

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА



P4 - 7225

А.Л.Куземский

САМОСГЛАСОВАННОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ  
ФУНКЦИЙ ГРИНА В МОДЕЛИ ХАБДАРДА

**1973**

ЛАБОРАТОРИЯ  
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

We regret that some of the pages in the microfiche copy of this report may not be up to the proper legibility standards, even though the best possible copy was used for preparing the master fiche.

## Ранг публикаций Объединенного института ядерных исследований

Препринты и сообщения Объединенного института ядерных исследований /ОИЯИ/ являются самостоятельными публикациями. Они издаются в соответствии со ст. 4 Устава ОИЯИ. Отличие препринтов от сообщений заключается в том, что текст препринта будет впоследствии воспроизведен в каком-либо научном журнале или аperiodическом сборнике.

### Индексация

Препринты, сообщения и депонированные публикации ОИЯИ имеют единую нарастающую порядковую нумерацию, составляющую последние 4 цифры индекса.

Первый знак индекса - буквенный - может быть представлен в 3 вариантах:

“Р” - издание на русском языке;

“Е” - издание на английском языке;

“Д” - работа публикуется на русском и английском языках.

Препринты и сообщения, которые рассылаются только в страны-участницы ОИЯИ, буквенных индексов не имеют.

Цифра, следующая за буквенным обозначением, определяет тематическую категорию данной публикации. Перечень тематических категорий изданий ОИЯИ периодически рассылается их получателям.

Индексы, описанные выше, проставляются в правом верхнем углу на обложке и титульном листе каждого издания.

### Ссылки

В библиографических ссылках на препринты и сообщения ОИЯИ мы рекомендуем указывать: инициалы и фамилию автора, далее - сокращенное наименование института-издателя, индекс, место и год издания.

Пример библиографической ссылки:

*И.И.Иванов. ОИЯИ, P2-4985, Дубна, 1971.*

**P4 - 7225**

**А.Л.Куземский**

**САМОСОГЛАСОВАННОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ  
ФУНКЦИЙ ГРИНА В МОДЕЛИ ХАББАРДА**

Направлено в журнал "Физика металлов  
и металловедение"

Куземский А.Л.

P4 - 7225

Самосогласованное вычисление функций Грина в модели Хаббарда

Получено уравнение Дайсона для одночастичной двухвременной температурной функции Грина в задаче о корреляции электронов в узких энергетических зонах, описывающихся гамильтонианом Хаббарда. Используемый метод основан на введении неприводимых функций Грина<sup>/2,3/</sup>. Полученное точное представление для массового оператора одночастичной функции Грина вычисляется в пределе низкой плотности.

Препринт Объединенного института ядерных исследований.  
Дубна, 1973

Kuzemsky A.L.

P4 - 7225

A Selfconsistent Calculation of the Green's Functions in the Hubbard Model

The Dyson's equation for the one-particle two-time thermal Green's function in the problem of the electron correlation in the narrow energy bands which are described by the Hubbard Hamiltonian, was derived. This derivation was based on the method of the irreducible Green's functions<sup>/2,3/</sup>. The obtained exact expression for the self-energy of the one-particle Green's function was calculated in the low-density limit.

Preprint. Joint Institute for Nuclear Research.  
Dubna, 1973

## §1. Введение

В настоящей работе мы рассмотрим самосогласованное вычисление одночастичных функций Грина в модели Хаббарда <sup>/1/</sup>, исходя непосредственно из уравнения Дайсона для двухвременных температурных функций Грина. Вывод уравнения Дайсона основывается на введении неприводимых функций Грина, использовавшихся ранее в ряде работ, например, в теории неидеальных ферми-систем <sup>/2/</sup>, самосогласованной фононной теории кристаллов <sup>/3/</sup> и для получения точного представления для массового оператора двухвременной функции Грина от поперечных спиновых компонент в ферромагнетике Гейзенберга <sup>/4/</sup>. Рассматриваемый метод представляет собой полезную переформулировку метода двухвременных температурных функций Грина, позволяющую непосредственно оперировать с точным массовым оператором, а расщепление производить на конечном этапе.

