

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

На правах рукопису

УДК 538.935, 538.956

*ТАБУНЩИК Кирило Вікторович*

**ДИНАМІКА МОДЕЛІ З ВЗАЄМОДІЄЮ**

01.04.02 - теоретична фізика

Д и с е р т а ц і я  
на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Науковий керівник:

Член-кореспондент НАН України,

доктор фіз.-мат. наук,

професор І.В.Стасюк

ЛЬВІВ-2001

## Зміст

<b>1</b>	<b>ОГЛЯД</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>САМОУЗГОДЖЕНА СХЕМА РОЗРАХУНКУ ... ФУНКЦІЙ ДЛЯ ... МОДЕЛІ З НЕПРЯМОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ</b>	<b>17</b>
2.1.	Модельний ... та вихідні співвідношення . . . . .	17
2.2.	Теорія ... і ... техніка . . . . .	20
2.2.1.	Теорема ... . . . . .	20
2.2.2.	Класифікація діаграм . . . . .	22
2.3.	... функції ... . . . . .	25
2.4.	Сумування ... для ... . . . . .	26
2.5.	... потенціал . . . . .	29
2.6.	Дослідження ефектів ..., фазових ... . . . . .	32
2.6.1.	Режим ... . . . . .	32
2.6.2.	Режим ... . . . . .	38
2.7.	Висновки та обговорення . . . . .	43
<b>3</b>	<b>РОЗРАХУНОК ... ФУНКЦІЙ В ... СХЕМІ ...</b>	<b>47</b>
3.1.	Вступ . . . . .	47
3.2.	Розрахунок кореляційних функцій . . . . .	49
3.2.1.	... функція . . . . .	49
3.2.2.	... функція . . . . .	52
3.2.3.	... функція . . . . .	54
3.3.	Дослідження ... щодо можливого утворення ... . . . . .	57
3.4.	Висновки та обговорення . . . . .	62
<b>4</b>	<b>...ДИНАМІКА ...</b>	<b>65</b>
4.1.	Вихідні співвідношення . . . . .	65
4.2.	Зона ... . . . . .	67
4.3.	... функції . . . . .	71
4.4.	Чисельне дослідження та ... . . . . .	74

4.5. Висновки . . . . .	86
<b>5 САМОУЗГОДЖЕНЕ ВРАХУВАННЯ ...</b>	<b>88</b>
5.1. ... при розрахунку ... . . . . .	88
5.2. Узагальнення наближення типу ... на випадок ... моделі . . . . .	93
5.3. Чисельне дослідження впливу ... на ... властивості системи . . . . .	94
5.4. Висновки та обговорення . . . . .	102
<b>6 ВИСНОВКИ</b>	<b>104</b>

## Розділ 1

### ОГЛЯД

Останнім часом у ... широко досліджуються системи, характерними рисами яких є ..., для опису якої використовується ....

Серед таких систем слід відзначити ... системи, при дослідженні яких використовується ... Експериментальні дослідження таких систем [1–5], а також результати ... досліджень [6] виявили існування ...

Типовим прикладом ..., в якій ..., є ... Такі ... мають ... структуру в якій ... здійснюється через ... У наведений формулі ... В силу того, що ... утворюється ... Такий ..., в свою чергу, ...

В результаті проведеного ... аналізу ... було встановлено, що ... Також, ... спостерігалась в експериментах з ... [1]. Таким чином, постало питання про необхідність побудови нових методів теоретичного дослідження ..., що приймали б до уваги ...

В перших теоретичних роботах [9–13] по дослідженню ... систем, в якій ... описувався з допомогою ... Отримані результати продемонстрували, що ... може виникати за рахунок ... Проте, слід відзначити, що в рамках ... такий результат суперечить експериментальним даним [8].

Для врахування впливу ... в роботах Матсушіти [14,15] було запропоновано модель, в якій запропоновано ... Проведені ... розрахунки, в рамках ..., продемонстрували, що ... відіграють важливу роль у ..., зокрема, вони ... Таким чином, при дослідженні ... було отримано результати, які якісно узгоджуються з експериментальними даним. Однак, недоліком запропонованою ... моделі

є неврахування ... Як було показано в роботах [17, 18] ... є визначальною при дослідженні ...

... аналіз ... було здійснено в роботі [19]. В результаті проведеного аналізу було сформульовано відповідну ... модель, розраховано ... і проаналізовано ... Отримані результати відповідають даним отриманим в результаті ... [6].

Інший тип систем, для опису яких може бути використаний ..., є системи особливістю будови яких є наявність ..., що може бути джерелом ... Прикладом таких систем є ..., що належать до ... Спільною властивістю ... є схильність до ... [20]. Як правило, такі ... зумовлені ..., що дозволяє вважати ...

Серед ... є найбільш детально досліджені. Зв'язок між ... здійснюється через ... Такі ... можуть в свою чергу міняти ...

На даний час існує цілий ряд експериментальних робіт які вказують на важливість ...

При дослідженні ... методами ... [21–23] і ... [22–24] спостерігалась ..., що відповідають ... Пояснюють таку поведінку ... Порівняння спостережуваного на експериментах [25–27] і теоретично розрахованого ... підтверджує точку зору про те, що ... добре описуються ..., в той час як ..., яка пов'язана ... узгоджується з ...

Цей результат добре узгоджується з даними експериментальних робіт по ... [28, 29], де показано, що ... супроводжується ...

В роботі [30] по дослідженню ..., було отримано ...

На користь важливої ролі ... говорять дані ... [31–33], проведені в ... Авторами вперше було зафіксовано наявність ... Було показано, що ... і добре ... в рамках моделі  $\phi^4$ . У випадку, коли ..., що свідчить про ...

Аналогічні висновки також було зроблено при розгляді ... ефектів [34, 35], процесів ...  $O_{IV}$  [36, 37] та при вивченні ... [38].

Слід також відзначити наявність ... Дані отримані в роботі [39] демонст-

рують ... Ці і решта аналогічні факти вказують на наявність ...

Врахування впливу ..., проводилось в рамках ... моделей з використанням ... наближень. Так, наприклад, в перших роботах на цю тему було використано модель ... [38,40] де ... В рамках запропонованого методу в роботі [42] було розглянуто ... ефект, в роботі [43] досліджувався вплив ..., а також можливість ... Проте, у випадку ..., більш доцільним є використання ... Таку модель, ..., було запропоновано в роботах [44–46], де відзначалась суттєва роль ...

Для врахування ... запропоновано наступну модель [44]:

- ... описуються моделлю ..., що дозволяє ... і врахувати ...;
- вводиться ...;
- враховується так зване ...

