

СИНГЛЕТНОЕ СОСТОЯНИЕ В МОДЕЛИ ХАББАРДА ПРИ  $U = \infty$ 

Е. В. Кузьмин\*

*Красноярский государственный университет  
660062, Красноярск, Россия*

И. О. Бакланов

*Институт физики им. Л. В. Киренского  
Сибирского отделения Российской академии наук  
660036, Красноярск, Россия*Поступила в редакцию 23 января 1997 г.,  
после переработки 9 июня 1998 г.

В связи с проблемой основного состояния в модели Хаббарда при  $U = \infty$  рассматривается нормальное (немагнитное)  $N$ -состояние системы во всей области электронных концентраций  $n \leq 1$ . Показано, что в одночастичном приближении, например, в обобщенном приближении Хартри—Фока, энергия  $\epsilon_0(n)$   $N$ -состояния ниже энергии  $\epsilon_{FM}(n)$  насыщенного ферромагнитного состояния при всех  $n$ . В приближении случайных фаз вычислена динамическая магнитная восприимчивость и показана стабильность  $N$ -состояния при всех  $n$ . Получены формально точное представление для массового оператора одночастичной электронной функции Грина и его аппроксимация в самосогласованном борновском приближении. Рассмотрено первое борновское приближение и показано, что при учете корреляций затухание обращается в нуль на фермиевской поверхности, а в электронной функции распределения при  $T = 0$  появляется скачок Мигдала, зависящий от  $n$ . Энергия  $N$ -состояния в этом приближении по-прежнему ниже  $\epsilon_{FM}(n)$  при  $n < 1$ . Показана изотропность спиновых корреляционных функций, характерная для синглетного состояния системы. В нулевом приближении вычислена спиновая корреляционная функция для ближайших соседей в зависимости от  $n$ . Сделан вывод об основном синглетном состоянии системы в термодинамическом пределе.

## 1. ВВЕДЕНИЕ. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Предмет настоящей работы — обсуждение проблемы основного состояния и функции распределения электронов в модели Хаббарда [1] при бесконечной величине одноузельного отталкивания  $U = \infty$ .

Гамильтониан системы

$$H_{\infty} = \sum_{f\sigma\Delta} t(\Delta) X_f^{\sigma 0} X_{f+\Delta}^{0\sigma} - \lambda \sum_{f\sigma} X_f^{\sigma\sigma}, \quad (1)$$

заданный на  $d$ -мерной решетке из  $N$  узлов с координационным числом  $z$  и периодическими граничными условиями, описывает  $N_e$  электронов, туннелирующих на ближайшие соседние пустые узлы ( $f$  — узлы решетки,  $\Delta$  — вектор, соединяющий ближайших соседей,  $t(\Delta)$  — интеграл туннелирования,  $\lambda$  — химический потенциал). Поскольку

\*E-mail: andrew@post.krasscience.rssi.ru

отталкивание полагается бесконечным, то каждый узел либо пуст, либо занят одним электроном с проекцией спина  $\sigma$  («двойки» запрещены). Это обстоятельство отражено в использовании операторов Хаббарда с хорошо известными перестановочными соотношениями, отличающихся от фермиевских (см. ниже).

Гамильтониан удобно нормировать на полуширину «затравочной» электронной зоны  $zt$ :

$$h_\infty = H_\infty/zt, \quad t(\Delta)/zt = -1/z.$$

В термодинамическом пределе ( $N \rightarrow \infty$ ,  $N_e \rightarrow \infty$ ,  $N_e/N = n = \text{const}$ ) все свойства описываемой системы зависят только от топологии решетки (ее размерности  $d$  и числа  $z$  ближайших соседей) и концентрации электронов  $n$  ( $0 \leq n \leq 1$ ).<sup>1</sup>

После фурье-преобразования всех операторов:

$$X_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{ikf} X_f^{0\sigma}, \quad X^{\sigma\sigma'}(q) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f e^{iqf} X_f^{\sigma\sigma'}, \quad (2)$$

где векторы  $k$  и  $q$  принадлежат первой зоне Бриллюэна, гамильтониан принимает вид

$$h_\infty = \sum_{k\sigma} (\omega_k - \mu) X_{k\sigma}^+ X_{k\sigma}, \quad (3)$$

где  $\omega_k$  — безразмерный закон дисперсии в приближении ближайших соседей:

$$\omega_k = -\frac{1}{z} \sum_\Delta e^{ik\Delta} = -\gamma_k, \quad (4)$$

$\mu = \lambda/zt$  — безразмерный химический потенциал.

Внешняя простота гамильтониана (3) иллюзорна, ибо операторы  $X$  подчиняются следующим перестановочным соотношениям и условию полноты:

$$\{X_{k\sigma}, X_{p\sigma'}^+\} = \frac{1}{N} \sum_f e^{i(k-p)f} (\delta_{\sigma\sigma'} X_f^{00} + X_f^{\sigma'\sigma}), \quad X_f^{00} + X_f^{\sigma\sigma} + X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} = 1. \quad (5)$$

Используя перестановочные соотношения (5), запишем уравнения движения ( $\hbar = 1$ )

$$i\dot{X}_{k\sigma} = [X_{k\sigma}, h_\infty] = \xi_k^0 X_{k\sigma} + R_{k\sigma}, \quad \xi_k^0 = \omega_k - \mu, \quad (6)$$

$$R_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \omega_{k-q} [X^{\bar{\sigma}\sigma}(q) X_{k-q\bar{\sigma}} - X^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(q) X_{k-q\sigma}], \quad \bar{\sigma} = -\sigma. \quad (7)$$

Нелинейность уравнения (6) обусловлена алгеброй операторов  $X$  или наличием «кинематических» корреляций между электронами с противоположными спиновыми проекциями.

Принципиальными для проблемы сильных электронных корреляций являются вопросы об основном состоянии системы и электронной функции распределения.

