ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА
Том 36, № 2
август, 1978

САМОСОГЛАСОВАННАЯ ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ КОРРЕЛЯЦИИ В МОДЕЛИ ХАББАРДА

А. Л. Куземский

На основе уравнения Дайсона для двухвременных температурных функций Грина рассматривается самогласованное вычисление одночастичных функций Грина в модели Хаббарда. Развитый метод позволяет получить обобщенное интерполяционное решение модели Хаббарда, справедливое для произвольных соотношений между эффективной шириной зоны и параметром кулоновского отталкивания. Два варианта теории позволяют получить два точных представления для массового оператора, которые используются для получения приближенных решений в атомном и зонном пределах.

1. Метод двухвременных температурных функций Грина [1, 2] удобен и эффективен при исследовании систем многих взаимодействующих частиц. В последнее время была предложена полезная переформулировка этого метода, которая позволяет оперировать с точным массовым оператором, а расцепления производить на конечном этапе. Этот подход основывается на введении неприводимых функций Грина [2—6], что позволяет, не прибегая к тому или иному способу обрыва цепочки уравнений для функций Грина, записать уравнение Дайсона и получить точное аналитическое представление для массового оператора. Приближенные решения конструируются как определенные приближения для массового оператора.

Метод неприводимых функций Грина применялся в большом числе работ по самосогласованной теории фононов, модели Гейзенберга, спин-фононному взаимодействию, сегнетоэлектричеству и др. (см. [2—6] и цитированную там литературу). В настоящей работе рассматривается применение этого подхода к модели Хаббарда, которая является одной из наиболее употребительных для описания магнитных свойств и перехода из металлического состояния в неметаллическое в переходных металлах и их халькогенидах [7, 8].

Гамильтониан, предложенный Хаббардом [7],

$$H=\sum_{ij\sigma}t_{ij}a_{i\sigma}^{+}a_{j\sigma}+\frac{U}{2}\sum_{i\sigma}n_{i\sigma}n_{i-\sigma} \tag{1}$$

зависит от двух параметров: эффективной ширины зоны $w=\left(N^{-1}\sum_{ij}|t_{ij}|^2\right)^{1/2}$ и энергии внутриатомного кулоновского отталкивания электронов U. С изменением их отношения меняется структура полос системы. Таким образом, для того чтобы описывать переходы в системе, необходимо получить интерполяционное решение для гамильтониана Хаббарда, справедливое в широком интервале значений параметра $z=w/U$ от атомного предела ($z\to 0$) до зонного предела ($z\gg 1$). Метод неприводимых функций Грина позволяет систематическим образом строить такие решения.

2. Следуя работам [9, 10], введем одночастичные функции Грина

$$G_{k\sigma}(t)=\langle\langle a_{k\sigma}(t);a_{k\sigma}^{+}\rangle\rangle=-i\theta(t)\langle[a_{k\sigma}(t),a_{k\sigma}^{+}]\rangle=$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}G_{k\sigma}(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\omega-\omega'}(e^{\beta\omega'}+1)J_{k\sigma}(\omega'),$$

где $\beta=(kT)^{-1}$, $J_{k\sigma}(\omega)$ — спектральная интенсивность. Уравнение для фурье-образа $G_{k\sigma}(\omega)$ функции Грина имеет вид

$$(\omega-\varepsilon_k)G_{k\sigma}(\omega)=1+\frac{U}{N}\sum_{pq}\langle\langle a_{k+p,\sigma}a_{p+q,-\sigma}^{+}a_{q,-\sigma}|a_{k\sigma}^{+}\rangle\rangle_\omega. \tag{2}$$

Введем по определению неприводимую функцию Грина, не содержащую ренормировок среднего поля,

$$\begin{aligned}&{}^{\mathrm{ir}}\langle\langle a_{k+p,\sigma}a_{p+q,-\sigma}a_{q,-\sigma}|a_{k\sigma}{}^{+}\rangle\rangle_\omega=\\&=\langle\langle a_{k+p,\sigma}a_{p+q,-\sigma}^{+}a_{q,-\sigma}|a_{k\sigma}{}^{+}\rangle\rangle_\omega-\delta_{p,0}\langle n_{q,-\sigma}\rangle G_{k\sigma}.\end{aligned} \tag{3}$$

Неприводимая функция Грина в (3) определена таким образом, что она не может быть сведена к функциям Грина более низкого порядка по числу фермионных операторов произвольным спариванием операторов, относящихся к одному моменту времени. Подставляя (3) в (2), получим

$$G_{k\sigma}(\omega)=G_{k\sigma}^{\mathrm{HF}}(\omega)+G_{k\sigma}^{\mathrm{HF}}\frac{U}{N}\sum_{pq}{}^{\mathrm{ir}}\langle\langle a_{k+p,\sigma}a_{p+q,-\sigma}^{+}a_{q,-\sigma}|a_{k\sigma}{}^{+}\rangle\rangle_\omega. \tag{4}$$

Здесь были введены следующие обозначения:

$$G_{k\sigma}^{\mathrm{HF}}(\omega)=(\omega-\varepsilon_{k\sigma}^{\mathrm{HF}})^{-1},\ \varepsilon_{k\sigma}^{\mathrm{HF}}=\varepsilon_k+\frac{U}{N}\sum_q\langle n_{q,-\sigma}\rangle.$$

Для получения уравнения Дайсона нам необходимо выразить функцию Грина ${}^{\mathrm{ir}}\langle\langle A|a_{k\sigma}{}^{+}\rangle\rangle$ в правой части (4) через полную функцию Грина $G_{k\sigma}(\omega)$. Для этого продифференцируем эту функцию по второму времени: $-i(d/dt)\,{}^{\mathrm{ir}}\langle\langle A;\,a_{k\sigma}{}^{+}(t)\rangle\rangle$. Для фурье-компонент это запишется в виде

$$\begin{aligned}&(\omega-\varepsilon_k)\,{}^{\mathrm{ir}}\langle\langle A|a_{k\sigma}{}^{+}\rangle\rangle_\omega={}^{\mathrm{ir}}\langle[A,a_{k\sigma}{}^{+}]_+\rangle+\\&+\frac{U}{N}\sum_{rs}\langle\langle A|a_{r,-\sigma}^{+}a_{r+s,-\sigma}a_{k+s,\sigma}^{+}\rangle\rangle_\omega.\end{aligned} \tag{5}$$

Антикоммутатор в (5) вычисляется на основе определения неприводимой части

$$\begin{aligned}&{}^{\mathrm{ir}}\langle[a_{k+p,\sigma}a_{p+q,-\sigma}^{+}a_{q,-\sigma},\,a_{k\sigma}{}^{+}]_+\rangle=\\&=\langle[a_{k+p,\sigma}a_{p+q,-\sigma}^{+}a_{q,-\sigma}-\langle a_{p+q,-\sigma}^{+}a_{q,-\sigma}\rangle a_{k+p,\sigma},\,a_{k\sigma}{}^{+}]_+\rangle\equiv 0.\end{aligned} \tag{6}$$

Подставляя (6) в уравнение (5) и вводя в нем аналогично (3) не приводимую по правым операторам функцию Грина, получим в результате

$$(7)\qquad G_{k\sigma}(\omega)=G_{k\sigma}{}^{\mathrm{HF}}(\omega)+G_{k\sigma}{}^{\mathrm{HF}}(\omega)P_{k\sigma}(\omega)G_{k\sigma}{}^{\mathrm{HF}}(\omega),$$

где введено следующее обозначение для радиационного оператора:

$$(8)\qquad P_{k\sigma}(\omega)=\frac{U^2}{N^2}\sum_{pqrs}{}^{\mathrm{ir}}\langle\langle a_{k+p,\sigma}\overset{+}{a}_{p+q,-\sigma}a_{q,-\sigma}\times$$

$$\times|\overset{+}{a}_{r,-\sigma}a_{r+s,-\sigma}\overset{+}{a}_{k+s,\sigma}\rangle\rangle_{\omega}{}^{\mathrm{ir}}=\frac{U^2}{N^2}\sum_{pqrs}G_{k\sigma}^{\mathrm{ir}}(p,q|r,s;\omega).$$

