

ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОСИСТЕМ В МОДЕЛИ ХАББАРДА В ПРИБЛИЖЕНИИ СТАТИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ

Аннотация.

Актуальность и цели. Модель Хаббарда широко используется для теоретического описания сильно коррелируемых электронных систем, при исследовании которых используются разнообразные приближенные методы. Относительно недавно были предложены четыре метода для вычисления функций Грина в приближении статических флуктуаций в модели Хаббарда. Целью настоящей работы является разработка еще двух методов вычисления функций Грина в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций.

Материалы и методы. В основе приближения статических флуктуаций лежит метод уравнений движения для операторов рождения. Приближение статических флуктуаций позволяет получить замкнутую систему дифференциальных уравнений для нахождения операторов рождения. Зная выражения для операторов рождения, можно найти функции Грина, корреляционные функции и энергетический спектр системы.

Результаты. Разработанные методы вычисления функций Грина в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций были применены для вычисления функции Грина для димера, гексагона, пентагона и фуллерена C_{20} .

Выводы. Полученные в работе результаты показывают, что функции Грина для вышеуказанных систем, полученные методами, предложенными в данной работе, совпадают с функциями Грина для этих систем, полученными ранее разработанными методами.

Ключевые слова: модель Хаббарда, функции Грина, энергетический спектр, наносистемы, димер, гексагон, пентагон, фуллерен.

A. V. Silant'ev

RESEARCH OF NANOSYSTEMS IN THE HUBBARD MODEL IN APPROXIMATION OF STATIC FLUCTUATIONS

Abstract.

Background. The Hubbard model is widely used for theoretical description of strongly correlated electronic systems. Various approximate methods are used for investigation of these systems. At the present time there are four approaches to calculation of the Green's function in the approximation of static fluctuations. The purpose of this paper is to develop two more approaches to calculation of the Green's function in the approximation of static fluctuations.

Materials and methods. The basis for the approximation of static fluctuations is the method of the motion equations for creation operators. The approximation of static fluctuations allows to obtain a closed system of differential equations for finding creation operators. The Green's functions, correlation functions and energy spectrum can be calculated using creation operators.

Results. The developed approaches for finding the Green's functions in the Hubbard model by the approximation of static fluctuations were used to obtain the Green's functions of dimer, hexagon, pentagon and fullerene C_{20} .

Conclusions. This work demonstrates that the Green's functions of dimer, hexagon, pentagon and fullerene C_{20} obtained by the new approaches coincide with the Green's functions of these systems obtained by the earlier approaches.

Key word: Hubbard model, Green's functions, energy spectrum, nanosystems, dimer, hexagon, pentagon, fullerene.

Уже почти полвека модель Хаббарда [1] широко используется для теоретического описания сильно коррелируемых электронных систем (СКЭС). Первоначально модель Хаббарда была предложена для описания магнитных свойств переходных металлов [1–3]. В дальнейшем при исследовании других материалов оказалось, что теоретические результаты, полученные в рамках модели Хаббарда и ее различных модификациях, находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными. В частности, модель Хаббарда применяется при изучении высокотемпературных сверхпроводников [4], органических сверхпроводников [5]. В последние два десятилетия ведутся интенсивные исследования наносистем. Исследования углеродных наносистем показали, что в этих системах взаимодействие между электронами велико и может достигать ~ 10 eV [6]. Поэтому для описания этих систем также используется модель Хаббарда [7].

При вычислении физических характеристик СКЭС используются различные приближенные методы: приближение самосогласованного поля, приближение хаотических фаз, приближение статических флуктуаций (ПСФ) и др. Отметим, что в настоящее время имеется несколько подходов [8–10] к вычислению функций Грина в ПСФ. Анализ этих подходов приведен в работе [11]. В данной работе рассмотрим еще два метода вычисления функций Грина в модели Хаббарда в ПСФ.

В модели Хаббарда СКЭС описываются гамильтонианом следующего вида:

$$H = \sum_{\sigma,i} \epsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{\sigma,i \neq j} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma,i} U_i n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}}, \quad (1)$$

где $c_{i\sigma}^+$, $c_{i\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электронов со спином σ на узле i ; $n_{i\sigma}$ – оператор числа частиц со спином σ на узле i ; ϵ_i – энергия одноэлектронного атомного состояния на узле i ; t_{ij} – интеграл переноса, описывающий перескоки электронов с узла i на узел j ; U_i – энергия кулоновского отталкивания двух электронов, находящихся на i -м узле; $\bar{\sigma} = -\sigma$.

