

ІНСТИТУТ  
ФІЗИКИ  
КОНДЕНСОВАНИХ  
СИСТЕМ

ICMP-01-13U

І.В. Стасюк, В.П. Брикса

Густина електронних станів для нескінченновимірної моделі  
Хаббарда

ЛЬВІВ

УДК: 538.935

PACS: 71.10.Fd, 71.38.+i, 77.80.Bh, 63.20.Ry

**Густина електронних станів для нескінченновимірної моделі  
Хаббарда**

І. В. Стасюк, В. П. Брикса

**Анотація.** В роботі досліджується енергетичний спектр електронів в металі, для опису якого взято модель Хаббарда. Використано наближену аналітичну схему методу динамічного середнього поля. Розраховано одночастинкову функцію Гріна для різних наближень (наближення сплаву, модифікованого сплаву та узагальнене наближення Хаббард-3). Досліджено концентраційні залежності хімічного потенціалу та країв енергетичних зон, а також особливості густини електронних станів в області переходу метал-діелектрик.

**The density of electron states in Hubbard model in the limit of infinite dimensionality of a space.**

I. V. Stasyuk, V. P. Bryksa

**Abstract.** In this work the electron energy spectrum of metal described in the framework of the Hubbard model is investigated. The approximate analytical scheme of the dynamical mean field method is used. The single-particle Green's function is calculated in the various approximations (Alloy-Analogy and Modified Alloy-Analogy approaches as well as generalized Hubbard-3 approximation). The concentrational dependences of chemical potential and of the edges of energy bands as well as the peculiarities of the electron density of states in the region of the metal-insulator transition are studied.

**Подається в** Condensed Matter Physics  
**Submitted to** Condensed Matter Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 2001  
Institute for Condensed Matter Physics 2001

## Вступ

Модель Хаббарда з'явилася на початку 60-років і з того часу цій моделі присвячено дуже багато робіт. В основному вивчалися два крайні випадки:  $W \gg U$  та  $U \gg W$ , де  $U$  – кулонівський потенціал взаємодії, а  $W$  – ширина зони провідності [1]. Найбільш цікавий випадок коли  $U \sim W$ . При цьому потрібно робити відхід від теорії збурень. Така можливість з'явилася з появою методу динамічного середнього поля (ДСП), що був розвинутий на початку 90-років [2]. Цей метод є точним при безмежній розмірності простору  $d = \infty$ . І хоча процедура розрахунку одночастинкової функції Гріна у даному методі досить прозора, та отримати якийсь результат досить складно. Всі розрахунки проводять в основному числовими методами і тому важливими є аналітичні підходи до розв'язку цієї моделі. В роботі [3] було запропоновано схему для знаходження одноузлової функції Гріна, яка базується на рівняннях руху для функцій Гріна та процедурі виділення незвідних частин з функції Гріна з подальшим використанням різночасового розщеплення. За допомогою описаної вище процедури можна отримати узагальнене наближення Хаббард-3. Окремо від описаних вище підходів лежить квантовий метод Монте-Карло (КММК) (див. [2]). Хоч це є також числовий метод, але він дає найбільш повні з відомих результати. Метою даної роботи є порівняти результати отриманого узагальненого наближення Хаббард-3 з результатами інших, більш відомих апроксимацій [4], таких як Хаббард-1, наближення сплаву, наближення узагальненого сплаву, Хаббард-3 і також з результатами по КММК.

## 1. Розв'язок задачі Хаббарда за допомогою методу ДСП.

Для даної моделі можна записати гамільтоніан у представленні вторинного квантування [5]:

$$H = \sum_i H_i + \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma}, \quad (1.1)$$

де  $H_i = U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{\sigma} n_{i\sigma}$ .

Перехід до розмірності простору  $d = \infty$  в теорії ДСП вимагає переозначення параметра переносу [2, 6]:

$$t = \frac{t^*}{\sqrt{d}}. \quad (1.2)$$

У випадку  $d$ -розмірної кубічної ґратки з спектром електронів

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{2t^*}{\sqrt{d}} \sum_{\alpha=1}^d \cos k_{\alpha} a, \quad (1.3)$$

ця процедура приводить до того, що густина електронів носить гаусівський характер:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{2\sqrt{\pi t^*}} e^{-\frac{\omega^2}{4t^{*2}}}. \quad (1.4)$$

При цьому мають місце значні спрощення у виразах для діаграмних рядів [7]. Залишаються лише ті діаграми для одночастинкових функцій Гріна, у яких власноенергетичні частини носять одноузловий характер.

$$\Sigma_{ij,\sigma}(\omega) = \Sigma_{\sigma}(\omega) \delta_{ij}. \quad (1.5)$$

Це приводить до того, що фур'є-представлення для  $\Sigma$  не залежить від хвильового вектора:

$$\Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = \Sigma_{\sigma}(\omega). \quad (1.6)$$

Запишемо функцію Гріна  $G(\mathbf{k}, \omega)$  у фур'є-представлення:

$$G_{\mathbf{k}}^{\sigma}(\omega) = \sum_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} G_{ij,\sigma}^{\sigma}(\omega). \quad (1.7)$$

Вираз для функції  $G_{\mathbf{k}}^{\sigma}(\omega)$  можна записати двома способами: за Дайсоном або за Ларкіним, через власноенергетичну частину:

$$G_{\mathbf{k}}^{\sigma}(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - t_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\sigma}(\omega)} \quad (1.8)$$

$$G_{\mathbf{k}}^{\sigma}(\omega) = \frac{1}{[\Xi_{\sigma}(\omega)]^{-1} - t_{\mathbf{k}}}. \quad (1.9)$$