Модель Хаббарда, предложенная для описания влияния корреляций между электронами на различные физические свойства системы, в частности на магнитные, представляет большой интерес <sup>/5/</sup>, поскольку является наиболее простой моделью изучения кулоновской корреляции между электронами с учетом периодического потенциала, т.е. с учетом зонной структуры твердого тела. Несмотря на схематизм, модель Хаббарда, все же, вероятно, правильно отражает наиболее существенные черты влияния электронных корреляций и удобна, поскольку в определенном смысле занимает промежуточное положение между моделью полностью коллективизированных электронов и мо-

целью локализованных спинов Гейзенберга. Схематизм модели определяет те расхождения между полученными приближенными решениями и реальной ситуацией в тех конкретных физических системах, к которым эта модель применялась.

Исследованию одночастичных свойств модели Хаббарда было посвящено большое количество работ, использующих различные методы теории систем многих частиц, имеющие разные области применимости в зависимости от предположений, сделанных относительно величины параметра кулоновского отталкивания и эффективной ширины зоны и связанного с этим характера приближения. Поэтому представляется полезным получить точное представление для массового оператора одночастичной функции Грина, справедливое для произвольных соотношений между величиной параметра кулоновского отталкивания и шириной зоны. Для конкретного случая низкой плотности найденное точное выражение вычисляется в ларном приближении.

В разделе 2 массовый оператор одночастичной функции Грина выражается через неприводимые функции Грина. В разделе 3 неприводимые функции Грина связываются с помощью спектральной теоремы с корреляционными функциями, которые вычисляются в пределе слабой связи и низкой плотности.

## *§2. Массовый оператор и неприводимые функции Грина*

Гамильтониан Хаббарда в импульсном представлении имеет вид:

$$H = \sum_{k, \sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \frac{U}{2N} \sum_{pqr\sigma} a_{p+r-q, \sigma}^+ a_{p, \sigma} a_{q, -\sigma}^+ a_{r, -\sigma}, \quad /1/$$

где  $U$  обозначает энергию взаимодействия двух электронов с одинаковыми функциями Ванье,  $N$  - число атомов в кристалле,  $a_{k\sigma}^+$ ,  $a_{k\sigma}$  - бозоновские операторы

рождения и уничтожения электронов с квазимпульсом  $k$  и спином  $\sigma$ . Так как  $a_{i\sigma}^{\dagger}, a_{i\sigma}$  антикоммутируют между собой, то  $n_{i\sigma}^{\uparrow} = n_{i\sigma}$ . Это означает исключение, согласно принципу Паули, отталкивания двух электронов с одним и тем же спином в одном узле. Первый член в /1/, содержащий зонную энергию  $\epsilon_k$ , описывает переходы частицы с одного узла на другой. Мы ограничимся случаем, когда это движение не сопровождается переворотом спина. В реальных системах особенности их поведения определяются как раз соотношением между энергией делокализации, определяемой  $\epsilon_k$ , и потенциальной энергией взаимодействия  $U$ , увеличение которой сужает зону. Физически интересной областью модели Хаббарда, с точки зрения возможности магнитного порядка, является область  $kT \ll \Delta \ll U$ , где  $T$  - температура, а  $\Delta$  - эффективная ширина зоны. Так, например, в приближении Хартри-Фока, в котором пренебрегается корреляциями между антипараллельными спинами, магнитный порядок, если он существует, наступает при значениях  $U \gg \Delta$ . Используемый метод позволяет получить точное выражение для массового оператора одночастичной функции Грина при произвольных соотношениях между  $U$  и  $\Delta$ .

Спектр одночастичных возбуждений системы /1/ описывается полюсами одночастичных функций Грина

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

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G_{k\sigma}(\omega) = \quad /2/$$

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

где  $\beta = (kT)^{-1}$ , а  $J_{k\sigma}(\omega)$  - спектральная интенсивность, связанная с временными корреляционными функциями следующим образом:

$$\langle a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}(t) \rangle = \langle a_{k\sigma}^+(-t) a_{k\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} J_{k\sigma}(\omega),$$

$$\begin{aligned} \langle a_{k\sigma}(t) a_{k\sigma}^+ \rangle &= \langle a_{k\sigma} a_{k\sigma}^+(-t) \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{\beta\omega} e^{-i\omega t} J_{k\sigma}(\omega). \end{aligned} \quad /3/$$

Если ввести спектральную плотность квазичастиц

$$g_{k\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k\sigma}(\omega + i\epsilon),$$

описывающую плотность одночастичных состояний системы, то выражения /3/ примут вид:

$$\begin{aligned} \langle a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} n(\omega) g_{k\sigma}(\omega), \\ \langle a_{k\sigma}(t) a_{k\sigma}^+ \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} [1 - n(\omega)] g_{k\sigma}(\omega), \end{aligned} \quad /5/$$

где  $n(\omega) = [\exp(\omega/\theta) + 1]^{-1}$  - число частиц с энергией  $\omega$ .

