УДК 538.22

А. В. Силантьев

ДИМЕР В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Аннотация.

Актуальность и цели. Точно решаемые модели имеют важное значение в квантовой физике, поскольку большинство моделей в квантовой физике не являются точно решаемыми. Используя точные решения, можно провести детальный анализ поведения рассматриваемой модели. Кроме того, используя точные решения в качестве эталона, можно сравнить их с решениями, полученными приближенным методом. Димер в модели Хаббарда относится к точно решаемой модели. Целью настоящей работы является сравнение точных решений, полученных для димера в модели Хаббарда, с решениями, полученными в приближении статических флуктуаций.

Материалы и методы. В работе при получении точных решений и решений в приближении статических флуктуаций использовался метод уравнений движения для операторов рождения, метод функций Грина и спектральная теорема. Знание функций Грина позволяет определить энергетический спектр квантовой системы, поскольку полюса функций Грина соответствуют энергетическим состояниям квантовой системы. Спектральная теорема позволяет, зная функции Грина, вычислить корреляционные функции квантовой системы.

Результаты. В результате использования методов квантовой теории поля были получены как точные, так и в приближении статических флуктуаций антикоммутаторные функции Грина для димера. С использованием антикоммутаторных функций Грина были получены корреляционные функции и энергетический спектр для димера.

Выводы. Полученные в работе результаты показывают, что в димере, как и в более сложных системах, энергетический спектр при сильном кулоновском отталкивании электронов расщепляется на две подзоны Хаббарда, а также происходит переход «метал – диэлектрик». Кроме того, в данной работе показано, что некоторые энергетические состояния димера, полученные в приближении статических флуктуаций, совпадают с энергетическими состояниями димера, полученными из точного решения.

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

A. V. Silant'ev

DIMER IN THE HUBBARD MODEL

Abstract.

Background. Exactly solvable models are of great importance in quantum physics, as most models in quantum physics are not exactly solvable. The detailed analysis of exactly solvable model's behavior can be made by exact solutions. The solutions of exactly solvable models, obtained by the approximation method, can be compared with exact solutions, used as standards. A dimer in the Hubbard model is an exactly solvable model. The purpose of this paper is to compare exact solutions obtained for a dimer in the Hubbard model, with solutions obtained for a dimer by approximation of static fluctuations.

Materials and methods. In this study, to construct exact solutions and solutions in approximation of static fluctuations the authors used the method of motion equa-

tions for creation operators, the method of Green's functions and the spectral theorem. The energy spectrum of a quantum system can be calculated by Green's functions, as the poles of Green's functions correspond to the energy spectrum of a quantum system. Knowing the Green's functions, the spectral theorem allows to calculate the correlation functions of the quantum system.

Results. Resulting from the usage of the methods of the quantum field theory there were obtained anticommutator Green's functions for a dimer, that were both exact and in approximation of static fluctuations. Using the anticommutator Green's functions the authors obtained correlation functions and the energy spectrum for a dimer.

Conclusions. This work demonstrates that the energy spectrum of a dimer is split by a strong Coulomb repulsion of electrons on two Hubbard subbands and the "metal-insulator" transition occurs in a dimer. This work also demonstrates that several energy states of a dimer, obtained by the approximation of static fluctuations, coincide with energy states of a dimer, obtained by an exact solution.

Key words: Hubbard model, Green's functions, energy spectrum, dimer, nanosystems.

В настоящее время изучению низкоразмерных сильно коррелируемых электронных систем и их структурных элементов посвящено большое число теоретических исследований. Для описания этих систем используется модель Хаббарда, которая была одновременно предложена Хаббардом [1], Гутцвиллером [2] и Канамори [3]. Отметим, что модель Хаббарда является частным случаем полярной модели Шубина – Вонсовского, которая была предложена в 1934 г. [4]. В полярной модели наряду с кулоновским взаимодействием электронов, находящихся на одном узле, учитывается также взаимодействие электронов, которые находятся на соседних узлах. В модели Хаббарда сильно коррелируемые электронные системы описываются гамильтонианом следующего вида:

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

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 взаимодействия двух электронов с разными спинами, находящихся на i-м узле; $\bar{\sigma} = -\sigma$.

Примерами квазидвумерных сильно коррелируемых электронных систем могут служить органические сверхпроводники $\kappa-(ET)_2X$ и $\theta-(ET)_2X$, проводящие слои которых состоят из димеров, которые образованы двумя молекулами ET [5]. Как показывают расчеты, для $k-(ET)_2Cu(SCN)_2$ энергия кулоновского отталкивания электронов, находящихся на одной молекуле ET, принимает следующее значение: U = 3,9 эВ [6], а интеграл переноса внутри димера t = –0,244 эВ [7]. Отметим, что интегралы переноса между димерами в $k-(ET)_2Cu(SCN)_2$ намного меньше $|t|$.

Отметим также, что димер в рамках модели Хаббарда используется в качестве модели двухатомных молекул. Например, в [8] димер используется для описания молекулы водорода, а в [9] – для описания как молекулы водорода, так и двухатомной гетерополярной молекулы LiH.

Цель данной работы состоит в том, чтобы получить для димера как точное решение, так и решение в приближении статических флуктуаций (ПСФ) [10–12]. Отметим, что в настоящее время имеется несколько подходов к вычислению функций Грина в ПСФ. Анализ этих подходов приведен в работе [13].