... має наступний вигляд:

$$H = \sum_i H_i + \sum_{ij\sigma} t_{ij\sigma}^+, \quad (1.1)$$

$$H_i = Un_{i\uparrow}n_{i\downarrow} - \mu \sum_{\sigma} n_{i\sigma} + g \sum_{\sigma} n_{i\sigma} S_i^z - h S_i^z - \Omega S_i^x,$$

і може бути отриманий при розгляді так званого ... [47]; він був також запропонований в роботах [48, 49].

Перші дослідження такої моделі виконувались в рамках наближень які відповідають випадку ... В роботі [45] було проведено розрахунок ...; встановлено, що при певних значеннях параметрів, які відповідають ..., виникає ... В роботі [49], з використанням ..., було здійснено ... на основі якого було побудовано ... Крім того, в рамках даної моделі, проводились дослідження методом ... з використанням ... [50, 51], а також обговорювалась можливість зв'язку ... [52, 53].

У випадку ... (що відповідає результатам робіт [45, 52]) опис ... було проведено в роботі [56–59] з використанням методу ... В границі ... досліджувалась

поведінка ... в залежності від ... Встановлено, що ... приводить до ... і появи ... Було зроблено відповідні висновки щодо ефективного звуження зон провідності та порушення електрон-діркової симетрії (яка відповідає заміні  $n \rightarrow 2-n$ ) за рахунок взаємодії з псевдоспіновою підсистемою. Показано, що має місце перенормування параметра Хаббардівської кореляції і при певних умовах ефективна кулонівська взаємодія електронів є менше нуля (що, в свою чергу, відповідає притяганню між електронами). В роботі [58] в межах того ж самого наближення проводився розгляд статичної діелектричної сприйнятливості. Шляхом розрахунку зміни заселеностей під впливом поперечного електричного поля (напрявленого перпендикулярно до шарів CuO у випадку матеріалів типу YBaCuO) було отримано можливість великих значень статичної діелектричної сталої у випадку часткового заповнення електронних підзон.

Незважаючи на значні зусилля фізиків теоретиків, дослідження моделі що описується гамільтоніаном (1.1) є далеким від завершення. Причиною такого повільного прогресу теорії є складність моделі, яка володіє спільними рисами як моделі Хаббарда, так і псевдоспінових моделей типу моделі Ізінга у поперечному полі, і, як наслідок, відсутність прозорої регулярної самоузгодженої теорії збурень, що дозволяла б досліджувати в повній мірі як динаміку системи так і її термодинамічні властивості.

Сама тільки модель Хаббарда [60], незважаючи на її фізичну простоту та невелику кількість параметрів, є надзвичайно складна з точки зору її математичної обробки. Гамільтоніан цієї моделі

$$H = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} \quad (1.2)$$

містить лише два доданки, які описують перенос електронів з вузла на вузол ( $t_{ij}$ ) і кулонівське відштовхування електронів на одному вузлі ( $U$ ).

Протягом останніх десятиліть було запропоновано багато підходів і наближень, в рамках яких, на основі моделі Хаббарда, проводились досліджен-

ня явища феромагнітизму, антиферомагнітизму, переходу метал-діелектрик, тощо. На даний час існує невелика кількість надійних результатів що стосуються властивостей даної моделі. У випадку слабого кулонівського відштовхування при дослідженні використовувалась стандартна теорія збурень по міжелектронній взаємодії (діаграмна техніка на мові фермі операторів), що відповідає фермі-рідинному опису. В рамках цього підходу було розраховано динамічну магнітну сприйнятливість (Ізуяма, Кім, Кубо [61]) і побудовано теорію спінових флуктуацій [62]. Також, в роботі Берка і Шріфера [63], вперше постало питання щодо ефективної взаємодії електронів через спінові флуктуації (парамагнони); отримані результати показали, що поблизу переходу в феромагнітний стан ця взаємодія має характер відштовхування. В протилежному граничному випадку ( $U \gg t$ ), коли можна виключити стани з двома електронами на одному вузлі і перейти до так званої  $t - J$  моделі (вперше введеною в роботі [64]), маємо сильно скорельовану систему, для опису якої в якості нульового наближення використовують точний розв'язок одновузлової задачі, а енергія переносу розглядається як збурення. В даному випадку доцільним є введення операторів Хаббарда [60], оскільки тоді, кулонівська частина гамільтоніана стає лінійною по введених операторах, а кінетична стає білінійною. Відповідна теорія збурень представляє собою діаграмну техніку на мові операторів Хаббарда в основі якої лежить теорема Віка, що була сформульована для цих операторів в роботах [65–69]. Вона виражає алгоритм розрахунку середніх від хронологічного добутку операторів Хаббарда шляхом послідовного зведення до середніх від меншої кількості цих операторів. На основі розвинутої в роботах [70–72] діаграмної техніки вдалося встановити загальну структуру спінових функцій Гріна, що дозволяють отримати повздовжню та поперечну динамічні сприйнятливості. Всі графічні структури при цьому (кінцеві діаграми, власноенергетична частина, тощо) виражаються через чотириполіусники і триполіусники, які зображаються від-

повідними графічними рядами. В рамках запропонованого наближення [70] просумовуються діаграми з електронними петлями, в результаті, всі величини виражаються через чотириточкову вершинну частину, яка включає так звані драбинчасті діаграми з антипаралельними лініями. Таке сумування у випадку стандартної теорії збурень ( $U \ll t$ ) відповідає наближенню хаотичних фаз (НХФ) (коли в якості базисних вибираються чисті зонні стани) і приводить до відомих результатів [61] для динамічної сприйнятливості. У випадку  $t - J$  моделі сумування усіх петлевих діаграм проводилось на базі розщеплених зонних станів, коли петлеві діаграми формуються функціями Гріна в наближенні Хаббард-I (таке наближення прийнято називати узагальненим наближенням хаотичних фаз УНХФ). Таке сумування приводить до нового результату для магнітної сприйнятливості, в якій проявляються одночасно риси локалізованого та колективного феромагнетизму.

Вперше при розгляді псевдоспін-електронної моделі (1.1), у якій до гамільтоніану Хаббарда додається взаємодія електронів з модою граткових коливань (які володіють значним ангармонізмом), було застосовано формалізм операторів Хаббарда у роботах [56–59], що дало змогу точно врахувати локальну псевдоспін-електронну взаємодію в гамільтоніані нульового наближення, провести дослідження спектру одноелектронних переходів та проаналізувати особливості заповнення зон. Авторами було показано, що взаємодія електронів з локальними ангармонічними коливаннями у випадку сильного електрон-коливного зв'язку приводить до розщеплення хаббардівських зон на додаткові підзони (вібронне розщеплення спектру); ефективна взаємодія між електронами є оператором за псевдоспіновими змінними і в залежності від стану коливної системи може мати як феромагнітний так і антиферомагнітний характер.

