

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

ГЕРА Орест Богданович



УДК 538.935

**ТЕРМОДИНАМІКА ТА ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР  
АСИМЕТРИЧНОЇ МОДЕЛІ ХАББАРДА:  
ЕФЕКТИ РОЗСІЯННЯ У ПІДХОДІ  
ДИНАМІЧНОГО СЕРЕДНЬОГО ПОЛЯ**

01.04.02 – теоретична фізика

**А В Т О Р Е Ф Е Р А Т**  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Львів – 2008

Дисертацією є рукопис.

Роботу виконано в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України, м. Львів.

- Науковий керівник – член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор **Стасюк Ігор Васильович**, завідувач відділу квантової статистики Інституту фізики конденсованих систем НАН України, м. Львів.
- Офіційні опоненти – доктор фізико-математичних наук, професор **Вільчинський Станіслав Йосипович**, завідувач кафедри квантової теорії поля Київського національного університету імені Тараса Шевченка, м. Київ;
- доктор фізико-математичних наук, професор **Ваврух Маркіян Васильович**, завідувач кафедри астрофізики Львівського національного університету імені Івана Франка, м. Львів.

Захист відбудеться 10 вересня 2008 року о 15 год. 30 хв. на засіданні спеціалізованої вченої Д 35.156.01 ради при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою: 79011 Львів, вул. Свенціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем НАН України за адресою: 79026 Львів, вул. Козельницька, 4.

Автореферат розіслано 8 серпня 2008 року.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради,  
кандидат фіз.-мат. наук

Т.Є. Крохмальський

**Актуальність теми.** Починаючи від робіт Хаббарда 60-х років [1] моделі з сильними електронними кореляціями інтенсивно досліджувались для опису сполук з перехідними та рідкісноземельними елементами.

При вивченні цих матеріалів була важливою проблема опису багатьох ефектів, пов'язаних з особливостями електронної структури  $f$ -,  $d$ -зон та з різноманітними фазовими переходами. У таких системах може проявлятися ряд явищ, теоретичний розгляд яких має науковий інтерес. До них відносяться феромагнетизм, антиферомагнетизм, фазові розшарування, структурні фазові переходи, тощо; особливе місце займають переходи метал-діелектрик, механізм яких до цього часу є в полі зору дослідників.

Додатковим поштовхом до дослідження моделей з хаббардівськими кореляціями стало відкриття високотемпературної надпровідності. На початку 90-х років було розвинуто метод динамічного середнього поля для опису сильно-скорельованих електронних систем. Такий підхід, пов'язаний з формальним граничним переходом до простору з безмежною розмірністю, дозволив значно спростити задачу; було отримано багато нетривіальних результатів для моделі Хаббарда (див. огляд [2]) і похідних від неї моделей, корисних для з'ясування механізмів високотемпературної надпровідності.

Крім моделі Хаббарда інтенсивно досліджувалась і модель Фалікова-Кімбала. Ця модель є простішою, оскільки в ній електрони одного з сортів локалізовані. У рамках теорії динамічного середнього поля (ТДСП; в англійській літературі DMFT) вона розв'язується аналітично, тому для неї відомо багато результатів щодо термодинаміки та фазових переходів, а також густин електронних станів (див. огляд [3]). Проте все ще залишаються відкритими питання стосовно густини станів локалізованих частинок при різних значеннях параметрів задачі (концентрації частинок різних сортів, температура), оскільки в загальному випадку точна розрахункова методика дуже вимоглива до обчислювальних ресурсів.

При вивченні матеріалів із змішаною валентністю, де на рівні Фермі перекриваються  $f$  і  $d$ -зони, необхідно застосовувати двозонні моделі. Саме в цьому випадку актуальною є асиметрична модель Хаббарда (АМХ), оскільки вона є найпростішою двозонною моделлю, яка враховує кореляцію між частинками в різних зонах [4, 5].

Через свою складність асиметрична модель Хаббарда дуже мало досліджена, і практично не розглядалась в рамках ТДСП. Навіть в такому відносно простому її граничному випадку як модель Фалікова-Кімбала, недостатньо проаналізованими залишаються рівноважні стани моделі у різних термодинамічних режимах та спектральні характеристики локалізованих частинок, оскільки через обчислювальні труднощі основні дослідження робились при половинному заповненні. Дослідження енергетичного спектру та термодинаміки асиметричної моделі Хаббарда та її різних граничних випадків є, таким чином,

актуальним.

В період активного розвитку ТДСП було розроблено багато різних підходів до формулювання та розв'язання т. зв. ефективної одноузлової задачі ТДСП. Ці методи поділяються на числові та аналітичні. Зокрема до числових методів відносяться методи точної діагоналізації, числової ренормгрупи та квантовий метод Монте Карло, а до аналітичних – методи, що базуються на теорії збурень чи на розщепленнях рівнянь руху для функцій Гріна. Всі ці підходи мають ряд обмежень щодо меж застосовності.

За останні роки новим поштовхом до розвитку способів розв'язання задач ТДСП став розвиток нового методу LDA+DMFT [6]. Цей підхід виник, оскільки звичайний метод функціоналу густини в рамках наближення локальної густини (LDA), який використовується для розрахунку зонної структури, не можна застосовувати до систем з сильними електронними кореляціями. Поєднання підходу функціоналу густини і ТДСП дозволило досліджувати електронні спектри реальних матеріалів з сильними електронними кореляціями. Разом з тим, постали нові вимоги до методів розв'язку одноузлової задачі ТДСП. Зокрема, вони мають працювати в широкому діапазоні значень вихідних параметрів, і оскільки задача запускається багатократно, метод має бути швидким.

У зв'язку з вищесказаним актуальною стала розробка аналітичних методів у рамках ТДСП, оскільки такі підходи є значно швидші від розрахункових схем, що ґрунтуються на числовому моделюванні. Основні досягнення у цьому напрямку пов'язані останнім часом з застосуванням апарату функцій Гріна при використанні технік різно- та одночасових розщеплень у вищих порядках.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційна робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем НАН України в рамках держбюджетних тем “Дослідження колективних іонних та електрон-іонних процесів у твердих тілах на основі ферміонних ґраткових моделей” (держреєстрація № 0102U000217), “Розвиток аналітичних методів теорії енергетичного спектру та динаміки сильнокорельованих систем частинок” (держреєстрація № 0105U002085) та проекту Державного фонду фундаментальних досліджень “Іонний та електронний транспорт в іонних провідниках та матеріалах з вузькими електронними зонами провідності” (№ 02.07/266).

**Мета і задача досліджень.** Метою роботи є дослідження асиметричної моделі Хаббарда в рамках теорії динамічного середнього поля, яке включає:

- розвиток та удосконалення аналітичного методу дослідження одноузлової задачі ТДСП;
- побудову рівнянь стану та дослідження областей існування нестійкостей та рівноважних фаз асиметричної моделі Хаббарда в границі Фалікова-Кімбала у різних термодинамічних режимах;
- дослідження ферміонних (одночастинкових) та бозонних гілок спектру та

вивчення впливу процесів розсіяння збуджень на його структуру, включаючи область переходу метал-діелектрик, при різних співвідношеннях між параметрами моделі та у різних граничних випадках.

*Об'єктом дослідження* є ферміонні системи, такі як електронна підсистема у сполуках з перехідними та рідкісноземельними елементами, в яких між частинками з різних зон (що володіють різною рухливістю) існує сильна локальна кореляція.

*Предметом дослідження* є спектральні функції та термодинамічні властивості асиметричної моделі Хаббарда.

*Методи дослідження.* Модель досліджується в рамках теорії динамічного середнього поля. У роботі для розв'язання одноузлової задачі ТДСП використано метод рівнянь руху для операторів Хаббарда з подальшими різночасовими розщепленнями та метод твірного функціоналу.

