Низкотемпературные свойства модели Хаббарда

Р. О. Зайцев[1)]

Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 21 октября 2014 г.

После переработки 11 декабря 2014 г.

Получены самосогласованные уравнения для определения энергетического спектра в модели Хаббарда, соответствующие однопетлевому приближению при произвольном соотношении между энергией Хаббарда U и величиной интеграла перескока t. В случае точно наполовину заполненной зоны определены условия перехода диэлектрик–металл, а также условия перехода из парадиэлектрического в антиферрометаллическое состояние (ВСП).

DOI: 10.7868/S0370274X15030133

В классических работах Хаббарда было показано, что исчезновение диэлектрической щели может происходить только за счет рассеяния на флуктуациях электронной и спиновой плотности [1, 2]. Однако величина соответствующих флуктуаций, вычисленная из физических соображений, отвечает флуктуациям невзаимодействующих локализованных электронов. Таким образом, результаты Хаббарда относятся к высокотемпературному пределу. Что же касается обратного, низкотемпературного предела, то из-за наличия энергетической щели в этой области флуктуации существенно подавлены. При этом переход в металлическое состояние происходит за счет эффектов кинематического взаимодействия [3], приводящих к уменьшению и дальнейшему исчезновению энергетической щели. Данное явление и будет исследовано в рамках однопетлевого приближения.

Удается также получить условия возникновения антиферромагнетизма для альтернантных двухподрешеточных систем. Для достижения этой цели также используется однопетлевое приближение.

Выразим гамильтониан Хаббарда $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_t$ через X-операторы:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{r}} \left\{ (U - 2\mu)\hat{X}_{\mathbf{r}}^{2,2} - (\mu + \sigma)\hat{X}_{\mathbf{r}}^{\sigma,\sigma} \right\},$$

$$\hat{H}_t = \sum_{\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\sigma} \left(\hat{X}_{\mathbf{r}_1}^{2,-\sigma} + \sigma\hat{X}_{\mathbf{r}_1}^{\sigma,0}\right)\left(\hat{X}_{\mathbf{r}_2}^{-\sigma,2} + \sigma\hat{X}_{\mathbf{r}_2}^{0,\sigma}\right) t(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \tag{1}$$

Здесь и ниже U – энергия Хаббарда, μ – химический потенциал.

При заданной проекции спина σ имеется два независимых перехода: из пустого в одночастичное состояние с проекцией σ и из одночастичного с проекцией $-\sigma$ в двухчастичное.

Соответственно введем два концевых множителя, каждый из которых равен сумме чисел заполнения конечного и начального состояний

$$f_1^\sigma = n_0 + n_{\mathrm{I}}^\sigma, \quad f_2^\sigma = n_{\mathrm{II}} + n_{\mathrm{I}}^{-\sigma}, \tag{2}$$

между которыми имеется соотношение $f_1^\sigma + f_2^\sigma = 1$.

Уравнения однопетлевого приближения записываются через компоненты обратной матрицы:

$$\hat{G}_\omega^{-1}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} E_1^\sigma - f_1^\sigma t_{\mathbf{p}} - \Sigma_{11}^\sigma & -f_1^\sigma \sigma t_{\mathbf{p}} - \Sigma_{12}^\sigma \\ -f_2^\sigma \sigma t_{\mathbf{p}} - \Sigma_{21}^\sigma & E_2^\sigma - f_2^\sigma t_{\mathbf{p}} - \Sigma_{22}^\sigma \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Как видно из рис. 1, недиагональные собственно-энергетические функции однопетлевого приближе-

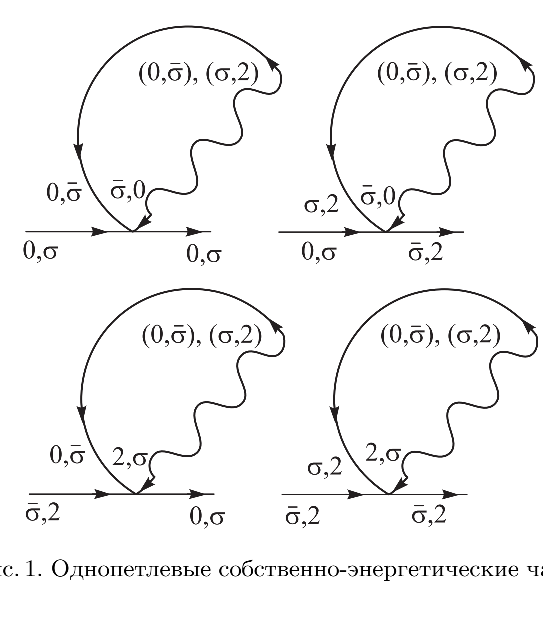

Рис. 1. Однопетлевые собственно-энергетические части

[1)]e-mail: Zaitsev_rogdai@mail.ru

ния выражаются через диагональные с помощью следующих соотношений:

$$\Sigma_{12}^{\sigma} = -\sigma\Sigma_{22}^{\sigma}, \quad \Sigma_{21}^{\sigma} = -\sigma\Sigma_{11}^{\sigma}. \tag{4}$$