Тими ж авторами, на мові операторів Хаббарда, з допомогою діаграмної техніки виходячи з рядів теорії збурень за електронним переносом, отримано

вирази для кореляційних функцій (які, в свою чергу, визначають поперечну діелектричну сприйнятливості систем) в рамках псевдоспін-електронної моделі в узагальненому наближенні хаотичних фаз (УНХФ) [73–76]. Встановлено можливість виникнення нестійкості як в центрі, так і на краю зони Бриллюена для температурної залежності поперечної діелектричної сприйнятливості; проаналізовано умови їх появи. Виявлені розбіжності було пов'язано з втратами стійкості системи відносно флуктуацій поляризації та густини електронного заряду. Досліджено зміну спектра низькочастотних збуджень та інтенсивності мод із зміною поля і концентрації електронів.

Слід відзначити, що основна увага в зазначених вище роботах приділялась вивченню електронних станів, ефективної електрон-електронної взаємодії, дослідженню сприйнятливості системи, тощо. Більш повний аналіз поведінки псевдоспін-електронної системи вимагає дослідження термодинамічних властивостей моделі. Відповідне дослідження у випадку відсутності електронного переносу ( $t_{ij}=0$ ) і нульової частоти розщеплення ( $\Omega=0$ ) з включенням прямої взаємодії між псевдоспінами було проведено в роботах [77] та [78] для сегнетоелектричного та антисегнетоелектричного типу взаємодій відповідно. В результаті проведеного аналізу (у випадку сегнетоелектричної взаємодії між псевдоспінами [77]), в рамках наближення середнього поля, було встановлено наявність в системі фазових переходів першого роду зі стрибком параметра порядку (і відповідно концентрації електронів  $n$ ) при температурах нижчих за критичну в режимі постійного значення хімічного потенціалу (в цьому режимі припускається, що в стані термодинамічної рівноваги існує резервуар електронів, явно в гамільтоніан не включений, який підтримує постійне значення хімічного потенціалу). Відповідна фазова крива має нахил відносно вісі температур, за рахунок чого існує можливість фазових переходів першого роду при зміні температури. В режимі фіксованої концентрації, в системі має місце розшарування фаз (ситуація подібна до переходу газ –

рідина при постійному об'ємі).

Узагальнення псевдоспін-електронної моделі з прямою взаємодією між псевдоспінами на двопідгратковий випадок було здійснено в роботі [79]. Метою такого узагальнення є прийняття до уваги особливості реальної структури в сполуках типу  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ . В рамках наближення середнього поля та однопетлевого наближення було розглянуто діелектричні властивості двопідграткової псевдоспін-електронної моделі. Отримані результати вказують на появу сегнетоелектричного типу нестійкостей в системі, що пов'язані з макроскопічною поляризацією вздовж вісі  $c$  в розглядуваних міднокисневих сполуках. При цьому, врахування взаємодії між електронною і псевдоспіновою підсистемами приводить до зсуву сегнетоелектричної фази і зміни форми фазової діаграми в порівнянні з чисто псевдоспіновим випадком (коли гамільтоніан моделі має вигляд гамільтоніану для моделі Міцуї [79, 80]).

В рамках чистого псевдоспінового формалізму (з використанням узагальненої моделі Міцуї) в роботах [81, 82] досліджувалась поведінка іонів вершинного кисню під впливом вакансій кисню в  $\text{CuO}$  ланцюжках. Статистика вакансій розглядалась як з використанням нерівноважного розподілу (заморожений безлад) [81], так і з використанням термодинамічно рівноважного розподілу Гібса [82]. В першому випадку розрахунок термодинамічних функцій здійснювався на основі методу кластерного середнього поля [81]. Було встановлено, що така система може існувати в різних фазах – в нееквівалентних неполярних фазах з взаємно скомпенсованим розподілом вершинних киснів у різних підгратках і в полярній фазі з взаємно некомпенсованим розподілом (отримані фазові діаграми узгоджуються з відповідними результатами для псевдоспін-електронної моделі [77–79]). Випадок, коли вакансії формують рівноважну підсистему розглядався в режимі фіксованої концентрації [82]. Проведені дослідження поведінки вільної енергії (яка для даного режиму визначає стабільні стани) від концентрації продемонстрували, подібно

до псевдоспін-електронної моделі [77, 78], можливість фазового розшарування на області з різними значеннями концентрацій і з різним псевдоспіновим впорядкуванням.

Таким чином, проведені дослідження, які стосувались вивченню динамічних та термодинамічних властивостей псевдоспін-електронної моделі, продемонстрували придатність її до опису низки реальних об'єктів, таких як:

- галогенномісткові комплекси перехідних металів різної валентності;
- перовскитного типу оксиди перехідних металів, що знаходяться у водневомісному середовищі;
- сполуки з сильноангармонічними елементами структури типу  $\text{YBaCuO}$ .

З використанням цієї моделі вдається описати і дослідити роль водневих зв'язків на електронні властивості комплексів з перехідними металами, зокрема, на утворення зарядовогустинної хвилі і її фазового впорядкування в галогенномісткових ТМ сполуках; на електронну провідність в перовскитного типу ТМ оксидах. Також, вивчаючи матеріали  $\text{YBaCuO}$  типу з допомогою псевдоспін-електронної моделі, вдається описати деякі спостережувальні структурні аномалії, такі як ефекти бістабільності (при зміні температури чи концентрації вакансій), нестабільності сегнетоелектричного типу, фазове розшарування, тощо.

При теоретичному дослідженні псевдоспін-електронної моделі одним з найбільш цікавим і складним випадком, все ще залишається випадок ненульового електронного переносу між вузлами. Як було вказано вище, основним методом при дослідженні моделі коли існує перескок електронів з вузла на вузол є метод УНХФ, якій є послідовним розвиненням наближення Хаббард-I. Запропоноване для дослідження діелектричної сприйнятливості, наближення УНХФ не є, однак, самоузгодженою теорією і ґраткові нестійкості досліджуються як результат розбіжностей кореляційних функцій, що неможна вважати

задовільним при наявності в моделі фазових переходів. Відповідно відкритим залишалось питання розрахунку термодинамічних функцій. Вперше при дослідженні псевдоспін-електронної моделі у граничному випадку  $\Omega = 0$  з кулонівським відштовхуванням  $U = \infty$ , а також для моделі Хаббарда з  $U = \infty$ , здійснено узагальнення схеми УНХФ на випадок розрахунку термодинамічних функцій в роботі [83]. Було показано, що таке наближення є аналогом наближення середнього поля для сильнокорельованих систем. В результаті проведеного розрахунку було встановлено, що конкуренція між прямою та ефективною взаємодіями приводить до появи в системі сегнетоелектричної фази.