Энергия системы является функцией ее полного спина  $S$ . В случае насыщенного ферромагнитного состояния ( $S = N_e/2$ ) решение задачи является точным и тривиальным для любого допустимого числа электронов. В этом случае система является идеальным ферми-газом электронов с одним направлением проекции спинов (состояние в  $k$ -пространстве либо пусто, либо занято только одним электроном). При  $T = 0$  функция распределения является ферми-ступенькой.

Альтернативной кандидатурой на роль основного состояния системы является синглетное состояние ( $S = 0$  для четного числа электронов), которое также будем называть нормальным ( $N$ ) сильнокоррелированным состоянием (числа электронов с проекциями спинов «вверх» и «вниз» одинаковы, дальний магнитный порядок отсутствует). Энергетическая выгодность  $N$ -состояния может быть обусловлена возможностью двойного заполнения состояний в  $k$ -пространстве ( $X_{k\alpha}^+ X_{k\beta}^+ |\psi_0\rangle \neq 0$ ), что приводит к понижению химического потенциала по сравнению с ферромагнитным состоянием. При этом, разумеется, в прямом пространстве «двойки» запрещены и  $N_e \leq N$ .

Корреляции между электронами с противоположными проекциями спинов максимальны именно в  $N$ -состоянии. «Разбрасывая» электроны по импульсам, они, с одной стороны, приводят к повышению энергии системы, с другой — могут привести к модификации ферми-ступеньки при  $T = 0$ . При этом принципиально важно выяснить, сохраняется ли в функции распределения скачок Мигдала [2] на фермиевской поверхности или он исчезает, как это имеет место в маргинальной [3] или латтинджеровской [4] электронных жидкостях.

Цель данной работы — расчет функций распределения электронов и энергии системы в  $N$ -состоянии при  $T = 0$  методом двухвременных запаздывающих функций Грина [5]. По сравнению с предыдущими работами [6, 7] здесь рассматривается аппроксимация массового оператора, соответствующая самосогласованному борновскому приближению.

## 2. ФУНКЦИИ ГРИНА. ОБЩИЕ СВОЙСТВА

Рассмотрим двухвременную запаздывающую антикоммутирующую функцию Грина

$$G_{k\sigma}(\tau) = -i\theta(\tau)\langle\{X_{k\sigma}(t), X_{k\sigma}^+(t')\}\rangle, \quad \tau = t - t' \tag{8}$$

и ее фурье-образ

$$\langle\langle X_{k\sigma} | X_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_E \equiv G_{k\sigma}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{iE\tau} G_{k\sigma}(\tau), \tag{9}$$

где  $E$  — спектральная переменная. Функцию Грина удобно записать в виде

$$G_{k\sigma}(E) = c_{\sigma} F_{k\sigma}(E), \quad \langle\{X_{k\sigma}, X_{k\sigma}^+\}\rangle = 1 - n_{\bar{\sigma}} \equiv c_{\sigma}, \quad n_{\bar{\sigma}} = \frac{1}{N} \sum_f \langle X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \rangle. \tag{10}$$

Введем спектральную интенсивность

$$I_{k\sigma}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_{k\sigma}(E + i0), \tag{11}$$

через которую на основании спектральной теоремы находятся средние (здесь и далее рассматривается случай  $T = 0$ ):

$$\langle X_{k\sigma}^+ X_{k\sigma} \rangle = n_{k\sigma} = c_\sigma \int_{-\infty}^0 I_{k\sigma}(E) dE \equiv c_\sigma f_{k\sigma}. \quad (12)$$

Спектральная интенсивность подчиняется правилу сумм

$$\int_{-\infty}^{\infty} I_{k\sigma}(E) dE = 1. \quad (13)$$

Химический потенциал находится из уравнения

$$n = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} n_{k\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} c_\sigma \int_{-\infty}^0 I_{k\sigma}(E) dE, \quad (14)$$

где  $n$  — заданная концентрация электронов. Энергия системы (на узел решетки) равна

$$\epsilon = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \omega_k n_{k\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \omega_k c_\sigma \int_{-\infty}^0 I_{k\sigma}(E) dE. \quad (15)$$

Поскольку все вычисления ведутся в термодинамическом пределе, в дальнейшем суммы могут заменяться интегралами:

$$\frac{1}{N} \sum_k A(\omega_k) = \int_{-1}^1 A(\omega) \rho(\omega) d\omega, \quad \int_{-1}^1 \rho(\omega) d\omega = 1,$$

где  $\rho(\omega)$  — плотность состояний, соответствующая закону дисперсии  $\omega_k$  (для альтернантных решеток  $\rho(\omega) = \rho(-\omega)$ ,  $-1 \leq \omega_k \leq 1$ ). После нахождения химического потенциала одночастичная функция распределения определяется формулой (12).

Насыщенное ферромагнитное состояние в модели Хаббарда описывается точно. При  $T = 0$  химический потенциал и энергия системы находятся из соотношений

$$n = \int_{-1}^{\mu} \rho(\omega) d\omega, \quad \epsilon_{FM}(n) = \int_{-1}^{\mu} \omega \rho(\omega) d\omega, \quad (16)$$

что позволяет найти явную зависимость энергии ферромагнитного состояния от электронной концентрации  $n$ .