Чтобы выделить массовый оператор, необходимо отделить связанную часть неприводимой функции Грина в (8)

$$(9)\qquad G_{k\sigma}^{\mathrm{ir}}(p,q|r,s;\omega)=L_{k\sigma}(p,q|r,s;\omega)+$$

$$+\frac{U^2}{N^2}\sum_{r_1s_1}\sum_{p_1q_1}L_{k\sigma}(p,q|r_1,s_1;\omega)G_{k\sigma}^{\mathrm{HF}}(\omega)G_{k\sigma}^{\mathrm{ir}}(p_1,q_1|r,s;\omega).$$

Здесь $L_{k\sigma}(p,\ q|r,\ s;\ \omega)$ — связанная часть функции Грина $G_{k\sigma}{}^{\mathrm{ir}}(p,\ q|r,\ s;\ \omega)$, согласно определению (9) не содержащая частей, соединенных одной линией $G_{k\sigma}{}^{\mathrm{HF}}(\omega)$. После несложных преобразований получим из (7)

$$(10)\qquad P_{k\sigma}(\omega)=M_{k\sigma}(\omega)+M_{k\sigma}(\omega)G_{k\sigma}{}^{\mathrm{HF}}(\omega)P_{k\sigma}(\omega),$$

где

$$(11)\qquad M_{k\sigma}(\omega)=\frac{U^2}{N^2}\sum_{pqrs}L_{k\sigma}(p,q;r,s;\omega).$$

Окончательно получим из (7) и (10)

$$(12)\qquad G_{k\sigma}(\omega)=G_{k\sigma}{}^{\mathrm{HF}}(\omega)+G_{k\sigma}{}^{\mathrm{HF}}(\omega)M_{k\sigma}(\omega)G_{k\sigma}(\omega).$$

Уравнение (12) представляет собой уравнение Дайсона для одночастичной двухвременной температурной функции Грина $G_{k\sigma}(\omega)$. Оно имеет следующее формальное решение:

$$(13)\qquad G_{k\sigma}(\omega)=[\omega-\varepsilon_{k\sigma}{}^{\mathrm{HF}}-M_{k\sigma}(\omega)]^{-1}.$$

Выражение

$$(14)\qquad M_{k\sigma}(\omega)=\frac{U^2}{N^2}\sum_{pqrs}\langle\langle a_{k+p,\sigma}\overset{+}{a}_{p+q,-\sigma}a_{q,-\sigma}|\overset{+}{a}_{r,-\sigma}a_{r+s,-\sigma}\overset{+}{a}_{k+s,\sigma}\rangle\rangle_{\omega}^{\mathrm{ir,c}}$$

является точным представлением для массового оператора одночастичной функции Грина для системы коррелирующих электронов в узких энергетических зонах (индекс «c» в (14) обозначает связанную часть). Выражение (14) можно записать в более удобной форме:

$$(15)\qquad M_{k\sigma}(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\omega-\omega'}(e^{\beta\omega'}+1)\frac{U^2}{N^2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dt}{2\pi}e^{i\omega t}\times$$

$$\times\sum_{pqrs}\langle\overset{+}{a}_{r,-\sigma}a_{r+s,-\sigma}\overset{+}{a}_{k+p,\sigma}a_{k+p,\sigma}(t)\overset{+}{a}_{p+q,-\sigma}(t)a_{q,-\sigma}(t)\rangle^{\mathrm{ir,c}}=$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega-\omega'} (e^{\beta\omega'}+1) U^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{i\omega' t} N^{-1} \sum_{i\neq j} e^{-ik(R_i-R_j)} \times$$

$$\times \langle a_{j\sigma}^{+} n_{j-\sigma} n_{i-\sigma}(t) a_{i\sigma}(t) \rangle^{\text{ir,c}}.$$

Выражение (15) для массового оператора $M_{k\sigma}$ одночастичной функции Грина модели Хаббарда является точным и справедливо для произвольных значений z. Как видно, метод неприводимых функций Грина тесно связан с определенным способом проектирования высших функций Грина на исходные; при этом в качестве нулевой функции Грина выбирается перенормированная с учетом всех ренормировок среднего поля нелокальная функция Грина. Представление (15) более удобно для получения приближенных решений в зонном пределе, поскольку явно содержит множитель U^2, но, вообще говоря, может также использоваться для получения приближенных решений и в случае сильной корреляции. Для получения приближенных решений нужно использовать определенные предположения о приближенном выражении для связанной части корреляционной функции в правой части (15).

3. С помощью введения неприводимых частей мы отделили все ренормировки среднего поля, т. е. все одновременные спаривания. Различные разновременные спаривания в (15) будут вести к различным приближенным решениям (см. [2—6, 9]). Сначала произведем простое парное расцепление

$$\langle a_{r,-\sigma}^{+} a_{r+s,-\sigma} a_{k+s,\sigma}^{+} a_{k+p,\sigma}(t) a_{p+q,-\sigma}(t) a_{q,-\sigma}(t) \rangle^{\text{ir,c}} \approx \tag{16}$$

$$\approx \delta_{k+s,k+p} \delta_{r+s,p+q} \delta_{r,q} \langle a_{k+p,\sigma}^{+} a_{k+p,\sigma}(t) \rangle \times$$

$$\times \langle a_{p+q,-\sigma} a_{p+q,-\sigma}^{+}(t) \rangle \langle a_{q,-\sigma}^{+} a_{q,-\sigma}(t) \rangle.$$

При этом получим

$$M_{k\sigma}^{p}(\omega) = \frac{U^2}{N^2} \sum_{p,q} \int \frac{d\omega_1\, d\omega_2\, d\omega_3}{\omega+\omega_1-\omega_2-\omega_3} \times \tag{17}$$

$$\times \{ n(\omega_1) [1-n(\omega_2)-n(\omega_3)] + n(\omega_2) n(\omega_3) \} \times$$

$$\times \langle g_{p+q,-\sigma}(\omega_1) g_{k+p,\sigma}(\omega_2) g_{p,-\sigma}(\omega_3).$$

Здесь $g_{k\sigma}(\omega) = -(1/\pi)\,\mathrm{Im}\, G_{k\sigma}(\omega+i\varepsilon)$.

Парное расцепление было использовано в работе [9] при вычислении массового оператора в парамагнитном состоянии. Парное приближение на языке диаграммной техники соответствует простой вершине в массовом операторе и применимо вне резонансных областей коллективных возбуждений, когда плотность квазичастиц достаточно низкая. Уравнения (12) и (17) представляют собой самосогласованную систему уравнений для одночастичной функции Грина в рамках парного приближения. Выбирая то или иное начальное представление для функции $g_{k\sigma}(\omega)$ в правой части (17), мы можем вычислить функцию Грина $G_{k\sigma}$. В принципе, подставляя полученный результат снова в (17), можно найти более точное решение. В зонном пределе разумным начальным приближением, допускающим возможность такой итерации, является $g_{k\sigma}(\omega) = \delta(\omega-\varepsilon_k)$. При этом из (17) получим

$$M_{k\sigma}^{p}(\omega)=\frac{U^2}{N^2}\sum_{pq}\frac{N_{kpq}}{\omega_1-\Omega_{kpq}}, \tag{18}$$

$$N_{kpq}^{\sigma}=n_{p+q,-\sigma}[1-n_{k+p,\sigma}-n_{q,-\sigma}]+n_{k+p,\sigma}n_{q,-\sigma}, \tag{19}$$
$$\Omega_{kpq}=-\varepsilon_{p+q}+\varepsilon_{k+p}+\varepsilon_{q}.$$

Массовый оператор вида (18) для модели Хаббарда был получен ранее в работе Ланжера [12], где использовались уравнение движения для функции Грина второго порядка и приближение типа разложения по плотности.

