

Исследование структурных элементов фуллерена в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций

© Г.И. Миронов

Марийский государственный педагогический институт,
424002 Йошкар-Ола, Россия

E-mail: mir@mgi.mari.ru

(Поступила в Редакцию 27 марта 2006 г.
В окончательной редакции 17 мая 2006 г.)

В приближении статических флуктуаций в модели Хаббарда вычисляются антикоммутирующие функции Грина, корреляционные функции, энергии основного состояния для замкнутых атомных структур, состоящих из пяти и шести атомов, являющихся структурными элементами фуллерена. Полученные результаты анализируются и сравниваются с известными ранее данными.

PACS: 71.10.Fd, 75.10.Jm

В последнее время бурное развитие получила атомная инженерия [1–4]. Все варианты атомной инженерии основаны на локальном (с точностью до отдельного атома) управлении атомно-молекулярными взаимодействиями. Инструментарий атомной инженерии дает возможность строить атомные структуры (нанокластеры) со свойствами, которые кардинально отличаются от свойств макроскопических объемов материалов того же состава [5–7]. Эта возможность, появившаяся вследствие прогресса зондовой микроскопии, позволяет конструировать и исследовать структуры, состоящие из небольшого числа одинаковых, в том числе переходных атомов [8,9], и атомов углерода (фуллерены) [10]. Для теоретического анализа структур, состоящих из таких атомов, можно использовать модель Хаббарда [11] (см., например, [8,9]).

В [12,13] была разработана методика решения модели Хаббарда [11] в приближении статических флуктуаций, в [14] вычислена энергия основного состояния двумерной бипартитной модели Хаббарда [15]. В [14] показано, что в пределах $U = 0$ и $U = \infty$ энергии основного состояния в частном случае одномерной модели в приближении статических флуктуаций и в случае точного решения [16] совпадают; в области промежуточных значений U имеется хорошее согласие с точным решением. Это позволяет сделать вывод, что приближение статических флуктуаций хорошо работает как в области слабых, так и в области промежуточных и сильных корреляций. В [17] в приближении статических флуктуаций была вычислена магнитная восприимчивость двумерной двухподрешеточной модели Хаббарда. Сравнение результатов, полученных в [17], с точным решением одномерной модели Хаббарда в магнитном поле [18] выявило, что в частном случае одномерной модели Хаббарда в присутствии магнитного поля приближение статических флуктуаций и точное решение показывают почти совпадающие качественно и количественно (с точностью до постоянного множителя) результаты. В [19,20] была решена задача о

димере — как точно, так и в приближении статических флуктуаций. Сравнение полученных результатов показывает, что, например, антикоммутирующая функция Грина, вычисленная точно, и такая же функция Грина, вычисленная в приближении статических флуктуаций, совпали. Все эти результаты позволяют надеяться, что приближение статических флуктуаций можно применить и при решении „нанокластерных“ задач [5–9].

Цель настоящей работы — вычисление и исследование одночастичных антикоммутирующих функций Грина, энергетического спектра, различных корреляционных функций и энергии основного состояния в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций в случаях пятичленного и шестичленного циклов, являющихся структурными элементами фуллерена (фуллерен C_{60} состоит из двадцати шестичленных и двенадцати пятичленных циклов).

1. Точное решение двухузельной модели Хаббарда (димера)

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 — энергия 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 наносистемы; $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$ — оператор числа частиц на узле i димера со спином σ ; $\bar{\sigma} = -\sigma$; $a_{i\sigma}^+, a_{i\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электронов на узле i димера со спином σ . В отличие от [21] здесь мы учли кулоновское отталкивание электронов, находящихся на разных узлах наносистемы.

Ценность гамильтониана (1) заключается в том, что в этом случае задача Хаббарда решается точно, причем без использования анзаца Бете [16]. Точное решение этой задачи было получено в [20]. Как показано в [20], Фурье-образы одночастичных функций Грина будут иметь вид ($j = 1, 2$; для определенности предположим, что $U > 2B$ — случай сильных корреляций)

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

Анализ функции Грина (2) проводится аналогично [21]. Заметим лишь, что учет межузельного кулоновского взаимодействия приводит к перенормировке кулоновского потенциала $U \rightarrow U - V$, происходит также перенормировка химического потенциала $\varepsilon = -(U + V)/2$. Основное состояние димера является антиферромагнитным; например, в [20] показано, что при температуре $T \rightarrow 0$ имеет место $\langle n_{1\uparrow} n_{2\downarrow} \rangle = \langle n_{1\downarrow} n_{2\uparrow} \rangle = 1/2$.

Как было показано ранее, решение модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций довольно адекватно описывает свойства модели Хаббарда. Поэтому с методической точки зрения задачу о димере интересно решить в приближении статических флуктуаций.

Гамильтониан Хаббарда (1) представим в виде

$$H = H_0 + H_1, \quad (3)$$

где

$$H_0 = \varepsilon \sum_{\sigma} (n_{1\sigma} + n_{2\sigma}) + B \sum_{\sigma} (a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^+ a_{1\sigma}),$$

$$H_1 = U(n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow} n_{2\downarrow}) + V(n_{1\uparrow} n_{2\downarrow} + n_{1\downarrow} n_{2\uparrow}).$$

Согласно полученному выше результату, основное состояние димера является антиферромагнитным. Для решения гамильтониана (3) методом спиновых флуктуаций предположим теперь, что в системе есть антиферромагнитное упорядочение. Тогда концентрацию n и среднее значение проекции спина S выразим следующим образом [22]:

$$n = \langle n_{1\sigma} \rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \langle n_{2\sigma} \rangle + \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle, \quad (4)$$

$$2S = \langle n_{1\sigma} \rangle - \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle - \langle n_{2\sigma} \rangle. \quad (5)$$

Из (4), (5) при $n = 1$ следует, что

$$\langle n_{1\sigma} \rangle = \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle = 1/2 + S, \quad (6)$$

$$\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \langle n_{2\sigma} \rangle = 1/2 - S, \quad (7)$$

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).

