

УДК 538.1; 539.2

Л. Дідух, докт. фіз.-мат. наук

Тернопільський державний технічний університет імені Івана Пулюя

## ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕЛЕКТРОНІВ У ВУЗЬКИХ ЕНЕРГЕТИЧНИХ ЗОНАХ: НОВЕ НАБЛИЖЕННЯ СЕРЕДНЬОГО ПОЛЯ. I. ДВОПОЛЮСНИЙ СПЕКТР В МОДЕЛІ ХАББАРДА

Запропоновано новий варіант наближення середнього поля в теорії сильно скорельованих електронних систем, описуваних моделлю Хаббарда та модифікованою формою полярної моделі кристала. У першій частині роботи розглянуто енергетичний спектр електронів у моделі Хаббарда в двополюсному наближенні. Отриманий спектр є температурно-залежним, точним в атомній і зонній границях, відтворює хартрі-фоківський спектр у випадку слабких внутрішньоатомних взаємодій та спектр електронів, розрахований за теорією збурень у випадку сильних внутрішньоатомних взаємодій, дозволяє описати перехід діелектрик-метал.

**Ключові слова:** вузькі зони провідності, наближення середнього поля, модель Хаббарда.

L. Didukh

## ENERGY SPECTRUM OF ELECTRONS IN NARROW ENERGY BANDS: NEW MEAN-FIELD APPROXIMATION. I. TWO POLE APPROXIMATION IN HUBBARD MODEL

A new variant of mean-field approximation in the theory of strongly correlated electron systems described by the Hubbard model and the modified form of polar model of crystal is proposed. In the first part the energy spectrum of Hubbard model is found using a two-pole approximation. The obtained spectrum is temperature dependent, exact in atomic and band limits, applicable for a description of the metal-insulator transition. It also reproduces the Hartree-Fock result in the case of weak intraatomic interaction and the spectrum, obtained by perturbation theory, for the case of strong correlation.

**Key words:** narrow energy bands, mean-field approximation, Hubbard model.

### 1. ВСТУП

Хаббардом вперше було показано [1], що сильна внутрішньоатомна взаємодія електронів кардинально модифікує їх зонний енергетичний спектр: виникають дві енергетичні зони (хаббардівські зони), розділені енергетичною щільною. У принципово важливому (при дослідженні переходу діелектрик-метал) випадку  $n=1$  ( $n$  – середнє число електронів на вузол) спектр Хаббарда дається виразом

$$E(\vec{k}) = -\mu + \frac{t(\vec{k}) + U}{2} \mp \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + t^2(\vec{k})} \quad (1)$$

(розглядається парамагнітний стан); тут  $\mu$  – хімічний потенціал,  $t(\vec{k})$  – фур'є компонента інтеграла переносу,  $U$  – величина кулонівського відштовхування двох електронів з протилежними спінами на вузлі, знак мінус відповідає нижній хаббардівській зоні, плюс – верхній хаббардівській зоні. Наближення, що дає спектр (1), відоме як наближення Хаббард-1 (Х-1); в англійській літературі – Hubbard 1 (Н-1).

Концепція хаббардівських зон виявилася надзвичайно плідною для інтерпретації експериментальних результатів, отриманих при дослідженні електричних і магнітних властивостей матеріалів з вузькими енергетичними зонами (насамперед, – оксидів, сульфідів та селенідів перехідних матеріалів [2]) – класу матеріалів з унікальними фізичними властивостями. Разом з цим, спектр (1) має серйозні вади, що сильно обмежує область застосовності наближення Х-1. Зокрема, спектр не описує перехід діелектрик-метал (енергетична щільна між дном верхньої зони і верхом нижньої зони

існує при будь-яких  $U \neq 0$ ), спектр не є температурно-залежним (чого слід очікувати з фізичних міркувань).

Недоліки наближення Х-1 були частково усунуті в роботі [3] (наближення Х-3), де була запропонована більш розвинута процедура розщеплення ланцюжка рівнянь для одноелектронної функції Гріна. Було отримано, що перехід діелектрик-метал настає за умови  $U_c / w \approx 1,7$  ( $U_c$  – критична величина кулонівської взаємодії, вище якої речовина перебуває у діелектричному стані,  $w$  – напівширина „незбуреної”  $s$ -зони). Проте, навіть в діелектричній фазі, де наближення Х-3 є більш надійним, ніж у металічній, воно викликає ряд заперечень принципового плану [4-7].

Інші багаточисленні підходи до опису моделі Хаббарда (запропоновані протягом більш як трьох десятиліть) відображені в багатьох оглядах (див., наприклад, огляди [5-7]). Хоча тут були досягнуті і значні успіхи (особливо у випадках  $U \gg w$  і  $w \gg U$ ), можна констатувати: до середини 90-х років минулого століття не існувало послідовної теорії, яка в рамках однієї ідеології описувала модель Хаббарда при довільних співвідношеннях між конкуруючими величинами  $w$  і  $U$ .

Новий етап в дослідженні сильно скорельованих систем, пов'язаний із створенням (в основному, – Джорджем, Котляром, Метцнером і Фолгардтом) теорії динамічного середнього поля (ТДСП; DMFT – в англійській літературі). Прогрес тут досягнутий на шляху трансформації моделі Хаббарда у випадку  $d \rightarrow \infty$  ( $d$  – розмірність простору) до аналога однодомішкової моделі Андерсона, в якій невзаємодіючі між собою електрони створюють динамічне середнє поле на „андерсонівському” центрі (див. огляди [8-10]). Ефективними тут виявилися не аналітичні підходи, а метод числового моделювання з залученням належного програмного забезпечення.

