

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Модель Хаббарда в режиме сильных корреляций

Ю.А. Изюмов

Дается современное состояние исследований модели Хаббарда — основной модели теории сильно коррелированных электронных систем. Показывается, каким образом в режиме сильных электронных корреляций $U \sim W$ возникают основные корреляционные эффекты: фазовый переход металл–диэлектрик, появление локализованных магнитных моментов, нарушение ферми-жидкостной картины. Излагаются различные подходы в исследовании проблемы, не опирающиеся на теорию возмущений по параметру U/W или W/U . В центре изложения новый метод в теории сильно коррелированных систем с использованием предела бесконечной размерности пространства $d = \infty$. Физические результаты при таком подходе сравниваются с результатами традиционных методов. Дается общая картина поведения сильно коррелированных систем в широком интервале параметров модели U , W и электронной концентрации n .

PACS numbers: 71.27. + a

Содержание

1. Введение (403).
 - 1.1. Гамильтониан модели. 1.2. Пределы слабой и сильной связи. 1.3. Проблема промежуточной связи.
2. Расщепление уравнений движения (406).
 - 2.1. Уравнения движения для запаздывающих функций Грина. 2.2. Приближение "Хаббард-1". 2.3. Приближение "Хаббард-3". 2.4. Анализ простейших приближений.
3. Предел бесконечной размерности пространства (409).
 - 3.1. Модель Хаббарда в пределе $d = \infty$. 3.2. Приближение когерентного потенциала для неупорядоченных систем. 3.3. Сведение модели Хаббарда в пределе $d = \infty$ к однопримесной модели Андерсона. 3.4. Свойства модели Хаббарда в пределе $d = \infty$. 3.5. Нарушение ферми-жидкостного поведения модели.
4. Метод континуального интегрирования (418).
 - 4.1. Статический предел и приближение когерентного потенциала. 4.2. Численный расчет для половинного заполнения.
5. Вариационные методы (420).
 - 5.1. Волновая функция Гутцвиллера. 5.2. Приближение Гутцвиллера.
6. Метод вспомогательных бозонов и фермионов (422).
 - 6.1. X -операторы. 6.2. Представление X -операторов бозонами и фермионами. 6.3. Учет констрейнов.
7. Основные корреляционные эффекты (424).
 - 7.1. Фазовый переход металл–диэлектрик. 7.2. Нарушение ферми-жидкостной картины. 7.3. Кроссовер от коллективизированного магнетизма к магнетизму с локализованными магнитными моментами.
8. Заключение (426).
Список литературы (426).

Ю.А. Изюмов. Институт физики металлов.
Уральское отделение РАН, 620219 Екатеринбург,
ул. С. Ковалевской 18, Тел. (3432) 44-41-93
E-mail: mathphys@ifm.e-burg.su

Статья поступила 4 ноября 1994 г.

1. Введение

1.1. Гамильтониан модели

В начале 70-х годов почти одновременно и независимо появились три работы [1–3], в которых была предложена простая модель металла, ставшая фундаментальной моделью теории сильно коррелированных электронных систем (СКЭС). В этой модели рассматривается единственная невырожденная зона электронов с локальным кулоновским взаимодействием.

Гамильтониан модели содержит всего два параметра: матричный элемент t перескока электрона с узла на соседний узел решетки и параметр U кулоновского отталкивания двух электронов на одном узле. В представлении вторичного квантования он записывается в виде

$$H = t \sum_{i,j,\sigma} C_{i\sigma}^\dagger C_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (1.1)$$

Здесь $C_{i\sigma}^\dagger (C_{i\sigma})$ — ферми-оператор рождения (уничтожения) электрона на узле i со спином σ , а $n_{i\sigma} = C_{i\sigma}^\dagger C_{i\sigma}$ — число электронов на этом узле.

Предложенная в [1–3] модель получила название модели Хаббарда, внесшего фундаментальный вклад в изучение статистической механики этой системы, хотя локальная форма кулоновского взаимодействия впервые введена Андерсоном для примесной модели в металле [4].

Следует также напомнить, что модель Хаббарда является частным случаем полярной модели Шубина–Вонсовского [5], появившейся за тридцать лет до работ [1–3]. В последней, наряду с кулоновским взаимодействием на одном узле, учитывается взаимодействие электронов на соседних узлах.

Простота и достаточность гамильтониана (1.1) сделала модель Хаббарда весьма популярной и эффектив-

ной для описания СКЭС, в которых параметр U кулоновского отталкивания больше или порядка ширины зоны W . Для простой кубической решетки $W = 2zt$, где z — число ближайших соседей.

Модель Хаббарда является основной рабочей моделью в СКЭС-теории. Из реальных объектов она ближе всего к узкозонным переходным металлам и их соединениям. Для этого класса веществ модель Хаббарда является эффективной моделью, позволяющей описывать их магнитные и электрические свойства и связь между ними.

В гамильтониане (1.1), записанном в узельном представлении, диагонален кулоновский член, в представлении Фурье, напротив, диагонален кинетический член, которому отвечает зонный спектр

$$\varepsilon_k = 2t \sum_{\alpha=1}^d \cos k_{\alpha}, \quad (1.2)$$

где d — размерность пространства.

Диагональность того или иного члена в гамильтониане открывает возможность построения теории возмущений в двух предельных случаях: $U \ll W$ и $U \gg W$. Иногда их называют пределами слабой и сильной связи соответственно.

Промежуточный случай

$$U \sim W, \quad (1.3)$$

естественно, наиболее труден, хотя физически и наиболее интересен, поскольку именно в этой области сильнее проявляются корреляционные эффекты, приводящие к фазовому переходу металл–изолятор, появляются локализованные магнитные моменты и возникает сильная связь между поведением носителей заряда и магнитным упорядочением.

В предыдущем обзоре [6] мы детально рассмотрели два предельных случая, используя теорию возмущений по параметру U/W или W/U . В настоящем обзоре мы рассмотрим, главным образом, промежуточный случай, не основываясь на экстраполяции от пределов слабой или сильной связи. Прежде чем перейти к этому случаю непосредственно, кратко напомним основные свойства системы в пределах слабой и сильной связи.

1.2. Пределы слабой и сильной связи

В пределе $U \ll W$ система представляет собой ферми-жидкость, в которой возможно возникновение магнитного дальнего порядка: ферромагнитного (F) или типа волны спиновой плотности (SDW) с волновым вектором Q . Это — режим коллективизированного магнетизма, без локализованных магнитных моментов. В его основе лежит выражение для динамической магнитной восприимчивости в приближении хаотических фаз (RPA) [7], т.е. при учете петлевых диаграмм,

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}{1 - U\chi_0(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (1.4)$$

Здесь

$$\chi_0(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{\omega + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\delta} \quad (1.5)$$

— "затравочная" восприимчивость свободных (зонных) электронов, $f(\varepsilon)$ — фермиевская функция распределения.

Условия расходимости $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ на нулевой частоте определяют границы F-фазы (при $\mathbf{q} = 0$) и SDW-фазы (при $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$). При наличии нестинга расходимость при $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ имеет место при любых U и температура Нееля антиферромагнитного перехода

$$T_N \approx W \exp\left(-\frac{1}{U\rho_0(\mu)}\right), \quad (1.6)$$

где $\rho_0(\mu)$ — плотность состояний на поверхности Ферми (μ — химический потенциал).

Для спектра (1.2) полный нестинг имеется для $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)/a$ при половинном заполнении зоны, т.е. при $n = 1$, где n — число электронов на один узел решетки. При отклонении от половинного заполнения зоны нестинг расстраивается и температура Нееля T_N быстро падает с изменением μ .

Границы ферромагнитной (F) и антиферромагнитной (A) фаз на плоскости (U, n) , следующие из условия расходимости статической магнитной восприимчивости, показаны на рис. 1. Представленная фазовая диаграмма совпадает с той, которая вытекает из приближения среднего поля (MFA) [8]. Вследствие электронно-дырочной симметрии картина оказывается симметричной относительно точки $n = 1$, поэтому в дальнейшем мы будем представлять только отрезок $0 < n < 1$.

Проблема появления локализованных магнитных моментов в модели Хаббарда требует выхода за RPA- и MFA-приближения. В режиме слабой связи она форму-

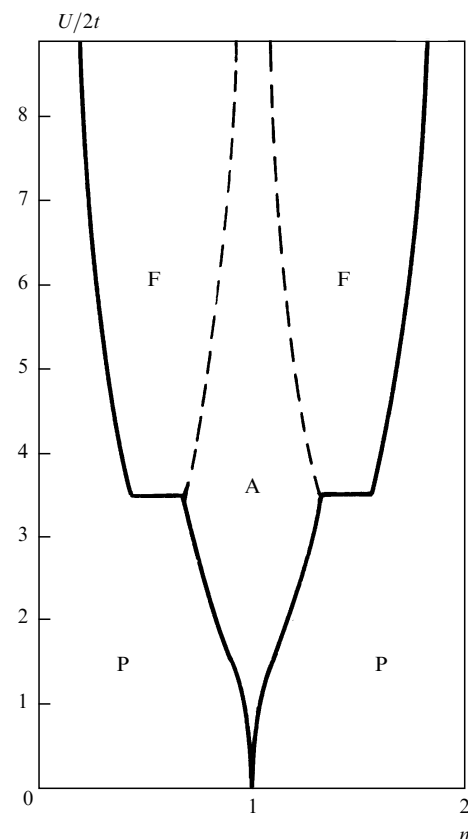


Рис. 1. Магнитная фазовая диаграмма в приближении среднего поля [8] при учете парамагнитной (P), ферромагнитной (F) и антиферромагнитной (A) фаз: сплошная линия — фазовый переход второго рода, штриховая — фазовый переход первого рода

лировалась в терминах концепции локализованных спиновых флуктуаций, интенсивно развивавшейся в 70-х годах. В рамках так называемой самосогласованной теории спиновых флуктуаций (см. книгу [9]) удалось показать, что магнитная восприимчивость, наряду со слабой температурной зависимостью, определяемой формулой (1.4), содержит вклад, пропорциональный $1/T$ (типа Кюри–Вейса), который свидетельствует о возникновении локализованных магнитных моментов.

Противоположный предельный случай $U \gg W$ соответствует сильно коррелированной системе. Используя малый параметр W/U , можно перейти от гамильтониана (1.1) к эффективному гамильтониану так называемой t – J -модели [10], которая описывает движение электронов по решетке при условии, что на одном узле не может быть более одного электрона с эффективным обменным взаимодействием между ближайшими соседями

$$J = 2 \frac{t^2}{U}. \quad (1.7)$$

Для t – J -модели можно построить теорию возмущений по параметру W/U , в которой в качестве нулевого приближения фигурируют одноузельные атомные состояния, а кинетический член и эффективный обмен рассматриваются формально как возмущения [11]. При половинном заполнении ($n = 1$) гамильтониан t – J -модели сводится к обменному гамильтониану гейзенберговской модели.

Таким образом, модель Хаббарда описывает в пределе слабой связи коллективизированный магнетизм, а в пределе сильной связи и $n = 1$ — локализованный магнетизм. В промежуточной области электронных концентраций должен существовать кроссовер от одного режима к другому.

Для t – J -модели может быть построено обобщенное приближение хаотических фаз (CRPA), состоящее в суммировании всех петлевых диаграмм, в которых линии Грина соответствуют не свободным, как в RPA-приближении, а сильно коррелированным электронам. Выражение для динамической магнитной восприимчивости имеет структуру типа (1.4), где, однако, "затравочная" восприимчивость содержит два вклада: один (коллективизированный) дается формулой типа (1.5) с коррелированным электронным спектром, а второй зависит от температуры по закону $1/T$ и учитывает локализованные магнитные моменты.

Кюри-вейсовский вклад резко возрастает при некоторой критической концентрации $n_c \approx 2/3$. Таким образом, вблизи концентрации n_c система совершает кроссовер от коллективизированного магнетизма к магнетизму с дуальным поведением. При $n > n_c$ система как бы является одновременно коллективизированным и локализованным магнетиком. Магнитная фазовая диаграмма при $T = 0$ К в рамках GRPA-приближения показана на рис. 2.

Вблизи точки $n = 1$ температура Нееля [12, 13]

$$T_N = \frac{1}{2} zJ - \frac{1}{4} (1 - n) zt. \quad (1.8)$$

Здесь первый член представляет температуру Кюри для гейзенберговского антиферромагнетика, а второй учитывает движение дырок. Поскольку $J \ll t$, температура Нееля T_N быстро убывает с отклонением от половинного заполнения.

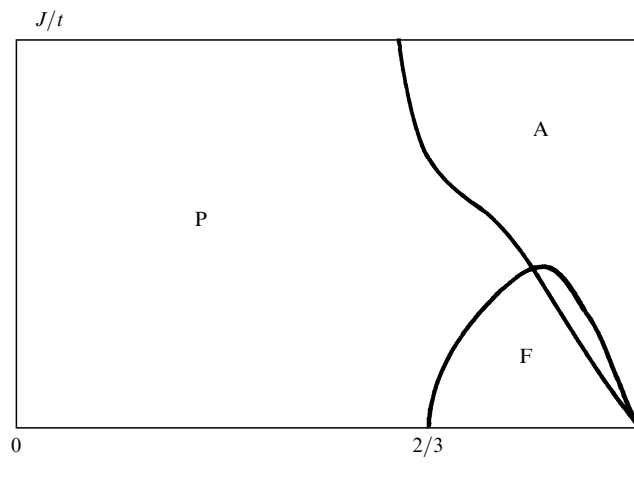


Рис. 2. Магнитная фазовая диаграмма для t – J -модели в рамках GRPA-приближения [11]

1.3. Проблема промежуточной связи

Между двумя пределами $U \ll W$ и $U \gg W$, где модель Хаббарда описывает ферми-жидкость в одном случае и сильно коррелированную систему в другом, существует широкая область промежуточных значений U , в которой поведение системы особенно сложно. Здесь оба члена в гамильтониане (1.1) реализуют противоположные тенденции: кинетический — делокализацию, а кулоновский — локализацию электронных состояний, так что электрические и магнитные свойства системы зависят от тонкого баланса этих тенденций.

В области промежуточных значений U происходит фазовый переход металл–изолятор и система совершает кроссовер от коллективизированного магнетизма к магнетизму с локализованными магнитными моментами. В течение трех десятилетий ведется интенсивное исследование этой проблемы (особенно в связи с высокотемпературной сверхпроводимостью медно-оксидных соединений), но только в самые последние годы стали поступать контуры ее решения. Именно это обстоятельство побудило автора к написанию данного обзора.

Перечислим вначале методы, используемые при анализе промежуточной ситуации (1.3), когда не существует формального малого параметра. Это — расщепление уравнений движения, приближение среднего поля (предел $d = \infty$), представление континуальным интегралом, вариационные методы, метод вспомогательных бозонов и фермионов.

К этому списку следует добавить численные методы, в особенности квантовый метод Монте-Карло (QMC) и точную диагонализацию малых кластеров, а также высокотемпературные разложения. Все они служат контролем для различного вида аналитических приближений.

Хаббард был первым, кто применил метод расщепления запаздывающих функций Грина и показал, что исходная электронная зона благодаря кулоновскому отталкиванию на узле расщепляется на две подзоны, причем нижняя зона отвечает одночастичным состояниям, а верхняя — состояниям с двойками.

Простейшее расщепление, получившее в литературе название "Хаббард-1" [1], соответствует результату Шубина–Вонсовского [5]. Более точное расщепление с использованием так называемой "сплавной аналогии"

(приближение "Хаббард-3" [14]) привело к фазовому переходу металл–изолятор моттовского типа [15] как раз при критическом значении параметра $U_c \sim W$.

Приближения Хаббарда [1, 14] не являются вполне контролируруемыми и страдают существенными недостатками, подробно обсуждаемыми в разделе 3. Однако с формальной точки зрения они весьма результативны и их следует рассматривать как интерполяцию между пределами слабой и сильной связи или между двумя типами электронных состояний в решетке — зонными и атомными.

Существенный прорыв в СКЭС-теории был сделан недавно Метцнером и Фолхартом [16] с помощью рассмотрения предела бесконечной размерности пространства $d = \infty$. Оказалось, что многие приближения, эвристически использованные ранее в СКЭС-теории и в других проблемах теории многих тел, являются точными в пределе $d = \infty$. Именно таким является хорошо известное приближение когерентного потенциала, которое включается составной частью в приближенные методы для модели Хаббарда, основанные на представлении статистической суммы континуальными интегралами [17, 18].

Более того, известное приближение Гутцвиллера [19] в вариационном методе является также точным в пределе $d = \infty$. Оказалось, что в пределе $d = \infty$ модель Хаббарда эквивалентна некоторой вспомогательной однопримесной модели Андерсона и найденное соответствие лежит в основе приближения среднего поля для модели Хаббарда. В рамках этого приближения удается правильно описать фазовый переход металл–диэлектрик и нарушение ферми-жидкостного поведения с ростом параметра U .

Предел бесконечной размерности пространства $d = \infty$ является центральным подходом данного обзора. Мы также рассмотрим последовательно все другие подходы, перечисленные выше. В основу изложения, как видно, положен методологический принцип, поскольку очень важно проанализировать в пределах каждого подхода (ни один из которых не является универсальным) его возможности, а также связь между различными явлениями, такими, например, как состояния электронного спектра и магнитного упорядочения. И только в разделе 7 мы попытаемся обрисовать общую физическую картину поведения модели Хаббарда на основе информации, полученной разными методами.

2. Расщепление уравнений движения

2.1. Уравнения движения для запаздывающих функций Грина

В своих первых исследованиях корреляционных эффектов Хаббард использовал метод двухвременных функций Грина [20, 21], который особенно удобен в тех случаях, когда взаимодействие между частицами велико и нет малого параметра, связанного с этим взаимодействием ($U \sim W$). В такой ситуации часто используют расщепление бесконечной цепочки уравнений для исходной функции Грина, сводя многочастичные функции Грина (или корреляционные функции) к более простым. Эти расщепления обычно имеют эвристический характер и проверяются разумностью физических результатов.

Следуя классическим работам Хаббарда [1, 14], рассмотрим одночастичную запаздывающую функцию Грина электронов

$$G_{ij}^{\sigma}(\omega) = \langle \langle C_{i\sigma} | C_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle_{\omega}. \quad (2.1)$$

Здесь и далее все обозначения стандартные [21]: символ $\langle \langle A | B \rangle \rangle$ — двухвременная функция Грина, построенная на операторах A и B , зависящих от времени t и t' соответственно, индекс ω соответствует фурье-компоненте по переменной $t - t'$.

Дифференцируя по времени t , для фурье-образа функции $\langle \langle A | B \rangle \rangle$ получаем цепочку уравнений, первое из которых имеет вид

$$\omega \langle \langle A | B \rangle \rangle_{\omega} = \langle [A, B] \rangle_{\eta} + \langle \langle [A, H] | B \rangle \rangle_{\omega}. \quad (2.2)$$

Здесь $[A, B]_{\eta} = AB - \eta BA$ (где η может быть равным 1 или -1), $\langle \dots \rangle$ — символ статистического усреднения с гамильтонианом H , $[A, H]$ — коммутатор A и H .

При расщеплении цепочки уравнений необходимо руководствоваться какими-либо физическими соображениями. В условиях $U \sim W$ Хаббард предложил точно учитывать электронные корреляции на одном узле, а корреляции на разных узлах приближенно сводить к одноузельным.

Другая методологическая идея заключается в использовании "сплавной аналогии", а именно, в рассмотрении движения данного электрона по решетке с узла на узел, который может быть либо занят другим электроном (с противоположным спином!), либо свободен, как движение электрона в разупорядоченном сплаве, состоящем из двух сортов атомов a и b . При этом вводится вероятность заполнения n^a и n^b для атомов данного сорта и электронная функция Грина усредняется по всем конфигурациям.