Запишем уравнение движения для оператора $c_{f\sigma}^+(\tau)$, заданного в представлении Гейзенберга:

$$\frac{dc_{f\sigma}^+}{d\tau} = \epsilon_f c_{f\sigma}^+ + \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ + U_f c_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}}, \quad (2)$$

где $\tau = it$.

Представим оператор $c_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}}$ в следующем виде:

$$c_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}} = c_{f\sigma}^+ c_{f\bar{\sigma}}^+ c_{f\bar{\sigma}} = c_{f\bar{\sigma}}^+ c_{f\bar{\sigma}} c_{f\sigma}^+ = c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma}, \quad (3)$$

где

$$m_{f\sigma} = c_{f\bar{\sigma}} c_{f\sigma}^+ . \quad (4)$$

Отметим, что оператор $m_{f\sigma}$ обладает следующими свойствами:

$$m_{f\sigma}^2 = 0, \quad m_{f\sigma} m_{f\bar{\sigma}} = (1 - n_{f\bar{\sigma}}) n_{f\sigma}, \quad c_{f\sigma}^+ m_{f\sigma} = 0, \\ c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma} m_{f\bar{\sigma}} = c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\bar{\sigma}}, \quad \{c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\bar{\sigma}}, c_{f\sigma}\} = m_{f\bar{\sigma}}, \quad \{c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma}, c_{f\sigma}\} = n_{f\bar{\sigma}}. \quad (5)$$

Подставляя (3) в (2), получим

$$\frac{dc_{f\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon_f c_{f\sigma}^+ + \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ + U_f c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma}. \quad (6)$$

Решение уравнения (6) будем искать, используя ПСФ. Следуя методу, предложенному в [12], запишем оператор $m_{f\sigma}$ в следующем виде:

$$m_{f\sigma} = \langle m_{f\sigma} \rangle + \Delta m_{f\sigma}, \quad (7)$$

где $\Delta m_{f\sigma}$ – оператор флуктуации, причем предполагается, что оператор $\Delta m_{f\sigma}$ не зависит от времени.

После подстановки (7) в (6) уравнение движения для оператора $c_{f\sigma}^+(\tau)$ примет вид

$$\frac{dc_{f\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon_f c_{f\sigma}^+ + U_f \langle m_{f\sigma} \rangle c_{f\bar{\sigma}}^+ + \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ + U_f c_{f\bar{\sigma}}^+ \Delta m_{f\sigma}. \quad (8)$$

Для того чтобы получить уравнение движения для оператора $c_{f\bar{\sigma}}^+ \Delta m_{f\sigma}$, умножим уравнение (8) на оператор $\Delta m_{f\bar{\sigma}}$, затем заменим σ на $\bar{\sigma}$ и воспользуемся свойствами оператора $m_{f\sigma}$ (5):

$$\frac{dc_{f\bar{\sigma}}^+ \Delta m_{f\sigma}}{d\tau} = (\varepsilon_f + U_f) c_{f\bar{\sigma}}^+ \Delta m_{f\sigma} - U_f \langle m_{f\sigma} \rangle c_{f\bar{\sigma}}^+ \Delta m_{f\bar{\sigma}} + \\ + \sum_i t_{if} c_{i\bar{\sigma}}^+ \Delta m_{f\sigma} + U_f \langle m_{f\sigma} \rangle c_{f\bar{\sigma}}^+ - U_f \langle m_{f\sigma} \rangle \langle m_{f\bar{\sigma}} \rangle c_{f\bar{\sigma}}^+. \quad (9)$$

Аналогичным образом можно получить уравнения движения и для операторов $c_{i\sigma}^+ \Delta m_{f\bar{\sigma}}$. Предложенная выше методика позволяет получать замкнутую систему дифференциальных уравнений для операторов. Для этого необходимо для каждого узла системы получить уравнения движения для операторов $c_{i\sigma}^+, c_{i\bar{\sigma}}^+ \Delta m_{f\sigma}, c_{i\bar{\sigma}}^+ \Delta m_{f\sigma} \Delta m_{g\sigma}, \dots$

Наиболее простым вариантом ПСФ является вариант, когда оператор $\Delta m_{f\sigma}$ не зависит от номера узла, т.е. $\Delta m_{f\sigma} = \Delta m_{\sigma}$. В этом случае для того