Відзначимо, що існуючі аналітичні підходи до опрацювання моделі Хаббарда (поза ТДСП) мають багато спільних рис з ТДСП. Так, базовий результат роботи [1] – існування хаббардівських зон – підтверджується ТДСП. Наближення Хаббард-3 в діелектричній області дає результати, близькі до ТДСП; в обох теоріях вихідна одновузлова електронна функція Гріна  $G_{ii}(\omega)$  має одну і ту ж форму. Ще ближчим є зв'язок між DMFT і наближенням ГНЗ [11]. Наближення Гутцвіллера [12] приводить до тих самих результатів, що і ТДСП в металічній області. В основі цих наближень (перелік їх та порівняльні характеристики з ТДСП можна було б розширити) достатньо розвинуті аналітичні методи, проте підходи тут суттєво різні: в наближеннях, близьких до Хаббард-3, – апарат функцій Гріна, в підході Гутцвіллера – варіаційний принцип, де розрахунок спінових конфігурацій ведеться класичним методом. В наближенні ж ТДСП властивості моделі Хаббарда і в діелектричній, і металічній фазах (при довільних співвідношеннях між  $w$  і  $U$ ) описуються в межах єдиного базового підходу; в цьому основна цінність ТДСП [10].

Разом з цим, при розгляді властивостей систем з сильними електронними кореляціями на основі ТДСП методами числового моделювання, втрачаються привабливі риси аналітичних підходів. Так, наприклад, хаббардівські зони, як і залежності хаббардівських спектрів від  $w$ ,  $U$  і від концентрації електронів, „проявляються” (для добре означеного стану мотт-хаббардівського діелектрика при  $U \gg w$ ) при чисельних розрахунках; з точки зору узагальнюючих висновків (якісного плану) щодо властивостей важливого класу вузькозонних матеріалів – легованих мотт-хаббардівських діелектриків, такий підхід є менш привабливий, ніж відповідний аналіз на основі  $t$ - $J$  моделі (чи інших споріднених підходів). Застосовність ТДСП до моделей, які відображали б електрон-діркову асиметрію, характерну для багатьох вузькозонних матеріалів, також зустрічає певні труднощі [13].

Можна зробити висновок: актуальною залишається розробка аналітичних методів дослідження систем з сильними електронними кореляціями, справедливими для довільних співвідношень між  $w$  і  $U$  і для довільних концентрацій електронів як в рамках ТДСП, так і поза нею.

У цьому контексті вкажемо на наближення, запропоновані в роботах [14, 15] (надалі – наближення-I) і в роботах [16, 17] (наближення II).

В наближенні I енергетичний спектр за умови  $n=1$  в парамагнітному стані має вигляд

$$E(\vec{k}) = -\mu + (1 - 2d)t(\vec{k}) + \frac{U}{2} \mp \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + (4dt(\vec{k}))^2}; \quad (2)$$

в наближенні II

$$E(\vec{k}) = -\mu + (1 - 2d)t(\vec{k}) + \frac{U}{2} \mp \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + t^2(\vec{k})}; \quad (3)$$

тут  $d$  – концентрація вузлів з двома електронами (двійок).

Недоліки хаббардівського спектру (1) відсутні у спектрах, заданих виразами (2) і (3). Важливо відзначити також, що спектри (2) і (3) не тільки описують переходи діелектрик-метал (при  $U_c = 2w$  у першому випадку) і при  $U_c \approx 1,7w$  – у другому (при температурі  $T = 0$ ), але і переходи із металічного стану в діелектричний при підвищенні температури, спостережувані, наприклад, в сполуках  $(V_{1-x}Cr_x)_2O_3$  і  $NiS_2$  [2]. Значимо також, що дані наближення були застосовані не лише до моделі Хаббарда, але і до більш загальної моделі – модифікованої форми полярної моделі кристала [14, 16, 17], в якій врахована електрон-діркова асиметрія (вузльозонна модель з нееквівалентними хаббардівськими зонами), спричинена міжвузельною електрон-електронною взаємодією, що зумовлює перенос електронів. На основі підходів, запропонованих в роботах [14-16], вдається пояснити і низку інших особливостей фізичних властивостей вузльозонних матеріалів [18-21]. Разом з цим потрібно відзначити і певну обмеженість цих підходів при розгляді фізичних властивостей матеріалів з вузькими енергетичними зонами.

Хоча спектри (2) і (3) є точними в зонній і атомній границях ( $U \rightarrow \infty$ ), вони не відтворюють у випадку малих  $w/U$  спектр, отриманий на основі ефективного гамільтоніана [14] ( $t$ - $J$ -гамільтоніана для напівзаповненої зони); спектри не містять доданка (незалежного від квазіімпульсу)  $\sim w^2/U$ , що відповідає за кінетичний обмін між найближчими сусідами. Зрозуміла важливість таких внесків у спектр при розгляді антиферромагнітного впорядкування. У випадку малих  $U/w$ , за умови, що система поляризована за спіном ( $n_\uparrow \neq n_\downarrow$ ), спектри (2) і (3) модифікуються, проте не містять характерних хартрі-фоківських внесків  $n_\downarrow U$  і  $n_\uparrow U$ . Одноелектронні функції Гріна, що приводять до спектрів (2), (3), – двополюсні, квазічастинкові стани – незатухаючі; бажаний, зрозуміло, вихід за рамки цього наближення.