У випадку відсутності прямої електрон-електронної взаємодії  $U = 0$ , в системі існує тільки ефективна багаточастинкова взаємодія між псевдоспінами через електрони провідності, і отже, цікаво дослідити вплив непрямой взаємодії запізнюючого типу на термодинаміку моделі. Відзначимо, що гамільтоніан псевдоспін-електронної моделі (1.1) у випадку  $U = 0$ ,  $\Omega = 0$  (так звана псевдоспін-електронна модель з непрямою взаємодією) є інваріантний щодо перетворення  $\mu \rightarrow -\mu$ ,  $h \rightarrow 2g - h$ ,  $n \rightarrow 2 - n$ ,  $S^z \rightarrow -S^z$  (електрон-діркова симетрія гамільтоніану), що дозволяє також описувати псевдоспін-діркову систему.

З іншої точки зору, гамільтоніан псевдоспін-електронної моделі з непрямою взаємодією дає можливість описати модель типу моделі бінарного сплаву. При цьому, зручно ввести оператори проектування на псевдоспінкові стани  $P_i^\pm = \frac{1}{2} \pm S_i^z$ ; тоді гамільтоніан моделі бінарного сплаву можна отримати використовуючи підстановку  $P_i^+ = p_i$ ,  $P_i^- = 1 - p_i$  де  $p_i$  є концентрація однієї з компонент сплаву і  $1 - p_i$  відповідно концентрація іншої компоненти. Основна відмінність між моделями полягає в здійсненні процедури усереднення по проекційних операторах  $P^\pm$  (температурне статистичне усереднення для випадку псевдоспін-електронної моделі з непрямою взаємодією і конфігура-

ційне для бінарного сплаву), а також у методі самоузгодження (фіксуванні поздовжнього поля  $h$  для псевдоспін-електронної моделі і фіксуванні величини електронної концентрації  $p$  компоненти бінарного сплаву).

Більш того, якщо у виразі для гамільтоніану псевдоспін-електронної моделі з непрямою взаємодією, ми знімемо спінові індекси і перепишемо гамільтоніан на мові операторів рухомих  $d_i$  ( $c_{i\sigma} = d_i$ ) і локалізованих  $f_i$  ( $P_i^+ = f_i^+ f_i$ ,  $P_i^- = 1 - f_i^+ f_i$ ) електронів, то в результаті отримаємо гамільтоніан моделі Фалікова-Кімбела в якому  $h$  відіграє роль хімічного потенціалу для локалізованих  $f$ -електронів. Основний стан моделі Фалікова-Кімбела у випадку фіксованого значення електронної концентрації для підсистем, є неоднорідним і з'являється можливість появи як співмірного так і неспівмірного впорядкування чи фазового розшарування в залежності від концентрації та величини взаємодії [90].

Повертаючись до розгляду можливих підходів при описі моделей з сильною електронною кореляцією, а також псевдоспін-електронних моделей, слід відзначити метод динамічного середнього поля.

Цей метод було запропоновано в роботах [85,86] для моделі Хаббарда (див. також [87] і посилання в ній). Динамічне середнє поле являє собою аналітичну схему без використання теорії збурень, яка дозволяє спроектувати модель Хаббарда на однодомішкову модель Андерсона, що дає можливість отримати точні результати в границі безмежної просторової розмірності. Наближення динамічного середнього поля (у випадку безмежної розмірності простору  $d = \infty$ ), яке було використане при дослідженні моделі Хаббарда, описує такі важливі кореляційні ефекти як: мотт-хаббардівський перехід метал-діелектрик, кросовер від колективного магнетизму до магнетизму з локалізованими магнітними моментами, порушення фермі-рідинної поведінки поблизу переходу метал-діелектрик. Однак, одновузлова задача для моделі Хаббарда точно нерозв'язана і тому використовуються допоміжні методи

для її розв'язку, зокрема квантовий метод Монте-Карло та ренормгруповий метод [87–89]. Слід відзначити, що існує ряд невирішених проблем в методі динамічного середнього поля, які пов'язані з виходом за рамки нескінченної розмірності ґратки. Зокрема, є труднощі в отриманні коректних розкладів за степенями  $1/d$ .

Псевдоспін-електронна модель з непрямою взаємодією вивчалась в рамках наближення динамічного середнього поля в роботі [84]. Проведений термодинамічний аналіз підтвердив основні результати отримані в роботах [77, 78] для моделі з прямою взаємодією між електронами але при відсутності електронного переносу. У границі нульової електронної кореляції (при  $d = \infty$ ) псевдоспін-електронна модель є точно розв'язуваною в рамках цього підходу: в режимі  $\mu = const$  має місце фазовий перехід першого роду, тоді як в режимі  $n = const$  при певних значеннях параметрів може відбуватися фазове розшарування в електронній підсистемі. Зауважимо, що дослідження спрощеної псевдоспін-електронної моделі проводились без врахування можливої появи в системі над структури. Для виявлення нестабільностей пов'язаних з ненульовим хвильовим вектором, необхідно розраховувати функції відгуку. Аналітичну схему розрахунку кореляційних функцій для сильнокорельованих систем в рамках наближення динамічного середнього поля було запропоновано в роботах [87, 90, 91]. Однак дослідження функцій відгуку неможна вважати достатнім для дослідження термодинаміки модульованого стану і фазових переходів в моделі.

Ще раз відзначимо, незважаючи на те, що метод динамічного середнього поля охоплює багато ключових рис поведінки досліджуваних систем навіть для скінченної просторової вимірності, він має очевидні і важливі обмеження, коли, наприклад, є необхідність описати фази з явно нелокальним параметром порядку. Окрім того, нехтування нелокальних динамічних кореляцій впливатиме навіть на фази з локальним параметром порядку [92]. Спроби

розширити метод, за допомогою включення нелокальних кореляцій, проводились в роботах [93–95]. Проте, всі вони мали свої недоліки, як аналітичні (зокрема, неповне, чи нерегулярне врахування всіх діаграм однакової топології і порядку по  $1/d$  і як наслідок порушення правил причинності) так і чисто технічні складності при використанні методу до розрахунку і побудові відповідних фазових діаграм.