### 3. МАССОВЫЙ ОПЕРАТОР ФУНКЦИИ ГРИНА И ЕГО АППРОКСИМАЦИЯ В РАМКАХ САМОСОГЛАСОВАННОГО БОРНОВСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

В точном уравнении (6) можно выделить линейную часть, соответствующую обобщенному приближению Хартри—Фока. Это достигается введением неприводимого оператора [5–7]:

$$\tilde{R}_{k\sigma} = R_{k\sigma} - \frac{\langle\langle R_{k\sigma}', X_{k\sigma}^+ \rangle\rangle}{\langle\langle X_{k\sigma}, X_{k\sigma}^+ \rangle\rangle} X_{k\sigma} \equiv R_{k\sigma} - \frac{a_{k\sigma}}{c_\sigma} X_{k\sigma}, \quad (17)$$

обладающего свойством  $\langle\{\tilde{R}_{k\sigma}, X_{k\sigma}^+\}\rangle = 0$ . Фактически это означает, что все «внутренние» спаривания, приводящие к линеаризации, этой процедурой учтены. Теперь уравнение (6) принимает вид

$$i\dot{X}_{k\sigma} = \xi_{k\sigma} X_{k\sigma} + \tilde{R}_{k\sigma}, \tag{18}$$

где

$$\xi_{k\sigma} = \xi_{k\sigma}^0 + \frac{1}{c_\sigma} \langle\{R_{k\sigma}, X_{k\sigma}^+\}\rangle = \Delta_\sigma + \left(c_\sigma + \frac{\kappa_\sigma}{c_\sigma}\right) \omega_k - \mu, \tag{19}$$

$\Delta_\sigma = |\epsilon_{\bar{\sigma}}|/c_\sigma$ ,  $\kappa_\sigma = \langle X_{f+\Delta}^{\bar{\sigma}\sigma} X_{f+\Delta}^{\sigma\bar{\sigma}} + \nu_{f\bar{\sigma}} \nu_{f+\Delta\bar{\sigma}} \rangle$ ,  $\epsilon_{\bar{\sigma}}$  — энергия (на узел решетки) подсистемы электронов с проекциями спина  $\bar{\sigma}$ ,  $\nu_{f\bar{\sigma}} = X_{f\bar{\sigma}}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} - n_{\bar{\sigma}}$ .

Функция Грина  $G_{k\sigma}(E)$  (или  $F_{k\sigma}(E)$ ) удовлетворяет уравнению Дайсона. Для его построения воспользуемся известным приемом дифференцирования гриновских функций сначала по «первому» времени  $t$ , а затем — по «второму» времени  $t'$ . Используя уравнение движения в обобщенном приближении Хартри—Фока, в результате (см. [6, 7]) получаем

$$F_{k\sigma}(E) = \frac{1}{E - \xi_{k\sigma} - \Sigma_{k\sigma}(E) + i0}, \quad \Sigma_{k\sigma}(E) = \frac{1}{c_\sigma} \langle\langle \tilde{R}_{k\sigma} | \tilde{R}_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_E^{(c)}. \tag{20}$$

Массовый оператор  $\Sigma_{k\sigma}(E)$  (собственно-энергетическая часть функции Грина) представляет собой связанную (с) часть высшей гриновской функции, не разрезаемую по линии графического представления нулевой функции Грина  $F_{k\sigma}^0(E) = (E - \xi_{k\sigma})^{-1}$ . Полагая

$$\Sigma_{k\sigma}(E + i0) \equiv M_{k\sigma}(E) - i\Gamma_{k\sigma}(E), \tag{21}$$

имеем

$$I_{k\sigma}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} F_{k\sigma}(E) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{k\sigma}(E)}{[E - \xi_{k\sigma} - M_{k\sigma}(E)]^2 + \Gamma_{k\sigma}^2(E)}, \tag{22}$$

причем  $\Gamma_{k\sigma}(E) \geq 0$  [5]. Представление массового оператора (20) является формально точным. Однако для конкретных вычислений необходимо располагать его явным видом, используя ту или иную аппроксимацию.

Спектральное представление высшей запаздывающей антикоммутирующей функции Грина имеет вид

$$\langle\langle \tilde{R}_{k\sigma} | \tilde{R}_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_E = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{J_{k\sigma}(E')}{E - E' + i0} dE'. \tag{23}$$

На основании спектральной теоремы ее спектральная плотность может быть выражена через временные средние

$$J_{k\sigma}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tau}{2\pi} e^{iE\tau} \left( \langle\tilde{R}_{k\sigma}^+(0) \tilde{R}_{k\sigma}(\tau)\rangle + \langle\tilde{R}_{k\sigma}(\tau) \tilde{R}_{k\sigma}^+(0)\rangle \right), \tag{24}$$

причем  $\Gamma_{k\sigma}(E) = \pi J_{k\sigma}(E)/c_\sigma$ .

Используя определение оператора  $R_{k\sigma}$  (7), вычисляем средние в (24), расцепляя их на произведение квазибозовского и квазифермиевского средних (т. е. осуществляя «внешние» спаривания). Каждое из них находится по спектральной теореме [5] через соответствующие коммутаторные и антикоммутаторные гриновские функции. В результате получаем

$$J_{k\sigma}(E) \approx \frac{1}{N} \sum_q \omega_{k-q}^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega N(\omega) f(E - \omega) (1 + e^{\beta E}) \times \\ \times [S^{\bar{\sigma}\sigma}(q, \omega) c_{\bar{\sigma}} I_{k-q, \bar{\sigma}}(E - \omega) + S^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(q, \omega) c_\sigma I_{k-q, \sigma}(E - \omega)]. \quad (25)$$

Здесь

$$S^{\bar{\sigma}\sigma}(q, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \langle X^{\bar{\sigma}\sigma}(q) | X^{\sigma\bar{\sigma}}(-q) \rangle \rangle_\omega, \quad (26)$$

$$\tilde{S}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(q, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \langle X^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(q) | X^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(-q) \rangle \rangle_\omega \quad (27)$$

и

$$f(E) = (e^{\beta E} + 1)^{-1}, \quad N(\omega) = (e^{\beta\omega} - 1)^{-1}.$$

Аналогичная аппроксимация была осуществлена в работе Плакиды с соавторами [8] (см. также [9]) для  $t - J$ -модели. Она соответствует самосогласованному борновскому приближению.