Получим теперь уравнение для средних чисел заполнения в парном приближении. Для этого, следуя работе [13], представим спектральную интенсивность функции Грина в следующем виде:

$$g_{k\sigma}(\omega)=\frac{1}{\pi}\frac{\Gamma_{k\sigma}(\omega)}{(\omega-E_{k\sigma})^2+\Gamma_{k\sigma}^2}\approx \tag{20}$$
$$\approx(1-\alpha_{k\sigma})\delta(\omega-E_{k\sigma})+\frac{1}{\pi}\frac{\Gamma_{k\sigma}(\omega)}{(\omega-E_{k\sigma})^2}$$

где

$$\Gamma_{k\sigma}(\omega)=-\operatorname{Im}M_{k\sigma}^{p}(\omega+i\varepsilon)=\pi\frac{U^2}{N^2}\sum_{pq}N_{kpq}^{\sigma}\delta(\omega-\Omega_{kpq}),$$

$$E_{k\sigma}=\varepsilon_{k\sigma}^{\mathrm{HF}}+\operatorname{Re}M_{k\sigma}^{p}(E_{k\sigma})=\varepsilon_{k\sigma}^{\mathrm{HF}}+\delta\varepsilon,$$

$$\delta\varepsilon=\mathscr{P}\frac{U^2}{N^2}\sum_{pq}\frac{N_{kpq}^{\sigma}}{\omega-\Omega_{kpq}}.$$

Неизвестный множитель $(1-\alpha_{k\sigma})$ при дельта-функции в правой части (20) определяется из условий нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty}d\omega g_{k\sigma}(\omega)=1,$$

откуда получаем

$$\alpha_{k\sigma}=\frac{U^2}{N^2}\sum_{pq}\frac{N_{kpq}^{\sigma}}{(\Omega_{kpq}-E_{k\sigma})}. \tag{21}$$

С учетом (21) найдем уравнение для средних чисел заполнения

$$n_{\sigma}=\frac{1}{N}\sum_{k}n(E_{k\sigma})+\frac{U^2}{N^3}\sum_{kpq}\frac{N_{kpq}^{\sigma}}{(\Omega_{kpq}-E_{k\sigma})^2}[n(\Omega_{kpq})-n(E_{k\sigma})]. \tag{22}$$

Таким образом, средние числа заполнения определяются из уравнения (22) самосогласованным образом. Первый член в правой части (22) описывает эффекты перенормировки энергии частиц в среднем поле (отсюда получается критерий магнетизма Стонера), а второй — эффекты парных столкновений квазичастиц во втором порядке по U. Плотность состояний квазичастиц в этом приближении равна

$$(23)\qquad D_\sigma(\omega)=N^{-1}\sum_k g_{k\sigma}(\omega)=$$

$$=N^{-1}\sum_k \{(1-\alpha_{k\sigma})\delta(\omega-E_{k\sigma})+\alpha_{k\sigma}\delta(\omega-\Omega_{kpq})\}.$$

Средняя энергия системы в данном приближении будет определяться выражением

$$\langle H\rangle=\frac{1}{2N}\sum_{k\sigma}\int_{-\infty}^{\infty}(\omega+\varepsilon_k)J_{k\sigma}(\omega)\,d\omega=$$

$$=\frac{1}{2N}\sum_{k\sigma}(E_{k\sigma}+\varepsilon_k)n(E_{k\sigma})+(\Delta E)_2,$$

где

$$(\Delta E)_2=-\frac{1}{2N}\frac{U^2}{N^2}\sum_{kpq\sigma}\frac{N^{\sigma}_{kpq}}{\Omega_{kpq}-E_{k\sigma}}\times$$

$$\times[(E_{k\sigma}+\varepsilon_k)n(E_{k\sigma})-(\Omega_{kpq}+\varepsilon_k)n(\Omega_{kpq})]$$

— величина, по структуре подобная поправке второго порядка к энергии в многопримесной модели Андерсона или модели Хаббарда с s—d-гибридизацией [14]. В зонном пределе второй член в правой части (22) мал. Поэтому можно попытаться получить критерий магнетизма в данном приближении. Для этого, следуя работе [15], введем среднее число электронов $n={}^1/_2(n_\uparrow+n_\uparrow)$ и намагниченность $m={}^1/_2(n_\uparrow-n_\downarrow)$. Обозначив $n_\sigma\equiv f(\varepsilon_f;\ \varepsilon_k+Un_{-\sigma})$ и рассматривая условие существования решений уравнения

$$m={}^1/_2 f(\varepsilon_f;\ \varepsilon_k+Un-Um)-{}^1/_2 f(\varepsilon_f;\ \varepsilon_k+Un+Um),$$

найдем критерий возникновения магнетизма в нашей системе. Он будет иметь вид

$$(24)\qquad N^{-1}\sum_k U_{\text{eff}}(k)g_{k\sigma}(\varepsilon_f)-\Delta(\varepsilon_f)>1.$$

Здесь введены обозначения

$$U_{\text{eff}}(k)=U\left\{1+\frac{U^2}{2N^2}\sum_{pq}\frac{N^{\uparrow}_{kpq}-N^{\downarrow}_{kpq}}{[\Omega_{kpq}-(\varepsilon_k+Un)]^2}\right\},$$

$$\Delta=\frac{U^3}{N^3}\sum_{kpq}\frac{N^{\uparrow}_{kpq}-N^{\downarrow}_{kpq}}{[\Omega_{kpq}-(\varepsilon_k+Un)]^3}[n(\Omega_{kpq})-n(\varepsilon_k+Un)].$$

Можно, говоря условно, считать соотношение (24) обобщенной формой критерия Стонера возникновения ферромагнетизма в модели Хаббарда. Наиболее близкую форму к этому критерию соотношение (24) приобретает в случае, когда можно считать $U_{\text{eff}}(k)\approx U_{\text{eff}}(0)$. При этом из (24) получаем

$$(25)\qquad U_{\text{eff}}D_\sigma(\varepsilon_f)-\Delta(\varepsilon_f)>1.$$

Из этого результата видно, что возникновение магнетизма в системе определяется плотностью состояний электронов. Возникновение перенормированной величины U_{eff} и параметра Δ является естественным при более точном учете корреляции, чем в приближении Хартри — Фока, которое ведет к критерию Стонера. Известно, что в приближении Хартри — Фока сильно преувеличивается тенденция системы к образованию магнитоупорядоченного состояния. Как уже говорилось выше, в зонном пределе представление (17) для массового оператора можно использовать для итерационного вычисления высших (по параметру взаимодействия U) порядков массового оператора, для чего надо подставить (23) в (17). Таким образом, предлагаемая самосогласованная процедура позволяет построить теорию возмущений для массового оператора. Из-за громоздкости получающихся выражений мы не приводим их здесь, а отсылаем к работе [11], где также рассматривается использование двухполюсного представления для спектральной плотности (двух дельта-функций) в качестве затравочного приближения.

4. В области резонанса одночастичных и коллективных возбуждений парное приближение становится неприменимым. В частности, для описания магнитоупорядоченного состояния особенно важно учесть вклад в массовый оператор процессов с переворотом спина. Развитый метод позволяет сделать это очень простым и наглядным образом. Для этого произведем в (15) следующие разновременные расцепления:

$$
\begin{aligned}
(26)\qquad &\langle a_{j\sigma}^{+} n_{j-\sigma} n_{i-\sigma}(t) a_{i\sigma}(t)\rangle^{\text{ir,c}} \approx \langle n_{j-\sigma} n_{i-\sigma}(t)\rangle \langle a_{j\sigma}^{+} a_{i\sigma}(t)\rangle + \\
&+\langle a_{j\sigma}^{+} a_{j-\sigma} \overset{+}{a}_{i-\sigma}(t) a_{i\sigma}(t)\rangle \langle \overset{+}{a}_{j-\sigma} a_{i-\sigma}(t)\rangle + \\
&+\langle a_{j\sigma}^{+} \overset{+}{a}_{j-\sigma} a_{i-\sigma}(t) a_{i\sigma}(t)\rangle \langle a_{j-\sigma} \overset{+}{a}_{i-\sigma}(t)\rangle .
\end{aligned}
$$

Тогда массовый оператор (15) запишется в виде

$$
\begin{aligned}
(27)\qquad & M_{k\sigma}(\omega) \approx M_{k\sigma}^{\text{el}}(\omega) + M_{k\sigma}^{\text{s}}(\omega) + M_{k\sigma}^{\text{d}}(\omega) = \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega-\omega'} (e^{\beta\omega'}+1) U^2 N^{-1} \sum_{i\neq j} e^{-ik(R_i-R_j)} \times \\
&\times \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dE n_{\text{F}} \left(-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \langle\langle a_{i\sigma} | a_{j\sigma}^{+} \rangle\rangle_{E+i\varepsilon} \right) n_{\text{B}}(\omega'-E) \times \right. \\
&\times \left(-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \langle\langle n_{i-\sigma} | n_{j-\sigma} \rangle\rangle_{\omega'-E+i\varepsilon} \right) + \\
&+ \int_{-\infty}^{\infty} dE n_{\text{F}}(E) \left(-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \langle\langle a_{i-\sigma} | \overset{+}{a}_{j-\sigma} \rangle\rangle_{E+i\varepsilon} \right) \times \\
&\left. \times n_{\text{B}}(\omega'-E) \quad -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \langle\langle a_{i-\sigma} a_{i\sigma} | a_{j\sigma}^{+} \overset{+}{a}_{j-\sigma} \rangle\rangle_{\omega'-E+i\varepsilon} \right) \right\}.
\end{aligned}
$$