Щоб знайти власноенергетичну частину потрібно від  $H$  перейти до деякого ефективного гамільтоніану  $H_{\text{eff}}$  наступним чином:

$$e^{-\beta H} \rightarrow e^{-\beta H_{\text{eff}}} = e^{-\beta H_0} \quad (1.10)$$

$$\times T \exp \left\{ - \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \sum_{\sigma} J_{\sigma}(\tau - \tau') a_{\sigma}^{\dagger}(\tau) a_{\sigma}(\tau') \right\},$$

де  $H_0 = H_i$ . Тут  $J_\sigma(\omega)$  має зміст частотно залежного потенціалу (т.зв. когерентного потенціалу) для одновузлової задачі і входить у вираз для одновузлової функції Гріна наступним чином

$$G_\sigma^{(a)}(\omega) = \frac{1}{[\Xi_\sigma(\omega)]^{-1} - J_\sigma(\omega)}. \quad (1.11)$$

Зв'язок між цими трьома функціями, можна записати наступним чином:

$$G_\sigma^{(a)}(\omega) = G_{ii,\sigma}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_k G_k^\sigma(\omega). \quad (1.12)$$

Щоб отримати замкнену систему рівнянь, потрібно знайти функціональну залежність між функцією Гріна та ефективним потенціалом  $J_\sigma(\omega)$ . Цю залежність можна отримати з розв'язку одновузлової задачі з статистичним оператором  $e^{-\beta H_{\text{eff}}}$ .

## 2. Функція Гріна для ефективної одновузлової задачі.

Задача визначення функції Гріна  $G_\sigma^{(a)}(\omega)$  була переформульована в [3] наступним чином. Був введений новий гамільтоніан з допоміжними фермі-операторами  $\xi_\sigma, \xi_\sigma^+$ .

$$\tilde{H}_{\text{eff}} = H_0 + V \sum_\sigma (a_\sigma^+ \xi_\sigma + \xi_\sigma^+ a_\sigma) + H_\xi, \quad (2.1)$$

де вигляд гамільтоніана  $H_\xi$  є невідомий; в результатах фігурує лише функція Гріна, яка побудована на операторах  $\xi_\sigma, \xi_\sigma^+$ :

$$\Upsilon_\sigma(\omega) = \langle \langle \xi_\sigma | \xi_\sigma^+ \rangle \rangle_\omega^{(H_\xi)}. \quad (2.2)$$

Зв'язок між  $\tilde{H}_{\text{eff}}$  і  $H_{\text{eff}}$  можна записати у вигляді усереднення статистичного оператора, побудованого на новому ефективному гамільтоніані, по допоміжних фермі-операторах.

$$\langle \exp(-\beta \tilde{H}_{\text{eff}}) \rangle^{(H_\xi)} = \exp(-\beta H_{\text{eff}}). \quad (2.3)$$

Між функцією Гріна  $\Upsilon_\sigma(\omega)$  і когерентним потенціалом існує зв'язок [3]:

$$2\pi V^2 \Upsilon_\sigma(\omega) = J_\sigma(\omega). \quad (2.4)$$

Одновузлова задача розв'язувалась на базі гамільтоніана (2.1) в роботі [3]. Був здійснений перехід від операторів народження і знищення до представлення Хаббарда  $a_\sigma = X^{0\sigma} + \sigma X^{-\sigma,2}$ , що дало змогу діагоналізувати одновузлову частину гамільтоніана:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{\text{eff}} = & - \mu \left( \sum_\sigma X^{\sigma\sigma} + 2X^{22} \right) + UX^{22} \\ & + V \sum_\sigma [(X^{\sigma 0} + \sigma X^{2,-\sigma} \xi_\sigma + \xi_\sigma^+ (X^{0\sigma} + \sigma X^{-\sigma,2}))] + H_\xi. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Функція Гріна  $G_\sigma^{(a)}(\omega)$  записується в цьому представленні наступним чином:

$$\begin{aligned} G_\sigma^{(a)}(\omega) = & \langle \langle X^{0\sigma} | X^{\sigma 0} \rangle \rangle_\omega + \sigma \langle \langle X^{0\sigma} | X^{2,-\sigma} \rangle \rangle_\omega \\ & + \sigma \langle \langle X^{-\sigma,2} | X^{\sigma 0} \rangle \rangle_\omega + \langle \langle X^{-\sigma,2} | X^{2,-\sigma} \rangle \rangle_\omega. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Для визначення цієї функції був застосований метод рівнянь руху, побудованих шляхом диференціювання як за правим так і за лівим часовим аргументом. Розщеплення функцій Гріна вищих порядків здійснювалося в рамках схеми виділення незвідних частин функції Гріна при проектуванні на базис операторів  $(X^{0\sigma}, X^{-\sigma,2})$ . Кореляційні функції, що формують власноенергетичні частини, розраховувались за допомогою процедури різночасових розщеплень [8].