Описані вище методи в рамках яких проводились дослідження псевдоспін-електронної моделі, як у випадку прямої псевдоспінової (електронної) взаємодії так і у випадку опосередкованої багаточастинкової запізнюючої взаємодії, не виходять за межі нульового наближення по оберненому радіусу взаємодії (що відповідає відбору діаграм з однією сумою по хвильовому вектору  $\mathbf{k}$ ). Таким чином, використання цих наближень (наближення середнього поля, кластерне наближення середнього поля, узагальнене наближення хаотичних фаз, наближення динамічного середнього поля для випадку скінченної розмірності простору) дає можливість отримувати коректні результати тільки за межами околів критичних точок. В околі критичних точок ефекти, пов'язані з флуктуаціями середнього поля, стають визначальними і для опису критичних властивостей системи необхідно приймати до уваги внески від флуктуацій самоузгодженого поля псевдоспінів.

## Розділ 2

### САМОУЗГОДЖЕНА СХЕМА РОЗРАХУНКУ ... ФУНКЦІЙ ДЛЯ ... МОДЕЛІ З НЕПРЯМОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ

Вивчається ...динаміка ... моделі, що описує ... (для опису якої доцільно використовувати ... представлення). Особливістю ... моделі що розглядається є ... (модель з ... ). Це дозволяє нам дослідити вплив ...

В даному розділі дисертації запропоновано самоузгоджений метод розрахунку ... моделі з непрямою взаємодією. Розрахунок здійснюється у випадку ... з використанням ... в якості базису, що дає можливість точно врахувати взаємодію ...

В основу запропонованого наближення покладено метод ... в рамках якого здійснюється ..., які виникають внаслідок ...

Використовуючи отримані аналітичні вирази для ..., в однорідному випадку проводиться дослідження ..., ..., можливості появи ... в системі. Побудовано відповідні ....

#### 2.1. Модельний ... та вихідні співвідношення

... має наступний вигляд

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma}, \\ H_0 &= \sum_i \left\{ -\mu \sum_{\sigma} n_{i\sigma} + g \sum_{\sigma} n_{i\sigma} S_i^z - h S_i^z \right\}, \end{aligned} \quad (2.1)$$

де  $c_{i\sigma}^+$ ,  $c_{i\sigma}$  – оператори народження і знищення електронів на вузлі  $i$  зі спіном  $\sigma$ ;  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$  – оператор числа заповнення.  $t_{ij}$  – інтеграл переносу електрона з вузла на вузол. Одновузлова частина гамільтоніана (2.1) містить енергію псевдоспінової підсистеми яка знаходиться у повздовжньому полі ( $\sim h$ ) та локальну взаємодію ( $\sim g$ ) електронів провідності з псевдоспінами.

Як зазначалось в першому розділі дисертації, гамільтоніан (2.1), після деяких спрощень, може бути переписаний у вигляді гамільтоніану електронної підсистеми моделі бінарного сплаву, а також у вигляді гамільтоніану моделі Фалікова-Кімбела. Основна відмінність між цими моделями полягає в методі здійснення процедури усереднення (температурне статистичне усереднення у випадку псевдоспін-електронної моделі і моделі Фалікова-Кімбела, конфігураційне усереднення у випадку моделі бінарного сплаву). Слід також відзначити, що записаний гамільтоніан володіє певною внутрішньою симетрією (інваріантність щодо перетворення  $\mu \rightarrow -\mu$ ,  $h \rightarrow 2g - h$ ,  $n \rightarrow 2 - n$ ,  $S^z \rightarrow -S^z$ ). Це дозволяє нам використовувати (2.1) для опису псевдоспін-діркових систем.

Перепишемо гамільтоніан псевдоспін-електронної моделі (2.1) і оператори, які відповідають фізичним величинам, використовуючи представлення вторинного квантування на мові операторів народження (знищення) електронів в стані з визначеною орієнтацією псевдоспіну:

$$a_{i\sigma} = c_{i\sigma} P_i^+, \quad a_{i\sigma}^+ = c_{i\sigma}^+ P_i^+, \quad \tilde{a}_{i\sigma} = c_{i\sigma} P_i^-, \quad \tilde{a}_{i\sigma}^+ = c_{i\sigma}^+ P_i^-. \quad (2.2)$$

Де  $P_i^\pm$  є операторами проектування на псевдоспінові стани

$$P_i^\pm = \frac{1}{2} \pm S_i^z, \quad (P_i^\pm)^2 = P_i^\pm, \quad P_i^+ P_i^- = 0.$$

Введені вузлові оператори народження (знищення) задовольняють наступним комутаційним співвідношенням:

$$\begin{aligned} \{\tilde{a}_{i\sigma}^+, \tilde{a}_{j\sigma'}\} &= \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} P_i^-, & \{\tilde{a}_{i\sigma}^+, a_{j\sigma'}\} &= 0, \\ \{a_{i\sigma}^+, a_{j\sigma'}\} &= \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} P_i^+, & \{a_{i\sigma}^+, \tilde{a}_{j\sigma'}\} &= 0. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Вихідний гамільтоніан (2.1) на мові цих операторів має наступний вигляд:

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_i H_i + H_{\text{int}} & (2.4) \\
 &= \sum_i \{ \varepsilon(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + \tilde{\varepsilon}(\tilde{n}_{i\uparrow} + \tilde{n}_{i\downarrow}) - hS_i^z \} \\
 &+ \sum_{ij\sigma} t_{ij} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{i\sigma}^+ \tilde{a}_{j\sigma} + \tilde{a}_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \tilde{a}_{i\sigma}^+ \tilde{a}_{j\sigma}),
 \end{aligned}$$

де введено наступні позначення

$$\varepsilon = -\mu + g/2, \quad \tilde{\varepsilon} = -\mu - g/2 \quad (2.5)$$

для енергій одновузлових станів;  $H_i$  – одновузловий (діагональний) доданок,  $H_{\text{int}}$  – описує перенос електронів з вузла на вузол.

