Теория сильно коррелированных систем в терминах производящего функционала

Изюмов Ю.А., Чащин Н.И., Алексеев Д.С.

Базовые модели теории сильно коррелированных систем (СКС) рассматриваются с единой точки зрения на основе метода производящего функционала. Для одночастичных функций Грина выведено уравнение в терминах функциональных производных по флуктуирующим полям. Итерации в этом уравнении порождают регулярную теорию возмущений вблизи атомного предела, позволяющую исследовать эволюцию квазичастичного и некогерентного спектров любой модели в зависимости от энергетических параметров и электронной концентрации.

Основные модели теории СКС (модель Хаббарда, tJ–модель, sd–модель, периодическая модель Андерсона и другие) характеризуются тем, что параметр кулоновского отталкивания электронов U или обменного интеграла J больше ширины исходной зоны W, поэтому стандартная теория возмущений для них не работает. В случае $U,J>>W$ следует исходить из другого предела (атомного), рассматривая кинетическую энергию как возмущение. В этой ситуации гамильтониан любой модели может быть записан в узельном представлении в следующем виде:

$$H=\sum_{ip} H_i^p B_i^p + \sum_{ij}\sum_{\alpha\beta} \mathfrak{I}_{ij}^{\alpha\beta} F_i^{+\alpha} F_j^{\beta} \qquad (1)$$

Здесь F_i^{α} – набор ферми-подобных операторов, а B_i^p – бозе-подобных операторов, описывающих систему. Таковыми являются X-операторы Хаббарда, учитывающие сильную корреляцию на узле, которая включена в величину H_i^p (перескок электронов по решетке включен в величину $\mathfrak{I}_{ij}^{\alpha\beta}$).

СКС описывается фермионной (электронной) и бозонной функциями Грина (ФГ):

$$\mathrm{G}_{12}^{\alpha\beta} = -\left\langle TF_1^{\alpha} F_2^{+\beta} \right\rangle, \quad D_{12}^{pq} = -\left\langle TB_1^{p} + B_2^{+q} \right\rangle \qquad (2)$$

где $\langle ... \rangle$ – символ статистического усреднения, T – оператор упорядочения по мнимому времени τ, а $l=(i\tau)$ – совокупный индекс, включающий номер узла i и время τ. Для вычисления ФГ введем производящий функционал $Z[V]$, представляющий статистическую сумму систему во флуктуирующих полях, где V описывает взаимодействие системы с этими полями и представляет собой линейную функцию по бозе-подобным операторам:

$$V=\sum_{ip}(v_i^{+p} B_i^p + v_i^p B_i^{+p}) \qquad (3)$$

Если записать уравнение движения для электронной ФГ $\mathrm{G}_{12}^{\alpha\beta}$, то в нем появляются смешанные ФГ более высокого порядка, которые выражаются как функциональные производные по полям ν_i^p от исходной ФГ. Таким образом, мы приходим к следующему уравнению для электронной ФГ:

$$\left[G_{0V}^{-1} - (A\Phi Y) - (AY) \right] \mathrm{G} = A\Phi \qquad (4)$$

(здесь опущены все матричные индексы ФГ $\mathrm{G}_{12}^{\alpha\beta}$). В этом основном уравнении оператор A представляет линейную комбинацию функциональных производных по всем флуктуирующим полям ν_i^p, Y выражается через матричные элементы перескока электронов по решетке, а Φ – логарифмическое представление производящего функционала, т.е. $Z[V]=e^{\Phi[V]}$, наконец G_{0V} – ФГ электрона для отдельного узла во флуктуирующих полях.

В любой из базовых моделей СКС уравнение для электронной ФГ имеет структуру уравнения (4), а величины A, Y, G_{0V} определяются конкретным видом гамильтониана модели (1) и перестановочными соотношениями операторов F и B. В монографии [1] приведена явная форма уравнения (4) для всех базовых моделей и анализируется структура решений этих уравнений.