чтобы получить замкнутую систему дифференциальных уравнений, достаточно записать уравнения (8) и (9) для каждого узла системы:

$$\begin{aligned}
 \frac{dc_{f\sigma}^+}{d\tau} &= \varepsilon_f c_{f\sigma}^+ + U_f \langle m_{f\sigma} \rangle c_{f\bar{\sigma}}^+ + \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ + U_f c_{f\bar{\sigma}}^+ \Delta m_{f\sigma}, \\
 \frac{dc_{f\bar{\sigma}}^+}{d\tau} &= \varepsilon_f c_{f\bar{\sigma}}^+ + U_f \langle m_{f\bar{\sigma}} \rangle c_{f\sigma}^+ + \sum_i t_{if} c_{i\bar{\sigma}}^+ + U_f c_{f\sigma}^+ \Delta m_{f\bar{\sigma}}, \\
 \frac{dc_{f\bar{\sigma}}^+ \Delta m_{f\sigma}}{d\tau} &= (\varepsilon_f + U_f) c_{f\bar{\sigma}}^+ \Delta m_{f\sigma} - U_f \langle m_{f\sigma} \rangle c_{f\bar{\sigma}}^+ \Delta m_{f\bar{\sigma}} + \\
 &+ \sum_i t_{if} c_{i\bar{\sigma}}^+ \Delta m_{f\sigma} + U_f \langle m_{f\sigma} \rangle c_{f\bar{\sigma}}^+ - U_f \langle m_{f\sigma} \rangle \langle m_{f\bar{\sigma}} \rangle c_{f\sigma}^+, \\
 \frac{dc_{f\sigma}^+ \Delta m_{f\bar{\sigma}}}{d\tau} &= (\varepsilon_f + U_f) c_{f\sigma}^+ \Delta m_{f\bar{\sigma}} - U_f \langle m_{f\bar{\sigma}} \rangle c_{f\sigma}^+ \Delta m_{f\sigma} + \\
 &+ \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ \Delta m_{f\bar{\sigma}} + U_f \langle m_{f\bar{\sigma}} \rangle c_{f\sigma}^+ - U_f \langle m_{f\bar{\sigma}} \rangle \langle m_{f\sigma} \rangle c_{f\bar{\sigma}}^+, \quad (10)
 \end{aligned}$$

где $f = 1, \dots, N$, N – число узлов системы.

Таким образом, используя данную методику, можно получить замкнутую систему дифференциальных уравнений, которая будет содержать $4N$ дифференциальных уравнений.

Рассмотрим еще одну методику вычисления оператора $c_{i\sigma}^+$ в ПСФ. Для этого продифференцируем по времени соотношение (7):

$$\frac{dm_{f\sigma}}{dt} = \frac{d(\langle m_{f\sigma} \rangle + \Delta m_{f\sigma})}{dt} = 0. \quad (11)$$

Таким образом, в ПСФ оператор $m_{f\sigma}$ является интегралом движения. Умножим (6) на $m_{f\bar{\sigma}}$

$$\frac{dc_{f\sigma}^+ m_{f\bar{\sigma}}}{d\tau} = \varepsilon_f c_{f\sigma}^+ m_{f\bar{\sigma}} + \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ m_{f\bar{\sigma}} + U_f c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma} m_{f\bar{\sigma}}. \quad (12)$$

С учетом (5) уравнение (12) примет вид

$$\frac{dc_{f\sigma}^+ m_{f\bar{\sigma}}}{d\tau} = (\varepsilon_f + U_f) c_{f\sigma}^+ m_{f\bar{\sigma}} + \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ m_{f\bar{\sigma}}. \quad (13)$$

Теперь для того чтобы получить уравнение движения для оператора $c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma}$, заменим в уравнении (13) σ на $\bar{\sigma}$:

$$\frac{dc_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma}}{d\tau} = (\varepsilon_f + U_f) c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma} + \sum_i t_{if} c_{i\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma}. \quad (14)$$

Аналогичным образом можно получить уравнения движения и для операторов $c_{i\sigma}^+ m_{f\sigma}$.

Развитая выше методика для получения уравнений движения для операторов в рамках ПСФ позволяет получать замкнутую систему дифференциальных уравнений для этих операторов. Для этого необходимо для каждого узла системы получить уравнения движения для операторов $c_{i\sigma}^+$, $c_{i\sigma}^+ m_{f\sigma}$, $c_{i\sigma}^+ m_{f\sigma} m_{g\sigma}, \dots$

Решив систему дифференциальных уравнений, можно вычислить антикоммутирующие функции Грина для каждого узла системы [13]:

$$\langle\langle c_{j\sigma}^+ | c_{j\sigma} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \sum_m \frac{F_{j,m}}{E - E_m + i\hbar}. \quad (15)$$

Зная функцию Грина, можно найти энергетический спектр E_m , спектральную плотность энергетических состояний $F_{j,m}$, а также можно определить целый ряд физических величин, характеризующих физические и химические свойства наносистемы.