Используя эти соотношения, а также определение диагональных матричных элементов:

$$E_1^{\sigma} = i\omega + \mu + \sigma H, \quad E_2^{\sigma} = i\omega + \mu + \sigma H - U, \tag{5}$$

находим две хаббардовские ветви:

$$\xi_{\mathbf{p}}^{\pm} = \frac{S^{\sigma} + t_{\mathbf{p}}}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{W_{\mathbf{p}}^{\sigma}} - \mu + \frac{U}{2} - \sigma H. \tag{6a}$$

Здесь

$$W_{\mathbf{p}}^{\sigma} = (S^{\sigma} - t_{\mathbf{p}})^2 + U^2 - 2U\left[R^{\sigma} + t_{\mathbf{p}}\left(f_1^{\sigma} - f_2^{\sigma}\right)\right], \tag{6b}$$

а вместо диагональных собственно-энергетических частей введены два следующих обозначения:

$$S^{\sigma} = \Sigma_1^{\sigma} + \Sigma_2^{\sigma}, \quad R^{\sigma} = \Sigma_1^{\sigma} - \Sigma_2^{\sigma}. \tag{7}$$

Таким образом, наша задача состоит в том, чтобы установить связь между средними числами заполнения, температурой и химическим потенциалом, а также записать два уравнения для определения собственно-энергетических частей $\Sigma_{1,2}^{\sigma}$.

Можно заметить, что три искомых соотношения выражаются через две независимые комбинации одночастичной функции Грина:

$$\begin{aligned} G_{-}^{\sigma}(\omega, \mathbf{p}) &= \left[G_{\omega}^{\sigma}(\mathbf{p})\right]_{1,1} + \sigma\left(G_{\omega}^{\sigma}(\mathbf{p})\right]_{2,1}, \\ G_{+}^{\sigma}(\omega, \mathbf{p}) &= \sigma\left[G_{\omega}^{\sigma}(\mathbf{p})\right]_{1,2} + \left[G_{\omega}^{\sigma}(\mathbf{p})\right]_{2,2}. \end{aligned} \tag{8}$$

Так, с помощью определения среднего числа частиц с заданной проекцией σ находим

$$n_{\sigma} = \langle \hat{a}_{\sigma}^{+}\hat{a}_{\sigma}\rangle = n_{\mathrm{II}} + n_{\mathrm{I}}^{\sigma} = f_2^{-\sigma} =$$

$$= T\sum_{\mathbf{p},\omega}\left[G_{-}^{\sigma}(\omega, \mathbf{p})e^{i\omega\delta}f_1^{\sigma} + G_{+}^{\sigma}(\omega, \mathbf{p})e^{i\omega\delta}f_2^{\sigma}\right]. \tag{9}$$

Аналогично же удается записать уравнения для определения собственно-энергетических частей:

$$\begin{aligned} \Sigma_1^{\sigma} &= -T\sum_{\mathbf{p},\omega} t_{\mathbf{p}} G_{-}^{-\sigma}(\omega, \mathbf{p})e^{i\omega\delta}, \\ \Sigma_2^{\sigma} &= T\sum_{\mathbf{p},\omega} t_{\mathbf{p}} G_{+}^{-\sigma}(\omega, \mathbf{p})e^{i\omega\delta}. \end{aligned} \tag{10}$$

Для того чтобы произвести суммирование по комплексным частотам $i\omega = i(2n+1)\pi T$, подставим в правую часть уравнений (9) и (10) явное выражение для одночастичной функции Грина, произведем разложение на простые множители, а затем просуммируем по комплексным частотам.

В качестве промежуточного результата получим

$$T\sum_{\omega} G_{\nu}^{\sigma}(\omega, \mathbf{p})e^{i\omega\delta} = \sum_{\lambda=\pm} B_{\nu}^{\lambda}(\mathbf{p})n_{\mathrm{F}}(\xi_{\mathbf{p}}^{\lambda}), \tag{11}$$

где $n_{\mathrm{F}}(\epsilon)$ – распределение Ферми, а коэффициенты $B_{\nu}^{\lambda}(\mathbf{p})$ определяются следующим образом:

$$B_{\pm}^{(\lambda,\sigma)}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2}\left[1 + \mathrm{sign}(\lambda)\frac{t_{\mathbf{p}} - S^{\sigma} \pm U}{\sqrt{W_{\mathbf{p}}^{\sigma}}}\right]. \tag{12}$$