В  $N$ -состоянии все основные характеристики не зависят от спиновых проекций ( $c_\sigma = c = 1 - n/2$ ,  $I_{p\sigma}(E) = I_p(E)$  и т. д.), и тогда при  $T = 0$  получаем следующее выражение для мнимой части массового оператора:

$$\Gamma_k(E) = \pi \frac{1}{N} \sum_q \omega_{k-q}^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega [S(q, \omega) + \tilde{S}(q, \omega)] \times \\ \times [\theta(E)\theta(\omega)\theta(E - \omega) - \theta(-E)\theta(-\omega)\theta(|E| - |\omega|)] I_{k-q}(E - \omega) \quad (28)$$

с очевидными переобозначениями для  $S(q, \omega)$  (26) и  $\tilde{S}(q, \omega)$  (27). Таким образом, мнимая часть массового оператора в самосогласованном борновском приближении представлена в виде свертки спектральных интенсивностей квазибозовских и квазифермиевских возбуждений по частотам  $\omega$  и импульсам  $q$ . Действительная часть массового оператора является трансформантой Гильберта от  $\Sigma_{k\sigma}(E)$ , т. е.

$$M_k(E) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma_k(E') dE'}{E - E'}. \quad (29)$$

Если функции (26) и (27), описывающие соответственно поперечные и продольные компоненты флуктуаций спиновой плотности, вычислены (хотя бы приближенно), массовый оператор должен находиться самосогласованно из (28), (29), представлений (20), (21) и уравнения для химического потенциала

$$n = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle X_{k\sigma}^+ X_{k\sigma} \rangle = (2 - n) \frac{1}{N} \sum_k \int_{-\infty}^0 I_k(E) dE. \quad (30)$$

Подчеркнем различие между истинным синглетным и нормальным (парамагнитным) состояниями. Синглетное состояние помимо свойства  $\hat{S}^i|0\rangle = 0$  характеризуется нетривиальной и изотропной спиновой корреляционной функцией

$$\langle S_f^x S_{f+r}^x \rangle = \langle S_f^y S_{f+r}^y \rangle = \langle S_f^z S_{f+r}^z \rangle \equiv C(r), \langle S_f^+ S_{f+r}^- \rangle = 2C(r), \quad (31)$$

не зависящей от направления вектора  $r$ . Если такая корреляция отсутствует ( $C(r) = 0$ ), то мы имеем дело с обычным парамагнитным состоянием. Соотношения (31) остаются в силе для корреляционных функций  $\langle S^i(q) S^i(-q) \rangle$  и соответствующих гриновских функций.

#### 4. НУЛЕВОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ И ПРИБЛИЖЕНИЕ ХАОТИЧЕСКИХ ФАЗ

Обсудим вначале нулевое приближение ( $N$ -состояние,  $T = 0$ ); когда при описании электронных состояний пренебрегается массовым оператором. В этом случае спектральная интенсивность является  $\delta$ -функцией, а функция распределения — «ферми-ступенькой»:

$$I_p^0(E) = \delta(E - \xi_p), \quad n_p^0 = c f_p^0 = c \theta(-\xi_p), \quad \xi_p \approx \Delta + c \omega_p - \mu. \quad (32)$$

Здесь  $c = 1 - n/2$ ,  $\Delta = |\epsilon_0|/2c$ ,  $\epsilon_0(n)$  — энергия системы (на узел) и использовано приближенное выражение для одночастичного спектра (опущена корреляционная функция  $\kappa$  (см. (19)). Удобно ввести эффективный химический потенциал  $m = (\mu - \Delta)/c$ . Тогда  $m$  и энергия системы как функции электронной концентрации  $n$  определяются соотношениями

$$\frac{n}{2 - n} = \int_{-1}^m \rho(\omega) d\omega \equiv g(m), \quad (33a)$$

$$\frac{\epsilon_0(n)}{2 - n} = \int_{-1}^m \omega \rho(\omega) d\omega \equiv v(m). \quad (33b)$$

Исключая верхний предел  $m$ , можно найти явную зависимость  $\epsilon_0(n)$ . Анализ показал [6, 7], что в нулевом приближении для всех концентраций  $\epsilon_0(n) < \epsilon_{FM}(n)$ , т. е. энергетически выгодно синглетное (немагнитное) состояние. Кроме того, первое из соотношений (33) правильно учитывает эффект «исключенного объема» в модели Хаббарда при  $U = \infty$ : ферми-поверхность «разбухает» по сравнению со случаем свободных электронов (для них  $n = 2g(m)$ ) и занимает всю зону Бриллюэна при  $n \rightarrow 1$  ( $m \rightarrow 1$ ).

Фигурирующие в массовом операторе спектральные плотности квазибозовских возбуждений можно найти в приближении хаотических фаз. В  $N$ -состоянии коммутаторные гриновские функции поперечных и продольных спиновых флуктуаций имеют вид [7]

$$\langle\langle S^+(q) | S^-( -q) \rangle\rangle_\omega = \langle\langle S^-(q) | S^+( -q) \rangle\rangle_\omega = \frac{D_0(q, \omega)}{1 + P(q, \omega)} \equiv D(q, \omega), \quad (34a)$$

$$\langle\langle S^z(q) | S^z( -q) \rangle\rangle_\omega = \frac{1}{2} D(q, \omega), \quad (34b)$$

$$\langle\langle X^{\sigma\bar{\sigma}}(q)|X^{\bar{\sigma}\sigma}(-q)\rangle\rangle = \langle\langle X^{\sigma\sigma}(q)|X^{\sigma\sigma}(-q)\rangle\rangle_{\omega} = \frac{D_0(q, \omega)}{1 - P^2(q, \omega)} \equiv \tilde{D}(q, \omega), \quad (35)$$

где

$$D_0(q, \omega) = -\chi_0^{+-}(q, \omega) = \frac{1}{N} \sum_p \frac{n_p - n_{p+q}}{\omega - c\omega_{pq}},$$

$$P(q, \omega) = \frac{1}{N} \sum_p \frac{n_{p+q}\omega_{p+q} - n_p\omega_p}{\omega - c\omega_{pq}}, \quad (36)$$

$$\langle X_{p\sigma}^+ X_{p\sigma} \rangle = \langle X_{p\bar{\sigma}}^+ X_{p\bar{\sigma}} \rangle = n_p, \quad \omega_{pq} = \omega_{p+q} - \omega_p.$$