Здесь $M_{k\sigma}^{\mathrm{el}}(\omega)$, $M_{k\sigma}^{\mathrm{s}}(\omega)$, $M_{k\sigma}^{\mathrm{d}}(\omega)$ — вклады в массовый оператор, учитывающие коллективные движения электронной плотности, спиновой плотности и плотности двоек, соответственно;

$$n_{\mathrm{F}}^{B}=[\exp(\omega/\theta)\mp1]^{-1}.$$

Рассмотрим для примера вычисление вклада $M_{k\sigma}^{\mathrm{el}}(\omega)$ в простейшем приближении

$$(28)\qquad M_{k\sigma}^{\mathrm{el}}(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\omega-\omega'}(e^{\beta\omega'}+1)U^2N^{-1}\sum_{i\neq j}e^{-i\vec{k}(R_i-R_j)}\times$$

$$\times\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dt}{2\pi}e^{i\omega' t}\{\langle a_{j\sigma}^{+}a_{i\sigma}(t)\rangle(n_{-\sigma}^2+K_{ij}(t))\},$$

$$K_{ij}(t)=\langle(n_{j-\sigma}-n_{-\sigma})(n_{i-\sigma}(t)-n_{-\sigma})\rangle.$$

Если ограничиться статическим приближением для $K_{ij}(t)$, т. е. положить $K_{ij}(t)\approx K_{ij}(0)$ (см. работу [5]), то из (28) получим

$$(29)\qquad M_{k\sigma}^{\mathrm{el}}(\omega)=\frac{U^2}{N}\sum_{q}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dE}{\omega-E}(e^{\beta E}+1)\times$$

$$\times\left\{-\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}G_{q\sigma}(E+i\varepsilon)\right\}(n_{-\sigma}^2+K_{k-q})n_{\mathrm{F}}(E).$$

Уравнения (29) и (12) представляют собой самосогласованную систему уравнений для одночастичной функции Грина $G_{k\sigma}$ в данном приближении. Беря в качестве затравочного значения $g_{q\sigma}(\omega)=\delta(\omega-\varepsilon_q)$, получим из (29)

$$(30)\qquad M_{k\sigma}^{\mathrm{el}}(\omega)=\frac{U^2}{N}\sum_{q}(\omega-\varepsilon_{k-q})^{-1}\{n_{-\sigma}^2+K_q\}.$$

Аналогично можно провести простейшие оценки величин $M_{k\sigma}^{\mathrm{s}}$ и $M_{k\sigma}^{\mathrm{d}}$. Более точный расчет массового оператора (27), вычисление коллективных функций Грина и применение к конкретным физическим системам будут изложены в отдельной работе.

5. В настоящем разделе мы рассмотрим схему вычисления второго точного представления для массового оператора. Это представление также справедливо для произвольных значений z, но более удобно для получения приближенных представлений в пределе сильной корреляции, поскольку явным образом содержит множитель $|t_{ij}|^2$. При этом в качестве нулевой функции Грина также выбирается перенормированная с учетом всех ренормировок среднего поля нелокальная функция Грина. В ряде работ [16, 17] теория возмущений в атомном пределе строилась на основе локальной нулевой функции Грина атомного предела $G=(\omega-Un_{-\sigma})/(\omega-U)\omega$. Как отмечено в работах [18, 19], это приводит к неточным результатам, поскольку даже в атомном пределе решение является заведомо нелокальным, т. е. необходимо с самого начала учитывать недиагональные элементы решения. Если попытаться обойтись без метода функций Грина, то нужно строить последовательную теорию возмущений в атомном пределе,

что представляет собой весьма нетривиальную задачу из-за высокой кратности вырождения энергетических уровней невозмущенного гамильтониана. При этом требуется решать проблему объемных расходимостей и строить специальный вариант весьма громоздкой диаграммной техники [19]. Отметим здесь же, что в работе [19] был сформулирован способ построения эффективного гамильтониана в модели Хаббарда унитарным преобразованием и показано, что простейшее — гейзенберговское — взаимодействие есть основное обменное взаимодействие в модели Хаббарда. В настоящей работе этот круг вопросов не затрагивается, а только вычисляется спектр возбуждений квазичастичных состояний систем в рамках метода неприводимых функций Грина, который дает самосогласованную схему систематического построения обобщенных интерполяционных решений гамильтониана Хаббарда, справедливых в широком интервале значений z.

Построение массового оператора основано на введении неприводимых частей для функции Грина $G_{ij\sigma}(t) = \langle\langle a_{i\sigma}(t); a_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle$, которая записывается в виде

$$G_{ij\sigma}(\omega) = \langle\langle a_{i\sigma}|a_{j\sigma}^{+}\rangle\rangle_{\omega} = \sum_{\alpha\beta} \langle\langle d_{i\alpha\sigma}|d_{j\beta\sigma}^{+}\rangle\rangle_{\omega} = \sum_{\alpha\beta} G_{ij\sigma}^{\alpha\beta}(\omega), \tag{31}$$

$$d_{i\alpha\sigma} \equiv n_{i-\sigma}^{\alpha} a_{i\sigma} (\alpha = \pm),\ n_{i\sigma}^{+} = n_{i\sigma};\ n_{i\sigma}^{-} = (1 - n_{i\sigma}),$$

где $G_{ij\sigma}^{\alpha\beta}$ — матричная функция Грина

$$\overline{G}_{ij\sigma}(\omega) = \left\langle\left\langle \begin{pmatrix} d_{i+\sigma} \\ d_{i-\sigma} \end{pmatrix} \middle| (d_{j+\sigma}^{+} d_{j-\sigma}^{+}) \right\rangle\right\rangle_{\omega} = \begin{bmatrix} \langle\langle d_{i+\sigma} | d_{j+\sigma}^{+}\rangle\rangle & \langle\langle d_{i+\sigma} | d_{j-\sigma}^{+}\rangle\rangle \\ \langle\langle d_{i-\sigma} | d_{j+\sigma}^{+}\rangle\rangle & \langle\langle d_{i-\sigma} | d_{j-\sigma}^{+}\rangle\rangle \end{bmatrix}, \tag{32}$$

уравнение движения для компонент которой имеет вид

$$(\omega - E_{\alpha}) G_{ij\sigma}^{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{ij}\delta_{\alpha\beta} n_{-\sigma}^{\alpha} + \sum_{l \neq i} t_{il} \langle\langle n_{i-\sigma}^{\alpha} a_{l\sigma} + \alpha a_{i\sigma} b_{il,-\sigma} | d_{j\beta\sigma}^{+}\rangle\rangle_{\omega}. \tag{33}$$

Вводя матричную запись

$$\overline{E} = \begin{bmatrix} (\omega - E_{+}) & 0 \\ 0 & (\omega - E_{-}) \end{bmatrix} \text{ и } \Phi = \begin{bmatrix} n_{-\sigma}^{+} & 0 \\ 0 & n_{-\sigma}^{-} \end{bmatrix}, \tag{34}$$

перепишем уравнение (33) в форме

$$\{\overline{E}\overline{G}_{ij\sigma}(\omega) - \Phi\delta_{ij}\}_{\alpha\beta} = \sum_{l \neq i} t_{il} \langle\langle n_{i-\sigma}^{\alpha} a_{l\sigma} + \alpha a_{i\sigma} b_{il,-\sigma} | d_{j\beta\sigma}^{+}\rangle\rangle_{\omega}. \tag{35}$$