Для того чтобы учесть спиновые флуктуации, введем оператор флуктуации проекции спина $\Delta S = \Delta S^z$ следующим образом (см. (6), (7)):

$$n_{1\bar{\sigma}} = 1/2 - S - \Delta S, \quad (8)$$

$$n_{2\bar{\sigma}} = 1/2 + S + \Delta S. \quad (9)$$

В (8), (9) мы предположили, что оператор флуктуации проекции спина не зависит от номера узла. Используя формулы (8), (9), уравнения движения для операторов рождения частиц в гейзенберговском представлении запишем в виде

$$\frac{d}{d\tau} a_{1\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_1 a_{1\sigma}^+(\tau) + B a_{2\sigma}^+(\tau) - U' \Delta S a_{1\sigma}^+(\tau), \quad (10)$$

$$\frac{d}{d\tau} a_{2\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_2 a_{2\sigma}^+(\tau) + B a_{1\sigma}^+(\tau) + U' \Delta S a_{2\sigma}^+(\tau), \quad (11)$$

где

$$\varepsilon_1 = \varepsilon + U(1/2 - S) + V(1/2 + S), \quad (12)$$

$$\varepsilon_2 = \varepsilon + U(1/2 + S) + V(1/2 - S), \quad (13)$$

$$U' = U - V. \quad (14)$$

Введем для операторов представление типа представления взаимодействия следующим образом ($f = 1, 2$) [13]:

$$\begin{aligned} a_{f\sigma}^+(\tau) = & \exp(H_0\tau) \exp(-H_0\tau) a_{f\sigma}^+(\tau) \exp(H_0\tau) \\ & \times \exp(-H_0\tau) = \exp(H_0\tau) \tilde{a}_{f\sigma}^+(\tau) \exp(-H_0\tau), \end{aligned} \quad (15)$$

где H_0 — гамильтониан, входящий в (3), с учетом перенормировок $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_1$, $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_2$. С учетом (15) из уравнений движения (10) можно получить

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) = -U' \Delta \tilde{S}(\tau) \tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau), \quad (16)$$

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 уравнение движения (16), так же как и (10), (11), является точным. Поскольку

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

из (8) получится следующее уравнение движения для оператора $\Delta S(\tau)$:

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

Следовательно, уравнение движения для оператора $\Delta\tilde{S}(\tau)$ будет иметь вид

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

Таким образом, оператор $\Delta\tilde{S}(\tau)$ не зависит от „времени“ τ : $\Delta\tilde{S}(\tau) = \Delta\tilde{S}(0)$.

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

$$\frac{d}{d\tau}\Delta S(0)\tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) = -U'\Delta S^2(0)\tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau). \quad (17)$$

Из равенства $n_{1\bar{\sigma}}n_{1\sigma} = n_{1\bar{\sigma}}$ и определения (8) можно получить, что

$$\Delta S^2 = 1/4 - S^2 - 2S\Delta S. \quad (18)$$

Из (17), (18) следует, что ($\Phi^2 = 1/4 - S^2$)

$$\frac{d}{d\tau}\Delta S(0)\tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) = 2SU'\Delta S(0)\tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) - U'\Phi^2\tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau). \quad (19)$$

Уравнения (16) и (19) образуют замкнутую систему уравнений движения для операторов. Решения системы (16), (19) равны

$$\tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) = \left\{ a_{1\sigma}^+(0) [\text{ch}(U'\tau/2) - 2S \text{sh}(U'\tau/2)] - 2\Delta S(0)a_{1\sigma}^+(0) \text{sh}(U'\tau/2) \right\} \exp(U'S\tau), \quad (20)$$

$$\Delta S(0)\tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau) = \left\{ -a_{1\sigma}^+(0)\Phi^2 2 \text{sh}(U'\tau/2) + \Delta S(0)a_{1\sigma}^+(0) \times [\text{ch}(U'\tau/2) + 2S \text{sh}(U'\tau/2)] \right\} \exp(U'S\tau). \quad (21)$$

Аналогичным образом можно получить решения и для второго узла. Согласно определению (15), общее решение, например, для оператора $a_{1\sigma}^+(\tau)$ имеет вид

$$\begin{aligned} a_{1\sigma}^+(\tau) &= \exp(H_0\tau)\tilde{a}_{1\sigma}^+(\tau)\exp(-H_0\tau) = \exp(H_0\tau)a_{1\sigma}^+(0) \\ &\times \exp(-H_0\tau) \left[\text{ch}\left(\frac{U'}{2}\tau\right) - 2S \text{sh}\left(\frac{U'}{2}\tau\right) \right] \\ &\times \exp(U'S\tau) - 2 \exp(H_0\tau)\Delta S(0)\exp(-H_0\tau) \\ &\times \exp(H_0\tau)a_{1\sigma}^+(0)\exp(H_0\tau) \text{sh}\left(\frac{U'}{2}\tau\right)\exp(U'S\tau). \quad (22) \end{aligned}$$

Введем следующее обозначение для операторов:

$$\bar{a}_{f\sigma}^+(\tau) = \exp(H_0\tau)a_{f\sigma}^+(0)\exp(-H_0\tau), \quad f = 1, 2. \quad (23)$$

Уравнения движения для введенных нами операторов (23) имеют вид

$$\frac{d}{d\tau}\bar{a}_{1\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_1\bar{a}_{1\sigma}^+(\tau) + B\bar{a}_{2\sigma}^+(\tau), \quad (24)$$

$$\frac{d}{d\tau}\bar{a}_{2\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_2\bar{a}_{2\sigma}^+(\tau) + B\bar{a}_{1\sigma}^+(\tau). \quad (25)$$

Решение для системы (24), (25) равно ($\bar{a}_{1\sigma}^+(0) = a_{1\sigma}^+(0)$, $\bar{a}_{2\sigma}^+(0) = a_{2\sigma}^+(0)$)

$$\begin{aligned} \bar{a}_{1\sigma}^+(\tau) &= a_{1\sigma}^+(0) \left[\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2t_B} \text{sh}(t_B\tau) + \text{ch}(t_B\tau) \right] \\ &\times \exp(\tau(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2) + a_{2\sigma}^+(0) \frac{B}{t_B} \text{sh}(t_B\tau) \\ &\times \exp(\tau(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2), \quad (26) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{a}_{2\sigma}^+(\tau) &= a_{2\sigma}^+(0) \left[\frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{2t_B} \text{sh}(t_B\tau) + \text{ch}(t_B\tau) \right] \\ &\times \exp(\tau(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2) + a_{1\sigma}^+(0) \frac{B}{t_B} \text{sh}(t_B\tau) \\ &\times \exp(\tau(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2), \quad (27) \end{aligned}$$