У цьому наближенні було отримано наступне співвідношення, що пов'язує власноенергетичну частину  $\Xi_\sigma(\omega)$  та когерентний потенціал  $J_\sigma(\omega)$

$$\begin{aligned} [\Xi_\sigma(\omega)]^{-1} &= (G_\sigma^{(a)}(\omega))^{-1} + J_\sigma(\omega), \\ [\Xi_\sigma(\omega)]^{-1} &= \left[ \frac{A_{0\sigma}}{\omega - \varepsilon_- - \tilde{\Omega}_\sigma(\omega)} + \frac{A_{2,-\sigma}}{\omega - \varepsilon_+ - \tilde{\Omega}_\sigma(\omega)} \right]^{-1} \\ &+ \tilde{\Omega}_\sigma(\omega), \end{aligned} \quad (2.7)$$

де

$$\begin{aligned} \varepsilon_+ &= U - \mu, \varepsilon_- = -\mu, \\ \tilde{\Omega}_\sigma(\omega) &= \Omega_\sigma(\omega) + \frac{V\varphi_\sigma}{A_{0\sigma}A_{2,-\sigma}}, \\ \Omega_\sigma(\omega) &= J_\sigma(\omega) - \frac{R_\sigma(\omega)}{A_{0\sigma}A_{2,-\sigma}}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

а

$$\begin{aligned}
R_\sigma(\omega) = & - \langle X^{\sigma\sigma} \rangle J_{-\sigma}(\omega) \\
& + \frac{1}{2} \langle X^{00} + X^{22} \rangle J_{-\sigma}(U - 2\mu - \omega) \\
& + \frac{1}{2} \langle X^{00} - X^{22} \rangle \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\omega + 2\mu - U - \omega'} \\
& \times \tanh \frac{\beta\omega'}{2} [-2\text{Im} J_{-\sigma}(-\omega' - i\varepsilon)],
\end{aligned} \tag{2.9}$$

$$A_{0\sigma} = 1 - n_\sigma, A_{2,-\sigma} = n_{-\sigma}. \tag{2.10}$$

Доданки, що входять у вираз (2.9), описують внески від процесів розсіювань, пов'язаних з перевертотом спіна електрона та за участю електронних двійок та дірок.

Параметр  $\varphi_\sigma = \langle \xi_{-\sigma} X^{-\sigma,0} \rangle + \sigma \langle X^{\sigma,2} \xi_{-\sigma}^+ \rangle$  визначає зсув електронних рівнів і знаходиться з рівняння:

$$\begin{aligned}
V\varphi_\sigma = & \frac{1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} \\
& \times \text{Im} \left( \frac{J_{-\sigma}(\omega) [A_{0,-\sigma}(\omega - \varepsilon_+) - V\varphi_{-\sigma}/A_{2\sigma}]}{(\omega - a_{-\sigma})(\omega - b_{-\sigma}) - \frac{V^2\varphi_{-\sigma}^2}{A_{0,-\sigma}A_{2\sigma}}} \right)_{\omega+i\varepsilon} \\
& - \frac{1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} \\
& \times \text{Im} \left( \frac{J_\sigma(\omega) [A_{2,\sigma}(\omega - \varepsilon_-) - V\varphi_{-\sigma}/A_{0,-\sigma}]}{(\omega - a_{-\sigma})(\omega - b_{-\sigma}) - \frac{V^2\varphi_{-\sigma}^2}{A_{0,-\sigma}A_{2\sigma}}} \right)_{\omega+i\varepsilon},
\end{aligned} \tag{2.11}$$

де

$$\begin{aligned}
a_\sigma & = -\mu + \frac{V}{A_{0\sigma}}\varphi_\sigma, \\
b_\sigma & = -\mu + U + \frac{V}{A_{2,-\sigma}}\varphi_\sigma.
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Якщо розглянути частковий випадок цього рівняння при великих

$U \rightarrow \infty$ , то можна отримати наступний результат:

$$V\varphi_\sigma = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{e^{\beta\omega} + 1} [-2\text{Im} \frac{A_{0,-\sigma} J_\sigma(\omega)}{\omega - \varepsilon_- - V\varphi_{-\sigma}/A_{0,-\sigma}}]_{\omega+i\varepsilon}. \tag{2.13}$$

Подібний результат було отримано в роботі [4].

### 3. Наближення сплаву.

В літературі описано різні апроксимаційні підходи до розрахунку функції Гріна для електронів. Вони були отримані різними способами. Порівняємо деякі з них з результатами, що отримуються в рамках описаної вище апроксимаційної схеми методу ДСП. Для наближення сплаву процеси розсіювання електронів здійснюються тільки через когерентний потенціал. Можна записати вирази для власноенергетичної частини і одновузлової функції Гріна:

$$\begin{aligned}
[\Xi_\sigma(\omega)]^{-1} & = \left[ \frac{A_{0\sigma}}{\omega - \varepsilon_- - J_\sigma(\omega)} + \frac{A_{2,-\sigma}}{\omega - \varepsilon_+ - J_\sigma(\omega)} \right]^{-1} \\
& + J_\sigma(\omega), \\
G_{ii,\sigma}^{(a)}(\omega) & = \frac{A_{0\sigma}}{\omega - \varepsilon_- - J_\sigma(\omega)} + \frac{A_{2,-\sigma}}{\omega - \varepsilon_+ - J_\sigma(\omega)}.
\end{aligned} \tag{3.1}$$

Тобто бачимо, що для схеми ДСП потрібно покласти:

$$R_\sigma(\omega) = 0, \varphi_\sigma = 0, \tilde{\Xi}_\sigma(\omega) = J_\sigma(\omega). \tag{3.2}$$

У даному випадку задачу можна розв'язати аналітично. Для цього спочатку знайдемо рівняння для визначення  $J_\sigma(\omega)$ . Запишемо вираз, яким зв'язана одновузлова функція Гріна з функцією Гріна для цілого кристалу.

$$G_{ii,\sigma}^{(a)}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{[\Xi_\sigma(\omega)]^{-1} - t_{\mathbf{k}}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{\rho(t)}{[\Xi_\sigma(\omega)]^{-1} - t}. \tag{3.3}$$

Тут ми скористалися, що  $\Xi_\sigma(\omega)$  не залежить від хвильового вектора, причому  $\rho(t)$ -густина станів в зоні. Покладемо, що густина станів носить напівеліптичний характер [2]:

$$\rho(t) = \frac{2}{\pi W^2} \sqrt{W^2 - t^2}, \tag{3.4}$$

де  $2W$ -ширина зони.