Функция Грина и корреляционные функции димера: точное решение

Из формулы (1) следует, что димер в рамках модели Хаббарда описывается следующим гамильтонианом:

$$H = \sum_{\sigma}\left[\varepsilon\cdot\left(n_{1\sigma}+n_{2\sigma}\right)+t\cdot\left(c_{1\sigma}^{+}c_{2\sigma}+c_{2\sigma}^{+}c_{1\sigma}\right)+\frac{U}{2}\left(n_{1\sigma}n_{1\bar{\sigma}}+n_{2\sigma}n_{2\bar{\sigma}}\right)\right]. \quad (2)$$

Для того чтобы вычислить функцию Грина, прежде всего найдем выражение для оператора $c_{f\sigma}^{+}(\tau)$, заданного в представлении Гейзенберга. Для этого запишем уравнение движения для этого оператора:

$$\frac{dc_{f\sigma}^{+}}{d\tau}=\varepsilon\cdot c_{f\sigma}^{+}+t\cdot c_{j\sigma}^{+}+U\cdot c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}, \quad (3)$$

где $\tau=it, j=1,2; f=1,2; j\neq f$.

Как видно из (3), для того чтобы найти оператор $c_{f\sigma}^{+}(\tau)$, необходимо еще получить уравнение движения для оператора $c_{f\sigma}^{+}n_{f}$:

$$\frac{dc_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}}{d\tau}=\left(\varepsilon+U\right)c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}+t\left(c_{f\sigma}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}^{+}c_{f\bar{\sigma}}-c_{f\sigma}^{+}c_{f\bar{\sigma}}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}+c_{j,\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}\right), \quad (4)$$

где $j=1,2; f=1,2; j\neq f$.

Как видно из (4), данное дифференциальное уравнение содержит целый ряд новых операторов. Составляя уравнения движения для вновь появляющихся операторов, мы получим замкнутую систему дифференциальных уравнений:

$$\frac{dc_{f\sigma}^{+}}{d\tau}=\varepsilon\cdot c_{f\sigma}^{+}+t\cdot c_{j\sigma}^{+}+U\cdot c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}},$$

$$\frac{dc_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}}{d\tau}=\left(\varepsilon+U\right)c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}+t\left(c_{f\sigma}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}^{+}c_{f\bar{\sigma}}-c_{f\sigma}^{+}c_{f\bar{\sigma}}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}+c_{j,\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}\right),$$

$$\frac{dc_{f\sigma}^{+}n_{j,\bar{\sigma}}}{d\tau}=\varepsilon\cdot c_{f\sigma}^{+}n_{j,\bar{\sigma}}+Uc_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}n_{j,\bar{\sigma}}+t\left(c_{f\sigma}^{+}c_{f\bar{\sigma}}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}-c_{f\sigma}^{+}c_{j,\bar{\sigma}}^{+}c_{f\bar{\sigma}}+c_{j,\sigma}^{+}n_{j,\bar{\sigma}}\right),$$

$$\frac{dc^+_{f\sigma}n_{j,\sigma}}{d\tau}=\varepsilon\cdot c^+_{f\sigma}n_{j,\sigma}+Uc^+_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}+tc^+_{j,\sigma}n_{f\sigma},$$

$$\frac{dc^+_{f\sigma}n_{j,\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}}{d\tau}=\varepsilon\cdot c^+_{f\sigma}n_{j,\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}+Uc^+_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}+$$

$$+t\ \left(c^+_{f\sigma}c^+_{f\bar{\sigma}}c_{j,\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}-c^+_{f\sigma}c^+_{j,\bar{\sigma}}c_{f\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}+c^+_{j,\sigma}n_{f\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}\right),$$

$$\frac{dc^+_{f\sigma}n_{j,\sigma}n_{f\bar{\sigma}}}{d\tau}=(\varepsilon+U)c^+_{f\sigma}n_{j,\sigma}n_{f\bar{\sigma}}+$$

$$+t\ \left(c^+_{f\sigma}c^+_{j,\bar{\sigma}}c_{f\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}-c^+_{f\sigma}c^+_{f\bar{\sigma}}c_{j,\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}+c^+_{j,\sigma}n_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}\right),$$

$$\frac{dc^+_{f\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}}{d\tau}=(\varepsilon+U)c^+_{f\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}+t\ c^+_{j,\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}},$$

$$\frac{dc^+_{f\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}}{d\tau}=(\varepsilon+U)c^+_{f\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}+t\ c^+_{j,\sigma}n_{f\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}},$$

$$\frac{dc^+_{f\sigma}c^+_{j,\bar{\sigma}}c_{f\bar{\sigma}}}{d\tau}=\varepsilon\cdot c^+_{f\sigma}c^+_{j,\bar{\sigma}}c_{f\bar{\sigma}}+$$

$$+t\ \left(c^+_{j,\sigma}c^+_{j,\bar{\sigma}}c_{f\bar{\sigma}}+c^+_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}-c^+_{f\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}\right)+Uc^+_{f\sigma}c^+_{j,\bar{\sigma}}c_{f\bar{\sigma}}n_{j,\sigma},$$

$$\frac{dc^+_{f\sigma}c^+_{f\bar{\sigma}}c_{j,\bar{\sigma}}}{d\tau}=(\varepsilon+U)c^+_{f\sigma}c^+_{f\bar{\sigma}}c_{j,\bar{\sigma}}-Uc^+_{f\sigma}c^+_{f\bar{\sigma}}c_{j,\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}+$$

$$+t\ \left(c^+_{j,\sigma}c^+_{f\bar{\sigma}}c_{j,\bar{\sigma}}+c^+_{f\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}-c^+_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}\right),$$

$$\frac{dc^+_{f\sigma}c^+_{j,\bar{\sigma}}c_{f\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}}{d\tau}=(\varepsilon+U)c^+_{f\sigma}c^+_{j,\bar{\sigma}}c_{f\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}+$$

$$+t\ \left(c^+_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}-c^+_{f\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}+c^+_{j,\sigma}c^+_{j,\bar{\sigma}}c_{f\bar{\sigma}}n_{f\sigma}\right),$$

$$\frac{dc^+_{f\sigma}c^+_{f\bar{\sigma}}c_{j,\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}}{d\tau}=\varepsilon\cdot c^+_{f\sigma}c^+_{f\bar{\sigma}}c_{j,\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}+$$

$$+t\ \left(c^+_{f\sigma}n_{j,\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}-c^+_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}n_{j,\sigma}+c^+_{j,\sigma}c^+_{f\bar{\sigma}}c_{j,\bar{\sigma}}n_{f\sigma}\right), \qquad (5)$$

где $j=1,2;\ f=1,2;\ j\neq f$.