В случае модели Хаббарда следует ввести аналогичные величины:

$$n_{i\sigma}^{\alpha} = \begin{cases} n_{i\sigma}, & \alpha = 1, \\ 1 - n_{i\sigma}, & \alpha = 2, \end{cases} \quad (2.3)$$

где $n_{i\sigma}$ — оператор числа электронов на узле i со спином σ . Эти величины удовлетворяют условиям

$$n_{i\sigma}^{\alpha} n_{i\sigma}^{\beta} = \delta_{\alpha\beta} n_{i\sigma}^{\alpha}, \quad \sum_{\alpha} n_{i\sigma}^{\alpha} = 1. \quad (2.4)$$

С помощью второго из соотношений (2.4) определение функции Грина (2.1) можно представить в форме [14]

$$G_{ij}^{\sigma}(\omega) = \sum_{\alpha} \langle \langle n_{i-\sigma}^{\alpha} C_{i\sigma} | C_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle_{\omega}. \quad (2.5)$$

Мы видим здесь преимущества узельного представления для задачи о решетке с локальным взаимодействием: оно позволяет сразу включать корреляцию электронов с противоположными спинами на узле.

Запишем уравнение движения для каждой из компонент, входящих в (2.5):

$$\begin{aligned} (\omega - \varepsilon_{\alpha}) \langle \langle n_{i-\sigma}^{\alpha} C_{i\sigma} | C_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle_{\omega} &= \\ &= n_{-\sigma}^{\alpha} \left\{ \delta_{ij} + \sum_k t_{ik} \langle \langle C_{k\sigma} | C_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle_{\omega} \right\} + \\ &+ \sum_k t_{ik} \langle \langle (n_{i-\sigma}^{\alpha} - n_{-\sigma}^{\alpha}) C_{i\sigma} | C_{j\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle_{\omega} + \xi_{\alpha} \sum_k t_{ik} \times \end{aligned}$$

$$\times \left\{ \langle \langle C_{i-\sigma}^\dagger C_{k-\sigma} C_{i\sigma} | C_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega + \langle \langle C_{k-\sigma}^\dagger C_{i-\sigma} C_{i\sigma} | C_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega \right\}. \quad (2.6)$$

Здесь ε_x — энергия электрона на одном атоме для двух состояний, т.е. когда там есть электрон (с противоположным спином) и когда он пустой:

$$\varepsilon_+ = U - \mu, \quad \varepsilon_- = -\mu \quad (2.7)$$

(эти энергии отсчитываются от уровня химического потенциала μ), а $\xi_\pm = \pm 1$.

В уравнении (2.6) величина $n_{-\sigma}^x$ представляет собой среднее значение электрона на узле i , т.е. $\langle n_{-\sigma}^x \rangle$. Предполагается, что $\langle n_{-\sigma}^x \rangle$ не зависит от i , т.е. парамагнитное или ферромагнитное состояния. Два последних члена в (2.6) учитывают корреляцию на разных узлах.

Уравнение (2.6) пока точно. Широко используются два приближения, известные в литературе как приближение "Хаббард-1" и "Хаббард-3" (по порядковому номеру работ в серии статей [1, 14]).

2.2. Приближение "Хаббард-1"

Отбрасывая в (2.6) два последних члена, т.е. пренебрегая корреляцией на различных узлах, получаем замкнутое уравнение

$$\langle \langle C_{i\sigma} | C_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega = \frac{1}{F_0^\sigma(\omega)} \left\{ \delta_{ij} + \sum_k t_{ik} \langle \langle C_{k\sigma} | C_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega \right\},$$

имеющее после фурье-преобразования решение

$$G_0^\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{F_0^\sigma(\omega) - \varepsilon_k}, \quad (2.8)$$

где $F_0^\sigma(\omega)$ определяется соотношением

$$\frac{1}{F_0^\sigma(\omega)} = \sum_x \frac{n_{-\sigma}^x}{\omega - \varepsilon_x} = \frac{1 - n_{-\sigma}}{\omega + \mu} + \frac{n_{-\sigma}}{\omega - U + \mu}. \quad (2.9)$$

В выражении (2.8) величина ε_k описывает распространение электрона с узла на узел решетки, $F_0^\sigma(\omega)$ учитывает резонансные свойства атома. Как следует из определения (2.9), первый член описывает резонанс на свободном атомном уровне, а второй член — резонанс на атоме, на котором уже есть электрон.

Относительный вес этих резонансных вкладов определяется вероятностью $n_{-\sigma}$ нахождения электрона на данном узле. Таким образом, приближение "Хаббард-1" (2.8) описывает движение электрона по решетке с некоторым средним распределением всех других электронов на ее узлах. Это — приближение типа среднего поля.

Выражение (2.8) можно представить в виде

$$G_0^\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \frac{P_{1\sigma}(\mathbf{k})}{\omega - E_{1\sigma}(\mathbf{k}) + \mu} + \frac{P_{2\sigma}(\mathbf{k})}{\omega - E_{2\sigma}(\mathbf{k}) + \mu}, \quad (2.10)$$

где

$$E_{1,2\sigma}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left[\varepsilon_{\mathbf{k}} + U \mp \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - 2\varepsilon_{\mathbf{k}}U(1 - 2n_{-\sigma}) + U^2} \right], \quad (2.11)$$

$$P_{1,2\sigma}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left[1 \mp \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - U(1 - 2n_{-\sigma})}{\sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - 2\varepsilon_{\mathbf{k}}U(1 - 2n_{-\sigma}) + U^2}} \right], \quad (2.12)$$

т.е. приближение "Хаббард-1" дает две ветви спектра (хаббардовские подзоны), расщепляющиеся на величину порядка U . Это расщепление остается конечным при любом, даже сколь угодно малом кулоновском взаимодействии, что является существенным недостатком приближения "Хаббард-1". Действительно, при половинном заполнении зоны в парамагнитном состоянии плотность состояний

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi N} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.13)$$

является симметричной функцией. Обе подзоны симметрично раздвинуты относительно уровня Ферми, поэтому система является диэлектриком. Она остается таковой при любом значении параметра U . Таким образом, приближение "Хаббард-1" не описывает фазового перехода металл-диэлектрик. Эти недостатки устранены в другом приближении.

2.3. Приближение "Хаббард-3"

Корреляционные эффекты на различных узлах описываются двумя последними членами уравнения (2.6), которые играют несколько различную роль. По терминологии Хаббарда, они описывают поправки за счет рассеяния на спиновом беспорядке и за счет резонансного уширения, вызванного движением электронов со спином $-\sigma$ (члены с множителем ξ_x в (2.6)).

Рассмотрим вначале поправки за счет рассеяния. Воспользуемся опять вторым из равенств (2.4). Тогда получим выражение

$$\begin{aligned} \langle \langle (n_{i,-\sigma}^x - n_{-\sigma}^x) C_{k\sigma} | C_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega &= \\ &= \sum_\beta \langle \langle (n_{i,-\sigma}^x - n_{-\sigma}^x) n_{k,-\sigma}^\beta C_{k\sigma} | C_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega, \end{aligned}$$

позволяющее учесть одноузельные корреляции. Запишем уравнения движения для функции Грина в правой части этого соотношения. Для $i \neq k$ из него можно получить выражение через функцию Грина, содержащую одноузельные корреляции:

$$\begin{aligned} \langle \langle (n_{i,-\sigma}^x - n_{-\sigma}^x) C_{k\sigma} | C_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega &= \sum_l \left(G_{kl}^{0\sigma} - \frac{G_{ki}^{0\sigma} G_{il}^{0\sigma}}{G_{ii}^{0\sigma}} \right) \times \\ &\times t_{li} \langle \langle (n_{i,-\sigma}^x - n_{-\sigma}^x) C_{i\sigma} | C_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Здесь

$$G_{ij}^0(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)]}{F_0^\sigma(\omega) - \varepsilon_{\mathbf{k}}}$$

— функция Грина приближения "Хаббард-1" в узельном представлении.

С учетом (2.14) поправка за счет рассеяния в уравнении (2.6) приводит к слагаемому

$$\lambda'_\sigma(\omega) \langle \langle (n_{i,-\sigma}^x - n_{-\sigma}^x) C_{i\sigma} | C_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega,$$

где

$$\lambda'_\sigma(\omega) = \sum_{k,l} t_{ik} \left(G_{kl}^{0\sigma} - \frac{G_{ki}^{0\sigma} G_{il}^{0\sigma}}{G_{ii}^{0\sigma}} \right) = F_0^\sigma(\omega) - \frac{1}{G_{ii}^{0\sigma}(\omega)}. \quad (2.15)$$

Аналогичным образом можно обработать и последний (резонансный) вклад в уравнение (2.6). В результате возникает замкнутое уравнение, которое можно записать в виде

$$\begin{aligned} (\omega - \varepsilon_\alpha) \langle \langle n_{i,-\sigma}^\alpha C_{i\sigma} | C_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega = \\ = n_{-\sigma}^\alpha \left\{ \delta_{ij} + \sum_k t_{ik} \langle \langle C_{k\sigma} | C_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega \right\} - \\ - \xi_\alpha n_{-\sigma}^+ \Omega_\sigma(\omega) \langle \langle n_{i,-\sigma}^- C_{i\sigma} | C_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega + \\ + \xi_\alpha n_{-\sigma}^- \Omega_\sigma(\omega) \langle \langle n_{i,-\sigma}^+ C_{i\sigma} | C_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\omega. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Здесь введена величина $\Omega_\sigma(\omega)$, состоящая из трех слагаемых:

$$\Omega_\sigma(\omega) = \Omega'_\sigma(\omega) + \Omega'_{-\sigma}(\omega) + \Omega''_{-\sigma}(\omega), \quad (2.17)$$

причем

$$\Omega''_{-\sigma}(\omega) = -\Omega'_{-\sigma}(\varepsilon_+ + \varepsilon_- - \omega). \quad (2.18)$$

Величина $\Omega'_\sigma(\omega)$ получается из слагаемого $\lambda'_\sigma(\omega)$, определенного в (2.15), при замене

$$F_0^\sigma \rightarrow F^\sigma, \quad G_{ii}^0 \rightarrow G_{ii}, \quad (2.19)$$

где F^σ и G_{ii} находятся самосогласованным образом из решения уравнения (2.16). Таким образом,

$$\Omega'_{-\sigma}(\omega) = F^\sigma(\omega) - \frac{1}{G_{ii}^\sigma(\omega)}, \quad (2.20)$$

где

$$G_{ii}^\sigma(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.21)$$

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{F^\sigma(\omega) - \varepsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (2.22)$$

$$\frac{1}{F^\sigma(\omega)} = \frac{\omega - (n_{-\sigma}^+ \varepsilon_- + n_{-\sigma}^- \varepsilon_+) - \Omega_\sigma(\omega)}{(\omega - \varepsilon_- - n_{-\sigma}^+ \Omega_\sigma)(\omega - \varepsilon_+ - n_{-\sigma}^- \Omega_\sigma) - n_{-\sigma}^+ n_{-\sigma}^- \Omega_\sigma^2}. \quad (2.23)$$

Выражения (2.22), (2.23) и есть приближение "Хаббард-3". При этом функция Ω_σ находится самосогласованным образом из (2.17)–(2.21).

Разумеется, процедура самосогласования, выражающаяся заменой (2.19), не является сколько-нибудь обоснованной, однако она приводит к фазовому переходу металл–диэлектрик. Ниже будет проведено обобщение физических следствий, возникающих в приближении "Хаббард-3", а сейчас мы дадим другую форму полученных уравнений.

Запишем основное выражение (2.22) для функции Грина в привычной форме, вводя собственно энергетическую часть $\Sigma(\omega)$ с помощью соотношения (у всех величин опустим спиновый индекс, имея в виду парамагнитную фазу)

$$F(\omega) \equiv \omega - \Sigma(\omega) + \mu. \quad (2.24)$$

Тогда уравнения (2.20)–(2.22) можно представить в виде

$$G_{ii}^\sigma(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\omega) + \mu}, \quad (2.25)$$

$$\Sigma(\omega) = \mathcal{G}^{-1}(\omega) - G_{ii}^{-1}(\omega). \quad (2.26)$$

Здесь формально введена некоторая вспомогательная функция

$$\mathcal{G}^{-1}(\omega) = \frac{1}{\omega - \Omega'(\omega) + \mu}, \quad (2.27)$$

определяющаяся целиком величиной $\Omega'(\omega)$. Эта величина находится из самосогласованных уравнений (2.20) с учетом (2.23) и (2.17).

Заметим, что такую же форму, как (2.25) и (2.26), имеют уравнения для модели Хаббарда в пределе бесконечной размерности пространства. Приближение "Хаббард-3" приводит к функции $\Sigma(\omega)$, не зависящей от волнового вектора, что в узельном пространстве соответствует локальному виду $\Sigma_{ij} = \delta_{ij} \Sigma$. Именно этот факт строго имеет место в пределе $d = \infty$ (см. раздел 3). По виду функция (2.27) отвечает функции Грина некоторой вспомогательной одноузельной задачи, характеризующейся собственной энергией $\Omega'(\omega)$. В приближении "Хаббард-3" собственная энергия $\Omega'(\omega)$ находится из указанных выше уравнений самосогласования.

Ниже мы увидим, однако, что полная система уравнений (2.25)–(2.27) с учетом (2.23) и (2.20) не полностью соответствует точным уравнениям для модели в пределе $d = \infty$, хотя имеется много общих черт. Поскольку предел $d = \infty$ отвечает приближению среднего поля, можно сказать, что теория [14] является лишь некоторым вариантом теории типа среднего поля. Насколько содержательна теория [14] и каковы недостатки приближения "Хаббард-3", мы увидим ниже.

Хаббард исследовал специальный случай, когда имеется по одному электрону на атом, т.е. случай половинного заполнения ($n = 1$). В парамагнитной фазе $n_\uparrow = n_\downarrow = n/2$ и для модельной плотности состояний

$$\rho_0(\omega) = \frac{1}{\pi W} \sqrt{1 - \left(\frac{\omega}{W/2} \right)^2}, \quad |\omega| < \frac{W}{2}, \quad (2.28)$$

основные уравнения (2.20)–(2.23) могут быть решены аналитически. В частности, величины $G_{ii}(\omega)$ и $\Omega'(\omega)$ могут быть разрешены относительно $F(\omega)$:

$$G_{ii}(\omega) = \frac{1}{\pi W^2} \left[F(\omega) - \sqrt{F(\omega) - \left(\frac{W}{2} \right)^2} \right]. \quad (2.29)$$

Подставляя (2.29) в уравнение (2.20), а затем комбинируя его с уравнением (2.23), мы получаем кубическое уравнение для величины $F(\omega)$. В зависимости от значения параметра W/U существуют области ω , в которых решение $F(\omega)$ имеет либо три вещественных корня, либо один вещественный и два комплексных. В первом случае плотность состояний квазичастиц $\rho(\omega)$ равна нулю, во втором — отлична от нуля (рис. 3).

Численный расчет показывает, что при критическом значении

$$\left(\frac{W}{U} \right)_c = 1,15 \quad (2.30)$$

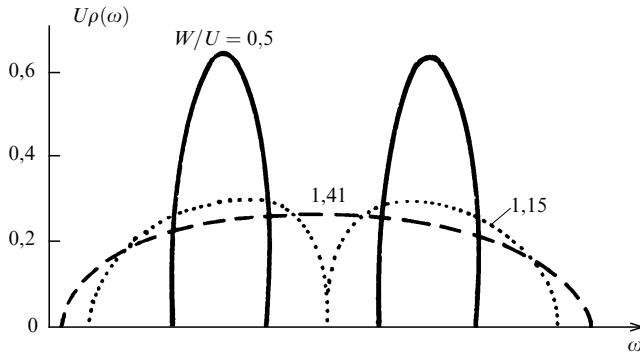


Рис. 3. Плотность состояний квазичастиц для различных значений W/U при $n = 1$ [14]

происходит изменение топологии кривой $\rho(\omega)$ на уровне Ферми $\mu = U/2$, соответствующем фазовому переходу металл–диэлектрик. Этот переход непрерывный. В металлической фазе плотность состояний на уровне Ферми изменяется по закону

$$U\rho(\omega) \propto \left[\left(\frac{W}{U} \right)_c - \frac{W}{U} \right]^{3/2}. \quad (2.31)$$

Таким образом, приближение "Хаббард-3" описывает предсказанный Моттом [15] фазовый переход из металлической фазы в диэлектрическую при значении кулоновского параметра $U \sim W$, что, несомненно, явилось большим успехом этого приближения. Однако имеются определенные трудности, возникающие в приближении "Хаббард-3" и подобных ему приближениях [22–24]. Они связаны прежде всего с нарушением фундаментальных свойств функции Грина [25, 26].

2.4. Анализ простейших приближений

Корреляционное расщепление полосы, возникающее уже в приближении "Хаббард-1", было весьма интересным результатом, хотя и неудовлетворительным с физической точки зрения, поскольку оно имело место при любых сколь угодно малых значениях U и, значит, не давало правильного перехода к теории ферми-жидкости. Позднее отмечались и другие недостатки этого приближения (нарушение правила сумм, динамическая неустойчивость квазичастичного спектра), из-за чего оно не может быть использовано для вычисления термодинамических свойств модели. Приближение "Хаббард-1" термодинамически неустойчиво также вблизи половинного заполнения. Другим его недостатком является отсутствие затухания квазичастиц.

Приближение "Хаббард-3" физически более привлекательно, поскольку приводит к расщеплению полосы только при достаточно большом значении U , а квазичастицы имеют затухание. Однако легко видеть, что затухание пропорционально $\text{Im } G_{ii}$, а потому конечно во всей области спектра, в том числе и на уровне Ферми. Это означает, что на "поверхности Ферми" нет скачка в распределении числа частиц, т.е. нет самой поверхности Ферми.

Другими словами, приближение "Хаббард-3" описывает неферми-жидкостное поведение системы во всей области изменения параметров. Таким образом, как и в приближении "Хаббард-1", здесь нет предельного перехода к малым значениям U . Обнаруживается также, что

теория в приближении "Хаббард-3" не самосогласована полностью и результат определения термодинамических величин зависит от способа вычисления [27, 28].

Что касается аналитических свойств функций Грина, то они различны в приближениях "Хаббард-1" и "Хаббард-3". Действительно, в первом случае функция Грина имеет полюсы на вещественной оси (соответствующие двум хаббардовским подзонам), а во втором случае имеет место разрез на этой оси. Аналитичность запаздывающей функции Грина в верхней полуплоскости никто не доказывал, но ее можно предполагать, поскольку само приближение аналогично приближению когерентного потенциала в теории бинарных сплавов, а функция Грина в ней аналитическая [29].

Во всяком случае, в имеющихся исследованиях модели Хаббарда в приближении "Хаббард-3", включая и численные расчеты, нарушение аналитических свойств замечено не было. Однако в близкой задаче — при исследовании $s-d$ -модели с использованием техники расщепления функций Грина в духе самосогласованного приближения Хаббарда обнаружено [27, 28], что такие нарушения могут появиться в некоторых типах самосогласования, которые проще, чем в приближении "Хаббард-3". В частности, может появиться разрез на мнимой оси в верхней полуплоскости, который неизбежно приводит к нарушению правила сумм. С этой точки зрения к процедурам самосогласования в технике расщепления функций Грина следует относиться с осторожностью.

Отметим также, что структура плотности состояний $\rho(\omega)$, соответствующей приближению "Хаббард-3", довольно бедная: имеются два сглаженных пика, лишенных особенностей типа Ван-Хова. Это происходит оттого, что приближение "Хаббард-3" не учитывает поправки, которые зависят от фермиевских функций распределения и тем самым могут нарушить картину жесткой полосы, т.е. вести к сингулярности $\rho(\omega)$, например, типа эффекта Кондо. В разделе 3 мы увидим, что последовательная теория среднего поля (т.е. в пределе $d = \infty$) учитывает подобные эффекты и плотность состояний $\rho(\omega)$ имеет более сложную структуру, отражающую кондо-сингулярности на поверхности Ферми.