Тоді проінтегрувавши праву частину співвідношення (3.3), отримуємо наступне рівняння для знаходження  $J_\sigma(\omega)$ :

$$J_\sigma(\omega) = \frac{W^2}{4} \left[ \frac{A_{0\sigma}}{\omega - \varepsilon_- - J_\sigma(\omega)} + \frac{A_{2,-\sigma}}{\omega - \varepsilon_+ - J_\sigma(\omega)} \right]. \quad (3.5)$$

Ми отримали рівняння відносно  $J_\sigma(\omega)$  третього порядку. Зрозуміло, що залежно від співвідношення між шириною зони та кулонівським параметром взаємодії будемо отримувати або всі три розв'язки дійсні, або два комплексно спряжених та один дійсний. Тобто, залежно від співвідношення  $\frac{U}{W}$ , ми будемо спостерігати або одну зону, або дві (рис. 1,2).

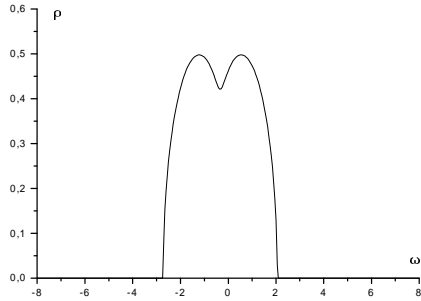


Рис. 1. Залежність густини станів електронної підсистеми для гіперкубічної ґратки від енергії  $W = 2, U = 3, n = 1$ , у наближенні сплаву.

Знайдемо залежність хімічного потенціалу від кількості електронів на один вузол ґратки. Для цього скористаємося зв'язком між функцією Гріна та концентрацією електронів.

$$n_\sigma = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{-2\text{Im}G_\sigma^a(\omega + i\varepsilon)_{\varepsilon \rightarrow 0}}{e^{\beta\omega} + 1}. \quad (3.6)$$

Слід відзначити, що гамільтоніан моделі Хаббарда не зміниться, якщо переозначити оператори народження та знищення електронів на оператори знищення та народження дірок. Тобто, модель Хаббарда володіє електрон-дірковою симетрією. Відповідне перетворення має наступний характер:

$$\mu \rightarrow U - \mu, \quad (3.7)$$

$$n \rightarrow 2 - n, \quad (3.8)$$

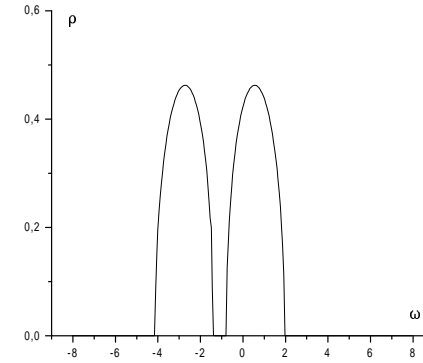


Рис. 2. Залежність густини станів електронної підсистеми для гіперкубічної ґратки від енергії  $W = 2, U = 1, n = 1$ , у наближенні сплаву.

де  $n = n_\sigma + n_{-\sigma}$ . У всіх результатах для даної моделі (зокрема, у поведінці країв зон, хімічного потенціалу) має спостерігатися дана симетрія.

Така симетрія служить також як спосіб перевірки числових розрахунків спектрів в моделі Хаббарда. Слід відзначити, що якщо в системі є додаткова взаємодія з іншою підсистемою, то ця симетрія може порушуватися [9]. З рис. 3,4 видно, що хімічний потенціал при наявності щілини в спектрі стрибає з однієї зони в іншу, що має місце при  $U > W$ . При  $U = W$  відбувається так званий перехід метал-діелектрик. У випадку коли є тільки одна зона ( $U < W$ ) стрибка  $\mu$  немає. В цьому випадку також зберігається згадана вище симетрія. При  $W \gg U$  повинно бути справедливе наближення Хартрі-Фока, що дає лінійну залежність країв зон від концентрації електронів; при зростанні відношення  $U/W$  ця залежність порушується (рис. 5).

#### 4. Наближення Хаббард-3.

В даному наближенні нехтують перенормуванням атомарних рівнів, а ефективний одновузловий потенціал записується у вигляді:

$$\tilde{\Omega}_\sigma(\omega) = J_\sigma(\omega) + J_{-\sigma}(\omega) - J_{-\sigma}(U - 2\mu - \omega). \quad (4.1)$$

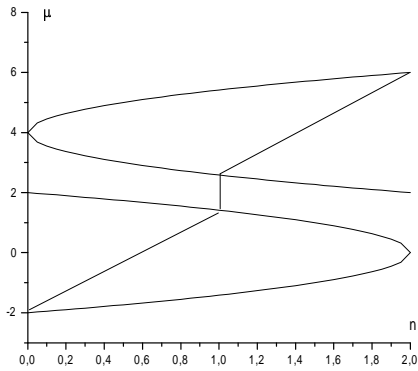


Рис. 3. Залежність хімічного потенціалу та країв зон від кількості електронів на вузол для наближення сплаву.  $W = 2, U = 4$ .