С помощью этих двух коэффициентов удается записать уравнение состояния (9), а также уравнения (10) для функций S^{σ} и R^{σ}:

$$n_{\sigma} = f_2^{-\sigma} =$$

$$= \sum_{\mathbf{p},\lambda}\left\{\left[B_{-}^{(\lambda,\sigma)}(\mathbf{p})f_1^{\sigma} + B_{+}^{(\lambda,\sigma)}(\mathbf{p})f_2^{\sigma}\right]n_{\mathrm{F}}(\xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda,\sigma)})\right\}, \tag{13}$$

$$S^{\sigma} = \sum_{\mathbf{p},\lambda}\left\{t_{\mathbf{p}}\left[B_{+}^{(\lambda,-\sigma)}(\mathbf{p}) - B_{-}^{(\lambda,-\sigma)}(\mathbf{p})\right]n_{\mathrm{F}}(\xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda,-\sigma)})\right\}, \tag{14}$$

$$R^{\sigma} = -\sum_{\mathbf{p},\lambda}\left\{t_{\mathbf{p}}\left[B_{+}^{(\lambda,-\sigma)}(\mathbf{p}) + B_{-}^{(\lambda,-\sigma)}(\mathbf{p})\right]n_{\mathrm{F}}(\xi_{\mathbf{p}}^{(\lambda,-\sigma)})\right\}, \tag{15}$$

Уравнения (15) и (16) обобщают уравнения Хаббарда, соответствующие нульпетлевому приближению (уравнение (13), записанное при $S = R = 0$). Учет однопетлевых поправок (14) и (15) приводит к существенным изменениям как в энергетическом спектре, так и в магнитных свойствах, возникающих при включении внешнего магнитного поля[2)].

Если предположить, что нижняя подзона Хаббарда заполнена точно наполовину, то $\mu = U/2$, а интегрирование по импульсам $\mathbf{p}$ происходит по всей зоне Бриллюэна. Предполагая, что плотность состояний $\rho(\epsilon) = \sum_{\mathbf{p}}\delta\left(\epsilon - t_{\mathbf{p}}\right)$ есть четная функция энергии ϵ, обнаруживаем, что $S^{\sigma} = 0$, $f_1 = f_2 = 1/2$.

Спектр возбуждений $\xi_{\mathbf{p}}^{\pm}$ выражается через однопетлевую собственно-энергетическую часть R:

$$R = \sum_{\mathbf{p}}\frac{t_{\mathbf{p}}^2}{\sqrt{t_{\mathbf{p}}^2 + \Delta^2}}\left[n_{\mathrm{F}}(\xi_{\mathbf{p}}^{-}) - n_{\mathrm{F}}(\xi_{\mathbf{p}}^{+})\right] =$$

[2)] Самосогласованные уравнения (13)–(15) не могут быть получены в рамках динамического среднего поля (DMFT) [4, 5]. Дело в том, что уравнения DMFT основаны на использовании классических антикоммутационных ферми-жидкостных перестановочных соотношений. По этой причине вклад, соответствующий электронной петле, которая изображена на рис. 1, вообще не учитывается.

$$= \int \rho_0(\epsilon) \frac{\epsilon^2}{\sqrt{\epsilon^2+\Delta^2}} \left[n_F(\xi_\epsilon^-) - n_F(\xi_\epsilon^+) \right] d\epsilon, \qquad (16)$$

где величина Δ есть диэлектрическая щель, которая определяется из условия самосогласования:

$$\xi_{\mathbf{p}}^{\pm} = \frac{t_{\mathbf{p}}}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{t_{\mathbf{p}}^2+\Delta^2}, \ \Delta^2 = U^2 - 2UR. \qquad (17a)$$

Здесь и ниже используется одночастичная затравочная плотность состояний:

$$\rho_0(\epsilon) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon - t_{\mathbf{p}}), \ \xi_\epsilon^{\pm} = \frac{\epsilon}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\epsilon^2+\Delta^2}. \qquad (17b)$$

Таким образом, однопетлевое приближение приводит к существенному уменьшению корреляционной щели, которая исчезает при условии $R = U/2$. Подставляя эту величину в левую и правую части уравнения (16), получаем критическое значение энергии Хаббарда, ниже которой система является металлом:

$$U_c = 2\sum_{\mathbf{p}} |t_{\mathbf{p}}| = 2\int |\epsilon| \rho_0(\epsilon) d\epsilon. \qquad (18)$$

Результаты вычислений температурной зависимости Δ для модели плоской зоны представлены на рис 2. В области предельно низкой температуры $T < T_c$, имеет место неоднозначная зависимость $\Delta(U)$, которая исчезает при $T > 0.04$ (эти результаты были получены численным методом ренорм-группы [6, 7]).