Уравнение для фурье-образа  $G_{k\sigma}(\omega)$  функции Грина /2/ имеет вид

$$(\omega - \epsilon_k) G_{k\sigma}(\omega) = I + U/N \sum_{pq} \langle\langle a_{k+p,\sigma} a_{p+q,-\sigma}^+ a_{q,-\sigma} | a_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega}. \quad /6/$$

Следуя работе /3/, введем по определению неприводимую функцию Грина, не содержащую ренормировок среднего поля:

$$\begin{aligned} i^r \langle\langle a_{k+p,\sigma} a_{p+q,-\sigma}^+ a_{q,-\sigma} | a_{k\sigma}^+ \rangle\rangle &= \langle\langle a_{k+p,\sigma} a_{p+q,-\sigma}^+ a_{q,-\sigma} | a_{k\sigma}^+ \rangle\rangle - \\ - \delta_{p,0} \langle n_{q,-\sigma} \rangle G_{k\sigma}. \end{aligned} \quad /7/$$

Как видно из этого определения, неприводимая функция Грина определена таким образом, что она не может быть сведена функциям Грина более низкого порядка по числу фермионных операторов произвольным спариванием операторов, относящихся к одному моменту времени. Заметим, что в отличие от случая электронного газа с парным взаимодействием, в /7/ не содержится члена типа так называемого обменного, поскольку считается, что рассеяние происходит без переворота спина. Если определение /7/ использовать в уравнении /6/, то последнее переписется в виде

$$G_{k\sigma}(\omega) = G_{k\sim\sigma}^{HF}(\omega) + G_{k-\sigma}^{HF} \times \\ \times U/N \sum_{pq}^{ir} \langle\langle a_{k+p,\sigma} a_{p+q,-\sigma}^+ a_{q,-\sigma} | a_{k\sigma}^+ \rangle\rangle. \quad /8/$$

Здесь были введены следующие обозначения

$$G_{k\sigma}^{HF}(\omega) = (\omega - \epsilon_{k\sigma}^{HF})^{-1}, \\ \epsilon_{k\sigma}^{HF} = \epsilon_k + U/N \sum_q \langle n_{q,-\sigma} \rangle \quad /9/$$

для невозмущенной функции Грина  $G_{k\sigma}^{HF}(\omega)$ , описывающей систему в хартри-фоковском приближении. Для получения уравнения Дайсона нам необходимо выразить функцию Грина  $^{ir} \langle\langle A | a_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega}$  в правой части /8/ через полную функцию Грина  $G_{k\sigma}(\omega)$  и массовый оператор. Поэтому продифференцируем эту функцию по второму времени:  $-i d/dt \ ^{ir} \langle\langle A | a_{k\sigma}^+(t) \rangle\rangle$ . Для фурье-компонент это запишется в виде

$$(\omega - \epsilon_k)^{ir} \langle\langle A | a_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = ^{ir} \langle [A, a_{k\sigma}^+]_+ \rangle + \\ + U/N \sum_{rs} \langle\langle A | a_{r,-\sigma}^+ a_{r+s,-\sigma} a_{k+s,\sigma} \rangle\rangle_{\omega}. \quad /10/$$

Антикоммутатор в /10/ вычисляется на основе определения неприводимой части /7/:

$$\begin{aligned} & \langle [a_{k+p, \sigma}^+ a_{p+q, -\sigma} a_{q, -\sigma} - a_{p+q, -\sigma}^+ a_{q, -\sigma}] a_{k+p, \sigma}, a_{k, \sigma}^+ \rangle = \\ & = \langle a_{p+q, -\sigma}^+ a_{q, -\sigma} \rangle \delta_{p,0} - \langle a_{p+q, -\sigma}^+ a_{q, -\sigma} \rangle \delta_{p,0} = 0. \end{aligned} \quad /11/$$