### **Наукова новизна одержаних результатів.**

- Метод рівнянь руху для функцій Гріна одноузлової задачі ТДСП з подальшим різночасовим розщепленням розвинуто вперше для випадку асиметричної моделі Хаббарда. На цій основі запропоновано модифікацію узагальненого наближення Хаббард-III (т. зв. МГНЗ), в рамках якої отримано масовий оператор одноузлової функції Гріна частинок з внесками, що походять від процесів розсіяння на збудженнях бозонного та дублонного типу.
- Побудовано фазові діаграми АМХ в границі Фалікова-Кімбала при  $U \rightarrow \infty$ , які визначають області існування однорідних і розшарованих фаз при фіксації хімічного потенціалу одного з сортів та концентрації іншого сорту частинок. В рамках підходу МГНЗ отримано рівняння стану (залежності  $\mu_B(n_B)$ ) та встановлено температурні інтервали і значення концентрацій частинок, при яких існує термодинамічна нестійкість, пов'язана з фазовим розшаруванням.
- Вперше отримано в границі Фалікова-Кімбала густини станів локалізованих частинок при  $U \rightarrow \infty$  для різних температур і хімічних потенціалів; досліджено формування зони локалізованих частинок за рахунок процесів розсіяння на бозонних збудженнях екситонного ("магنونного") типу, яке виникає за рахунок взаємодії з рухомими частинками. Проаналізовано її перебудову при зміні концентрації останніх та при фазовому розшаруванні.
- Вперше для асиметричної моделі Хаббарда у наближеннях Хаббард-I, типу сплаву та узагальненому наближенні Хаббард-III (ГНЗ) досліджено густини одночастинкових станів, розташування країв енергетичних зон та виникнення щілини в спектрі залежно від одноузлової енергії

відштовхування  $U$  у випадку половинного заповнення. Виходячи з аналітичних властивостей одноузлової функції Гріна  $G_\sigma(\omega)$  та її незвідної частини  $\Xi_\sigma(\omega)$  при  $\omega = 0$ , сформульовано критерій неперервної появи згаданої щілини і описано кросовер при переході між моделями Хаббарда і Фалікова-Кімбала.

- Сформульовано метод твірного функціоналу в теорії динамічного середнього поля і застосовано його до розв'язання ефективної одноузлової задачі для асиметричної моделі Хаббарда. Запропоновано ітераційну процедуру побудови оберненої незвідної частини функції Гріна частинок у вигляді формального ряду за степенями когерентного потенціалу.
- В рамках методу твірного функціоналу розвинено самоузгоджений варіант узагальненого наближення Хаббард-III, що базується на врахуванні процесів розсіяння через т. зв. повні петлеві внески (що формуються повними функціями Гріна) до незвідної частини (масового оператора). З відповідної системи нелінійних інтегральних рівнянь у границі Фалікова-Кімбала та при  $U \rightarrow \infty$  знайдено одноузлову функцію Гріна ферміонів; виявлено зумовлений розсіянням ефект розмиття країв спектру локалізованих частинок.
- Запропоновано процедуру розрахунку бозонних функцій Гріна для одноузлової задачі ТДСП в підході твірного функціоналу. Для бозонної функції Гріна АМХ, що визначає спектр збуджень та гібридаційну ( $f-d$ ) сприйнятливість, в границі Фалікова-Кімбала при  $U \rightarrow \infty$  встановлено, що її спектральна функція є асиметричною і має скінченну ширину, зумовлену флуктуаційною зміною енергії локального рівня.

**Практичне значення одержаних результатів.** Метод розв'язання ефективної одноузлової задачі ТДСП, розвинутий в дисертації та апробований на прикладі асиметричної моделі Хаббарда та її граничних випадків, може бути поширений на інші моделі та задачі в теорії сильноскорельованих систем. На цій основі можна продовжити дослідження термодинаміки АМХ в різних термодинамічних режимах та при різних співвідношеннях між параметрами переносу частинок. Методику, яка базується на твірному функціоналі Каданова-Бейма, можна в подальшому використати для побудови наближень вищих порядків для асиметричної моделі Хаббарда з метою більш повного дослідження і опису переходу метал-діелектрик.

Результати, отримані при дослідженні ферміонних і бозонних гілок спектру, можуть сприяти більш глибокому розумінню ролі процесів розсіяння збуджень у формуванні їх спектральних характеристик та в інших ефектах, що мають місце у сильноскорельованих електронних системах. У випадку застосування АМХ до двозонних систем виявлені особливості густини станів збуджень екситонного типу можуть бути корисними при інтерпретації спектрів

поглинання, пов'язаних з міжзонними ( $f-d$ ) переходами.

**Особистий внесок здобувача.** Автор узагальнив метод різночасових розщеплень в підході рівнянь руху для функцій Гріна на випадок асиметричної моделі Хаббарда з різними хімічними потенціалами частинок. Метод було доповнено точними аналітичними співвідношеннями між функціями Гріна, які дозволили включити середньопольові внески у систему рівнянь динамічного середнього поля. На основі розробленого методу автором проведено аналіз енергетичного спектру частинок в границі Фалікова-Кімбала, і досліджено відкриття щілини в спектрі асиметричної моделі Хаббарда при половинному заповненні.

Автор приймав безпосередню участь в адаптації методу твірного функціоналу до одновузлової задачі динамічного середнього поля, ним проведено аналіз структури ітераційного ряду для незвідної частини одночастинкової функції Гріна.

Автор виконав усі числові розрахунки, пов'язані з отриманням основних результатів.

**Апробація результатів дисертації.** Результати дисертації представлялись на таких конференціях: наукова конференція “Сучасні проблеми квантової теорії” (Тернопіль, 2004 р.); 7-ма Міжнародна конференція з спектроскопії в нових надпровідниках (Сітгес, Іспанія, 2004 р.); 20-та Загальна конференція відділення конденсованої речовини Європейського фізичного товариства (Прага, Чехія, 2004 р.); Міжнародна конференція з сильноскорельованих електронних систем (Карлсруе, Німеччина, 2004 р.); Міжнародна конференція з сильноскорельованих електронних систем (Відень, Австрія, 2005 р.); Міжнародної конференції Статистична фізика 2005: сучасні задачі та нові застосування (Львів, 2005 р.); V міжнародна школа-конференція “Актуальні проблеми фізики напівпровідників” (Дрогобич, 2005 р.); Міжнародна конференція в Україні, Статистична фізика 2006, Конденсована речовина: теорія і застосування (Харків, 2006 р.); Міжнародна конференція з сильноскорельованих електронних систем (Х'юстон, США, 2007 р.); Міжнародна наукова конференція “Фізика конденсованих систем та прикладне матеріалознавство” (Львів, 2007 р.), а також семінарах в Інституті фізики конденсованих систем НАН України.

**Публікації.** За результатами дисертації опубліковано 15 робіт, в тому числі 5 статей виданих у реферованих журналах, зазначених у переліках ВАК України та 10 тез наукових конференцій.

**Структура та об'єм дисертації.** Дисертація складається з вступу, огляду літератури, трьох розділів, в яких викладені результати оригінальних досліджень, висновків, додатку і списку цитованої літератури. Робота викладена на 120 сторінках (разом з літературою – 135 сторінок), включає бібліографічний список, що містить 128 найменувань.

## ЗМІСТ РОБОТИ

**У вступі** обґрунтовано стан проблеми, актуальність досліджень, сформульовано мету роботи, і відзначено новизну результатів.

**У першому розділі** описано розвиток досліджень асиметричної моделі Хаббарда. Наведено короткий огляд основних підходів у теорії динамічного середнього поля і методів розв'язання ефективної одноузлової задачі. Описано стан досліджень граничних випадків АМХ: моделі Хаббарда і моделі Фалікова-Кімбала. Наведено основи методики розрахунку функцій Гріна, яка базується на підході твірного функціоналу Каданова-Бейма.

**У другому розділі** розділі розвивається аналітична схема для дослідження у рамках теорії динамічного середнього поля асиметричної моделі Хаббарда з гамільтоніаном

$$\hat{H} = \sum_i \hat{H}_i + \sum_{ij\sigma} t_{ij}^\sigma a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma}, \quad \hat{H}_i = U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \sum_{\sigma \in \{\downarrow, \uparrow\}} \mu_\sigma n_{i\sigma}, \quad (1)$$

яка описує частинки різного сорту (електрони у різних зонах) з локальною взаємодією  $U$  (при переході від звичайної моделі Хаббарда спіновим проекціям відповідають індекси сорту  $A$  і  $B$ ). Для розв'язання ефективної одноузлової задачі застосовано підхід, що базується на різночасових розщепленнях в рівняннях руху для функцій Гріна, побудованих на операторах Хаббарда, та на узагальненні процедури знаходження середньопольових поправок. Шляхом порівняння розрахованих термодинамічних залежностей типу рівнянь стану з точними, що отримуються в границі, яка відповідає моделі Фалікова-Кімбала, встановлюються межі застосовності запропонованої схеми.