У випадку сильної псевдоспін-електронної взаємодії ( $g \gg t$ ) зручно вибрати одновузловий гамільтоніан  $H_i$  в якості нульового наближення:

$$H_0 = \sum_i H_i$$

Його власні функції побудовані на векторах  $|n_{i\uparrow}, n_{i\downarrow}, S_i^z\rangle$  утворюють повний базис станів елементарної комірки:

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= |0, 0, \frac{1}{2}\rangle, & |2\rangle &= |1, 1, \frac{1}{2}\rangle, & |3\rangle &= |0, 1, \frac{1}{2}\rangle, & |4\rangle &= |1, 0, \frac{1}{2}\rangle, & (2.6) \\
 |\tilde{1}\rangle &= |0, 0, -\frac{1}{2}\rangle, & |\tilde{2}\rangle &= |1, 1, -\frac{1}{2}\rangle, & |\tilde{3}\rangle &= |0, 1, -\frac{1}{2}\rangle, & |\tilde{4}\rangle &= |1, 0, -\frac{1}{2}\rangle.
 \end{aligned}$$

З метою розрахунку термодинамічних функцій ми використаємо стандартне представлення статистичного оператора:

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} \hat{\sigma}(\beta), \quad (2.7)$$

$$\hat{\sigma}(\beta) = T_\tau \exp \left\{ - \int_0^\beta H_{\text{int}}(\tau) d\tau \right\}. \quad (2.8)$$

Тут, для запису недіагональної частини гамільтоніана використовується представлення взаємодії:

$$A(\tau) = e^{\tau H_0} A e^{-\tau H_0}.$$

Тоді, для середнього значення від оператора псевдоспіну  $\langle S_i^z \rangle$  отримуємо наступний вираз

$$\langle S_i^z \rangle = \frac{1}{\langle \hat{\sigma}(\beta) \rangle_0} \langle S_i^z \hat{\sigma}(\beta) \rangle_0 = \langle S_i^z \hat{\sigma}(\beta) \rangle_0^c. \quad (2.9)$$

Усереднення  $\langle \dots \rangle_0$  проводиться за статистичним розподілом з гамільтоніаном  $H_0$ , а символ  $\langle \dots \rangle_0^c$  означає виділення зв'язаних діаграм (незв'язаною діаграмою ми називаємо таку, яка містить по крайній мірі одну частину, що не приєднана лініями взаємодії до решта частин діаграми).

## 2.2. Теорія ... і ... техніка

### 2.2.1. Теорема ...

Розклад ... приводить, ..., до виразу, що має вигляд ... Розрахунок ... може бути проведений за допомогою відповідної теореми ... [65]. Ця теорема задає алгоритм ... Таке зведення дає можливість записати результат у вигляді ...

Розглянемо ...

$$\langle T a_1^{\alpha_1}(\tau_1) \dots a_i^{\alpha_i}(\tau_i) \dots a_n^{\alpha_n}(\tau_n) \rangle_0.$$

Для зручності ми будемо вважати що  $T$  – ... Оператор ... може приймати значення:

$$a_i^{\alpha_i}(\tau_i) = (\tilde{a}_i^+(\tau_i), a_i^+(\tau_i), \tilde{a}_i(\tau_i), a_i(\tau_i)).$$

Введемо наступне позначення для ...:

$$\Psi = \langle a_1^{\alpha_1}(\tau_1) \dots a_{m-1}^{\alpha_{m-1}}(\tau_{m-1}) a_o^\alpha(\tau) a_{m+1}^{\alpha_{m+1}}(\tau_{m+1}) \dots a_n^{\alpha_n}(\tau_n) \rangle_0.$$

Виділений ... прийнявши до уваги просте правило ...:

$$a_{m-1}^{\alpha_{m-1}}(\tau_{m-1}) a_o^\alpha(\tau) = -a_o^\alpha(\tau) a_{m-1}^{\alpha_{m-1}}(\tau_{m-1}) + \{a_{m-1}^{\alpha_{m-1}}(\tau_{m-1}) a_o^\alpha(\tau)\}, \quad (2.10)$$

Після чого використаємо наступне співвідношення:

$$\langle a_o^\alpha(\tau) a_1^{\alpha_1}(\tau_1) \dots a_n^{\alpha_n}(\tau_n) \rangle_0 = e^{\pm \beta \varepsilon^\alpha} \langle a_1^{\alpha_1}(\tau_1) \dots a_n^{\alpha_n}(\tau_n) a_o^\alpha(\tau) \rangle_0,$$

де ...; також введено позначення:  $\varepsilon^\alpha = \varepsilon$  при  $a^\alpha = (a^+, a)$ ,  $\varepsilon^\alpha = \tilde{\varepsilon}$  коли  $a^\alpha = (\tilde{a}^+, \tilde{a})$ . Далі, знову діємо згідно правила (2.10) і ... В результаті проведеної процедури отримаємо:

$$\begin{aligned} \Psi &= \sum_{i=1}^{m-1} (-1)^{p_i} \langle a_1^{\alpha_1}(\tau_1) \dots \{a_i^{\alpha_i}(\tau_i) a_o^\alpha(\tau)\} \dots a_n^{\alpha_n}(\tau_n) \rangle_0 \\ &+ e^{\pm\beta\varepsilon^\alpha} \sum_{j=m+1}^n (-1)^{p_j} \langle a_1^{\alpha_1}(\tau_1) \dots a_{m-1}^{\alpha_{m-1}}(\tau_{m-1}) \dots \{a_j^{\alpha_j}(\tau_j) a_o^\alpha(\tau)\} \dots a_n^{\alpha_n}(\tau_n) \rangle_0 \\ &+ (-1)^{p_n} e^{\pm\beta\varepsilon^\alpha} \Psi, \end{aligned}$$

де  $p_n - \dots$ , оскільки ... Таким чином, вираз для ... має вигляд:

$$\begin{aligned} \Psi &= \frac{1}{1 + e^{\pm\beta\varepsilon^\alpha}} \sum_{i=1}^{m-1} (-1)^{p_i} \langle a_1^{\alpha_1}(\tau_1) \dots \{a_i^{\alpha_i}(\tau_i) a_o^\alpha(\tau)\} \dots a_n^{\alpha_n}(\tau_n) \rangle_0 \\ &+ \frac{e^{\pm\beta\varepsilon^\alpha}}{1 + e^{\pm\beta\varepsilon^\alpha}} \sum_{j=m+1}^n (-1)^{p_j} \langle a_1^{\alpha_1}(\tau_1) \dots a_{m-1}^{\alpha_{m-1}}(\tau_{m-1}) \dots \{a_j^{\alpha_j}(\tau_j) a_o^\alpha(\tau)\} \dots a_n^{\alpha_n}(\tau_n) \rangle_0. \end{aligned}$$

Нехай, для визначеності, ... Розглянемо величину

$$\frac{1}{1 + e^{\pm\beta\varepsilon^\alpha}} \{a_i^{\alpha_i}(\tau_i) a_o^\alpha(\tau)\}.$$

Згідно (2.3) ... тільки у випадку коли ... і має при цьому вигляд:  $(1 + e^{-\beta\varepsilon})^{-1} P^+ \delta_{oi} e^{\varepsilon(\tau-\tau_i)}$ . Аналогічно отримуємо:

$$\frac{e^{\pm\beta\varepsilon^\alpha}}{1 + e^{\pm\beta\varepsilon^\alpha}} \{a_j^{\alpha_j}(\tau_j) a_o^\alpha(\tau)\} = \frac{P^+}{1 + e^{\beta\varepsilon}} \delta_{oi} e^{\varepsilon(\tau-\tau_j)}. \quad (2.11)$$