Запропонований далі підхід має на меті розширити область застосовності наближень, введених в роботах [14-17], і усунути відзначені вище недоліки цих наближень.

## 2. ГАМІЛЬТОНІАН. РІВНЯННЯ ДЛЯ ФУНКЦІЙ ГРІНА

Будемо виходити з гамільтоніана Хаббарда, записаного в представленні  $X_i^{kl}$  - операторів [14]:

$$H = H_0 + H_1 + H_1'; \quad (4)$$

де

$$H_0 = -\mu \sum (X_i^\uparrow + X_i^\downarrow + 2X_i^2) + U \sum X_i^2; \quad (5)$$

$$H_1 = \sum_{ij\sigma} t(ij) (X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} + X_i^{2\sigma} X_j^{\sigma 2}); \quad (6)$$

$$H_1' = \sum_{ij\sigma} t(ij) (X_i^{\downarrow 0} X_j^{\uparrow 2} - X_i^{\uparrow 0} X_j^{\downarrow 2}) + e.c., \quad (7)$$

тут  $\sigma$  – спіновий індекс ( $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ),  $t(ij)$  – інтеграл переходу електрона між найближчими сусідами.

Подамо, використовуючи зв'язок між електронними операторами і  $X_p^{kl}$ -операторами [22], –

$$\begin{aligned} a_{p\uparrow}^+ &= X_p^{\uparrow 0} - X_p^{2\downarrow}, & a_{p\uparrow} &= X_p^{0\uparrow} - X_p^{\downarrow 2} \\ a_{p\downarrow}^+ &= X_p^{\downarrow 0} + X_p^{2\uparrow}, & a_{p\downarrow} &= X_p^{0\downarrow} + X_p^{\uparrow 2} \end{aligned} \quad (8)$$

одноелектронну функцію Гріна

$$G_{ps}^\sigma(E) = \langle\langle a_{p\sigma} | a_{s\sigma}^+ \rangle\rangle \quad (9)$$

у вигляді

$$G_{ps}(E) = \langle\langle X_p^{0\uparrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle - \langle\langle X_p^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle + \langle\langle X_p^{\downarrow 2} | X_s^{2\downarrow} \rangle\rangle - \langle\langle X_p^{0\uparrow} | X_s^{2\downarrow} \rangle\rangle \quad (10)$$

Рівняння для функції Гріна  $\langle\langle X_p^{0\uparrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle$  –

$$\begin{aligned} (E + \mu) \langle\langle X_p^{0\uparrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle &= \frac{\langle X_p^\uparrow + X_p^0 \rangle \delta_{ps}}{2\pi} + \langle\langle [X_p^{0\uparrow}, H_1]_- | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle + \\ &+ \langle\langle [X_p^{0\uparrow}, H_1'] | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (11)$$

де  $[A, B]_-$  означає комутатор  $AB-BA$ .

Далі, опрацьовуючи рівняння (11), зробимо наступні кроки: –

1. У згоді з проекційною процедурою прийемо, що

$$[X_p^{0\uparrow}, H_1]_- = \sum_i \varepsilon_1^\uparrow(pi) X_i^{0\uparrow}, \quad (12)$$

де  $\varepsilon(pi)$  – неоператорний вираз. Після антикомутації обох сторін рівняння з оператором  $X_k^{\uparrow 0}$  отримується рівняння для  $\varepsilon(pi)$ . Стандартний підхід [23], який означає  $\varepsilon(pi)$  як  $c$ -число, полягає в усередненні операторних виразів у цьому рівнянні.

У нашому підході (див. також роботи [14-15]) неоператорний характер  $\varepsilon(pi)$ -величин стверджується заміною в рівнянні (отриманому з (12) після вказаної антикомутації)  $X_i^{kl}$  операторів – операторами народження і знищення вузла – операторами Шубіна-Вонсовського  $\alpha_{ik}^+$ ,  $\alpha_{il}$  за формулою

$$X_i^{kl} = \alpha_{ik}^+ \alpha_{il} \quad (13)$$

і наступною заміною  $\alpha$ -операторів  $c$ -числами [24]. Цим пропонується методика відрізняється від використовуваної в дусі ідеології Рот, де проводиться усереднення операторних виразів у рівнянні на визначення  $\varepsilon(pi)$ .

Для випадку  $n=1$  ( $n$  – середнє число електронів на вузол) і відсутності магнітного впорядкування

$$\varepsilon_1^\uparrow(pi) = \varepsilon_1^\downarrow(pi) = \varepsilon_1(pi) = (1 - 2d)t(pi), \quad (14)$$

де  $d$  – концентрація двійок.

2. У явному вигляді останній вираз у рівнянні (11) записується так:

$$- \sum_{i \neq p} t(pi) \langle\langle (X_p^\uparrow + X_p^0) X_i^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle + \langle\langle X_p^{02} X_i^{\downarrow 0} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle - \langle\langle X_p^{\downarrow 2} X_i^{\uparrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle. \quad (15)$$

Зважаючи на специфіку „гібридизаційного” переносу, описуваного  $H_1'$ , першу функцію Гріна у виразі (15) представимо як

$$\langle\langle X_p X_p^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle + \langle X_p^\uparrow + X_p^0 \rangle \langle\langle X_p^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle, \quad (16)$$

де  $X_p = X_p^\uparrow + X_p^0 - \langle X_p^\uparrow + X_p^0 \rangle$ , а дві останні як

$$\sum \varepsilon^\uparrow(pi) \langle\langle X_p^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle, \quad (17)$$

де  $\varepsilon^\uparrow(pi)$  визначається за тією ж процедурою, що і  $\varepsilon_1(pi)$ .