Система уравнений (5), содержащая 24 дифференциальных уравнения первого порядка, является замкнутой и имеет точное аналитическое решение. Поскольку решение является громоздким, то мы его здесь не приводим. Зная

решение системы уравнений (5), мы можем найти Фурье-образ антикоммутаторной функции Грина:

$$\left\langle\left\langle c_{2\sigma}^{+}\middle| c_{2\sigma}\right\rangle\right\rangle = \frac{i}{2\pi}\cdot\sum_{m=1}^{8}\frac{F_m}{E-E_m+ih}, \tag{6}$$

$$F_1 = (R-4b)\Big(-2\left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}n_{2\sigma}\right\rangle + \left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle +$$

$$+\left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{1\bar{\sigma}}^{+}c_{2\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}}n_{1\bar{\sigma}}\rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}}\rangle + \left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}\right\rangle\Big)\Big/(4R),$$

$$F_2 = \Big(2-2\left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}n_{2\sigma}\right\rangle - \left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle -$$

$$-\left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{1\bar{\sigma}}^{+}c_{2\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle + \langle n_{2\bar{\sigma}}n_{1\bar{\sigma}}\rangle - 3\langle n_{1\bar{\sigma}}\rangle + \left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}\right\rangle\Big)\Big/4,$$

$$F_3 = (R+4b)\Big(2\left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}n_{2\sigma}\right\rangle + \left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle +$$

$$+\left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{1\bar{\sigma}}^{+}c_{2\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}}n_{1\bar{\sigma}}\rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}}\rangle - \left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}\right\rangle\Big)\Big/(4R),$$

$$F_4 = \Big(2+2\left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}n_{2\sigma}\right\rangle - \left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle -$$

$$-\left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{1\bar{\sigma}}^{+}c_{2\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle + \langle n_{2\bar{\sigma}}n_{1\bar{\sigma}}\rangle - 3\langle n_{1\bar{\sigma}}\rangle - \left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}\right\rangle\Big)\Big/4,$$

$$F_5 = \Big(-2\left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}n_{2\sigma}\right\rangle - \left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle -$$

$$-\left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{1\bar{\sigma}}^{+}c_{2\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle + \langle n_{2\bar{\sigma}}n_{1\bar{\sigma}}\rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}}\rangle + \left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}\right\rangle\Big)\Big/4,$$

$$F_6 = (R+4b)\Big(-2\left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}n_{2\sigma}\right\rangle + \left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle +$$

$$+\left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{1\bar{\sigma}}^{+}c_{2\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}}n_{1\bar{\sigma}}\rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}}\rangle + \left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}\right\rangle\Big)\Big/(4R),$$

$$F_7 = \Big(2\left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}n_{2\sigma}\right\rangle - \left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle -$$

$$-\left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{1\bar{\sigma}}^{+}c_{2\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle + \langle n_{2\bar{\sigma}}n_{1\bar{\sigma}}\rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}}\rangle - \left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}\right\rangle\Big)\Big/4,$$

$$F_8 = (R-4b)\Big(2\left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}n_{2\sigma}\right\rangle + \left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle +$$

$$+\left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{1\bar{\sigma}}^{+}c_{2\bar{\sigma}}c_{1\sigma}\right\rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}}n_{1\bar{\sigma}}\rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}}\rangle - \left\langle c_{2\bar{\sigma}}^{+}c_{1\bar{\sigma}}\right\rangle\Big)\Big/(4R),$$

$$E_1 = \varepsilon + (U-R)/2 - b, \quad E_2 = \varepsilon - b, \quad E_3 = \varepsilon + (U-R)/2 + b, \quad E_4 = \varepsilon + b,$$

$$E_5 = \varepsilon + U - b, \quad E_6 = \varepsilon + (U+R)/2 - b, \quad E_7 = \varepsilon + U + b,$$

$$E_8 = \varepsilon + (U+R)/2 + b, \qquad R = \sqrt{U^2 + 16b^2}\ , \tag{7}$$

где F_m – спектральная плотность энергетического состояния E_m, $b = -t$.

Зная решение системы уравнений (5), мы можем также найти корреляционные функции:

$$\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{2} \big(3\varphi(e+U-b) + \varphi\big((4e+3U-R)/2\big) + \varphi(3e+2U-b) +$$

$$+\varphi(3e+2U+b) + 3\varphi(e+U+b) + \varphi(2e+U) + \varphi(2e+2U) +$$

$$+\varphi\big((4e+3U+R)/2\big) + \varphi\big(2(e+U)\big) + 2\big),$$

$$\left\langle c^{+}_{2\bar{\sigma}} c_{1\bar{\sigma}} \right\rangle = \frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{2R} \big(4b\varphi\big((4e+3U+R)/2\big) - 4b\varphi\big((4e+3U-R)/2\big) +$$

$$+R\varphi(3e+2U+b) + R\varphi(e+U+b) - R\varphi(e+U-b) - R\varphi(3e+2U-b)\big),$$

$$\left\langle c^{+}_{2\bar{\sigma}} c_{1\bar{\sigma}} n_{2\sigma} \right\rangle = -\frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{2R} \big(R\varphi(e+U-b) - R\varphi(e+U+b) -$$

$$-2b\varphi\big((4e+3U+R)/2\big) + 2b\varphi\big((4e+3U-R)/2\big)\big),$$

$$\left\langle c^{+}_{2\sigma} c^{+}_{1\bar{\sigma}} c_{2\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \right\rangle = \frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{4R} \big((R-U)\varphi\big((4e+3U-R)/2\big) +$$