Введем теперь по определению матричную неприводимую функцию Грина $\overline{D}_{il}^{\,\mathrm{ir}}(\omega)$

$$\begin{aligned} \overline{D}_{il}^{\,\mathrm{ir}}(\omega) = {} & \begin{bmatrix} \langle\langle n_{i-\sigma}^{+} a_{l\sigma} + a_{i\sigma} b_{il,-\sigma} | d_{j+\sigma}^{+}\rangle\rangle & \langle\langle n_{i-\sigma}^{+} a_{l\sigma} + a_{i\sigma} b_{il,-\sigma} | d_{j-\sigma}^{+}\rangle\rangle \\ \langle\langle n_{i-\sigma}^{-} a_{l\sigma} - a_{i\sigma} b_{il,-\sigma} | d_{j+\sigma}^{+}\rangle\rangle & \langle\langle n_{i-\sigma}^{-} a_{l\sigma} - a_{i\sigma} b_{il,-\sigma} | d_{j-\sigma}^{+}\rangle\rangle \end{bmatrix} - \\ & - \sum_{\alpha'} \left\{ \begin{bmatrix} A_{il}^{+\alpha'} \\ A_{il}^{-\alpha'} \end{bmatrix} \times [G_{ij\sigma}^{\alpha'} G_{ij\sigma}^{\alpha'}] - \begin{bmatrix} B_{li}^{+\alpha'} \\ B_{li}^{-\alpha'} \end{bmatrix} \times [G_{lj\sigma}^{\alpha'} G_{lj\sigma}^{\alpha'}] \right\}. \end{aligned} \tag{36}$$

Коэффициенты $\overline{A}_{il}$ и $\overline{B}_{li}$ определяются из условия

$$\langle [\{\overline{D}_{il}^{\,\mathrm{ir}}\}_{\alpha\beta},\ d_{j\beta\sigma}]_{+}\rangle = 0. \tag{37}$$

Вычисляя соответствующие коммутаторы в (37) и приравнивая между собой члены, пропорциональные δ_{ij} и δ_{jl}, соответственно, получим $(i\neq l)$

(38) $$\{\bar{A}_{il}\}_{\alpha\beta}=\alpha(\langle d_{i\beta-\sigma}a_{l-\sigma}\rangle+\langle d_{i-\beta-\sigma}a^{+}_{l-\sigma}\rangle)(n_{-\sigma}{}^{\beta})^{-1},$$

$$\{\bar{B}_{li}\}_{\alpha\beta}=\{\langle n^{\beta}_{l-\sigma}n^{\alpha}_{i-\sigma}\rangle+\alpha\beta(\langle a_{i\sigma}a^{+}_{i-\sigma}a_{l-\sigma}a_{l\sigma}{}^{+}\rangle-$$

$$-\langle a_{i\sigma}a_{i-\sigma}a^{+}_{l-\sigma}a_{l\sigma}{}^{+}\rangle)\}(n_{-\sigma}{}^{\beta})^{-1}.$$

Ту часть высшей функции Грина, которую мы выразили через исходные функции Грина, удобно записать с помощью функции Грина нулевого порядка, содержащей все ренормировки среднего поля:

(39) $$\{\bar{E}\bar{G}_{0ij}-\Phi\delta_{ij}\}_{\alpha\beta}=$$

$$=\sum_{l\alpha'}t_{il}\left\{\begin{bmatrix}A_{il}^{+\alpha'}\\A_{il}^{-\alpha'}\end{bmatrix}\times[G_{0ij}^{\alpha'+}\,G_{0ij}^{\alpha'-}]-\begin{bmatrix}B_{li}^{+\alpha'}\\B_{li}^{-\alpha'}\end{bmatrix}\times[G_{0lj}^{\alpha'+}\,G_{0lj}^{\alpha'-}]\right\}.$$

С помощью преобразования Фурье $\bar{G}_{0ij}=N^{-1}\sum_q\bar{G}_{0q}\exp[iq(R_i-R_j)]$ можно найти явный вид матрицы $\bar{G}_{0q}$

(40) $$\begin{bmatrix}G_{0q}{}^{++}(\omega) & G_{0q}{}^{+-}(\omega)\\G_{0q}{}^{-+}(\omega) & G_{0q}{}^{--}(\omega)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}n_{-\sigma}{}^{+}b & n_{-\sigma}{}^{-}d\\n_{-\sigma}{}^{+}c & n_{-\sigma}{}^{-}a\end{bmatrix}(ab-cd)^{-1}.$$

Коэффициенты a, b, c, d равны

(41) $$\left.\begin{matrix}a\\b\end{matrix}\right\}=\left(\omega-E_{\pm}-N^{-1}\sum_{\tau}\varepsilon_{\tau}(A^{\pm\pm}(-\tau)-B^{\pm\pm}(\tau-q))\right)$$

$$\left.\begin{matrix}c\\d\end{matrix}\right\}=N^{-1}\sum_{\tau}\varepsilon_{\tau}(A^{\mp\pm}(-\tau)-B^{\mp\pm}(\tau-q)).$$

Подставляя (40) в (36), получим

(42) $$\bar{G}_{q\sigma}(\omega)=\bar{G}_{0q}(\omega)+\bar{G}_{0q}(\omega)\bar{\Phi}^{-1}D_{1q}(\omega),$$

$$D_{1q}{}^{\alpha\beta}=\left\{\left\langle\!\!\left\langle\sum_l t_{il}D^{1\mathrm{r}}_{il,\alpha}|d^{+}_{j\beta\sigma}\right\rangle\!\!\right\rangle_{\omega}\right\}_q.$$

Таким образом, для получения уравнения Дайсона нам необходимо вычислить матрицу $\bar{D}_{1q}(\omega)$. Для этого продифференцируем эту матричную функцию Грина по второму времени

(43) $$-i\frac{d}{dt}\left\langle\!\!\left\langle\sum_l t_{il}D^{1\mathrm{r}}_{il,\alpha};\,d^{+}_{j\beta\sigma}(t)\right\rangle\!\!\right\rangle.$$

Выделяя теперь в уравнении (43) аналогично (36) неприводимую по правым операторам функцию Грина, получим уравнение Дайсона

(44) $$\bar{G}_{q\rho}(\omega)=\bar{G}_{0q}(\omega)+\bar{G}_{0q}(\omega)\bar{M}_{q\sigma}(\omega)\bar{G}_q(\omega).$$

Массовый оператор $\bar{M}_{q\sigma}(\omega)$ имеет вид

(45) $$\bar{M}_{q\sigma}(\omega)=\bar{P}_q{}^{c}(\omega)=\Phi^{-1}\left\{\sum_{lm}t_{il}t_{mj}\langle\!\langle\bar{D}_{il}{}^{1\mathrm{r}}|D_{mj}{}^{1\mathrm{r}}\rangle\!\rangle_{\omega}{}^{c}\right\}_q\Phi^{-1}.$$

Формальное решение уравнения Дайсона (44) имеет вид

$$\bar{G}_{q\sigma}(\omega)=\{\bar{G}_{0q}^{-1}(\omega)-\bar{M}_{q\sigma}(\omega)\}^{-1}= \tag{46}$$

$$=\frac{1}{\det(\bar{G}_{0q}^{-1}-\bar{M}_{q\sigma})}\begin{vmatrix} \left(\frac{b}{n_{-\sigma}^{-}}-M_{q\sigma}^{--}\right) & \left(\frac{d}{n_{-\sigma}^{+}}+M_{q\sigma}^{+-}\right) \\ \left(\frac{c}{n_{-\sigma}^{-}}+M_{q\sigma}^{-+}\right) & \left(\frac{a}{n_{-\sigma}^{+}}-M_{q\sigma}^{++}\right) \end{vmatrix}$$

Таким образом, задача нахождения функции Грина $\bar{G}_{q\sigma}$ свелась к вычислению элементов матриц $\bar{G}_{0q}^{-1}$ и $\bar{M}_{q\sigma}$.