Ефективна одноузлова задача формулюється на мові допоміжного фермі-поля  $\xi$  в представленні операторів Хаббарда [7]

$$H_{\text{eff}} = - \sum_\sigma [\mu_\sigma (X^{\sigma\sigma} + X^{22})] + U X^{22} + \sum_\sigma V_\sigma [(X^{\sigma 0} + \zeta X^{2\bar{\sigma}}) \xi_\sigma + \text{h.c.}] + H_\xi, \quad (2)$$

що діють на базисі одноузлових станів  $|0\rangle$ ,  $|2\rangle$ ,  $|A\rangle$ ,  $|B\rangle$  ( $\bar{\sigma} = B$ ,  $\zeta = +$  при  $\sigma = A$ ;  $\bar{\sigma} = A$ ,  $\zeta = -$  при  $\sigma = B$ ).

При обчисленні одноузлової ферміонної (електронної) функції Гріна  $G_\sigma(\omega) \equiv 2\pi \langle \langle a_\sigma | a_\sigma^\dagger \rangle \rangle_\omega$ , де  $a_\sigma = X^{0\sigma} + \zeta X^{\bar{\sigma}2}$ , усереднення за операторами  $\xi$ ,  $\xi^\dagger$  робиться з допомогою функції  $\mathcal{G}_\sigma(\omega) = \langle \langle \xi_\sigma | \xi_\sigma^\dagger \rangle \rangle_\omega^{(H_\xi)}$ , яка у цьому випадку виконує роль когерентного потенціалу  $2\pi V_\sigma^2 \mathcal{G}_\sigma(\omega) = J_\sigma(\omega)$ .

Для розв'язання одноузлової задачі використано метод, запропонований у [7] (т. зв. підхід ГНЗ). Рівняння руху для функцій Гріна на  $X$ -операторах записуються з використанням процедури проектування на базис ферміонних операторів Хаббарда та виділенням незвідних частин типу



$\langle\langle X^{\bar{\sigma}\sigma} \xi_{\bar{\sigma}}^- | \xi_{\bar{\sigma}}^+ X^{\sigma\bar{\sigma}} \rangle\rangle_{\omega}^{\text{ir}}$ . Останні обчислюються за допомогою спектральної теореми, де у відповідних кореляційних функціях здійснюються різночасові розщеплення ( $\langle\langle \xi_{\bar{\sigma}}^+(t) X^{\sigma\bar{\sigma}}(t) X^{\bar{\sigma}\sigma} \xi_{\bar{\sigma}}^- \rangle\rangle^{\text{ir}} \approx \langle X^{\sigma\bar{\sigma}}(t) X^{\bar{\sigma}\sigma} \rangle \langle \xi_{\bar{\sigma}}^+(t) \xi_{\bar{\sigma}}^- \rangle$ ). При цьому враховано внески, пов'язані з відмінностями концентрацій та хімічних потенціалів частинок різних сортів ( $t_{ij}^{\sigma} \neq t_{ij}^{\bar{\sigma}}, \mu_{\sigma} \neq \mu_{\bar{\sigma}}$ ).

Підхід доповнено точними співвідношеннями для розрахунку коефіцієнтів проектування, з якими пов'язані середньопольові поправки  $\varphi_{\sigma}$ :

$$V_{\bar{\sigma}} \varphi_{\sigma} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2 \operatorname{Im} [J_{\bar{\sigma}}(\omega + i\varepsilon) (\langle\langle X^{0\bar{\sigma}} | X^{\bar{\sigma}0} \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon} - \langle\langle X^{\sigma 2} | X^{2\sigma} \rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon})] d\omega}{e^{\beta\omega} + 1}, \quad (3)$$

де входять повні функції Гріна на операторах Хаббарда.

У запропонованій модифікації узагальненого наближення Хаббард-III (МГНЗ) розв'язок одновузлової задачі отримано у вигляді зв'язку між незвідною за Ларкіном частиною  $\Xi_{\sigma}^{-1}$  одновузлової функції Гріна  $G_{\sigma}$  та когерентним потенціалом  $J_{\sigma}$ :

$$\Xi_{\sigma}^{-1}(\omega) = \left[ \frac{A_{0\sigma}}{\omega + \mu_{\sigma} - \tilde{\Omega}_{\sigma}(\omega)} + \frac{A_{2\bar{\sigma}}}{\omega + \mu_{\sigma} - U - \tilde{\Omega}_{\sigma}(\omega)} \right]^{-1} + \tilde{\Omega}_{\sigma}(\omega), \quad (4)$$

де

$$\tilde{\Omega}_{\sigma}(\omega) = J_{\sigma}(\omega) - \frac{R_{\sigma}(\omega)}{A_{0\sigma} A_{2\bar{\sigma}}} + \frac{V_{\bar{\sigma}} \varphi_{\sigma}(\omega)}{A_{0\sigma} A_{2\bar{\sigma}}}, \quad A_{pq} = \langle X^{pp} + X^{qq} \rangle; \quad (5)$$

функція  $R_{\sigma}(\omega)$  описує ефекти розсіяння на бозонних збудженнях екситонного ("магнного") та дублонного типу:

$$\begin{aligned} R_{\sigma}(\omega) = & -\frac{\langle X^{\sigma\sigma} \rangle + \langle X^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \rangle}{2} J_{\bar{\sigma}}(\omega + \mu_{\sigma} - \mu_{\bar{\sigma}}) + \frac{\langle X^{00} \rangle + \langle X^{22} \rangle}{2} J_{\bar{\sigma}}(U - \mu_{\sigma} - \mu_{\bar{\sigma}} - \omega) \\ & + \frac{\langle X^{\sigma\sigma} \rangle - \langle X^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} \rangle}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\{-\operatorname{Im} J_{\bar{\sigma}}(\omega' + i\varepsilon)\}}{\omega - \omega' - \mu_{\bar{\sigma}} + \mu_{\sigma}} \tanh \frac{\beta\omega'}{2} d\omega' \\ & + \frac{\langle X^{00} \rangle - \langle X^{22} \rangle}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\{-\operatorname{Im} J_{\bar{\sigma}}(-\omega' - i\varepsilon)\}}{\omega - \omega' + \mu_{\bar{\sigma}} + \mu_{\sigma} - U} \tanh \frac{\beta\omega'}{2} d\omega'. \end{aligned} \quad (6)$$

Дані рівняння доповнюються співвідношеннями, які випливають з розв'язку рівняння Ларкіна та описують зв'язок з функцією Гріна для ґратки:

$$G_{\sigma}^{-1}(\omega) = \Xi_{\sigma}^{-1}(\omega) - J_{\sigma}(\omega), \quad G_{\sigma}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho_{\sigma}^0(t) dt}{\Xi_{\sigma}^{-1}(\omega) - t}. \quad (7)$$

Розв'язки системи рівнянь (6), (7) отримано числовим способом. На цій основі, виходячи з співвідношення

$$n_{\sigma} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{-2 \operatorname{Im} G_{\sigma}(\omega + i\varepsilon)}{e^{\beta\omega} + 1}, \quad (8)$$

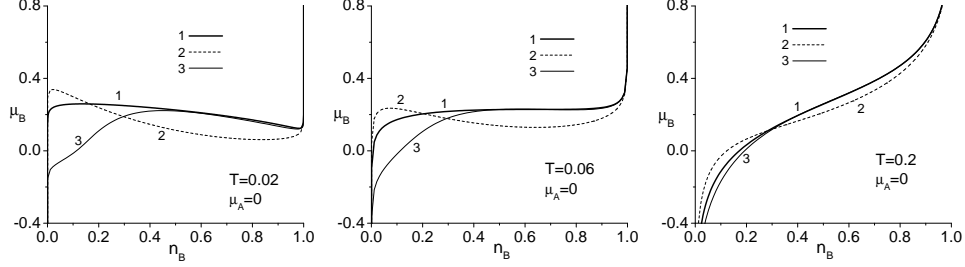


Рис. 1: Залежності  $\mu_B$  від  $n_B$  у різних наближеннях; 1 – точний результат; 2 – МАА; 3 – МГНЗ ( $W_A = 1$ ,  $W_B = 0$ ,  $U = \infty$ ).