$$+(R+U)\varphi\big((4e+3U+R)/2\big) - 2R\varphi(2e+2U)\big),$$

$$\left\langle c^{+}_{2\sigma} c^{+}_{2\bar{\sigma}} c_{1\bar{\sigma}} c_{1\sigma} \right\rangle = \frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{2} \big(-2R\varphi(2e+U) +$$

$$+(U+R)\varphi\big((4e+3U-R)/2\big) + (-U+R)\varphi\big((4e+3U+R)/2\big)\big),$$

$$\langle n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{4R} \big(2R\varphi(2e+U) + 4R\big(\varphi(e+U+b) + \varphi(e+U-b) + 1\big) +$$

$$+(R+U)\varphi\big((4e+3U-R)/2\big) + (R-U)\varphi\big((4e+3U+R)/2\big)\big),$$

$$\langle n_{2\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{4R} \big(2R\varphi(2e+2U) + 4R\big(\varphi(e+U+b) + \varphi(e+U-b) + 1\big) +$$

$$+(R-U)\varphi\big((4e+3U-R)/2\big) + (R+U)\varphi\big((4e+3U+R)/2\big)\big),$$

$$\langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle \big(1 + \varphi(e+U+b)\big)\big(1 + \varphi(e+U-b)\big),$$

$$\left\langle c^{+}_{1\bar{\sigma}} c_{2\bar{\sigma}} n_{2\sigma} \right\rangle = -\frac{\langle n_{2\sigma} n_{2\bar{\sigma}} n_{1\sigma} n_{1\bar{\sigma}} \rangle}{2R} \big(2b\varphi\big((4e+3U-R)/2\big) -$$

$$-2b\varphi\left(\left(4e+3U+R\right)/2\right)+R\varphi\left(e+U-b\right)-R\varphi\left(e+U+b\right)\Big),$$

$$\left\langle c_{2\sigma}^{+}c_{1\sigma}n_{2\bar{\sigma}}n_{1\bar{\sigma}}\right\rangle=\frac{\left\langle n_{2\sigma}n_{2\bar{\sigma}}n_{1\sigma}n_{1\bar{\sigma}}\right\rangle}{2}\left(-\varphi\left(e+U-b\right)+\varphi\left(e+U+b\right)\right),$$

$$\left\langle n_{1\sigma}n_{2\bar{\sigma}}n_{1\bar{\sigma}}\right\rangle=\frac{\left\langle n_{2\sigma}n_{2\bar{\sigma}}n_{1\sigma}n_{1\bar{\sigma}}\right\rangle}{2}\left(2+\varphi\left(e+U-b\right)+\varphi\left(e+U+b\right)\right),$$

$$\left\langle n_{2\sigma}n_{2\bar{\sigma}}n_{1\sigma}n_{1\bar{\sigma}}\right\rangle=1\Big/\Big(2\varphi\left(2\left(e+U\right)\right)+\varphi\left(\left(4e+3U+R\right)/2\right)+\varphi\left(\left(4e+3U-R\right)/2\right)+$$

$$+2\varphi\left(e+U+b\right)+2\varphi\left(3e+2U-b\right)+$$

$$+2\varphi\left(3e+2U+b\right)+\varphi\left(2e+U\right)+\varphi\left(2e+2U\right)+2\varphi\left(e+U-b\right)+1\Big),$$

$$\varphi\left(E\right)=\exp\left(E/kT\right),\qquad e=\varepsilon-\mu\,, \tag{8}$$

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

Функция Грина димера в приближении статических флуктуаций

Для того чтобы найти функцию Грина димера в ПСФ [11], найдем прежде всего решение уравнения (3) в ПСФ. В работе [11] показано, что в ПСФ оператор $n_{f\bar{\sigma}}$ является интегралом движения. Умножая (3) на оператор $n_{f\bar{\sigma}}$ и учитывая, что $\left(n_{f\bar{\sigma}}\right)^2=n_{f\bar{\sigma}}$, получим

$$\frac{d\left(c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}\right)}{d\tau}=\left(\varepsilon+U\right)c_{f\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}}+t\cdot c_{i\sigma}^{+}n_{f\bar{\sigma}},\quad i\neq f. \tag{9}$$

Для того чтобы получить замкнутую систему дифференциальных уравнений, запишем уравнения движения для операторов $c_{1\sigma}^{+}$, $c_{2\sigma}^{+}$, $c_{1\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}}$, $c_{1\sigma}^{+}n_{2\bar{\sigma}}$, $c_{2\sigma}^{+}n_{2\bar{\sigma}}$, $c_{2\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}}$, $c_{1\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}}n_{2\bar{\sigma}}$, $c_{2\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}}n_{2\bar{\sigma}}$:

$$\frac{dc_{1\sigma}^{+}}{d\tau}=\varepsilon\cdot c_{1\sigma}^{+}+t\cdot c_{2\sigma}^{+}+U\cdot c_{1\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}},$$

$$\frac{dc_{2\sigma}^{+}}{d\tau}=\varepsilon\cdot c_{2\sigma}^{+}+t\cdot c_{1\sigma}^{+}+U\cdot c_{2\sigma}^{+}n_{2\bar{\sigma}},$$

$$\frac{dc_{1\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}}}{d\tau}=\left(\varepsilon+U\right)\cdot c_{1\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}}+t\cdot c_{2\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}},$$

$$\frac{dc_{2\sigma}^{+}n_{2\bar{\sigma}}}{d\tau}=\left(\varepsilon+U\right)\cdot c_{2\sigma}^{+}n_{2\bar{\sigma}}+t\cdot c_{1\sigma}^{+}n_{2\bar{\sigma}},$$

$$\frac{dc_{1\sigma}^{+}n_{2\bar{\sigma}}}{d\tau}=\varepsilon\cdot c_{1\sigma}^{+}n_{2,\bar{\sigma}}+t\cdot c_{2\sigma}^{+}n_{2\bar{\sigma}}+U\cdot c_{1\sigma}^{+}n_{1\bar{\sigma}}n_{2\bar{\sigma}},$$