Наиболее простым вариантом ПСФ является вариант, когда оператор $m_{f\sigma}$ не зависит от номера узла, т.е. $m_{f\sigma} = m_\sigma$. В этом случае, для того чтобы получить замкнутую систему дифференциальных уравнений, достаточно записать уравнения (6) и (14) для каждого узла системы:

$$\begin{aligned} \frac{dc_{f\sigma}^+}{d\tau} &= \varepsilon_f c_{f\sigma}^+ + \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ + U_f c_{f\sigma}^+ m_\sigma, \\ \frac{dc_{f\sigma}^+ m_\sigma}{d\tau} &= (\varepsilon_f + U_f) c_{f\sigma}^+ m_\sigma + \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ m_\sigma, \end{aligned} \quad (16)$$

где $f = 1, \dots, N$, N – число узлов наносистемы. Можно показать, что решение системы из $2N$ дифференциальных уравнений (16) сводится к решению системы из N дифференциальных уравнений, в то время как в методе, который приводит к системе дифференциальных уравнений (10), для нахождения операторов $c_{f\sigma}^+$ необходимо решить систему из $4N$ дифференциальных уравнений.

Решив систему уравнений (16), можно получить функции Грина, которые будут иметь следующую структуру:

$$\begin{aligned} \langle\langle c_{j\sigma}^+ | c_{j\sigma} \rangle\rangle &= \frac{i}{2\pi} \cdot \sum_{m=1}^p \frac{F_{j,m}}{E - E_m + i\hbar}, \\ E_k &= \varepsilon + e_k, \quad E_{k+p/2} = E_k + U, \quad F_{j,m} = q_m \cdot Q_{j,m}, \\ Q_{j,k+p/2} &= Q_{j,k}, \quad k = 1 \dots p/2, \end{aligned}$$

$$q_m = \begin{cases} 1 - \frac{n}{2}, & m = 1 \dots p/2, \\ \frac{n}{2}, & m = p/2 + 1 \dots p, \end{cases} \quad (17)$$

где p – число энергетических состояний системы.

Зная функцию Грина (17), можно найти степень вырождения каждого энергетического состояния:

$$g_i = \sum_{j=1}^N Q_{j,i}, \quad (18)$$

где g_i – степень вырождения i -го энергетического состояния; N – число узлов наносистемы.

Рассмотрим для примера димер в приближении неоднородных и однородных статических флуктуаций. Для того чтобы в приближении неоднородных статических флуктуаций получить замкнутую систему дифференциальных уравнений, запишем уравнения движения для операторов $c_{1\sigma}^+$, $c_{2\sigma}^+$, $c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{1\sigma}$, $c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{2\sigma}$, $c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{2\sigma}$, $c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{1\sigma}$, $c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{1\sigma} m_{2\sigma}$, $c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{1\sigma} m_{2\sigma}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dc_{1\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon c_{1\sigma}^+ + t \cdot c_{2\sigma}^+ + U \cdot c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{1\sigma}, \\ \frac{d(c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{1\sigma})}{d\tau} = (\varepsilon + U) c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{1\sigma} + t \cdot c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{1\sigma}, \\ \frac{d(c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{2\sigma})}{d\tau} = \varepsilon c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{2\sigma} + t \cdot c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{2\sigma} + U \cdot c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{1\sigma} m_{2\sigma}, \\ \frac{d(c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{1\sigma} m_{2\sigma})}{d\tau} = (\varepsilon + U) c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{1\sigma} m_{2\sigma} + t \cdot c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{1\sigma} m_{2\sigma}, \\ \frac{dc_{2\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon c_{2\sigma}^+ + t \cdot c_{1\sigma}^+ + U \cdot c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{2\sigma}, \\ \frac{d(c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{2\sigma})}{d\tau} = (\varepsilon + U) c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{2\sigma} + t \cdot c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{2\sigma}, \\ \frac{d(c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{1\sigma})}{d\tau} = \varepsilon c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{1\sigma} + t \cdot c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{1\sigma} + U \cdot c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{2\sigma} m_{1\sigma}, \\ \frac{d(c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{2\sigma} m_{1\sigma})}{d\tau} = (\varepsilon + U) c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{2\sigma} m_{1\sigma} + t \cdot c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{2\sigma} m_{1\sigma}. \end{array} \right. \quad (19)$$