За цих наближень вираз (15) набуває вигляду

$$-\sum_i \varepsilon_2^\uparrow(pi) \langle\langle X_i^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle - \sum_i t(pi) \langle\langle X_p X_i^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle; \quad (18)$$

в парамагнітному стані  $\varepsilon_2^\uparrow(pi) = \varepsilon_2^\downarrow(pi) = \varepsilon_2(pi) = -2dt(pi)$ .

З урахуванням цього для функції Гріна  $\langle\langle X_p^{0\uparrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle$  маємо наступне рівняння –

$$(E + \mu) \langle\langle X_p^{0\uparrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle = \frac{\langle X_p^\uparrow + X_p^0 \rangle \delta_{ps}}{2\pi} + \sum_i \varepsilon_1(pi) \langle\langle X_i^{0\uparrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle + \sum_i \varepsilon_2(pi) \langle\langle X_i^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle - \sum_i t(pi) \langle\langle X_p X_i^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle. \quad (19)$$

Якщо у цьому рівнянні прийняти наближення  $X_p^\uparrow + X_p^\downarrow = \langle X_p^\uparrow + X_p^0 \rangle$  (занулюється остання функція Гріна), то ми приходимо до відповідних рівнянь, отриманих в роботах [14, 15]. Збереження функції Гріна  $\langle\langle X_p X_i^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle$  дозволяє адекватно врахувати процеси переносів, описувані  $H_1'$  (парне народження дірок і двійок на сусідніх вузлах). Саме за рахунок цього, як буде показано далі, отримується, зокрема, коректний внесок в одночастинковий спектр, зумовлений кінетичним обміном.

Подібним чином отримується рівняння для функції Гріна  $\langle\langle X_i^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle$ , що входить в рівняння (19). Маємо:

$$(E + \mu - U) \langle\langle X_r^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle = \sum_i \tilde{\varepsilon}_1(pi) \langle\langle X_i^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle + \sum_i \tilde{\varepsilon}_2(pi) \langle\langle X_i^{0\uparrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle - \sum_i t(pi) \langle\langle \tilde{X}_p X_i^{0\uparrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle, \quad (20)$$

де  $\tilde{\varepsilon}_1(pi) = (1 - 2d)t(pi)$ ,  $\varepsilon_2(pi) = -2dt(pi)$  (парамагнітний стан),  $\tilde{X}_p = X_p^\downarrow + X_p^2 - \langle X_p^\downarrow + X_p^2 \rangle$ .

Якщо в рівняннях (19) і (20) знехтувати останніми функціями Гріна, то ми приходимо до результатів робіт [14, 15].

3. Для функції Гріна  $\langle\langle X_p X_r^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle = T_{prs}(E)$  маємо рівняння:

$$(E + \mu - U) T_{prs}(E) = \sum_i t(ri) \langle\langle [X_p X_r^{\downarrow 2}, H_1 + H_1']_- | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle. \quad (21)$$

Розкриваючи комутатор, отримуємо:

$$(E + \mu - U) \langle\langle X_p X_r^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle = -t(rp) \langle\langle (X_r^\downarrow + X_r^2) X_p^{0\uparrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle + \sum_i t(ri) \langle\langle X_p X_i^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle + \Delta, \quad (22)$$

де  $\Delta$  – позначає функції Гріна, які виникають при переході від (21) до (22) (в додаток до перших двох доданків у правій стороні рівняння (22)). Прийнемо далі наближення середнього поля:

$$X_r^\downarrow + X_r^2 = \langle X_r^\downarrow + X_r^2 \rangle = n_\downarrow, \\ X_p^\uparrow + X_p^0 = \langle X_p^\uparrow + X_p^0 \rangle = 1 - n_\downarrow = n_\uparrow;$$

внаслідок цього занулюються функції Гріна, що входять у  $\Delta$  і містять операторні вирази  $X_p$  і  $\tilde{X}_p$ . Знехтуємо також малоімовірними процесами, пов'язаними із

знищенням і народженням двох електронів на вузлі, та трьохцентровими функціями Гріна з  $X_i^{kl}$  ( $k \neq l$ )-оператором. Тоді замість рівняння (22) будемо мати:

$$(E + \mu - U) \left\langle \left\langle X_p X_r^{\downarrow 2} \middle| X_s^{\uparrow 0} \right\rangle \right\rangle = -n_{\downarrow} t(rp) \left\langle \left\langle X_p^{0\uparrow} \middle| X_s^{\uparrow 0} \right\rangle \right\rangle + \sum_i t(ri) \left\langle \left\langle X_p X_r^{\downarrow 2} \middle| X_s^{\uparrow 0} \right\rangle \right\rangle. \quad (23)$$

Подібно до цього отримуємо рівняння

$$(E + \mu) \left\langle \left\langle \tilde{X}_p X_r^{0\uparrow} \middle| X_s^{\uparrow 0} \right\rangle \right\rangle = - \langle X_p^{\uparrow} + X_p^0 \rangle t(rp) \left\langle \left\langle X_p^{\downarrow 2} \middle| X_s^{\uparrow 0} \right\rangle \right\rangle + \sum_i t(ri) \left\langle \left\langle \tilde{X}_p X_r^{0\uparrow} \middle| X_s^{\uparrow 0} \right\rangle \right\rangle. \quad (24)$$