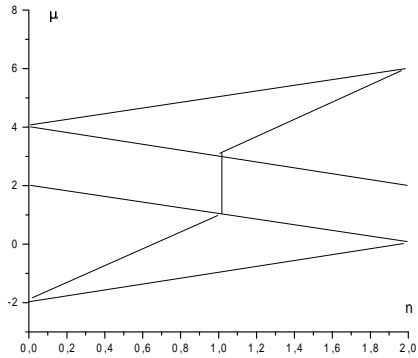


Рис. 4. Залежність хімічного потенціалу та країв зон від кількості електронів на вузол для наближення Хаббард-1.  $W = 2, U = 4$ .

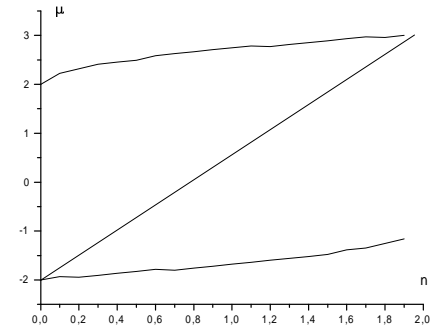


Рис. 5. Залежність хімічного потенціалу та країв зон від концентрації електронів в наближенні сплаву:  $W = 2, U = 1$ .

Тобто в методі ДСП потрібно покласти, що при половинному заповненні справедливі такі заміни:

$$\frac{\langle X^{\sigma\sigma} \rangle}{A_{0\sigma} A_{2,-\sigma}} \rightarrow 1, \frac{\langle X^{22} \rangle}{A_{0\sigma} A_{2,-\sigma}} \rightarrow 1. \quad (4.2)$$

Звичайно, що в загальному такі припущення невірні. Адже процеси розсіювання електронів значно складніші. Це і враховується в першу чергу коректуючими множниками в (2.8), що виражаються через середні від  $X$  операторів. Крім того в (2.8) є поправка на відхилення від половинного заповнення. Тому можна розвивати три схеми апроксимацій: перша полягає у наближенні (4.2), що відповідає Хаббард-3, друга базується на врахуванні коректуючих множників, але при не врахуванні поправки на відхилення від половинного заповнення, врешті у третій враховується відхилення від половинного заповнення. Якщо порівнювати даний апроксимаційний підхід з попереднім (наближення сплаву), то різниця вже з'являється на першому кроці. Динаміка появи щілини в цих двох підходах сильно відрізняється. Якщо в наближенні сплаву при поступовому збільшенні кулонівської взаємодії щілина виникає одночасно при будь-яких концентраціях електронів, в тому числі далеких від половинного заповнення, то в Хаббард-3 щілина спочатку утворюється при половинному заповненні (рис. 6).

Якщо розглядати випадок, коли ми маємо одну зону, то слід відмітити, що не виконується наближення Хартрі-Фока, границя спектру не поводить себе так, як в наближенні сплаву (рис. 7).

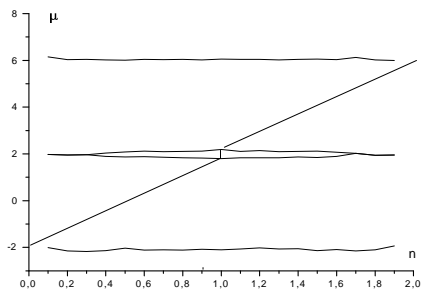


Рис. 6. Залежність хімічного потенціалу та країв зон від концентрації електронів у звичайному наближенні Хаббард-3, де справедливі заміни (4.2):  $W = 2, U = 4$ .

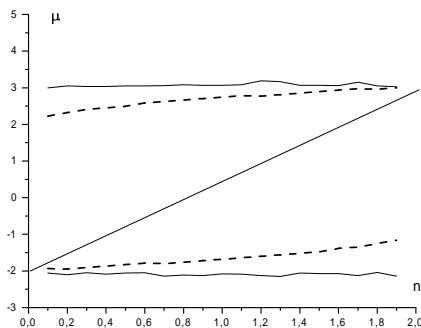


Рис. 7. Залежність хімічного потенціалу та країв зон від концентрації електронів: для звичайного наближення Хаббард-3 (суцільна лінія), для наближення сплаву (розривна лінія).

Нас цікавить область, де  $U \sim W$ . Слід сказати, що залежність густини станів від енергії може бути набагато складнішою, ніж однієї двогорбна структура. За результатами оптико-спектральних досліджень [1, 2], ця структура в проміжній області носить трьохпіковий характер. При збільшенні параметра кулонівської взаємодії центральний пік зникає. Якщо ж є відхилення від половинного заповнення, то структура сильно ускладнюється, але трьохпікова структура зберігається (рис. 8).