3. Предел бесконечной размерности пространства

3.1. Модель Хаббарда в пределе $d = \infty$

Несколько лет назад Метцнер и Волхарт [16] ввели предел бесконечной размерности пространства $d = \infty$ для сильно коррелированной электронной решетки. Ими было показано, что в пределе $d = \infty$ все вычисления для модели Хаббарда сильно упрощаются и при этом сохраняются все существенные свойства модели. Это вызвало огромный поток исследований, приведших, в частности, к построению строгой MFA-теории для различных моделей сильно коррелированных систем.

Упрощения вычислений в пределе $d = \infty$ происходят из-за того, что собственная энергия электрона становится диагональной в узельном представлении:

$$\Sigma_{ij}(\omega) = \Sigma(\omega) \delta_{ij}. \quad (3.1)$$

Другими словами, можно считать, что функция Σ не зависит от квазиимпульса, а является только функцией

частоты. Одновременно оказалось, что во всех вершинных частях диаграммной техники можно пренебречь законом сохранения квазиимпульса, т.е. заменить соответствующую δ -функцию на единицу [30].

При выполнении предела $d = \infty$ необходимо соответствующим образом масштабировать параметры гамильтониана. Идея использования предела $d = \infty$ для СКЭС-теории восходит к статистической механике модели Изинга, где для больших размерностей пространства предложено масштабировать обменный параметр $J = J^*/z$ (здесь $J^* = \text{const}$, а z — число ближайших соседей, которое стремится к пределу $z \rightarrow \infty$, если $d \rightarrow \infty$). Только благодаря указанному масштабированию плотность обменной энергии остается конечной.

Для гамильтониана (1.1) модели Хаббарда величина U является локальным параметром, не зависящим от окружения и поэтому не должна масштабироваться, однако матричный элемент перескока необходимо масштабировать следующим образом [16]:

$$t = \frac{t^*}{2\sqrt{d}}, \quad t^* = \text{const}. \quad (3.2)$$

Для d -мерной гиперкубической решетки с электронным спектром

$$\varepsilon_k = \frac{t^*}{\sqrt{d}} \sum_{\alpha=1}^d \cos k_{\alpha}, \quad (3.3)$$

плотность состояний $\rho_0(\omega)$ в пределе $d = \infty$ оказывается гауссовой [16]:

$$\rho_0(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\pi}t^*} \exp\left(-\frac{\omega^2}{t^{*2}}\right). \quad (3.4)$$

Усредненное с этой плотностью среднеквадратичное значение энергии ε_k^2 оказывается равным t^{*2} , т.е. конечно в пределе $d \rightarrow \infty$, чем и оправдывается выбор масштабирования (3.2). Это согласуется также с тем фактом, что при $U \gg t$ эффективный обменный интеграл между ближайшими соседями $J \sim t^2/U \sim 1/z$, как и должно быть для обменного гамильтониана.

Таким образом, в пределе $d = \infty$ исчезают все особенности Ван-Хова в плотности состояний, что отличает этот предел от конечных $d = 2, 3$. Другое отличие состоит в том, что спектр (3.4) не является ограниченным, как зонный спектр на решетке конечной размерности. Оба эти обстоятельства несущественны для теории. Наиболее существенной характеристикой предела $d = \infty$ является локальный характер собственной энергии.

Как следствие масштабирования (3.2) параметра перескока зависимость от d одночастичной функции Грина на решетке $G_{ij}^0(z)$ при $d = \infty$ определяется "расстоянием" между узлами i и j :

$$G_{ij}^0 \sim \left(\frac{1}{\sqrt{d}}\right)^{|i-j|}, \quad |i-j| = \sum_{\alpha=1}^d |i_{\alpha} - j_{\alpha}|, \quad (3.5)$$

где координаты узлов выражены в единицах параметра решетки. В частности, для ближайших соседей $G_{ij}^0 \sim 1/\sqrt{d}$.

Согласно общей концепции статистической механики предел $d = \infty$ соответствует теории среднего поля, которая для модели Хаббарда оказывается нетривиальной. Ниже мы изложим несколько версий такой теории. При этом ее формулировка тесно связана с приближе-

нием когерентного потенциала, которое мы сейчас и рассмотрим. Это поможет связать приближение "Хаббард-3" с пределом $d = \infty$.

3.2. Приближение когерентного потенциала для неупорядоченных систем

В некоторых подходах СКЭС-теории (расщепление функций Грина, континуальное интегрирование) успешно использовалась "сплавная аналогия" между движением электрона по узлам решетки, на которых уже находятся электроны с той или иной ориентацией спина, и движением электрона в неупорядоченном двухкомпонентном сплаве. В последнем случае функция Грина электрона вычислялась в приближении когерентного потенциала (СПА).

Центральным в этом методе является предположение о том, что собственно энергетическую часть электрона в узельном представлении можно считать диагональной, т.е. [32, 25]

$$\Sigma_{ij} = \Sigma \delta_{ij}. \quad (3.6)$$

В пределе $d = \infty$ имеет место именно это соотношение. Поэтому становится ясным, что СПА-приближение является точным в пределе бесконечной размерности. Осознание этого факта помогло построить приближение среднего поля для модели Хаббарда, которое является точным в пределе $d = \infty$.

Чтобы лучше понять предел $d = \infty$ в теории взаимодействующих электронов, рассмотрим вначале соответствующий предел для системы невзаимодействующих электронов, движущихся в решетке со случайным атомным потенциалом:

$$H = t \sum_{i,j} C_i^{\dagger} C_j + \sum_i V_i n_i \quad (3.7)$$

(спиновые индексы опущены, поскольку V_i не зависит от спина).

Обозначим конфигурационное усреднение случайных величин символом $\langle \dots \rangle_{\text{av}}$. Задача состоит в вычислении величины $\langle G \rangle_{\text{av}}$, где G — одноэлектронная функция Грина, соответствующая гамильтониану (1.1). В узельном представлении функция Грина G подчиняется уравнению

$$G = G^0 + G^0 V G. \quad (3.8)$$

Введем собственную энергию Σ электрона в эффективной среде, описываемой усредненной функцией Грина, определяя ее соотношением

$$\langle G \rangle_{\text{av}} = (G_0^{-1} - \Sigma)^{-1}. \quad (3.9)$$

Нам предстоит найти самосогласованным путем величину Σ .

Комбинируя уравнения (3.8) и (3.9), представим выражение для G в виде

$$G = \langle G \rangle_{\text{av}} + \langle G \rangle_{\text{av}} T \langle G \rangle_{\text{av}}, \quad (3.10)$$

где

$$T = \frac{V - \Sigma}{1 - (V - \Sigma) \langle G \rangle_{\text{av}}} \quad (3.11)$$

— T -матрица. Чтобы уравнение (3.10) было непротиворечивым, необходимо положить $\langle T \rangle_{\text{av}} = 0$.

В пределе $d = \infty$ собственно энергетическая часть Σ_{ij} диагональна в узельном представлении и не зависит от k в импульсном представлении. Поэтому из уравнения (3.9) следует, что

$$\langle G(\omega) \rangle_{av} = G_{ii}^0(\omega - \Sigma), \quad (3.12)$$

где

$$G_{ii}^0 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}} = \int d\varepsilon \frac{\rho_0(\varepsilon)}{\varepsilon - \omega} \quad (3.13)$$

— одноузельная функция Грина идеальной решетки, а $\rho_0(\varepsilon)$ — плотность состояний для электронов в этой решетке.

Выпишем теперь окончательное уравнение для эффективной собственно энергетической части:

$$\left\langle \frac{V_i - \Sigma(\omega)}{1 - (V_i - \Sigma(\omega))G_{ii}^0(\omega - \Sigma(\omega))} \right\rangle_{av} = 0. \quad (3.14)$$

Это есть основное уравнение СРА-приближения. Оно точно в пределе $d = \infty$.

Свободную энергию F можно записать как сумму трех вкладов: свободной энергии F_{med} эффективной одно-родной среды, из которой необходимо вычесть собственную энергию F_i в узле i и заменить ее на энергию с полным потенциалом V_i на узле i , усреднив по конфигурациям. Таким образом,

$$F = F_{med} - F_i + \langle F_i' \rangle_{av}, \quad (3.15)$$

где

$$F_{med} = -T \sum_{\mathbf{k}} [G^0(\mathbf{k}, i\omega_k) - \Sigma]^{-1}, \quad (3.16)$$

$$F_i = -T \text{Tr} \ln \langle G_{ii} \rangle_{av}^{-1}, \quad (3.17)$$

$$F_i' = -T \text{Tr} \ln [\langle G_{ii} \rangle_{av}^{-1} - V_i - \Sigma]. \quad (3.18)$$

Вводя локальный эффективный пропагатор

$$\mathcal{G}^{-1} \equiv \langle G_{ii} \rangle_{av}^{-1} + \Sigma, \quad (3.19)$$

представим свободную энергию в виде

$$F = -T \text{Tr} \left\{ \int d\varepsilon \rho_0(\varepsilon) \ln(i\omega_k + \mu - \Sigma - \varepsilon) - \ln(\mathcal{G}^{-1} - \Sigma) + \langle \ln(\mathcal{G}^{-1} - V_i) \rangle_{av} \right\}. \quad (3.20)$$

Минимизируя функционал (3.20) с помощью условия $\delta F / \delta \mathcal{G}^{-1} = 0$, мы получаем уравнение

$$\frac{1}{\mathcal{G} - \Sigma} = \left\langle \frac{1}{\mathcal{G} - V_i} \right\rangle_{av}, \quad (3.21)$$

которое совместно с (3.19) определяет величину Σ . Уравнение (3.21) совпадает с ранее выведенным уравнением (3.14). Уравнения (3.19) и (3.21) следует решать итерациями. Для заданного $\mathcal{G}$ из (3.21) находим Σ . С помощью (3.19) получаем новое значение $\mathcal{G}^{-1}$. Подставляем это значение в (3.21). И т.д. до получения самосогласованных решений. Уравнения (3.19) и (3.21) являются уравнениями теории среднего поля для гамильтониана (3.7). Они точные в пределе $d = \infty$.

В случае модели Хаббарда соответствующие уравнения могут быть получены в рамках той же схемы. Для полной аналогии между моделью (3.7) и моделью Хаббарда следует дать несколько другое (достаточно формальное) представление вклада F_i' в свободную энергию [33]:

$$F_i' = -T \ln Z_i'. \quad (3.22)$$

Здесь Z_i' — статистическая сумма, определенная с помощью действия S_i' :

$$Z_i' = \int D\psi D\psi^* \exp[S_i'(\psi, \psi^*)], \quad (3.23)$$

$$S_i' = \text{Tr} \psi_n^* \langle G_{ii} \rangle_{av}^{-1} \psi_n - \text{Tr} \psi_n^* (V_i - \Sigma) \psi_n, \quad (3.24)$$

где ψ и ψ^* — гассмановы переменные.

Выражение (3.24) имеет форму лагранжиана. Поскольку оно билинейно по ψ и ψ^* , функциональный интеграл (3.23) легко вычисляется и мы приходим к выражению (3.18) для F_i' . Простым обобщением выражений (3.23) и (3.24) получается свободная энергия для модели взаимодействующих электронов.

3.3. Сведение модели Хаббарда в пределе $d = \infty$ к однопримесной модели Андерсона

Для гамильтониана (1.1) одноузельное действие следует записать в виде [33]

$$S_i' \{ \psi_{\sigma}, \psi_{\sigma}^*; \mathcal{G}_{\sigma}^{-1} \} = \text{Tr} \psi_{\sigma n}^* \mathcal{G}_{\sigma}^{-1} \psi_{\sigma n} - U \int_0^{\beta} d\tau \psi_{\uparrow}^*(\tau) \psi_{\uparrow}(\tau) \psi_{\downarrow}^*(\tau) \psi_{\downarrow}(\tau), \quad (3.25)$$

где $\beta = 1/kT$, k — постоянная Больцмана.

Статистическую сумму Z_i' можно вычислить с помощью формулы Хаббарда–Стратоновича

$$\exp a^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-\pi x^2 - 2\sqrt{\pi} a x), \quad (3.26)$$

трансформирующей экспоненту с квадратичным оператором в экспоненту с линейной степенью этого оператора.

Используя тождество

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = \frac{1}{4} [(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})^2 - (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2],$$

запишем экспоненту, стоящую в выражении для Z_i' в виде континуального интеграла по классическим полям $\xi(\tau)$ и $\eta(\tau)$, описывающим флуктуации зарядовой и спиновой плотности соответственно:

$$\begin{aligned} \exp \left[-U \int_0^{\beta} d\tau n_{i\uparrow}(\tau) n_{i\downarrow}(\tau) \right] = \\ = \int d\eta d\xi \exp \left\{ -\frac{1}{2\beta} \int_0^{\beta} d\tau [\eta^2(\tau) + \xi^2(\tau)] - \sqrt{\frac{2U}{\beta}} \times \right. \\ \left. \times \left[i\xi(\tau)(n_{\uparrow}(\tau) + n_{\downarrow}(\tau)) + \eta(\tau)(n_{\uparrow}(\tau) - n_{\downarrow}(\tau)) \right] \right\}. \quad (3.27) \end{aligned}$$

После разложения полей $\xi(\tau)$ и $\eta(\tau)$ в ряд Фурье по дискретным частотам ω_k , получаем окончательное выражение для Z'_i через континуальный интеграл по полям ξ_n и η_n :

$$Z'_i = \int \delta\eta \delta\xi \exp[S'_i(\eta, \xi; \mathcal{G}_\sigma^{-1})], \quad (3.28)$$

$$S'_i = -\frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\xi_n^2 + \eta_n^2) + \text{Tr} \ln \left[\hat{\mathcal{G}}_\sigma^{-1} - \sqrt{\frac{U}{2\beta}} (\sigma\hat{\eta} + i\hat{\xi}) \right]. \quad (3.29)$$

Здесь $\hat{\xi}$ и $\hat{\eta}$ — бесконечнорядные матрицы с элементами $\hat{\xi}_{mn} = \xi_{m-n}$, $\hat{\eta}_{mn} = \eta_{m-n}$, а $\hat{\mathcal{G}}_\sigma^{-1}$ — диагональная матрица:

$$(\hat{\mathcal{G}}_\sigma^{-1})_{mn} = \delta_{mn} \mathcal{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n).$$

Полная свободная энергия определяется тремя вкладками аналогично [59]:

$$F = -T \text{Tr} \left\{ \int d\varepsilon \rho_0(\varepsilon) \ln(i\omega_n + \mu - \Sigma_\sigma - \varepsilon) - \ln(\mathcal{G}_\sigma^{-1} - \Sigma_\sigma) \right\} - T \ln Z'_i, \quad (3.30)$$

где эффективный локальный пропагатор

$$\mathcal{G}_\sigma^{-1} = \frac{1}{G_{ii,\sigma}^0} (\omega - \Sigma_\sigma(\omega)) + \Sigma_\sigma(\omega). \quad (3.31)$$

Дифференцируя (3.31) по $\mathcal{G}_\sigma^{-1}$, получаем уравнение для собственно энергетической части Σ_σ :

$$\frac{1}{\mathcal{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n) - \Sigma_\sigma(i\omega_n)} = \left\langle \left[\frac{1}{\mathcal{G}_\sigma^{-1} - \sqrt{U/2\beta}(\sigma\hat{\eta} + i\hat{\xi})} \right]_{nn} \right\rangle_{\eta\xi}. \quad (3.32)$$

Здесь символ $\langle \dots \rangle_{\eta\xi}$ означает усреднение (функциональное интегрирование) по переменным η и ξ :

$$\langle \dots \rangle_{\eta\xi} = \frac{1}{Z'_i} \int \delta\eta \delta\xi \dots \exp(S'_i[\eta, \xi]).$$

Уравнения (3.31) и (3.32) являются самосогласованными уравнениями для определения величин Σ_σ и $\mathcal{G}_\sigma^{-1}$. Их можно решить итерациями. По заданному $\mathcal{G}_\sigma^{-1}$ из (3.32) определяется Σ_σ . С помощью (3.31) по полученному значению Σ вычисляется $\mathcal{G}_\sigma^{-1}$. Процесс повторяется.

По своей структуре уравнения (3.31) и (3.32) аналогичны (3.19) и (3.21) для модели (3.7). В обеих моделях в правой части уравнений для Σ производится усреднение: в одном случае по конфигурациям локальных полей V_i с некоторой заданной функцией распределения, в другом — по бесконечному набору флуктуационных полей η_v и ξ_v , характеризующихся дискретными частотами ω_v .

Имеется, однако, существенное различие между ними: для системы невзаимодействующих электронов в разупорядоченной среде все функции $\mathcal{G}^{-1}(\omega)$ и $\Sigma(\omega)$ входят с одной и той же частотой. В уравнении (3.32) для системы взаимодействующих электронов все частоты перепутываются. Поэтому динамика модели Хаббарда в пределе $d = \infty$ нетривиальна даже в статическом случае, когда $\eta_v = \xi_v = 0$ для $v \neq 0$.

Уравнения (3.31) и (3.32) составляют истинную термодинамически самосогласованную теорию среднего поля для модели Хаббарда. Она точна в нулевом приближении по параметру $1/z$. Теория справедлива для произвольного параметра U и произвольной электронной концентрации n . Этим она принципиально отличается от других самосогласованных подходов, например типа Хартри–Фока, которые всегда имеют ограниченную применимость в пространстве параметров системы.

В изложенной теории фигурируют две величины Σ_σ и $\mathcal{G}_\sigma$, характеризующие однородную эффективную среду. Величина Σ_σ описывает среднее поле, действующее на электрон со стороны других электронов, а $\mathcal{G}_\sigma$ определяет фактически точный локальный пропагатор:

$$G_{ii,\sigma} = (\mathcal{G}_\sigma^{-1} - \Sigma_\sigma)^{-1}. \quad (3.33)$$

Мы видим, что в пределе $d = \infty$ возникает проблема учета взаимодействия электронов на одном узле, погруженном в систему эффективно невзаимодействующих электронов. Эта проблема связана с вычислением третьего вклада в свободную энергию (3.30). Его вычисление, т.е. проведение фактического усреднения в правой части уравнения (3.32), представляет наибольшие трудности теории. Из-за этого вклада модель Хаббарда не может быть решена аналитически в пределе $d = \infty$.

В пределе $d = \infty$ получены только точные уравнения (3.31) и (3.32) и задача сведена, таким образом, к численным вычислениям. Практически, однако, удобно действовать по-другому. Можно попытаться свести задачу о решетке с локальными взаимодействиями (модель Хаббарда) к задаче об одной примеси, погруженной в специально подобранную систему невзаимодействующих электронов на этой же решетке. Такой подход был предложен одновременно в нескольких работах (см. [34–36]).

Вернемся к выражению (3.25) для одноузельного действия. Величина $\mathcal{G}_\sigma$ здесь пока не определена. Ранее мы ее находили из условия минимизации свободной энергии. Поступим теперь иначе. Будем рассматривать выражение (3.25) как действие для однопримесной проблемы некоторой модели (модель Андерсона [4] или модель Вольфа [37]). С помощью этого действия можно вычислить электронную функцию Грина для вспомогательной однопримесной проблемы $G_{\text{imp}}(i\omega_n, \mathcal{G}^{-1})$ и ее собственно энергетическую часть $\Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n, \mathcal{G}^{-1})$ с заданной "затравочной" функцией Грина $\mathcal{G}$.

Отождествляя G_{imp} и $\Sigma_{\text{imp},\sigma}$ с локальной функцией Грина G_{ii} и собственной энергией Σ модели Хаббарда, можно написать уравнения для самосогласованного определения величины $\mathcal{G}$:

$$\frac{1}{\mathcal{G}^{-1} - \Sigma} = \int d\varepsilon \frac{\rho_0(\varepsilon)}{i\omega_n + \mu - \Sigma - \varepsilon}. \quad (3.34)$$

С полученным, уточненным, значением $\mathcal{G}$ надо опять решить вспомогательную однопримесную задачу, т.е. найти G и Σ , и из уравнения (3.34) определить новое значение $\mathcal{G}$. Этот итерационный процесс следует повторить до получения устойчивого (самосогласованного) результата.