Перейдемо в рівняннях (21) – (24) до  $\vec{k}$ -простору:

$$(E + \mu - \varepsilon_1(\vec{k})) G_{\vec{k}} = \frac{1}{2\pi} + \varepsilon_2(\vec{k}) T_{\vec{k}} - \frac{1}{N} \sum_{p\vec{k}} T_{p\vec{k}\vec{k}} t(\vec{k}), \quad (25)$$

$$(E + \mu - U - \tilde{\varepsilon}_1(\vec{k})) T_{\vec{k}} = \tilde{\varepsilon}_2(\vec{k}) G_{\vec{k}} - \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} t(\vec{k}) \tilde{T}_{p\vec{k}\vec{k}}, \quad (26)$$

$$(E + \mu - U - t(\vec{k})) T_{p\vec{k}\vec{k}} = n_{\downarrow} \sum_r t(rp) \exp(i\vec{k}\vec{r} - i\vec{k}p) G_{\vec{k}}, \quad (27)$$

$$(E + \mu - t(\vec{k})) \tilde{T}_{p\vec{k}\vec{k}} = n_{\uparrow} \sum_r t(rp) \exp(i\vec{k}\vec{r} - i\vec{k}p) T_{\vec{k}}; \quad (28)$$

тут  $\varepsilon_1(\vec{k})$ ,  $\tilde{\varepsilon}_1(\vec{k})$ ,  $\varepsilon_2(\vec{k})$  і  $\tilde{\varepsilon}_2(\vec{k})$  – фур'є-компоненти відповідно  $\varepsilon_1(pi)$ ,  $\tilde{\varepsilon}_1(pi)$ ,  $\varepsilon_2(pi)$  і  $\tilde{\varepsilon}_2(pi)$ ,  $G_{\vec{k}}$ ,  $T_{\vec{k}}$  – фур'є-компоненти функцій Гріна  $\left\langle \left\langle X_p^{0\uparrow} \middle| X_s^{\uparrow 0} \right\rangle \right\rangle$  і  $\left\langle \left\langle X_p^{\downarrow 2} \middle| X_s^{\uparrow 0} \right\rangle \right\rangle$ , а  $T_{p\vec{k}\vec{k}}$  і  $\tilde{T}_{p\vec{k}\vec{k}}$  – функції Гріна  $\left\langle \left\langle X_p X_r^{\downarrow 2} \middle| X_s^{\uparrow 0} \right\rangle \right\rangle$  та  $\left\langle \left\langle \tilde{X}_p X_r^{0\uparrow} \middle| X_s^{\uparrow 0} \right\rangle \right\rangle$  у вузлово-квазіімпульсному представленні.

Отже, отримується система двох рівнянь для функцій Гріна  $G_{\vec{k}}$  і  $T_{\vec{k}}$ :

$$(E + \mu - \varepsilon_1 - \varepsilon_1(\vec{k})) G_{\vec{k}} = \frac{1}{2\pi} + \varepsilon_2(\vec{k}) T_{\vec{k}}, \quad (29)$$

$$(E + \mu - U - \varepsilon_2 - \tilde{\varepsilon}_1(\vec{k})) T_{\vec{k}} = \tilde{\varepsilon}_2(\vec{k}) G_{\vec{k}}; \quad (30)$$

тут

$$\varepsilon_1 = \frac{n_{\downarrow}}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{t^2(\vec{k})}{E + \mu - U - t(\vec{k})}, \quad (31)$$

$$\varepsilon_2 = \frac{n_{\uparrow}}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{t^2(\vec{k})}{E + \mu - t(\vec{k})}, \quad (32)$$

$$\varepsilon_1(\vec{k}) = \tilde{\varepsilon}_1(\vec{k}) = (1 - 2d)t(\vec{k}), \quad \varepsilon_2(\vec{k}) = \tilde{\varepsilon}_2(\vec{k}) = -2dt(\vec{k}). \quad (33)$$

### 3. ОДНОЕЛЕКТРОННА ФУНКЦІЯ ГРІНА. ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР

З рівнянь (29)-(30) отримуємо:

$$G_{\vec{k}} = \frac{1}{4\pi} \left( \frac{A_{\vec{k}}}{E - E_1(\vec{k})} + \frac{B_{\vec{k}}}{E - E_2(\vec{k})} \right), \quad (34)$$

$$T_{\vec{k}} = \frac{1}{4\pi} \frac{\varepsilon_2(\vec{k})}{E_2(\vec{k}) - E_1(\vec{k})} \left( \frac{1}{E - E_2(\vec{k})} - \frac{1}{E - E_1(\vec{k})} \right), \quad (35)$$

де

$$A_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{U + \varepsilon_2 - \varepsilon_1}{E_2(\vec{k}) - E_1(\vec{k})} \right), \quad B_{\vec{k}} = 1 - A_{\vec{k}},$$

$$E_{1,2}(\vec{k}) = -\mu + \frac{U + \varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + (1 - 2d)t(\vec{k}) \mp \frac{1}{2} \sqrt{(U + \varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 + (4dt(\vec{k}))^2}. \quad (36)$$

Вирази (34) і (35) записані для парамагнітного стану.