розраховано залежності  $\mu_\sigma(n_\sigma)$  між хімічними потенціалами і концентраціями частинок; розглянуто випадок границі Фалікова-Кімбала (коли  $t_B \rightarrow 0$ ,  $J_B(\omega) \rightarrow 0$ ) для АМХ з безмежним  $U$  (коли виключені двократно заповнені стани на вузлі). Криві для  $\mu_B(n_B)$ , побудовані у випадку ґратки Бете з напівеліптичною густиною станів  $\rho_\sigma(\varepsilon) = 2\sqrt{W_\sigma^2 - \varepsilon^2}/(\pi W_\sigma^2)$ , наведено на рис. 1. Там же для порівняння подано результати, що відповідають наближенню т. зв. модифікованого сплаву (МАА) [8] (дане наближення отримується при нехтуванні внесками (6), пов'язаними з розсіянням на бозонних збудженнях), а також графіки, побудовані на основі точних термодинамічних співвідношень для моделі Фалікова-Кімбала у ТДСП.

Залежності  $\mu_B(n_B)$ , отримані у МГНЗ, узгоджуються з точними в широкому діапазоні температур для концентрацій більших деякого значення, яке залежить від хімічного потенціалу  $\mu_A$  (рис. 1; при  $\mu_A = 0$  узгодження має місце для концентрацій  $n_B \gtrsim 0.5$ ). Наближення дає коректне значення  $T_c \simeq 0.060W_A$ , а при температурах нижчих за критичну – чітко вказує на фазовий перехід. При  $T > T_c$  результати, отримані в МГНЗ, практично співпадають з точними.

Базуючись на термодинамічних співвідношеннях, в границі Фалікова-Кімбала з безмежним одновузловим відштовхуванням досліджено області існування стійких фаз та фазові переходи як між однорідними фазами, так і переходи до станів з фазовим розшаруванням. В доповнення до результатів досліджень Фрірікса, Летфулова та інших [9, 10], розглянуто термодинамічні режими ( $\mu_A = \text{const}$ ,  $\mu_B = \text{const}$ ), ( $n_A = \text{const}$ ,  $\mu_B = \text{const}$ ) і ( $\mu_A = \text{const}$ ,  $n_B = \text{const}$ ). На рис. 2а зображено ділянки фазових розшарувань в режимі ( $\mu_A = \text{const}$ ,  $n_B = \text{const}$ ), а на рис. 2б,в – діаграми в режимі ( $n_A = \text{const}$ ,  $\mu_B = \text{const}$ ). На цій основі виділено області концентрацій частинок, які відповідають однорідним фазам. Зокрема, встановлено, що при температурах  $T \geq T_c \simeq 0.06W_A$  завжди стійким є однорідний стан, а при нижчих температурах слід аналізувати можливість фазового розшарування (залежно від

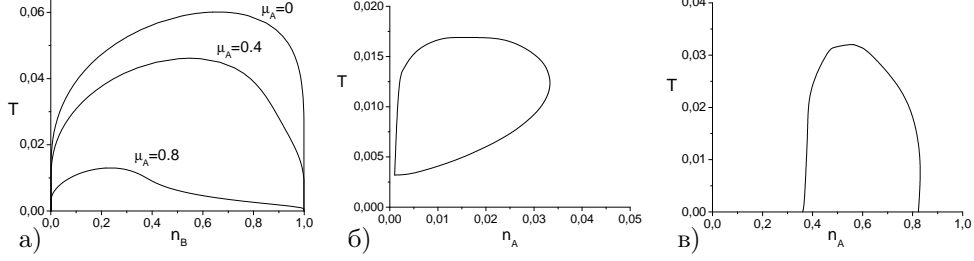


Рис. 2: Діаграми фазового розпарування: а) – діаграми  $(n_B, T)$  для різних хімічних потенціалів рухомих частинок; б), в) – діаграми  $(n_A, T)$  при  $\mu_B = -0.006$  і  $\mu_B = 0.6$  відповідно ( $W_A = 1$ ,  $W_B = 0$ ).

термодинамічного режиму) при розрахунку енергетичного спектру.

**В третьому розділі** досліджуються одночастинкові густини станів АМХ (як в границі Фалікова-Кімбала з безмежним  $U$ , так і залежно від співвідношення між параметрами переносу частинок різних сортів), вивчається перехід метал-діелектрик (перехід з відкриттям – закриттям щілини в спектрі) при зміні  $U$ . Розрахунки одночастинкових густини станів асиметричної моделі Хаббарда проводяться на основі співвідношення:

$$\rho_\sigma(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_\sigma(\omega + i0^+), \quad (9)$$

де входить повна одновузлова ферміонна функція Гріна. Шлях її розрахунку у підході МГНЗ дано в другому розділі.

Проведено розрахунок густини станів  $\rho_B(\omega)$  локалізованих частинок на основі наближення ГНЗ при половинному заповненні у границі Фалікова-Кімбала, де відповідна функція Гріна має вигляд

$$G_B(\omega) = \frac{\omega - 2J_A(\omega)}{\omega^2 - U^2/4 - 2\omega J_A(\omega)}, \quad (10)$$

а  $\varphi_B = 0$  внаслідок симетрії задачі. Досліджено профілі  $\rho_B(\omega)$ ; кількісне узгодження з результатом, отриманим з точної розрахункової методики в [11], досягається при достатньо великих значеннях  $U$  і при збільшенні  $T$ .

Більш детальне дослідження структури ферміонних густини станів виконано в границі Фалікова-Кімбала у випадку безмежної енергії відштовхування ( $U \rightarrow \infty$ ). На основі підходу МГНЗ розглянуто для різних температур зміну густини станів локалізованих частинок  $\rho_B(\omega)$  при зміні концентрації рухомих частинок  $n_A$  від малих значень (порожньої зони) до повністю заповненої зони. На рис. 3 зображено отримані спектри при температурах вище або порядку критичної ( $T_c \approx 0.06W_A$ ); стійким є однорідний стан.

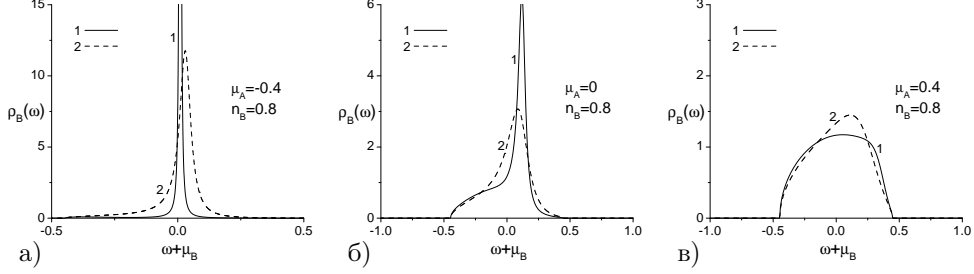


Рис. 3: Густина станів локалізованих частинок в рамках наближення MGHЗ при різних значеннях  $\mu_A$ : 1)  $T = 0.06$ , 2)  $T = 0.2$  ( $W_A = 1$ ,  $W_B = 0$ ,  $U = \infty$ ).

Для низьких концентрацій  $n_A$  (від'ємні значення  $\mu_A$ ) система є близькою до атомарної границі і спектр  $\rho_B(\omega)$  має вигляд дельта-подібного піку, трохи розмитого розсіянням на рухомих частинках (рис. 3а,  $\mu_A = -0.4$ ). У випадку майже заповнених зон, коли  $n_A + n_B \rightarrow 1$  (рис. 3в,  $\mu_A = 0.4$ ), згаданий пік зникає завдяки значному внеску когерентного потенціалу рухомих частинок  $J_A(\omega)$ . Проміжний випадок зображено на рис. 3б; за своїм профілем спектр подібний до форми густини станів  $f$ -електронів у моделі Андерсона для  $U \rightarrow \infty$  [12] при проміжних заповненнях.

Проаналізовано структуру спектрів  $\rho_A(\omega)$  і  $\rho_B(\omega)$  у випадку фазового розшарування, де для концентрації  $n_B \in (n_{B1}, n_{B2})$  має місце розділення на фази з концентраціями  $n_{B1}$  і  $n_{B2}$ , а спектр системи в цілому можна розглядати як суперпозицію спектрів кожної з компонент. Концентрації  $n_{B1}$  і  $n_{B2}$  залежать від  $T$ , що приводить до додаткової зміни спектрів  $\rho_A(\omega)$  і  $\rho_B(\omega)$  з температурою. На рис. 4а зображено профілі  $\rho_B(\omega)$  при температурі нижчій за критичну, а на рис. 4б дано порівняння спектрів при різних температурах. Ширина зони в розшарованому стані залежить від температури і більша від ширини в однорідному випадку (при  $T > T_c$ ).