Решив систему уравнений (19), получим для операторов $c_{1\sigma}^+$, $c_{2\sigma}^+$ следующие выражения:

$$\begin{aligned}
 c_{j\sigma}^+(\tau) = & \frac{1}{2} \left[c_{j\sigma}^+(0) - c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma}(0) - c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma}(0) + c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma} m_{f\sigma}(0) + c_{f\sigma}^+(0) - \right. \\
 & \left. - c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma}(0) - c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma}(0) + c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma} m_{j\sigma}(0) \right] \cdot \exp(E_1 \tau) + \\
 & + \frac{1}{2} \left(c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma} m_{f\sigma}(0) - c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma} m_{j\sigma}(0) \right) \cdot \exp(E_2 \tau) + \\
 & + \frac{1}{2} \left[c_{j\sigma}^+(0) - c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma}(0) - c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma}(0) + c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma} m_{f\sigma}(0) - c_{f\sigma}^+(0) + c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma} + \right. \\
 & \left. + c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma}(0) - c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma} m_{j\sigma}(0) \right] \cdot \exp(E_3 \tau) + \\
 & + \frac{1}{2} \left(c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma} m_{f\sigma}(0) + c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma} m_{j\sigma}(0) \right) \cdot \exp(E_4 \tau) + \\
 & + \frac{1}{2} \left[c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma}(0) + c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma}(0) - 2c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma} m_{f\sigma}(0) + \frac{U}{g_1} \left(c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma}(0) - c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma}(0) \right) + \right. \\
 & \left. + 2 \frac{t}{g_1} \left(c_{f\sigma}^+(0) + c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma}(0) - 2c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma} m_{j\sigma}(0) \right) \right] \cdot \exp(E_5 \tau) + \\
 & + \frac{1}{2} \left[c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma}(0) + c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma}(0) - 2c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma} m_{f\sigma}(0) + \frac{U}{g_1} \left(-c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma}(0) + c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma}(0) \right) + \right. \\
 & \left. + 2 \frac{t}{g_1} \left(-c_{f\sigma}^+(0) - c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{j\sigma}(0) + 2c_{f\bar{\sigma}}^+ m_{f\sigma} m_{j\sigma}(0) \right) \right] \cdot \exp(E_6 \tau); \quad (20)
 \end{aligned}$$

$$E_1 = \varepsilon + t, \quad E_2 = \varepsilon - t + U, \quad E_3 = \varepsilon - t, \quad E_4 = \varepsilon + t + U,$$

$$E_5 = \frac{1}{2}(2\varepsilon + U + g_1), \quad E_6 = \frac{1}{2}(2\varepsilon + U - g_1), \quad g_1 = \sqrt{U^2 + 4t^2}, \quad (21)$$

где $j = 1, 2; f = 1, 2; j \neq f$.

Для того чтобы найти энергетический спектр димера, прежде всего вычислим фурье-образ антикоммутирующих функций Грина [13]. Для этого воспользуемся соотношением (20):

$$\left\langle \left\langle c_{j\sigma}^+ \middle| c_{j\sigma} \right\rangle \right\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \cdot \sum_{m=1}^6 \frac{F_{j\sigma m}}{E - E_m + i\hbar}, \quad (22)$$

где

$$F_{1\sigma 1} = F_{1\sigma 3} = F_{2\sigma 1} = F_{2\sigma 3} = \frac{1}{2} (1 - \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}} \rangle),$$

$$F_{1\sigma 2} = F_{1\sigma 4} = F_{2\sigma 2} = F_{2\sigma 4} = \frac{1}{2} \langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}} \rangle,$$

$$F_{1\sigma 5} = F_{2\sigma 6} = \frac{1}{2} \left(\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle - 2 \langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}} \rangle + \frac{U}{g_1} [\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle] \right),$$

$$F_{1\sigma 6} = F_{2\sigma 5} = \frac{1}{2} \left(\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle - 2 \langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}} \rangle - \frac{U}{g_1} [\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle] \right). \quad (23)$$

Энергетический спектр димера определяется полюсами $E_1 - E_6$ функций Грина (22). Для того чтобы найти спектральный вес каждого энергетического состояния, как видно из (23), необходимо вычислить средние $\langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}} \rangle$, $\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle$, $\langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle$. Используя (20), (22) и спектральную теорему [14], получим

$$\langle n_{1\sigma} \rangle = \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \langle n_{2\sigma} \rangle = \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle = \frac{K_1}{2K}, \quad \langle n_{1\sigma} n_{2\sigma} \rangle = \langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}} \rangle = \frac{K_2}{K}, \quad (24)$$