Возможен и другой подход, позволяющий исследовать качественный характер решения уравнений в модели Хаббарда при $d = \infty$. Для этого следует использовать

"затравочную" функцию Грина в однопримесных моделях. В модели Андерсона

$$\mathcal{G}^{-1}(\omega) = \omega - \varepsilon_d + V^2 \int d\varepsilon \frac{\Delta(\varepsilon)}{\omega - \varepsilon}, \quad (3.35)$$

$$V^2 \Delta(\varepsilon) = \pi \sum_k V_k^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k),$$

где ε_d — энергия d -уровня на примесном атоме, V_k — параметр s - d -гибридизации. В модели Вольфа

$$\mathcal{G}^{-1}(\omega) = \int d\varepsilon \frac{\Delta(\varepsilon)}{\omega - \varepsilon}. \quad (3.36)$$

Таким образом, модель Хаббарда в пределе $d = \infty$ сводится к одной из моделей для примесного атома в решетке. При этом "затравочная" функция Грина $\mathcal{G}_\sigma$ однопримесной задачи учитывает все эффективные взаимодействия электрона на примесном узле с остальной частью кристаллической решетки.

Однопримесная модель Андерсона не решается точно, однако можно воспользоваться результатами ее ренорм-группового анализа [38]. В зависимости от соотношения основных параметров E_d и Δ (E_d — ренормированный уровень d -состояния, Δ — ширина уровня) в модели Андерсона имеются три режима ферми-жидкостного поведения. Этим трем режимам соответствуют три ферми-жидкостных режима в модели Хаббарда.

1. Когда $E_d/\Delta \ll -1$, вблизи половинного заполнения плотность состояний $\rho(\omega)$ в модели Андерсона имеет трехпиковую структуру: узкий квазичастичный пик (сулабриковский резонанс) ширины T_K (температуры Кондо) и два сателлитных пика. В модели Хаббарда им соответствует вторая хаббардовская подзона для частиц (верхний сателлит) и дырок (нижний сателлит). Это — режим локализованного магнитного момента. Спиновая динамика состоит во флуктуациях между состояниями $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ на узле.

2. Когда $|E_d/\Delta| < 1$, имеет место режим смешанной валентности, в котором существенны переходы между тремя состояниями: $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$. Плотность состояний $\rho(\omega)$ имеет два пика: уширенный квазичастичный пик и сателлит, которым в модели Хаббарда соответствуют две достаточно широкие хаббардовские подзоны.

3. Наконец, когда $E_d/\Delta \gg 1$, плотность состояний $\rho(\omega)$ имеет один уширенный пик. В модели Хаббарда ему должна соответствовать нерасщепленная подзона.

3.4. Свойства модели Хаббарда в пределе $d = \infty$

Численные расчеты на основе алгоритма (3.34), включающего в себя вычисление вспомогательной однопримесной задачи, подтверждают вышеописанную качественную картину структуры спектра модели Хаббарда в приближении среднего поля [34–41, 41, 43, 44]. Так, три ферми-жидкостных режима, появляющихся в модели Хаббарда при половинном заполнении при увеличении U , показаны на рис. 4 и 5.

Результаты, представленные на рис. 4, получены с помощью решения однопримесной модели Андерсона QMC-методом, который точен, но не может быть использован при низких температурах [34]. На рис. 5 показаны результаты для $T = 0$, полученные путем комбинации QMC-метода и рядов теории возмущений по параметру U [42]. В отличие от [34] в работе [42] имеется решение со щелью, соответствующей переходу

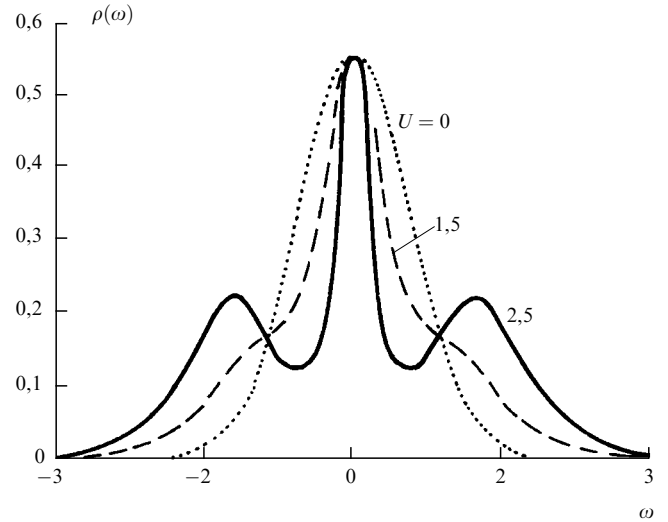


Рис. 4. Спектральная плотность локальной функции Грина $G_{ii}(\omega)$ модели Хаббарда в MFA-приближении для различных значений U при $n = 1$ [34]

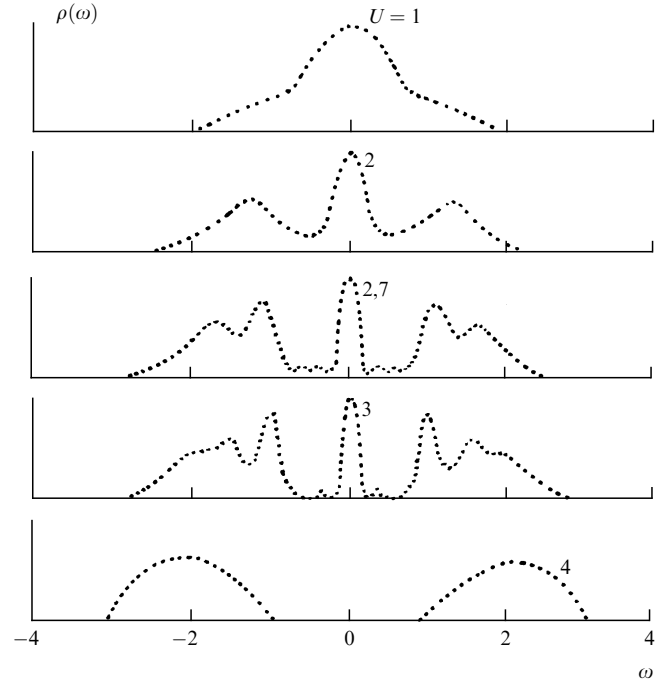


Рис. 5. То же, что и на рис. 4 [42]

металл–изолятор, а также промежуточный режим от металлического к диэлектрическому состоянию.

Характерно, что высота узкого центрального пика не меняется с возрастанием U до критического значения U_c , когда появляется щель в спектре и центральный пик скачком исчезает. Таким образом, при $d = \infty$ и $T = 0$ в модели Хаббарда имеется постепенный фазовый переход металл–диэлектрик. Численные результаты [34, 42] были дополнены простым аналитическим расчетом [41], помогающим уяснить физику явления. Трехпиковую структуру локальной плотности состояний можно аппроксимировать "затравочной" функцией Грина вида

$$\mathcal{G}(\omega) = \left(\omega - \frac{W\Delta}{\omega + i\Delta \operatorname{sgn} \omega} \right)^{-1}. \quad (3.37)$$

Тогда действительно при $\Delta \rightarrow 0$ $\text{Im } \mathcal{G}(\omega)$ описывает δ -образный пик шириной Δ в точке $\omega = 0$ и два спутных пика в точках $\omega = \pm\omega_0$, где $\omega_0^2 = W\Delta - \Delta^2/2$. Тем самым "затравочная" функция Грина $\mathcal{G}$ перенормируется величиной Δ , которая должна находиться из уравнения самосогласования (3.34) в результате итерационного процесса.

Вычислив предварительно собственную энергию $\Sigma_{\text{imp}}(\omega)$, можно записать итерационный процесс в форме

$$\Delta_{n+1} = \frac{9W}{U^2} \left(W\Delta_n - \frac{\Delta_n^2}{2} \right).$$

Эта система нелинейных уравнений имеет две фиксированные точки:

$$\Delta^* = \begin{cases} 2W \left[1 - \left(\frac{U}{U_c} \right)^2 \right], & U < U_c, \\ 0, & U > U_c. \end{cases} \quad (3.38)$$

Области стабильности разделяются критическим значением $U_c = 3W$. Нулевая фиксированная точка соответствует диэлектрической фазе, а ненулевая — металлической. Поскольку, как следует из (3.37), при $\omega < \Delta$

$$\text{Re } \Sigma(\omega) \approx \frac{W}{\Delta} \omega,$$

находим, что для металлической фазы в окрестности фазового перехода параметр Мигдала

$$Z \approx 1 - \left(\frac{U}{U_c} \right)^2. \quad (3.39)$$

Итак, при подходе к фазовому переходу со стороны малых значений U система остается ферми-жидкостью и непрерывно переходит в диэлектрическое состояние. Эти эвристические результаты подтверждаются численными

решениями точных уравнений модели Хаббарда при $d = \infty$ [42] (рис. 6).

Магнитные свойства модели Хаббарда при половинном заполнении в пределе $d = \infty$ проявляют черты локализованного антиферромагнетика, как и должно быть. Численный расчет статической магнитной восприимчивости на волновом векторе $q = Q$ для различных температур показывает расходящуюся при приближении к некоторой точке T_N [35, 44]. При $U = 1,5$ статическая магнитная восприимчивость

$$\chi(\mathbf{Q}) \propto (T - T_N)^{-\nu}, \quad (3.40)$$

где $T_N = 0,0866 \pm 0,0003$, $\nu = 0,99 \pm 0,05$. Таким образом, в этом случае выполняется закон Кюри, как и в изотропной гейзенберговской модели с бесконечным числом ближайших соседей.

Поведение температуры Нееля T_N в зависимости от параметра U показано на рис. 7. При малых значениях U температура Нееля T_N экспоненциально мала, что соответствует результатам теории возмущений [45]. При очень больших значениях U температура Нееля изменяется по закону $T_N \propto 1/U$, т.е. в соответствии с хорошо известными результатами [45]. На том же рисунке приведены результаты численного расчета и для $d = 3$, откуда видно, что предел бесконечной размерности пространства $d = \infty$ очень близок к реальной размерности.

На рис. 7 показана также зависимость от U среднеквадратичного локального момента

$$\sqrt{\langle m^2 \rangle} = \sqrt{\langle (n_\uparrow - n_\downarrow)^2 \rangle} = \sqrt{1 - 2\langle n_\uparrow n_\downarrow \rangle}. \quad (3.41)$$

При изменении параметра U от 0 до ∞ локальный момент $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$ меняется от 0,5 до 1. Поведение $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$ коррелирует с изменением T_N от U : температура Нееля проходит через максимум там, где локальный момент начинает насыщаться.

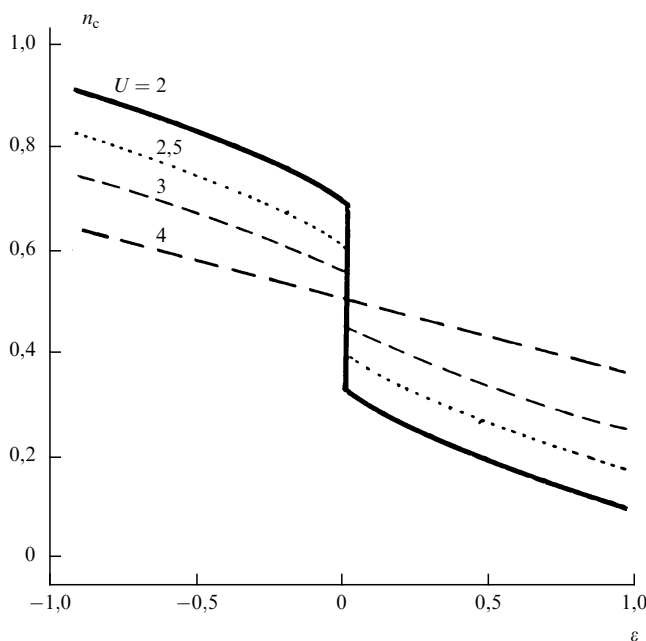


Рис. 6. Число заполнений n_c как функция ϵ вблизи энергии Ферми для различных значений U при $n = 1$ [42]

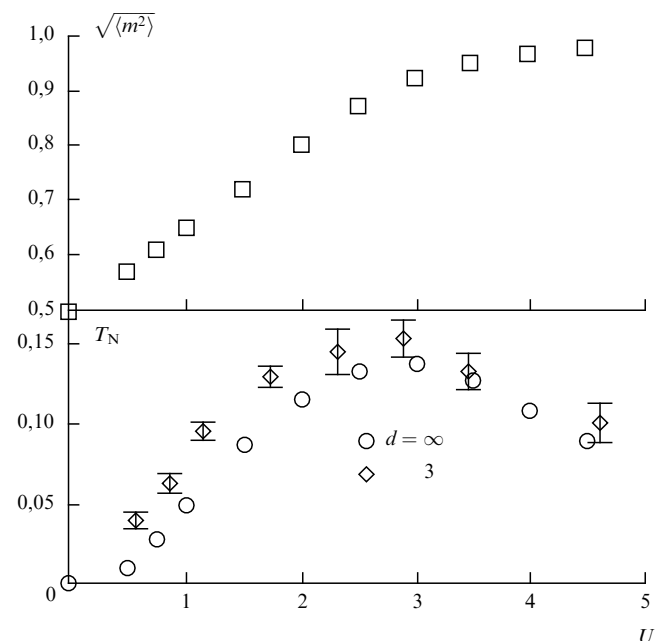


Рис. 7. Температура Нееля и локальный магнитный момент как функции параметра U при $n = 1$ [44]

При отклонении от половинного заполнения температура Нееля T_N начинает резко падать. Критические значения параметра U , при которых появляется расходимость в антиферромагнитной восприимчивости, показаны на рис. 8. Однако ни при каких использованных в расчетах параметрах расходимости в ферромагнитной восприимчивости обнаружено не было.

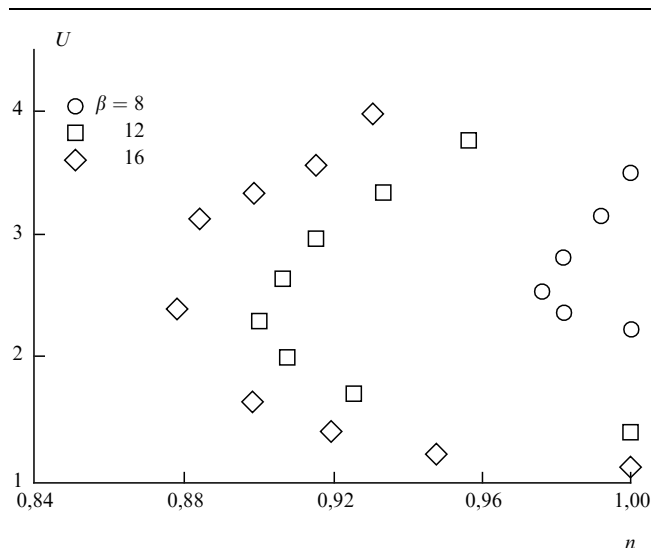


Рис. 8. Критические значения U , при которых появляется расходимость в магнитной восприимчивости, в зависимости от электронной концентрации n [44] ($\beta = 16$) в единицах ширины зоны

Изменение спектральной плотности (плотности состояний) $\rho(\omega)$ при отклонении от половинного заполнения представлено на рис. 9 при $U = 4$, что соответствует диэлектрическому состоянию при $n = 1$. Видно, что с ростом отклонения от $n = 1$ диэлектрическая щель в спектре исчезает и возникает центральный пик, интенсивность которого возрастает за счет уменьшения спутников. Этот же пик возрастает с понижением температуры

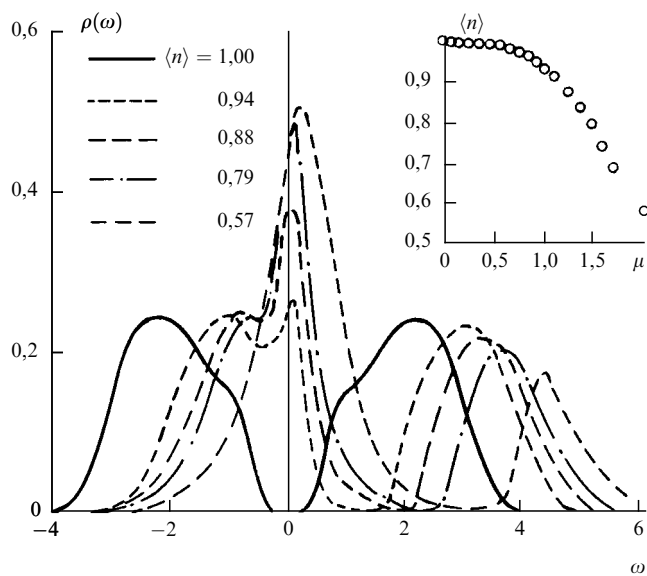


Рис. 9. Эволюция плотности состояний при отклонении от половинного заполнения при $\beta = 7,2$, $U = 4$. На вставке — химический потенциал в зависимости от концентрации электронов

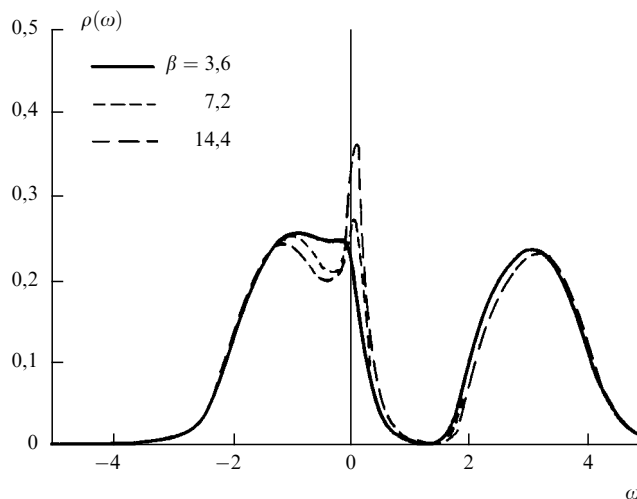


Рис. 10. Эволюция резонансного пика на поверхности Ферми в зависимости от температуры при $U = 4$, $n = 0,94$ [44]

(рис. 10). В указанном интервале температур его интенсивность описывается функцией $\ln T$.

В то же время большие спутниковые пики, соответствующие переходам с уменьшением заряда (переходы на узел и с узла), несущественно меняются с температурой. Квазичастичный пик, связанный с рассеянием электрона на поверхности Ферми спиновыми флуктуациями, существенно увеличивается с понижением температуры, как это имеет место в эффекте Кондо. Благодаря кондоподобному резонансу на поверхности Ферми в такой системе должны быть существенны аномалии термодинамических и кинетических свойств, таких, как теплоемкость, сопротивление, оптическая проводимость и др. [43].

Таким образом, в настоящем разделе продемонстрировано, что модель Хаббарда в пределе бесконечной размерности пространства эквивалентна однопримесной модели Андерсона со специально подобранными характеристиками. Ее поведение определяется физическими свойствами однопримесной модели Андерсона, которые изучены достаточно детально.

Оказалось, что в пределе $d = \infty$ модель Хаббарда вблизи половинного заполнения испытывает фазовый переход металл–диэлектрик. В диэлектрической фазе при достаточно больших значениях U возникает антиферромагнитное упорядочение с локальными магнитными моментами. Металлическая фаза имеет ферми-жидкостное поведение с тяжелыми электронами, масса которых возрастает по мере приближения к границам диэлектрической фазы.

Ожидаемая фазовая диаграмма при половинном заполнении показана на рис. 11, на котором грубо оцененная переходная область от металла к диэлектрику заштрихована. Эта область представляет собой, по-видимому, полуметаллическое состояние с термодинамически возбужденными носителями.