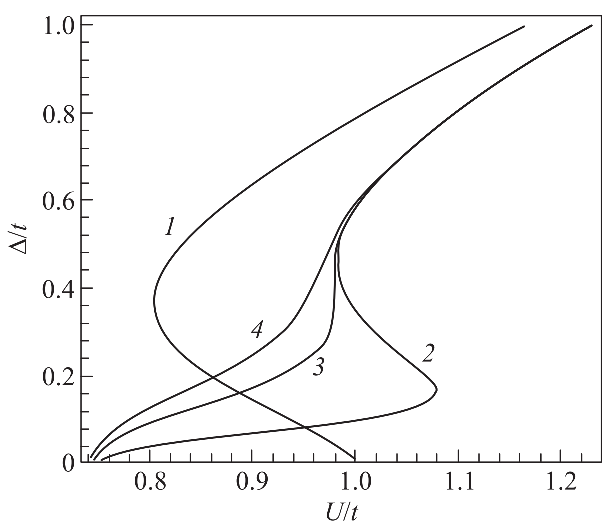

Рис. 2. Величина диэлектрической щели Δ/t в зависимости от безразмерной энергии Хаббарда U/t ($\rho_0 = \theta(1-\epsilon^2)/2$, $n = 1$): *1* – $T = 0$, *2* – $T = 0.01$, *3* – $T = 0.04$, *4* – $T = 0.06$

В пределе $T = 0$ удается получить аналитическое выражение $U(\Delta)$ для полуэллиптической плотности состояний: $\rho_0(\epsilon) = (4/\pi)\sqrt{1-\epsilon^2}$. При $T = 0$ уравнение (16) переписывается следующим образом:

$$R = R(\Delta) = \frac{4}{3\pi}\sqrt{1+\Delta^2} \times$$
$$\times \left[(1+2\Delta^2)\mathrm{E}\left(\frac{1}{\sqrt{1+\Delta^2}}\right) - 2\Delta^2 \mathrm{K}\left(\frac{1}{\sqrt{1+\Delta^2}}\right) \right]. \qquad (19a)$$

Здесь и ниже $\mathrm{K}(x)$ и $\mathrm{E}(x)$ – полные эллиптические интегралы I и II рода.

Для квадратной решетки

$$\rho_0(\epsilon) = \frac{2}{\pi^2}\mathrm{K}\left(\sqrt{1-\frac{\epsilon^2}{4}}\right) = \frac{8}{(|\epsilon|+2)\pi^2}\mathrm{K}\left(\frac{2-|\epsilon|}{2+|\epsilon|}\right), \qquad (19b)$$

так что возникает необходимость численного интегрирования:

$$R = R(\Delta) = \frac{8}{\pi^2}\int_0^2 \frac{\epsilon^2}{(2+|\epsilon|)\sqrt{\epsilon^2+\Delta^2}} \mathrm{K}\left(\frac{2-|\epsilon|}{2+|\epsilon|}\right) d\epsilon. \qquad (19c)$$

Таким образом, нам удается определить явную зависимость энергии Хаббарда U от величины диэлектрической щели Δ (см. рис. 3):

$$U = |R(\Delta)| + \sqrt{R^2(\Delta)+\Delta^2}. \qquad (20)$$

Здесь $\Delta = \sqrt{U^2 - 2UR}$ – величина диэлектрической щели, а все энергетические величины обезразмерены на полуширину $|t|$.

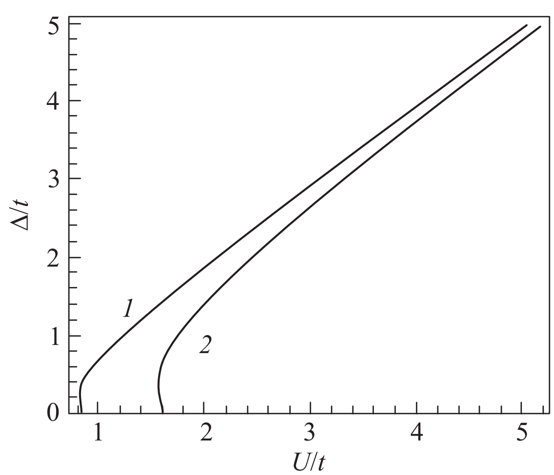

Рис. 3. Величина диэлектрической щели Δ/t в зависимости от безразмерной энергии Хаббарда U/t ($T = 0$, $n = 1$). Кривая *1* соответствует полуэллиптической плотности состояний, *2* – квадратной решетке

Как следует из рис. 3, с понижением энергии Хаббарда U происходит уменьшение энергетической щели. Наконец она обращается в нуль, что отвечает переходу диэлектрик–металл. Соответствующая точка перехода, вычисленная в статье Хаббарда [2] ($(U/t)_c = \sqrt{3}/2 \approx 0.866$) для затравочной полуэллиптической плотности состояний, слабо отличается от полученной из уравнения (20), $(U/t)_c = 8/(3\pi) \approx 0.848$.

Рассмотрим далее возможность возникновения волны спиновой плотности (ВСП) в случае двухподрешеточной кристаллической системы.