$$K_1 = [2f_F(E_5)f_F(E_6) + f_F(E_2) + f_F(E_4) - 2f_F(E_2)f_F(E_4)] \times$$

$$\times [f_F(E_1) + f_F(E_3)],$$

$$K_2 = f_F(E_5)f_F(E_6) \cdot [f_F(E_1) + f_F(E_3)],$$

$$K = [1 - f_F(E_2) + f_F(E_3) + f_F(E_1) - f_F(E_5) - f_F(E_6)]f_F(E_4) +$$

$$+ [1 + f_F(E_3) + f_F(E_1) - f_F(E_5) - f_F(E_6)]f_F(E_2) +$$

$$+ 2[f_F(E_5) + f_F(E_6) - f_F(E_1) - f_F(E_3)]f_F(E_4)f_F(E_2) +$$

$$+ [2 + f_F(E_1) - f_F(E_2) + f_F(E_3) - f_F(E_4)]f_F(E_5)f_F(E_6),$$

$$f_F(E) = \left[e^{(E-\mu)/(kT)} + 1 \right]^{-1}, \quad (25)$$

где μ – химический потенциал; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура.

Теперь рассмотрим димер в приближении однородных статических флуктуаций. Поскольку димер состоит из двух узлов то, для того чтобы в приближении однородных статических флуктуаций получить замкнутую систему дифференциальных уравнений, запишем систему уравнений (16) для обоих узлов димера:

$$\frac{dc_{1\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon_{\sigma} c_{1\sigma}^+ + tc_{2\sigma}^+ + Uc_{1\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma},$$

$$\frac{dc_{2\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon_{\sigma} c_{2\sigma}^+ + tc_{1\sigma}^+ + Uc_{2\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma},$$

$$\frac{d(c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma})}{d\tau} = (\varepsilon_{\sigma} + U) c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma} + tc_{2\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma},$$

$$\frac{d(c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma})}{d\tau} = (\varepsilon_{\sigma} + U) c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma} + t c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma}. \quad (26)$$

Система уравнений (26) является замкнутой, причем третье и четвертое уравнения представляют собой замкнутую подсистему уравнений. Отметим, что решение подсистемы, состоящей из третьего и четвертого уравнений, является частным решением подсистемы, состоящей из первого и второго уравнений, а общее решение однородной подсистемы, состоящей из первого и второго уравнений, является общим решением подсистемы, состоящей из третьего и четвертого уравнений, при $U = 0$ и замене $c_{i\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma}$ на $c_{i\bar{\sigma}}^+$. Как известно, общее решение неоднородной системы уравнений можно представить в виде суммы частного решения и общего решения однородной системы. Таким образом, решение системы (26) из четырех дифференциальных уравнений сводится к решению системы из двух дифференциальных уравнений. Система уравнений (26) имеет точное аналитическое решение

$$\begin{aligned} c_{i\sigma}^+(\tau) = & \frac{1}{2} \left((c_{1\sigma}^+(0) + c_{2\sigma}^+(0) - c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma}(0) - c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma}(0)) \exp(E_1 \tau) + \right. \\ & + (c_{i\sigma}^+(0) - c_{j\sigma}^+(0) - c_{i\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma}(0) + c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma}(0)) \exp(E_2 \tau) + \\ & \left. + (c_{1\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma}(0) + c_{2\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma}(0)) \exp(E_3 \tau) + (c_{i\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma}(0) - c_{j\bar{\sigma}}^+ m_{\sigma}(0)) \exp(E_4 \tau) \right), \quad (27) \end{aligned}$$

$$E_1 = \varepsilon - b, \quad E_2 = \varepsilon + b, \quad E_3 = \varepsilon - b + U, \quad E_4 = \varepsilon + b + U, \quad (28)$$

где $i = 1, 2; j = 1, 2; i \neq j$, $b = -t$.

Для того чтобы найти энергетический спектр димера, воспользуемся выражением (27) и вычислим фурье-образ антикоммутирующих функций Грина:

$$\langle\langle c_{j\sigma}^+ | c_{j\sigma} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{2} \left\{ \frac{1 - \frac{n}{2}}{E - E_1 + ih} + \frac{1 - \frac{n}{2}}{E - E_2 + ih} + \frac{\frac{n}{2}}{E - E_3 + ih} + \frac{\frac{n}{2}}{E - E_4 + ih} \right\}, \quad (29)$$

где n – концентрация электронов.

Энергетический спектр димера определяется полюсами $E_1 - E_4$ функций Грина (29).