При отклонении от половинного заполнения диэлектрическая фаза быстро замещается металлической фазой с усиленными ферми-жидкостными параметрами. В частности, на поверхности Ферми при низких температурах возникают узкие резонансы, соответствующие кондовской экранировке локализованных магнитных моментов. Антиферромагнитное упорядочение подавляется с

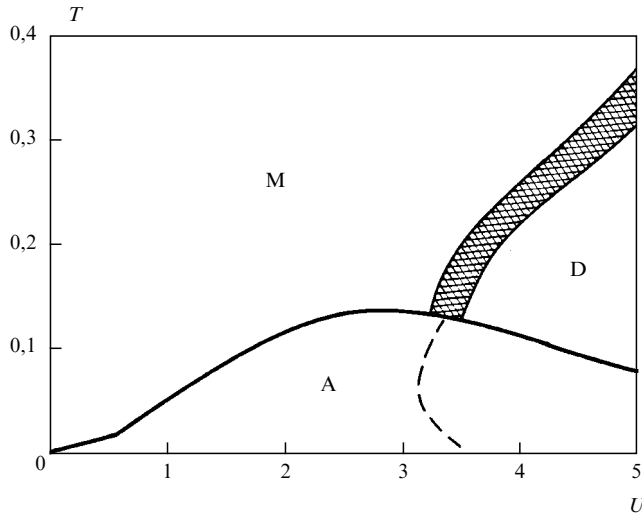


Рис. 11. Фазовая диаграмма модели Хаббарда на плоскости (T, U) при $d = \infty, n = 1$ [43]

отклонением от $n = 1$. При $n \leq 0,8$ система ведет себя как обычная ферми-жидкость.

Следует подчеркнуть, что в пределе $d = \infty$ мы имеем точное уравнение для модели Хаббарда, хотя при получении решения необходимо численно решать вспомогательную задачу об однопримесной модели Андерсона. Если это сделано, то мы имеем точную теорию среднего поля для модели Хаббарда. Таким образом, известны (по крайней мере в принципе) точные решения модели в двух предельных случаях: $d = 1$ [46, 47] и $d = \infty$.

Возникает естественный вопрос: насколько близко поведение модели при $d = 3$ к случаю $d = \infty$? Полного ответа на этот вопрос еще нет, однако накопленный опыт исследования сильно коррелированных систем в пределе $d = \infty$ позволяет сделать вывод, что размерность реального пространства ($d = 3$) уже можно считать весьма высокой. Отдельные сравнения результатов расчета для $d = \infty$ и $d = 3$ подтверждают это (см., например, рис. 7).

3.5. Нарушение ферми-жидкостного поведения модели

Выше при изложении точной в пределе $d = \infty$ теории для решения эффективной однопримесной задачи использовался QMC-метод. Поскольку при численных расчетах приходится иметь дело с дискретными матцубаровскими частотами $\omega_n = 2\pi nT$, QMC-метод ограничен со стороны низких температур. Необходимость численного аналитического продолжения с мнимой оси на вещественную еще более усугубляет вычислительные трудности. Поэтому необходим поиск новых приближенных схем расчета.

Весьма эффективным оказалось приближение Эдвардса–Герца (ЕНА) [48]. Развита ими интерполяционная схема точна в двух пределах: в атомном ($t \rightarrow 0$) и в пределе свободных электронов ($U \rightarrow 0$). В рамках этого приближения Эдвардс и Герц обнаружили нарушение ферми-жидкостного характера электронных состояний при промежуточных значениях U .

Недавно Вермбтер и Чизхолл [49] дали улучшенную версию ЕНА-приближения и проделали детальные численные расчеты $\rho(\omega)$, $\text{Im } \Sigma(\omega)$, $\text{Re } \Sigma(\omega)$ для широкого интервала параметров U , n , T . В результате их исследования физическая картина перехода системы при измене-

нии U или n от ферми-жидкостного режима к диэлектрической фазе через область неферми-жидкостных состояний значительно прояснилась. Ниже мы изложим основные результаты работ [48, 49].

Рассмотрим снова предел $d = \infty$. Одноузловая функция Грина системы $G_{ii\sigma}(\omega)$ (обозначим ее для краткости $G_\sigma(\omega)$) выражается через плотность состояний $\rho_0(\omega)$ невзаимодействующих электронов с помощью соотношения

$$G_\sigma(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\rho_0(\varepsilon)}{\omega - \Sigma_\sigma(\omega) - \varepsilon}. \quad (3.42)$$

Следуя [49], представим собственно энергетическую часть в виде

$$\Sigma_\sigma(\omega) = \frac{Un_{-\sigma}}{1 - (U - \Sigma_\sigma(\omega))\tilde{G}_\sigma(\omega)}, \quad (3.43)$$

$$n_\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \rho_{0\sigma}(\varepsilon) f(\varepsilon). \quad (3.44)$$

Здесь $\rho_\sigma(\omega) = -(1/\pi) \text{Im } G_\sigma(\omega)$ — плотность состояний с учетом взаимодействия электронов, величина $\tilde{G}_\sigma(\omega)$ должна быть определена дополнительно. Заметим, что при замене $\tilde{G}_\sigma(\omega)$ на $G_\sigma(\omega)$ выражение (3.43) переходит в уравнение СРА-приближения, соответствующее "сплавной аналогии" для модели Хаббарда (приближение "Хаббард-3").

Следуя идее [48], необходимо выбрать $\tilde{G}_\sigma(\omega)$ в таком виде, чтобы соотношение (3.43) в атомном пределе переходило в уравнение СРА-приближения, а при $U \rightarrow 0$ давало известное выражение для собственной энергии стандартной теории возмущений.

Нетрудно проверить, что оба предела удовлетворяются, если выбрать $\tilde{G}_\sigma(\omega)$ в виде

$$\tilde{G}_\sigma(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\tilde{\rho}_0(\varepsilon)}{\omega - \Sigma_\sigma(\omega) + E_\sigma - \varepsilon}, \quad (3.45)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_0(\omega) = & \frac{1}{n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})} \int d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3 \times \\ & \times \rho_{-\sigma}^0(\omega_1 - E_{-\sigma}) \rho_{-\sigma}^0(\omega_2 - E_{-\sigma}) \rho_{\sigma}^0(\omega_3 - E_\sigma) \times \\ & \times \{f(\omega_1)[1 - f(\omega_2)] + f(\omega_3)[f(\omega_2) - f(\omega_1)]\} \times \\ & \times \delta(\omega + \omega_1 - \omega_2 - \omega_3). \end{aligned} \quad (3.46)$$

Здесь сдвиг E_σ , ведущий к эффективному атомному уровню для σ -электронов, должен быть вычислен самосогласованно из условия

$$n_\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho_\sigma(\omega) f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho_\sigma^0(\omega - E_\sigma) f(\omega). \quad (3.47)$$

Поскольку в атомном пределе $\rho_\sigma(\omega)$ определяет δ -функцию, формула (3.46) сводится к $\tilde{\rho}_\sigma(\omega) = \rho_0(\omega - E_\sigma)$ и мы получаем из (3.45) выражение

$$\tilde{G}_\sigma(\omega) = G^0(\omega - \Sigma_\sigma(\omega)) = G_\sigma(\omega),$$

ведущее к СРА-результату (приближение "Хаббард-3").

С другой стороны, разлагая (3.43) по степеням параметра U , получаем выражение

$$\Sigma_{\sigma}(\omega) = Un_{-\sigma} + U^2 n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma}) \tilde{G}_{\sigma}(\omega), \quad (3.48)$$

которое с учетом определений (3.45) и (3.46) сводится к результату теории возмущений. Уравнения (3.42)–(3.47) должны решаться интерполяциями с использованием гауссовой функции для "затравочной" плотности состояний $\rho_0(\omega)$.

Результаты численного расчета в рамках ЕНА-приближения представлены на рис. 12–14. Два первых рисунка относятся к модели Хаббарда при половинном заполнении. На рис. 12 показана эволюция плотности состояний для различных значений параметра U . При малых значениях U , в частности при $U = 0,5$, функция $\rho(\omega)$ мало отличается от гауссовой кривой, центрированной при $\omega = 0$. С ростом U пик $\rho(\omega)$ деформируется и смещается вправо, но так, что его высота (плотность состояний $\rho(\mu)$ на уровне Ферми $\mu = U/2$) остается постоянной вплоть до $U = 2$.

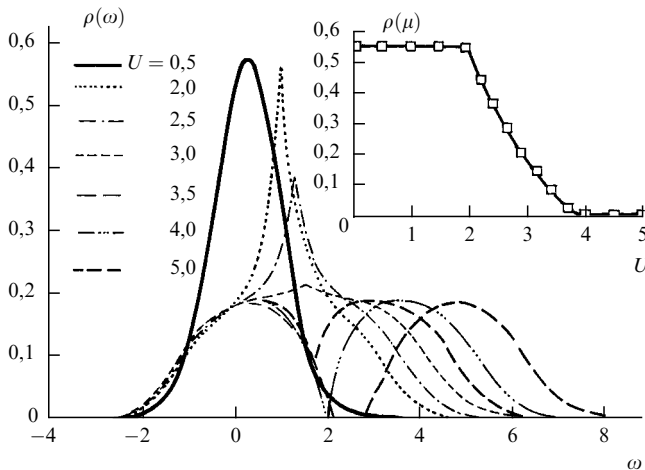


Рис. 12. Плотность состояний как функция ω для различных значений U при $n = 1$, $T = 0$ [53]. На вставке — плотность состояний на поверхности Ферми как функция U

При $U > 2$ интенсивность пика понижается. С дальнейшим ростом U вместо пика возникает провал, а справа от него постепенно формируется колоколообразная область, соответствующая верхней хаббардовской подзоне. При $U > 4$ нижняя и верхняя хаббардовские подзоны раздвигаются. Таким образом, при изменении U возникает ферми-переход из металлического в диэлектрическое состояние.

На вставке к рис. 12 изображена плотность состояний $\rho(\mu)$ на уровне Ферми в зависимости от U . В области $2 < U < 4$ система остается металлом, но ее свойства сильно отличаются от ферми-жидкости.

Расчет показывает, что при $U > 2$ мнимая часть собственной энергии $\text{Im} \Sigma(\omega)$ остается конечной на уровне Ферми, возрастает с ростом U , расходится при $U \approx 4$, после чего обращается в нуль (рис. 13). Поскольку в ферми-жидкости вблизи уровня Ферми должно быть $\text{Im} \Sigma(\omega) \propto (\omega - \mu)^2$, такое поведение означает нарушение ферми-жидкостной картины. Расчет

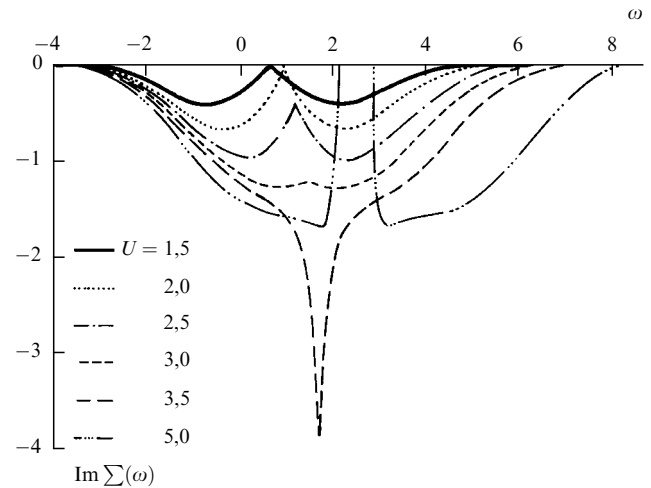


Рис. 13. Мнимая часть собственной энергии $\text{Im} \Sigma(\omega)$ для различных значений U при $n = 1$, $T = 0$ [53]

реальной части собственной энергии $\text{Re} \Sigma(\omega)$ показывает, что при $U \approx 4$ масса квазичастиц m^*/m расходится и на уровне Ферми возникает диэлектрическая щель.

Таким образом, ЕНА-приближение дает непрерывную эволюцию металлической фазы в диэлектрическую через промежуточную область неферми-жидкостного металлического состояния. Сравнение результатов ЕНА-приближения с "точным" результатом расчета по QMC-методу в пределе $d = \infty$ показывает, что приближенный подход Эдвардса–Герца дает полуколичественное совпадение в широком интервале параметров и температур.

Чрезвычайно интересные результаты возникают в пределе ЕНА-приближения для $n < 1$ (рис. 14). При отклонении от половинного заполнения плотность состояний $\rho(\omega)$ быстро деформируется от первоначальной гауссовой формы к двухпиковой форме, соответствующей двум хаббардовским подзонам. При уменьшении n плотность состояний на уровне Ферми достигает значений для некоррелированной системы и мы прихо-

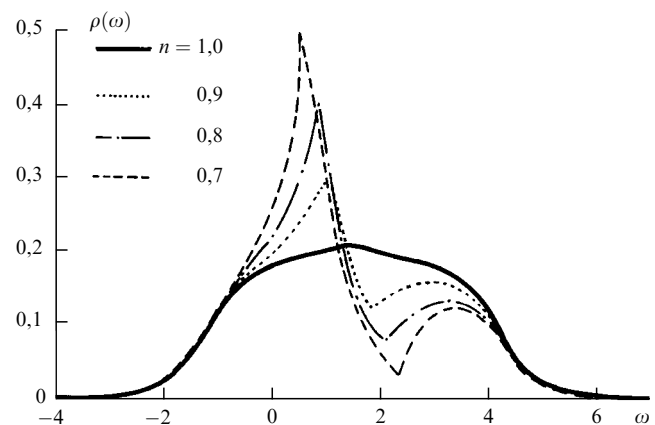


Рис. 14. Плотность состояний для различных значений n при $U = 3$, $T = 0$ [53]

дим к ферми-жидкостной картине. Для больших значений U это достигается при меньших электронных плотностях.

Таким образом, при $T = 0$ на плоскости (U, n) возникает фазовая диаграмма, изображенная на рис. 15. Сплошная кривая, вычисленная в модели полуэллиптической плотности состояний [48], определяет область ферми-жидкостного поведения системы. Штриховая кривая схематически ограничивает область антиферромагнитной фазы.

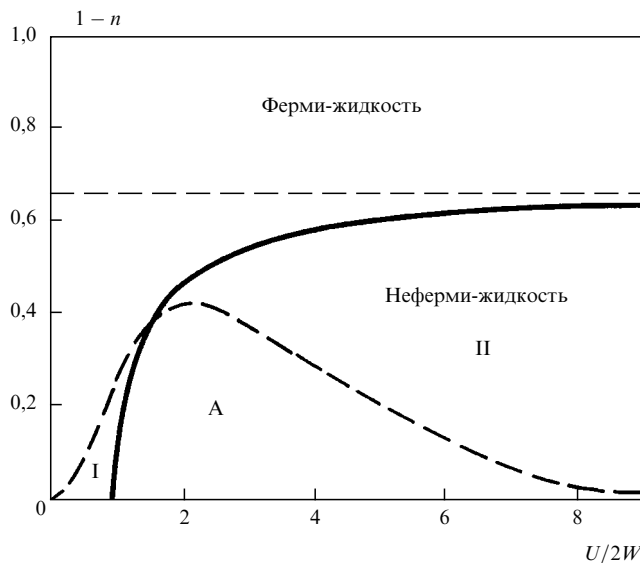


Рис. 15. Фазовая диаграмма модели Хаббарда на плоскости (U, n) при $T = 0$ К [48]

Магнитное упорядочение возникает при $n = 1$ для всех значений U . Тем самым предполагается полный нестинг. В области I реализуется антиферромагнетизм в ферми-жидкостной фазе. Область II соответствует разупорядоченной металлической (но неферми-жидкостной) фазе. В остальной области фазовой диаграммы антиферромагнетизм реализуется частично в металлической, а частично в диэлектрической фазе.

Следует обратить внимание на связь двух явлений: появление локализованных магнитных моментов и возникновение неферми-жидкостного поведения. В ферми-жидкостной области локализованных магнитных моментов нет. Они возникают при $U \geq 2$, быстро растут с ростом U и приводят сначала к неферми-жидкостному металлическому, а затем (при $U \geq 4$) к диэлектрическому состоянию.

Отметим, что попытка обоснования ЕНА-приближения в терминах стандартной диаграммной техники была предпринята недавно в [50]. Основная задача сводилась к построению функционала $\Sigma[G]$, существование которого означало бы, что соответствующее приближение является "сохраняющим" [51, 52]. Однако такой функционал не был найден, и проблема обоснования ЕНА-приближения или его корректировки требует дополнительного исследования. Отдельные вопросы теории в пределе $d = \infty$ и сравнение с результатами теории возмущений см. в [54–61].

4. Метод континуального интегрирования

4.1. Статический предел и приближение когерентного потенциала

Первые успешные теории магнитного поведения модели Хаббарда в широком интервале параметров U и n основывались на представлении статистической суммы Z в виде континуального интеграла и использовании в нем статического приближения [62–65]. Метод восходит к работе [66], в которой изучалась однопримесная модель Андерсона [4]. В предыдущем разделе такое представление использовалось для одноузельной модели.

Обобщая формулу (3.28) на полную решетку, представим статистическую сумму Z в виде континуального интеграла по полям η и ξ :

$$Z = Z_0 \int \delta\eta \delta\xi \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\xi_n^2 + \eta_n^2) + \text{Tr} \ln (1 - G^0 \hat{V}) \right\}. \quad (4.1)$$

Здесь интегрирование ведется по полям η_{in} и ξ_{in} , так что

$$\delta\eta \delta\xi = \prod_i \delta\eta_i \delta\xi_i,$$

$$\delta\eta_i = d\eta_{i0} \prod_n d^2\eta_{in}, \quad d^2\eta_{in} = d(\text{Re } \eta_{in}) d(\text{Im } \eta_{in})$$

(аналогично для $\delta\xi_i$).

След в экспоненте (4.1) ведется по всем состояниям, характеризующимся индексом узла, частотой и спином; оператор $\hat{V}$ диагонален по узлам и спинам, причем

$$V_{i\sigma} = \sqrt{\frac{U}{2\beta}} (\sigma \hat{\eta}_i + \hat{\xi}_i) \quad (4.2)$$

($\hat{\eta}_i$ и $\hat{\xi}_i$ — матрицы по частотным индексам m и n), Z_0 — статистическая сумма для электронов в отсутствие взаимодействия.

Проблема вычисления статистической суммы Z свелась фактически к вычислению одноэлектронной функции Грина $G = (1 - G^0 \hat{V}) G^0$ в продольном флуктуирующем внешнем поле (локально неоднородном и зависящем от времени) и усреднению по этим полям с гауссовой функцией распределения.

Статическое приближение состоит в том, что в выражении (4.1) под знаком следа отбрасываются все компоненты поля η_{in} и ξ_{in} , кроме компонент η_{i0} и ξ_{i0} , соответствующих нулевой частоте (будем обозначать их просто η_i и ξ_i).

В остающемся континуальном интеграле интегрирование по зарядовым полям ξ_i производится методом стационарной фазы, поскольку считается, что они более высокочастотные, чем флуктуации спинового поля. В итоге мы получаем статистическую сумму в виде континуального интеграла по статическому полю η_i :

$$Z_{\text{stat}} = Z_0 \int \prod_i \delta\eta_i \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_i \eta_i^2 + \text{Tr} \ln (1 - G^0 \hat{V}) \right\}, \quad (4.3)$$

где $V'_{i\sigma} = \sqrt{U/2\beta} \sigma \eta_i$.