Подібним чином знаходяться й інші функції Гріна, що входять у вираз (10). У підсумку одноелектронна функція Гріна матиме вигляд

$$G_{\vec{k}}(E) = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{C_{\vec{k}}}{E - E_1(\vec{k})} + \frac{D_{\vec{k}}}{E - E_2(\vec{k})} \right), \quad (37)$$

$$C_{\vec{k}} = \frac{1}{2} - \frac{2dt(\vec{k})}{E_2(\vec{k}) - E_1(\vec{k})}, \quad D_{\vec{k}} = 1 - C_{\vec{k}}.$$

Подібним чином можна модифікувати і наближення-2: –

Вихідне рівняння для функції Гріна  $\langle\langle X_p^{0\uparrow} | X_r^{\uparrow 0} \rangle\rangle$  з урахуванням виразу (15) у наближенні-2 набуде вигляду (19), проте, на відміну від „наближення-1”,  $\varepsilon_2(pi) = -\langle X_p^{\uparrow} + X_p^0 \rangle t(pi)$  (при цьому різниця двох останніх функцій у виразі (15) приймається рівною нулю). Подібно до цього в рівнянні (20)  $\tilde{\varepsilon}_2 = -\langle X_p^{\downarrow} + X_p^2 \rangle t(pi)$ . Якщо подальший розгляд провести аналогічно п. 2.1, то у підсумку одноелектронна функція Гріна матиме вигляд ( $n=1$ , парамагнітний стан)

$$G_{\vec{k}} = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{C'_{\vec{k}}}{E - E_1(\vec{k})} + \frac{D'_{\vec{k}}}{E - E_2(\vec{k})} \right),$$

де

$$C'_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{t(\vec{k})}{E_2(\vec{k}) - E_1(\vec{k})} \right), \quad D'_{\vec{k}} = 1 - C'_{\vec{k}},$$

а енергетичний спектр дається виразом

$$E_{1,2}(\vec{k}) = -\mu + \frac{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}{2} + (1 - 2d)t(\vec{k}) \mp \frac{1}{2} \sqrt{(U + \varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 + t^2(\vec{k})}.$$

Отже, одноелектронна функція Гріна і енергетичний спектр, отримуються з модифікованого наближення-1 заміною  $4dt(\vec{k}) \rightarrow t(\vec{k})$ .

#### 4. ОБГОВОРЕННЯ ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

1. Розглянемо енергетичний спектр (36) за умови  $(U + \varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 \gg (4dt(\vec{k}))^2$  (стан мотт-хаббардівського діелектрика або напівметалу). Тоді

$$E_1(\vec{k}) = -\mu + \varepsilon_1 + (1 - 2d)t(\vec{k}), \quad (38)$$

$$E_2(\vec{k}) = -\mu + U + \varepsilon_2 + (1 - 2d)t(\vec{k}); \quad (39)$$

для  $n=1$   $\mu = U/2$ . Вирази (38) і (39) описують відповідно нижню і верхню хаббардівські зони. Видно, що врахування переходів між  $|i\sigma\rangle$ -станами і верхньою хаббардівською зоною (за допомогою функції Гріна  $\langle\langle X_p X_r^{\downarrow 2} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle$  та переходів між  $|i\uparrow\downarrow\rangle$ -станами і нижньою хаббардівською зоною (за допомогою функції Гріна  $\langle\langle \tilde{X}_p X_r^{0\uparrow} | X_s^{\uparrow 0} \rangle\rangle$ ) приводять до перенормування атомних енергетичних рівнів.

Розрахуємо вирази  $\varepsilon_1$  і  $\varepsilon_2$ , користуючись точними розв'язками „атомної задачі”. Підставляючи  $E = -\mu = -U/2$  у формулу (31) і  $E = -\mu + U$  у формулу (32), отримуємо (в парамагнітному стані)

$$\varepsilon_1 = -\frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} \frac{t^2(\vec{k})}{U + t(\vec{k})}, \quad \varepsilon_2 = \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} \frac{t^2(\vec{k})}{U - t(\vec{k})}.$$

Використаємо прямокутну густину станів для незбуреної зони з напівшириною  $w$ :

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \delta(E - t(\vec{k})) = \frac{1}{2w} \theta(w^2 - E^2), \quad (40)$$

де  $\theta(x) = 1$  для  $x > 0$ ,  $\theta(x) = 0$  для  $x < 0$ . Тоді

$$\varepsilon_1 = \frac{U}{2} - \frac{U^2}{4w} \ln \frac{U+w}{|U-w|}, \quad \varepsilon_2 = -\varepsilon_1. \quad (41)$$

За умови  $U \gg w$  (стан мотт-хаббардівського діелектрика)

$$\varepsilon_1 = -\varepsilon_2 = -\frac{w^2}{6U}. \quad (42)$$

Енергетичний спектр (36)-(37) з виразами (42) співпадає зі спектром, розрахованим із ефективного гамільтоніана моделі Хаббарда, отриманого за умови  $U \gg w$  [14] ( $t$ - $J$ -гамільтоніана для напівзаповненої зони), якщо кінетичну обмінну взаємодію (надобмін) врахувати у наближенні молекулярного поля.

2. Якщо система поляризована за спіном (феромагнітний стан, парамагнетик у магнітному полі), то в спектрі електронів зі спіном  $\sigma = \uparrow$  зміщення атомних енергетичних рівнів будуть

$$\varepsilon_1^{\uparrow} = -n_{\downarrow} \frac{w^2}{6U}, \quad \varepsilon_2^{\uparrow} = n_{\uparrow} \frac{w^2}{6U}; \quad (43)$$

для електронів зі спіном  $\sigma = \downarrow$  будемо мати:

$$\varepsilon_1^{\downarrow} = -n_{\uparrow} \frac{w^2}{6U}, \quad \varepsilon_2^{\downarrow} = n_{\downarrow} \frac{w^2}{6U} \quad (44)$$

(у відповідності із внеском до спектру при розгляді на основі ефективного гамільтоніана за умови  $n_{\uparrow} \neq n_{\downarrow}$ ).