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

Тогда решение (22) будет иметь вид

$$\begin{aligned} a_{1\sigma}^+(\tau) &= \left\{ a_{1\sigma}^+(0) \left[\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2t_B} \text{sh}(t_B\tau) + \text{ch}(t_B\tau) \right] \right. \\ &+ \left. a_{2\sigma}^+(0) \frac{B}{t_B} \text{sh}(t_B\tau) \right\} \left[\text{ch}\left(\frac{U'}{2}\tau\right) - 2S \text{sh}\left(\frac{U'}{2}\tau\right) \right] \\ &\times \exp(U'S\tau) \exp(\tau(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2) - \Delta S(\tau) \left\{ a_{1\sigma}^+(0) \right. \\ &\times \left[\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2t_B} \text{sh}(t_B\tau) + \text{ch}(t_B\tau) \right] + a_{2\sigma}^+(0) \frac{B}{t_B} \text{sh}(t_B\tau) \left. \right\} \\ &\times 2 \text{sh}\left(\frac{U'}{2}\tau\right) \exp(U'S\tau) \exp(\tau(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2), \quad (28) \end{aligned}$$

где $\Delta S(\tau)$ — оператор в представлении Гейзенберга. Вычислим антикоммутирующую функцию Грина, учитывая решение (28), по методике, изложенной в [12]. Получим

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{1\sigma}^+ | a_{1\sigma} \rangle\rangle_E &= \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} - S)(1 - \frac{SU'}{t_B})}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - U'(S + \frac{1}{2}) - t_B} \right. \\ &+ \frac{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} - S)(1 + \frac{SU'}{t_B})}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - U'(S + \frac{1}{2}) + t_B} \\ &+ \frac{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + S)(1 - \frac{SU'}{t_B})}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - U'(S - \frac{1}{2}) - t_B} \\ &+ \left. \frac{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + S)(1 + \frac{SU'}{t_B})}{E - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - U'(S - \frac{1}{2}) + t_B} \right\}. \quad (29) \end{aligned}$$

С помощью спектральной теоремы [23] из (29) можно получить уравнение для определения $\langle n_{1\sigma} \rangle$. Аналогичным образом можем найти уравнение для $\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle$. С помощью этих выражений можно записать уравнения для

химического потенциала μ ($\mu = -\varepsilon$) и намагниченности $2S$. Их этих уравнений следует, что при температуре $T = 0$ условие $n = 1$ 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

$$\langle a_{1\sigma}^+ / a_{1\sigma} \rangle_E = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{1/4}{E - U'/2 - B} + \frac{1/4}{E - U'/2 + B} + \frac{1/4}{E + U'/2 - B} + \frac{1/4}{E + U'/2 + B} \right\}. \quad (30)$$

Антикоммутирующая функция Грина (30) совпадает с антикоммутирующей функцией Грина (2), вычисленной при $T = 0$ точно. Таким образом, в случае двух узлов развития выше методика расчета приводит при $T = 0$ к совпадению с точным результатом. Отметим, что в случае наносистемы может возникнуть вопрос о возможности применения спектральной теоремы [23]. Положив в решении (28) $\tau = \beta$, где $\beta = 1/kT$ и воспользовавшись тем, что что под знаком шпура операторы можно циклически переставлять

$$\langle a_{1\sigma}^+(\beta) a_{1\sigma}(0) \rangle = \langle a_{1\sigma}(0) a_{1\sigma}^+(0) \rangle = 1 - \langle n_{1\sigma} \rangle,$$

можно легко показать, что и в случае наносистем флуктуационно-диссипационная (спектральная) теорема [23] справедлива.

2. Пятичленный цикл (пентагон)

Гамильтониан наносистемы, состоящий из пяти атомов, имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V}, \\ \hat{H}_0 &= \varepsilon \sum_{i=1}^5 (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + B \sum_{\sigma} (a_{2\sigma}^+ a_{1\sigma} + a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma} + a_{3\sigma}^+ a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^+ a_{3\sigma} + a_{4\sigma}^+ a_{3\sigma} + a_{3\sigma}^+ a_{4\sigma} + a_{4\sigma}^+ a_{5\sigma} + a_{5\sigma}^+ a_{4\sigma} + a_{1\sigma}^+ a_{5\sigma} + a_{5\sigma}^+ a_{1\sigma}), \\ \hat{V} &= U \sum_{i=1}^5 n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \end{aligned} \quad (31)$$

Слагаемое \hat{H}_0 в (31) описывает одночастичное состояние электрона на узле нанокластера и перескоки электронов с узла на узел за счет энергии поля наносистемы и энергии тепловых флуктуаций, слагаемое \hat{V} — кулоновское взаимодействие электронов, оказавшихся на одном атоме. В (31) ε — собственная энергия электрона, U — энергия кулоновского взаимодействия электронов на одном узле с разными проекциями спинов, B — интеграл переноса, описывающий перескоки электронов с одного узла на соседний узел за счет тепловых флуктуаций и энергии поля наносистемы; $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$ — оператор числа частиц на узле i ($i \in \overline{1, 5}$) пятичленного

цикла со спином σ (проекцией спина σ), $a_{i\sigma}^+, a_{i\sigma}$ — соответственно операторы рождения и уничтожения электронов на узле i со спином σ . Проекция спина σ в гамильтониане (1) принимает два значения: $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Поскольку учет межузельного кулоновского потенциала приводит лишь к перенормировкам, в (31) мы опустили слагаемое, описывающее межузельное кулоновское взаимодействие электронов.