Для загального випадку асиметричної моделі Хаббарда досліджено при половинному заповненні спектри  $\rho_A(\omega)$ ,  $\rho_B(\omega)$  та перехід з появою щілини (перехід метал-діелектрик). Розгляд проведено в рамках наближення GHЗ, а також у таких базових наближеннях, як Хаббард-I і наближення типу сплаву. На відміну від останніх, GHЗ описує зону, яка формується переносом частинок обох сортів, в результаті чого критичне значення  $U_c$  є більшим, ніж у наближенні типу сплаву, де  $U_c^A \neq U_c^B$ ; у наближенні Хаббард-I  $U_c = 0$ .

На рис. 5 ілюструється перехід з відкриттям щілини для асиметричної моделі Хаббарда в рамках наближення GHЗ. В цьому підході зони обох сортів частинок мають однакову ширину. Характер переходу узгоджується з неперервною

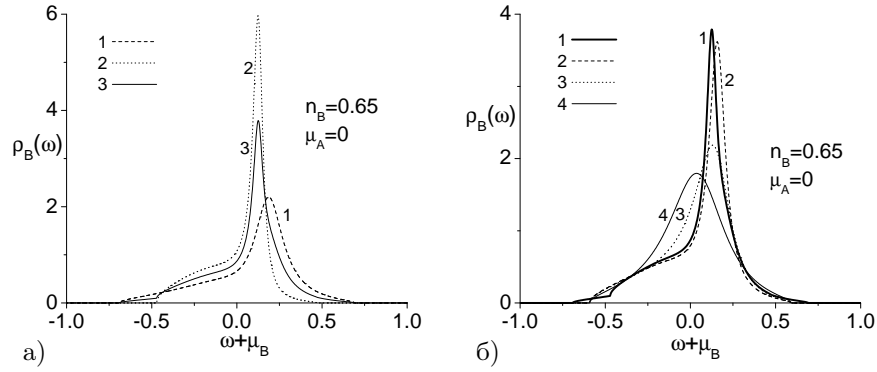


Рис. 4: Густина станів локалізованих частинок в рамках наближення MGHZ ( $W_A = 1, W_B = 0$ ). а) Суперпозиція спектрів при  $T < T_c$  ( $T = 0.059$ ;  $n_{B1} \approx 0.52$ ,  $n_{B2} \approx 0.78$ ); 1,2 – спектри кожної з компонент; 3 – суперпозиція 1 і 2. б) Повна густина станів при різних температурах (1 –  $T = 0.059$ , 2 –  $T = 0.061$ , 3 –  $T = 0.2$ , 4 –  $T = 1.0$ ).

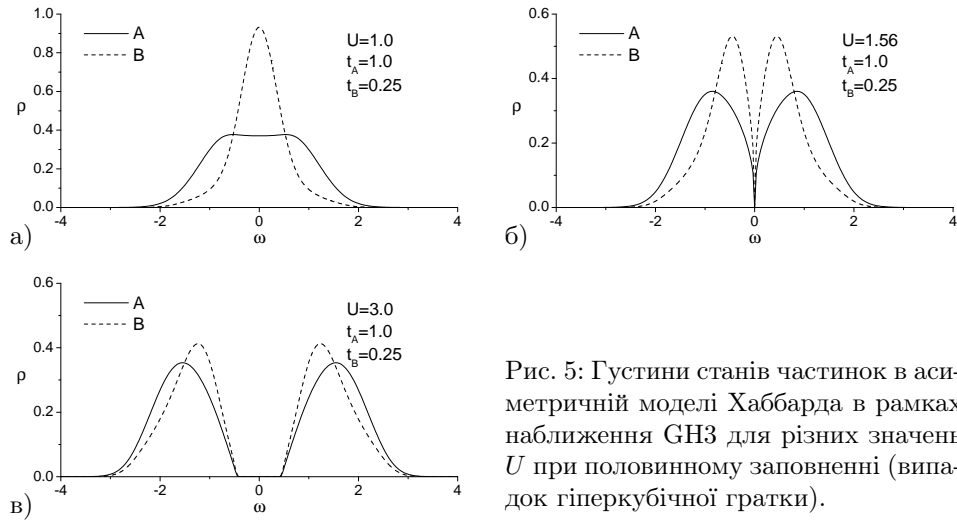


Рис. 5: Густина станів частинок в асиметричній моделі Хаббарда в рамках наближення ГНЗ для різних значень  $U$  при половинному заповненні (випадок гіперкубічної ґратки).

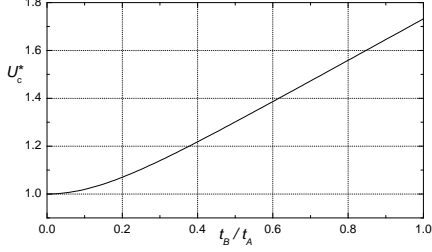


Рис. 6: Масштабоване критичне значення  $U_c^* = U_c/W_A$  як функція відношення  $t_B/t_A$  в рамках наближення ГНЗ при половинному заповненні.

перебудовою спектру типу метал-діелектрик при високих температурах для звичайної моделі Хаббарда, і фактом, що у випадку моделі Фалікова-Кімбала щільна відкривається неперервно при збільшенні  $U$ . При низькій температурі результат, що отримується в границі Хаббарда у рамках ГНЗ, відповідає одному з двох співвідносячих розв'язків для спектру [13], коли при зменшенні  $U$  щільна закривається при  $U = U_{c2}$  без появи квазічастинкового піку на рівні Фермі.

Базуючись на симетрії частинка-дірка при половинному заповненні та розбіжності незвідної частини ферміонної функції Гріна в момент відкриття щільної при неперервному переході метал-діелектрик, доведено наступні співвідношення:

$$\lim_{U \rightarrow U_c^-} \frac{J_\sigma(0)}{G_\sigma(0)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon^2 \rho_\sigma^0(\varepsilon) d\varepsilon, \quad \lim_{U \rightarrow U_c^-} G_\sigma(0) \Xi_\sigma^{-1}(0) = 1, \quad (11)$$

які дозволяють знайти критичне значення  $U_c$  у наближенні ГНЗ:

$$U_c = \sqrt{\frac{W_A^2 + W_B^2 + (W_A^4 + W_B^4 + 14W_A^2W_B^2)^{1/2}}{2}}, \quad (12)$$

де  $W_\sigma$  – ефективна півширина незбуреної зони:  $W_\sigma = 2 \left( \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon^2 \rho_\sigma^0(\varepsilon) d\varepsilon \right)^{1/2}$ . Отриманий результат може бути застосований до різних типів ґраток (гіперкубічної, Бете та інших) при масштабуванні енергії  $U_c^* = U_c/W_A$  (рис. 6).

Оскільки в ГНЗ не описуються ефекти температурного розширення зон і квазічастинкові особливості, метод дає кращі результати біля границі Фалікова-Кімбала. У даній границі методика ГНЗ дає точне значення для  $U_c$  ( $U_c = W_A$ ), в той час як у протилежній границі звичайної моделі Хаббарда оцінка  $U_c$  є заниженою ( $U_c = \sqrt{3}W \approx 1.73W$ ; за даними [13],  $U_c$  має залежати від температури і для високих температур  $U_c \approx (2.4 - 2.5)W$ ).

**В четвертому розділі**, щоб систематизувати і обґрунтувати підхід узагальненого наближення Хаббард-III, який описаний і доповнений в попередніх розділах, для дослідження одновузлової задачі ТДСП застосовано метод твірного функціоналу Каданова-Бейма, розвинутий Ізюмовим та ін. для спінових

та електронних моделей на ґратці [14]. В рамках підходу розвинуто самоузгоджену схему розрахунку ферміонних і бозонних функцій Гріна і більш детально досліджено бозонну гілку спектру.