Соотношение (346) указывает на спиновую изотропность (см. (31)), характерную для синглетного состояния. В этом состоянии коррелятор

$$\langle X^{\sigma\bar{\sigma}}(q)X^{\bar{\sigma}\sigma}(-q) \rangle + \langle X^{\bar{\sigma}\sigma}(q)X^{\sigma\bar{\sigma}}(-q) \rangle = 3\langle S^z(q)S^z(-q) \rangle + \frac{1}{4}\langle \rho(q)\rho(-q) \rangle, \quad (37)$$

где  $\rho(q)$  — оператор флуктуаций электронной плотности. В приближении хаотических фаз получаем

$$\langle\langle \rho(q)|\rho(-q)\rangle\rangle_{\omega} = \frac{D_0(q, \omega)}{1 - P(q, \omega)} \equiv \bar{D}(q, \omega), \quad (38)$$

и поэтому в синглетном состоянии сумма спектральных интенсивностей представима в виде

$$S(q, \omega) + \bar{S}(q, \omega) = \frac{3}{2} S(q, \omega) + \frac{1}{4} \bar{S}(q, \omega), \quad (39)$$

где  $\bar{S}(q, \omega)$  — мнимая часть функции (38).

Используя ферми-ступеньку  $f_p^0 = \theta(-\xi_p) = \theta(m - \omega_p)$  при вычислении поперечной восприимчивости  $\chi^{+-}(q, \omega) = -D(q, \omega)$  хаббардовских электронов в статическом случае ( $\omega = 0$ ) при  $q \rightarrow 0$ , получаем [7]

$$\lim_{q \rightarrow 0} \chi^{+-}(q, 0) = \frac{\rho(m)}{1 - g(m) + m\rho(m)} \equiv u(m)\rho(m), \quad (40)$$

где  $u(m)$  — фактор парамагнитного усиления. Выражение (40) полюсной особенности не имеет, что свидетельствует об устойчивости  $N$ -состояния по отношению к возникновению ферромагнетизма; этот вывод согласуется с работой [10].

Таким образом, нулевое приближение и приближение хаотических фаз взаимно согласуются (отсутствие ферромагнетизма в модели Хаббарда при  $U = \infty$  в термодинамическом пределе).

## 5. ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ ПРИ ВЫЧИСЛЕНИИ МАССОВОГО ОПЕРАТОРА И ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Рассмотрим роль кинематических корреляций в  $N$ -состоянии системы. Они описываются массовым оператором  $\Sigma_k(E)$ , самосогласованное нахождение которого представляется исключительно сложной задачей, требующей трудоемких численных расчетов. По этой причине мы примем ряд упрощающих предположений, которые не изменяют, на наш взгляд, принципиальных выводов и существа дела.

1. Знаменатели функций  $D(q, \omega)$ ,  $\bar{D}(q, \omega)$  и  $\tilde{D}(q, \omega)$  в нуль не обращаются, и это свидетельствует об отсутствии в рассматриваемой модели хорошо определенных коллективных возбуждений (магнонов или нуль-звука). Это позволяет (вместо приближения хаотических фаз) приближенно заменить сумму спектральных интенсивностей на

$$S(q, \omega) + \tilde{S}(q, \omega) \approx 2AS_0(q, \omega), \tag{41}$$

что эквивалентно рассмотрению восприимчивости невзаимодействующих хаббардовских электронов. В (41)  $A$  — корректирующий множитель, зависящий от концентрации (или от химического потенциала). При функции распределения общего вида  $n_p = cf_p = cf(\omega_p)$  имеем

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} D_0(q, \omega) = S_0(q, \omega) = \frac{c}{N} \sum_p f(\omega_p) [1 - f(\omega_{p+q})] \times \\ \times [\delta(\omega - c\omega_{pq}) - \delta(\omega + c\omega_{pq})] \equiv S_0^{(+)}(q, \omega) - S_0^{(-)}(q, \omega). \tag{42}$$

Эта функция, называемая динамическим формфактором [11], определена как для положительных ( $\omega > 0$ ), так и для отрицательных ( $\omega < 0$ ) частот, так как  $\omega_{pq} > 0$  (очевидно, что  $S_0^{(-)}(q, -\omega) = S_0^{(+)}(q, \omega)$ ), и описывает некогерентные однопарные электронные возбуждения со спектром  $\omega_{pq}$  в пределах первой зоны Бриллюэна.

Корректирующий множитель  $A$  найдем из правила сумм

$$\frac{1}{N} \sum_q \langle S_q^+ S_{-q}^- \rangle = \frac{1}{N} \sum_q \langle X_q^{\sigma\sigma} X_{-q}^{\sigma\sigma} \rangle = \frac{n}{2}. \tag{43}$$

Используя (41), по спектральной теореме при  $T = 0$  имеем

$$\langle S_q^+ S_{-q}^- \rangle = \frac{Ac}{N} \sum_p f_p (1 - f_{p+q}). \tag{44}$$

Взяв ферми-ступеньку  $f_p^0 = \theta(m - \omega_p)$  в качестве нулевой функции распределения с эффективным химическим потенциалом  $m$  и переходя от суммирования к интегрированию с плотностью электронных состояний  $\rho(\omega)$ , получаем

$$\frac{n}{2} = Ac \int_{-1}^1 d\omega \rho(\omega) \theta(m - \omega) \int_{-1}^1 d\omega' \rho(\omega') \theta(\omega' - m) = Acg(m) [1 - g(m)].$$