Введем теперь в уравнение /10/, аналогично /7/, неприводимую по правым операторам функцию Грина, в результате чего получим

$$\begin{aligned} & (\omega - \epsilon_{k\sigma}^{HF})^{-1} i^r \langle \langle a_{k+p, \sigma} a_{p+q, -\sigma} a_{q, -\sigma} | a_{k\sigma}^+ \rangle \rangle_{\omega} = \\ & = U/N \sum_{rs} i^r \langle \langle a_{k+p, \sigma} a_{p+q, -\sigma} a_{q, -\sigma} | a_{r, -\sigma} a_{r+s, -\sigma} a_{k+s, \sigma}^+ \rangle \rangle_{\omega}^{ir}. \end{aligned} \quad /12/$$

Подставляя /12/ в уравнение /8/, будем иметь

$$G_{k\sigma}(\omega) = G_{k-\sigma}^{HF}(\omega) + G_{k-\sigma}^{HF}(\omega) P_k(\omega) G_{k-\sigma}^{HF}(\omega), \quad /13/$$

где введено следующее обозначение

$$\begin{aligned} P_k(\omega) &= U^2 / N^2 \sum_{pqrs} \\ & i^r \langle \langle a_{k+p, \sigma}^+ a_{p+q, -\sigma} a_{q, -\sigma} | a_{r, -\sigma} a_{r+s, -\sigma} a_{k+s, \sigma}^+ \rangle \rangle_{\omega}^{ir}. \end{aligned} \quad /14/$$

Чтобы выделить массовый оператор, необходимо отделить связанную часть неприводимой функции Грина в /14/, которая, согласно /3/, вводится с помощью следующего уравнения

$$\begin{aligned} G_k^{ir}(p, q | r, s; \omega) &= K_k(p, q | r, s; \omega) + \\ & + U^2 / N^2 \sum_{r_1 s_1} \sum_{p_1 q_1} K_k(p, q | r_1, s_1; \omega) G_{k-\sigma}^{HF}(\omega) G_k^{ir}(r_1, q_1 | r, s; \omega), \end{aligned} \quad /15/$$

где  $G_k^{ir}(p, q | r, s; \omega) =$

$$= {}^{ir} \langle \langle a_{k+p, \sigma}^+ a_{p+q, -\sigma}^+ a_{q, -\sigma} | a_{r, -\sigma}^+ a_{r+s, -\sigma}^+ a_{k+s, \sigma}^+ \rangle \rangle_{\omega}^{ir},$$

$K(p, q | r, s; \omega) =$

- связанная часть функции Грина  $G(p, q | r, s; \omega)$ , согласно определению /15/, не содержащая частей, соединенных одной линией  $G_{k-\sigma}^{HF}(\omega)$ . Умножая /15/ на  $U^2/N^2$  и проводя соответствующее суммирование, получим

$$P_k(\omega) = M_k(\omega) + M_k(\omega) G_{k-\sigma}^{HF}(\omega) P_k(\omega), \quad /16/$$

где

$$M_k(\omega) = U^2/N^2 \sum_{pqrs} K_k(p, q | r, s; \omega). \quad /17/$$

Подставим /16/ в /13/, откуда найдем

$$G_{k\sigma}(\omega) = G_{k-\sigma}^{HF}(\omega) + G_{k-\sigma}^{HF}(\omega) M_k(\omega) G_{k\sigma}(\omega). \quad /18/$$

Уравнение /18/ представляет собой уравнение Дайсона для одночастичной двухвременной функции  $G_{k\sigma}(\omega)$ , которую можно представить в виде

$$G_{k\sigma}(\omega) = [\omega - \epsilon_{k-\sigma}^{HF} - M_k(\omega)]^{-1}. \quad /19/$$

Выражение

$$M_k(\omega) = U^2/N^2 \sum_{pqrs} \langle \langle a_{k+p, \sigma}^+ a_{p+q, -\sigma}^+ a_{q, -\sigma} | a_{r, -\sigma}^+ a_{r+s, -\sigma}^+ a_{k+s, \sigma}^+ \rangle \rangle_{\omega}^{ir, c} \quad /20/$$