У даному розділі розгляд АМХ обмежено граничним випадком  $U \rightarrow \infty$ . З метою запровадження твірного функціоналу одноузлова задача доповнена допоміжним залежним від часу полем, яке діє на бозонні оператори Хаббарда:

$$\hat{V} = \int_0^\beta d\tau \hat{V}(\tau) = \int_0^\beta d\tau \sum_\gamma v_\gamma(\tau) X^\gamma(\tau), \quad (13)$$

де  $\gamma = 00, \sigma\sigma, \sigma\bar{\sigma}$ . В цьому випадку статистична сума переписується як  $Z \rightarrow Z_V = \text{Sp} (e^{-\beta H} \mathcal{T}_\tau e^{-V})$ , і вводиться твірний функціонал  $\Phi_V = \ln Z_V$ . Такий підхід дозволяє будувати кореляційні функції вищого порядку, які містять бозонні оператори Хаббарда, як варіаційні похідні по відповідних полях.

Метод використано щоб отримати замкнуту систему рівнянь у функціональних похідних для визначення ферміонної функції Гріна  $G_V^{\sigma 0, 0\eta}(\tau, \tau') \equiv \langle \mathcal{T}_\tau X^{\sigma 0}(\tau) X^{0\eta}(\tau') \rangle_V$ , яка у границі  $v_\gamma = 0$  переходить в одноузлову функцію  $G^{\sigma 0, 0\sigma}(\tau - \tau')$ .

Шляхом застосування запропонованої в роботі т. зв. рекурентної форми теореми Віка отримано рівняння, яке використовується безпосередньо для побудови оберненої незвідної (за Ларкінном) частини  $\hat{\Xi}^{-1} = \hat{G}^{-1} + \hat{J}$  одноузлової функції Гріна:

$$\hat{\Xi}^{-1} = -\hat{A}_0^{-1} \hat{g}^{-1} + \hat{A}_0^{-1} \overrightarrow{\hat{A}' \hat{J} \hat{G}} \hat{\Xi}^{-1}, \quad (14)$$

Тут використано матричний запис на базисі  $(\sigma 0, 0\eta)$ . Стрілка вказує матрицю, на яку діє оператор диференціювання  $\hat{A}'$ , що містить варіаційні похідні по полях  $v_\gamma(\tau)$ ;  $\hat{A}_0 = \hat{A}' \Phi_V$ , а  $\hat{g}^{-1}$  – матриця, яка включає обернені незбурені функції Гріна та доданки лінійні за  $v_\gamma(\tau)$ .

Досліджено структуру ряду, який виникає при ітераційному розв'язанні рівняння (14) та описано спосіб виділення масового оператора одноузлової функції Гріна та її кінцевої частини.

Матрицю  $\hat{\Xi}^{-1}(\omega)$ , як функціонал, залежний від повних ферміонної  $G_A$  і бозонної  $G^{AB}$  функцій Гріна, отримано в явному вигляді при обмеженні у (14) першою ітерацією за  $\hat{J}$ :

$$(\hat{\Xi}^{-1})_{11}(\omega_n) = \frac{1}{A_{0B}} \left\{ g_{B0}^{-1}(\omega_n) [1 - Q_B(\omega_n) - N_B(\omega_n)] + \frac{1}{A_{0A}} \tilde{S}_B \right\}, \quad (15)$$

де

$$Q_B(\omega_n) = \left( \frac{\delta \Phi_V}{\delta v_{0A}} \right)^{-2} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} e^{i\omega_m 0^+} J_B(\omega_m) G_c^{0B}(\omega_m - \omega_n), \quad (16)$$

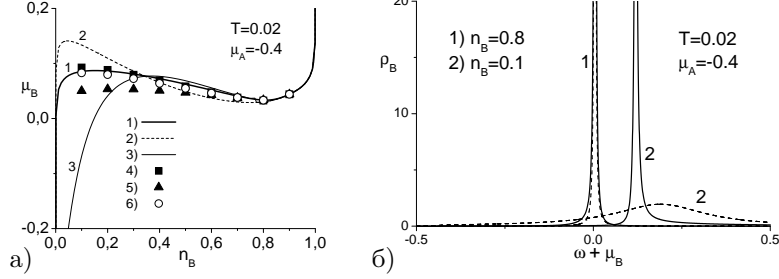


Рис. 7: а) Хімічний потенціал  $\mu_B$  як функція концентрації  $n_B$  в наближеннях МАА (2), МГНЗ (3) і самоузгодженого МГНЗ (різні варіанти вибору початкового оператора при побудові рівняння для бозонної функції Гріна: (4) і (5); симетризований варіант: (6)) у порівнянні з точним термодинамічним результатом (1). б) Ферміонна спектральна функція  $\rho_B$  в наближеннях МГНЗ (пунктирна лінія) і самоузгодженого МГНЗ (суцільна лінія) при різних концентраціях  $n_B$  (ґратка Бете;  $W_A = 1$ ,  $W_B = 0$ ).

$$N_B(\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} e^{i\omega_m 0^+} J_A(\omega_m) G_A(\omega_m) G^{AB}(\omega_m - \omega_n) \frac{1}{D}, \quad (17)$$

$$\tilde{S}_B = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_m} e^{i\omega_m 0^+} J_A(\omega_m) G_A(\omega_m). \quad (18)$$

Показано, що підходи різночасових розщеплень, а також одночасових розщеплень вищого порядку (останні застосовуються при використанні домішкової моделі Андерсона для формулювання одновузлової задачі [15]) є спрощеними варіантами схеми (14) у згаданому першому порядку. Зокрема, результат застосування методу твірного функціоналу можна звести у цьому випадку до МГНЗ після заміни у масовому операторі повних функцій Гріна незбуреними.

Подальший розв'язок задачі проведено з використанням в  $\Xi^{-1}$  повних ферміонних і бозонних функцій Гріна, що відповідає самоузгодженому варіанту теорії. При цьому для знаходження бозонної функції Гріна  $G^{AB}$ , яка у випадку  $d-f$  електронних систем визначає т. зв. гібридаційну сприйнятливість [16], запропоновано процедуру, подібну до застосованої при побудові рівнянь типу (14), та розглянуто її різні варіанти. Розрахунки у цьому підході проведено для АМХ у границі Фалікова-Кімбала (при безмежному одновузловому відштовхуванні). На основі отриманих результатів досліджено ферміонні та бозонні гілки спектру (густини станів  $\rho_B(\omega)$  і  $\rho_{AB}(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} G^{AB}(\omega + i0^+)$ ).

Шляхом порівняння з точними термодинамічними залежностями  $\mu_B(n_B)$  в границі Фалікова-Кімбала встановлено, що самоузгоджений варіант розши-



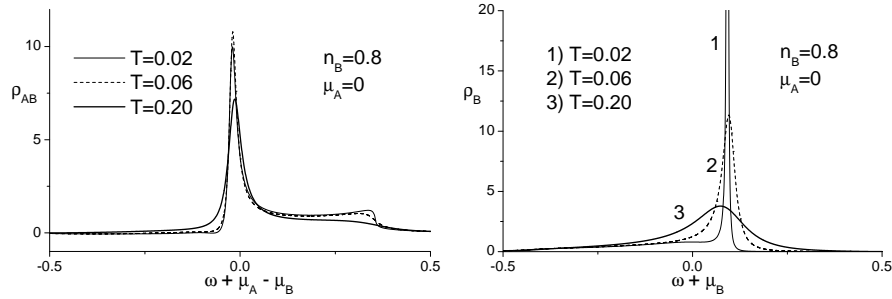


Рис. 8: Вигляд спектральних функцій  $\rho_{AB}$  і  $\rho_B$  при різних температурах (самоузгоджене наближення МГНЗ, симетризований варіант).

рює межі застосовності наближення МГНЗ. На рис. 7а наведено порівняння з результатами інших наближень та з точною кривою  $\mu_B(n_B)$ ; покращення наближення має місце при низьких значеннях  $n_B$ . При високих концентраціях, коли МГНЗ добре описує термодинаміку, самоузгоджений варіант не вносить суттєвих змін у спектр  $\rho_B(\omega)$  (рис. 7б,  $n_B = 0.8$ ). З другого боку, при малих концентраціях поправки є суттєвими і має місце звуження профілю  $\rho_B(\omega)$  і наближення його за формою до випадку високих концентрацій (рис. 7б,  $n_B = 0.1$ ).