Применяя СРА-приближение для величины $1 - G^0 \hat{V}$, можно представить континуальный интеграл (4.3) в виде

произведения простых интегралов, относящихся к одному узлу:

$$Z \approx Z_0 \prod_i \int_{-\infty}^{\infty} \delta\eta_i P(\eta_i).$$

Здесь

$$P(\eta_i) = \frac{1}{P} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \eta_i^2 + \sum_{\omega, n} \sum_{\sigma} \ln [\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) - V'_{i\sigma}] \right\} \quad (4.4)$$

— функция распределения полей η_i .

В выражении (4.4) $\mathcal{G}_{\sigma}$ — функция Грина эффективной среды, которая в СРА-методе определяется из (3.19) и (3.21), P — нормировочный множитель. Средние значения

$$\langle \eta \rangle \equiv \int d\eta P(\eta) \eta, \quad \langle \eta^2 \rangle \equiv \int d\eta P(\eta) \eta^2 \quad (4.5)$$

определяют спонтанный момент m и локализованный момент на атоме $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$.

Таким образом, в статическом приближении проблема свелась к вычислению функции Грина $\mathcal{G}_{\sigma}$ в СРА-схеме и последующему вычислению функции распределения полей $P(\eta)$. Эта задача должна решаться численно. Как мы увидим ниже, статическое приближение хорошо связывает два предела: $U \gg W$ и $U \ll W$, т.е. теория имеет интерполяционный характер между режимом с локализованными магнитными моментами и коллективизированным магнетизмом.

Статическое приближение работает хорошо при высоких температурах и приводит к трудностям при низких температурах. Так, оно нарушает ряд термодинамических свойств при $T = 0$, как-то [64]

$$\left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_{T=0} = 0, \quad (C_V)_{T=0} = 0, \quad \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{T=0} = 0.$$

Однако эти соотношения не нарушаются, когда вместо СРА-метода используется РРА-приближение [67].

Далее, статическое приближение не включает спин-волновые возбуждения и переоценивает разницу в энергии ферромагнитного и парамагнитного состояний [64] из-за пренебрежения корреляциями. Последний недостаток можно устранить, включив корреляции с помощью вариационного подхода Гутцвиллера [2, 19]. В этом случае возникает теория [64], в которой свободная энергия при $T = 0$ дает коррелированное основное состояние, а при $T \rightarrow \infty$ совпадает с результатами статического приближения.

4.2. Численный расчет для половинного заполнения

На рис. 16–18 приведены результаты расчета магнитных свойств модели Хаббарда для простой кубической решетки в случае половинного заполнения ($n = 1$). Расчеты проведены в рамках статического приближения (штриховые кривые) и с учетом динамических поправок по вариационному методу (сплошные кривые). Различными символами изображены результаты численного расчета для малых кластеров по QMC-методу. При $n = 1$ основное состояние системы — неелевский антиферромагнетик.

На рис. 16 показаны намагниченность подрешетки и среднеквадратичный магнитный момент на узле в зависимости от параметра U . Видно, что с ростом U намагниченность растет от 0 до 1 (в магнетонах Бора), плавно переходя в режим гейзенберговского магнетика с атомным спином $S = 1/2$ при $U \rightarrow \infty$. Наиболее быстрое изменение локализованного момента происходит при $U \sim W$. Оба расчета дают мало различающиеся результаты, близкие к данным расчетов для малых кластеров (кружки) [68]. В отличие от намагниченности $\langle m \rangle$, локализованный момент $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$ слабо зависит от U .

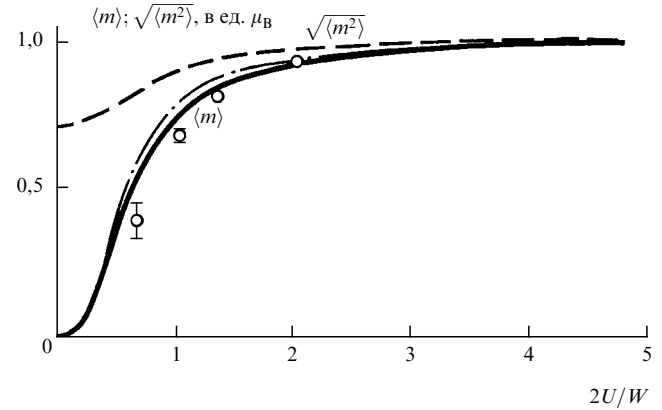


Рис. 16. Намагниченность подрешетки $\langle m \rangle$ и локализованный момент $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$ для модели Хаббарда при $n = 1$, $T = 0$ [64]: штриховая кривая — в статическом приближении; сплошная кривая — с включением динамических поправок [65]; кружки — расчет для малых кластеров [68]

Два следующих рисунка представляют температурное изменение магнитных свойств. На рис. 17 показана фазовая диаграмма на плоскости (T, U) . Сплошная (или штриховая) кривая отделяет антиферромагнитную фазу от двух парамагнитных фаз — металлической и диэлектрической. Кривая, разделяющая парамагнитную и анти-

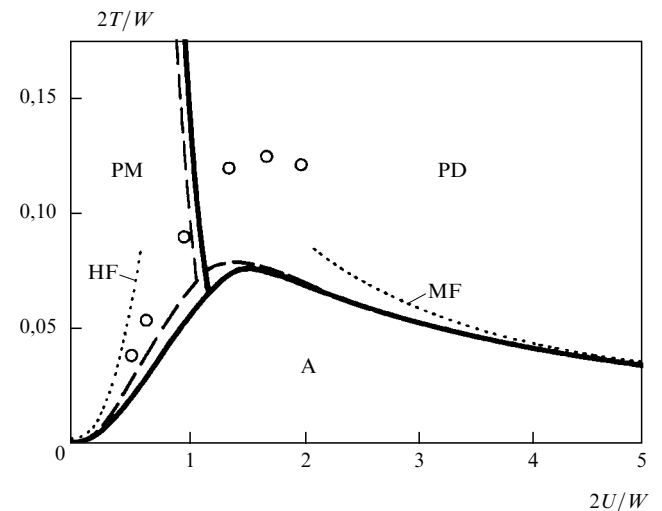


Рис. 17. Фазовая диаграмма на плоскости (T, U) , показывающая антиферромагнитную фазу (A), парамагнитную фазу металла (PM) и парамагнитную фазу диэлектрика (PD) [65]. Обозначения кривых те же, что и на рис. 16; кружки — расчет для малых кластеров [69]

ферромагнитную фазы, получена из расчета температуры Нееля при различных $2U/W$, а кривая, разделяющая металлическую и диэлектрическую фазы, — по обращению в нуль щели в электронном спектре. Внутри антиферромагнитной фазы такая кривая не рассчитывалась.

Пунктирные кривые определяют границы антиферромагнитной фазы в приближениях Хартри–Фока (при малых $U \ll W$) и молекулярного поля (при больших $U \gg W$). Сплошная (или штриховая) кривая связывает эти два предела. Таким образом, СРА-теория является интерполяционной теорией. Большое расхождение этой теории с расчетами для малых кластеров объясняется, по-видимому, размерными эффектами [65].

Температурная зависимость обратной магнитной восприимчивости в широком интервале температур линейна. Кюри-вейсовское поведение восприимчивости указывает на существование локализованных магнитных моментов, слабо зависящих от температуры. Это подтверждается непосредственным расчетом $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$ при различных T .

На рис. 18 приведены результаты для различных значений параметра $2U/W$. В пределе больших U имеет место совпадение с результатами приближения молекулярного поля, а в пределе малых U — с результатами приближения Хартри–Фока. Полученная картина магнитного поведения модели при $n = 1$, по-видимому, слабо чувствительна к "затравочной" плотности состояний электронного спектра. Так, для полуэллиптической плотности состояний магнитная фазовая диаграмма остается такой же, как на рис. 17 [70].

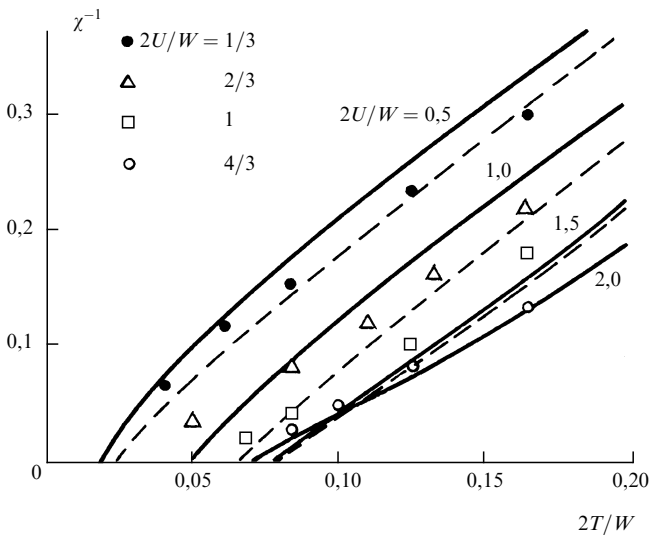


Рис. 18. Температурная зависимость обратной магнитной восприимчивости антиферромагнитной фазы при различных значениях $2U/W$ [65]. Обозначения кривых те же, что и на рис. 16; различные точки — расчеты для малых кластеров [69]

Представленные результаты свидетельствуют о том, что простая теория, в которой используются статическое приближение и СРА-метод, не очень чувствительна к учету электронных корреляций. Такой вывод, однако, может сильно измениться при отклонении от половинного заполнения, поскольку корреляции в этом случае могут быть более важными.

5. Вариационные методы

5.1. Волновая функция Гутцвиллера

Вариационные методы в задачах статистической физики особенно эффективны, когда отсутствует возможность построения регулярной теории возмущений. С помощью пробной волновой функции ψ_0 можно учесть корреляционные эффекты чисто интуитивным путем и найти энергию основного состояния, варьируя среднюю энергию

$$E = \frac{(\psi_0^* H \psi_0)}{(\psi_0^* \psi_0)} \quad (5.1)$$

по свободным параметрам, входящим в ψ_0 .

Для модели Хаббарда Гутцвиллер предложил выбрать ψ_0 в виде [2]

$$\psi_0 = \prod_i [1 - (1 - g)D_i] |0\rangle = g^D |0\rangle, \quad (5.2)$$

где $|0\rangle$ — "вакуумная" волновая функция, $D_i = n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$, $D = \sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$, т.е. D — оператор числа пар электронов на узлах решетки, $0 < g < 1$ — вариационный параметр. При $g = 1$ мы имеем систему невзаимодействующих электронов. Значение $g = 0$ соответствует $U = \infty$, когда все состояния с двойками на одном узле отброшены.

Таким образом, промежуточные значения вариационного параметра g соответствуют состояниям с конечным числом двоек в системе (обозначим его $N\bar{d}$). Однако, как видно из (5.2), вероятность их быстро убывает с ростом этого числа (d представляет собой среднее число узлов, занятых двойками).

Волновая функция (5.2) глобальным образом учитывает уменьшение вероятности состояний с большим числом двоек. Как оказалось (см., например, [71]), столь простой способ учета корреляционных эффектов дает хорошие результаты, в особенности при расчете энергии основного состояния.

Выбор "вакуумной" волновой функции в (5.2) определяется типом основного состояния. Для парамагнитной фазы $|0\rangle$ выбирается в виде волновой функции "ферми-моря":

$$|0\rangle = \prod_{k\sigma} a_{k\sigma}^\dagger |\text{vac}\rangle. \quad (5.3)$$

Здесь $|\text{vac}\rangle$ — волновая функция истинного вакуума.

Для основного состояния с нарушенной симметрией $|0\rangle$ выбирается как волновая функция в приближении Хартри–Фока. Например, для антиферромагнитного состояния с волновым вектором $\mathbf{Q}$ "вакуумная" волновая функция

$$|0\rangle = \prod_{k\sigma} [u_k a_{k\sigma}^\dagger + v_k a_{k+Q\sigma}^\dagger] |\text{vac}\rangle, \quad (5.4)$$

где u_k и v_k — известные коэффициенты u - v -преобразования.

Рассмотрим парамагнитное основное состояние. Энергия E_0 является функцией среднего числа двоек $\bar{d}$. Она содержит два слагаемых: потенциальную энергию $U\bar{d}$, растущую с ростом $\bar{d}$, и кинетическую энергию, убывающую с ростом $\bar{d}$. Существует некоторое опти-

мальное значение $\bar{d}$, получаемое дифференцированием средней энергии (5.1) по параметру $\bar{d}$. При этом вариационный параметр g связан с $\bar{d}$ соотношением [71]

$$g^2 = \frac{\bar{d}(1 - n_{\uparrow} - n_{\downarrow} + \bar{d})}{(n_{\uparrow} - \bar{d})(n_{\downarrow} - \bar{d})}. \quad (5.5)$$

Для парамагнитной фазы среднее число электронов на узле $n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = n/2$.

В случае ферромагнитной фазы величины $n_{\uparrow}$ и $n_{\downarrow}$ (или намагниченность $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$) должны находиться варьированием энергии (5.1), наряду с величиной $\bar{d}$. Для антиферромагнитного основного состояния (5.4) энергия должна варьироваться по намагниченности подрешетки m и щели Δ в электронном спектре, входящей в коэффициенты u - v -преобразования. Для этого случая между g и $\bar{d}$ существует связь типа (5.5) [72].

5.2. Приближение Гутцвиллера

При вычислении энергии основного состояния с помощью волновой функции (5.1) Гутцвиллер использовал приближение [19], при котором подсчет числа спиновых конфигураций производится классическим методом с помощью комбинаторных приемов. Этот эвристический прием не имел обоснования до тех пор, пока не было показано, что приближение Гутцвиллера точно соответствует вычислению энергии с волновой функцией (5.1) в пределе $d = \infty$ [72, 76]. Мы видим, таким образом, еще раз функциональную роль предела $d = \infty$ для установления связи между различными подходами, которые используются в СКЭС-теории.

Воспроизведем кратко результаты вычисления энергии основного состояния в пределе $d = \infty$ [72–76]. Для вычисления $\langle \psi_0^* H \psi_0 \rangle$ была развита диаграммная техника по параметру $1 - g^2$. Она оказалась стандартной техникой для функций Грина, но только без учета динамики.

Ряды теории возмущений выражаются через функции нулевого приближения:

$$P_{ij\sigma}^0 \equiv \langle \psi_0^* C_{i\sigma}^\dagger C_{j\sigma} \psi_0 \rangle. \quad (5.6)$$

При больших размерностях пространства d их поведение (как функций расстояния между узлами) определяется асимптотикой типа (3.5), откуда следует, что в пределе $d = \infty$ неприводимая собственно энергетическая часть локальна, т.е.

$$S_{ij\sigma}^* = \delta_{ij} S_{i\sigma}^*. \quad (5.7)$$

Сумма всех неприводимых диаграмм в пределе $d = \infty$ выражается через точный коррелятор $P_{i\sigma}$:

$$S_{i\sigma}^* = -\frac{1}{2P_{i\sigma}} \left[1 - \sqrt{1 + 4(1 - g^2)P_{i\sigma}P_{i\sigma}^*} \right]. \quad (5.8)$$

При этом матрицы P_σ и P_σ^0 связаны уравнениями

$$P_\sigma = P_\sigma^0 + P_\sigma^0 S_\sigma P_\sigma^0, \quad (5.9)$$

$$S_\sigma = \frac{1}{1 - S_\sigma^* P_\sigma} S_\sigma^* \sigma. \quad (5.10)$$

Для трансляционно-инвариантной системы величина $S_{i\sigma}^* = S_\sigma^*$ находится из уравнений (5.8)–(5.10) и выражается через среднее число электронов n_σ на узле со

спином σ :

$$S_\sigma^* = \frac{E_\sigma - \sqrt{E_\sigma^2 - 4(1 - g^2)(1 - n_\sigma)n_\sigma}}{2(1 - n_\sigma)}, \quad (5.11)$$

где

$$E_\sigma = 1 - (1 - g^2)(n_\sigma - n_{-\sigma}).$$

Вычисление средней энергии (5.1) приводит к формуле

$$\frac{E}{N} = \sum_\sigma q_\sigma \bar{e}_{0\sigma} + U\bar{d}. \quad (5.12)$$

Здесь

$$q_\sigma = 1 - \frac{S_\sigma^*}{(1 + g)^2} \left(1 - \frac{g^2}{1 - S_\sigma^*} \right), \quad (5.13)$$

$$\bar{d} = \frac{g^2 n_\sigma}{1 - g^2} \frac{S^*}{1 - S^*}, \quad (5.14)$$

$\bar{e}_{0\sigma}$ — кинетическая энергия (на один узел решетки) невзаимодействующих электронов.

Формула (5.12) с учетом (5.13) и (5.14) выражает энергию системы в зависимости от параметров $n_{\uparrow}$, $n_{\downarrow}$ и g . Минимизируя по этим параметрам, можно найти энергию E_0 основного состояния.

Заметим, что в фурье-пространстве величина P_σ^0 есть число частиц $n_{k\sigma}^0$ с импульсом k . Поэтому в основном состоянии из (5.10) следует, что величина S_σ является разрывной функцией импульса:

$$S_\sigma = \begin{cases} \frac{S_\sigma^*}{1 - S_\sigma^*}, & k < k_{F\sigma}, \\ S_\sigma^*, & k > k_{F\sigma}. \end{cases} \quad (5.15)$$

В результате функция распределения частиц по импульсам при $k = k_{F\sigma}$ имеет скачок величины q_σ , определяемой соотношением (5.13). Таким образом, в пределе $d = \infty$ энергия в модели Хаббарда выражается через среднее число двоек и скачок импульса на поверхности Ферми.

Замечательно, что выражение (5.12) совпадает с результатом, полученным в приближении Гутцвиллера, т.е. это приближение является точным в пределе $d = \infty$. В общем случае (без предположения о трансляционной инвариантности) вместо (5.12) имеем формулу [74]

$$E = \sum_{i,j,\sigma} \sqrt{q_{i\sigma} q_{j\sigma}} P_{ij\sigma}^0 + U \sum_i \bar{d}_i, \quad (5.16)$$

в которую входят локальные величины d_i и $q_{i\sigma}$, определяемые соотношениями (5.14) и (5.13) с локальными величинами $n_{i\sigma}$ и $S_{i\sigma}^*$. Теория может быть обобщена так, чтобы давать поправки в виде разложения по степеням около предела $d = \infty$ [76].

Расчет по формулам теории в пределе $d = \infty$ приводит к прекрасному согласию с результатами расчета для $d = 2$ по QMC-методу. В случае $d = 3$ согласие еще лучше. Из рис. 19 видно, что даже при $d = 2$ поправки $1/d$ очень малы, т.е. приближение Гутцвиллера дает весьма точно энергию основного состояния, причем эта энергия слабо чувствительна к размерности пространства d .

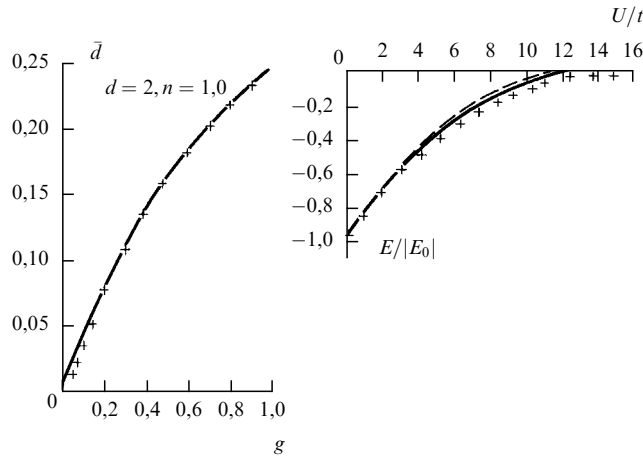


Рис. 19. Сравнение расчетов в приближении Гутцвиллера (пунктирная линия) с поправками $1/d$ (сплошная линия) и расчетами по QMC-методу (крестики) для: (а) среднего числа пар; (б) энергии основного состояния в двумерной модели Хаббарда [76]

Сравнение энергий парамагнитной, ферромагнитной и антиферромагнитной фаз позволяет построить фазовую диаграмму на плоскости (U, n) (рис. 20). Границы фаз в предположении, что обе магнитоупорядоченные области однородны, даны пунктирными линиями. Если предположить возможность существования неоднородных фаз, эти границы изменятся (сплошные линии на рис. 20).