Для того чтобы определить условия появления ВСП, вычислим спиновую магнитную восприимчивость. При условии, когда слабое магнитное поле зависит от координат, удобно перейти к импульсному представлению: $\delta h_{\mathbf{r}} = \delta h_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{qr})$. Мы предположим, что поправки к электронной плотности δn, к концевым множителям $\delta f_{1,2}$ ([8, 9]), а также к собственно-энергетическим частям $\delta\Sigma_{1,2}$ ([10]) зависят от координат через единственную компоненту Фурье:

$$\delta n^\sigma_{\mathbf{r}} = \delta f^\sigma_{1,\mathbf{r}} = -\delta f^\sigma_{2,\mathbf{r}} = \delta n^\sigma_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{qr}) =$$
$$= \delta f^\sigma_1(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{qr}) = -\delta f^\sigma_2(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{qr});$$
$$\delta\Sigma^\sigma_{1,\mathbf{r}} = \delta\Sigma^\sigma_1(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{qr}),\ \delta\boldsymbol{\Sigma}^\sigma_{\mathbf{2},\mathbf{r}} = \delta\boldsymbol{\Sigma}^\sigma_{\mathbf{2}}(\mathbf{q}) \exp(\mathbf{iqr}). \tag{21}$$

Уравнение для восприимчивости $\chi_{\mathbf{q}}$ находим с помощью вариации уравнения для функции Грина $G_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})$, выраженной через вариацию магнитного поля $\mathbf{h_q}$, концевого множителя $f_{\mathbf{q}} = \delta f^\sigma_{1,\mathbf{r}} = -\delta f^\sigma_{2,\mathbf{r}}$ и однопетлевых собственно-энергетических частей $S_{\mathbf{q}} = \Sigma_{1,\mathbf{q}} + \Sigma_{2,\mathbf{q}}$ и $R_{\mathbf{q}} = \Sigma_{1,\mathbf{q}} - \Sigma_{2,\mathbf{q}}$:

$$\delta n^\sigma_{\mathbf{q}} = \delta f^\sigma_{\mathbf{q}} T \sum_{\omega,\mathbf{p}} \left[G^\sigma_{-,\omega}(\mathbf{p}) - G^\sigma_{+,\omega}(\mathbf{p})\right] +$$
$$+ f^\sigma_1 T \sum_{\omega,\mathbf{p}} \delta G^\sigma_{-,\omega}(\mathbf{p},\mathbf{q}) + f^\sigma_2 T \sum_{\omega,\mathbf{p},\mathbf{q}} \delta G^\sigma_{+,\omega}(\mathbf{p},\mathbf{q}),$$
$$\delta S^\sigma_{\mathbf{q}} = -T \sum_{\omega,\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} \left[\delta G^{-\sigma}_{-,\omega}(\mathbf{p},\mathbf{q}) - \delta G^{-\sigma}_{+,\omega}(\mathbf{p},\mathbf{q})\right],$$
$$\delta R^\sigma_{\mathbf{q}} = -T \sum_{\omega,\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} \left[\delta G^{-\sigma}_{-,\omega}(\mathbf{p},\mathbf{q}) + \delta G^{-\sigma}_{+,\omega}(\mathbf{p},\mathbf{q})\right]. \tag{22}$$

Выражения для гриновских функций в первой сумме первого уравнения определены с помощью соотношений (11), (12). Вариации гриновских функций определяются через вариацию обратной функции (3) с помощью общей формулы:

$$\delta\hat{G}^\sigma_\omega(\mathbf{p}) = -\hat{G}^\sigma_\omega(\mathbf{p}) \delta\hat{G}^{-1}_{\sigma,\omega}(\mathbf{p},\mathbf{q}) \hat{G}^\sigma_\omega(\mathbf{p}+\mathbf{q}). \tag{23}$$

Здесь гриновские функции вычисляются при нулевом магнитном поле, а вариация обратной функции Грина находится с помощью общих формул (3)–(5):

$$\delta\hat{G}^{-1}_{\sigma,\omega}(\mathbf{p},\mathbf{q}) =$$
$$\begin{pmatrix} \sigma\delta h_{\mathbf{q}} - \delta f^\sigma_1(\mathbf{q}) t_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \delta\Sigma^\sigma_{11}(\mathbf{q}) & -\sigma\delta f^\sigma_1(\mathbf{q}) t_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \sigma\delta\Sigma^\sigma_{22}(\mathbf{q}) \\ -\sigma\delta f^\sigma_2(\mathbf{q}) t_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \sigma\delta\Sigma^\sigma_{11}(\mathbf{q}) & \sigma\delta h_{\mathbf{q}} - \delta f^\sigma_2(\mathbf{q}) t_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - \delta\Sigma^\sigma_{22}(\mathbf{q}) \end{pmatrix}. \tag{24}$$

Далее мы учитываем, что в нашей задаче все вариации меняют знак при изменении знака проекции спина:

$$\delta f^{-\sigma}_k = -\delta f^\sigma_k,\ \delta\Sigma^{-\sigma}_{11} = -\delta\Sigma^\sigma_{11},\ \delta\Sigma^{-\sigma}_{22} = -\delta\Sigma^\sigma_{22}. \tag{25}$$