На рис. 8 показано, що отриманий при самоузгодженому розрахунку бозонний спектр  $\rho_{AB}$  має у загальному випадку асиметричний вигляд; скінченна ширина профілю  $\rho_{AB}(\omega)$  зумовлена ефектами розсіяння. Самоузгоджена схема, на відміну від МГНЗ, дає можливість також описати ефект розмиття країв ферміонної густини станів  $\rho_B$  при підвищенні температури.

#### Основні результати та висновки

1. Новий аналітичний підхід у теорії динамічного середнього поля – узагальнене наближення Хаббарда-III (ГНЗ) – дає задовільний опис термодинамічних властивостей асиметричної моделі Хаббарда (та її границі – моделі Фалікова-Кімбала) в області високих температур та в усій області, крім малих, концентрацій рухомих частинок ( $n_A + n_B \approx 1$  при  $U \rightarrow \infty$ ).
2. Запропоновано модифікацію узагальненого наближення Хаббард-III (т. зв. МГНЗ), в рамках якої шляхом точного врахування середньопольових поправок до енергетичного спектру розширено межі застосовності підходу ГНЗ, в тому числі на область більш низьких температур.
3. Розрахунок спектральних функцій АМХ в границі Фалікова-Кімбала при  $U \rightarrow \infty$ , проведений на основі підходу МГНЗ, виявив особливості густини станів локалізованих частинок, пов'язані з її суперпозиційною структурою.

рою в зоні розшарування на фази з різними концентраціями, та зі зміною концентрації рухомих частинок  $n_A$  (від дельтаподібного піку до широкої зони – при збільшенні  $n_A$  чи хімічного потенціалу  $\mu_A$ ).

4. На основі запропонованого в роботі критерію неперервного переходу метал-діелектрик, що базується на симетрії та розбіжності незвідної частини функції Гріна частинок в момент відкриття щілини при половинному заповненні, встановлено залежність критичного значення енергії відштовхування  $U_c$  від співвідношення між параметрами переносу частинок різного сорту  $t_B/t_A$  (у всій області між границями Хаббарда і Фалікова-Кімбала).
5. Шляхом дослідження розташування країв енергетичних підзон при половинному заповненні в залежності від енергії відштовхування  $U$  встановлено, що процеси розсіяння частинок, які враховуються у підході ГНЗ, приводять до розширення підзон і тим самим до збільшення критичної енергії  $U_c$ , при якій відкривається щілина.
6. На основі методики твірного функціоналу, застосованої до ефективної одновузлової задачі в ТДСП, сформульовано послідовну ітераційну схему побудови оберненої незвідної частини ферміонної функції Гріна для АМХ у вигляді формального розкладу за степенями когерентного потенціалу  $J_\sigma$ . У першому порядку за  $J_\sigma$  процеси розсіяння на бозонних збудженнях враховуються в термінах повних функцій Гріна у однопетлевому наближенні.
7. Встановлено механізми формування кінцевої частини та масового оператора ферміонної функції Гріна. Масовий оператор у першому порядку за  $J_\sigma$  містить при відповідних спрощеннях складові, що отримуються в методі одночасових розщеплень рівнянь руху на основі домішкової моделі Андерсона; у незбуреному варіанті його форма відповідає наближенню ГНЗ.
8. В результаті розрахунків спектральних функцій АМХ, виконаних в рамках самоузгодженої схеми (яка сформульована виходячи з підходу твірного функціоналу), встановлено, що бозонна функція гібридаційного типу  $\rho_{AB}$  має асиметричний вигляд і скінченну ширину, зумовлену динамікою рухомих частинок. З другого боку, розсіяння на бозонних збудженнях приводить до ефекту розмиття країв спектральної густини станів  $\rho_B$  локалізованих частинок.

#### Список цитованої літератури

- [1] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London, Ser. A **276**, 238 (1963).
- [2] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).

- [3] J. K. Freericks, V. Zlatić, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 1333 (2003).
- [4] A. N. Kocharian, G. R. Reich, *J. Appl. Phys.* **76**, 6127 (1994).
- [5] G. Fáth, Z. Domański, R. Lemański, *Phys. Rev. B* **52**, 13910 (1995).
- [6] V. I. Anisimov, A. I. Poteryaev, M. A. Korotin, A. O. Anokhin, G. Kotliar, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 7359 (1997).
- [7] I. V. Stasyuk, *Condens. Matter Phys.* **3**, 437 (2000).
- [8] M. Potthoff, T. Herrmann, T. Wegner, W. Nolting, *phys. stat. sol. (b)* **210**, 199 (1998).
- [9] J. K. Freericks, C. Gruber, N. Macris, *Phys. Rev. B* **60**, 1617 (1999).
- [10] B. M. Letfulov, *Eur. Phys. J. B* **11**, 423 (1999).
- [11] U. Brandt, M. P. Urbanek, *Z. Phys. B* **89**, 297 (1992).
- [12] T. A. Costi, *J. Phys. C* **19**, 5665 (1986).
- [13] R. Bulla, T. A. Costi, D. Vollhardt, *Phys. Rev. B* **64**, 045103 (2001).
- [14] Y. A. Izyumov, N. I. Chaschin, D. S. Alexeev, F. Mancini, *Eur. Phys. J. B* **45**, 69 (2005).
- [15] H. O. Jeschke, G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **71**, 085103 (2005).
- [16] V. Zlatić, J. K. Freericks, R. Lemański, G. Czycholl, *Phil. Mag. B* **81**, 1443 (2001).

#### Результати дисертації опубліковано в таких роботах

1. Stasyuk I. V., Hera O. B. Green's functions of infinite- $U$  asymmetric Hubbard model: Falicov-Kimbal limit // *Condens. Matter Phys.* — 2003. — Vol. 6, no. 1. — Pp. 127–143.
2. Stasyuk I. V., Hera O. B. Densities of states of the Falicov-Kimball model off half filling in infinite dimensions // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 72, no. 4. — Pp. 045134–1–9.
3. Stasyuk I. V., Hera O. B. Mott transition in the asymmetric Hubbard model at half-filling within dynamical mean-field theory // *Eur. Phys. J. B.* — 2005. — Vol. 48, no. 3. — Pp. 339–348.
4. Stasyuk I. V., Hera O. B. Asymmetric Hubbard model within generating functional approach in dynamical mean field theory // *Condens. Matter Phys.* — 2006. — Vol. 9, no. 3. — Pp. 587–602.
5. Стасюк І. В., Гера О. Б. Асимметричная модель Хаббарда в методе производящего функционала: спектральные функции в пределе Фаликова-Кимбала // *Теоретическая и математическая физика.* — 2008. — Т. 154, № 1. — С. 164–182. (*Theoretical and Mathematical Physics.* — 2008. — Vol. 154, no. 1. — Pp. 137–152.)
6. Стасюк, І. В. Термодинаміка асиметричної моделі Хаббарда в теорії динамічного середнього поля / І.В. Стасюк, О.Б. Гера // *Наукова конференція “Сучасні проблеми квантової теорії”*, Тернопіль, Україна, 15–16 березня 2004 р. Тези доповідей. — Тернопіль: 2004. — С. 57.