Вводя представление Гейзенберга для операторов рождения частиц

$$a_{i\sigma}^+(\tau) = \exp(\hat{H}\tau) a_{i\sigma}^+(0) \exp(-\hat{H}\tau), \quad \tau = it,$$

можем получить следующие уравнения движения:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} a_{1\uparrow}^+(\tau) &= \varepsilon a_{1\uparrow}^+(\tau) + B a_{2\uparrow}^+(\tau) + B a_{5\uparrow}^+(\tau) + U n_{1\downarrow} a_{1\uparrow}^+(\tau), \\ \frac{d}{d\tau} a_{2\uparrow}^+(\tau) &= \varepsilon a_{2\uparrow}^+(\tau) + B a_{1\uparrow}^+(\tau) + B a_{3\uparrow}^+(\tau) + U n_{2\downarrow} a_{2\uparrow}^+(\tau), \\ \frac{d}{d\tau} a_{3\uparrow}^+(\tau) &= \varepsilon a_{3\uparrow}^+(\tau) + B a_{2\uparrow}^+(\tau) + B a_{4\uparrow}^+(\tau) + U n_{3\downarrow} a_{3\uparrow}^+(\tau), \\ \frac{d}{d\tau} a_{4\uparrow}^+(\tau) &= \varepsilon a_{4\uparrow}^+(\tau) + B a_{3\uparrow}^+(\tau) + B a_{5\uparrow}^+(\tau) + U n_{4\downarrow} a_{4\uparrow}^+(\tau), \\ \frac{d}{d\tau} a_{5\uparrow}^+(\tau) &= \varepsilon a_{5\uparrow}^+(\tau) + B a_{4\uparrow}^+(\tau) + B a_{1\uparrow}^+(\tau) + U n_{5\downarrow} a_{5\uparrow}^+(\tau). \end{aligned} \quad (32)$$

Решив систему операторных уравнений (32) в приближении статических флуктуаций описанным выше методом [12,13], получим выражение для Фурье-образа антикоммутирующей функции Грина

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{1\uparrow}^+ | a_{1\uparrow} \rangle\rangle_E &= \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{1/10}{E - \varepsilon - U - 2B} + \frac{1/10}{E - \varepsilon - 2B} + \frac{1/5}{E - \varepsilon - U - \frac{\sqrt{5}}{2}|B| + \frac{B}{2}} + \frac{1/5}{E - \varepsilon - \frac{\sqrt{5}}{2}|B| + \frac{B}{2}} + \frac{1/5}{E - \varepsilon - U + \frac{\sqrt{5}}{2}|B| + \frac{B}{2}} + \frac{1/5}{E - \varepsilon + \frac{\sqrt{5}}{2}|B| + \frac{B}{2}} \right\}. \end{aligned} \quad (33)$$

Функция Грина (33) справедлива для общего случая произвольного значения числа электронов n , приходящихся на узел квадрата ($0 \leq n \leq 2$). При записи (33) мы учли, что решение самосогласованного уравнения для спина S имеет решение $S = 0$. Знаменатели в функции Грина (33) определяют энергетический спектр нанокластера, числители — „емкости“ [24] соответствующих уровней энергии, т.е. вероятности нахождения электронов на этих уровнях энергий. Формулу, аналогичную (33), можно получить для всех атомов нанокластера. Отметим, что $\langle\langle a_{1\uparrow}^+ | a_{1\uparrow} \rangle\rangle_E = \langle\langle a_{1\downarrow}^+ | a_{1\downarrow} \rangle\rangle_E = \langle\langle a_{2\uparrow}^+ | a_{2\uparrow} \rangle\rangle_E = \langle\langle a_{2\downarrow}^+ | a_{2\downarrow} \rangle\rangle_E = \dots$ (т.е. все узлы пятичленного цикла эквивалентны).

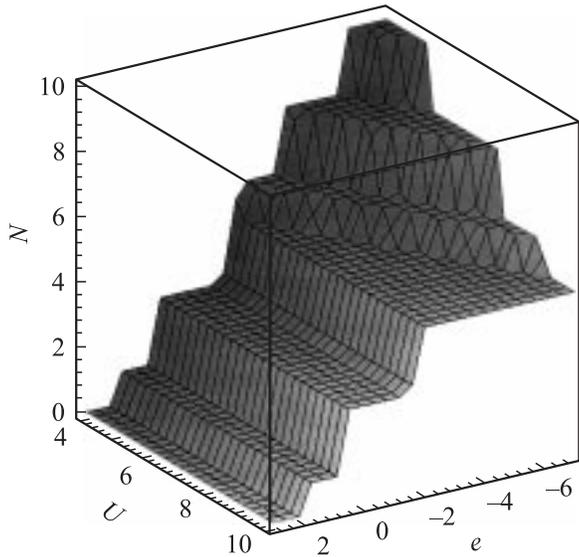


Рис. 1. Количество электронов N в пятичленном цикле в зависимости от собственной энергии $\varepsilon = e$ и величины кулоновского потенциала U при значениях параметров $B = -1$ eV, $\beta = 50$ ($\beta = 1/kT$).

Воспользовавшись флуктуационно-диссипационной теоремой [23], из (33) получим следующее выражение для корреляционных функций $\langle n_{1\uparrow} \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle n_{1\uparrow} \rangle &= \frac{1}{10} [f^+(\varepsilon + U + 2B) - f^+(\varepsilon + 2B)] \\ &+ \frac{1}{5} \left[f^+\left(\varepsilon + U + \frac{\sqrt{5}}{2}|B| - \frac{B}{2}\right) + f^+\left(\varepsilon + \frac{\sqrt{5}}{2}|B| - \frac{B}{2}\right) \right. \\ &\left. + f^+\left(\varepsilon + U - \frac{\sqrt{5}}{2}|B| - \frac{B}{2}\right) + f^+\left(\varepsilon + U - \frac{\sqrt{5}}{2}|B| - \frac{B}{2}\right) \right], \end{aligned} \quad (34)$$

где мы ввели обозначение $f^+(x) = 1/(1 + \exp(x/kT))$.

