие, — к увеличению величины S по сравнению со случаем $B'=0$.

Аналогичное выражение можно получить и для электронов другой подсистемы. Полюса функций Грина имеют вид

$$E_1 = \varepsilon_1, \quad E_2 = \varepsilon_2,$$
$$E_3 = \varepsilon_1 + U_1, \quad E_4 = \varepsilon_2 + U_2. \qquad (\text{П}4)$$

Решая эту же задачу в приближении статических флуктуаций можно получить следующее выражение для фурье-образа антикоммутаторной функции Грина:

$$\langle a^+_{f\sigma} | a_{f\sigma} \rangle_E = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{1/2}{E - \varepsilon_1 - U_1(1/2 + S + \Phi)} + \frac{1/2}{E - \varepsilon_1 - U_1(1/2 + S - \Phi)} \right\}. \qquad (\text{П}5)$$

Применив флуктуационно-диссипационную теорему [15], из (П5) получим следующее уравнение для определения спина S:

$$\frac{1}{2} - S = \frac{1}{2} \Big\{ f^+\big(\varepsilon_1 + U_1(1/2 + S + \Phi)\big) + f^+\big(\varepsilon_1 + U_1(1/2 + S - \Phi)\big) \Big\},$$

из которого в случае точного полузаполнения зоны при произвольных значениях температуры следует равенство $S = 0$.

Подставляя найденное значение спина S в функцию Грина (П4), получим следующую формулу для фурье-образа функции Грина:

$$\langle a^+_{f\sigma} | a_{f\sigma} \rangle_E = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{1/2}{E - \varepsilon_1} + \frac{1/2}{E - \varepsilon_1 - U_1} \right\},$$

в точности совпадающую с выражением (П3), если учесть, что в случае точного полузаполнения зоны, как следует из (П3) при переходе к термодинамическим средним с помощью флуктуационно-диссипационной теоремы, $\langle n_{f\sigma} \rangle = \langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle = 1/2$.

Таким образом, приближение статических флуктуаций в случае атомного предела приводит к точному результату.

Список литературы

[1] V.I. Belinicher, A.L. Chernyshev. Phys. Rev. **B49**, *14*, 9746 (1994).
[2] F. Onufrieva, J. Rossat-Mignod. Phys. Rev. **B52**, *10*, 7572 (1995).
[3] R. Hayn, A.F. Barabanov, J. Schulenburg. Preprint (1996).
[4] M.V. Eremin et al. JETP Lett. **60**, *2*, 125 (1994).
[5] E.H. Lieb. Phys. Rev. Lett. **62**, 1201 (1989).
[6] H. Tasaki. Preprint cond-mat/9707286 (1997).
[7] В.В. Лоскутов, Г.И. Миронов, Р.Р. Нигматуллин. ФНТ **22**, *3*, 282 (1996).
[8] Г.И. Миронов. ФТТ **39**, *9*, 1594 (1997).
[9] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. **A276**, *1365*, 238 (1963).
[10] V.J. Emery. Phys. Rev. Lett. **58**, *26*, 2794 (1987).
[11] Р.Р. Нигматуллин, В.А. Тобоев. ТМФ **68**, *1*, 88 (1986).
[12] Т. Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках. М. (1988). 287 с.
[13] Е.В. Кузьмин, В.А. Петраковский, З.А. Завадский. Физика магнитоупорядоченных веществ. М. (1976). 288 с.
[14] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. **A281**, 401 (1964).
[15] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. М. (1965). 334 с.