Поскольку  $c = 1 - n/2 = 1/[1 + g(m)]$ ,  $n/2 = g(m)/[1 + g(m)]$ , то

$$A(m) = [1 - g(m)]^{-1}. \tag{45}$$

После такой аппроксимации мнимую часть массового оператора можно представить в виде ( $S_0^+(q, \omega) \equiv S_0(q, \omega)$  при  $\omega \geq 0$ )

$$\Gamma_k(E) \approx \begin{cases} \Gamma_k^+ = \frac{2A\pi}{N} \sum_q \omega_{k-q}^2 \int_0^E d\omega S_0(q, \omega) I_{k-q}(E - \omega), & E > 0, \\ \Gamma_k^- = \frac{2A\pi}{N} \sum_q \omega_{k-q}^2 \int_0^{|E|} d\omega S_0(q, \omega) I_{k-q}(-|E| + \omega), & E < 0. \end{cases} \tag{46}$$

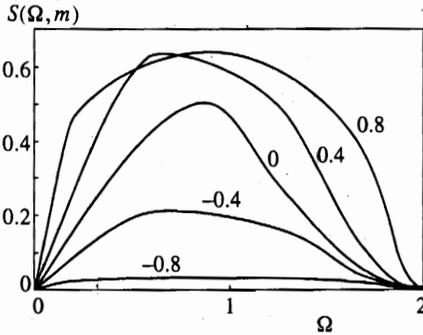


Рис. 1. Плотность однопарных возбуждений для различных значений химического потенциала  $m$  ( $\Omega$  — энергия возбуждения). Использована эллиптическая плотность электронных состояний

Из (46) следует, что затухание  $\Gamma_k(E)$  при  $E \rightarrow 0$  обращается в нуль. Напомним, что значению спектральной переменной  $E = 0$  соответствует фермиевский уровень, так что на самой ферми-поверхности затухание отсутствует.

2. Вместо динамического формфактора  $AS_0(q, \omega) = S(q, \omega)$  будем рассматривать его среднее по всем импульсам значение:

$$S(q, \omega) \rightarrow \frac{A}{N} \sum_q S_0(q, \omega) \equiv S(\omega, m), \quad (47)$$

которое является плотностью однопарных возбуждений с энергией  $\omega$  при химическом потенциале  $m$ . Используя ферми-ступеньку и переходя к новой переменной  $\Omega = \omega/c$ , из (42) и (47) получаем

$$S(\Omega, m) = A(m) \int_{m-\Omega}^m \rho(x) \rho(x + \Omega) dx, \quad 0 \leq \Omega \leq 2. \quad (48)$$

Из (48) следует, что  $S(\Omega, m) \approx A(m) \rho^2(m) \Omega$  при  $\Omega \rightarrow 0$ . Вид функции  $S(\Omega, m)$  приведен на рис. 1 для эллиптической плотности электронных состояний  $\rho(x) = (2/\pi) \sqrt{1-x^2}$ . Анализ выражения (48) показал, что характер поведения и численные значения  $S(\Omega, m)$  существенно не изменяются при других плотностях состояний для дву- и трехмерных альтернантных решеток.

Суть аппроксимации (47) заключается в следующем. Общие выражения (25) и (28) описывают процессы следующего типа: электрон с «энергией»  $E$  и импульсом  $k$  переходит в состояние  $E - \omega$ ,  $k - q$ , возбуждая электронно-дырочную пару с импульсом  $q$  и энергией  $\omega = \omega_{pq}$ . При использовании аппроксимации (47) мы игнорируем детальное описание состояний по импульсам и фиксируем переход электрона с изоэнергетической поверхности  $E$  на изоэнергетическую поверхность  $E - \omega$ ; такие переходы осуществляются с различными импульсами  $q$ , что и отражено в (47). Поскольку описание состояний ведется по изоэнергетическим поверхностям, то утрачивается зависимость затухания и всего массового оператора от квазиимпульса  $k$ , т.е.  $\Sigma_k(E) \rightarrow \Sigma(E) \equiv M(E) - i\Gamma(E)$ .

Теперь, полагая  $E = \epsilon$ , имеем

$$\Gamma(\epsilon) \approx \begin{cases} 2\pi \int_0^\epsilon d\Omega S(\Omega, m) \frac{1}{N} \sum_p \omega_p^2 I_p(\epsilon - \Omega), & \epsilon > 0, \\ 2\pi \int_0^{|\epsilon|} d\Omega S(\Omega, m) \frac{1}{N} \sum_p \omega_p^2 I_p(-|\epsilon| + \Omega), & \epsilon < 0, \end{cases} \quad (49)$$

$$M(\epsilon) = \text{Re} \Sigma(\epsilon) \approx \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(E') dE'}{\epsilon - E'}. \quad (50)$$

3. Рассмотрим первое борновское приближение (первый итерационный шаг само-согласованного решения):

$$I_p(\epsilon - \Omega) \rightarrow I_p^0(\epsilon - \Omega) = \delta(\epsilon - \Omega - (\omega_p - m)).$$

Тогда сумма в (49) равна

$$\frac{1}{N} \sum_p \omega_p^2 I_p^0(\epsilon - \Omega) \approx \frac{1}{zN} \sum_p I_p^0(\epsilon - \Omega) = \frac{1}{z} \int_{-1}^1 dx \rho(x) \delta[\epsilon - \Omega + m - x] = \frac{1}{z} \rho(\epsilon - \Omega + m),$$

где

$$\frac{1}{z} = \frac{1}{N} \sum_p \omega_p^2 = \int_{-1}^1 \omega^2 \rho(\omega) d\omega \quad (51)$$

есть среднее значение квадрата затравочного спектра по всей зоне Бриллюэна. В этом случае получаем затухание в виде

$$\gamma(\epsilon, m) = \Gamma^{(1)}(\epsilon) \approx \begin{cases} \frac{2\pi}{z} \int_0^\epsilon d\Omega S(\Omega, m) \rho(\epsilon - \Omega + m), & 0 \leq \epsilon \leq 3 - m, \\ \frac{2\pi}{z} \int_0^{|\epsilon|} d\Omega S(\Omega, m) \rho(-|\epsilon| + \Omega + m), & -(3 + m) \leq \epsilon \leq 0, \end{cases} \quad (52)$$

причем  $-1 \leq m \leq 1$ .