является точным представлением для массового оператора одночастичной функции Грина для системы коррелирующих

электронов в узких энергетических зонах и описывающихся гамильтонианом Хаббарда. Это выражение можно записать в более удобной форме, если воспользоваться соотношениями /2/, /3/

$$M(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega'} (e^{\beta\omega'} + 1) U^2 / N^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega't} \times$$

$$\times \sum_{pqrs} \langle a_{r,-\sigma}^+(t) a_{r+s,-\sigma}(t) a_{k+s,\sigma}^+(t) | a_{k+p,\sigma} a_{p+q,-\sigma} a_{q,-\sigma} \rangle^{ir,c}.$$

/21/

Таким образом, массовый оператор одночастичной функции Грина для модели Хаббарда с помощью введения неприводимых функций Грина /2-4/ можно записать в явном виде, не прибегая к тому или иному способу обрыва цепочки зацепляющихся уравнений. Заметим, что подобные рассуждения можно столь же просто провести для гамильтониана Хаббарда в узловом представлении

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

со следующим результатом

$$G_{k\sigma}(\omega) = [\omega - \epsilon_{k-\sigma}^{HF} - M_k(\omega)]^{-1},$$

где

$$\langle\langle a_{i\sigma} | a_{j\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = N^{-1} \sum_k G_{k\sigma}(\omega) e^{ik(R_i - R_j)},$$

$$t_{ij} = N^{-1} \sum_k \epsilon_k e^{ik(R_i - R_j)}; \epsilon_{k-\sigma}^{HF} = \epsilon_k + U \langle n_{-\sigma} \rangle$$

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

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

Для нахождения приближенного вида массового оператора /21/ нужно использовать определенные предположения о приближенном выражении для связанной части корреляционной функции, что и рассматривается для некоторых случаев в следующем разделе.

### §3. Вычисление массового оператора в парном приближении

Рассмотрим теперь одну из возможностей /2,3/ нахождения приближенного выражения для массового оператора /21/. С помощью введения неприводимых частей мы отделили все ренормировки среднего поля, т.е. одно-временные спаривания. Предположим теперь, что полную корреляционную функцию в /21/ можно приближенно представить в виде произведения одночастичных корреляционных функций, пренебрегая эффектами корреляционных поправок для полной трехчастичной корреляционной функции. В результате мы будем иметь

$$\begin{aligned} & \langle a_{r,-\sigma}^+(t) a_{r+s,-\sigma}(t) a_{k+s,\sigma}^+(t) | a_{k+p,\sigma} a_{p+q,-\sigma} a_{q,-\sigma} \rangle_{ir,c} \approx \\ & \approx \delta_{k+s,k+p} \cdot \delta_{r+s,p+q} \cdot \delta_{r,q} \langle a_{k+p,\sigma}^+(t) a_{k+p,\sigma} \rangle \langle a_{p+q,-\sigma}(t) a_{p+q,-\sigma} \rangle \times \\ & \times \langle a_{q,-\sigma}^+(t) a_{q,-\sigma} \rangle. \end{aligned} \quad /22/$$

Учитывая /3/-/5/, /22/, перепишем выражение /21/ в следующем виде

$$\begin{aligned} M_k(\omega) = & U^2 / N^2 \int \frac{d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3}{\omega + \omega_1 - \omega_2 - \omega_3} \frac{[1 - n(\omega_1)] n(\omega_2) n(\omega_3)}{n(\omega_2 + \omega_3 - \omega_1)} \times \\ & \times g_{k+p,\sigma}(\omega_2) \cdot g_{p+q,-\sigma}(\omega_1) \cdot g_{q,-\sigma}(\omega_3). \end{aligned}$$

/23/

Массовый оператор в парном приближении /23/ можно записать в несколько более удобном виде, если воспользоваться непосредственно проверяемым соотношением

$$\frac{[1-n(\omega_1)]n(\omega_2)n(\omega_3)}{n(\omega_2+\omega_3-\omega_1)} \equiv n(\omega_1)[1-n(\omega_2)-n(\omega_3)] + n(\omega_3)n(\omega_2). \quad /24/$$