Вычислив антикоммутирующие функции Грина для других атомов нанокластера, можно показать, что

$$\langle n_{1\uparrow} \rangle = \langle n_{1\downarrow} \rangle = \langle n_{2\uparrow} \rangle = \langle n_{2\downarrow} \rangle = \dots \quad (35)$$

С учетом термодинамических средних $\langle n_{i\uparrow} \rangle$, $\langle n_{i\downarrow} \rangle$ ($i \in \overline{1, 5}$) можно получить уравнение для химического потенциала. На рис. 1 представлено решение этого уравнения для $N = \sum_{i=1}^5 (\langle n_{i\uparrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle)$ в зависимости от величины кулоновского потенциала U и одночастичной энергии ε (химический потенциал $\mu = -\varepsilon$). Из анализа рисунка следует, что с помощью параметров U, ε можно „управлять“ количеством электронов в нанокластере. нас интересует случай, когда на пять узлов нанокластера приходится пять электронов ($n = 1$). В режиме сильной связи равенству $n = 1$ соответствует $\varepsilon = -U/2$ [12–14,24].

Полюса функции Грина (33) определяют энергетический спектр наносистемы: нижняя хаббардовская „подзона“ состоит из трех энергетических уровней: $\varepsilon + 2B$; $\varepsilon + \sqrt{5}B/2 - B/2$; $\varepsilon - \sqrt{5}B/2 - B/2$, верхняя „подзона“ — из уровней $\varepsilon + U + 2B$; $\varepsilon + U + \sqrt{5}B/2 - B/2$; $\varepsilon + U - \sqrt{5}B/2 - B/2$. Согласно (33), электрон с проекцией спина $+1/2$ с вероятностью, равной $1/10$, может находиться на уровнях энергии $\varepsilon + 2B$ и $\varepsilon + U + 2B$, на остальных уровнях энергии электрон может быть обнаружен с вероятностью $1/5$.

Среднее значение энергии нанокластера (энергия основного состояния при температуре $T \rightarrow 0$) будет выражаться следующим образом [14]:

$$E_0 = 20B \langle a_{1\uparrow}^\dagger a_{2\uparrow} \rangle + 5U \langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle, \quad (36)$$

где

$$\begin{aligned} \langle a_{1\uparrow}^\dagger a_{2\uparrow} \rangle &= \frac{1}{10} [f^+(\varepsilon + U + 2B) + f^+(\varepsilon + 2B)] \\ &+ \frac{1}{20} \left(\sqrt{5} \frac{B}{|B|} - 1 \right) \left[f^+\left(\varepsilon + U + \frac{\sqrt{5}}{2}|B| - \frac{B}{2}\right) \right. \\ &\left. + f^+\left(\varepsilon + \frac{\sqrt{5}}{2}|B| - \frac{B}{2}\right) \right] - \frac{1}{20} \left(\sqrt{5} \frac{B}{|B|} + 1 \right) \\ &\times \left[f^+\left(\varepsilon + U - \frac{\sqrt{5}}{2}|B| - \frac{B}{2}\right) + f^+\left(\varepsilon - \frac{\sqrt{5}}{2}|B| - \frac{B}{2}\right) \right], \\ \langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle &= \langle n_{1\uparrow} \rangle \langle n_{1\downarrow} \rangle - \frac{1}{100} \left\{ [f^+(\varepsilon + U + 2B) \right. \\ &\left. - f^+(\varepsilon + 2B)] + 2 \left[f^+\left(\varepsilon + U + \frac{\sqrt{5}}{2}|B| - \frac{B}{2}\right) \right. \right. \\ &\left. \left. - f^+\left(\varepsilon + \frac{\sqrt{5}}{2}|B| - \frac{B}{2}\right) + f^+\left(\varepsilon + U - \frac{\sqrt{5}}{2}|B| - \frac{B}{2}\right) \right. \right. \\ &\left. \left. - f^+\left(\varepsilon - \frac{\sqrt{5}}{2}|B| - \frac{B}{2}\right) \right] \right\}^2. \end{aligned}$$

Анализ формулы (36) для энергии основного состояния проведем далее. Отметим лишь, что основным состоянием рассматриваемого нанокластера является антиферромагнитное состояние.

3. Шестичленный цикл (гексагон)

Гамильтониан наносистемы, состоящей из шести атомов в виде правильного шестиугольника, представим в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (37)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = & \varepsilon \sum_{i=1}^6 (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + \sum_{\sigma} \left(B'(a_{2\sigma}^+ a_{1\sigma} + a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma}) \right. \\ & + B(a_{3\sigma}^+ a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^+ a_{3\sigma}) + B'(a_{4\sigma}^+ a_{3\sigma} + a_{3\sigma}^+ a_{4\sigma}) \\ & + B(a_{4\sigma}^+ a_{5\sigma} + a_{5\sigma}^+ a_{4\sigma}) + B'(a_{5\sigma}^+ a_{6\sigma} + a_{6\sigma}^+ a_{5\sigma}) \\ & \left. + B(a_{1\sigma}^+ a_{6\sigma} + a_{6\sigma}^+ a_{1\sigma}) \right), \\ \hat{V} = & U \sum_{i=1}^6 n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \end{aligned}$$

Смысл слагаемых в гамильтониане (37) совпадает со смыслом слагаемых в гамильтониане (31). Известно, что в случае фуллерена каждый шестичленный цикл содержит три двойных связи и три простых. Длина двойной связи (расстояние между двумя атомами углерода, образующими двойную связь) меньше длины простой связи. Для того чтобы приблизить задачу к реальному случаю, двойную связь в (37) „заменяли“ простой связью с интегралом переноса B' , который по абсолютной величине будет больше чем B .

Записав уравнения движения для операторов рождения, аналогичные (32), и решив получившуюся систему операторных дифференциальных уравнений в приближении статических флуктуаций [12,13], найдем выражение для Фурье-образа антикоммутирующей функции Грина ($\sigma = \uparrow, \downarrow$)

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{1\sigma}^+ | a_{1\sigma} \rangle\rangle_E = & \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{1/6}{E - \varepsilon - U + t_{B1}} + \frac{1/6}{E - \varepsilon + t_{B1}} \right. \\ & + \frac{1/6}{E - \varepsilon - U - t_{B1}} + \frac{1/6}{E - \varepsilon - t_{B1}} + \frac{1/12}{E - \varepsilon - U + t_{B2}} \\ & \left. + \frac{1/12}{E - \varepsilon + t_{B2}} + \frac{1/12}{E - \varepsilon - U - t_{B2}} + \frac{1/12}{E - \varepsilon - t_{B2}} \right\}, \end{aligned} \quad (38)$$

где $t_{B1} = \sqrt{B_1^2 - B_1 B + B^2}$, $t_{B2} = \sqrt{B_1^2 + B_1 B + B^2}$.