Введемо незбурену одноелектронну функцію Гріна:

$$\check{g}_{io}(\tau - \tau') = \frac{\langle T_\tau a_i(\tau) a_o^+(\tau') \rangle_0}{\langle \{a_i a_o^+\} \rangle_0} = e^{\varepsilon(\tau'-\tau)} \delta_{oi} \begin{cases} (1 + e^{-\beta\varepsilon})^{-1} & , \tau > \tau', \\ -(1 + e^{\beta\varepsilon})^{-1} & , \tau' > \tau. \end{cases} \quad (2.12)$$

Означимо операцію спарювання:

$$\overleftarrow{a_i(\tau') a_o^+(\tau)} = \check{g}_{io}(\tau' - \tau) P_i^+, \quad \overrightarrow{a_o^+(\tau) a_i(\tau')} = -\check{g}_{io}(\tau' - \tau) P_i^+.$$

Аналогічно для випадку  $a_o^\alpha(\tau) = \tilde{a}_o^+$  запишемо:

$$\overleftarrow{\tilde{a}_i(\tau') \tilde{a}_o^+(\tau)} = \check{g}_{io}(\tau' - \tau) P_i^-, \quad \overrightarrow{\tilde{a}_o^+(\tau) \tilde{a}_i(\tau')} = -\check{g}_{io}(\tau' - \tau) P_i^-, \quad (2.13)$$

$$\tilde{g}_{io}(\tau - \tau') = \frac{\langle T_\tau \tilde{a}_i(\tau) \tilde{a}_o^+(\tau') \rangle_0}{\langle \{ \tilde{a}_i \tilde{a}_o^+ \} \rangle_0} = e^{\tilde{\varepsilon}(\tau' - \tau)} \delta_{oi} \begin{cases} (1 + e^{-\beta \tilde{\varepsilon}})^{-1} & , \tau > \tau' , \\ -(1 + e^{\beta \tilde{\varepsilon}})^{-1} & , \tau' > \tau . \end{cases}$$

Прийнявши до уваги виписані формули (2.11) – (2.13), остаточний вираз для середнього, після виконання описаної процедури запишемо у вигляді:

$$\begin{aligned} \langle T_\tau a_1^{\alpha_1}(\tau_1) \dots a_{m-1}^{\alpha_{m-1}}(\tau_{m-1}) a_o^\alpha(\tau) a_{m+1}^{\alpha_{m+1}}(\tau_{m+1}) \dots a_n^{\alpha_n}(\tau_n) \rangle_o &= \quad (2.14) \\ &= \sum_{i=1}^{m-1} (-1)^{p_i} \langle T_\tau a_1^{\alpha_1}(\tau_1) \dots \overleftarrow{a_i^{\alpha_i}(\tau_i)} \dots a_o^\alpha(\tau) \dots a_n^{\alpha_n}(\tau_n) \rangle_o + \\ &+ \sum_{j=m+1}^n (-1)^{p_j} \langle T_\tau a_1^{\alpha_1}(\tau_1) \dots \overrightarrow{a_o^\alpha(\tau)} \dots a_j^{\alpha_j}(\tau_j) \dots a_n^{\alpha_n}(\tau_n) \rangle_o \end{aligned}$$

Отже, для введених вузлових операторів народження (знищення) в стані з визначеною орієнтацією псевдоспіну, теорему Віка можна сформулювати як: *середнє від  $T$  – добутку певної кількості операторів народження і знищення електронів в стані з певною орієнтацією псевдоспіну дорівнює сумі доданків, в яких виконані всі можливі спарювання, плюс додаткове врахування парності перестановок  $p_i$  в напрямі спарювання. Остаточний вираз записується у вигляді суми від добутку незбурених функцій Гріна і середніх певної кількості проєкційних операторів.*

### 2.2.2. Класифікація діаграм

В результаті використання теореми Віка в нас залишаються середні від добутку псевдоспінових операторів  $S^z$ . В свою чергу середні від добутків таких операторів розкладаються за кумулянтами:

$$\langle S_i^z \rangle_0 = b, \quad \langle S_i^z S_j^z \rangle_0 = b^2 + b' \delta_{ij}, \quad (2.15)$$

$$\langle S_i^z S_j^z S_k^z \rangle_0 = b^3 + b' b (\delta_{ij} + \delta_{ik} + \delta_{jk}) + b'' \delta_{ij} \delta_{jk} \quad (2.16)$$

і т. п., причому

$$b = \langle S_i^z \rangle_0 = \frac{\text{Sp}(S_i^z e^{-\beta H_0})}{\text{Sp}(e^{-\beta H_0})} = \frac{1}{2} \tanh \left\{ \frac{\beta}{2} h + \ln \frac{1 + e^{-\beta \varepsilon}}{1 + e^{-\beta \tilde{\varepsilon}}} \right\},$$

$$b' = \langle S^z S^z \rangle_{0c} = \frac{\partial}{\partial(\beta h)} b, \quad b'' = \langle S^z S^z S^z \rangle_{0c} = \frac{\partial^2}{\partial(\beta h)^2} b.$$

Проілюструємо описану процедуру (тобто використаємо теорему Віка і зробимо розклад за кумулянтами) на прикладі розрахунку середнього від оператора псевдоспіну  $\langle S^z \rangle$ , виділяючи один з доданків, що появляється у четвертому порядку теорії збурень

$$\int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \int_0^\beta d\tau_3 \int_0^\beta d\tau_4 \sum_{ij i_1 j_1} \sum_{i_2 j_2 i_3 j_3} t_{ij} t_{i_1 j_1} t_{i_2 j_2} t_{i_3 j_3} \quad (2.17)$$

$$\times \langle T_\tau S_l^z a_i^+(\tau_1) a_j(\tau_1) \tilde{a}_{i_1}^+(\tau_2) a_{j_1}(\tau_2) a_{i_2}^+(\tau_3) \tilde{a}_{j_2}(\tau_3) a_{i_3}^+(\tau_4) a_{j_3}(\tau_4) \rangle_0.$$