По-прежнему на ферми-поверхности  $\gamma(\epsilon) \rightarrow 0$  при  $\epsilon \rightarrow 0$ . Вблизи ферми-поверхности ( $\epsilon \rightarrow 0$  и поэтому  $\Omega \rightarrow 0$ ) имеем

$$S(\Omega, m) \approx A(m) \rho^2(m) \Omega, \quad \rho(\epsilon - \Omega + m) \approx \rho(m)$$

и

$$\gamma(\epsilon, m) \approx \frac{\pi}{z} A(m) \rho^3(m) \epsilon^2. \quad (53)$$

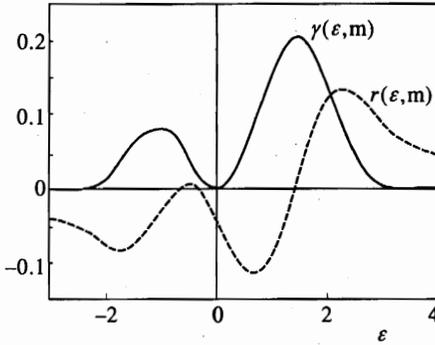


Рис. 2

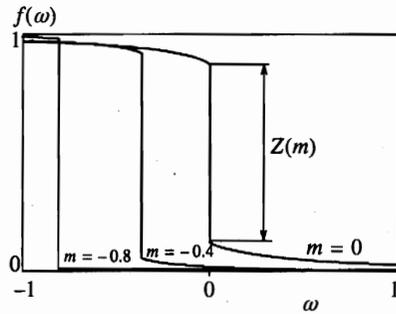


Рис. 3

Рис. 2. Действительная  $r(\epsilon, m)$  и мнимая  $\gamma(\epsilon, m)$  части массового оператора в первом борновском приближении как функции спектральной переменной  $\epsilon$  при  $m = -0.4$

Рис. 3. Типичный вид функции распределения в модели Хаббарда при  $U = \infty$  и  $T = 0$

Напомним, что мы проводим вычисления в безразмерных единицах; фактически  $1/z$  имеет размерность квадрата энергии, а  $\gamma$  — энергии. Результат (53) по функциональной зависимости от  $\epsilon$  согласуется с теорией ферми-жидкости Ландау [12] (действительно, положив  $\epsilon = \epsilon_p - \epsilon_F = (p^2 - p_F^2)/2m \approx v_F(p - p_F)$ , получаем  $\gamma \propto (p - p_F)^2$ ), а также с расчетами времени жизни квазичастицы в обобщенном приближении хаотических фаз (см. [11]). Результаты расчета  $\gamma(\epsilon, m)$  и  $r(\epsilon, m)$  — действительной части массового оператора (трансформанты Гильберта от  $\gamma(\epsilon, m)$ ) — приведены на рис. 2.

В рамках использованных приближений спектральная интенсивность имеет вид

$$I_p(\epsilon) = I(\epsilon, \omega_p, m) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma(\epsilon, m)}{[\epsilon - (\omega_p - m) - r(\epsilon, m)]^2 + \gamma^2(\epsilon, m)} \tag{54}$$

Численно и аналитически доказано, что она удовлетворяет правилу сумм

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon I(\epsilon, \omega_p, m) = 1$$

для произвольных  $\omega_p$  и  $m$ . Функция распределения

$$n_k = cf_k = cf(\omega_k, m), \quad f(\omega_k, m) = \int_{-\infty}^0 I(\epsilon, \omega_k, m) d\epsilon \tag{55}$$

имеет скачок при  $\omega_k = m$  (рис. 3). Уравнение для химического потенциала (30) с функцией распределения (55) приводится к виду

$$\frac{n}{2-n} = \int_{-1}^1 \rho(\omega) f(\omega, m) d\omega. \tag{56}$$

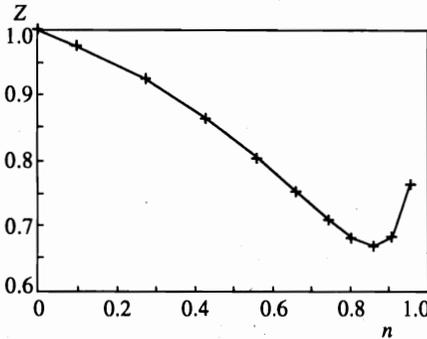


Рис. 4

Рис. 4. Зависимость величины скачка на фермиевской поверхности от электронной концентрации  $n$

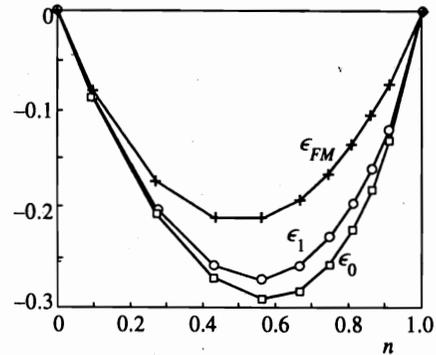


Рис. 5

Рис. 5. Энергии насыщенного ферромагнитного состояния,  $\epsilon_{FM}(n)$ , нормального состояния в нулевом приближении,  $\epsilon_0(n)$ , и в первом борновском приближении,  $\epsilon_1(n)$

Из (56) получаем с большой степенью точности, что химический потенциал, вычисленный в первом борновском приближении, не отличается от  $m$ . Зависимость величины скачка  $Z(n)$  от электронной концентрации  $n$  представлена на рис. 4. Энергии насыщенного ферромагнитного состояния,  $\epsilon_{FM}(n)$ , а также  $N$ -состояния в нулевом приближении,  $\epsilon_0(n)$ , и в первом борновском приближении,  $\epsilon_1(n)$ , приведены на рис. 5. Из него следует, что кинематические корреляции электронов в  $N$ -состоянии хотя и повышают энергию системы по сравнению с нулевым приближением, тем не менее оставляют энергетическую выгоду  $N$ -состояния.