$$\frac{dc^{+}_{2\sigma}n_{1\bar{\sigma}}}{d\tau}=\varepsilon\cdot c^{+}_{2\sigma}n_{1,\bar{\sigma}}+t\cdot c^{+}_{1\sigma}n_{1\bar{\sigma}}+U\cdot c^{+}_{2\sigma}n_{1\bar{\sigma}}n_{2\bar{\sigma}},$$

$$\frac{dc^{+}_{1\sigma}n_{1\bar{\sigma}}n_{2,\bar{\sigma}}}{d\tau}=(\varepsilon+U)\;\; c^{+}_{1\sigma}n_{1\bar{\sigma}}n_{2,\bar{\sigma}}+t\cdot c^{+}_{2\sigma}n_{1\bar{\sigma}}n_{2,\bar{\sigma}},$$

$$\frac{dc^{+}_{2\sigma}n_{1\bar{\sigma}}n_{2,\bar{\sigma}}}{d\tau}=(\varepsilon+U)\;\; c^{+}_{2\sigma}n_{1\bar{\sigma}}n_{2,\bar{\sigma}}+t\cdot c^{+}_{1\sigma}n_{1\bar{\sigma}}n_{2,\bar{\sigma}}. \qquad (10)$$

Решив систему уравнений (10), получим для операторов $c^{+}_{1\sigma}$, $c^{+}_{2\sigma}$ следующие выражения:

$$c^{+}_{j\sigma}(\tau)=\frac{1}{2}\Big[c^{+}_{j\sigma}(0)-c^{+}_{j\sigma}n_{j\bar{\sigma}}(0)-c^{+}_{j\sigma}n_{f\bar{\sigma}}(0)+c^{+}_{j\sigma}n_{j\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}(0)+c^{+}_{f\sigma}(0)-$$

$$-c^{+}_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}(0)-c^{+}_{f\sigma}n_{j\bar{\sigma}}(0)+c^{+}_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}n_{j\bar{\sigma}}(0)\Big]\cdot\exp(E_1\tau)+\frac{1}{2}\Big(c^{+}_{j\sigma}n_{j\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}(0)-$$

$$-c^{+}_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}n_{j\bar{\sigma}}(0)\Big)\cdot\exp(E_6\tau)+\frac{1}{2}\Big[c^{+}_{j\sigma}(0)-c^{+}_{j\sigma}n_{j\bar{\sigma}}(0)-c^{+}_{j\sigma}n_{f\bar{\sigma}}(0)+$$

$$+c^{+}_{j\sigma}n_{j\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}(0)-c^{+}_{f\sigma}(0)+c^{+}_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}+c^{+}_{f\sigma}n_{j\bar{\sigma}}(0)-c^{+}_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}n_{j\bar{\sigma}}(0)\Big]\cdot\exp(E_3\tau)+$$

$$+\frac{1}{2}\Big(c^{+}_{j\sigma}n_{j\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}(0)+c^{+}_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}n_{j\bar{\sigma}}(0)\Big)\cdot\exp(E_4\tau)+$$

$$+\frac{1}{2}\Bigg[c^{+}_{j\sigma}n_{j\bar{\sigma}}(0)+c^{+}_{j\sigma}n_{f\bar{\sigma}}(0)-2c^{+}_{j\sigma}n_{j\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}(0)+\frac{U}{R_1}\Big(c^{+}_{j\sigma}n_{j\bar{\sigma}}(0)-c^{+}_{j\sigma}n_{f\bar{\sigma}}(0)\Big)-$$

$$-2\frac{b}{R_1}\Big(c^{+}_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}(0)+c^{+}_{f\sigma}n_{j\bar{\sigma}}(0)-2c^{+}_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}n_{j\bar{\sigma}}(0)\Big)\Bigg]\cdot\exp(E_5\tau)+$$

$$+\frac{1}{2}\Bigg[c^{+}_{j\sigma}n_{j\bar{\sigma}}(0)+c^{+}_{j\sigma}n_{f\bar{\sigma}}(0)-2c^{+}_{j\sigma}n_{j\bar{\sigma}}n_{f\bar{\sigma}}(0)+\frac{U}{R_1}\Big(-c^{+}_{j\sigma}n_{j\bar{\sigma}}(0)+c^{+}_{j\sigma}n_{f\bar{\sigma}}(0)\Big)-$$

$$-2\frac{b}{R_1}\Big(-c^{+}_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}(0)-c^{+}_{f\sigma}n_{j\bar{\sigma}}(0)+2c^{+}_{f\sigma}n_{f\bar{\sigma}}n_{j\bar{\sigma}}(0)\Big)\Bigg]\cdot\exp(E_2\tau), \qquad (11)$$

где $j=1,2; f=1,2; j\neq f$;

$$E_1=\varepsilon-b,\quad E_2=\varepsilon+(U-R_1)/2,\quad E_3=\varepsilon+b,\quad E_4=\varepsilon+U-b,$$

$$E_5=\varepsilon+(U+R_1)/2,\quad E_6=\varepsilon+U+b,\quad R_1=\sqrt{U^2+4b^2}\,. \qquad (12)$$

Зная выражения (11) для операторов $c^{+}_{1\sigma}$, $c^{+}_{2\sigma}$, мы можем найти Фурье-образ антикоммутаторных функций Грина:

$$\left\langle\left\langle c^{+}_{2\sigma}\middle|c_{2\sigma}\right\rangle\right\rangle=\frac{i}{2\pi}\cdot\sum_{m=1}^{6}\frac{F_m}{E-E_m+ih}, \qquad (13)$$

где

$$F_1 = F_3 = \left(1 + \left\langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \right\rangle\right)/2 - \left\langle n_{1\bar{\sigma}} \right\rangle,$$

$$F_2 = F_5 = \left\langle n_{1\bar{\sigma}} \right\rangle - \left\langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \right\rangle,\ F_4 = F_6 = \left\langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \right\rangle/2. \qquad (14)$$