Кроме того, из тождества $f^\sigma_1 + f^\sigma_2 = 1$ следует соотношение $\delta f^\sigma_2 = -\delta f^\sigma_1$. Отсюда заключаем, что наша задача сводится к решению системы уравнений следующего вида:

$$df = F_f df^\sigma_1 + F_S dS + F_R dR + f' dh,$$
$$dS = S_f df^\sigma_1 + S_S dS + S_R dR + S' dh,$$
$$dR = R_f df^\sigma_1 + R_S dS + R_R dR + R' dh. \tag{26}$$

Здесь введены обозначения $\delta f_1 = \delta f^+_1$, $\delta S = \delta S^+ = \delta\Sigma^+_{11} + \delta\Sigma^+_{22}$, $\delta R = \delta R^+ = \delta\Sigma^+_{11} - \delta\Sigma^+_{22}$.

Вычисление коэффициентов уравнения (26) приводит к следующему результату:

$$F_f = \sum_{\mathbf{p}} \frac{U}{\xi^+_{\mathbf{p}} - \xi^-_{\mathbf{p}}} \left[n_{\mathrm{F}}(\xi^-_{\mathbf{p}}) - n_{\mathrm{F}}(\xi^+_{\mathbf{p}})\right] +$$
$$+ T \sum_{\omega,\mathbf{p}} \frac{U t_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}(-E_2 f_1 - E_1 f_2 + S)}{W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})},$$
$$F_S = T \sum_{\omega,\mathbf{p}} \frac{U(E_1 f_2 - E_2 f_1 - R)}{2W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})},$$
$$F_R = T \sum_{\omega,\mathbf{p}} \frac{U(-E_2 f_1 - E_1 f_2 + S)}{2W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})};$$
$$f' = T \sum_{\omega,\mathbf{p}} \left\{-S^2 + \frac{1}{2}\left[R + S(2 - f_1 + f_2)\right] E_1 + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{2}\left[-R + S(2 + f_1 - f_2)\right] E_2 - f_1 E_2^2 - f_2 E_1^2 \right\} \times$$
$$\times \frac{1}{W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})};$$
$$S_f = T \sum_{\omega,\mathbf{p}} \frac{U^2 t_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}}{W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})},$$
$$S_S = T \sum_{\omega,\mathbf{p}} \frac{U t_{\mathbf{p}}(-E_1 - E_2 + 2t_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})}{2W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})},$$
$$S_R = T \sum_{\omega,\mathbf{p}} \frac{U^2 t_{\mathbf{p}}}{2W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})},$$
$$S' = UT \sum_{\omega,\mathbf{p}} (E_1 + E_2 - t_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} - S) \frac{t_{\mathbf{p}}}{W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})};$$

$$R_f = T\sum_{\omega,\mathbf{p}} \frac{U(-E_1-E_2+2S)t_{\mathbf{p}}t_{\mathbf{p+q}}}{W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})},$$

$$R_S = T\sum_{\omega,\mathbf{p}} \frac{Ut_{\mathbf{p}}\,(U-2R-Ft_{\mathbf{p+q}})}{2W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})},$$

$$R_r = T\sum_{\omega,\mathbf{p}} \frac{Ut_{\mathbf{p}}(-E_1-E_2+2S)}{2W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})},$$

$$R' = -T\sum_{\omega,\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}\left\{2S^2+[-2S-(f_1-f_2)t_{\mathbf{p+q}}-R]\,E_1+\right.$$

$$\left.+[-2S+(f_1-f_2)t_{\mathbf{p+q}}+R]\,E_2+E_1^2+E_2^2\right\}\frac{1}{W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})}. \tag{27}$$

Здесь $U=E_1-E_2$, $\xi^{\pm}_{\mathbf{p}}$ – энергии в верхней и нижней подзоне Хаббарда, определенные в (6a) и (6b),

$$W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q}) = (i\omega-\xi^+_{\mathbf{p}})(i\omega-\xi^-_{\mathbf{p}})(i\omega-\xi^+_{\mathbf{p+q}})(i\omega-\xi^-_{\mathbf{p+q}}).$$

В случае точно наполовину заполненной зоны $n=1$ в уравнениях следует положить $\mu=-U/2$, $E_1=i\omega_n+U/2$, $E_2=i\omega_n-U/2$, $f_1=f_2=1/2$, $S_0=0$. В результате коэффициенты, определяющие магнитную восприимчивость, приобретают

$$F_f = \sum_{\mathbf{p}} \frac{U}{\sqrt{\Delta^2+t^2_{\mathbf{p}}}}\left[n_{\mathrm{F}}(\xi^-_{\mathbf{p}})-n_{\mathrm{F}}(\xi^+_{\mathbf{p}})\right],$$

$$F_S = T\sum_{\omega,\mathbf{p}} \frac{\Delta^2}{4W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})},\ F_R=0,$$