Подставляя /24/ в /23/, окончательно получим выражение для массового оператора в парном приближении

$$M_k(\omega) = U^2/N^2 \int \frac{d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3}{\omega + \omega_1 - \omega_2 - \omega_3} \{n(\omega_1)[1-n(\omega_2)-n(\omega_3)] + n(\omega_2)n(\omega_3)\} g_{p+q, -\sigma}(\omega_1) \cdot g_{k+p, \sigma}(\omega_2) \cdot g_{q, -\sigma}(\omega_3). \quad /25/$$

Это выражение является результатом самосогласованного приближения, в котором не используется нулевое приближение. Выбирая то или иное начальное приближение для спектральной плотности  $g_{k\sigma}(\omega)$ , мы можем вычислить функцию Грина  $G_{k\sigma}(\omega)$  в этом приближении. Затем, подставляя полученный результат для спектральной плотности в /25/, в принципе, можно найти более точное решение для  $G_{k\sigma}$ .

Для сравнения с другими работами рассмотрим приближение свободных квазичастиц, в котором

$$g_{k\sigma}(\omega) = \delta(\omega - \epsilon_k). \quad /26/$$

Тогда выражение /25/ для массового оператора примет следующий вид:

$$M_k(\omega) = U^2/N^2 \sum_{pq} \frac{n_{p+q, -\sigma} [1 - n_{k+p, \sigma} - n_{q, -\sigma}] + n_{k+p, \sigma} \cdot n_{q, -\sigma}}{\omega + \epsilon_{p+q} - \epsilon_{k+p} - \epsilon_q} \quad /27/$$

Приближение свободных квазичастиц для  $g_{k\sigma}(\omega)$  в /25/ оправдано, если величина параметра кулоновского отталкивания достаточно мала по сравнению с эффективной шириной зоны, т.е. если  $U/\Delta < 1$ . В этом случае, поскольку перед интегралом в /25/ уже содержится множитель  $U^2$ , плотность состояний можно считать дельтаобразной. Кроме того, использованное парное приближение /22/, вообще говоря, оправдано, если плотность квазичастиц достаточно низкая, т.е. если  $\langle n \rangle \ll 1$ . При этих предположениях массовый оператор вида /27/ для модели Хаббарда был получен ранее в работе Ланжера /6/, где использовалось двойное дифференцирование функции Грина по первому времени и приближение типа плотностного разложения в приближении хаотических фаз. В приближении низкой плотности сдвиг энергии /определяющийся массовым оператором/ был вычислен впервые для модели Хаббарда Канамори /7/ в  $t$ -матричном приближении теории ядерной материи Бракнера. Его результат имеет следующую структуру

$$\Delta E = U/N \left\{ 1 + U/N \sum_{pq} \frac{\delta(kf, pq)}{E_{pq} - E} \right\}^{-1}.$$

Подобные по структуре выражения были также получены в указанном пределе недавно в /8/ в  $t$ -матричном приближении и в /9/ с помощью оригинального двухполюсного приближения для функций Грина. Поскольку  $t$ -матричный подход определяет вероятность перехода под действием бесконечной последовательности актов двухчастичного рассеяния, то /8/ имеет вид бесконечной прогрессии. Соотношение /27/ можно интерпретировать как первые два члена из бесконечной прогрессии /28/, что связано с тем, что приближение, в котором оно получено, является самосогласованным приближением второго порядка. Заметим, что, поскольку мы работали в импульсном представлении /1/, не возникла трудность, отмеченная в работе /8/, связанная с тем, что массовый оператор в работах Хаббарда /1/ не зависит от квазиимпульса, что означает нарушение закона сохранения импульса при

расщеплениях. Это приводит к тому, что, как показано в /8/, в пределе малых значений  $U/\Delta$ , т.е. для металлической фазы, расщепление Хаббарда не дает хорошо определенной поверхности Ферми, которая является характерным признаком металла. Здесь такой ситуации не возникает.

Дальнейшее исследование рассмотренного приближения может быть проведено, например, на основе исследований работ /2/ и выходит за рамки настоящего обсуждения.