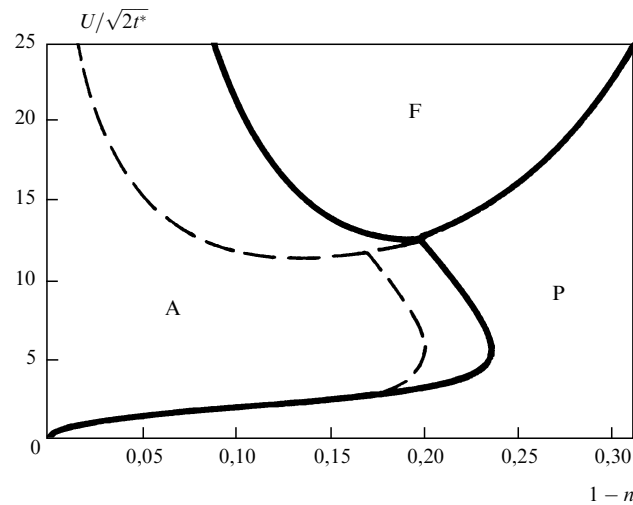


Рис. 20. Магнитная фазовая диаграмма при $T=0$ [77] (сплошные линии). Пунктирные линии соответствуют фазовой диаграмме, учитывающей только однородные состояния

Оказывается, что энергетически выгодно возникновение антиферромагнитной фазы с включением малых областей ферромагнитной фазы. Возможность появления в модели Хаббарда таких смешанных фаз изучалась детально в ряде работ [78–82].

Заметим, что при получении магнитной фазовой диаграммы в [77] использовалась гауссова плотность состояний в затравочном спектре (3.4), соответствующем пределу $d=\infty$. Поэтому величина U на рис. 20 дана в единицах t^* . Вариационные подходы использовались также при исследовании ферромагнитного состояния в модели Хаббарда [83, 84].

6. Метод вспомогательных бозонов и фермионов

6.1. X-операторы

В условиях сильного кулоновского взаимодействия ($U \gg t$) в качестве гамильтониана нулевого приближения можно брать кулоновский член. Поскольку в модели Хаббарда учитывается взаимодействие электронов лишь на одном узле, проблема нулевого приближения сводится к одноузельной и легко решается точно. В этой ситуации удобно использовать базис

$$P(|i0\rangle, |i+\rangle, |i-\rangle, |i2\rangle) \quad (6.1)$$

локализованных атомных функций на узле, описывающих состояния без электронов, с одним электроном и с двойкой соответственно.

Переходы между состояниями описываются матрицами 4×4 , соответствующими X-операторам Хаббарда [85]

$$X_i^{pq} = |ip\rangle\langle iq|.$$

Все элементы такой матрицы равны нулю, кроме одного, стоящего на пересечении p -строки и q -столбца, равного 1.

Число электронов на узле при переходе из состояния $|iq\rangle$ в состояние $|ip\rangle$ может измениться на 1, 2 или остаться неизменным. Это означает, что часть независимых X^{pq} -операторов является фермиподобной (f -операторами), часть — бозеподобной (b -операторами):

$$f(X^{0\sigma}, X^{\sigma 0}, X^{\sigma 2}, X^{2\sigma}), \quad b(X^{+-}, X^{-+}, X^{20}, X^{02}), \quad (6.2)$$

четыре — диагональными:

$$X^{00}, X^{++}, X^{--}, X^{22}.$$

Очевидно, что произведение двух X-операторов также является X-оператором или равно нулю согласно правилу

$$X^{rs}X^{pq} = \delta_{sp}X^{rq}. \quad (6.3)$$

С помощью правила (6.3) можно составить коммутатор или антикоммутатор двух X-операторов:

$$[X_i^{rs}, X_j^{pq}]_{\pm} = \delta_{ij}[\delta_{sp}X_i^{rq} \pm \delta_{rq}X_i^{ps}]. \quad (6.4)$$

Разумеется, коммутатор берется для b -операторов, а антикоммутатор — для f -операторов.

Для X-операторов имеет место следующее тождество:

$$X_i^{00} + \sum_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma} + X_i^{22} = 1, \quad (6.5)$$

выражающее полноту одноузельных состояний (6.1). X-операторы могут быть выражены через ферми-операторы с помощью соотношений

$$\begin{aligned} X_i^{00} &= (1 - n_{i\uparrow})(1 - n_{i\downarrow}), & X_i^{\sigma\sigma} &= n_{i\sigma}(1 - n_{i-\sigma}), \\ X_i^{22} &= n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}, & X_i^{\sigma 0} &= a_{i\sigma}^{\dagger}(1 - n_{i-\sigma}), & X_i^{2\sigma} &= \sigma a_{i-\sigma}^{\dagger}n_{i\sigma}, \\ X_i^{\sigma, -\sigma} &= a_{i\sigma}^{\dagger}a_{i, -\sigma}, & X_i^{20} &= \sigma a_{i, -\sigma}^{\dagger}a_{i\sigma}^{\dagger}. \end{aligned} \quad (6.6)$$

(Сопряженные операторы находятся по правилу $(X^{pq})^\dagger = X^{qp}$.)

Из соотношений (6.6) видно, что $X_i^{\sigma 0}$ и $X_i^{2\sigma}$ являются фермиоподобными операторами. Через их линейную комбинацию могут быть выражены сами ферми-операторы:

$$a_{i\sigma}^\dagger = X_i^{\sigma 0} + \sigma X_i^{2,-\sigma}. \quad (6.7)$$

Гамильтониан (1.1) СКЭС-модели (с включенным в него химическим потенциалом μ) в терминах X -операторов имеет вид

$$\begin{aligned} H = & \sum_i \{ -\mu X_i^{++} - \mu X_i^{--} + (U - 2\mu) X_i^{22} \} + \\ & + t \sum_{i,j} \{ (X_i^{+0} + X_i^{2-})(X_j^{0+} + X_j^{-2}) + \\ & + (X_i^{-0} - X_i^{2+})(X_j^{0-} - X_j^{+2}) \}. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Замечательно, что в этом представлении кулоновский член, который был четверным в терминах ферми-операторов, стал линейным в терминах X -операторов, а кинетическая энергия стала квадратичной формой по ним. Именно в этой линеаризации кулоновского члена и заключаются все преимущества X -операторов.

Выражение (6.8) открывает возможность построения регулярной теории возмущений по степеням t/U в виде диаграммной техники для X -операторов [86, 24]. Мы кратко описали ее в нашем предыдущем обзоре [6] и не будем касаться этого вопроса здесь. Поскольку алгебра X -операторов достаточно сложна, диаграммная техника с ними оказывается весьма не простой, хотя и имеет определенные преимущества.

В данном обзоре мы остановимся на других подходах, в которых X -операторы выражаются с помощью произведений обычных ферми- и бозе-операторов. Такие представления и составляют технику вспомогательных бозонов и фермионов, первоначально изложенную в [87, 88] для других моделей.

6.2. Представление X -операторов бозонами и фермионами

Имеется много различных представлений такого рода. Их можно получить, используя следующую общую связь между X_i^{pq} -операторами и соответствующей матрицей X^{pq} :

$$X_i^{pq} = \psi_i^\dagger X^{pq} \psi_i, \quad (6.9)$$

где ψ_i — четырехкомпонентный столбец, составленный из ферми- и бозе-операторов уничтожения.

Рассмотрим вначале предельный случай модели Хаббарда — t - J -модель, в которой учитываются только три состояния на узле: $|i0\rangle$, $|i+\rangle$, $|i-\rangle$. Выбирая ψ_i в виде

$$\psi_i^\dagger = (b_i^\dagger, f_{i\uparrow}^\dagger, f_{i\downarrow}^\dagger),$$

где $b_i^\dagger$ — бозе-оператор, а $f_{i\sigma}^\dagger$ — ферми-оператор, с помощью (6.9) получаем выражения

$$X_i^{0\sigma} = b_i^\dagger f_{i\sigma}, \quad X_i^{+-} = f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\downarrow}, \quad (6.10)$$

которые удовлетворяют перестановочным соотношениям для X -операторов при дополнительном условии

$$b_i^\dagger b_i + \sum_\sigma f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} = 1. \quad (6.11)$$

Это — так называемое представление вспомогательных бозонов.

Выбирая ψ_i в виде

$$\psi_i^\dagger = (f_i^\dagger, b_{i\uparrow}^\dagger, b_{i\downarrow}^\dagger),$$

получаем представление вспомогательных фермионов

$$X_i^{0\sigma} = f_i^\dagger b_{i\sigma}, \quad X_i^{+-} = b_{i\uparrow}^\dagger b_{i\downarrow} \quad (6.12)$$

при дополнительном условии

$$\sum_\sigma b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} + f_i^\dagger f_i = 1. \quad (6.13)$$

В обоих случаях вспомогательная частица (бозон или фермион) не несет никакого другого индекса, кроме узельного.

Для модели Хаббарда можно привести, например, следующее представление через вспомогательные бозоны [89]:

$$\begin{aligned} X_i^{0\sigma} &= e_i^\dagger f_{i\sigma}, & X_i^{00} &= e_i^\dagger e_i, \\ X_i^{2\sigma} &= d_i^\dagger f_{i\sigma}, & X_i^{\sigma\sigma} &= f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}, \\ X_i^{02} &= e_i^\dagger d_i, & X_i^{22} &= d_i^\dagger d_i \end{aligned} \quad (6.14)$$

при дополнительном условии

$$e_i^\dagger e_i + d_i^\dagger d_i + \sum_\sigma f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} = 1. \quad (6.15)$$

Здесь бозе-операторы $e_i^\dagger$ и $d_i^\dagger$ порождают состояния $|i0\rangle$ с пустым узлом и $|i2\rangle$ с двойкой, а ферми-оператор $f_{i\sigma}^\dagger$ порождает состояние $|i\sigma\rangle$ с одним электроном на узле:

$$|i0\rangle = e_i^\dagger |\text{vac}\rangle, \quad |i\sigma\rangle = f_{i\sigma}^\dagger |\text{vac}\rangle, \quad |i2\rangle = d_i^\dagger |\text{vac}\rangle, \quad (6.16)$$

где $|\text{vac}\rangle$ — волновая функция полного вакуума.

В [90] предложено записывать базисные функции с помощью четырех вспомогательных бозонов:

$$|i0\rangle = e_i^\dagger |\text{vac}\rangle, \quad |i\sigma\rangle = f_{i\sigma}^\dagger p_{i\sigma}^\dagger |\text{vac}\rangle, \quad |i2\rangle = f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\downarrow}^\dagger d_i^\dagger |\text{vac}\rangle. \quad (6.17)$$

Такой выбор базисных функций приводит к более сложному (не билинейному) представлению X -операторов. При этом должны выполняться условия, гарантирующие устранение нефизических состояний:

$$\begin{aligned} e_i^\dagger e_i + \sum_\sigma p_{i\sigma}^\dagger p_{i\sigma} + d_i^\dagger d_i &= 1, \\ f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} &= p_{i\sigma}^\dagger p_{i\sigma} + d_i^\dagger d_i = 0. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Гамильтониан (1.1) в представлении (6.17) имеет вид

$$H = t \sum_{i,j,\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} Z_{i\sigma}^\dagger Z_{j\sigma} + U \sum_i d_i^\dagger d_i, \quad (6.19)$$

где

$$Z_{i\sigma} = e_i^\dagger p_{i\sigma} + p_{i,-\sigma}^\dagger d_i.$$

Таким образом, кулоновская часть гамильтониана диагональна, но все трудности переносятся на кинетическую часть, имеющую теперь форму ферми-бозонного взаимодействия. Такая ситуация типична при использовании различных представлений X -операторов, хотя кинетическая энергия может принимать различную форму.

Имеется обширная литература с использованием техники вспомогательных бозонов и фермионов в модели Хаббарда и t - J -модели (см., например, [91–98]), в особенности вблизи половинного заполнения. В [96] проведено сравнение результатов с использованием вспомогательных бозонов и фермионов для t - J -модели. Общего рецепта выбора конкретного представления не существует.

6.3. Учет констрейнов

Выражение X -операторов через ферми- и бозе-операторы сводит задачу к методам стандартной теории возмущений для ферми- и бозе-систем, однако это оборачивается другой трудностью — необходимостью учитывать дополнительные условия (констрейны) типа (6.14) и (6.18), устраняющие нефизические состояния, т.е. возвращающие расширенное гильбертово пространство к исходному.

Учет констрейнов обычно производится с помощью лагранжевых множителей при записи выражений для статистической суммы, представляющей континуальный интеграл по ферми- и бозе-полям. Так, для гамильтониана в форме (6.19) после интегрирования по грасмановым переменным получаем следующий континуальный интеграл по бозе-полям e_i , $p_{i\uparrow}$, $p_{i\downarrow}$ и d_i [90]:

$$Z = \int \delta e \delta p_\uparrow \delta p_\downarrow \delta d \prod_{i\sigma} \delta \lambda_i \delta \lambda'_{i\sigma} \exp \left[- \int_0^\beta d\tau S(\tau) \right], \quad (6.20)$$

где

$$\begin{aligned} S(\tau) = & \sum_i e_i^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \lambda_i \right) e_i + \sum_{i,\sigma} p_{i\sigma}^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \lambda_i - \lambda'_{i\sigma} \right) p_{i\sigma} + \\ & + \sum_i d_i^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + U + \lambda_i - \lambda'_{i\sigma} \right) d_i - \lambda_i + \\ & + \text{Tr} \ln \left[\delta_{ij} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu + \lambda'_{i\sigma} \right) + t_{ij} Z_{i\sigma}^\dagger Z_{j\sigma} \right]. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Здесь λ_i и $\lambda_{i\sigma}$ — множители Лагранжа для первого и второго уравнений (6.18). Констрейны (6.18) локальны, поэтому λ_i и $\lambda_{i\sigma}$ зависят от узла i . Однако они не зависят от второй переменной τ , поскольку оба констрейна (6.18) коммутируют с гамильтонианом (6.19).

В качестве первого приближения в работе с континуальным интегралом (6.20) используем приближение седловой точки, в котором предполагается, что бозе-поля и лагранжевы множители не зависят от узлов и времени. Это означает статическое приближение по бозе-полям и замену локальных констрейнов глобальными, т.е. выполняющимися только в среднем.

Статическое приближение приводит к следующему выражению для свободной энергии $f = -kT \ln Z/N$:

$$\begin{aligned} f = & Ud^2 - T \sum_\sigma \int d\varepsilon \rho_0(\varepsilon) \ln \{ 1 + \exp[-\beta(q_\sigma \varepsilon - \mu + \lambda'_\sigma)] \} + \\ & + \lambda \left(\sum_\sigma p_\sigma^2 + e^2 + d^2 - 1 \right) - \sum_\sigma \lambda'_\sigma (p^2 + d^2), \end{aligned} \quad (6.22)$$

где $q_\sigma = \langle Z_{i\sigma}^\dagger Z_{i\sigma} \rangle$. В парамагнитном случае при половинном заполнении ($n = 1$, $\mu = U/2$) отсюда после минимизации по λ и λ'_σ получаем свободную энергию как функцию лишь одного параметра d . Для $T = 0$ имеем

$$f = 2q \int d\varepsilon \rho_0(\varepsilon) \varepsilon f(q\varepsilon) + Ud^2, \quad (6.23)$$

где

$$q = 8d^2(1 - 2d^2). \quad (6.24)$$

Интеграл по ε в (6.23) представляет собой среднюю кинетическую энергию электронов. Поэтому выражение (6.23) совпадает с (5.12), если ввести плотность двоек $d^2 = \bar{d}$. Таким образом, получен замечательный результат: приближение седловой точки в континуальном интеграле, представляющем статистическую сумму модели Хаббарда с помощью вспомогательных бозонов при $T = 0$, эквивалентно приближению Гутцвиллера, о котором мы теперь знаем, что оно точно в пределе $d = \infty$.

Учет флуктуаций среднего поля в континуальном интеграле позволяет дать такую трактовку теории, при которой сильно коррелированная система описывается бозонными и фермионными полями, связанными друг с другом калибровочными полями, учитывающими констрейны [82, 92]. Этот подход интенсивно использовался в последнее время при изучении транспортных свойств СКЭС, стимулированных аномальным поведением высокотемпературных сверхпроводников в нормальной металлической фазе, в частности линейной зависимостью от T электросопротивления.

7. Основные корреляционные эффекты

Выше изложен ряд методов исследования модели Хаббарда в режиме сильных корреляций ($U \geq W$). К ним следовало бы добавить также методы, опирающиеся исключительно на компьютерные расчеты (высокотемпературные разложения, диагонализация малых кластеров), результаты которых могут служить для контроля приближенных аналитических подходов.

Во всех перечисленных подходах (за исключением предела $d = \infty$, о котором отдельно речь пойдет ниже) добывается ограниченная информация о физических свойствах основной модели в СКЭС-теории. Сопоставление отдельных, часто мозаичных, результатов позволяет воссоздать картину наиболее существенных корреляционных эффектов в поведении модели.

7.1. Фазовый переход металл–диэлектрик

Интуитивно предсказанный Моттом фазовый переход металл–диэлектрик был впервые выведен Хаббардом еще тридцать лет назад в рамках "сплавной аналогии", т.е. в духе СРА-приближения. Хаббард показал, что при некотором критическом значении $U_c \sim W$ в середине

зоны исходного электронного спектра возникает щель, так что при половинном заполнении система становится диэлектриком.

Как показывает последовательная теория среднего поля, основанная на рассмотрении предела $d = \infty$, представленная Хаббардом картина, является слишком упрощенной. Действительно, при половинном заполнении с ростом U постепенно возникает щель, но на уровне Ферми формируется также острый квазичастичный пик, соответствующий сул-андерсоновскому резонансу за счет рассеяния электронов на локализованных спиновых флуктуациях. Поведение этого пика с температурой аналогично тому, какое имеется в эффекте Кондо.

Наличие острого квазичастичного пика определяет транспортные свойства системы в металлической фазе. Такое поведение модели Хаббарда в указанных условиях соответствует поведению некоторой эффективной одно-примесной модели Андерсона, к которой эта модель сводится в пределе $d = \infty$.

Последние исследования показывают [105], что фазовый переход металл–диэлектрик должен быть первого рода. На рис. 21 представлена фазовая диаграмма для модели Хаббарда в пределе $d = \infty$ при половинном заполнении. Расчет был произведен для модельной плотности состояний в исходной зоне в виде полукружности. Это соответствует, как известно, решетке Бете, в которой каждый атом имеет z ближайших соседей, никак не связанных между собой.

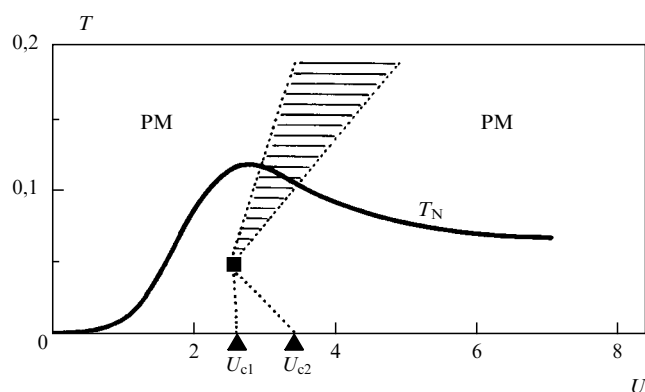


Рис. 21. Фазовая диаграмма на плоскости (T, U) на решетке Бете при $d = \infty, n = 1$ [105]

Для решетки Бете возможно аналитическое преобразование уравнений самосогласования (3.33)–(3.35) теории среднего поля, в результате чего дальнейшее численное решение значительно упрощается. Как результат, при использовании QMC-метода для решения соответствующей одномерной задачи Андерсона возможно продвижение в область более низких температур.

Оказывается, что уравнения самосогласования при $T = 0$ имеют два различных решения, которые сосуществуют в интервале $U_{c1} < U < U_{c2}$. Одно из них отвечает металлической фазе, а другое — диэлектрической, причем точки U_{c1} и U_{c2} соответствуют абсолютной потере устойчивости диэлектрической и металлической фаз. При конечной температуре эта область сужается и превращается в точку (квадрат на рис. 21).

Внутри треугольника, образованного двумя пунктирными линиями и осью абсцисс, лежит линия фазовых

переходов первого рода, которая находится из равенства энергий металлической и диэлектрической фаз. В заштрихованной области (при более высоких температурах) обе фазы сосуществуют и, таким образом, возможен непрерывный кроссовер от одной фазы к другой, причем границы этой области соответствуют фазовым переходам второго рода. Линия антиферромагнитного фазового перехода лежит выше линии фазового перехода металл–диэлектрик.

В целом приведенный на рис. 21 тип фазовой диаграммы был предсказан ранее в [43] (см. рис. 11). Хотя фазовый переход металл–диэлектрик достаточно хорошо понят в частном случае половинного заполнения, имеется пока мало результатов для общего случая — при отклонении от половинного заполнения.

7.2. Нарушение ферми-жидкостной картины

Вопрос об эволюции характера одночастичных состояний металлической фазы не имеет еще однозначного решения. Полная картина соответствовала бы указанию характера квазичастичного спектра в каждой точке трехмерного пространства параметров (U, n, T) . В настоящее время мы имеем лишь отдельные сечения плоскостями (U, n) при $T = 0$ или (U, T) при $n = 1$. Большинство результатов получено в приближении среднего поля ($d = \infty$).

На рис. 6 представлено изменение функции распределения квазичастиц вблизи уровня Ферми при половинном заполнении. С ростом U скачок на уровне Ферми непрерывно уменьшается до нуля, что указывает на постепенное уменьшение амплитуды Z когерентного состояния и на расходимость эффективной массы m^* . Однако ферми-жидкостная картина сохраняется вплоть до некоторого критического значения U_c , при котором возникает диэлектрическое состояние путем фазового перехода второго рода.

К такому же выводу приводит качественный анализ уравнений самосогласования [41], представленный выше. В то же время в интерполяционном подходе Эдвардса–Герца [48, 49], не опирающемся на предел $d = \infty$, мнимая часть собственной энергии квазичастиц не равна нулю на поверхности Ферми в некотором интервале значений U , что указывает на нарушение ферми-жидкостной картины в металлической фазе (см. рис. 13).

При отклонении от половинного заполнения область неферми-жидкостного поведения сужается и свойства ферми-жидкости в системе достаточно быстро восстанавливаются (см. рис. 15). Проблема кроссовера от ферми-жидкостного поведения в металлический режим сильных электронных корреляций при увеличении U или приближении к половинному заполнению только намечена и, несомненно, должна исследоваться.

7.3. Кроссовер от коллективизированного магнетизма к магнетизму с локализованными магнитными моментами

Эта проблема первоначально обсуждалась в литературе, исходя из предела слабой связи, в терминах локализованных спиновых флуктуаций [9]. Следующим этапом было использование статического приближения в технике континуального интегрирования (см. раздел 4 настоящего обзора).

На рис. 16–18 представлена картина магнитного поведения модели при половинном заполнении, получен-

ная в этом приближении. В этом случае в системе имеются локализованные магнитные моменты, о чем свидетельствует слабое изменение величины $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$ на рис. 16 и юри-вейсовский вклад в магнитную восприимчивость (см. рис. 18). На рис. 17 показано, что температура Нееля T_N как функция кулоновского взаимодействия U имеет минимум при $U \sim W$. Кривая $T_N(U)$ связывает выражения (1.6) и (1.7) для T_N , соответствующие пределу слабой и сильной связи.

Результаты статического приближения имеют, таким образом, интерполяционный характер. Эти результаты качественно подтверждаются при более строгом подходе, отвечающем пределу $d = \infty$, при котором учитывается динамика в системе (см. рис. 7 и 8).

Два вопроса являются наиболее актуальными:

1) как происходит кроссовер от коллективизированного к локализованному магнетизму при изменении электронной концентрации n ;

2) как кроссовер в магнитном поведении связан с кроссовером в электронных свойствах — от ферми-жидкостного к неферми-жидкостному поведению.

На оба эти вопроса пока нет четкого ответа. На первый вопрос его нет потому, что внимание исследователей сосредоточено, главным образом, на поведении модели вблизи половинного заполнения (в связи с проблемой высокотемпературных сверхпроводников).

Второй вопрос сложен сам по себе, и исследования самого квазичастичного спектра модели только что начались. Одним из последних результатов этих исследований является фазовая диаграмма, представленная на рис. 15. Такого типа фазовые диаграммы должны быть дополнены указанием областей, где происходит кроссовер в магнитном поведении.

Отметим, что в пределе сильной электронной корреляции ($U \gg W$) в рамках t - J -модели сделана попытка установить магнитный кроссовер при изменении электронной концентрации и обнаружить взаимосвязь магнитного и электронного кроссоверов [11–13].

8. Заключение

Общий итог нашего обзора может быть таким. Предел $d = \infty$ дает наиболее универсальный и эффективный метод исследования модели Хаббарда. Он позволяет сформулировать приближение среднего поля для сильно взаимодействующих фермионов, корректное с точки зрения требований статистической механики.

Основные уравнения этого приближения дают правильные пределы $U \ll W$, $U \gg W$ и справедливы при любых значениях параметров U , W и электронной концентрации n . В пределе $d = \infty$ статистическая механика модели Хаббарда на решетке сводится к таковой для некоторой вспомогательной однопримесной модели Андерсона (со специально подобранными параметрами), которая имеет известные решения.

Модель Хаббарда в пределе $d = \infty$ описывает важнейшие корреляционные эффекты: переход металл–диэлектрик, кроссовер от коллективизированного магнетизма к магнетизму с локализованными магнитными моментами, нарушение ферми-жидкостной картины вблизи границ фазового перехода металл–диэлектрик.

Сравнение результатов теории в пределе $d = \infty$ с численными расчетами для $d = 3$ или $d = 2$, выполненными по QMC-методу или методу точной диагонализации

малых кластеров, показывает, что во многих случаях имеется совпадение результатов не только качественное, но и количественное. Конечно, предел $d = \infty$, соответствующий приближению среднего поля, не может описать динамику флуктуаций, например спиновые волны в магнитоупорядоченной фазе. Однако существуют способы учета поправок порядка $1/d$, которые позволяют решить подобные задачи.

К сожалению, теория среднего поля в пределе $d = \infty$ имеет дело с уравнениями согласования, требующими большого объема компьютерных вычислений. Наряду с дальнейшими исследованиями в этом направлении, актуальной является разработка приближенных аналитических методов решения этих уравнений, пусть только качественных по своей точности. Примером исследованных такого рода является недавняя работа [106].

Предел $d = \infty$ использовался также для других моделей в теории сильно коррелированных систем, например для t - J -модели [107, 108], для решетки Андерсона [109] и расширенных моделей Хаббарда [11, 110, 112]. Недавно он применен для моделей с беспорядком. Так, в модели Хаббарда с беспорядком исследовалась интерференция эффектов от сильного кулоновского взаимодействия и от беспорядка в явлении фазового перехода металл–диэлектрик, т.е. взаимосвязь моттовского и андерсоновского механизмов электронной локализации.

В связи с внедрением в теорию предела $d = \infty$ физика сильно коррелированных систем снова на подъеме. Ситуация здесь напоминает известную ситуацию двадцатилетней давности, когда в теории фазовых переходов второго рода была понята важная роль размерности $d = 4$ и было предложено ϵ -разложение, давшее универсальный метод исследования систем с сильно взаимодействующими флуктуациями.

Список литературы

- Hubbard J *Proc. Roy. Soc. A* **276** 238 (1963)
- Gutzwiller M C *Phys. Rev. Lett.* **10** 159 (1963)
- Kanamori J *Prog. Theor. Phys.* **30** 275 (1963)
- Anderson P W *Phys. Rev.* **124** 41 (1961)
- Shubin S P, Wonsowsky S V *Proc. Roy. Soc. A* **145** 159 (1934)
- Изюмов Ю А *УФН* **161** 1 (1991)
- Izuyama T, Kim D, Kubo R J. *Phys. Soc. Jpn* **18** 1025 (1963)
- Penn D R *Phys. Rev.* **142** 350 (1966)
- Moriya T *Spin Fluctuations in itinerant electron magnetism* (Berlin: Springer-Verlag, 1985)
- Chao K A, Spalek J, Oles A J. *Phys. C* **10** L271 (1977)
- Izyumov Yu A, Letfulov B M *J. Phys.: Condens. Matter* **2** 8905 (1990)
- Izyumov Yu A, Letfulov B M, Shipitsyn E V *J. Phys.: Condens. Matter* **4** 9955 (1992)
- Изюмов Ю А, Летфулов Б М, Шипицин Е В *ЖЭТФ* **105** 1357 (1994)
- Hubbard J *Proc. Roy. Soc. A* **281** 401 (1964)
- Mott N F *Phil. Mag.* **6** 287 (1961)
- Metzner W, Vollhardt D *Phys. Rev. Lett.* **62** 324 (1989)
- Hubbard J *Phys. Rev. B* **19** 2626 (1979); **20** 4584 (1979); **23** 597 (1981)
- Hasegawa H *J. Phys. Soc. Jpn* **46** 1504 (1979); **49** 178 (1980)
- Gutzwiller M C *Phys. Rev. A* **137** 1726 (1965)
- Боголюбов Н Н, Тябликов С В *ДАН СССР* **126** 53 (1959)
- Зубарев Д Н *УФН* **71** 71 (1960)
- Зайцев Р О *ЖЭТФ* **70** 1100 (1976); **75** 2362 (1978)
- Goryachev E G, Kuzmin E V, Ovchinnikov S G *J. Phys. C* **15** 1481 (1982)
- Изюмов Ю А, Скрябин Ю Н *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем* (М.: Наука, 1987)

25. Ehrenreich H, Schwartz L M, in *Solid State Physics*, **31** 150 (1976)
26. Arai T, Cohen M H *Phys. Rev. B* **15** 1836 (1977); **21** 3300, 3309 (1980)
27. Anokhin A O, Irkhin V Yu *Phys. Stat. Sol. B* **165** 129 (1991)
28. Anokhin A O, Irkhin V Yu, Katsnelson M I *J. Phys.: Condens. Matter* **3** 1475 (1991)
29. Muller-Hartmann E *Solid State Commun.* **12** 1269 (1973)
30. Muller-Hartmann E *Z. Phys. B* **76** 211 (1989)
31. Brandt U, Mielch C Z. *Phys. B* **75** 365 (1989); **79** 295 (1990)
32. Velicki B, Kirpatrick S, Ehrenreich H *Phys. Rev.* **175** 741 (1968)
33. Vollhardt D, in *Proc. Int. School of Physics "Enrico Fermi"* Course CXXI (Eds R A Broglia, J R Schrieffer) (Amsterdam: North Holland, 1994) p. 31
34. George A, Kotliar G *Phys. Rev. B* **45** 6479 (1992)
35. Jarrell M *Phys. Rev. Lett.* **69** 168 (1992)
36. Janis V, Vollhardt D *Int. J. Mod. Phys. B* **6** 731 (1992)
37. Wolf P A *Phys. Rev.* **114** 1030 (1961)
38. Haldane F D M *Phys. Rev. Lett.* **40** 416 (1978)
39. Georges A, Kotliar G, Si Q *Int. J. Mod. Phys. B* **6** 705 (1992)
40. Georges A, Krauth W *Phys. Rev. Lett.* **69** 1240 (1992)
41. Rozenberg M J, Zhang X Y, Kotliar G *Phys. Rev. Lett.* **69** 1236 (1992)
42. Zhang X Y, Rozenberg M J, Kotliar G *Phys. Rev. Lett.* **70** 1666 (1993)
43. Pruschke T, Cox D L, Jarrell M *Phys. Rev. B* **47** 3553 (1993)
44. Jarrell M, Pruschke T *Z. Phys. B* **90** 187 (1993)
45. Scaletter R T, Scalapino D J, Sugar R L, Toussain D *Phys. Rev. B* **39** 4711 (1989)
46. Lieb E H, Wu F Y *Phys. Rev. Lett.* **20** 1445 (1968)
47. Frahm H, Korepin V E *Phys. Rev. B* **42** 10533 (1990)
48. Edwards D M, Hertz J A *Physica B* **163** 527 (1990)
49. Wermbter S, Czychoł G *Metal-Insulator transition and fermi-liquid behaviour on the infinite dimensional Hubbard model* (Universitat Bremen, Report 58, March 1994)
50. Edwards D M *J. Phys.: Condens. Matter* **5** 161 (1993)
51. Baym G, Kadanoff L P *Phys. Rev.* **124** 287 (1961)
52. Baym G *Phys. Rev.* **127** 1391 (1962)
53. Schweitzer H, Czychoł G *Z. Phys. B* **77** 327 (1990)
54. Janis V *Z. Phys. B* **83** 227 (1991)
55. van Dongen P G J *Phys. Rev. Lett.* **67** 757 (1991)
56. van Dongen P G J, Vollhardt D *Phys. Rev. Lett.* **65** 1663 (1990)
57. Ohkawa F J J. *Phys. Soc. Jpn* **61** 1615 (1992)
58. Dobrosavljevic V, Kotliar D *Phys. Rev. B* **50** 1430 (1994)
59. Hirsch J E, Fye R M *Phys. Rev. Lett.* **56** 2521 (1989)
60. Zlatić V, Horvatic B *Phys. Rev. B* **28** 6904 (1983)
61. Menge B, Muller-Hartmann E *Z. Phys. B* **82** 237 (1991)
62. Cyrot M J. *Phys. (Paris)* **33** 25 (1972)
63. Takahashi Y *J. Phys. Soc. Jpn* **55** 3553 (1986)
64. Kakehashi Y, Fulde P *Phys. Rev. B* **32** 1595 (1985)
65. Kakehashi Y, Hasegawa H *Phys. Rev. B* **37** 7777 (1988)
66. Schrieffer J R, Evenson W E, Wang S Q *J. Phys. (Paris)* **32** C1 (1971)
67. Hertz A, Klenin M A *Phys. Rev. B* **10** 1084 (1974)
68. Yokoyama H, Shiba H *J. Phys. Soc. Jpn* **56** 3582 (1987)
69. Hirsch J E *Phys. Rev. B* **35** 1851 (1987)
70. Kakehashi Y, Samson J H *Phys. Rev. B* **33** 298 (1986)
71. Vollhardt D *Rev. Mod. Phys.* **56** 99 (1984)
72. Metzner W, Vollhardt D *Phys. Rev. Lett.* **62** 324 (1989)
73. Metzner W *Z. Phys. B* **77** 253 (1989)
74. Vollhardt D, van Dongen P G J, Gebhard F, Metzner W *Mod. Phys. Lett.* **4** 499 (1990)
75. van Dongen P G J, Gebhard F, Vollhardt D *Z. Phys. B* **76** 199 (1989)
76. Gebhard F *Phys. Rev. B* **41** 9452 (1990)
77. Fazekas P, Menge B, Muller-Hartmann E *Z. Phys. B* **78** 69 (1990)
78. Нараев Э Л *Физика магнитных полупроводников* (М.: Наука, 1979)
79. Visscher P B *Phys. Rev. B* **10** 943 (1974)
80. Ogawa T, Kanda K, Matsubara K *Prog. Theor. Phys.* **53** 614 (1975)
81. Florencio J, Chao K A *Phys. Rev. B* **14** 3121 (1976)
82. Ioffe L B, Larkin A I *Phys. Rev. B* **39** 8988 (1989)
83. Shastri B S, Krishnamurthy H R, Anderson P W *Phys. Rev. B* **41** 2375 (1990)
84. van der Linden W, Edwards D M *J. Phys.: Condens. Matter* **3** 4917 (1991)
85. Hubbard J *Proc. Roy. Soc. A* **285** 542 (1965); **296** 82 (1966)
86. Зайцев Р О *ЖЭТФ* **68** 207 (1975); **70** 1100 (1976)
87. Barnes S E *J. Phys. F* **6** 1375 (1976)
88. Coleman P *Phys. Rev. B* **29** 3035 (1984)
89. Zou Z, Anderson P W *Phys. Rev. B* **37** 627 (1988)
90. Kotliar G, Ruckenstein A *Phys. Rev. Lett.* **57** 1362 (1986)
91. Kane C, Lee P A, Read N *Phys. Rev. B* **39** 6880 (1989)
92. Nagaosa N, Lee P A *Phys. Rev. Lett.* **64** 2450 (1990); *Phys. Rev. B* **46** 5621 (1992)
93. Fresard R, Wölfle P *Int. J. Mod. Phys. B* **6** 685 (1992)
94. Grilli M, Kotliar G *Phys. Rev. Lett.* **64** 1170 (1990)
95. Arovas A P, Auerbach A *Phys. Rev. B* **38** 316 (1988)
96. Feng S, Wu J B, Su Z B, Yu L *Phys. Rev. B* **47** 15192 (1993)
97. Tanamoto T, Kuboki K, Fukuyama H *J. Phys. Soc. Jpn* **60** 3072 (1991)
98. Markelov A V *Mod. Phys. Lett. B* **6** 1181 (1992)
99. Халиуллин Г *Письма в ЖЭТФ* **52** 999 (1990)
100. Wang Y R, Rice M J *Phys. Rev. B* **49** 4360 (1994)
101. van Dongen P G J, Janis V *Phys. Rev. Lett.* **72** 3258 (1994)
102. Janis V *Phys. Rev. B* **49** 1612 (1994)
103. Jarrell M, Pruschke Th *Phys. Rev. B* **49** 1458 (1994)
104. Zhang X Y, Zhang G M *Phys. Rev. B* **49** 7929 (1994)
105. Rozenberg M J, Kotliar G, Zhang X Y *Phys. Rev. B* **49** 10181 (1994)
106. Li Y M, Dambrumenil N *Phys. Rev. B* **49** 6058 (1994)
107. Metzner W, Schmit P, Vollhardt D *Phys. Rev. B* **45** 2237 (1992)
108. Strack R, Vollhardt D *Phys. Rev. B* **46** 13852 (1992)
109. Szychoł G, Schweitzer H *Physica Scripta* **45** 125 (1992)
110. van Dongen P G J *Phys. Rev. Lett.* **67** 757 (1991)
111. Kotliar G, Si Q *Phys. Rev. B* **48** 13881 (1993)
112. Si Q, Kotliar G *Phys. Rev. Lett.* **70** 3193 (1993)

THE HUBBARD MODEL IN THE REGIME OF STRONG ELECTRONIC CORRELATIONS

Yu.A. Izyumov

Institute of Metal Physics.

Ural Division of the Russian Academy of Sciences

ul. S. Kovalevskoi 18, 620219 Ekaterinburg, Russia

Tel. (7-3432) 44-41 93, E-mail: mathphys@ifm.e-burg.su

An up-to-date study is made of the Hubbard model, a main model of strongly correlated electron systems. It is shown that in the regime of strong correlations $U \sim W$ the following principal correlation effects appear: metal-insulator phase transition, appearance of localized magnetic moments, violation of the fermi-liquid behavior. Different approaches to the problem, not basing on perturbation theory with respect to a small parameter U/W or W/U , are discussed. A new method in the theory of the strongly correlated system is brought to light, which is based on the limit of the infinite space dimension $d = \infty$. Physical results obtained by this method are compared with ones obtained by other traditional approaches. On overview of the behaviour of strongly correlated systems is given in the wide interval of the parameters U , W and the electronic concentration n .

PACS numbers: **71.27. + a**

Bibliography — 112 references

Received 4 November 1994