7. Stasyuk, I. V. On electron states of asymmetric Hubbard model in dynamical mean-field theory / I.V. Stasyuk, O.B. Hera // 7th International Conference on Spectroscopies in Novel Superconductors, Sitges, Spain, 11–16 July, 2004. Program & Abstract Book. — Sitges, Spain: 2004. — P. P219.
8. Stasyuk, I. V. Asymmetric Hubbard model in dynamical mean-field approximation / I.V. Stasyuk, O.B. Hera // 20th General Conference of the Condensed Matter Division of the European Physical Society, Prague, Czech Republic, 19–23 July, 2004. Book of Abstracts. — Prague, Czech Republic: 2004. — P. 213.
9. Stasyuk, I. V. Thermodynamics of asymmetric Hubbard model in dynamical mean-field approach / I.V. Stasyuk, O.B. Hera // International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, Karlsruhe, Germany, 26–30 July, 2004. Program and Abstracts. — Karlsruhe, Germany: 2004. — P. 225.
10. Stasyuk, I. V. Mott transition and thermodynamic properties of the asymmetric Hubbard model / I.V. Stasyuk, O.B. Hera // International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, Vienna, Austria, 26–30 July, 2005. Program and Abstracts. — Vienna, Austria: 2005. — P. 89.
11. Stasyuk, I. V. Spectral functions of asymmetric Hubbard model in DMFT / I.V. Stasyuk, O.B. Hera // Statistical Physics 2005: Modern Problems and New Applications, Lviv, Ukraine, 28–30 August, 2005. Book of Abstracts. — Lviv: 2005. — P. 182.
12. Стасюк, І. В. Структура енергетичного спектру та термодинаміка асиметричної моделі Хаббарда / І.В. Стасюк, О.Б. Гера // V міжнародна школа-конференція “Актуальні проблеми фізики напівпровідників”, Дрогобич, Україна, 27–30 червня 2005 р. Тези доповідей. — Дрогобич: 2005. — С. 221.
13. Stasyuk, I. V. Generating functional approach to asymmetric Hubbard model / I.V. Stasyuk, O.B. Hera // International Conference in Ukraine, Statistical Physics 2006, Condensed Matter: Theory & Applications, Kharkiv, Ukraine, 12–15 September 2006. Program Abstracts. — Kharkiv: 2006. — P. 43.
14. Stasyuk, I. V. Green’s function of asymmetric Hubbard model in generating functional approach / I.V. Stasyuk, O.B. Hera // International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, Houston, Texas, USA, 13–18 May, 2007. Program and Abstracts. — Houston, USA: 2007. — P. 86.
15. Стасюк, І. В. Дослідження спектральних функцій асиметричної моделі Хаббарда наближеними аналітичними методами / І.В. Стасюк, О.Б. Гера // Міжнародна наукова конференція “Фізика конденсованих систем та прикладне матеріалознавство”, Львів, Україна, 11–13 жовтня 2007 р. Тези доповідей. — Львів: 2007. — С. 48.

**Гера О.Б. Термодинаміка та енергетичний спектр асиметричної моделі Хаббарда: ефекти розсіяння у підході динамічного середнього поля. – Рукопис.**

*Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика, Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, Львів, 2008.*

Метою даної дисертації є дослідження асиметричної моделі Хаббарда (AMX) в рамках теорії динамічного середнього поля. На основі підходу різночасових розщеплень рівнянь руху для функцій Гріна запропоновано та вдосконалено метод розв'язання одновузлової задачі AMX. В результаті сформульовано т. зв. наближення MGH3, яке описує розсіяння частинок на бозонних збудженнях екситонного ("магنونного") та дублонного типу. В рамках запропонованого підходу описано перебудову густини станів локалізованих частинок в границі Фалікова-Кімбала з безмежною одновузловою взаємодією при зміні концентрації частинок чи температури, а також при фазових розшаруваннях. При половинному заповненні описано густини станів AMX при скінченній енергії одновузлової взаємодії, і знайдено залежність критичного значення даної енергії, при якому відбувається неперервний перехід метал-діелектрик від співвідношення між параметрами переносу частинок різного сорту. Для систематизації та обґрунтування наближень, які застосовуються в теорії, запропоновано метод твірного функціоналу Каданова-Бейма для розв'язання ефективної одновузлової задачі динамічного середнього поля. В рамках цього методу досліджено бозонні спектри в границі Фалікова-Кімбала з безмежним одновузловим відштовхуванням.

**Ключові слова:** асиметрична модель Хаббарда, модель Фалікова-Кімбала, енергетичний спектр, теорія динамічного середнього поля, перехід метал-діелектрик, густина станів, твірний функціонал

**Гера О.Б. Термодинамика и энергетический спектр асимметричной модели Хаббарда: эфффекты рассеивания в подходе динамического среднего поля. – Рукопись.**

*Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика, Институт физики конденсированных систем Национальной академии наук Украины, Львов, 2008.*

Целью данной диссертации является исследование асимметричной модели Хаббарда (AMX) в рамках теории динамического среднего поля. На основе подхода разновременных расщеплений уравнений движения для функций Грина предложен и улучшен метод решения одноузловой задачи AMX. В результате сформулировано приближение MGH3, которое описывает процессы рассеяния частиц на бозонных возбуждениях екситонного ("магنونного")

и дублонного типа. В рамках предложенного подхода описана реконструкция плотности состояний локализованных частиц в пределе Фаликова-Кимбала с бесконечным одноузельным взаимодействием при изменении концентрации частиц или температуры, а также при фазовых расслоениях. При половинном заполнении описаны плотности состояний АМХ при конечной энергии одноузельного взаимодействия, и найдена зависимость критического значения данной энергии? при котором происходит непрерывный переход металл-диэлектрик от соотношения между параметрами переноса частиц разного сорта. С целью систематизации и обоснования приближений, которые использованы в теории, предложен метод производящего функционала Каданова-Бейма для решения эффективной одноузельной задачи динамического среднего поля. В рамках этого метода исследовано бозонные спектры в пределе Фаликова-Кимбала с бесконечным одноузельным отталкиванием.

**Ключевые слова:** асимметричная модель Хаббарда, модель Фаликова-Кимбала, энергетический спектр, теория динамического среднего поля, переход металл-диэлектрик, плотность состояний, производящий функционал

**Hera O.B. Thermodynamics and energy spectrum of asymmetric Hubbard model: scattering effects in dynamical mean field approach. – Manuscript.**

*Thesis on search of the scientific degree of candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.02 – theoretical physics, Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2008.*

The thesis presented is aimed on the theoretical study of asymmetric Hubbard model (AHM) within dynamical mean field theory (DMFT). To solve the single-site problem of DMFT, the equation of motion approach with different-time decoupling is used. The generalized Hubbard-III (GH3) approximation is developed for AHM. The approach gives the self-energy (irreducible part) of the single-site Green's function with contributions resulting from boson excitation of exciton ("magnon") and doublon type. GH3 is modified by improving equations for the mean-field corrections of energy levels (so-called MGH3 approximation).

The phase separation diagrams of AHM in the Falicov-Kimball limit with infinite on-site repulsion are obtained, describing regions of instability of homogeneous phase in the thermodynamic regime with fixed the chemical potential of particles of one type and the concentration of another type. In the MGH3 approach, equations of state (dependences of the chemical potentials on the particle concentrations) are obtained, and the temperature values and concentration ranges, where thermodynamic instability related to the phase separation takes place, are established.

For the first time in the mentioned above limit, the reconstruction of densities of states of localized particles at changes of particle concentrations and temperature

is described. The role of the scattering on boson excitations of magnon type in forming spectrum of localized particles is investigated. Also, the effect of the phase separation phenomena on the particle spectrum is considered. In a general case of finite repulsion  $U$ , the densities of states of AHM are investigated within Hubbard-I, alloy-analogy and GH3 approximations. The positions of the energy band edges are calculated and condition of the gap appearing in the spectrum is considered (at change of  $U$  at half-filling). Basing on analytic relations for the one-particle Green's functions and their irreducible part at zero frequency (at the Fermi level) that follows from the particle-hole symmetry, the criterium for continuous gap opening is formulated. It is found the dependence of the critical value of the on-site interaction energy for the continuous metal-insulator transition depending on a ratio of the hopping parameters of particles of different types. As a result, the crossover between the Falicov-Kimball model and the standard Hubbard model is described.

To systematize the approximations that appear in the theory, the Kadanoff-Baym generating functional approach for solving the single-site problem of the dynamical mean field theory is proposed. The iterative procedure of constructing the inverse irreducible part of the particle Green's function in a form of a formal series in powers of the coherent potential is presented. Within the generating functional approach the self-consistent generalized Hubbard-III approximation is developed. The approximation is based on taking into account the scattering processes (initially formed by nonperturbed Green's functions) by the so-called full loop contributions to the mass operator.

Using the appropriate set of nonlinear integral equations, the single-site fermion Green's function in the Falicov-Kimball limit with on-site repulsion is found. The effect of appearance of broadened tails of spectral functions of localized particles induced by the scattering processes is revealed. The procedure for calculating the boson Green's function (that corresponds to the so-called hybridization ( $f-d$ ) susceptibility) for the single-site problem of DMFT within the generating functional approach is proposed. In the mentioned limit of AHM, it is shown that the boson spectrum of exciton ("magnon") type has asymmetric form and its nonzero width is determined by the dynamics of movable particles.

**Keywords:** asymmetric Hubbard model, Falicov-Kimball model, energy spectrum, dynamical mean field theory, metal-insulator transition, density of states, generating functional.