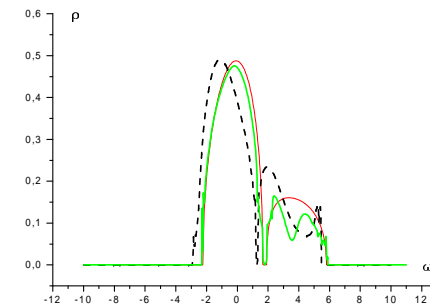


Рис. 8. Залежність густини станів від енергії для наближення типу Хаббард-3: звичайне наближення Хаббард-3 (суцільна лінія), при врахуванні коректуючих множників (розривна лінія), при врахуванні відхилення від половинного заповнення (жирна лінія):  $W = 2, U = 4, \beta = 7.2$ .

Якщо будувати залежності країв зон від концентрації для наближення Хаббард-3 з врахуванням коректуючих множників, то видно, що вони збігаються з результатами звичайного хаббардівського розв'язку за винятком поведінки зон при малих і великих електронних концентраціях (рис. 9,10).

На краях інтервалу електронних концентрацій ( $n \sim 0, n \sim 2$ ), ми спостерігаємо додаткове розщеплення. Якщо збільшити параметр кулонівської взаємодії, то дане розщеплення проявляється краще (рис. 11). Можливість появи додаткового розщеплення для густини електронних станів  $\epsilon$ , мабуть, наслідком недостатності застосованого наближення.

Якщо доповнити наближення Хаббард-3 шляхом врахування відхилення від половинного заповнення, то розщеплення залишиться, але трохи згладиться (рис. 12). В звичайному хаббардівському наближенні, коли при половинному заповненні з'являється щілина, то

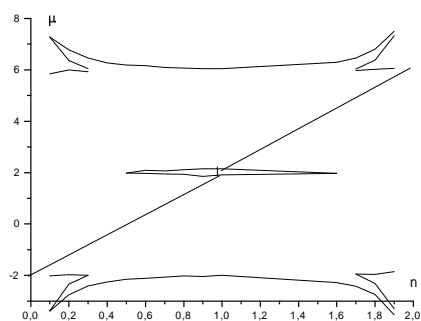


Рис. 9. Залежність країв зон та хімічного потенціалу від концентрації електронів для наближення Хаббард-3 з врахуванням коректуючих множників:  $W = 2, U = 4, \beta = 7.2$ .

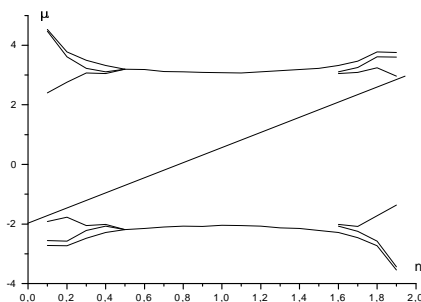


Рис. 10. Залежність країв зон та хімічного потенціалу від концентрації електронів для наближення Хаббард-3 з коректуючими множниками:  $W = 2, U = 1, \beta = 7.2$ .

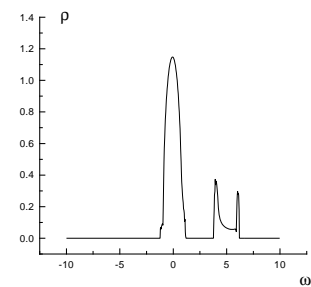
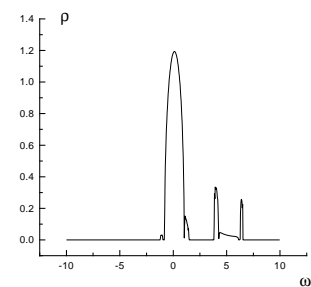
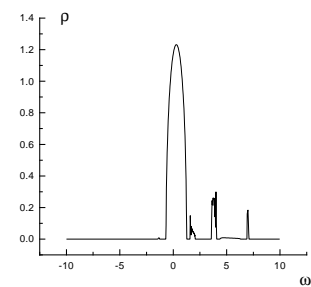


Рис. 11. Густина електронних станів для наближення Хаббард-3 з коректуючими множниками:  $W = 1, U = 7, \beta = 7.2$ , для, відповідно,  $n = 0, 1; 0, 2; 0, 3$ .



для малих концентрацій зони дотикаються, тоді як при врахуванні коректуючих множників зони вже не будуть дотикатися (рис. 12).

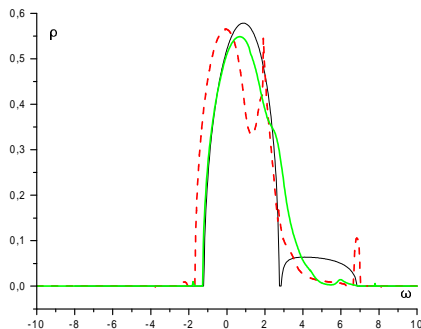


Рис. 12. Залежність густини станів від енергії для різних апроксимацій: Хаббард-3 (суцільна лінія), Хаббард-3 з коректуючими множниками (рвана лінія), Хаббард-3 з поправкою на відхилення від половинного заповнення (потовщена лінія):  $W = 2, U = 4, n = 0.2, \beta = 7.2$ .

Якщо розглядати випадок половинного заповнення, то ситуація спрощується. Останній доданок в (2.8) зникає. Щодо густини станів в області  $U \sim W$ , то видно, що її поведінка значно складніша, ніж дає наближення сплаву (рис. 13 – 19). З наведених рисунків видно, що до того моменту коли густина станів буде мати три піки, що узгоджується з КММК, спочатку на густині станів виникає область менших густин, що має характер псевдощілини.

