

системе, в к-рой одночастичное описание (имеющее место для ферми-жидкости) невозможно, поскольку важными становятся многоэлектронные эффекты (корреляции). В этой ситуации можно воспользоваться малым параметром  $W/U \ll 1$  и перейти от общего гамильтониана (1) к эфф. гамильтониану т. н.  $t-J$ -модели:

$$H = t \sum_{ij\sigma} (1 - n_{i\sigma}) c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} (1 - n_{j\sigma}) + J \sum_{ij} \left( S_i S_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right), \quad (3)$$

к-рый описывает движение скоррелированных электронов по решётке: они совершают прыжки с узла на соседний узел, но так, чтобы на одном узле не было двух электронов [эти состояния запрещаются факторами  $(1 - n_{i\sigma})$  в первом члене]; при этом возникает эфф. антиферромагн. обменное взаимодействие электронов на соседних узлах с обменным интегралом  $J = 2t^2/U$ .

Кроме двух параметров ( $t$ ,  $U$  или  $t$ ,  $J$ ) Х. м. характеризуется ещё одним параметром — электронной концентрацией  $n$  (число электронов на один узел решётки). В этой невырожденной модели  $n$  меняется в пределах  $0 < n < 2$ , причём поведение системы существенно зависит от величины  $n$ . Из (3) видно, что при половинном заполнении зоны ( $n = 1$ ) гамильтониан  $t-J$ -модели сводится к гамильтониану Гейзенберга модели с атомным локализованным спином  $S = 1/2$ , так что основное состояние системы должно быть антиферромагнитным с волновым вектором  $Q = (\pi, \pi, \pi)$ . За счёт взаимодействия электронных состояний с антиферромагн. порядком при  $n = 1$  должна открываться щель на поверхности Ферми, так что в этих условиях система должна быть диэлектриком. При отклонении от половинного заполнения в системе появляется дырочная проводимость, а антиферромагн. порядок ослабляется за счёт движения дырок, так что при нек-рой концентрации дырок антиферромагнетизм исчезает; при последующем уменьшении  $n$  сильно коррелированная система переходит в режим ферми-жидкости. Т. о., из рассмотрения двух предельных случаев ясно, что при изменении  $n$  должен существовать кроссовер от ферми-жидкостного поведения в фазу диэлектрич. состояния и одновременно кроссовер от коллективизированного магнетизма к магнетизму с локализованными магн. моментами. При фиксированном  $n$  аналогичный кроссовер должен возникать с ростом  $U$ . Эти наиб. интересные явления появляются в области промежуточных значений  $U \sim W$ , где возмущенной теория не работает, поэтому необходимо использовать при анализе Х. м. другие приближённые подходы, не основанные на разложениях по параметрам  $U/W$  или  $W/U$ . Ниже рассматривается ряд таких подходов [2].

**Квазичастичный спектр при наличии сильной корреляции.** Первые важные результаты о поведении систем с большим  $U \geq W$  были получены Хаббардом с помощью метода расщепления ур-ний движения для двухвременных Грина функций. Простейшее расщепление (известное в литературе как приближение «Хаббард-1») основано на том, что в гамильтониане (1) кулоновский член диагонален в узельном представлении, поэтому корреляции на одном узле могут быть учтены точно; оно приводит к следующему спектру квазичастичных состояний с импульсом  $k$  и спином  $\sigma$ :

$$E_{1,2}^{\sigma}(k) = \frac{1}{2} \left[ \mathcal{E}(k) + U \pm \sqrt{\mathcal{E}^2(k) - 2\mathcal{E}(k)U(1 - 2n_{\sigma}) + U^2} \right], \quad (4)$$

Т. о., при наличии кулоновского отталкивания на узле вместо одной исходной зоны (2) возникают две т. н. хаббардовские подзоны, зависящие от числа электронов  $n_{\sigma}$  со спином  $-\sigma$ , причём расстояние между этими подзонами порядка  $U$ . Результат (4) носит интерполяц. характер между двумя пределами: свободных электронов ( $U=0$ ) и атомным пределом ( $t=0$ ). В последнем случае возникают два атомных уровня  $E_{01}=0$  и  $E_{02}=U$ , соответствующих состояниям с одним и двумя электронами на узле. Оказывается, что ниж. подзона соответствует одночастичным электронным состояниям, а верхняя — двухчастичным, в к-рых на одном узле находятся два электрона. Расстояние

между этими подзонами по порядку величины соответствует разности энергии в атомных состояниях, равной  $U$ . Этот вывод Хаббарда соответствует картине расщепления спектра в Шубина — Вонсовского модели, являющейся предшественницей Х. м. Приближение «Хаббард-1» страдает рядом недостатков, т. к. оно даёт расщепление зоны при любом сколько угодно малом  $U$ , а также нарушает аналитич. свойства электронной ф-ции Грина и необходимые правила сумм. Тем не менее сам факт корреляц. расщепления зоны чрезвычайно важен. Для  $t-J$ -модели (4) переходит в следующую ф-лу для энергии в ниж. подзоне (верх. подзону следует отбросить) в парамагн. фазе:

$$E(k) = \left( 1 - \frac{n}{2} \right) \mathcal{E}(k). \quad (5)$$

Эта ф-ла описывает корреляц. сужение зоны за счёт фактора  $1 - n/2$ , зависящего от концентрации электронов.

Позднее Хаббард улучшил расщепление и пришёл к физически более корректному результату, известному как приближение «Хаббард-3», основанному на использовании «сплавовой аналогии». Если кулоновский член в (1) взять в среднего поля приближении, т. е. заменить его на  $U \sum_{i\sigma} \langle n_{i\sigma} \rangle n_{i\sigma}$ , то это будет означать, что электрон со спином  $\sigma$  взаимодействует с локальным полем величины  $U \langle n_{i\sigma} \rangle$ , к-рое на отд. узле принимает значение либо 0, либо  $U$ . Задача становится тогда эквивалентной задаче о движении электрона в двухкомпонентном сплаве, и для неё может быть использовано приближение типа когерентного потенциала (CPA), хорошо известное в теории сплавов.

Расчитанная в приближении «Хаббард-3» плотность состояний  $\rho(\omega)$  изменяет свою топологию с ростом  $U$  (рис. 1). При достижении нек-рого критич. значения

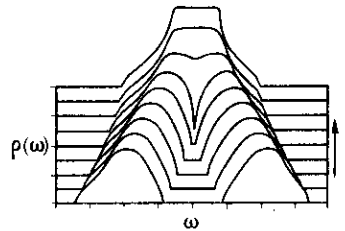


Рис. 1. Изменение плотности состояний  $\rho(\omega)$  с ростом параметра  $U$  (направление роста указано стрелкой) в приближении «Хаббард-3» для простой кубической решётки.

$U \approx W$  имеет место расщепление единой зоны на две подзоны. При половинном заполнении это происходит точно в центре исходной зоны, поэтому в точке  $U = U_c$  имеет место фазовый переход металл — диэлектрик, предсказанный Моттом. При дальнейшем увеличении  $U$  ширина запрещённой зоны растёт по закону  $(U - U_c)^{3/2}$ . В приближении «Хаббард-3» корреляц. расщепление зоны происходит только при достаточно больших значениях  $U$ , а квазичастицы имеют конечное затухание, причём аналитич. свойства ф-ции Грина не нарушаются. Однако выяснилось, что при всех  $U$  затухание отлично от нуля также и на поверхности Ферми, т. е. на ней нет скачка в распределении частиц по импульсам, что означает отсутствие и самой поверхности Ферми. Др. словами, приближение «Хаббард-3» описывает неферми-жидкостное поведение системы во всей области изменения параметров; как и в приближении «Хаббард-1», здесь нет предельного перехода к малым  $U$ . Кроме того, в приближении «Хаббард-3» теория не согласована полностью и результат вычисления термодинамич. величин зависит от способа вычисления. Эти недостатки приближения связаны с неконтролируемыми расщеплениями ф-ций Грина. Большой прогресс в понимании сильно коррелированных систем, описываемых Х. м., был достигнут при рассмотрении предела  $d \rightarrow \infty$ .

**Предел бесконечной размерности пространства.** В теориях систем мн. тел предел  $d \rightarrow \infty$  соответствует приближенную ср. поля, к-рое является асимптотически точным в этом пределе. Прекрасным примером служит Изинга модель, в к-рой доказано, что ур-ние молекулярного поля