Используя соотношения (11), (13) и спектральную теорему [14], получим выражения для корреляционных функций:

$$\left\langle n_{1\sigma} \right\rangle = \left\langle n_{1\bar{\sigma}} \right\rangle = \left\langle n_{2\sigma} \right\rangle = \left\langle n_{2\bar{\sigma}} \right\rangle = \frac{K_1}{2K}, \qquad \left\langle n_{1\sigma} n_{2\sigma} \right\rangle = \left\langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}} \right\rangle = \frac{K_2}{K}, \qquad (15)$$

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

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

$$K_2 = f_F(E_5) f_F(E_2) \cdot \left[f_F(E_1) + f_F(E_3)\right],$$

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

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

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

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

$$f_F(E) = \left[e^{(E-\mu)/(kT)} + 1\right]^{-1}. \qquad (16)$$

Обсуждение результатов

Зная выражения для корреляционных функций димера, можно найти некоторые его физические характеристики. Например, для того чтобы найти химический потенциал димера, следует решить уравнение на химпотенциал:

$$2\left\langle n_{j\sigma} \right\rangle = n, \qquad (17)$$

где n – средняя концентрация электронов в системе.

Подставляя корреляционную функцию из (8) в (17), получим, что в случае, когда зона проводимости заполнена на половину ($n = 1$), химический потенциал димера имеет следующий вид:

$$\mu = \varepsilon + \frac{U}{2}. \qquad (18)$$

Таким образом, при n = 1 химический потенциал димера не зависит от температуры и сдвинут относительно энергии одноэлектронного атомного состояния на $U/2$.

Как известно, полюса функций Грина определяют энергетический спектр системы. Как видно из соотношений (6), (13) и (14), в точном решении у димера имеется 8 энергетических состояний, в приближении неоднородных

статических флуктуаций имеется 6 энергетических состояний, а в случае однородных статических флуктуаций имеется только 4 энергетических состояния, поскольку в этом случае $\langle n_{2\bar{\sigma}} n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle$. Отметим, что половина энергетических состояний находится вблизи энергии $\varepsilon + U$, образуя верхнюю подзону Хаббарда, а оставшаяся половина энергетических состояний сосредоточена вблизи энергии ε, образуя нижнюю подзону Хаббарда. На рис. 1–6 представлены зависимости энергетических состояний димера относительно химического потенциала от $b/U\,(U/b)$ для точного решения, для решения, полученного в приближении неоднородных статических флуктуаций, и для решения, полученного в приближении однородных статических флуктуаций соответственно.

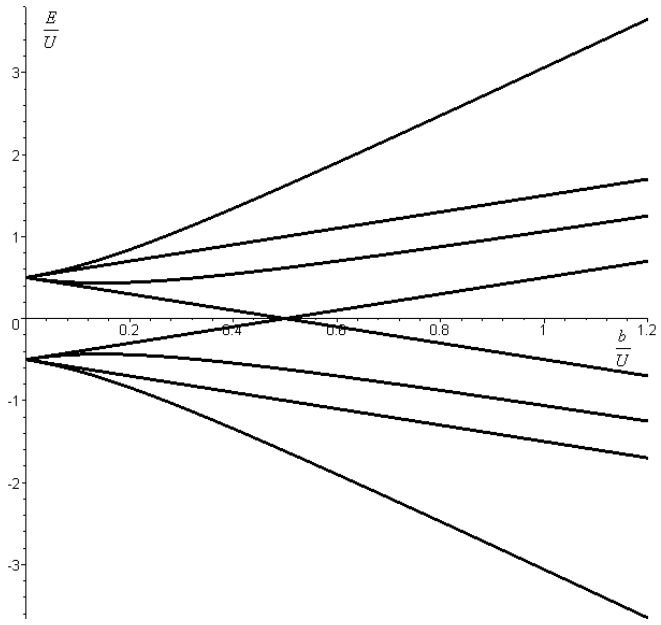

Рис. 1. Зависимость энергетического спектра димера, полученного из точного решения, от b/U

Из рис. 1–6 видно, что как в точном решении, так и в ПСФ при изменении параметра $b/U\ (U/b)$ одно энергетическое состояние переходит из нижней подзоны в верхнюю подзону, другое энергетическое состояние переходит из верхней подзоны в нижнюю подзону. Из формулы (7) следует, что при $2b < U$ энергетическое состояние E_5 находится в верхней подзоне, а энергетическое состояние E_4 находится в нижней подзоне; а при $2b > U$ энергетическое состояние E_4 находится в верхней подзоне, а энергетическое состояние E_5 находится в нижней подзоне. Переход энергетических состояний из одной подзоны в другую приводит к тому, что при некоторых значениях параметра b/U энергетическая щель между подзонами обращается в нуль. Как следует из соотношений (7), энергетическая щель между подзонами обращается в нуль при выполнении следующего условия:

$$U = 2b\,. \tag{19}$$

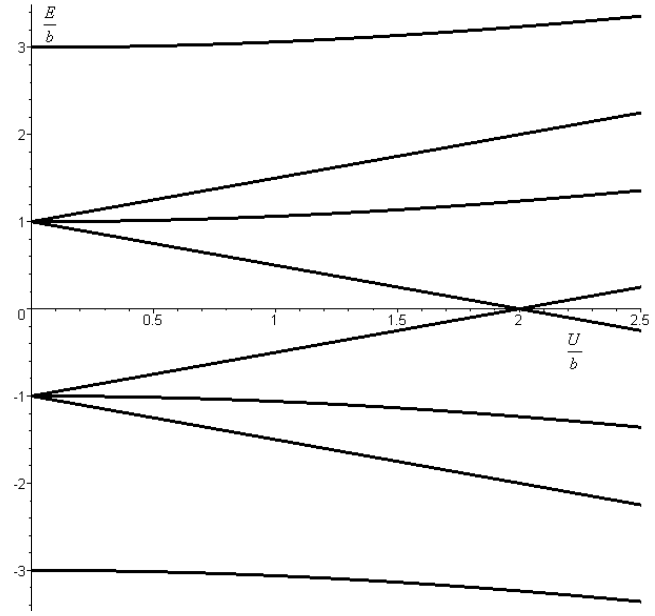

Рис. 2. Зависимость энергетического спектра димера, полученного из точного решения, от U/b