$$f' = T\sum_{\omega,\mathbf{p}} \frac{4\omega^2-\Delta^2}{4W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})};$$

$$S_f = US_S,\ S_S=-S'=UT\sum_{\omega,\mathbf{p}}\frac{t_{\mathbf{p}}t_{\mathbf{p+q}}}{W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{q})},\ S_R=0,$$

$$R_f=R_S=R_r=R'=0. \tag{28}$$

Здесь использовано определение величины энергетической щели, $\Delta=\sqrt{U^2-2RU}$, через которую выражаются энергии в верхней и нижней подзонах Хаббарда:

$$\xi^{\pm}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2}\left(\pm\sqrt{\Delta^2+t^2_{\mathbf{p}}}+t_{\mathbf{p}}\right).$$

Рассмотрим возможность установления антиферромагнетизма (ВСП) в случае двухподрешеточной кристаллической системы, когда выполняется условие $t_{\mathbf{p+Q}}=-t_{\mathbf{p}}$ (полный *nasting*). При этом оказывается, что величина $W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{Q})$ является четной функцией энергетического параметра ω:

$$W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{Q}) = [\omega^2+(\xi^+_{\mathbf{p}})^2][\omega^2+(\xi^-_{\mathbf{p}})^2]. \tag{29}$$

Коэффициенты, определяющие магнитную восприимчивость при $\mathbf{q}=\mathbf{Q}$, приобретают следующий вид:

$$F_f = \sum_{\mathbf{p}} \frac{U}{\sqrt{\Delta^2+t^2_{\mathbf{p}}}}\left[n_F(\xi^-_{\mathbf{p}})-n_{\mathrm{F}}(\xi^+_{\mathbf{p}})\right],$$

$$F_S = T\sum_{\omega,\mathbf{p}} \frac{\Delta^2}{4W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{Q})},\ F_R=0,$$

$$f' = T\sum_{\omega,\mathbf{p}} \frac{4\omega^2-U^2}{4W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{Q})};$$

$$S_f=US_S,\ S_S=-S'=-UT\sum_{\omega,\mathbf{p}}\frac{t^2_{\mathbf{p}}}{W_\omega(\mathbf{p},\mathbf{Q})},\ S_R=0,$$

$$R_f=R_S=R_r=R'=0. \tag{30}$$

Поскольку импульсная зависимость правых частей в формулах (30) определяется только через интеграл перескока $t_{\mathbf{p}}$, то удобно ввести затравочную плотность состояний $\rho(\epsilon)=\sum\limits_{\mathbf{p}}\delta(\epsilon-t_{\mathbf{p}})$. Если предположить, что $\rho(\epsilon)=\rho(-\epsilon)$, то соотношения (30) приобретают вид

$$F_f = \int \rho(\epsilon)\frac{U}{\sqrt{\epsilon^2+\Delta^2}}\left[n_{\mathrm{F}}(\xi^-_\epsilon)-n_{\mathrm{F}}(\xi^+_\epsilon)\right]d\epsilon,$$

$$F_S = A_0(T)\frac{\Delta^2}{4},\ F_R=0,$$

$$f' = A_2(T)-A_0(T)\frac{\Delta^2}{4},$$

$$S_f=US_s,\ S_S=-S'=-UD_s,\ S_R=0,$$

$$R_f=R_S=R_r=R'=0, \tag{31}$$

где

$$A_k = T\sum_{\omega}\int\rho(\epsilon)\frac{\omega^k}{V_\omega(\epsilon)}d\epsilon,\ V_\omega(\epsilon)=$$

$$=[\omega^2+(\xi^+_\epsilon)^2][\omega^2+(\xi^-_\epsilon)^2],$$

$$D_s = T\sum_{\omega}\int\rho(\epsilon)\frac{\epsilon^2}{V_\omega(\epsilon)}d\epsilon,\ \xi^{\pm}_\epsilon=\frac{1}{2}\left[\epsilon\pm\sqrt{\Delta^2+\epsilon^2}\right]. \tag{32}$$

Из (32), следует, что вне зависимости от температуры антиферромагнитная поправка $\delta R=0$. Оставшаяся система уравнений имеет вид

$$df_1 = F_f df_1+F_S dS+f'dh,$$

$$dS = S_f df_1+S_S dS+S'dh. \tag{33}$$

Запишем коэффициенты, входящие в эти уравнения, в пределе $T=0$:

$$F_f(0)=UA,\ F_S(0)=\frac{A}{2},\quad f'(0)=0,$$

$$A = \int \rho(\epsilon) \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} d\epsilon,$$

$$S_f(0) = US_S(0), \ S_S(0) = S'(0) = -2\frac{U^2}{\Delta^2} R,$$

$$R = \int \rho(\epsilon) \frac{\epsilon^2}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} d\epsilon. \qquad (34)$$