Полоса функции Грина (38) определяют спектр элементарных возбуждений наносистемы: нижняя хаббардовская „подзона“ состоит из четырех энергетических уровней ($\varepsilon + t_{B1}$; $\varepsilon - t_{B1}$; $\varepsilon + t_{B2}$; $\varepsilon - t_{B2}$), верхняя хаббардовская „подзона“ состоит также из четырех уровней ($\varepsilon + U + t_{B1}$; $\varepsilon + U - t_{B1}$; $\varepsilon + U + t_{B2}$; $\varepsilon + U - t_{B2}$). Согласно (38), электрон с проекцией спина σ с вероятностью, равной $1/6$, может находиться на уровнях энергии $\varepsilon + t_{B1}$; $\varepsilon - t_{B1}$; $\varepsilon + U + t_{B1}$; $\varepsilon + U - t_{B1}$, на остальных четырех уровнях электрон может быть обнаружен с вероятностью $1/12$.

Воспользовавшись флуктуационно-диссипационной теоремой [23], из (38) можно получить следующее

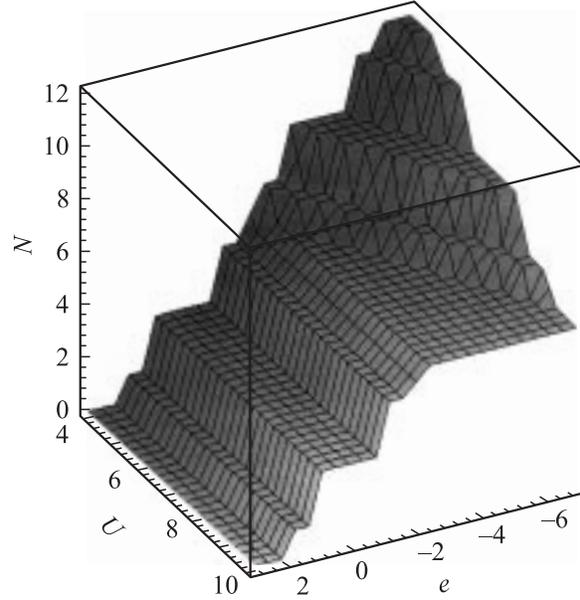


Рис. 2. Количество электронов N в шестичленном цикле в зависимости от собственной энергии $\varepsilon = e$ и величины кулоновского потенциала U при значениях параметров $B = -1$ eV, $\beta = 50$ ($\beta = 1/kT$).

выражение для термодинамических средних $\langle n_{1\uparrow} \rangle$, $\langle n_{1\downarrow} \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle n_{1\uparrow} \rangle = \langle n_{1\downarrow} \rangle = & [f^+(\varepsilon + U - t_{B1}) + f^+(\varepsilon + U + t_{B1}) \\ & + f^+(\varepsilon - t_{B1}) + f^+(\varepsilon + t_{B1})] / 6 + [f^+(\varepsilon + U - t_{B2}) \\ & + f^+(\varepsilon + U + t_{B2}) + f^+(\varepsilon - t_{B2}) + f^+(\varepsilon + t_{B2})] / 12. \end{aligned} \quad (39)$$

Вычислив антикоммутирующие функции Грина для других атомов наносистемы, можно показать, что $\langle n_{1\uparrow} \rangle = \langle n_{1\downarrow} \rangle = \langle n_{2\uparrow} \rangle = \langle n_{2\downarrow} \rangle = \dots$. С учетом термодинамических средних $\langle n_{i\uparrow} \rangle$, $\langle n_{i\downarrow} \rangle$ ($i \in \overline{1, 6}$) можно вывести уравнение для химического потенциала. На рис. 2 представлено решение такого уравнения для $N = \sum_{i=1}^6 (\langle n_{i\uparrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle)$ в зависимости от величины кулоновского потенциала U и энергии ε (химический потенциал $\mu = -\varepsilon$). Из (39) и анализа рис. 2 следует, что с помощью параметров U , ε можно изменять количество электронов в нанокластере. Ситуации, когда на шесть узлов нанокластера приходится шесть электронов ($n = 1$), соответствует равенство $\varepsilon = -U/2$. Таким образом, и в случае шестичленного цикла можно „управлять“ количеством электронов в системе (в пределах от нуля до двенадцати).

Энергия основного состояния наносистемы, состоящей из шести атомов в виде шестиугольника, содержащей шесть электронов, будет выражаться следующим образом ($T \rightarrow 0$) [14]:

$$E_0 = 12B (\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle + \langle a_{1\uparrow}^+ a_{6\uparrow} \rangle) + 6U \langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle, \quad (40)$$

где

$$\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle = \frac{1}{6} \left\{ \frac{2B_1 - B}{t_{B1}} \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + t_{B1} \right) - f^+ \left(\frac{U}{2} - t_{B1} \right) \right] + \frac{B_1 + B}{t_{B2}} \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + t_{B2} \right) - f^+ \left(\frac{U}{2} - t_{B2} \right) \right] \right\},$$

$$\langle a_{1\uparrow}^+ a_{6\uparrow} \rangle = \frac{1}{6} \left\{ \frac{2B - B_1}{t_{B1}} \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + t_{B1} \right) - f^+ \left(\frac{U}{2} - t_{B1} \right) \right] + \frac{B_1 + B}{t_{B2}} \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + t_{B2} \right) - f^+ \left(\frac{U}{2} - t_{B2} \right) \right] \right\},$$

$$\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle = \langle n_{1\uparrow} \rangle \langle n_{1\downarrow} \rangle - \frac{1}{36} \left\{ 2 \left[f^+ \left(\frac{U}{2} + t_{B1} \right) - f^+ \left(\frac{U}{2} - t_{B1} \right) \right] + f^+ \left(\frac{U}{2} + t_{B2} \right) - f^+ \left(\frac{U}{2} - t_{B2} \right) \right\}^2,$$

корреляционные функции $\langle n_{1\uparrow} \rangle$ и $\langle n_{1\downarrow} \rangle$ определяются формулой (39) при значении $\varepsilon = -U/2$.