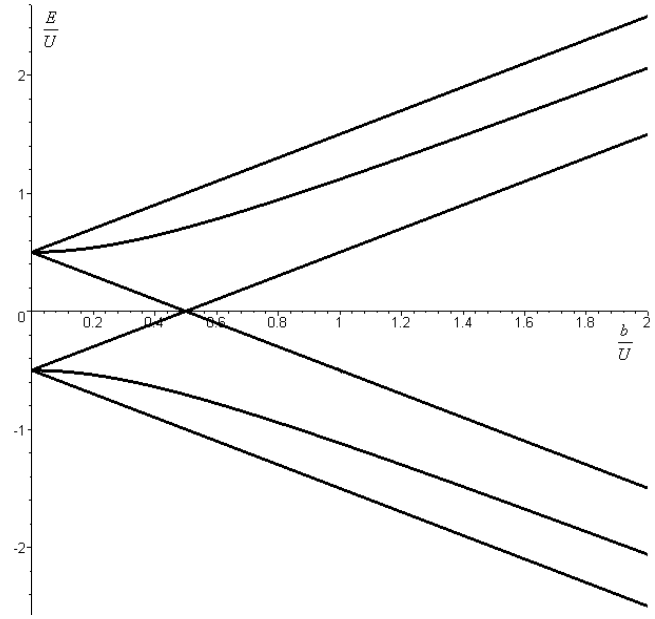

Рис. 3. Зависимость энергетического спектра димера, полученного в приближении неоднородных статических флуктуаций, от b/U

Таким образом, при выполнении условия (19) в системе происходит так называемый «фазовый переход металл–диэлектрик» [15], который наблюдается в более сложных системах.

Отметим, что условия, при которых энергетическая щель между подзонами обращается в нуль в ПСФ, совпадают с условием, которое было получе-

но из точного решения. Это связано с тем, что четыре энергетических уровня димера, полученные в ПСФ, совпадают с четырьмя из восьми энергетических уровней, полученных при точном решении.

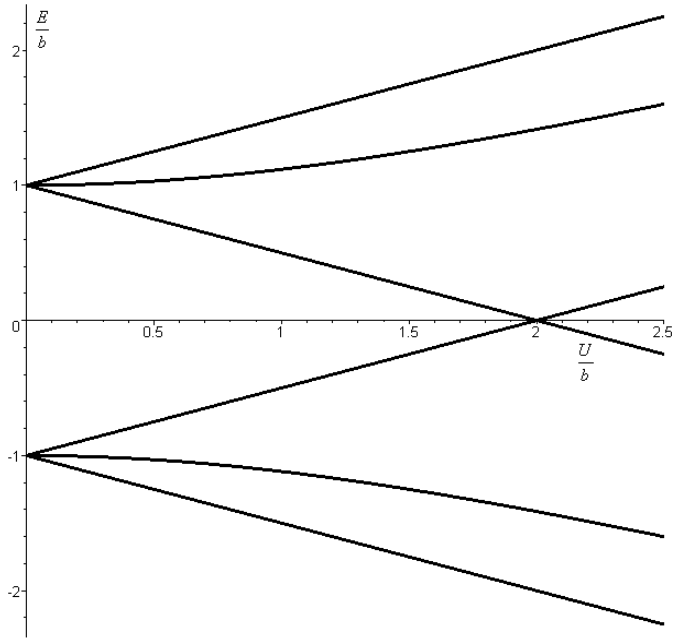

Рис. 4. Зависимость энергетического спектра димера, полученного в приближении неоднородных статических флуктуаций, от U/b

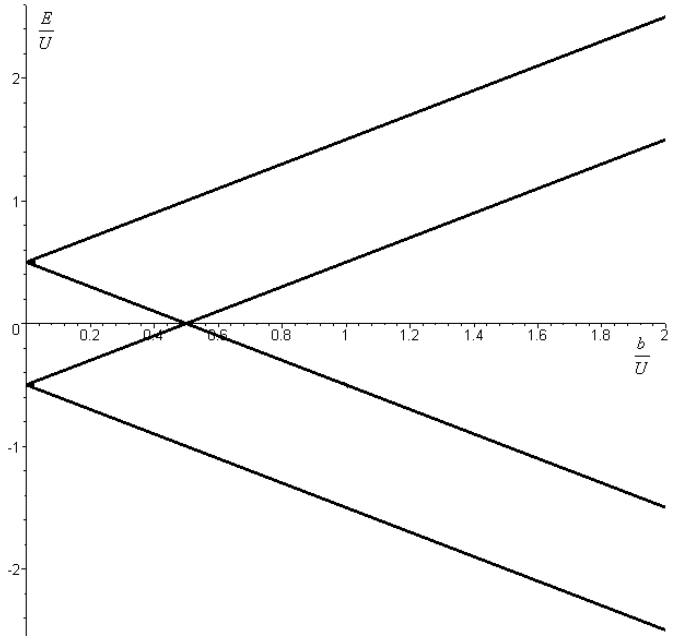

Рис. 5. Зависимость энергетического спектра димера, полученного в приближении однородных статических флуктуаций, от b/U