Подстановка этих коэффициентов в систему уравнений (33) позволяет найти обратную магнитную восприимчивость:

$$\chi^{-1} = \left(2\frac{df_1}{dh}\right)^{-1} =$$

$$= \frac{\Delta^2}{4AUR} \left(1 - UA + 2R\frac{U}{\Delta^2} - AR\frac{U^2}{\Delta^2}\right). \qquad (35)$$

Таким образом, в пределе $T = 0$ условие возникновения антиферромагнетизма преобразуется с следующему виду:

$$1 - UA + 2R\frac{U}{\Delta^2} - AR\frac{U^2}{\Delta^2} = 0. \qquad (36)$$

Энергия Хаббарда U связана с величиной диэлектрической щели Δ соотношением

$$U = U(\Delta) = R(\Delta) + \sqrt{R(\Delta)^2 + \Delta^2}. \qquad (37)$$

Аналогичным образом через параметр Δ можно выразить все остальные коэффициенты, входящие в (35): $A(\Delta)$ и $R(\Delta)$.

Подставляя эти функции в условие (36), находим критическое значение $U_{af}/t \leq 1$, которому соответствует возникновение ВСП (см. рис. 4).

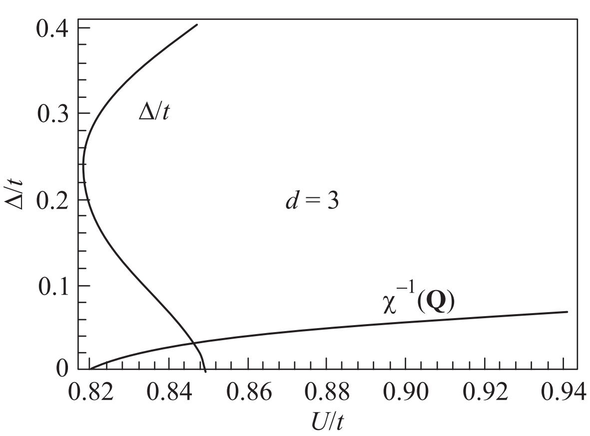

Рис. 4. Величины диэлектрической щели Δ/t и обратной антиферромагнитной проницаемости $\chi(\mathbf{Q})^{-1}$ для полуэллиптической плотности состояний

Как следует из рис. 4 и 5, антиферромагнитное упорядочение возникает в диэлектрической фазе в непосредственной близости от точки перехода из диэлектрической в металлическую фазу.

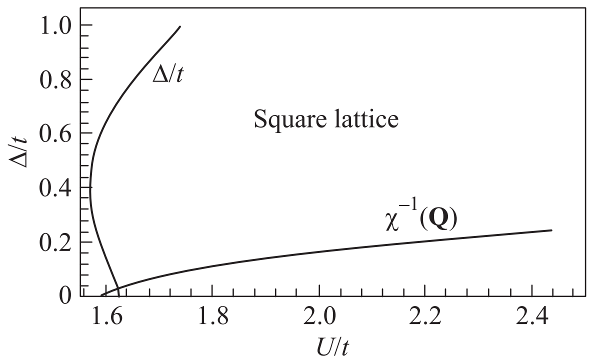

Рис. 5. Величины диэлектрической щели Δ/t и обратной антиферромагнитной проницаемости $\chi(\mathbf{Q})^{-1}$ для квадратной решетки

Таким образом, мы приходим к выводу о том, что в однопетлевом приближении удается получить не только точку перехода из диэлектрического в металлическое состояние, но также с помощью уравнения (36) и точку возникновения антиферромагнитного параметра порядка.

Общее заключение, которое можно сделать исходя из вычислений в однопетлевом приближении, состоит в том, что в простейшей S-электронной модели Хаббарда для точно наполовину заполненной зоны можно обнаружить фазовый переход металл–диэлектрик. При этом антиферромагнитное упорядочение (ВСП) при $T = 0$ существует во всей металлической области ($t > U_c$).

Физической причиной уменьшения диэлектрической щели следует считать наличие так называемого кинематического взаимодействия, которое при большой электронной концентрации ($n > 2/3$) имеет характер притяжения [10].

1. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. (London) A **277**, 237 (1964).
2. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. (London) A **281**, 401 (1964).
3. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
4. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
5. Э. З. Кучинский, И. А. Некрасов, М. В. Садовский, УФН **182**, 345 (2012).
6. R. Bulla, Phys. Rev. Lett. **83**, 136 (1999).
7. R. Bulla, T. A. Costi, and D. Vollhardt, Phys. Rev. **B 64**, 045103 (2001).
8. J. Hubbard and K. P. Jain, J. Phys. C **1**, 1650 (1968).
9. J. W. Schweitzer, Phys. Rev. B **3**, 2357 (1971).
10. Р. О. Зайцев, *Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма*, URSS, M. (2001) [R. O. Zaitsev, *Diagrammatic Methods in the Theory Superconductivity and Ferromagnetism*, URSS, M. (2007)].