Анализ формулы (40) проведем далее. Отметим лишь, что основным состоянием гексагона является антиферромагнитное состояние. Например, вычисление корреляционной функции $\langle n_{1\uparrow} n_{2\downarrow} \rangle$ в случае сильных корреляций показывает, что $\langle n_{1\uparrow} n_{2\downarrow} \rangle = 1/2$.

4. Обсуждение результатов

Понижение энергий основного состояния атомных структур (наноструктур) различных конфигураций обусловлено „перескоками“ электронов с узла на узел: чем „интенсивнее“ происходят переносы электронов с узла на узел, тем ниже энергия наносистемы. На рис. 3 приведена зависимость энергии основного состояния в пересчете на один атом (удельной энергии основного состояния) от отношения величины кулоновского потенциала к интегралу переноса для трех разных случаев. Из анализа графиков следует, что конфигурация из шести атомов в виде правильного шестиугольника при учете двойной связи даже в самом грубом приближении энергетически выгоднее, чем конфигурации из пяти атомов и с простым шестицикленным циклом. В случае сильных и слабых корреляций энергии пятицикленного и простого шестицикленного циклов совпадают, в случае промежуточной связи энергия простого шестицикленного цикла меньше. Этот факт в случае промежуточной связи позволяет объяснить неаддитивный (неэкстенсивный) характер энергии нанокластеров [5,6,25]. График для энергии основного состояния позволяет объяснить большую распространенность и устойчивость шестичленных циклов как в случае графита, фуллерена, углеродных нанотрубок, так и в случае, например, бензольных колец.

На рис. 4 приведена зависимость корреляционной функции $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$ от отношения U/B . Из анализа рисунка следует, что в случае слабой связи узлы нанокластеров

с одинаковой вероятностью могут быть заняты двумя электронами как для пятицикленного, так и для шестицикленного цикла. В случае сильной связи коррелятор $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$ больше для шестицикленного цикла с модифицированным интегралом переноса, поскольку в этом случае степень обобщественности электронов оказывается больше. Действительно, как показывает анализ

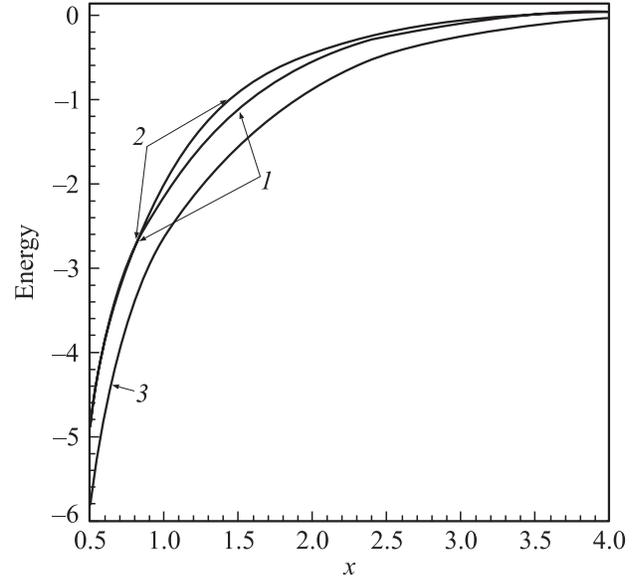


Рис. 3. Средняя энергия наносистем (энергия основного состояния) как функция отношения $U/B = x$ при $\beta = 5$ ($\beta = 1/kT$). 1 — простой шестицикленный цикл ($B' = B$), 2 — пятицикленный цикл, 3 — шестицикленный цикл с разными значениями интегралов переноса при $B' = 1.4B$.

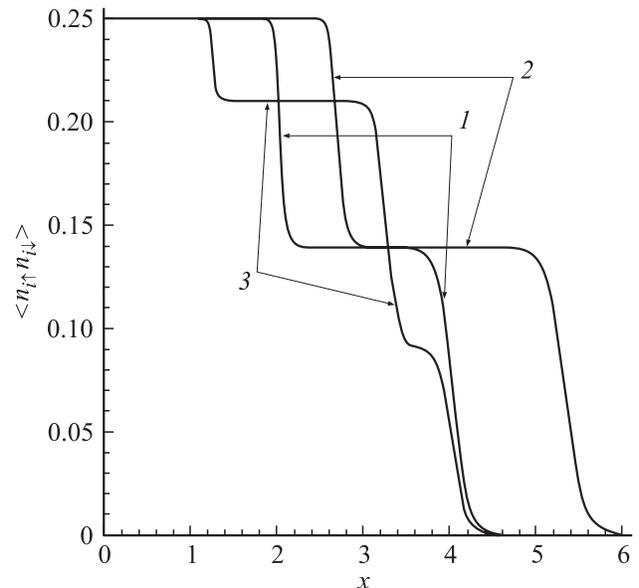


Рис. 4. Зависимость корреляционной функции $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$ от отношения $U/B = x$ при значениях параметров $\beta = 50$ ($\beta = 1/kT$), $B' = 1.5B$. 1 — простой шестицикленный цикл, 2 — шестицикленный цикл с разными интегралами перескока, 3 — пятицикленный цикл.