Приведем еще результаты вычислений для гексагона, димера и фуллерена C_{20} . Фурье-образы антикоммутирующих функций Грина для пентагона гексагона и фуллерена C_{20} имеют следующий вид:

$$\langle\langle c_{j\sigma}^+ | c_{j\sigma} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{5} \left\{ \frac{1 - \frac{n}{2}}{E - E_1 + ih} + \frac{2 \left(1 - \frac{n}{2} \right)}{E - E_2 + ih} + \frac{2 \left(1 - \frac{n}{2} \right)}{E - E_3 + ih} + \right.$$

$$\left. + \frac{\frac{n}{2}}{E - E_4 + ih} + \frac{n}{E - E_5 + ih} + \frac{n}{E - E_6 + ih} \right\},$$

$$E_1 = \varepsilon - 2b, \quad E_2 = \varepsilon + b(1 - \sqrt{5})/2, \quad E_3 = \varepsilon + b(1 + \sqrt{5})/2,$$

$$E_4 = \varepsilon - 2b + U, \quad E_5 = \varepsilon + b(1 - \sqrt{5})/2 + U, \quad E_6 = \varepsilon + b(1 + \sqrt{5})/2 + U; \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \langle\langle c_{j\sigma}^+ | c_{j\sigma} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{6} & \left\{ \frac{1 - \frac{n}{2}}{E - E_1 + ih} + \frac{2\left(1 - \frac{n}{2}\right)}{E - E_2 + ih} + \frac{2\left(1 - \frac{n}{2}\right)}{E - E_3 + ih} + \frac{1 - \frac{n}{2}}{E - E_4 + ih} + \right. \\ & \left. + \frac{\frac{n}{2}}{E - E_5 + ih} + \frac{n}{E - E_6 + ih} + \frac{n}{E - E_7 + ih} + \frac{\frac{n}{2}}{E - E_8 + ih} \right\}; \end{aligned}$$

$$E_1 = \varepsilon - b - b_1, \quad E_2 = \varepsilon - \sqrt{b_1^2 - b_1 b + b^2}, \quad E_3 = \varepsilon + \sqrt{b_1^2 - b_1 b + b^2},$$

$$E_4 = \varepsilon + b + b_1, \quad E_5 = \varepsilon - b - b_1 + U, \quad E_6 = \varepsilon - \sqrt{b_1^2 - b_1 b + b^2} + U,$$

$$E_7 = \varepsilon + \sqrt{b_1^2 - b_1 b + b^2} + U, \quad E_8 = \varepsilon + b + b_1 + U; \quad (31)$$

$$\langle\langle c_{j\sigma}^+ | c_{j\sigma} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \cdot \sum_{m=1}^{12} \frac{F_{j,m}}{E - E_m + ih},$$

$$E_k = \varepsilon + e_k, \quad E_{k+6} = E_k + U, \quad F_{j,m} = q_m \cdot Q_{j,m}, \quad Q_{j,k+6} = Q_{j,k}, \quad k = 1 \dots 6,$$

$$q_m = \begin{cases} 1 - n/2, & m = 1 \dots 6, \\ n/2, & m = 7 \dots 12, \end{cases}$$

$$Q_{j,1} = \frac{1}{20}, \quad Q_{j,2} = Q_{j,6} = \frac{3}{20}, \quad Q_{j,3} = \frac{1}{4}, \quad Q_{j,4} = Q_{j,5} = \frac{1}{5}, \quad j = 1 \dots 20,$$

$$e_1 = -3b, \quad e_2 = -\sqrt{5}b, \quad e_3 = -b, \quad e_4 = 0, \quad e_5 = 2b, \quad e_6 = \sqrt{5}b, \quad b = -t. \quad (32)$$

В заключение отметим, что функции Грина димера (22) и (29), пентагона (30), гексагона (31) и фуллерена C_{20} (32), полученные в ПСФ методом, который предложен в данной работе, совпадают с функциями Грина, полученными в ПСФ другими методами [8–10, 14]. Таким образом, предложенный в данной работе метод позволяет в рамках модели Хаббарда в ПСФ вычислять антикоммутаторные функции Грина, корреляционные функции и энергетический спектр наносистем, а также различные термодинамические характеристики этих систем.