#### §4. Обсуждение

В настоящей работе было получено уравнение Дайсона и точное представление для массового оператора одночастичной двухвременной температурной функции Грина в задаче о корреляции электронов в узких зонах, описываемых гамильтонианом Хаббарда. Массовый оператор был точным образом выражен через неприводимую функцию Грина, не содержащую ренормировок среднего поля, для произвольных соотношений между величиной параметра кулоновского отталкивания  $U$  и эффективной ширины зоны  $\Delta$ . Метод является самосогласованным, не опирающимся на использование приближения нулевого порядка. Найденный массовый оператор был вычислен для конкретного случая низкой плотности и в пределе малой величины корреляции квазичастиц в парном приближении, а парные корреляции при этом учитывались в приближении свободных квазичастиц, поскольку все ренормировки среднего поля здесь учитываются автоматически. Рассмотренный метод, в принципе, не ограничен использованием для спектральной плотности приближения свободных квазичастиц и может оказаться полезным при получении более высоких приближений для одночастичной функции Грина в модели Хаббарда. Такое более точное описание парных корреляций должно привести к появлению фактора, описывающего затухание квазичастиц, а следовательно, к несколько "размазанной" дельта-функции в спектральной плотности квазичастичных состояний.

В заключение мне бы хотелось искренне поблагодарить К.Элька, Н.М.Плакиду, Л.А.Максимова, К.А.Кикоина, а также В.Б.Приезжева за ценные дискуссии.

### Литература

1. J.Habbar. *Proc Roy Soc*, 1963, A276, 238; 1964, A281, 401.
2. И.А.Квасников, В.Д.Озрин, В.П.Олейников. ИТФ-69-62, Киев, 1969; ИТФ-71-84Р, Киев, 1971.
3. Н.М.Плакида. ТМФ, 5, 147 /1970/; ФТТ, 14, 2841 /1972/.
4. Н.М.Плакида. ОИЯИ, Е4-6901, Дубна, 1973.
5. Д.И.Хомский. ФММ, 29, 31 /1970/.  
К.А.Кикоин, Л.А.Максимов. ФММ, 28, 43 /1969/;  
ЖЭТФ, 58, 2184 /1970/.
6. W.D.Langer. *Phys.Lett.*, 1971, 35A, 45.
7. J.Kanamori. *Progr. Theor. Phys.*, 1963, 30, 275.
8. D.W.Edwards, A.C.Hewson. *Rev.Med.Phys.*, 1968, 40, 810.
9. L.M.Roth. *Phys.Rev.*, 1969, 184, 451.

Рукопись поступила в издательский отдел  
4 июня 1973 года.



# Тематические категории публикаций Объединенного института ядерных исследований

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты

### Условия обмена

Препринты и сообщения ОИЯИ рассылаются бесплатно, на основе взаимного обмена, университетам, институтам, лабораториям, библиотекам, научным группам и отдельным ученым более 50 стран.

Мы ожидаем, что получатели изданий ОИЯИ будут сами проявлять инициативу в бесплатной посылке публикаций в Дубну. В порядке обмена принимаются научные книги, журналы, препринты и иного вида публикации по тематике ОИЯИ.

Единственный вид публикаций, который нам присылать не следует, - это репринты /оттиски статей, уже опубликованных в научных журналах/.

В ряде случаев мы сами обращаемся к получателям наших изданий с просьбой бесплатно прислать нам какие-либо книги или выписать для нашей библиотеки научные журналы, издающиеся в их странах.

### Отдельные запросы

Издательский отдел ежегодно выполняет около 3 000 отдельных запросов на высылку препринтов и сообщений ОИЯИ. В таких запросах следует обязательно указывать индекс запрашиваемого издания.

### Адреса

Письма по всем вопросам обмена публикациями, а также запросы на отдельные издания следует направлять по адресу:

*101000 Москва,  
Главный почтамт, п/я 79.  
Издательский отдел  
Объединенного института  
ядерных исследований.*

Адрес для посылки всех публикаций в порядке обмена, а также для бесплатной подписки на научные журналы:

*101000 Москва,  
Главный почтамт, п/я 79.  
Научно-техническая библиотека  
Объединенного института  
ядерных исследований.*

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.  
Заказ 16669. Тираж 600. Уч.-изд. листов 0,79.  
Редактор В. Р. Саранцева. Подписано к печати 15/8-73 г.