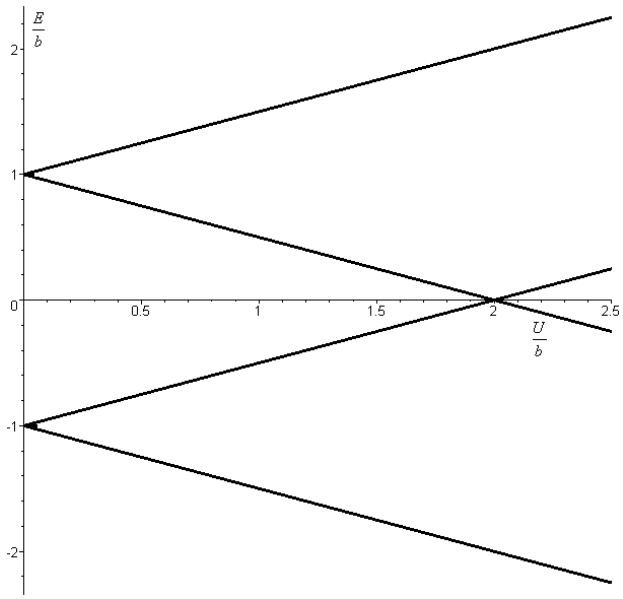

Рис. 6. Зависимость энергетического спектра димера,
полученного в приближении однородных статических флуктуаций, от U/b

Из рис. 1, 3 и 5 видно, что в атомном пределе, т.е. при $b = 0$, имеются только два энергетических состояния, которые расщепляются при $b \neq 0$ и образуют две подзоны Хаббарда. Из рис. 4 и рис. 6 видно, что в ПСФ в зонном пределе, т.е. при $U = 0$, имеются два энергетических состояния, которые расщепляются при $U \neq 0$. В точном решении при $U << b$, как видно из рис. 2, имеется существенное отличие от решения, полученного в ПСФ. Из (6) и (7) следует, что $F_1 = F_8 = 0$ при $U = 0$, и $F_1 \neq 0, F_8 \neq 0$ при $U \neq 0$. Таким образом, как видно из рис. 2, при $U \neq 0$ происходит не только расщепление двух энергетических состояний, но появляются новые энергетические состояния с энергиями E_1, E_8. Возможно, что в более сложных системах при $U << b$ кроме основной зоны также образуются дополнительные подзоны.

Полученные в работе результаты показывают, что в димере, как и в более сложных системах, энергетический спектр при сильном кулоновском отталкивании электронов расщепляется на две подзоны Хаббарда, щель между которыми при $U = 2b$ исчезает, что приводит к так называемому переходу «метал – диэлектрик», который наблюдается в сложных системах, описываемых моделью Хаббарда. Кроме того, в данной работе показано, что четыре энергетических состояния димера, полученные в ПСФ, совпадают с энергетическими состояниями димера, полученными из точного решения.

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. **Shubin, S. P.** On the electron tfeory of metals / S. P. Shubin, S. V. Wonsowskii // Proceedings of the Royal Society A. – 1934. – Vol. 145. – P. 159–180.
5. **McKenzie, R. H.** A strongly correlated electron model for the layered organic superconductors k-(BEDT-TTF)2X / R. H. McKenzie // Comments on Condensed Matter Physics. – 1998. – Vol. 18. – P. 309–317.
6. **Castet, F.** Determination of the coulombic interaction parameters of the extended Hubbard model in organic conductors / F. Castet, A. Fritsch, L. Ducasse // Journal of Physics I. – 1996. – Vol. 6. – P. 583–593.
7. **Campos, C. E.** Extended Hückel tight-binding study of the effect of pressure and uniaxial stress on the electronic structure of α-(BEDT-TTF)$_2$KHg(SCN)$_4$ and κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu(NCS)$_2$ / C. E. Campos, P. S. Sandhu, J. S. Brooks, T. Ziman // Physical Review B. – 1996. – Vol. 53. – P. 12725.
8. **Alvarez-Fernández, B.** The Hubbard model for the hydrogen molecule / B. Alvarez-Fernández, J. A. Blanco // European Journal of Physics. – 2002. – Vol. 23. – P. 11–14.
9. **Meniry, E. J.** Introduction to the Hubbard Model / E. J. Meniry. – Belfast : University of Belfast, 2005. – P. 93.
10. **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.
11. **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.
12. **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.
13. **Силантьев, А. В.** Фуллерен C_{60} в рамках модели Хаббарда / А. В. Силантьев // Известия вузов. Физика. – 2013. – Т. 56, № 2. – С. 70–79.
14. **Тябликов, С. В.** Методы квантовой теории магнетизма / С. В. Тябликов. – М. : Наука, 1975. – С. 527.
15. **Gebhard, F.** The Mott Metal-Insulator Transition: Models and Methods / F. Gebhard. – Berlin, Springer, 1997. – P. 379.

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. Shubin S. P., Wonsowskii S. V. *Proceedings of the Royal Society A*. 1934, vol. 145, pp. 159–180.
5. McKenzie R. H. *Comments on Condensed Matter Physics*. 1998, vol. 18, pp. 309–317.
6. Castet F., Fritsch A., Ducasse L. *Journal of Physics I*. 1996, vol. 6, pp. 583–593.
7. Campos C. E., Sandhu P. S., Brooks J. S., Ziman T. *Physical Review B*. 1996, vol. 53, p. 12725.
8. Alvarez-Fernández B., Blanco J. A. *European Journal of Physics*. 2002, vol. 23, pp. 11–14.
9. Meniry E. J. *Introduction to the Hubbard Model*. Belfast: University of Belfast, 2005, p. 93.
10. 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.
11. 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.

12. 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.
13. Silant'ev A. V. *Izvestiya vuzov. Fizika*. [University proceedings. Physics]. 2013, vol. 56, no. 2, pp. 70–79.
14. Tyablikov S. V. *Metody kvantovoy teorii magnetizma* [Methods of the quantum magnetic theory]. Moscow: Nauka, 1975, p. 527.
15. Gebhard F. *The Mott Metal-Insulator Transition: Models and Methods*. Berlin, Springer, 1997, p. 379.

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

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

E-mail: kvvant@rambler.ru

УДК 538.22

Силантьев, А. В.

Димер в модели Хаббарда / А. В. Силантьев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 1 (33). – С. 168–182.