6. Рассмотрим функцию Грина нулевого порядка (40). Полная функция Грина нулевого порядка $G_{0\sigma}(q, \omega)$ согласно (31) равна

$$G_{0\sigma}(q,\omega)=(ab-cd)^{-1}(n_{-\sigma}^{-}a+n_{-\sigma}^{+}b+n_{-\sigma}^{-}d+n_{-\sigma}^{+}c)= \tag{47}$$

$$=\frac{\omega-(n_{-\sigma}^{+}E_{-}+n_{-\sigma}^{-}E_{+})-\lambda(q)}{(\omega-E_{+}-n_{-\sigma}^{-}\lambda_1(q))(\omega-E_{-}-n_{-\sigma}^{+}\lambda_2(q))-n_{-\sigma}^{-}n_{-\sigma}^{+}\lambda_3(q)\lambda_4(q)},$$

где

$$\lambda_{\substack{1\\2}}(q)=\frac{1}{n_{-\sigma}^{\mp}}\sum_{\tau}\varepsilon_{\tau}(A^{\pm\pm}(\tau)-B^{\pm\pm}(\tau-q)), \tag{48}$$

$$\lambda_{\substack{3\\4}}(q)=\frac{1}{n_{-\sigma}^{\mp}}\sum_{\tau}\varepsilon_{\tau}(A^{\pm\mp}(-\tau)-B^{\pm\mp}(\tau-q)),$$

$$\lambda(q)=(n_{-\sigma}^{-})^2(\lambda_1+\lambda_3)+(n_{-\sigma}^{+})^2(\lambda_2+\lambda_4).$$

Функция Грина «нулевого» порядка (47) имеет двухполюсную структуру, близкую к решению «Хаббард III» [20] и решению Рот [21, 22], но более точно учитывает недиагональные матричные элементы, поскольку содержит все ренормировки среднего поля. В частности, решение «Хаббард III» дает локальный массовый оператор.

Уравнение для полюсов функции Грина (47) имеет вид

$$\Big\{\Big(\omega-E_{+}-N^{-1}\sum_{\tau}\varepsilon_{\tau}(A^{++}(-\tau)-B^{++}(\tau-q))\Big)\times \tag{49}$$

$$\times\Big(\omega-E_{-}-N^{-1}\sum_{\tau}\varepsilon_{\tau}(A^{--}(-\tau)-B^{--}(\tau-q))\Big)-$$

$$-N^{-1}\sum_{\tau}\varepsilon_{\tau}(A^{-+}(-\tau)-B^{+-}(\tau-q))N^{-1}\sum_{\tau}\varepsilon_{\tau}\times$$

$$\times(A^{+-}(-\tau)-B^{+-}(\tau-q))\Big\}=0.$$

Спектр квазичастичных состояний будет состоять из двух ветвей:

$$\omega_{1,2}(q)={}^1/_2\{(E_{+}+E_{-}+a_1+b_1)\pm[(E_{+}+E_{-}-a_1-b_1)^2-4cd]^{1/2}\}, \tag{50}$$

$$a_1=\omega-E_{+}-a,\quad b_1=\omega-E_{-}-b.$$

Таким образом, спектральная интенсивность функции Грина нулевого порядка будет иметь два пика, расстояние между которыми равно

$$\omega_1(q)-\omega_2(q)=\{(U-a_1-b_1)^2-cd\}^{1/2}\approx U\left(1-\frac{(a_1-b_1)}{U}\right)+O(z). \tag{51}$$

Остановимся теперь более подробно на сравнении нашего начального приближения (47) с другими известными решениями гамильтониана Хаббарда в случае сильной корреляции. Для этого перепишем $\bar{G}_{0q}(\omega)$ в следующем виде:

$$\bar{G}_{0q}(\omega)=\begin{bmatrix} \left\{\dfrac{a}{n_{-\sigma}^{+}}-\dfrac{db^{-1}c}{n_{-\sigma}^{+}}\right\}^{-1} & \dfrac{d}{a}\left\{\dfrac{b}{n_{-\sigma}^{-}}-\dfrac{da^{-1}c}{n_{-\sigma}^{-}}\right\}^{-1} \\ \dfrac{c}{b}\left\{\dfrac{a}{n_{-\sigma}^{+}}-\dfrac{db^{-1}c}{n_{-\sigma}^{+}}\right\}^{-1} & \left\{\dfrac{b}{n_{-\sigma}^{-}}-\dfrac{da^{-1}c}{n_{-\sigma}^{-}}\right\}^{-1} \end{bmatrix} \tag{52}$$

откуда получим для полной функции Грина нулевого порядка

$$G_{0\sigma}(q,\omega)=\frac{n_{-\sigma}^{+}(1+c/b)}{a-db^{-1}c}+\frac{n_{-\sigma}^{-}(1+d/a)}{b-ca^{-1}d}\approx \tag{53}$$

$$\approx\frac{n_{-\sigma}^{-}}{\omega-E_{-}-n_{-\sigma}^{+}W_{q,-\sigma}^{-}}+\frac{n_{-\sigma}^{+}}{\omega-E_{+}-n_{-\sigma}^{-}W_{q,-\sigma}^{+}},$$

здесь

$$n_{-\sigma}^{+}n_{-\sigma}^{-}W_{q,-\sigma}^{\pm}=N^{-1}\sum_{i\neq j}t_{ij}\exp[-iq(R_i-R_j)]\times \tag{54}$$

$$\times\{(\langle a_{i-\sigma}^{+}n_{i\sigma}^{\pm}a_{j-\sigma}\rangle+\langle a_{i-\sigma}n_{i\sigma}^{\mp}a_{j-\sigma}^{+}\rangle)+(\langle n_{j-\sigma}^{\pm}n_{i-\sigma}^{\pm}\rangle+$$

$$+\langle a_{i\sigma}a_{i-\sigma}^{+}a_{j-\sigma}a_{j\sigma}^{+}\rangle-\langle a_{i\sigma}a_{i-\sigma}a_{j-\sigma}^{+}a_{j\sigma}^{+}\rangle)\}$$

— величины сдвигов для верхней и нижней зон вследствие корреляции электронов. В таком виде решение (53) очень близко к решению, получаемому в случае сильной корреляции методом Рот [21, 22] и методом моментов [23, 24]. Выражение для зонного сдвига (54), получаемое методом неприводимых функций Грина, совпадает с результатами, полученными этими методами, с тем исключением, что зонный сдвиг (54) различен для верхней и нижней подзон и не содержит членов, не зависящих от квазиимпульса. Причина заключается в том, что в выражении (47) более точно учитывается недиагональная структура решения, поскольку просуммированы все ренормировки среднего поля. Обычно в атомном пределе в методе Рот и методе моментов при рассмотрении зонного сдвига в нем оставляется только часть, не зависящая от квазиимпульса, что как раз соответствует отбрасыванию нелокальных членов.

В нашем подходе для получения дальнейших приближенных решений из представления (54) необходимо сравнить коллективные корреляционные функции в правой части (54). При $z\to 0$ и $n_\sigma+n_{-\sigma}<1$ можно, следуя работе [25], считать, что корреляционные функции $\langle a_{i-\sigma}^{+}n_{i\sigma}^{\pm}a_{j-\sigma}\rangle$, $\langle a_{i-\sigma}n_{i\sigma}^{\pm}a_{j-\sigma}^{+}\rangle$ и $\langle a_{i\sigma}a_{j-\sigma}^{+}a_{j-\sigma}a_{j\sigma}^{+}\rangle$ малы. При этом из (54) получим следующее выражение для зонного сдвига:

$$n_{-\sigma}^{+}n_{-\sigma}^{-}W_{q,-\sigma}^{\pm}=N^{-1}\sum_{i\neq j}t_{ij}\langle n_{j-\sigma}^{\pm}n_{i-\sigma}^{\pm}\rangle\exp[-iq(R_i-R_j)]. \tag{55}$$

Решение (55) переходит в решение «Хаббард I» [7], если сделать дополнительное приближение $\langle n_{j-\sigma}n_{i-\sigma}\rangle\approx n_{-\sigma}^2$; тогда получим

$$G_{0\sigma}(q,\omega)\cong\frac{n_{-\sigma}}{\omega-U-\varepsilon_q n_{-\sigma}}+\frac{1-n_{-\sigma}}{\omega-\varepsilon_q(1-n_{-\sigma})} \tag{56}$$

Таким образом, использование представления (47) в качестве функции Грина «нулевого» порядка позволяет получить как частные случаи известные решения модели Хаббарда; условия применимости этих решений обсуждаются в указанных работах. Используемые в данной работе приближения для получения этих решений всегда связаны со стандартной процедурой расцепления, выражающей высшие корреляционные функции через низшие. Именно использование метода двухвременных функций Грина позволяет ясно видеть, какие корреляции отбрасываются в полной корреляционной функции для получения того или иного известного приближения, что позволяет систематически конструировать приближенные решения. Заметим, что параметры $\lambda_i(q)$ в (48) не зависят от частоты. Такая зависимость, обусловленная неупругими процессами рассеяния, как будет показано ниже, возникает за счет массового оператора.