## 5. Наближення модифікованого сплаву.

На відміну від наближення Хаббард-3, дане наближення враховує перенормування атомарних рівнів. При цьому слід покласти:

$$R_\sigma = 0, \tilde{\Omega}_\sigma(\omega) = J_\sigma(\omega) + \frac{V\varphi_\sigma}{A_{0\sigma}A_{2,-\sigma}}. \quad (5.1)$$

Якщо проводити кількісну оцінку, то можна скористатися припущенням, що  $U \rightarrow \infty$  і тоді спробувати розв'язати рівняння для  $\varphi_\sigma$ , яке було отримане в попередній частині. Якщо припустити, що перенормування атомарних рівнів мало впливає на когерентний потенціал розсіювання електронів, то для випадку абсолютного нуля температури, взявши когерентний потенціал з розв'язку наближення

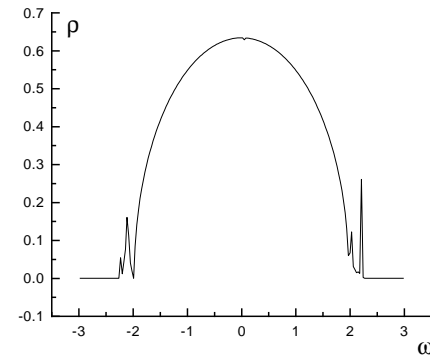


Рис. 13. Залежність густини електронних станів від енергії для наближення Хаббард-3 з коректуючими множниками при  $n = 1; W = 2; U = 1; \beta = 7.2$

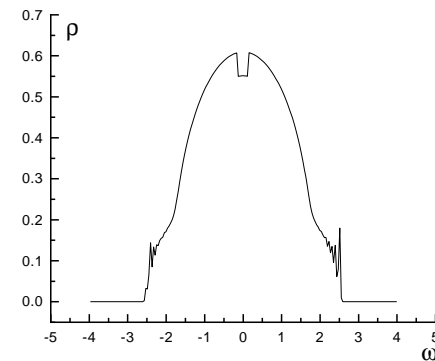


Рис. 14. Залежність густини електронних станів від енергії для наближення Хаббард-3 з коректуючими множниками при  $n = 1; W = 2; U = 1, 2; \beta = 7.2$

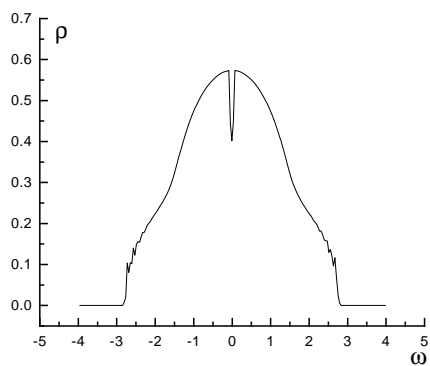


Рис. 15. Залежність густини електронних станів від енергії для наближення Хаббард-3 з коректуючими множниками при  $n = 1$ ;  $W = 2$ ;  $U = 1, 5$ ;  $\beta = 7.2$

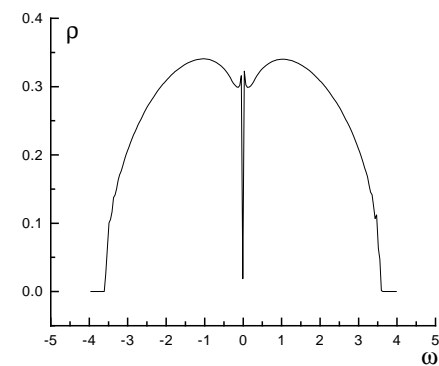


Рис. 17. Залежність густини електронних станів від енергії для наближення Хаббард-3 з коректуючими множниками при  $n = 1$ ;  $W = 2$ ;  $U = 3, 1$ ;  $\beta = 7.2$

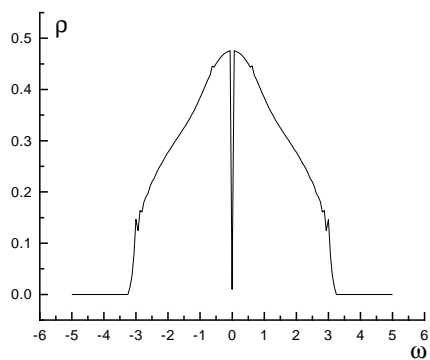


Рис. 16. Залежність густини електронних станів від енергії для наближення Хаббард-3 з коректуючими множниками при  $n = 1$ ;  $W = 2$ ;  $U = 2, 8$ ;  $\beta = 7.2$

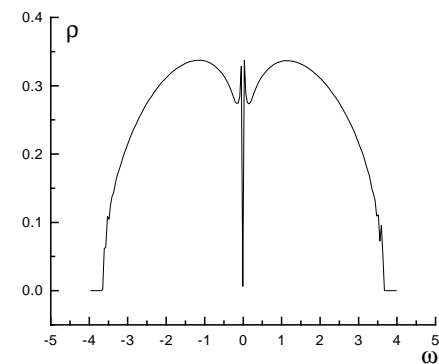


Рис. 18. Залежність густини електронних станів від енергії для наближення Хаббард-3 з коректуючими множниками при  $n = 1$ ;  $W = 2$ ;  $U = 3, 2$ ;  $\beta = 7.2$

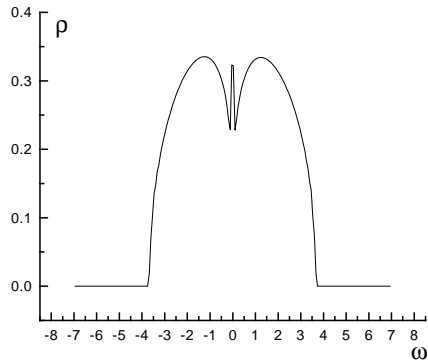


Рис. 19. Залежність густини електронних станів від енергії для наближення Хаббард-3 з коректуючими множниками при  $n = 1$ ;  $W = 2$ ;  $U = 3, 3$ ;  $\beta = 7.2$

сплаву, можна провести інтегрування та розрахувати зсув атомарних рівнів. Якщо ми маємо справу з температурами відмінними від нуля, то явні аналітичні вирази отримати важко.