Список литературы

1. **Hubbard, J.** Electron correlations in narrow energy bands / J. Hubbard // *Proceedings of the Royal Society A*. – 1963. – Vol. 276. – P. 238–257.
2. **Gutzwiller, M. C.** Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals / M. C. Gutzwiller // *Physical Review Letters*. – 1963. – Vol. 10. – P. 159–162.
3. **Kanamori, J.** Electron correlations and ferromagnetism of transition metals / J. Kanamori // *Progress of Theoretical Physics*. – 1963. – Vol. 30. – P. 275–289.
4. **Зайцев, Р. О.** Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма / Р. О. Зайцев. – М. : УРСС, 2004. – С. 175.
5. **McKenzie, R. H.** A strongly correlated electron model for the layered organic superconductors $k\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{X}$ / R. H. McKenzie // *Comments on Condensed Matter Physics* – 1998. – Vol. 18. – P. 309–317.
6. Strength of Effective Coulomb Interactions in Graphene and Graphite / T. O. Wehling, E. Sasioglu, C. Friedrich, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, S. Blugel // *Physical Review Letters*. – 2011. – Vol. 106. – P. 236805.
7. **Иванченко, Г. С.** Проводимость двухслойных углеродных нанотрубок в рамках модели Хаббарда / Г. С. Иванченко, Н. Г. Лебедев // *Физика твердого тела*. – 2007. – Т. 49. – С. 183–189.
8. **Силантьев, А. В.** Применение метода статических флуктуаций к модели Хаббарда / А. В. Силантьев // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки*. – 2011. – № 3 (19). – С. 151–163.
9. **Силантьев, А. В.** Модель Хаббарда в приближении статических флуктуаций / А. В. Силантьев // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки*. – 2011. – № 4 (20). – С. 86–100.
10. **Силантьев, А. В.** Исследование наносистем в рамках модели Хаббарда / А. В. Силантьев // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки*. – 2012. – № 4 (24). – С. 214–226.
11. **Силантьев, А. В.** Фуллерен C_{60} в рамках модели Хаббарда / А. В. Силантьев // *Известия вузов. Физика*. – 2013. – Т. 56, № 2. – С. 70–79.
12. **Нигматуллин, Р. Р.** Корреляционные функции для анизотропной модели Гейзенберга в нулевом магнитном поле / Р. Р. Нигматуллин, В. А. Тобоев // *Теоретическая и математическая физика*. – 1986. – Т. 68. – С. 88–97.
13. **Тябликов, С. В.** Методы квантовой теории магнетизма / С. В. Тябликов. – М. : Наука, 1975. – С. 527.
14. **Силантьев, А. В.** Влияние деформации на энергетический спектр фуллерена C_{20} / А. В. Силантьев // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки*. – 2013. – № 1 (25). – С. 135–143.

References

1. Hubbard J. *Proceedings of the Royal Society A*. 1963, vol. 276, pp. 238–257.
2. Gutzwiller M. C. *Physical Review Letters*. 1963, vol. 10, pp. 159–162.
3. Kanamori J. *Progress of Theoretical Physics*. 1963, vol. 30, pp. 275–289.
4. Zaytsev R. O. *Diagrammnye metody v teorii sverkhprovodimosti i ferromagnetizma* [Diagram methods in the theory of superconductivity and ferromagnetics]. Moscow: URSS, 2004, p. 175.
5. McKenzie R. H. *Comments on Condensed Matter Physics*. 1998, vol. 18, pp. 309–317.
6. Wehling T. O., Sasioglu E., Friedrich C., Lichtenstein A. I., Katsnelson M. I., Blugel S. *Physical Review Letters*. 2011, vol. 106, p. 236805.
7. Ivanchenko G. S., Lebedev N. G. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 2007, vol. 49, pp. 183–189.
8. Silant'ev A. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2011, no. 3 (19), pp. 151–163.

9. Silant'ev A. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2011, no. 4 (20), pp. 86–100.
10. Silant'ev A. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2012, no. 4 (24), pp. 214–226.
11. Silant'ev A. V. *Izvestiya vuzov. Fizika* [University proceedings. Physics]. 2013, vol. 56, no. 2, pp. 70–79.
12. Nigmatullin R. R., Toboev V. A. *Teoreticheskaya i matematicheskaya fizika* [Theoretical and mathematical physics]. 1986, vol. 68, pp. 88–97.
13. Tyablikov S. V. *Metody kvantovoy teorii magnetizma* [Methods of the quantum theory of magnetism]. Moscow: Nauka, 1975, p. 527.
14. Silant'ev A. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2013, no. 1 (25), pp. 135–143.

Силантьев Анатолий Владимирович

старший преподаватель, кафедра физики
и методики преподавания физики,
Марийский государственный
университет (Россия,
г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, 1)

E-mail: kvvant@rambler.ru

Silant'ev Anatoliy Vladimirovich

Senior lecturer, sub-department of physics
and physics teaching technique, Mari
State University (1 Lenina square,
Yoshkar-Ola, Russia)

УДК 538.1

Силантьев, А. В.

Исследование наносистем в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций / А. В. Силантьев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 2 (34). – С. 164–175.