7. Рассмотрим поправки за счет массового оператора. Перенормированный спектр системы будет задаваться следующим уравнением:

$$\begin{aligned}(57)\qquad &\left\{\left(\frac{a}{n_{-\sigma}^{+}}M_{q\sigma}^{++}\right)\left(\frac{b}{n_{-\sigma}^{-}}-M_{q\sigma}^{--}\right)-\right.\\ &\left.-\left(\frac{c}{n_{-\sigma}^{-}}+M_{q\sigma}^{+-}\right)\left(\frac{d}{n_{-\sigma}^{+}}+M_{q\sigma}^{+-}\right)\right\}=0,\end{aligned}$$

и существенно определяться характером приближений, использованных для вычисления массового оператора. Полная функция Грина $G_\sigma(q,\omega)$ будет иметь вид

$$\begin{aligned}(58)\qquad G_\sigma(q,\omega)=&\frac{1}{\det(\bar{G}_{c_q}^{-1}-\bar{M}_{q\sigma})}\left\{\frac{1}{n_{-\sigma}^{+}}(a-n_{-\sigma}^{+}M_{q\sigma}^{++})+\right.\\ &+\frac{1}{n_{-\sigma}^{-}}(b-n_{-\sigma}^{-}M_{q\sigma}^{--})+\frac{1}{n_{-\sigma}^{+}}(d+n_{-\sigma}^{+}M_{q\sigma}^{+-})+\\ &\left.+\frac{1}{n_{-\sigma}^{-}}(c+n_{-\sigma}^{-}M_{q\sigma}^{-+})\right\}=[\omega-(n_{-\sigma}^{+}E_{-}+n_{-\sigma}^{-}E_{+})-\tilde{\lambda}(q,\omega)]\times\\ &\times[(\omega-E_{+}-n_{-\sigma}^{-}\tilde{\lambda}_1(q,\omega))(\omega-E_{-}-n_{-\sigma}^{+}\tilde{\lambda}_2(q,\omega))-\\ &-n_{-\sigma}^{-}n_{-\sigma}^{+}\tilde{\lambda}_3(q,\omega)\tilde{\lambda}_4(q,\omega)]^{-1},\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}(59)\qquad &\tilde{\lambda}_{\substack{1\\2}}(q,\omega)=\lambda_{\substack{1\\2}}(q)-(n^{\pm}/n_{-\sigma}^{\mp})M_{q\sigma}^{\pm\pm}(\omega),\\ &\tilde{\lambda}_{\substack{3\\4}}(q,\omega)=\lambda_{\substack{3\\4}}(q)+(n_{-\sigma}^{\mp}/n_{-\sigma}^{\pm})M_{q\sigma}^{\pm\mp}(\omega),\\ &\tilde{\lambda}(q,\omega)=\lambda(q)+n_{-\sigma}^{+}n_{-\sigma}^{-}(M_{q\sigma}^{++}(\omega)+\\ &+M_{q\sigma}^{--}(\omega)-M_{q\sigma}^{-+}(\omega)-M_{\sigma q}^{+-}(\omega)).\end{aligned}$$

Поправки за счет массового оператора входят в (59) как аддитивные добавки, что очень удобно при оценке вкладов различных эффектов рассеяния. Решение (58) является точным представлением для полной функции Грина $G_\sigma(q,\omega)$ для модели Хаббарда. Здесь пока еще не сделано никаких аппроксимаций, лишь все эффекты среднего поля выделены в нулевую функцию Грина. Использование проекционных операторов позволило придать этому точному представлению двухполюсный вид. Поэтому это представление более удобно для получения приближенных решений в области сильной корреляции, где происходит расщепление на две подзоны. Для нахождения (58) запишем точный массовый оператор через корреляционные функции:

$$(60)\qquad \{\Phi\overline{M}_{q\sigma}\Phi\}_{\alpha\beta}=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\omega-\omega'}(e^{\omega'/\theta}+1)\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dt}{2\pi}e^{i\omega' t}\times$$

$$\times N^{-1}\sum_{ijlm}e^{-iq(R_i-R_j)}t_{il}t_{mj}\langle D^{+1r}_{mj,\beta}D^{1r}_{il,\alpha}(t)\rangle^{c}.$$

С помощью введения неприводимых частей мы отделили все одновременные спаривания. Как и в предыдущем случае, произведем теперь возможные разновременные спаривания для корреляционной функции в правой части (60). Получим

$$(61)\qquad \langle D^{+1r}_{mj,\beta}D_{il,\alpha}(t)\rangle^{c}\approx\langle a_{m\sigma}{}^{+}a_{l\sigma}(t)\rangle\langle n^{\beta}_{j-\sigma}n^{\alpha}_{i-\sigma}(t)\rangle+$$

$$+\langle a_{m\sigma}{}^{+}n^{\alpha}_{i-\sigma}(t)\rangle\langle n^{\beta}_{j-\sigma}a_{l\sigma}(t)\rangle+\beta\langle b^{+}_{mj,-\sigma}a_{l\sigma}(t)\rangle\times$$

$$\times\langle a_{j\sigma}{}^{+}n^{\alpha}_{i-\sigma}(t)\rangle+\beta\langle b^{+}_{mj,-\sigma}n^{\alpha}_{i-\sigma}(t)\rangle\langle a_{j\sigma}{}^{+}a_{l\sigma}(t)\rangle+$$

$$+\alpha\langle a_{m\sigma}{}^{+}a_{i\sigma}(t)\rangle\langle n^{\beta}_{j-\sigma}b_{il,-\sigma}(t)\rangle+\alpha\langle a_{m\sigma}{}^{+}b_{il,-\sigma}(t)\rangle\times$$

$$\times\langle n^{\beta}_{j-\sigma}b_{il,-\sigma}(t)\rangle+\alpha\beta\langle b^{+}_{mj,-\sigma}a_{i\sigma}(t)\rangle\langle a_{j\sigma}{}^{+}b_{il,-\sigma}(t)\rangle+$$

$$+\alpha\beta\langle b^{+}_{mj,-\sigma}b_{il,-\sigma}(t)\rangle\langle a_{j\sigma}{}^{+}a_{i\sigma}(t)\rangle.$$

Входящие в (61) величины можно интерпретировать на языке теории сплавов как поправки рассеяния, поправки резонансного уширения и интерференционные поправки [10]. В качестве примера вычислим простейшую поправку рассеяния, т. е. будем считать, что

$$(62)\qquad \langle D^{+1r}_{mj,\beta}\,D^{1r}_{il,\alpha}\rangle\approx\langle a_{m\sigma}{}^{+}a_{l\sigma}(t)\rangle\langle n^{\beta}_{j-\sigma}n^{\alpha}_{i-\sigma}\rangle=$$
$$=\langle a_{m\sigma}{}^{+}a_{l\sigma}(t)\rangle\{n_{-\sigma}{}^{\beta}n_{-\sigma}{}^{\alpha}+K_{ij}{}^{\alpha\beta}(t)\},$$

$$K_{ij}{}^{\alpha\beta}(t)=\langle(n^{\beta}_{j-\sigma}-n_{-\sigma}{}^{\beta})(n^{\alpha}_{i-\sigma}(t)-n_{-\sigma}{}^{\alpha})\rangle.$$

Первый член в уравнении (62) описывает рассеяние квазичастичных возбуждений со спином σ в среднем поле, а второй — дополнительную передачу импульса при рассеянии. Для качественной оценки второго эффекта, как и в (29), воспользуемся статическим приближением $K_{ij}{}^{\alpha\beta}(t)\approx K_{ij}{}^{\alpha\beta}(0)$. Подставляя (62) в (60), получим

$$(63)\qquad \{\Phi\overline{M}_{q\sigma}\Phi\}_{\alpha\beta}=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{\omega-\omega'}(e^{\omega'/\theta}+1)\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dt}{2\pi}\times$$

$$\times e^{i\omega' t}N^{-1}\sum_{ijlm}\exp[-iq(R_i-R_j)]\times$$

$$\times t_{il}t_{mj}\int\limits_{-\infty}^{\infty}d\omega_1 n(\omega_1)e^{i\omega_1 t}\left\{-\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}G_{ml,\sigma}(\omega_1+i\varepsilon)\right\}(n_{-\sigma}{}^{\beta}n_{-\sigma}{}^{\alpha}+K_{ij}{}^{\alpha\beta}(0)).$$