Предлагается мультипликативное представление электронной ФГ $\mathrm{G}=G\Lambda$, где G названа пропагаторной частью ФГ, а Λ – концевой частью. Пропагаторная часть подчиняется уравнению

Дайсона $G^{-1} = G_{0V}^{-1} - \Sigma$, где Σ – собственно-энергетическая часть. Таким образом, электронная ФГ СКС характеризуется двумя величинами: собственно-энергетической Σ и концевой Λ частями, в отличие от обычных ферми-систем, в которых $\Lambda \equiv 1$. Из основного уравнения (4) можно получить два уравнения на Σ и Λ, полностью определяющих ФГ G. Итерации в этих уравнениях порождают теорию возмущений по величине Y, т.е. по перескокам электрона на решетке. Эти уравнения выведены в [1] для всех моделей СКС, в пределах второго порядка по параметру W/U или W/J вычислены Σ и Λ, и проанализирован спектр квазичастичных и некогерентных состояний электронов.

В качестве примера приведем расчет плотности состояний для модели Хаббарда при половинном заполнении зоны (n=1) в зависимости от параметра U/W [1,3] *(рис.1)*.

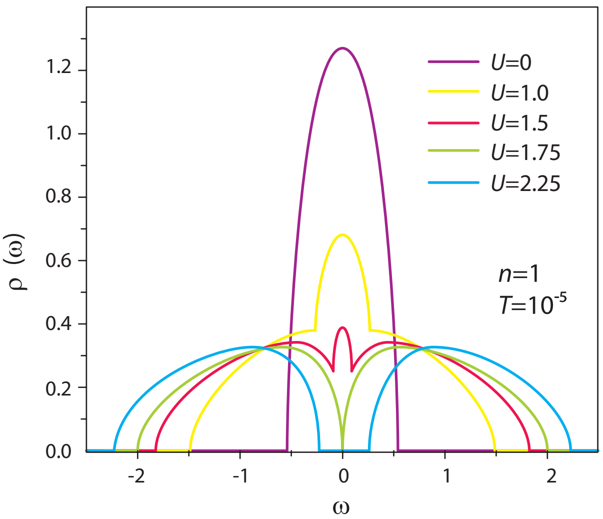

Рис. 1

Эта картина описывает фазовый переход металл-диэлектрик и согласуется с расчетами по динамической теории среднего поля. Другой пример – sd–модель в условиях сильной sd–обменной связи при n=1.

Решение уравнения (4) приводит к следующему выражению для электронной ФГ [2]:

$$g_{\mathbf{k}}(\omega) = \frac{1}{F(\omega) - \varepsilon_{\mathbf{k}}} \tag{5}$$

$$F(\omega) = \frac{\omega - (J/2)^2}{\omega - (J/2)\xi(\omega)} \tag{6}$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ – энергия электрона в затравочной зоне, а $\xi(\omega)$ описывает взаимодействие электронов со спиновыми флуктуациями. В отсутствие члена $\xi(\omega)$ выражение (5) описывает две хаббардовские подзоны, центрированные возле атомных подуровней $\omega = \pm\, J/2$. Величина $\xi(\omega)$ отвечает за появление квазичастичного пика на энергии Ферми $\omega = 0$. В определенной области параметров при $|\omega| << J/2$ из общих соотношений (5)–(6) следует полюсная часть ФГ вида

$$g_{\mathbf{k}}(\omega) = \frac{Z}{\omega - Z\,\varepsilon_{\mathbf{k}} + i\gamma} \tag{7}$$

где

$$Z = 1 - \frac{J}{2}\left[\frac{d}{d\omega}\mathrm{Re}\,\xi(\omega)\right]_{\omega=0} \tag{8}$$

определяет вес квазичастичного состояния, а $\gamma \sim \frac{\mathrm{Im}\,\xi(\omega)}{Z}$ – затухание. Вблизи $J/W \approx 1$ возникает фазовый переход металл-диэлектрик, и в его окрестности, в области металлической фазы, Z может оказаться малым, что соответствует образованию тяжелых фермионов, образующих зону шириной $\sim ZW$.

[1] Ю.А. Изюмов, Н.И. Чащин, Д.С. Алексеев. Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала, Москва–Ижевск, 2006.

[2] Yu.A. Izyumov, N.I. Chaschin, D.S. Alexeev, F. Mancini. Eur.Phys.J.B 45, 69 (2005).

[3] Yu.A. Izyumov, N.I. Chaschin, D.S. Alexeev. Condensed Matter Physics 9, N3 (47), 545 (2006).