Обсудим спиновую структуру полученного состояния. Спиновая изотропность, характерная для синглетного состояния (346), сохраняется в использованном приближении (41). Спиновая корреляционная функция для ближайших соседей (в первой координационной сфере) определяется соотношением

$$C_1 = \frac{1}{2N} \sum_q \gamma_q \langle S_q^+ S_{-q}^- \rangle. \tag{57}$$

В приближении (41) имеем

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{cA}{2N} \sum_q \gamma_q \frac{1}{N} \sum_p f_p^0 (1 - f_{p+q}^0) = \\ &= \frac{cA}{2N} \sum_p \theta(m - \omega_p) \frac{1}{N} \sum_k \gamma_{k-p} \theta(\omega_k - m). \end{aligned} \tag{58}$$

Для квадратной и кубической решеток имеет место известный симметричный эффект «расщепления»  $\gamma_{k-p}$ , т. е.

$$C_1 = \frac{cA}{2N} \sum_p [\theta(m - \omega_p) \gamma_p] \frac{1}{N} \sum_k \gamma_k \theta(\omega_k - m) =$$

$$= \frac{cA}{2} \left( \int_{-1}^m \rho(\omega)\omega d\omega \right) \left( \int_m^1 \rho(\omega')\omega' d\omega' \right) = -\frac{1}{2} \frac{v^2(m)}{1-g^2(m)}. \quad (60)$$

Используя соотношения (33), окончательно получаем

$$C_1 = -\frac{1}{8} \frac{\epsilon_0^2(n)}{1-n}. \quad (61)$$

Например, для прямоугольной плотности состояний  $\rho(\omega) = 1/2$  энергия  $\epsilon_0(n) = -n(1-n)/(1-n/2)$ , и тогда

$$C_1(n) = -\frac{1}{8} \frac{n^2(1-n)}{(1-n/2)^2}.$$

В рассматриваемой модели корреляции обусловлены только перескоками электронов на соседние пустые узлы и, естественно,  $C_1(n) \rightarrow 0$  при  $n \rightarrow 1$ .

Таким образом, описанное  $N$ -состояние является синглетным с нетривиальной изотропной спиновой корреляционной функцией.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленный в настоящей работе аналитический и численный анализ модели Хаббарда в предельном случае бесконечного отталкивания на одном узле ( $U = \infty$ ) показывает, что свойства электронной системы в качественном отношении остаются такими же, как и у нормального металла с электрон-электронным взаимодействием. На наш взгляд, важен тот факт, что кинематические электронные корреляции сохраняют фермиевскую поверхность, оставляя свой «след» в виде скачка Мигдала у функции распределения. Хотя этот результат получен в рамках первого борновского приближения, есть основания считать, что он принципиально не изменится и при дальнейших итерациях, так как затухание (мнимая часть массового оператора) всегда обращается в нуль на фермиевской поверхности, т. е. при значении спектральной переменной  $E = 0$ .

В результате численных расчетов показано, что основным является нормальное (немагнитное) синглетное состояние. Главная причина этого — уменьшение химического потенциала по сравнению с насыщенным ферромагнитным состоянием, о чем свидетельствует уже нулевое приближение. Рассмотрение проводилось в термодинамическом пределе, и поэтому тонкий квантовомеханический эффект, описываемый теоремой Нагаока [13] об основном ферромагнитном состоянии при наличии одной дырки, в этом пределе исчезает. Уместно также сослаться на работу [14], в которой утверждается, что при наличии двух дырок ферромагнитное состояние не является основным.

В модели с  $U = \infty$  мы рассмотрели только  $N$ -состояние в качестве главного претендента на основное состояние системы. При этом состояние с электронной концентрацией  $n = 1$  является «выколотой» точкой с нулевой энергией и с большой степенью вырождения. При конечных, но больших значениях кулоновского отталкивания ( $U \gg t$ ) вырождение снимается за счет антиферромагнитных обменных взаимодействий  $J \approx t^2/U$  с возникновением дальнего антиферромагнитного порядка при малых дырочных концентрациях [9]. Однако при увеличении концентрации дырок дальний

антиферромагнитный порядок исчезает и система должна перейти в нормальное (металлическое) состояние описанного выше типа.

Авторы благодарны В. В. Валькову, С. Г. Овчинникову и А. Л. Панتيкиорову за полезные дискуссии. Работа выполнена при финансовой поддержке Красноярского краевого фонда науки (грант № 7F0179).

## Литература

1. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963); **277**, 237 (1964); **281**, 401 (1964).
2. А. Б. Мигдал, *Качественные методы в квантовой теории*, Наука, Москва (1975).
3. P. Anderson, Phys. Rev. Lett. **64**, 1839 (1990).
4. F. Haldane, J. Phys. C **14**, 2585 (1981).
5. С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, Москва (1975).
6. Е. В. Кузьмин, ФММ **81**(5), 33 (1996).
7. Е. В. Кузьмин, ФТТ **39**(2), 193 (1997).
8. N. M. Plakida, V. S. Oudovenko, and V. Yu. Yushankhai, Phys. Rev. B **50**, 6431 (1994).
9. Ю. А. Изюмов, УФН **167**, 465 (1997).
10. J. Hubbard and K. P. Pain, J. Phys. C Ser. 2 **1**, 1650 (1968).
11. Д. Пайнс, Ф. Нозьер, *Теория квантовых жидкостей*, Мир, Москва (1967).
12. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика*, ч. 2, Наука, Москва (1978).
13. Y. Nagaoka, Phys. Rev **147**, 392 (1966).
14. B. To'th, Lett. Math. Phys. **22**, 321 (1991).