Якщо проводити аналіз нових ефектів поведінки електронів, то видно (рис. 20), що в основному перенормується той атомарний рівень, де густина електронів менша. Також при такому перенормуванні відбувається деякий перерозподіл густини електронних станів (рис. 21).

## Висновки

Модель Хаббарда є дуже проста за своїм виглядом, але поряд з тим аналітичний розв'язок її є досить складною математичною задачею. Тому існує багато різних наближень [4]: наближення сплаву, наближення узагальненого сплаву, наближення Хаббард-1, наближення Хаббард-3. З кожним роком з'являється все більше і більше різних шляхів до розв'язку моделі Хаббарда, наприклад, квантовий метод Монте-Карло [2]. В даній роботі використана наближенні аналітичні розв'язки в рамках схеми ДСП, в рамках якого враховується перенормування атомарних рівнів та більш складні процеси розсіювання електронів. На основі отриманого розв'язку числовим способом проведено порівняння різних відомих апроксимаційних підходів. Виявлено ряд нових ефектів, які могли би проявлятися шляхом спо-

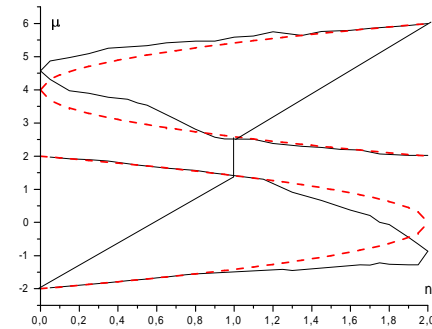


Рис. 20. Залежність країв зон та хімічного потенціалу від енергії для наближення узагальненого сплаву (суцільна лінія), та для наближення сплаву (розривна лінія):  $W = 2$ ,  $U = 4$ ,  $\beta = 7.2$ .

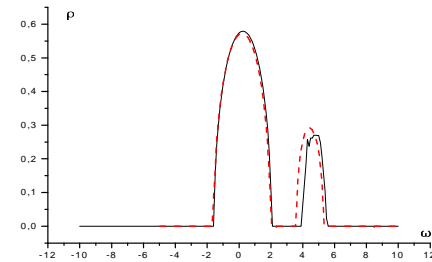


Рис. 21. Залежність густини станів від енергії для наближення узагальненого сплаву (суцільна лінія), та для наближення сплаву (розривна лінія):  $W = 2$ ,  $U = 4$ ,  $\beta = 7.2$ ,  $n = 0.4$ .

стережень: неоднорідність по концентрації електронів появи щілини при переході метал-діелектрик, додаткове розщеплення зон при малих та великих концентраціях електронів. Показано, що густина в області  $U \sim W$  носить трьохпіковий характер, що узгоджується з результатами отриманими квантовим Монте-Карло [2]. При менших значеннях відношення  $U/W$  виявлено в цій же області можливість зародження псевдощілини. Зроблено аналіз впливу перенормування енергетичних рівнів, що узгоджується з роботою [4]. Показано що для узагальненого наближення Хаббард-3 краї зон слабо залежать від концентрації електронів, що не збігається з результатами наближень сплаву та Хаббард-1. Не проведено аналіз ефектів, які можуть спостерігатися коли одночасно враховувати ефекти перенормування рівнів та ефекти розсіювання електронів.

## Література

1. Изюмов Ю.А. УФН, 1995, Том 165, № 4, С. 403-427.
2. Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rosenberg M. J. Rev. Mod. Phys., 1996, Vol. 68, p. 13.
3. Stasyuk I.V. Condensed Matter Physics, 2000, Vol. 3, №. 2(22), p. 437-456.
4. Potthoff M., Herrmann T., Wegner T., Nolting W. Phys. Stat. Sol. (b), 1998, Vol. 210, p. 199.
5. Hubbard J. Proc. Roy. Soc. A., 1963, Vol. 276, p. 238
6. Metzner W., Vollhardt D. Phys. Rev. B., 1989, Vol. 74, p. 507.
7. Metzner W. Phys. Rev. B., 1991, Vol. 43, p. 8549.
8. Плакида Н.М. Метод двухвременных функций Грина в теории ангармонических кристаллов. — В кн.: Статистическая физика и квантовая теория поля, под. ред. Н.Н. Боголюбова. М: Наука, 1973, С. 205–240.
9. I.V. Stasyuk, A.M. Shvaika J. Phys. Studies Vol. 3, № 2 (1999), p. 177-183.

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Ігор Васильович Стасюк  
Вадим Петрович Брикса

ГУСТИНА ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ ДЛЯ НЕСКІНЧЕННОВИМІРНОЇ  
МОДЕЛІ ХАББАРДА

Роботу отримано 13 вересня 2001 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром ІФКС НАН України

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені