ОПИСАНИЕ СИСТЕМ С СИЛЬНЫМИ ЭЛЕКТРОННЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ НА ПРИМЕРЕ МОДЕЛИ ХАББАРДА

М.М. Коршунов, С.Г. Овчинников*

В данной работе развивается общий подход к решению модельных систем, описывающих эффекты сильных электронных корреляций. Для демонстрации этого подхода мы использовали его на примере модели Хаббарда.

В последние годы все больше внимания уделяется исследованию и описанию систем с сильными электронными корреляциями (СЭК). В основном этот интерес обусловлен тем, что феномен высокотемпературной сверхпроводимости не может быть адекватно описан без учета эффектов сильных корреляций. Также проблема СЭК имеет общенаучный интерес: существующая зонная теория дает неправильное описание для таких систем.

В данной работе развивается общий подход к решению модельных систем, описывающих эффекты сильных электронных корреляций.

Одним из наиболее элегантных методов исследования системы является метод функций Грина. Используя гамильтониан и коммутационные соотношения для входящих в него операторов, мы находим функцию Грина. Полюсами этой функции определяется энергетический спектр системы. Затем, используя спектральную теорему, мы получаем уравнения самосогласования на средние значения операторов, входящих в функцию Грина. Решив эти уравнения, мы находим спектр системы.

Пусть нам дан гамильтониан $H = H_0 + H_{\text{int}}$, записанный в операторах Хаббарда в базисе корневых векторов. Здесь H_0 обозначает линейную по базисным операторам Хаббарда часть, а H_{int} - все остальное. Оператор Хаббарда, или Х-операторы, определяется как $X_f^{pq} \equiv |p\rangle\langle q|$, где $|p\rangle$ и $|q\rangle$ - вектора состояний на узле *f*. Вследствие своей структуры эти операторы подчиняются более сложным коммутационным соотношениям, чем обычные операторы рождения и уничтожения. Например, если состояния $|p\rangle$, $|q\rangle$, $|n\rangle$ и $|m\rangle$ нормированы на единицу, то коммутатор двух Х-операторов имеет следующий вид:

$$[X_f^{pq}, X_g^{nm}]_{\pm} = \delta_{f,g}\left(\delta_{q,n} X_f^{pm} \pm \delta_{p,m} X_f^{nq}\right),$$

где $\delta_{a,b}$ - символ Кронекера.

Оператор X_f^{pq} называется фермиевским, если состояния *p* и *q* отличаются на нечетное число частиц со спином 1/2, иначе оператор называется бозевским. На самом деле, конечно, корректно было бы назвать эти операторы квази-фермиевскими и квази- бозевскими соответственно, так как они относятся к квазичастичным процессам, но, поскольку в дальнейшей работе мы рассматриваем только квазичастичные переходы, то используем сокращенные названия.

Также, следуя Зайцеву [1], введем корневые вектора α_i следующим образом: $(pq) \to \alpha_i \to i$. При таком определении устанавливается взаимно-однозначное соответствие между X_f^{pq} и X_f^i: $X_f^{pq} = X_f^{(pq)\to\alpha_i\to i} = X_f^i$.

Рассмотрим H_{int}, поскольку рассмотрение H_0, линейного по базисным операторам, является тривиальной задачей. Предположим, что гамильтониан H_{int} может быть представлен в виде суммы двух частей: $H_{quadratic}$ - квадратичной по фермиевским базисным операторам X_f^n и $H_{non-quadratic}$ - неквадратичной части. Во введенных обозначениях $H_{quadratic}$ имеет вид:

$$H_{quadratic} = \sum_{<i,j>,\sigma} \sum_{m,n} \gamma_{ij,\sigma}(m,n)\, \overset{+}{X}{}_{i\sigma}^{m}\, X_{j\sigma}^{n}, \tag{1}$$

где индексы *m* и *n* нумеруют корневые вектора. Также, для удобства работы в дальнейшем, введена явная зависимость операторов от спина σ. Коэффициенты $\gamma_{ij,\sigma}(m,n)$ являются с-числами и в большинстве случаев могут быть выражены следующим образом: $\gamma_{ij,\sigma}(m,n) = t_{ij}^{mn} \cdot \Gamma_{i\sigma}(m) \cdot \Gamma_{j\sigma}(n)$, где t_{fg}^{mn} - интегралы перескока между узлами f и g, а $\Gamma_{f\sigma}(m)$ - параметры перехода от представления X-операторов к представлению одноэлектронных операторов уничтожения на узле f со спином σ,

$$a_{f\sigma} = \sum_m \Gamma_{f\sigma}(m)\, X_{f\sigma}^{m}, \tag{2}$$

Уравнения движения можно представить в следующей форме:

$$i\dot{X}_{f\sigma}^{p} = \left[X_{f\sigma}^{p}, H_0 + H_{quadratic} + H_{non-quadratic}\right] = \Omega_p X_{f\sigma}^{p} + L_{f\sigma}^{p}, \tag{3}$$

где $L_{f\sigma}^{p} = L_{f\sigma}^{p}(quadratic) + L_{f\sigma}^{p}(non-quadratic)$, $L_{f\sigma}^{p}(quadratic) \equiv [X_{f\sigma}^{p}, H_{quadratic}]$, $L_{f\sigma}^{p}(non-quadratic) \equiv [X_{f\sigma}^{p}, H_{non-quadratic}]$ и $\Omega_p \equiv [X_{f\sigma}^{p}, H_0]$ - энергии одноэлектронных возбуждений.

Учитывая (1), а также тождество $[A,BC] \equiv \{A,B\}C - B\{A,C\}$, можно сразу выписать выражение для $L_{f\sigma}^{p}(quadratic)$:

$$L_{f\sigma}^{p}(quadratic) = \sum_{g,\sigma'}\sum_{m,n} \gamma_{fg,\sigma'}(m,n)\left(E_f^{\sigma\sigma'}(p,m) X_{g\sigma'}^{n} - \overset{+}{X}{}_{g\sigma'}^{m} D_f^{\sigma\sigma'}(p,n)\right), \tag{4}$$

где $E_f^{\sigma\sigma'}(p,m) \equiv \left\{X_{f\sigma}^{p}, \overset{+}{X}{}_{f\sigma'}^{m}\right\}$ - нейтральный бозон, а $D_f^{\sigma\sigma'}(p,n) \equiv \left\{X_{f\sigma}^{p}, X_{f\sigma'}^{n}\right\}$ - однократно заряженный бозон.

Не составляет труда записать это выражение в импульсном пространстве

$$L_{k\sigma}^{p}(quadratic) = \sum_{q,\sigma'}\sum_{m,n} \gamma_{-q,\sigma'}(m,n)\left(E_{k-q}^{\sigma\sigma'}(p,m) X_{q\sigma'}^{n} - \overset{+}{X}{}_{q\sigma'}^{m} D_{k+q}^{\sigma\sigma'}(p,n)\right). \tag{5}$$

Для расцепления уравнений на функции Грина воспользуемся методом неприводимых операторов [2], заключающимся в линеаризации уравнений движения в обобщенном приближении Хартри - Фока (ОПХФ).

Во введенных обозначениях сформулируем этот метод следующим образом. Введем неприводимый оператор:

$$L_{k\sigma}^{p} = \overline{L_{k\sigma}^{p}} + \sum_h C_{k\sigma}(p,h) X_{k\sigma}^{h} + \sum_h \Delta_{k\sigma}(p,h)\, \overset{+}{X}{}_{-k\bar{\sigma}}^{h}, \tag{6}$$

где $C_{k\sigma}(p,h) = \dfrac{\left\langle\left\{L_{k\sigma}^{p}, \overset{+}{X}{}_{k\sigma}^{h}\right\}\right\rangle}{\left\langle\left\{X_{k\sigma}^{h}, \overset{+}{X}{}_{k\sigma}^{h}\right\}\right\rangle}$, $\Delta_{k\sigma}(p,h) = \dfrac{\left\langle\left\{L_{k\sigma}^{p}, X_{-k\bar{\sigma}}^{h}\right\}\right\rangle}{\left\langle\left\{\overset{+}{X}{}_{-k\bar{\sigma}}^{h}, X_{-k,\bar{\sigma}}^{h}\right\}\right\rangle}$. При этом $\Delta_{k\sigma}$ является ни чем иным, как сверхпроводящим параметром порядка, а $C_{k\sigma}$ - перенормировкой химпотенциала.

Для $L_{k\sigma}^{p}(quadratic)$ мы будем использовать в дальнейшем приближение Хаббард-1, заключающееся в расцеплении средних на разных узлах. Мы можем сразу выписать $C_{k\sigma}(p,h)$:

$$C_{k\sigma}(p,h) = \frac{\sum_{q,\sigma'}\sum_{m,n} \gamma_{-q,\sigma'}(m,n)\left\langle E_{k-q}^{\sigma\sigma'}(p,m)\right\rangle\left\langle E_{q-k}^{\sigma'\sigma}(n,h)\right\rangle}{\left\langle E_{k=0}^{\sigma\sigma}(h,h)\right\rangle}, \tag{7}$$

Член $\Delta_{k\sigma}(p,h)$ запишем в общем виде:

$$\Delta_{k\sigma}(p,h)=\frac{1}{\left\langle E^{\bar\sigma\bar\sigma}_{k=0}(h,h)\right\rangle}\sum_{q,\sigma'}\sum_{m,n}\gamma_{-q,\sigma'}(m,n)\Big\langle E^{\sigma\sigma'}_{k-q}(p,m)D^{\sigma'\bar\sigma}_{q-k}(n,h)-E^{\bar\sigma\sigma'}_{-q-k}(h,m)D^{\sigma\sigma'}_{k+q}(p,n)-$$
$$-[E^{\sigma\sigma'}_{k-q}(p,m),X^{h}_{-k\bar\sigma}]X^{n}_{q\sigma'}-X^{n}_{q\sigma'}[D^{\sigma\sigma'}_{k+q}(p,n),X^{h}_{-k\bar\sigma}]\Big\rangle. \qquad (8)$$

В рамках ОПХФ мы должны положить равным нулю неприводимый оператор $\overline{L^{p}_{k\sigma}}$. Уравнения движения примут следующий вид:

$$\begin{cases} i\dot{X}^{p}_{k\sigma}=\sum_h\left(\Omega_p\delta_{p,h}+C_{k\sigma}(p,h)\right)X^{h}_{k\sigma}+\sum_h\Delta_{k\sigma}(p,h)\overset{+}{X}{}^{h}_{-k\bar\sigma} \\ i\left(\dot{\overset{+}{X}}{}^{p}_{-k\bar\sigma}\right)=-\sum_h\left(\Omega_p\delta_{p,h}+C^{+}_{-k\bar\sigma}(p,h)\right)\overset{+}{X}{}^{h}_{-k\bar\sigma}-\sum_h\Delta^{+}_{-k\bar\sigma}(p,h)X^{h}_{k\sigma}. \end{cases} \qquad (9)$$

Теперь рассмотрим получение функций Грина на основе этих уравнений. Для пары операторов $A(t)$ и $B(t')$ при $t=t'$ уравнения на функцию Грина имеют вид [3]:

$$E\langle\langle A\,|\,B\rangle\rangle_E=\langle[A,B(0)]_\pm\rangle+\langle\langle i\dot{A}\,|\,B\rangle\rangle_E. \qquad (10)$$

Поскольку далее мы всегда будем работать с функциями Грина в энергетическом представлении, то индекс E у функции Грина $\langle\langle\ldots|\ldots\rangle\rangle_E$ будем опускать.

Для уравнений движения в ОПХФ (9) легко выписать систему уравнений (10), притом, как видно, она является замкнутой:

$$\begin{cases}\sum_h\left((E-\Omega_p)\delta_{p,h}-C_{k\sigma}(p,h)\right)\left\langle\left\langle X^{h}_{k\sigma}\,\middle|\,\overset{+}{X}{}^{l}_{k\sigma}\right\rangle\right\rangle-\sum_h\Delta_{k\sigma}(p,h)\left\langle\left\langle \overset{+}{X}{}^{h}_{-k\bar\sigma}\,\middle|\,\overset{+}{X}{}^{l}_{k\sigma}\right\rangle\right\rangle=\left\langle\left\{X^{p}_{k\sigma},\overset{+}{X}{}^{l}_{k\sigma}\right\}\right\rangle \\ \sum_h\left((E+\Omega_p)\delta_{p,h}+C^{+}_{-k\bar\sigma}(p,h)\right)\left\langle\left\langle \overset{+}{X}{}^{h}_{-k\bar\sigma}\,\middle|\,\overset{+}{X}{}^{l}_{k\sigma}\right\rangle\right\rangle+\sum_h\Delta^{+}_{-k\bar\sigma}(p,h)\left\langle\left\langle X^{h}_{k\sigma}\,\middle|\,\overset{+}{X}{}^{l}_{k\sigma}\right\rangle\right\rangle=0.\end{cases}$$

Фактически это уравнения на матричные функции Грина $\hat{G}_{k\sigma}=\left\langle\left\langle X^{h}_{k\sigma}\,\middle|\,\overset{+}{X}{}^{l}_{k\sigma}\right\rangle\right\rangle$ и Горькова $\hat{F}^{+}_{k\sigma}=\left\langle\left\langle \overset{+}{X}{}^{h}_{-k\bar\sigma}\,\middle|\,\overset{+}{X}{}^{l}_{k\sigma}\right\rangle\right\rangle$.

Вводя матрицы

$\hat{\mathfrak{R}}_{k\sigma}=\left(\Omega_p\delta_{p,h}+C_{k\sigma}(p,h)\right)$,

$\hat{\Delta}_{k\sigma}=\Delta_{k\sigma}(p,h)$,

$\hat{E}^{\sigma\sigma}_{k}=E^{\sigma\sigma}_{k}(p,h)=\sqrt{N}\left\{X^{p}_{k\sigma},\overset{+}{X}{}^{l}_{k\sigma}\right\}$

и решая уравнения, получаем выражения для $\hat{G}_{k\sigma}$ и $\hat{F}^{+}_{k\sigma}$:

$$\begin{cases} \hat{F}^{+}_{k\sigma} = -\left(E\hat{I} + \left(\hat{\Re}_{-k\bar{\sigma}}\right)^{+}\right)^{-1} \hat{\Delta}^{+}_{-k\bar{\sigma}} \hat{G}_{k\sigma} \\ \hat{G}_{k\sigma} = \left(E\hat{I} - \hat{\Re}_{k\sigma} + \hat{\Delta}_{k\sigma}\left(E\hat{I} + \left(\hat{\Re}_{-k\bar{\sigma}}\right)^{+}\right)^{-1} \hat{\Delta}^{+}_{-k\bar{\sigma}}\right)^{-1} \dfrac{\left\langle \hat{E}^{\sigma\sigma}_{k} \right\rangle}{\sqrt{N}}, \end{cases} \tag{11}$$

где $\hat{I}$ - единичная матрица, N - число векторов в k-пространстве.

Таким образом, с помощью приведенной выше схемы мы можем для системы с любым числом базисных корневых векторов и, следовательно, с любым числом уровней найти в приближении ОПХФ матричные функции Грина и Горькова. Но, несмотря на простоту выражений (11), за ними стоит большая вычислительная работа. Тем не менее, используя выражения (11) в совокупности с приближением Хаббард-1, можно получить основные низкоэнергетические явления в системах с СЭК.

Теперь перейдем к рассмотрению конкретной модели - модели Хаббарда (12). Она является наиболее наглядной и простой моделью, описывающей системы с СЭК. Вообще, эффекты сильных корреляций не пренебрежимо малы, когда U становится порядка ширины зоны свободных электронов W. При соотношении же U/W>>1 эффекты СЭК приобретают значительную роль. Это так называемый режим сильной связи. Принято считать, что именно этот предел реализуется в ВТСП-соединениях, содержащих CuO_2-слой. Предположение о том, что основой для понимания процессов в CuO_2 - плоскости в перовскитных структурах может быть однозонная модель Хаббарда [4], возникло еще в 1987г. [5,6]. Гамильтониан этой модели записывается следующим образом:

$$H = \sum_{f,\sigma}\left((\varepsilon - \mu)n_{f,\sigma} + \frac{U}{2} n_{f,\sigma} n_{f,\bar{\sigma}}\right) + t\sum_{f,\delta,\sigma} a^{+}_{f,\sigma} a_{f+\delta,\sigma}. \tag{12}$$

Здесь U - кулоновское отталкивание на одном узле; t - интеграл перескока между ближайшими соседями f и $f+\delta$, где δ - вектор, их соединяющий; ε - энергия одноэлектронных возбуждений; μ - химпотенциал; $a^{+}_{f,\sigma}$ и $a_{f,\sigma}$ - операторы рождения и уничтожения соответственно, $n_{f,\sigma} = a^{+}_{f,\sigma} a_{f,\sigma}$ - оператор числа частиц со спином σ на узле f.

Сначала перепишем гамильтониан модель Хаббарда (12) в представлении Х-операторов. Одноэлектронные операторы рождения $a^{+}_{f\sigma}$ и уничтожения $a_{f\sigma}$ связаны с операторами Хаббарда следующими соотношениями:

$$\begin{cases} a^{+}_{f\sigma} = X^{\sigma 0}_{f} + 2\sigma X^{S\bar{\sigma}}_{f} \\ a_{f\sigma} = X^{0\sigma}_{f} + 2\sigma X^{\bar{\sigma}S}_{f}, \end{cases}$$

где индекс 0 обозначает вакуум, S - двухчастичный синглет, σ, $\bar{\sigma}$ - одночастичные состояния. При этом оператор числа частиц также выражается через операторы Хаббарда:

$$n_{f\sigma} = a^{+}_{f\sigma} a_{f\sigma} = X^{\sigma\sigma}_{f} + X^{SS}_{f}.$$

Не составляет труда записать гамильтониан во введенных таким образом операторах:

$$H = \sum_{f,\sigma}\left((\varepsilon-\mu)\left(X^{\sigma\sigma}_{f} + X^{SS}_{f}\right) + \frac{U}{2} X^{SS}_{f}\right) + t\sum_{f,g,\sigma}\left(X^{\sigma 0}_{f} + 2\sigma X^{S\bar{\sigma}}_{f}\right)\left(X^{0\sigma}_{g} + 2\sigma X^{\bar{\sigma}S}_{g}\right). \tag{13}$$

Этот гамильтониан описывает перескоки, представленные на рис. 1. Введем базис корневых векторов $\{\alpha_0, \alpha_1\}$ следующим образом:

$$(0\sigma) \to \alpha_0 \to 0,$$
$$(\bar{\sigma} S) \to \alpha_1 \to 1.$$

В этом случае базисные операторы Хаббарда примут вид:

$$\left\{X^{0\sigma}_{i}, X^{\bar{\sigma}S}_{i}\right\} \Rightarrow \left\{X^{0}_{i}, X^{1}_{i}\right\}.$$

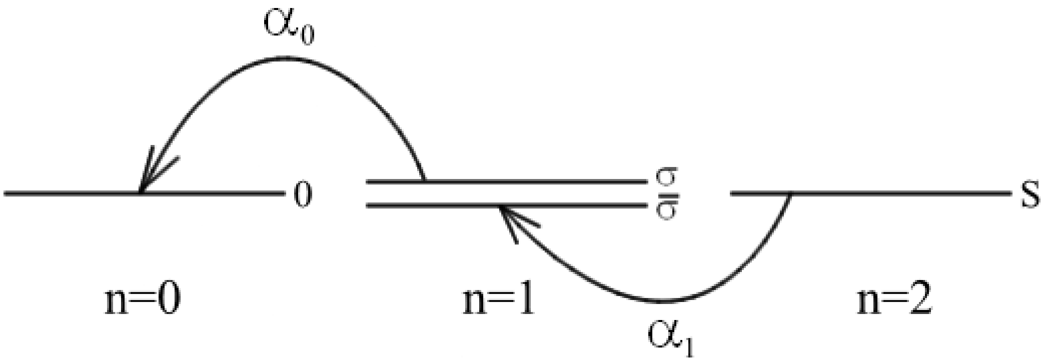

Рис. 1. Перескоки между состояниями в модели Хаббарда (показаны перескоки только для одной проекции спина)

Условие полноты базиса: $X_f^{00}+\sum_\sigma X_f^{\sigma\sigma}+X_f^{SS}=1$.

Гамильтониан модели Хаббарда может быть полностью представлен в виде $H=H_0+H_{quadratic}$. В этом случае справедлива формула (3) для уравнений движения

$$i\dot{X}_{f\sigma}^{p}=\left[X_{f\sigma}^{p},H_0+H_{quadratic}\right]=\Omega_p X_{f\sigma}^{p}+L_{f\sigma}^{p}(quadratic),$$

где $\Omega_p=\begin{pmatrix}\varepsilon-\mu\\ U+(\varepsilon-\mu)\end{pmatrix}$ - энергии невзаимодействующих частиц.

Коэффициенты $\gamma_{ij,\sigma}(m,n)$ даются матрицей:

n \ m	0	1
0	t	$2\sigma t$
1	$2\sigma t$	t

В дальнейшем изложении для матриц мы будем всегда использовать следующие обозначения: у матрицы $M(p,h)$ индекс p нумерует *столбцы*, а индекс h – *строки*.

Коммутатор $L_{f\sigma}^{p}(quadratic)$ имеет вид (4):

$$L_{f\sigma}^{p}(quadratic)=\sum_{g,\sigma'}\sum_{m,n}\gamma_{fg,\sigma'}(m,n)\left(E_f^{\sigma\sigma'}(p,m)X_{g\sigma'}^{n}-\overset{+}{X}{}_{g\sigma'}^{m}D_f^{\sigma\sigma'}(p,n)\right),$$

где нейтральный и однократно заряженный бозоны $E_f^{\sigma\sigma'}(p,m)$ и $D_f^{\sigma\sigma'}(p,n)$ представлены следующими матрицами:

$$E_f^{\sigma\sigma'}(p,m)\equiv\left\{X_{f\sigma}^{p},\overset{+}{X}{}_{f\sigma'}^{m}\right\}=\begin{pmatrix}\delta_{\sigma\sigma'}\left(X_f^{00}+X_f^{\sigma\sigma}\right)+\delta_{\bar\sigma\sigma'}X_f^{\bar\sigma\sigma} & 0\\ 0 & \delta_{\sigma\sigma'}\left(X_f^{SS}+X_f^{\bar\sigma\bar\sigma}\right)+\delta_{\bar\sigma\sigma'}X_f^{\bar\sigma\sigma}\end{pmatrix},$$

$$D_f^{\sigma\sigma'}(p,n)\equiv\left\{X_{f\sigma}^{p},X_{f\sigma'}^{n}\right\}=\begin{pmatrix}0 & \delta_{\bar\sigma\sigma'}X_f^{0S}\\ \delta_{\bar\sigma\sigma'}X_f^{0S} & 0\end{pmatrix}.$$

В приближении Хаббард-1 имеем $C_{k\sigma}(p,h)$ вида (7):

$$C_{k\sigma}(p,h)=\frac{\sum\limits_{q,\sigma'}\sum\limits_{m,n}\gamma_{-q,\sigma'}(m,n)\left\langle E_{k-q}^{\sigma\sigma'}(p,m)\right\rangle\left\langle E_{q-k}^{\sigma'\sigma}(n,h)\right\rangle}{\left\langle E_{k=0}^{\sigma\sigma}(h,h)\right\rangle}.$$

Член $\Delta_{k\sigma}(p,h)$, согласно (8), равен

$$\Delta_{k\sigma}(p,h)=\sum_{q,\sigma'}\sum_{m,n}\gamma_{-q,\sigma'}(m,n)\Big(\left\langle E_{k-q}^{\sigma\sigma'}(p,m)\right\rangle\left\langle D_{q-k}^{\sigma'\bar{\sigma}}(n,h)\right\rangle-\left\langle E_{-q-k}^{\bar{\sigma}\sigma'}(h,m)\right\rangle\left\langle D_{k+q}^{\sigma\sigma'}(p,n)\right\rangle-$$

$$-\left\langle R_{-q}^{\sigma\sigma'}(p,m;h)X_{q\sigma'}^{n}\right\rangle\Big)\cdot\frac{1}{\left\langle E_{k=0}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(h,h)\right\rangle}.$$

Здесь был введен тензор $R_{-q}^{\sigma\sigma'}(p,m;h)$:

$$R_{-q}^{\sigma\sigma'}(p,m;h)\equiv\sqrt{N}\,[E_{k-q}^{\sigma\sigma'}(p,m),X_{-k\bar{\sigma}}^{h}]=\begin{pmatrix}\delta_{\sigma\sigma'}X_{-q}^{0\bar{\sigma}}-\delta_{\bar{\sigma}\sigma'}X_{-q}^{0\sigma} & -\delta_{\sigma\sigma'}X_{-q}^{0\bar{\sigma}}-\delta_{\bar{\sigma}\sigma'}X_{-q}^{0\sigma}\\ \delta_{\sigma\sigma'}X_{-q}^{\sigma S}+\delta_{\bar{\sigma}\sigma'}X_{-q}^{\bar{\sigma}S} & -\delta_{\sigma\sigma'}X_{-q}^{\sigma S}+\delta_{\bar{\sigma}\sigma'}X_{-q}^{\bar{\sigma}S}\end{pmatrix}.$$

Также было учтено, что $[D_{k+q}^{\sigma\sigma'}(p,n),X_{-k\bar{\sigma}}^{h}]=0$ (в этом можно убедиться прямым расчетом).

В приближении среднего поля $\left\langle E_{k}^{\sigma\sigma'}(p,h)\right\rangle$ и $\left\langle D_{k}^{\sigma\sigma'}(p,h)\right\rangle$ записываются следующим образом:

$$\left\langle E_{k}^{\sigma\sigma'}(p,m)\right\rangle=\delta_{\sigma\sigma'}\begin{pmatrix}\left\langle X_{k}^{00}+X_{k}^{\sigma\sigma}\right\rangle & 0\\ 0 & \left\langle X_{k}^{SS}+X_{k}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}\right\rangle\end{pmatrix},$$

$$\left\langle D_{k}^{\sigma\sigma'}(p,n)\right\rangle=\delta_{\bar{\sigma}\sigma'}\begin{pmatrix}0 & \left\langle X_{k}^{0S}\right\rangle\\ \left\langle X_{k}^{0S}\right\rangle & 0\end{pmatrix}.$$

Далее будем рассматривать парамагнитную фазу: $n_{\sigma}=n_{\bar{\sigma}}=\dfrac{n}{2}$.

Уравнение на химпотенциал μ имеет вид:

$$n=1+x=\frac{1}{N}\sum_{f}\left(\sum_{\sigma}\left\langle X_{f}^{\sigma\sigma}\right\rangle+2\left\langle X_{f}^{SS}\right\rangle\right). \tag{14}$$

Помимо приближения Хаббард-1 мы используем тот факт, что при концентрации допанта $x>0$ заполняется сначала терм с $n=1$. Предполагая при этом пространственную однородность, находим одно из решений уравнения на химпотенциал (14):

$$\begin{cases}\left\langle X_{f}^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}\right\rangle=\left\langle X_{f}^{\sigma\sigma}\right\rangle=\dfrac{1}{2}(1-x),\\ \left\langle X_{f}^{SS}\right\rangle=x.\end{cases}$$

Из условия полноты получаем: $\left\langle X_{f}^{00}\right\rangle=0$.

Учитывая только ближайших соседей $t_{fg}=t\,\delta_{g,f+d_f}$, $t_k=\dfrac{t}{\sqrt{N}}\sum\limits_{d_f}e^{ikd_f}$, где d_f - вектора ближайших соседей, введем величину ω_k следующим образом:

$$\omega_k = \sum_{d_f} e^{i k d_f}.$$

В случае квадратной решетки, которую мы и будем рассматривать, имеем

$$\omega_k = 2(\cos k_x + \cos k_y).$$

Приведем явный вид матричных элементов $C_{k\sigma}(p,h)$ и $\Delta_{k\sigma}(p,h)$ в обозначениях и приближениях, введенных выше:

$$C_{k\sigma}(0,0) = \frac{1-x}{2} t\omega_k,$$

$$C_{k\sigma}(0,1) = 2\sigma \frac{1-x}{2} t\omega_k,$$

$$C_{k\sigma}(1,0) = 2\sigma \frac{1+x}{2} t\omega_k,$$

$$C_{k\sigma}(1,1) = \frac{1+x}{2} N\omega_k.$$

$$\Delta_{k\sigma}(0,0) = \frac{2\sigma 2t}{1-x}\frac{1}{N}\sum_q \left(\omega_{k-q}\left\langle 2X_q^{00} + X_q^{\sigma\sigma} + X_q^{\bar\sigma\bar\sigma}\right\rangle\left\langle X_{-q}^{0S}\right\rangle - \omega_q\left(4\sigma B_{q\sigma}(0,0) + B_{q\sigma}(0,1) + B_{q\bar\sigma}(0,1)\right)\right),$$

$$\Delta_{k\sigma}(0,1) = \frac{2t}{1+x}\frac{1}{N}\sum_q \left(\omega_{k-q}\left\langle X_q^{00} - X_q^{SS}\right\rangle\left\langle X_{-q}^{0S}\right\rangle - \omega_q\left(4\sigma B_{q\sigma}(1,1) + B_{q\sigma}(1,0) + B_{q\bar\sigma}(1,0)\right)\right),$$

$$\Delta_{k\sigma}(1,0) = \frac{2t}{1-x}\frac{1}{N}\sum_q \left(\omega_{k-q}\left\langle X_q^{SS} - X_q^{00}\right\rangle\left\langle X_{-q}^{0S}\right\rangle + \omega_q\left(4\sigma B_{q\sigma}(0,0) + B_{q\sigma}(0,1) + B_{q\bar\sigma}(0,1)\right)\right),$$

$$\Delta_{k\sigma}(1,1) = \frac{2\sigma 2t}{1+x}\frac{1}{N}\sum_q \left(\omega_{k-q}\left\langle 2X_q^{SS} + X_q^{\sigma\sigma} + X_q^{\bar\sigma\bar\sigma}\right\rangle\left\langle X_{-q}^{0S}\right\rangle + \omega_q\left(4\sigma B_{q\sigma}(1,1) + B_{q\sigma}(1,0) - B_{q\sigma}(0,1)\right)\right),$$

где $B_{k\sigma}(p,h) = \left\langle X_{-k\bar\sigma}^{p} X_{k\sigma}^{h}\right\rangle$ - аномальные средние. Для них выполняется свойство симметрии:

$$B_{k\sigma}(p,p) = -B_{-k\bar\sigma}(p,p),$$

которое было использовано здесь при получении $\Delta_{k\sigma}(p,h)$.

Теперь, используя метод неприводимых операторов в том виде, в котором он сформулирован выше, не составляет труда получить явный вид матричных функций Грина и Горькова в соответствии с формулами (11).

В заключение хотелось бы отметить, что модель Хаббарда охватывает основные свойства систем с СЭК, но с ее помощью нельзя полностью описать свойства реальных ВТСП систем, таких как, например, $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. Для описания корреляционных эффектов в купратах нами была сформулирована синглет-триплетная модель [7]. К ней также применим изложенный здесь формализм, что существенно облегчает ее рассмотрение.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зайцев Р.О. Обобщенная диаграмная техника и спиновые волны в анизотропном ферромагнетике // ЖЭТФ. 1975. Т.68. №1. с. 207.
2. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма. - М.: Наука, 1975 - 528 с.
3. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. - М.: Наука, 1971 - 416 с.
4. Hubbard J.C. Electron correlations in narrow energy bands // Proc. Roy. Soc. A. 1963. V.276. p. 238.
5. Anderson P.W. The resonating valence bond state in and superconductivity // Science. 1987. V.235. p. 1196.
6. Зайцев Р.О., Иванов В.А. О возможности парной конденсации в модели Хаббарда // ФТТ. 1987. Т.29. С. 2554.
7. Коршунов М.М., Овчинников С.Г. Эффективный гамильтониан синглет-триплетной модели для оксидов меди // ФТТ. 2001. Т.43. №3. С. 399.