

ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ–ИЗОЛЯТОР В ПРИСУТСТВИИ СИНГУЛЯРНОСТЕЙ ВАН ХОВА ДЛЯ БИПАРТИТНЫХ РЕШЕТОК

П. А. Игошев^{a,b}, В. Ю. Ирхин^{a}*

^a *Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук
620108, Екатеринбург, Россия*

^b *Уральский федеральный университет
620002, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 14 января 2019 г.,
после переработки 25 января 2019 г.
Принята к публикации 25 января 2019 г.

Рассмотрена проблема фазовой диаграммы основного состояния для $t-t'$ -модели Хаббарда при половинном заполнении зоны. В рамках аналитического разложения по интегралу переноса t' и прямой антиферромагнитной щели Δ получен критерий перехода металл–изолятор. В случае квадратной решетки существует интервал значений t' , для которых переход металл–изолятор является переходом первого рода, что связано с наличием сингулярности Ван Хова. Для простой и объемноцентрированной кубических решеток переход из изоляторного антиферромагнитного состояния происходит в фазу антиферромагнитного металла и является переходом второго рода; за ним следует переход в парамагнитный металл.

DOI: 10.1134/S0044451019060117

1. ВВЕДЕНИЕ

Переход металл–изолятор (metal–insulator transition, MIT), в системах взаимодействующих электронов может быть реализован в рамках двух сценариев [1, 2]: моттовский переход (для систем с сильными корреляциями при высоких температурах) и слэтеровский сценарий (реализуется для зонного антиферромагнетика при низких температурах). Теоретическая проблема определения сценария перехода металл–изолятор для той или иной системы является сложной и до сих пор окончательно не решенной проблемой.

Присутствие сингулярностей Ван Хова в плотности электронных состояний вблизи поверхности Ферми может существенно изменить физические свойства, в частности термодинамику фазового перехода [3–7].

В данной работе мы учтем формирование антиферромагнитного (АФМ) состояния в рамках модели Хаббарда при половинном заполнении зоны. В этом случае в приближении ближайших соседей, ко-

гда электронный спектр $t_{\mathbf{k}}$ удовлетворяет условию нестинга $t_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -t_{\mathbf{k}}$ (\mathbf{Q} — вектор АФМ-структуры), АФМ-щель в электронном спектре, а следовательно, изоляторное состояние, возникает при сколь угодно малых значениях параметра кулоновского взаимодействия U . Однако при наличии переноса между вторыми соседями с характерной энергией D' неустойчивость парамагнитного металлического состояния возникает при конечном значении U . В главном логарифмическом приближении для критического значения имеем

$$\frac{1}{U_{MIT}} = \begin{cases} \rho(0) \ln \left(\frac{D}{D'} \right), & \rho(E) \sim \rho(0), \\ \frac{a}{2} \ln^2 \left(\frac{D}{D'} \right), & \rho(E) \sim a \ln \left(\frac{D}{|E|} \right), \\ \frac{a'}{3} \ln^3 \left(\frac{D}{D'} \right), & \rho(E) \sim a' \ln^2 \left(\frac{D}{|E|} \right) \end{cases} \quad (1)$$

соответственно для трех бипартитных решеток: простой кубической (ПК), квадратной и объемноцентрированной кубической (ОЦК). Здесь D — полуширина зоны, $\rho(E)$ — затравочная плотность состояний вблизи уровня Ферми для электронного

* E-mail: valentin.irkhin@imp.uran.ru

спектра в приближении ближайших соседей, a и a' — положительные коэффициенты при сингулярных вкладах в $\rho(E)$. Таким образом, наличие этих вкладов приводит к существенному изменению зависимости U_{MIT} от t' .

Конкуренция изоляторного АФМ-состояния с парамагнитным дает фазовую границу перехода металл–изолятор первого рода [8]. Однако учет переноса между вторыми соседями приводит к появлению фазы АФМ-металла, которая может быть более энергетически выгодной, чем парамагнитный металл.

Ранее выполненные расчеты [9, 10] показали, что слэтеровский сценарий перехода металл–изолятор доминирует над моттовским сценарием перехода в парамагнитной фазе [1, 11], а геометрия решетки играет существенную роль для фазовой диаграммы. В частности, наличие сингулярностей Ван Хофа в центре зоны может привести к неаналитическим зависимостям энергии системы в парамагнитном (и АФМ-) состояниях соответственно от D' и от величины АФМ-щели. Как показывают численные расчеты для квадратной решетки [9, 12–14], для нее действительно возможен переход первого рода. Однако неточность и неполное совпадение результатов этих расчетов указывают на необходимость аналитического исследования, которое и будет выполнено в данной работе как для квадратной, так и для трехмерных решеток.

2. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СОСТОЯНИИ АФМ-ИЗОЛЯТОРА

В рамках модели Хаббарда,

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (2)$$

учтем возможность АФМ-порядка $m_{iz} = m \exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i)$ с волновым вектором \mathbf{Q} , где m — амплитуда намагниченности (z — ось квантования). Мы используем обобщенное приближение Хартри–Фока $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_{HF}$, где

$$\mathcal{H}_{HF} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[\left(t_{\mathbf{k}} + U \frac{n}{2} \right) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - U m \sigma c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} \right] + UN \left[m^2 - \frac{n^2}{4} \right], \quad (3)$$

причем $t_{\mathbf{k}}(\tau) = -(\sum_i' -\tau \sum_i'') \exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_i)$ — затравочный электронный спектр, \mathbf{R}_i — положение узла i относительно нулевого, сумма со штрихом идет

по ближайшим соседям (интеграл t принимается за единицу), сумма с двумя штрихами — по следующим за ближайшими соседями (интеграл $t' = \tau t = \tau$), n — число электронов на узел. Электронный спектр для этого гамильтониана имеет вид

$$E_\nu(\mathbf{k}) = e_{\mathbf{k}\sigma} + U \frac{n}{2} + (-1)^\nu \sqrt{e_{\mathbf{k}\sigma}^2 + \Delta^2}, \quad \nu = 1, 2, \quad (4)$$

$\Delta = Um$ — прямая АФМ-щель, $e_{\mathbf{k}(s,a)} = (t_{\mathbf{k}} \pm t_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})/2$. Как обсуждалось во Введении, при наличии нестинга переход металл–изолятор происходит при малых U . В этом случае приближение среднего поля вполне применимо, поскольку выполняется условие $U_{MIT} \ll D$, где критическое значение U_{MIT} определяется выражением (1). Используемый в работах [9, 10] метод вспомогательных бозонов [15, 16], учитывающий корреляции и применимый вплоть до больших U , в рассматриваемой ситуации приводит лишь к количественным перенормировкам. Уравнения среднего поля имеют вид

$$n = \frac{1}{N} \sum_{\nu\mathbf{k}} f[E_\nu(\mathbf{k})], \quad (5)$$

$$m = -\frac{\Delta}{2N} \sum_{\nu\mathbf{k}} \frac{(-1)^\nu}{\sqrt{e_{\mathbf{k}\sigma}^2 + \Delta^2}} f[E_\nu(\mathbf{k})], \quad (6)$$

где

$$f(E) = \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{T}\right) \right]^{-1}$$

— функция Ферми, причем уровень Ферми E_F выбирается так, чтобы выполнялось условие $n = 1$.