Уравнения (63) и (58) представляют собой самосогласованную систему уравнений для одночастичной функции Грина $G_{ij\sigma}(\omega)$. Возьмем для простой оценки в качестве затравочного приближения выражение (56). Тогда будем иметь

$$\text{(64)} \qquad \{\Phi \overline{M}_{q\sigma}\Phi\}_{\alpha\beta} \approx N^{-1}\sum_{q'} |\varepsilon_{q-q'}|^2 \{K_{q'}{}^{\alpha\beta} + n_{-\sigma}{}^{\beta} n_{-\sigma}{}^{\alpha}\} \times$$
$$\times \left\{ \frac{n_{-\sigma}}{\omega - U - \varepsilon_{q-q'} n_{-\sigma}} + \frac{1-n_{-\sigma}}{\omega - \varepsilon_{q-q'}(1-n_{-\sigma})} \right\}.$$

На основе массового оператора (64) можно в явном виде найти сдвиг энергии и затухание вследствие неупругого рассеяния квазичастичных возбуждений, что дает значительные преимущества по сравнению с работой [20], где явное вычисление аналитического вида массового оператора для различных поправок весьма затруднительно. Заметим, что для систематического построения решений необходимо вычислять коллективные корреляционные функции электронной плотности, спиновой плотности и плотности двоек. Мы предполагаем рассмотреть этот вопрос отдельно.

8. Таким образом, в настоящей работе с помощью метода неприводимых функций Грина получены общие выражения для массового оператора (14) и (60), позволяющие систематическим путем строить интерполяционные решения модели Хаббарда в широком интервале значений параметра z от атомного до зонного предела. В частности, можно сразу выделить те аппроксимации для массового оператора, которые не нарушают закона сохранения квазиимпульса в системе. Это особенно существенно в зонном пределе, т. е. для металлической фазы [26]. В самом деле, в случае очень слабой корреляции, когда отсутствует расщепление на подзоны, можно определить поверхность Ферми, следуя работе Латтинжера [27]. Если при стремлении ω к некоторому фиксированному значению ε_f затухание $\Gamma_{k\sigma}(\omega) = -\operatorname{Im} M_{k\sigma}(\omega + i\varepsilon)$, стремится к нулю, то

$$\text{(65)} \qquad g_{k\sigma}(\omega) = \frac{\Gamma_{k\sigma}(\omega)}{[\omega - \varepsilon_{k\sigma}{}^{\text{HF}} - \Delta_{k\sigma}(\omega)]^2 + \Gamma_{k\sigma}{}^2(\omega)} \approx$$
$$\approx \delta(\omega - \varepsilon_{k\sigma}{}^{\text{HF}} - \Delta_{k\sigma}(\varepsilon_f))|_{\omega \to \varepsilon_f}.$$

Множество значений квазиимпульса k, удовлетворяющих уравнению

$$\text{(66)} \qquad \varepsilon_f - \varepsilon_{k\sigma}{}^{\text{HF}} - \Delta_{k\sigma}(\varepsilon_f) = 0,$$

в общем случае принадлежит некоторой поверхности в импульсном пространстве, которая называется поверхностью Ферми взаимодействующей системы [27]. В работе Эдвардса и Хьюсона утверждалось, что решение «Хаббард I» не позволяет ввести хорошо определенную поверхность Ферми из-за того, что массовый оператор не содержит зависимости от квазиимпульса. Однако, по нашему мнению, в случае, когда имеется расщепление на подзоны, говорить о поверхности Ферми взаимодействующей системы в смысле Латтинжера [27] несправедливо. Конечное время жизни квазичастиц на поверхности Ферми, полученное Эдвардсом и Хьюсоном для решения «Хаббард I» свидетельствует об этом. Для однозонного решения модели Хаббарда в зонном пределе можно задать хорошо определенную поверхность Ферми и для локального массового оператора, если решение построить так, чтобы затухание на поверхности Ферми обращалось в нуль. В этом случае не зависящая от квазиимпульса добавка в (66) будет приводить к сдвигу центра тяжести и деформации идеальной ферми-сферы; более точное описание требует, конечно, учета зависимости от квазиимпульса. Наш подход позволяет на основе решения (14) в зонном пределе описывать случай нерасщепленных подзон и естественным образом вводить поверхность Ферми на основе определения (66). Для массового оператора в парном приближении (18) доказательство существования хорошо определенной поверхности Ферми можно найти в работе [28].

Итак, развитый самосогласованный метод построения обобщенных интерполяционных решений модели Хаббарда является весьма общим, не использует конкретное нулевое приближение и позволяет в рамках единой схемы вычислять спектр квазичастичных возбуждений системы как в зонном, так и в атомном пределах. Можно надеяться, что этот метод будет полезен для тех конкретных систем, для которых применима модель Хаббарда. Так, результаты работы [9] уже применялись для исследования хаббардовского антиферромагнетика [29] и в некоторых других задачах.

В заключение выражаю благодарность Н. М. Плакиде и В. Гётце за полезные обсуждения.

Объединенный институт
ядерных исследований

**Поступила в редакцию
21 июня 1977 г.**

Литература

[1] Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов. ДАН СССР, **126**, 53, 1959.
[2] С. В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма, «Наука», 1975.
[3] Н. М. Плакида. ТМФ, **5**, 147, 1970.
[4] Н. М. Плакида. ФТТ, **14**, 2841, 1972.
[5] Н. М. Плакида. Phys. Lett., **A43**, 481, 1973.
[6] Г. Конвент, Н. М. Плакида, Ф. Вукайлович. Препринт ОИЯИ Р4-7145, Дубна, 1973. З. Петру, Г. Л. Маилян. Препринт ОИЯИ Р4-8893, Дубна, 1975.
[7] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc., **A276**, 238, 1963.
[8] Д. И. Хомский. ФММ, 1970, **29**, 31.
[9] А. Л. Куземский. Препринт ОИЯИ Р4-7225, Дубна, 1973.
[10] А. Л. Куземский. Препринт ОИЯИ Р17-9239, Дубна, 1975.
[11] А. Л. Куземский. Препринт ОИЯИ Р17-10695, Дубна, 1977.
[12] W. D. Langer. Phys. Lett., **35A**, 45, 1971.
[13] Н. М. Плакида, П. Р. Русек. Препринт ОИЯИ Р4-8032, Дубна, 1974.
[14] Р. М. Уайт. Квантовая теория магнетизма, «Мир», 1972.
[15] А. Л. Куземский. Acta Phys. Pol., **A49**, 169, 1976.
[16] K. S. Schőnhammer. J. Phys.:, **C7**, 3520, 1974.
[17] K. Elk. Phys. Stat. Sol., **64**, 489, 1974.
[18] D. M. Esterling. Phys. Rev., **B2**, 4686, 1970.
[19] В. А. Капустин. ФТТ, **16**, 804, 1974; ТМФ, **21**, 118, 1974.
[20] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc., **A281**, 401, 1964.
[21] L. M. Roth. Phys. Rev., **184**, 451, 1969.
[22] O. Krisement. Z. Phys., **270**, 383, 1974.
[23] W. Holting. Z. Phys., **255**, 25, 1972.
[24] О. К. Калашников, Е. С. Фрадкин. ЖЭТФ, **55**, 607, 1968; ТМФ, **5**, 417, 1970.
[25] R. A. Tahir-Kheli, H. S. Jarrett. Phys. Rev., **180**, 544, 1969.
[26] D. M. Edwards, A. C. Hewson, Rev. Mod. Phys., **40**, 810, 1968.
[27] J. M. Luttinger. Phys. Rev., **119**, 1153, 1960.
[28] В. М. Галицкий. В сб.: «Применение методов квантовой теории поля к задачам многих тел», Атомиздат, 1963.
[29] Е. В. Кузьмин, С. Г. Овчинников. ТМФ, **31**, 379, 1977; ФТТ, **19**, 1127, 1977.

SELF-CONSISTENT THEORY OF THE ELECTRON CORRELATION IN THE HUBBARD MODEL

A. L. Kuzemsky

Self-consistent calculation of one-particle Green's functions in the Hubbard model is considered. The Dyson equation for the two-time thermal Green function is derived and the generalized interpolation solution of the Hubbard model is obtained. This solution is valid for any value of the Coulomb correlation. Two exact representations for the self-energy operator are used for obtaining approximate solutions in the band and atomic limits.