3. Енергетична щільність між хаббардівськими зонами  $n_{\uparrow} = n_{\downarrow}$ , отримана з (36), –

$$\Delta E = -2w(1-2d) + \sqrt{(U + \varepsilon_2 - \varepsilon_1)^2 + (4dw)^2} \quad (45)$$

(величини  $\varepsilon_1$  і  $\varepsilon_2$  даються виразами (41)), відрізняється від отриманої в роботах [14, 15] наявністю перенормованої енергії активації пари дірка-двійка ( $U \rightarrow U + \varepsilon_2 - \varepsilon_1$ ). Різниця  $\varepsilon_2 - \varepsilon_1$  має прямий фізичний зміст: на таку величину зростає енергія активації внаслідок послідовного врахування переходів „вузол-хаббардівська зона” (в мотт-хаббардівському діелектрику вона йде на подолання енергії антиферомагнітного зв'язку даного вузла з найближчими сусідами).

4. Концентрація двійок  $d$  визначається за допомогою функції Гріна  $\langle\langle X_p^{\downarrow 2} | X_s^{2\downarrow} \rangle\rangle_{\vec{k}}$  (фур'є-компоненти функції Гріна  $\langle\langle X_p^{\downarrow 2} | X_s^{2\downarrow} \rangle\rangle$ ):

$$\langle\langle X_p^{\downarrow 2} | X_s^{2\downarrow} \rangle\rangle_{\vec{k}} = \frac{1}{4\pi} \left( \frac{B_{\vec{k}}}{E - E_1(\vec{k})} + \frac{A_{\vec{k}}}{E - E_2(\vec{k})} \right). \quad (46)$$

Використання густини станів (40) приводить до наступного виразу для концентрації полярних станів при температурі  $T = 0$ :

$$d = \frac{1}{4} + \frac{U + \varepsilon_2 - \varepsilon_1}{32dw} \ln(1 - 4d)\theta(2w - U + \varepsilon_1 - \varepsilon_2). \quad (47)$$

На відміну від роботи [14], де критичне значення кулонівського відштовхування  $U_c$ , що відповідає переходу метал-діелектрик, визначалося умовою  $U_c = 2w$ , тут  $U_c \approx 1,8w$ .

5. Порівняємо вираз (45) для  $\Delta E$  з результатом ТДСП для добре означеного стану мотт-хаббардівського діелектрика за умови  $U = 4w$ . ТДСП дає [9]  $\Delta E = 2w$ ; такий самий результат отримується і з (45) при використанні виразів (41).

6. Якщо узагальнити функцію Гріна (35) на випадок малих  $U$  і  $n_\uparrow \neq n_\downarrow$ , то ми прийдемо до хартрі-фоківського наближення. Справді, у цьому випадку, коли  $d \rightarrow \frac{1}{4}$ ,  $(4dw)^2 > U^2$

$$G_{\vec{k}}^\sigma(E) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{E - E_\sigma(\vec{k})},$$

де

$$E_\sigma(\vec{k}) = -\mu + \frac{U + \varepsilon_1^\sigma + \varepsilon_2^\sigma}{2} + t(\vec{k}).$$

За умови  $n_\uparrow \neq n_\downarrow$   $\varepsilon_1$  і  $\varepsilon_2$  даються виразами ( $w \gg U$ )

$$\varepsilon_1^\uparrow = n_\downarrow U, \quad \varepsilon_2^\uparrow = -n_\uparrow U; \quad \varepsilon_1^\downarrow = n_\uparrow U, \quad \varepsilon_2^\downarrow = -n_\downarrow U.$$

Оскільки  $n_\uparrow + n_\downarrow = 1$ , то

$$E^\uparrow(\vec{k}) = -\mu + t(\vec{k}) + n_\downarrow U$$

$$E^\downarrow(\vec{k}) = -\mu + t(\vec{k}) + n_\uparrow U$$

у згоді з наближенням Хартрі-Фока.

7. Внаслідок переходів вузол  $\leftrightarrow$  хаббардівські зони існують не лише зсуви енергій атомних рівнів (задані наведеними вище виразами для  $\varepsilon_1$  і  $\varepsilon_2$ ), але і їх розмиття; ця важлива особливість спектру втрачається внаслідок переходу від виразів (31) – (32) до виразів 41. Справді, запишемо формули (31) і (32) у вигляді

$$\lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{t^2(\vec{k})}{E + \mu - U - t(\vec{k}) + is} = P \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{t^2(\vec{k})}{E + \mu - U - t(\vec{k})} - \frac{i\pi}{N} \sum_{\vec{k}} t^2(\vec{k}) \delta(E + \mu - U - t(\vec{k})) \quad (48)$$

$$\lim_{s \rightarrow 0} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{t^2(\vec{k})}{E + \mu - t(\vec{k}) + is} = P \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{t^2(\vec{k})}{E + \mu - t(\vec{k})} - \frac{i\pi}{N} \sum_{\vec{k}} t^2(\vec{k}) \delta(E + \mu - U - t(\vec{k})); \quad (49)$$

тут  $P$  – символ головного значення. Кожен з цих виразів, які стоять справа, можна записати як

$$\delta_1 - i\Delta_1, \quad \delta_2 - i\Delta_2,$$

де  $\delta_1$  і  $\delta_2$  зсуви віртуальних енергетичних рівнів  $-\frac{U}{2}$  і  $\frac{U}{2}$ , а  $\Delta_1$  і  $\Delta_2$  – їх ширини. Тут можна бачити певну аналогію з одноцентровою моделлю Андерсона і з допоміжною одновузловою задачею в ТДСП. Наслідки, які впливають з представлень  $\varepsilon_1$  і  $\varepsilon_2$  у вигляді (48) і (49), будуть розглянуті в окремій праці.