Рассмотрим свойства основного состояния (температура $T = 0$). Предположим сначала, что мы имеем дело с изоляторной фазой, когда заполнена только нижняя ($\nu = 1$) АФМ-подзона:

$$\mathcal{F}_{AFI}(\Delta) = \frac{U}{4} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{e_{\mathbf{k}\sigma}^2 + \Delta^2} + \frac{\Delta^2}{U}. \quad (7)$$

Величина Δ удовлетворяет уравнению $\partial \mathcal{F}_{AFI}(\Delta) / \partial \Delta = 0$. При этом вся зависимость от U (за исключением постоянного члена $U/4$) происходит через Δ .

Бипартитные решетки обладают общей особенностью: существует такой вектор \mathbf{Q} , что решетка разбивается на две подрешетки и $\exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}) = +1$ (-1) для вектора \mathbf{R} , принадлежащего первой (второй) подрешетке. Фактически вектор \mathbf{Q} является вектором обратной решетки для каждой из этих подрешеток. В этом случае $e_{\mathbf{k}\sigma}$ не зависит от τ и совпадает с $t_{\mathbf{k}}$ при $\tau = 0$ (постоянная решетки принимается за единицу):

$$e_{\mathbf{k}\alpha} = \begin{cases} -2(\cos k_x + \cos k_y), & \text{квадратная решетка, } \mathbf{Q} = (\pi, \pi), \\ -2(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z), & \text{ПК-решетка, } \mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi), \\ -8 \cos(k_x/2) \cos(k_y/2) \cos(k_z/2), & \text{ОЦК-решетка, } \mathbf{Q} = (2\pi, 0, 0), \end{cases} \quad (8)$$

и

$$e_{\mathbf{k}s} = \begin{cases} 4\tau \cos k_x \cos k_y, & \text{квадратная решетка, } \mathbf{Q} = (\pi, \pi), \\ 4\tau(\cos k_y \cos k_z + \cos k_z \cos k_x + \cos k_x \cos k_y), & \text{ПК-решетка, } \mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi), \\ 2\tau(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z), & \text{ОЦК-решетка, } \mathbf{Q} = (2\pi, 0, 0). \end{cases} \quad (9)$$

В результате энергия изоляторной АФМ-фазы не зависит от τ .

Изоляторная АФМ-фаза конкурирует с металлическими фазами — парамагнитной и АФМ. В отличие от свободной энергии изоляторной АФМ-фазы, свободная энергия парамагнитной фазы существенно зависит от τ :

$$\mathcal{F}_{PM}(\tau) = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} E_{PM}(\mathbf{k}, \tau) \times \times \theta(E_F - E_{PM}(\mathbf{k}, \tau)) - \frac{U}{4}, \quad (10)$$

где $E_{PM}(\mathbf{k}, \tau) = t_{\mathbf{k}}(\tau) + U/2$, а уровень Ферми E_F удовлетворяет уравнению

$$\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \theta(E_F - E_{PM}(\mathbf{k}, \tau)) = 1, \quad (11)$$

где $\theta(x)$ — ступенчатая функция Хевисайда. Как и выше, вся зависимость $\mathcal{F}_{PM}(\tau)$ от U , за исключением члена $U/4$, происходит через E_F . Следовательно, равенство свободных энергий парамагнитной и изоляторной АФМ-фаз,

$$\mathcal{F}_{PM}(\tau) = \mathcal{F}_{AFI}(\Delta), \quad (12)$$

дает уравнение в переменных τ и Δ для фазовой границы, на которой происходит переход первого рода. В дальнейшем удобно отсчитывать энергию от $\mathcal{F}_0 \equiv \mathcal{F}_{PM}(0) = \mathcal{F}_{AFI}(0)$:

$$\delta\mathcal{F}_{PM}(\tau) \equiv \mathcal{F}_{PM}(\tau) - \mathcal{F}_0,$$

$$\delta\mathcal{F}_{AFI}(\Delta) \equiv \mathcal{F}_{AFI}(\Delta) - \mathcal{F}_0.$$

Удобно переписать суммы по \mathbf{k} через плотность состояний

$$\rho(\varepsilon, \tau) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - t_{\mathbf{k}}(\tau)). \quad (13)$$

Запишем свободную энергию АФМ-изолятора (7) в единицах D :

$$\delta\mathcal{F}_{AFI}(\Delta) = \Delta^2 \left[\frac{1}{U} - \frac{2}{D} \mathcal{G} \left(\frac{\Delta}{D} \right) \right], \quad (14)$$

где

$$\mathcal{G}(d) = \int_0^1 d\varepsilon \frac{\rho_D(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon^2 + d^2 + \varepsilon}}, \quad (15)$$

$\varepsilon = \varepsilon/D$, $\rho_D(\varepsilon) = D\rho(D\varepsilon, 0)$. Из условия минимума величины $\delta\mathcal{F}_{AFI}$ получим

$$\frac{D}{U} = 2\mathcal{G} \left(\frac{\Delta}{D} \right) + \frac{\Delta}{D} \mathcal{G}' \left(\frac{\Delta}{D} \right), \quad (16)$$

$$\delta\mathcal{F}_{AFI}(\Delta) = \frac{\Delta^3}{D^2} \mathcal{G}' \left(\frac{\Delta}{D} \right). \quad (17)$$

Для малого значения U важно получить асимптотику $\mathcal{G}(d)$ при малых d . Она определяется поведением плотности состояний при $\tau = 0$ в окрестности центра зоны $\varepsilon = 0$. Асимптотика $\mathcal{G}(d)$ в зависимости от поведения плотности состояния в окрестности центра зоны получена в Приложении В. В общем случае имеем

$$\mathcal{G}(d) = a_0 + a_1 \ln \left(\frac{2}{d} \right) + a_2 \ln^2 \left(\frac{2}{d} \right) + a_3 \ln^3 \left(\frac{2}{d} \right). \quad (18)$$

Тогда

$$-\frac{\Delta}{D} \mathcal{G}' \left(\frac{\Delta}{D} \right) = a_1 + 2a_2 \ln \left(\frac{2D}{\Delta} \right) + 3a_3 \ln^2 \left(\frac{2D}{\Delta} \right).$$

Используя соотношения (16) и (17), получим связь U и Δ :

$$U = D \left[2a_0 - a_1 + 2(a_1 - a_2) \ln \left(\frac{2D}{\Delta} \right) + (2a_2 - 3a_3) \ln^2 \left(\frac{2D}{\Delta} \right) + 2a_3 \ln^3 \left(\frac{2D}{\Delta} \right) \right]^{-1}, \quad (19)$$

$$\delta\mathcal{F}_{AFI}(\Delta) = -\frac{\Delta^2}{D} \left[a_1 + 2a_2 \ln \left(\frac{2D}{\Delta} \right) + 3a_3 \ln^2 \left(\frac{2D}{\Delta} \right) \right]. \quad (20)$$

Интересно, что свободная энергия АФМ-изолятора не зависит от постоянного вклада в $\mathcal{G}(d)$ (пропорционального a_0); значения энергии, удаленные от $\epsilon = 0$, дают вклад только в a_0 . В частном случае плотности состояний без особенностей имеем

$$U = \left[\rho(0,0) \ln \left(\frac{2D}{\Delta} \right) + \frac{2\delta\mathcal{G}}{D} \right]^{-1}, \quad (21)$$

$$\delta\mathcal{F}_{AFI}(\Delta) = -\Delta^2 \rho(0,0)/2, \quad (22)$$

где постоянная $\delta\mathcal{G}$ определяется плотностью состояний во всех точках зоны (см. ниже уравнение (64)).

3. ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ–ИЗОЛЯТОР В АФМ-СОСТОЯНИИ

Параметр Δ имеет смысл прямой щели в спектре. При малом τ АФМ-состояние имеет, вообще говоря, непрямую щель между нижней и верхней АФМ-подзонами, которая закрывается при увеличении τ — система переходит в металлическое АФМ-состояние.

Квадратная решетка. Выражение для

$$E_{1,max} \equiv \max_{\mathbf{k}} E_1(\mathbf{k}) = \max \left[-\Delta, -4\tau \sqrt{\frac{1-2\tau}{1+2\tau}}, 4\tau - \sqrt{16 + \Delta^2} \right]$$

существенно зависит от параметров τ и Δ (см. области реализации максимума на фазовой диаграмме в переменных $\tau - \Delta$ на рис. 1а), а выражение для

$$E_{2,min} \equiv \min_{\mathbf{k}} E_2(\mathbf{k}) = -4\tau + \Delta$$

справедливо при любых параметрах τ, Δ . Условие $E_{1,max} < E_{2,min}$ — условие реализации изоляторного состояния. На рис. 1а также показана соответствующая линия перехода металл–изолятор:

$$\Delta_{MIT}^{sq}(\tau) = \begin{cases} 2\tau, & \tau < 1/\sqrt{2}, \\ 4\tau - \tau^{-1}, & \tau > 1/\sqrt{2}. \end{cases} \quad (23)$$

ПК-решетка. Анализ показывает, что

$$E_{1,max} = \max \left[-\Delta, 12\tau - \sqrt{36 + \Delta^2} \right],$$

тогда как

$$E_{2,min} = -4\tau + \Delta.$$

Сравнение первых двух значений с $E_{2,min}$ дает границу перехода металл–изолятор (рис. 2а):

$$\Delta_{MIT}^{sc}(\tau) = \begin{cases} 2\tau, & \tau < \sqrt{3}/4, \\ 8\tau - 9\tau^{-1}/8, & \tau > \sqrt{3}/4. \end{cases} \quad (24)$$

ОЦК-решетка. Анализ показывает, что максимум достигается при двух значениях:

$$E_{1,max} = \max \left[12\tau - \sqrt{64 + \Delta^2}, 8\tau - \Delta \right],$$

$$E_{2,min} = +\Delta.$$

Фазовая диаграмма для ОЦК-решетки представлена на рис. 2б:

$$\Delta_{MIT}^{bcc}(\tau) = \begin{cases} 4\tau, & \tau < 2/\sqrt{3}, \\ 6\tau - 8\tau^{-1}/3, & \tau > 2/\sqrt{3}. \end{cases} \quad (25)$$

Рассмотрим теперь конкуренцию изоляторного АФМ-состояния с металлическими АФМ- и парамагнитным состояниями.

Используя найденное выражение для границы перехода металл–изолятор в АФМ-фазе, $\Delta_{MIT}(\tau)$, вычислим разницу энергий изоляторной АФМ-фазы и парамагнитной (металлической) фазы:

$$\delta\mathcal{F}_{MIT}(\tau) \equiv \delta\mathcal{F}_{AFI}(\Delta_{MIT}(\tau)) - \delta\mathcal{F}_{PM}(\tau). \quad (26)$$

Если $\delta\mathcal{F}_{MIT}(\tau) > 0$, то происходит переход первого рода в парамагнитное металлическое состояние при данном τ , минуя металлическое АФМ-состояние. В противном случае, $\delta\mathcal{F}_{MIT}(\tau) < 0$, переход в парамагнитное состояние происходит через металлическую АФМ-фазу и является переходом второго рода. Свободная энергия парамагнитной фазы в зависимости от τ приведена в Приложении А.

Квадратная решетка. Используя выражения (20), (23) и (67), получаем

$$\delta\mathcal{F}_{AFI}^{sq}(\Delta_{MIT}^{sq}(\tau)) = -B_{sq}(\tau)\tau^2 + o(\tau^3), \quad (27)$$

где

$$B_{sq}(\tau) = \frac{1}{2\pi^2} \left(1 + 2 \ln \frac{16}{\tau} \right). \quad (28)$$

Из уравнения (40) из Приложения А получим

$$\delta\mathcal{F}_{PM}^{sq}(\tau) = -A_{sq}(\omega_F(\tau))\tau^2 + o(\tau^3), \quad (29)$$

где $A_{sq}(\omega_F)$ определено уравнением (41), а ω_F — уровень Ферми, отсчитанный от положения сингулярности Ван Хова (см. Приложение А).

В отличие от несингулярного случая (см. ниже результаты для ПК-решетки), энергии фаз (27) и (29) практически совпадают, что приводит к тому, что область металлической АФМ-фазы оказывается очень узкой. Выше на рис. 1б показана зависимость от τ разницы энергий на границе АФМ-металл–АФМ-изолятор, $\delta\mathcal{F}_{MIT}^{sq}(\tau)$. Видно, что разница

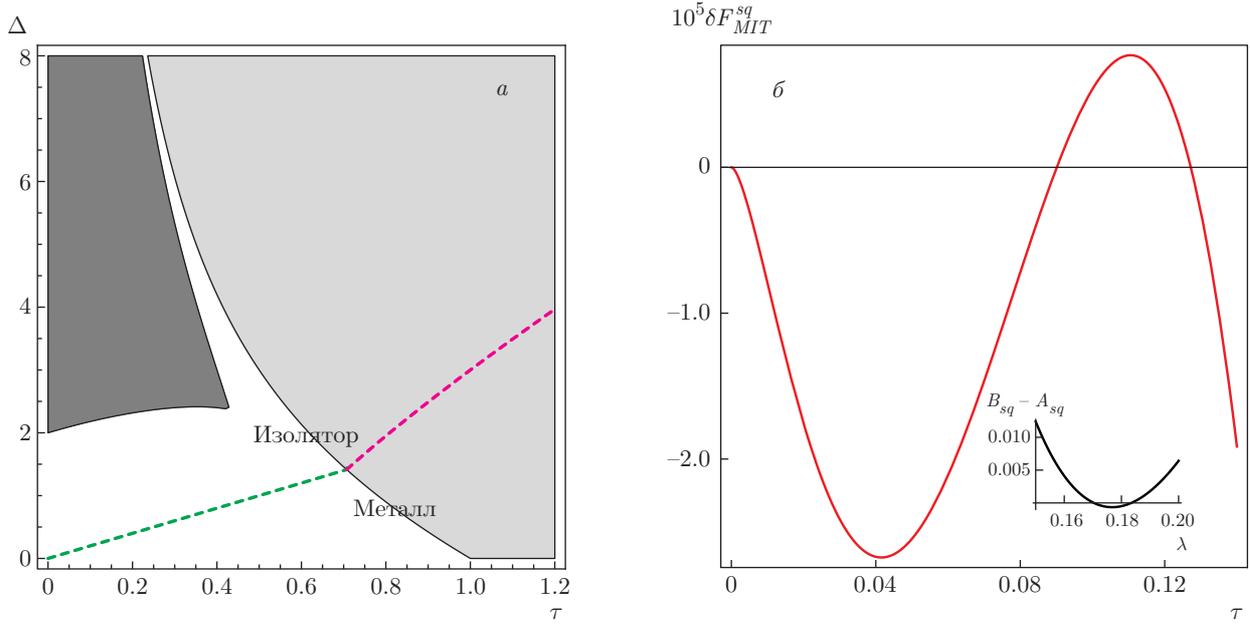


Рис. 1. а) Фазовая диаграмма перехода металл–изолятор в переменных τ – Δ для квадратной решетки. В белой области $E_{1,max} = -\Delta$, в темно-серой области $E_{1,max} = -4\tau - \Delta\sqrt{(1-2\tau)/(1+2\tau)}$, в светло-серой области $E_{1,max} = 4\tau - \sqrt{16 + \Delta^2}$. Точка излома кривой перехода металл–изолятор имеет координаты $\tau = 1/\sqrt{2}$, $\Delta = \sqrt{2}$. б) Зависимость $\delta\mathcal{F}_{MIT}^{sq}(\tau)$, определяемая уравнением (26), для квадратной решетки. На вставке разность $B_{sq}(\lambda) - A_{sq}(\lambda)$ в окрестности минимума при $\lambda = \lambda_0$

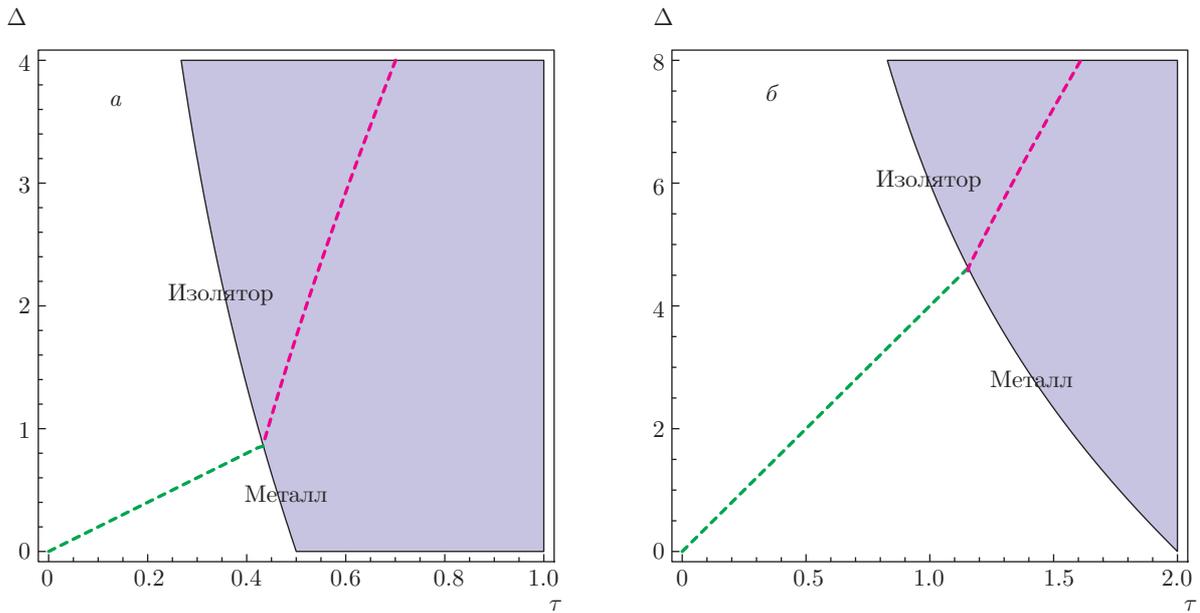


Рис. 2. а) Диаграмма перехода металл–изолятор для ПК-решетки в переменных τ – Δ . Белая область определена уравнением $E_{1,max} = -4\tau + \Delta$; серая область — $E_{1,max} = 12\tau - \sqrt{36 + \Delta^2}$. Линии дают границу между изоляторной и металлической АФМ-фазами. Излом кривой происходит в точке $\tau = \sqrt{3}/4$, $\Delta = \sqrt{3}/2$. б) Диаграмма перехода металл–изолятор для ОЦК-решетки в переменных τ – Δ . Белая область определена уравнением $E_{1,max} = 8\tau - \Delta$; серая область — $E_{1,max} = 12\tau - \sqrt{64 + \Delta^2}$. Линии дают границу между изоляторной и металлической АФМ-фазами. Излом кривой происходит в точке $\tau = 2/\sqrt{3}$, $\Delta = 8/\sqrt{3}$

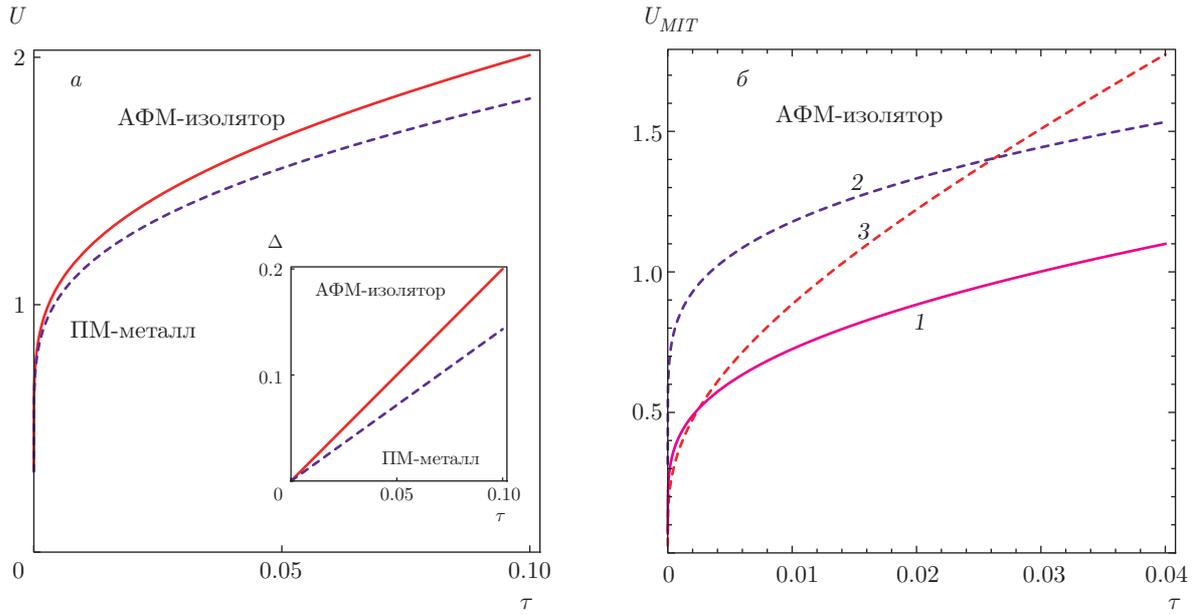


Рис. 3. *а)* Фазовая диаграмма основного состояния модели Хаббарда для ПК-решетки в переменных $\tau-U$. Штриховая кривая показывает неустойчивость изоляторной АФМ-фазы относительно металлической АФМ-фазы, сплошная кривая — относительно парамагнитной (ПМ) металлической фазы (последняя неустойчивость не реализуется). На вставке — фазовая диаграмма в переменных $\tau-\Delta$. *б)* Границы перехода АФМ-металл–АФМ-изолятор для различных решеток: 1 — квадратной по формуле (32); 2 — ПК по формуле (36); 3 — ОЦК по формулам (19), (25) с коэффициентами (74)

очень мала и меняет знак при $\tau \approx 0.08$ (второе изменение знака находится за пределами точности разложения). Причиной этого является наличие сингулярностей Ван Хова в электронном спектре: разложение энергии фаз (парамагнитная фаза, уравнение (29) или изоляторная АФМ-фаза, уравнение (27)) не имеет простой аналитической формы.

Удобно параметризовать зависимость на границе через $\lambda = (1 + \ln(16/\omega_F))^{-1}$:

$$A_{sq}(\omega_F(\lambda)) = \bar{A}_{sq} - \frac{32}{\pi^2}\lambda + \frac{16}{\pi^2}\lambda^2, \quad (30)$$

$$B_{sq}(\tau(\lambda)) = \frac{1}{\pi^2} \left[\ln(8\lambda) - \frac{1}{2} + \lambda^{-1} \right], \quad (31)$$

где постоянная \bar{A}_{sq} определена в Приложении А. Чтобы лучше понять причины появления узкой области, сравним разность функций $B_{sq}(\tau(\lambda)) - A_{sq}(\omega_F(\lambda))$, определяющую род перехода при малых τ (см. вставку к рис. 1б). Минимум функции $B_{sq}(\tau(\lambda)) - A_{sq}(\omega_F(\lambda))$ достигается при малых $\lambda_0 = 1/(4\sqrt{2})$. Этому значению минимума соответствует $\tau_0 = 0.1075$,

$$A_{sq}(\lambda_0) = 0.558261, \quad B_{sq}(\lambda_0) = 0.557614.$$

Видно, что за исключением узкой окрестности λ_0 выполняется неравенство $B_{sq}(\lambda) > A_{sq}(\lambda)$.

При малых τ изоляторная фаза выигрывает у парамагнитной фазы из-за логарифмического вклада в энергию, однако при увеличении Δ энергии фаз пересекаются в двух точках. Отметим, что увеличение τ приводит к неприменимости рассмотренных выше разложений, что требует непосредственного численного решения уравнения (12).

Используя формулу (19), получим зависимость критического значения взаимодействия на границе перехода металл–изолятор:

$$U_{MIT}^{sq}(\tau) = 4\pi^2 \left[\ln^2 \left(\frac{16}{\tau} \right) + \frac{\pi^2}{6} - 4 \ln^2 2 + 2\pi^2 \delta\mathcal{G}_{sq} \right]^{-1}, \quad (32)$$

где постоянная $\delta\mathcal{G}_{sq}$ определена в Приложении В. Эта зависимость показана на рис. 3б.

ПК-решетка. Используя выражения (20), (70), находим

$$\delta\mathcal{F}_{AFI}^{sc}(\Delta_{MIT}^{sc}(\tau)) = -B_{sc}\tau^2 + o(\tau^3), \quad (33)$$

$$\mathcal{F}_{PM}^{sc}(\tau) = -A_{sc}\tau^2 + o(\tau^3), \quad (34)$$

где $B_{sc} = 0.285$, $A_{sc} = 0.145$ (см. Приложение А).

Величина $\Delta_{MIT}^{sc}(\tau)$ определяется уравнением (24). При малых τ имеем

$$\delta\mathcal{F}_{MIT}^{sc}(\tau) = (A_{sc} - B_{sc})\tau^2 + o(\tau^3) = -0.14\tau^2 + o(\tau^3) < 0. \quad (35)$$

Таким образом, при увеличении τ для парамагнитной фазы происходит переход сначала в металлическую АФМ-фазу, а затем в парамагнитную. При малых τ знак $\delta\mathcal{F}_{MIT}^{sc}(\tau)$ не может измениться, поскольку оба вклада, (33) и (34), не имеют особенностей (неаналитичности). Это означает, что род перехода по U не меняется с изменением τ .

Используя уравнение (21), получим

$$U_{MIT}^{sc}(\tau) = 2 \left[\rho_{sc}(0, 0) \ln \left(\frac{6}{\tau} \right) + \frac{\delta\mathcal{G}_{sc}}{3} \right]^{-1}, \quad (36)$$

где $\rho_{sc}(0, 0) = 0.143$, а величины $\delta\mathcal{G}_{sc}$ определены в Приложении В. Полученный результат (см. рис. 3б) отличается от результата работы [8], поскольку учтено, что изоляторное АФМ-состояние фактически конкурирует не с парамагнитным, а с металлическим АФМ-состоянием, что меняет значение Δ_{MIT} на границе (хотя в этом случае Δ все еще линейно зависит от τ , эта зависимость имеет другой коэффициент).

ОЦК-решетка. Численное исследование уравнений (25) и (73) дает, что $\delta\mathcal{F}_{MIT}^{bcc}(\tau) < 0$, так что при увеличении τ реализуется переход второго рода из фазы АФМ-изолятора в фазу АФМ-металла. Зависимость критического значения параметра кулоновского взаимодействия $U_{MIT}^{bcc}(\tau)$ определяется уравнениями (19), (25) и коэффициентами (74) в Приложении В и показана на рис. 3б.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе в рамках слэтеровского сценария исследован переход металл–изолятор в основном состоянии АФМ-металла для различных бипартитных решеток. Показано, что изоляторное АФМ-состояние может быть неустойчиво по отношению к переходу как в металлическое АФМ-состояние, так и в парамагнитное состояние. Для первой неустойчивости найдено уравнение фазовой границы в переменных $t' - \Delta$. С соответствующими корреляционными перенормировками оно применимо и за рамками приближения среднего поля (например, в подходе вспомогательных бозонов Котляра–Рукемпштейна [15, 16]). Как показывают наши вычисления, в области применимости использованного разложения по t' критическое значение U удовлетворяет критерию $U_{MIT} \ll D$, так что приближение Хартри–Фока можно считать достаточно хорошим. С увели-

чением t' становятся важными корреляционные поправки, которые могут быть описаны в методе вспомогательных бозонов (см. численные расчеты [9]).

При половинном заполнении зоны зависимость энергии парамагнитного и изоляторного АФМ-состояний от параметров модели определяется главным образом поведением плотности электронных состояний в окрестности центра зоны. Здесь можно выделить два случая:

а) несингулярная плотность состояний (пример — ПК-решетка), когда эта энергия имеет квадратичную зависимость от параметров t' или АФМ-щели Δ ;

б) сингулярная плотность состояний (примеры — квадратная и ОЦК-решетки), когда указанная квадратичная зависимость приобретает дополнительные логарифмические факторы и, таким образом, является существенно неаналитической.

Заметим, что, в отличие от разложения свободной энергии в теории Ландау, в котором равновесное значение параметра порядка определяется балансом между членами второго и четвертого порядков, здесь баланс определяется вкладами в энергию, содержащими логарифмические множители, и устанавливается в области намного меньших параметров. При этом коэффициенты в разложении свободной энергии определяются коэффициентами при сингулярных вкладах в плотность состояний. Подчеркнем, однако, что Δ не является параметром порядка, поскольку критерий перехода из состояния АФМ-изолятора, вообще говоря, не определяется обращением Δ в нуль (в качестве параметра порядка должен выступать спектральный вес квазичастиц в металлическом состоянии).

В качестве применения данной теории мы получили критерий перехода металл–изолятор в АФМ-состоянии для квадратной решетки. Наличие сингулярностей Ван Хофа в электронном спектре приводит к дополнительному сингулярному (логарифмическому) вкладу в энергию АФМ- и ПМ-состояний и вкладу, пропорциональному $\ln^2(t/\Delta)$, в обратное критическое значение U . Нелинейное соотношение между Δ и t' на границе перехода АФМ-изолятор–ПМ-металл, обусловленное сингулярностью, приводит к изменению рода перехода со второго на первый при конечном значении $\tau = t' \simeq 0.08$. Это согласуется с численными результатами [9, 13], которые в приближении Хартри–Фока дают переход первого рода в интервале $0.08 \lesssim t' \lesssim 0.3-0.4$. На границе металл–изолятор в АФМ-состоянии энергия изоляторной АФМ-фазы очень близка к энергии металлической ПМ-фазы.

Результаты по изменению рода перехода с изменением t' достаточно надежны и не связаны со спецификой приближения среднего поля. В частности, возникновение перехода первого рода при $t' \lesssim 0.2$ подтверждается расчетами по методу Монте-Карло [12].

Таким образом, при наличии сингулярностей Ван Хова в плотности электронных состояний может произойти изменение рода перехода, как это имеет место для квадратной решетки. Напротив, в ПК-решетке имеет место переход второго рода из АФМ-изолятора в АФМ-металл. Для ОЦК-решетки, несмотря на наличие сингулярностей Ван Хова, ситуация оказывается похожей: всегда реализуется переход второго рода, поскольку граница устойчивости изоляторной АФМ-фазы по отношению к ПМ-фазе в переменных $t'-\Delta$, хотя и нелинейна (как и для квадратной решетки), не пересекается с линией перехода в АФМ-металл.

Благодарности. Авторы благодарны М. А. Тимиргазину, Ю. Н. Скрыбину и А. О. Анохину за полезные обсуждения.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Федерального агентства научных организаций России (тема «Квант» № АААА-А18-118020190095-4).

Работа подготовлена по итогам XXXVIII Совещания по физике низких температур (НТ-38).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Разложение энергии парамагнетика по параметру τ

Разложим энергию парамагнитной фазы невзаимодействующих электронов по переносу между вторыми соседями при половинном заполнении. С учетом формулы (10) перепишем изменение энергии через плотность состояний:

$$\delta\mathcal{F}_{PM}(\tau) = 2 \left[\int d\varepsilon \varepsilon \theta(E_F(\tau) - \varepsilon) \rho(\varepsilon, \tau) - \int d\varepsilon \varepsilon \theta(-\varepsilon) \rho(\varepsilon, 0) \right]. \quad (37)$$

Вычислим теперь асимптотику $\delta\mathcal{F}_{PM}(\tau)$ при малых τ .

Квадратная решетка. Поскольку при половинном заполнении зоны уровень Ферми приходится на положение сингулярности Ван Хова $\varepsilon_s = -4\tau$,

удобно отсчитывать энергию от этой сингулярности, $\varepsilon = \varepsilon_s + \omega$ и $E_F = \varepsilon_s + \omega_F$. Прямое дифференцирование по параметру τ здесь не проходит, так как плотность состояний сингулярна и получающиеся интегралы расходятся. Используя асимптотику для плотности состояний

$$\rho^{sq}(\omega) \equiv \rho^{sq}(\omega, \tau = 0) = \frac{1}{2\pi^2} \ln \frac{16}{|\omega|} + o(\omega), \quad (38)$$

для ω_F получим следующее уравнение:

$$\omega_F \left(\ln \frac{16}{|\omega_F|} + 1 \right) = 8\tau. \quad (39)$$

Легко видеть, что $\text{sign } \omega_F = \text{sign } \tau$. В нашем случае $\omega_F > 0$.

Перепишем выражение (10) через плотность состояний:

$$\delta\mathcal{F}_{PM}^{sq}(\tau) = -A_{sq}(\omega_F)\tau^2, \quad (40)$$

где

$$A_{sq}(\omega) = \bar{A}_{sq} - \frac{32/\pi^2}{1 + \ln(16/\omega)} + \frac{16/\pi^2}{(1 + \ln(16/\omega))^2}, \quad (41)$$

$$\bar{A}_{sq} = - \int_{\varepsilon_1}^0 \omega \frac{\partial^2 \rho_{sq}(\omega + \varepsilon_s, \tau)}{\partial \tau^2} \Big|_{\tau=0} d\omega - \frac{8}{\pi} = 1.08. \quad (42)$$

ПК-решетка. Дифференцируя уравнение (10) по τ и учитывая зависимость $E_F(\tau)$, определяемую уравнением (11), получим при половинном заполнении $(\partial\mathcal{F}_{PM}^{sc}/\partial\tau)_{\tau=0} = 0$ и

$$A_{sc} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{F}_{PM}^{sc}}{\partial \tau^2} \Big|_{\tau=0} = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial E_F}{\partial \tau} \Big|_{\tau=0} \xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}^2 \right) \delta(E_F - t_{\mathbf{k}}(0)), \quad (43)$$

где введено обозначение $\xi_{\mathbf{k}} = \partial t_{\mathbf{k}}/\partial\tau$. Последнее выражение удобно выразить через парциальные плотности состояний

$$p_n^{sc}(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}^n \delta(\varepsilon - t_{\mathbf{k}}(0)), \quad n = 0, 1, 2, \quad (44)$$

причем $p_0^{sc}(\varepsilon) = \rho^{sc}(\varepsilon)$. Из уравнения (11) получим

$$\frac{\partial E_F}{\partial \tau} \Big|_{\tau=0} = \frac{p_1^{sc}(E_F)}{\rho^{sc}(E_F)}. \quad (45)$$

Тогда окончательно имеем

$$A_{sc} = \frac{(p_1^{sc}(E_F))^2}{\rho^{sc}(E_F)} - p_2^{sc}(E_F). \quad (46)$$

Эти формулы справедливы, когда на уровне Ферми нет сингулярности Ван Хофа. В противоположном случае необходимо выделять сингулярные (логарифмические) вклады в разложении $\delta\mathcal{F}_{PM}$ по малому параметру τ . Вычислим $\rho_n(E_F = 0)$ для ПК-решетки (половинное заполнение зоны):

$$p_n^{sc}(E_F = 0) = \frac{4^n}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} (\cos k_x \cos k_y + \cos k_y \cos k_z + \cos k_x \cos k_z)^n \delta(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z). \quad (47)$$

Вычисление интегралов дает

$$\rho^{sc}(0) = 0.142, \quad p_1^{sc}(0) = -0.353, \\ p_2^{sc}(0) = 1.023, \quad A_{sc} = 0.145.$$

Тогда свободная энергия запишется как

$$\delta\mathcal{F}_{PM}^{sc}(\tau) = -A_{sc}\tau^2 + o(\tau^3). \quad (48)$$

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Асимптотика вкладов $\mathcal{G}(d)$

Рассмотрим разложение величины $\mathcal{G}(d)$ (15) по параметру d до членов порядка d^2 . Прямое разложение знаменателя при $\epsilon > 0$ дает

$$\frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 + d^2} + \epsilon} = \frac{1}{2\epsilon} - \frac{d^2}{8\epsilon^3} + \mathcal{O}(d^4). \quad (49)$$

Подстановка этого разложения в интеграл (15) дает расходимость, если $\rho(\epsilon)$ содержит вклады степеней ϵ меньших, чем 3.

Представим плотность состояний в виде

$$\rho_D(\epsilon) = \rho_D^s(\epsilon) + \delta\rho_D(\epsilon),$$

так что $\int d\epsilon \delta\rho_D(\epsilon)/\epsilon$ сходится. Определим вклады, сингулярные при $d \rightarrow 0$ и регулярные вплоть до членов до d^4 включительно, соответственно $\mathcal{G} = \mathcal{G}_s + \delta\mathcal{G}$, где

$$\begin{pmatrix} \mathcal{G}_s(d) \\ \delta\mathcal{G}(d) \end{pmatrix} = \int_0^1 \begin{pmatrix} \rho_D^s(\epsilon) \\ \delta\rho_D(\epsilon) \end{pmatrix} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + d^2} + \epsilon}. \quad (50)$$

Для вычисления интегралов используем полилогарифмическую функцию:

$$\int_0^1 dx \frac{\ln^n(1/x)}{x+a} = -n! \text{Li}_{n+1}\left(-\frac{1}{a}\right), \quad a > 0. \quad (51)$$

Идея оценки асимптотики интегралов — выбрать функцию, имитирующую критическое поведение знаменателя в областях, дающих наибольший вклад в интеграл. Мы имеем две существенные области: $\epsilon \ll d$ и $\epsilon \gg d$,

$$\sqrt{\epsilon^2 + d^2} + \epsilon \rightarrow 2\epsilon + d. \quad (52)$$

Исследуем сначала сингулярный вклад от двойной логарифмической (dl) особенности $\rho_D^s(\epsilon) = \ln^2(1/\epsilon)$:

$$\mathcal{G}_{dl}(d) \equiv \int_0^1 d\epsilon \frac{\ln^2(1/\epsilon)}{\sqrt{\epsilon^2 + d^2} + \epsilon} \rightarrow \bar{\mathcal{G}}_{dl}(d) \equiv \int_0^1 d\epsilon \frac{\ln^2(1/\epsilon)}{2\epsilon + d}. \quad (53)$$

Используя уравнение (51) и разлагая Li_3 , получим

$$\bar{\mathcal{G}}_{dl}(d) = \frac{1}{6} \left[\ln^3\left(\frac{2}{d}\right) + \pi^2 \ln\left(\frac{2}{d}\right) \right] + o(1). \quad (54)$$

Асимптотика разности выражений в уравнении (53) имеет вид

$$\mathcal{G}_{dl}(d) - \bar{\mathcal{G}}_{dl}(d) = \frac{1}{4} \left[\ln^2\left(\frac{2}{d}\right) + \left(1 - \frac{\pi^2}{3}\right) \ln\left(\frac{2}{d}\right) + \left(\frac{1}{2} + \zeta(3) + \frac{\pi^2}{6}\right) \right] + o(1). \quad (55)$$

Суммируя выражения (54) и (55), находим

$$\mathcal{G}_{dl}(d) = \frac{1}{6} \left[\ln^3\left(\frac{2}{d}\right) + \frac{3}{2} \ln^2\left(\frac{2}{d}\right) + \left(\frac{3}{2} - \pi^2\right) \ln\left(\frac{2}{d}\right) + \frac{3}{2} \left(\frac{1}{2} + \zeta(3) + \frac{\pi^2}{6}\right) \right] + o(1). \quad (56)$$

Рассмотрим теперь сингулярный вклад от логарифмической (l) особенности $\rho_D^s(\epsilon) = \ln(1/\epsilon)$:

$$\mathcal{G}_l(d) = \int_0^1 d\epsilon \frac{\ln(1/\epsilon)}{\sqrt{\epsilon^2 + d^2} + \epsilon} \rightarrow \bar{\mathcal{G}}_l(d) = \int_0^1 d\epsilon \frac{\ln(1/\epsilon)}{2\epsilon + d}. \quad (57)$$

Из уравнения (51) имеем асимптотику

$$\bar{\mathcal{G}}_l(d) = \frac{1}{4} \ln^2\left(\frac{2}{d}\right) + \frac{\pi^2}{12} + o(d). \quad (58)$$

Рассмотрим теперь оценку для

$$\mathcal{G}_l(d) - \bar{\mathcal{G}}_l(d) = \frac{1}{4} \left[\ln\left(\frac{2}{d}\right) + \frac{3 - \pi^2}{6} \right] + o(d). \quad (59)$$

Суммируя оба вклада (58) и (59), получаем

$$\mathcal{G}_l(d) = \frac{1}{4} \left[\ln^2 \left(\frac{2}{d} \right) + \ln \left(\frac{2}{d} \right) + \frac{3 + \pi^2}{6} \right] + o(d). \quad (60)$$

Вклад от постоянной в окрестности $\epsilon = 0$ плотности состояний равен

$$\mathcal{G}_0(d) = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} + \ln \left(\frac{2}{d} \right) \right] + o(1). \quad (61)$$

Наконец, учтем вклад $\delta\mathcal{G}$ от регулярной части плотности состояний $\delta\rho_D(\epsilon) = \rho_D(\epsilon) - \rho_D^s(\epsilon)$. Мы предполагаем, что интеграл $\int_0^1 d\epsilon \delta\rho_D(\epsilon)/\epsilon$ сходится, так как сингулярный вклад ρ_D^s вычтен. Тогда

$$\delta\mathcal{G}(d) = \frac{1}{2} \int_0^1 d\epsilon \frac{\delta\rho_D(\epsilon)}{\epsilon} + o(d). \quad (62)$$

Таким образом, постоянный вклад для каждой решетки можно определить численно:

$$\delta\mathcal{G}(d) = \delta\mathcal{G} + o(d), \quad (63)$$

где

$$\delta\mathcal{G} = \frac{1}{2} \int_0^1 d\epsilon \frac{\delta\rho_D(\epsilon)}{\epsilon}. \quad (64)$$

Результат для $\delta\rho_D(\epsilon)$ не содержит сингулярных вкладов в $\mathcal{G}(d)$.

Применим полученные асимптотики для следующих решеток.

Квадратная решетка. $D = 4$:

$$\rho_D^{sq}(\epsilon) = \frac{2}{\pi^2} \ln \left(\frac{4}{|\epsilon|} \right) + \delta\rho_D^{sq}(\epsilon), \quad (65)$$

$$\mathcal{G}_{sq}(d) = \frac{2}{\pi^2} \mathcal{G}_l(d) + \frac{4 \ln 2}{\pi^2} \mathcal{G}_0(d) + \delta\mathcal{G}_{sq} + o(d), \quad (66)$$

где $\delta\rho_D^{sq}(\epsilon) = o(\epsilon)$, $\delta\mathcal{G}_{sq} = 0.0140268$. Используя выражения (60) и (64), получим коэффициенты для представления (18):

$$\begin{aligned} a_0^{sq} &= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{3 + \pi^2}{6} + 2 \ln 2 \right), \\ a_1^{sq} &= \frac{1 + 4 \ln 2}{2\pi^2}, \\ a_2^{sq} &= \frac{1}{2\pi^2}. \end{aligned} \quad (67)$$

ПК-решетка. $D = 6$. В этом случае плотность состояний аналитична в центре зоны и для нее справедливо выражение

$$\rho_D^{sc}(\epsilon) = \rho_D^{sc}(0) + \delta\rho_D^{sc}(\epsilon), \quad (68)$$

где $\rho_D^{sc}(0) = 0.856038$ [17], $\delta\rho_D^{sc}(\epsilon) = o(\epsilon)$. Тогда, согласно уравнениям (61) и (64),

$$\mathcal{G}_{sc}(d) = \rho_D^{sc}(0) \mathcal{G}_0(d) + \delta\mathcal{G}_{sc} + o(d), \quad (69)$$

и мы получим коэффициенты представления (18):

$$a_0^{sc} = \rho_D(0)/4 + \delta\mathcal{G}_{sc}, \quad (70)$$

$$a_1^{sc} = \rho_D(0)/2, \quad (71)$$

где $\delta\mathcal{G}_{sc} = -0.173$.

ОЦК-решетка. $D = 8$. Из работы [18] получим асимптотику

$$\rho_D^{bcc}(\epsilon) = \frac{2}{\pi^3} \left(\ln^2 \frac{8}{|\epsilon|} - \left(\frac{\pi}{4} \right)^2 \right) + \delta\rho_{bcc}(\epsilon), \quad (72)$$

где $\delta\rho_D^{bcc}(\epsilon) = o(\epsilon)$. Из уравнений (56), (60), (61), (64) получим

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{bcc}(d) &= \frac{2}{\pi^3} \left\{ \mathcal{G}_{al}(d) + 2 \ln(8) \mathcal{G}_l(d) + \right. \\ &\quad \left. + \left[\ln^2 8 - \left(\frac{\pi}{4} \right)^2 \right] \mathcal{G}_0(d) \right\} + \delta\mathcal{G}_{bcc} + o(d), \end{aligned} \quad (73)$$

где $\delta\mathcal{G}_{bcc} = -0.36$, также и коэффициенты представления (18):

$$\begin{aligned} a_0^{bcc} &= \frac{1}{4\pi^3} \left[9 \ln^2 2 + (3 + \pi^2) \ln 2 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} + \zeta(3) + \frac{5\pi^2}{48} \right] + \delta\mathcal{G}_{bcc} = -0.23, \\ a_1^{bcc} &= \frac{1}{\pi^3} \left(9 \ln^2 2 + 3 \ln 2 + \frac{1}{2} - \frac{19\pi^2}{48} \right) = 0.09665, \quad (74) \\ a_2^{bcc} &= \frac{1}{\pi^3} \left(3 \ln 2 + \frac{1}{2} \right) = 0.08319, \\ a_3^{bcc} &= \frac{1}{3\pi^3} = 0.01075. \end{aligned}$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Ф. Мотт, *Переходы металл–изолятор*, Наука, Москва (1979).
2. M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998).
3. T. Das, R. S. Markiewicz, and A. Bansil, *Adv. Phys.* **63**, 151 (2014).
4. П. А. Игошев, А. А. Катанин, В. Ю. Ирхин, *ЖЭТФ* **132**, 1187 (2007).
5. P. A. Igoshev, M. A. Timirgazin, A. A. Katanin, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, *Phys. Rev. B* **81**, 094407 (2010).

6. M. A. Timirgazin, P. A. Igoshev, V. F. Gilmutdinov, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, *J. Phys.: Condens. Matter* **27**, 446002 (2015).
7. П. А. Игошев, Е. Е. Кокорина, И. А. Некрасов, *ФММ* **118**, 219 (2017).
8. M. I. Katsnelson and V. Yu. Irkhin, *J. Phys. C* **17**, 4291 (1984).
9. M. A. Timirgazin, P. A. Igoshev, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, *J. Low. Temp. Phys.* **185**, 651 (2016).
10. M. A. Timirgazin, P. A. Igoshev, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 505601 (2016).
11. W. F. Brinkman and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **2**, 4302 (1970).
12. D. Duffy and A. Moreo, *Phys. Rev. B* **55**, R676 (1997).
13. Z.-Q. Yu and L. Yin, *Phys. Rev. B* **81**, 195122 (2010).
14. I. Yang, E. Lange, and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **61**, 2521 (2000).
15. G. Kotliar and A.E. Ruckenstein, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1362 (1986).
16. R. Fresard and P. Wölfle, *J. Phys.: Cond. Matt.* **4**, 3625 (1992).
17. R. J. Jelitto, *J. Phys. Chem. Sol.* **30**, 609 (1969).
18. S. Katsura and T. Horiguchi, *J. Math. Phys.* **12**, 230 (1971).