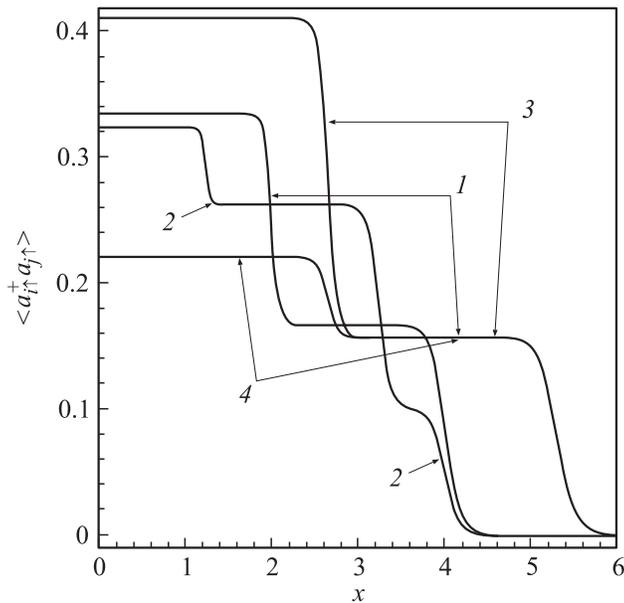


Рис. 5. Зависимость корреляционной функции $\langle a_{i\uparrow}^+ a_{j\uparrow} \rangle$ от $U/B = x$ при значениях параметров $\beta = 50$ ($\beta = 1/kT$), $B' = 1.5B$. 1 — $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$ для простого шестицикленного цикла, 2 — $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$ для пятицикленного цикла, 3 — $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$ для шестицикленного цикла с разными значениями интеграла перескока, 4 — $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{6\uparrow} \rangle$ — для шестицикленного цикла с разными значениями интеграла перескока.

рис. 5, в случае сильных корреляций аномальные средние $\langle a_{i\uparrow}^+ a_{j\uparrow} \rangle$, описывающие переходы электронов с узла на узел наносистемы, больше для шестицикленного цикла с модифицированным интегралом переноса. Графики на рис. 5 находятся в согласии с графиками на рис. 4. Отметим, что корреляционные функции $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$ и $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{6\uparrow} \rangle$ для шестицикленного цикла с разными значениями интеграла перескока в случае слабой и промежуточных связей сильно различаются, тогда как в случае сильной связи из-за большого значения кулоновского потенциала они становятся одинаковыми. При низких температурах корреляционные функции, приведенные на рис. 4 и 5, имеют вид многоступенчатых функций, ступенчатость этих функций определяется энергетическим спектром рассматриваемых атомных структур. Из вида графиков на рис. 4 и 5 можно сделать важный вывод о том, что при наличии двойной связи „токи“ в режиме сильных корреляций при включении статического магнитного поля будут „протекать“ в основном по атомам шестицикленного цикла. В магнитном поле в пятицикленных и шестицикленных циклах должны возникать (например, в случае углерода) p -электронные (π -электронные) „токи“. „Токи“ должны быть более значительными в режиме сильных корреляций, как это следует из анализа графиков на рис. 4 и 5, в случае гексагональной структуры (шестицикленного цикла) при наличии двойной связи.

Таким образом, приближение статических флуктуаций позволяет исследовать поведение нанокластеров раз-

личных конфигураций в модели Хаббарда. Вычисление энергии основного состояния свидетельствует о том, что шестицикленный цикл при учете изменения интеграла переноса в случае двойной связи является энергетически более выгодным по сравнению с пятицикленным циклом и простым шестицикленным циклом. Отмечена возможность „управления“ количеством электронов в случае пятицикленного и шестицикленного циклов. Показано, как энергетический спектр наносистем влияет на вид корреляционных функций при низких температурах.

Предварительные результаты работы были представлены на зимней школе физиков-теоретиков „Коуровка-2006“ [26].

Автор выражает благодарность Р.О. Зайцеву, Н.М. Плакиде, В.Г. Шаврову за внимание к работе и обсуждение ее результатов, Р.Р. Нигматуллину за внимание к работе.

Список литературы

- [1] S.D. Bader. Surf. Sci. **500**, 172 (2002).
- [2] V.J. Luban. J. Mang. Magn. Mater. E **272–276**, 635 (2004).
- [3] В.И. Трефилов, Д.В. Щур, Б.П. Тарасов и др. Фуллерены — основы материалов будущего. Киев (2001).
- [4] Ю.И. Головин. Введение в нанотехнологию. М. (2003).
- [5] H. Hasegawa. Physica A **351** (273 (2005).
- [6] H. Hasegawa. Preprint. Cond-mat/0506553 (2005).
- [7] S.A. Cannas, A.C. Magalhaes, F.A. Tamarit. Phys. Rev. B **61**, 11 521 (2000).
- [8] J.P. Bucher, C.D. Douglass, L.A. Bloomfield. Phys. Rev. Lett. **66**, 3052 (1991).
- [9] S.E. Aspel, J.W. Emmert, J. Deng, L.A. Bloomfield. Phys. Rev. Lett. **76**, 1441 (1996).
- [10] H. Kroto, J. Heath, S. O'Brien, R. Curl, R. Smalley. Nature **318**, 162 (1985).
- [11] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963).
- [12] Г.И. Миронов. ФТТ **39**, 1594 (1997).
- [13] Г.И. Миронов. ФТТ **41**, 951 (1999).
- [14] Г.И. Миронов. ФТТ **44**, 209 (2002).
- [15] V.J. Emery. Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
- [16] E.H. Lieb, F.Y. Wu. Phys. Lett. **20**, 1445 (1968).
- [17] Г.И. Миронов. ФТТ **47**, 1075 (2005).
- [18] C. Yang, A.N. Kocharian, Y.L. Chiang. J. Phys.: Cond. Matter **12**, 7433 (2000).
- [19] Г.И. Миронов. В сб.: Структура и динамика молекулярных систем. Казань (2003). В.10. Ч. 1. С. 323–326.
- [20] Г.И. Миронов. В сб.: Актуальные проблемы физики конденсированных сред. Казань (2004). С. 235–255.
- [21] Г.И. Миронов. ФТТ **48**, 1299 (2006).
- [22] Д.И. Хомский. ФММ **29**, 31 (1970).
- [23] С.В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма. Наука, М. (1975).
- [24] Г.И. Миронов. ФНТ **31**, 1388 (2005).
- [25] Г.И. Миронов. В сб.: Структура и динамика молекулярных систем. Казань (2005). В. 12. Ч. 2. С. 42–49.
- [26] Г.И. Миронов. Тез. докл. XXXI Междунар. зимней школы физиков-теоретиков „Коуровка-2006“. Екатеринбург (2006). С. 31–32.