## Висновки

На основі нового варіанту наближення середнього поля розрахований енергетичний спектр електронів в моделі Хаббарда у двополюсному наближенні. Отриманий спектр є температурно-залежним, точним в атомній і зонній границях, відтворює хартрі-фоківський спектр у випадку слабких внутрішньоатомних взаємодій та спектр електронів, розрахований за теорією збурень у випадку сильних внутрішньоатомних взаємодій, дозволяє описати перехід діелектрик-метал. Показано, що врахування переходів вузол ↔ хаббардівська зона, приводять не до зсувів атомних рівнів, але і до їх розмиття; тут є певна аналогія з одноцентровою моделлю Андерсона і з допоміжною одновузловою задачею в ТДСП. Особливості енергетичного спектру детально обговорені у роботі.

#### Література

- Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. / J.Hubbard // Proc. Roy. Soc.- 1963.- V.A276.- № 1369.- p.p. 238-257.
- Mott N.F. Metal-insulator transition.- Taylor & Francis, London, 1990.- 286 p.
- Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. III. / J.Hubbard // Proc. Roy. Soc.- 1965.- V.A281.- № 1369.- p.p. 401-419.
- Kawabata A. One electron Green's function in magnetic insulators // Progr. Theor. Phys.- 1972.- № 48.- p.p. 1793-1808.
- Изюмов Ю.А. Модель Хаббарда в режиме сильных корреляций // Успехи физ. наук. - 1995.- Т. 165.- С. 403-426.
- Edwards P.P., Rao C.N.R. Metal-insulator Transitions Revised. Taylor & Francis, London, 1995.
- Gebhard F. The Mott metal-insulator transition: models and methods. Springer, Berlin 1997.
- Georges A. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and limit of infinite dimensions / Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M. // Rev. Mod. Phys.- 1996.- vol. 68, № 1.- p.p. 13-125.
- Kotliar G. Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory / Kotliar G., Savrasov S. Y., Haule K., Oudovenko V. S., Parcollet O., and Marianetti C. A. // Rev. Mod. Phys.-2006.- V.78.- 865 p.
- Изюмов Ю.А. Материалы с сильными электронными корреляциями // Успехи физ. наук - 2008.- Т. 178.- С. 26-60.
- Stasyuk I.V. Approximate analytical dynamical mean-field approach to strongly correlated electron systems // Cond. Matt. Phys. – 2000. – vol. 3, № 2(22). – p.p. 437-455.
- Gutzwiller M. Correlation of electrons in a narrow s band // Phys. Rev. -1965.- V. 137, №6A. –p.p. 1726-1735.
- Shvaika A.M. Strong-coupling approach for strongly correlated electron systems // Phys. Rev. B. - 2000. - V. 62. - p.p. 2358- 2371.
- Дідух Л. Модель вузькозонного матеріалу з електронно-дірковою асиметрією // Журн. фіз. досл., 1997.- Т. 1.- С. 241-250.
- Didukh L. Energy spectrum of electrons in the Hubbard model: a new mean-field approximation // phys. stat. sol.(b), 1998.- vol. 206.- p.p. R5-R6.
- Didukh L. A modified form of the polar model of crystals // Condens. Matter Phys., 1998.- vol. 1.- p.p. 125-144.
- Didukh L. A modified form of the polar model of crystals // Acta Physica Polonica B., 2000.- vol. 31.- p.p. 3097-3133.
- Didukh L., Skorenkyu Yu., Kramar O. Electron correlations in narrow energy bands: modified polar model approach // Condensed Matter Physics.- 2008.- vol. 11, No. 3(55).- p.p. 443-454.
- Skorenkyu Yu., Didukh L., Kramar O. and Dovhopyaty Yu. Mott transition, ferromagnetism and conductivity in the generalized Hubbard model // Acta Physica Polonica A.- 2007.- vol. 111, № 4.- p.p. 635-644.
- Дідух Л.Д., Скоренький Ю.Л., Крамар О.І., Довгоп'ятий Ю.М. Кореляційні ефекти у вузьких енергетичних зонах. I. Енергетичний спектр модифікованої форми полярної моделі // Вісник Тернопільського державного технічного університету.– 2008. – Т.13, №2.– С. 175-183.
- Дідух Л.Д., Скоренький Ю.Л., Крамар О.І., Довгоп'ятий Ю.М. Кореляційні ефекти у вузьких енергетичних зонах. I. Енергетичний спектр модифікованої форми полярної моделі // Вісник Тернопільського державного технічного університету.– 2008. – Т.13, №2.– С. 175-183.
- Дідух Л.Д., Стасюк І.В. Ефективний гамільтониан в моделі Андерсона // Физ. мет. и метал.- 1968.- Т. 26, № 4.- С. 582-588.
- Roth L.M. Simple narrow-band model of ferromagnetism due to intraatomic exchange // Phys. Rev. – 1966.- vol. 149, № 1. – p.p. 306-308.
- Дідух Л.Д., Стасюк І.В. К теорії ферромагнетизма в полярній моделі // УФЖ.- 1968.- Т.13, № 6.- С.899-904.