Послідовне спарювання деякого вибраного вузлового оператора з іншими дає можливість звести вираз (2.17) до суми середніх від меншої кількості операторів

$$\begin{aligned} & \langle T_\tau S_l^z a_i^+(\tau_1) a_j(\tau_1) \tilde{a}_{i_1}^+(\tau_2) a_{j_1}(\tau_2) a_{i_2}^+(\tau_3) \tilde{a}_{j_2}(\tau_3) a_{i_3}^+(\tau_4) a_{j_3}(\tau_4) \rangle_0 \\ &= \langle T_\tau S_l^z \overbrace{a_i^+(\tau_1) a_j(\tau_1) \tilde{a}_{i_1}^+(\tau_2) a_{j_1}(\tau_2) a_{i_2}^+(\tau_3) \tilde{a}_{j_2}(\tau_3) a_{i_3}^+(\tau_4) a_{j_3}(\tau_4)} \rangle_0 \\ &+ \langle T_\tau S_l^z \overbrace{a_i^+(\tau_1) a_j(\tau_1) \tilde{a}_{i_1}^+(\tau_2) a_{j_1}(\tau_2)} a_{i_2}^+(\tau_3) \tilde{a}_{j_2}(\tau_3) a_{i_3}^+(\tau_4) a_{j_3}(\tau_4) \rangle_0 \\ &= -\check{g}_{ij_3}(\tau_1 - \tau_4) \langle T_\tau S_l^z P_{j_3}^+ a_j(\tau_1) \tilde{a}_{i_1}^+(\tau_2) a_{j_1}(\tau_2) a_{i_2}^+(\tau_3) \tilde{a}_{j_2}(\tau_3) a_{i_3}^+(\tau_4) \rangle_0 \\ &- \check{g}_{ij_1}(\tau_1 - \tau_2) \langle T_\tau S_l^z P_{j_1}^+ a_j(\tau_1) \tilde{a}_{i_1}^+(\tau_2) a_{i_2}^+(\tau_3) \tilde{a}_{j_2}(\tau_3) a_{i_3}^+(\tau_4) a_{j_2}(\tau_3) \rangle_0. \end{aligned}$$

Подальше використання процедури спарювання приводить до наступного результату

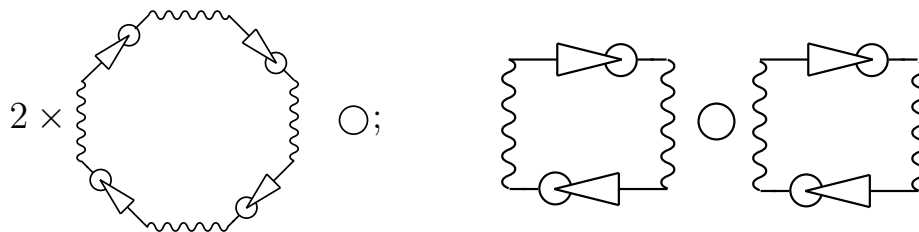
$$\begin{aligned} & -\check{g}_{ij_1}(\tau_1 - \tau_2) \check{g}_{i_1 j_2}(\tau_2 - \tau_3) \check{g}_{i_3 j}(\tau_4 - \tau_1) \check{g}_{i_2 j_1}(\tau_3 - \tau_2) \langle T_\tau S_l^z P_j^+ P_{j_1}^+ P_{j_2}^- P_{j_3}^+ \rangle_0 \\ & -\check{g}_{ij_3}(\tau_1 - \tau_4) \check{g}_{i_1 j_2}(\tau_2 - \tau_3) \check{g}_{i_2 j}(\tau_3 - \tau_1) \check{g}_{i_3 j_1}(\tau_4 - \tau_2) \langle T_\tau S_l^z P_j^+ P_{j_1}^+ P_{j_2}^- P_{j_3}^+ \rangle_0 \quad (2.18) \\ & +\check{g}_{ij_3}(\tau_1 - \tau_4) \check{g}_{i_1 j_2}(\tau_2 - \tau_3) \check{g}_{i_2 j_1}(\tau_3 - \tau_2) \check{g}_{i_3 j}(\tau_4 - \tau_1) \langle T_\tau S_l^z P_j^+ P_{j_1}^+ P_{j_2}^- P_{j_3}^+ \rangle_0. \end{aligned}$$

Введемо діаграмні зображення

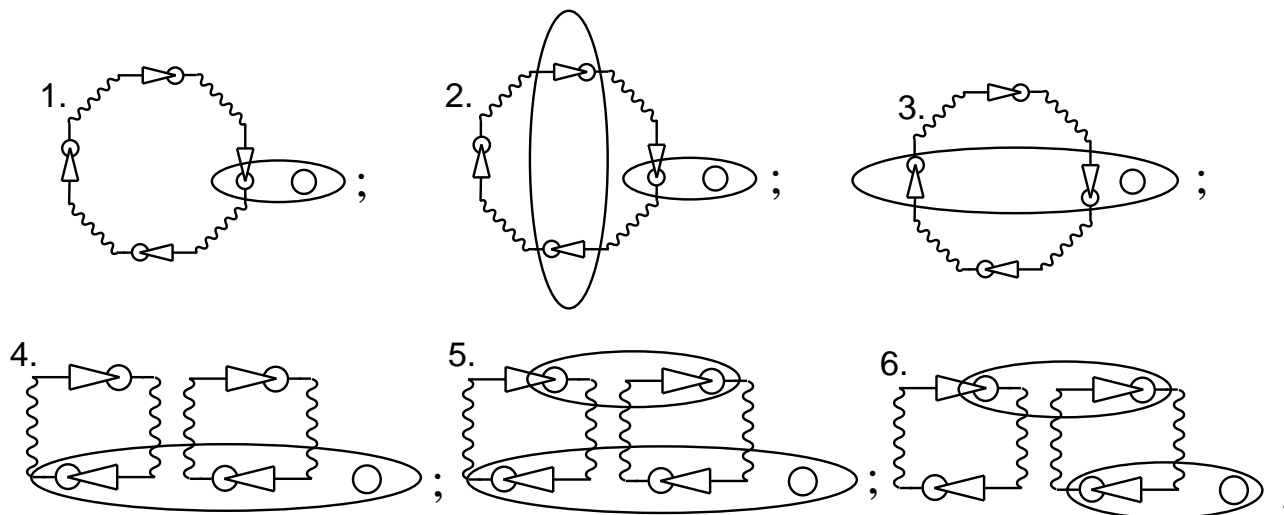
$$\bigcirc - S_l^z; \quad 1 \text{ ~~~~~ } 1' - t_{11'};$$

$$1 \text{---} \triangleleft \text{---} 1' - (\check{g}_{11'} P_1^+ + \tilde{g}_{11'} P_1^-)$$

Виразу (2.18) в даному відповідають випадку діаграми:



Розклад середніх у формулі (2.18) за кумулянтами приводить до розмноження діаграм (в графічному зображенні кумулянтам відповідають овали, що охоплюють відповідні вершини з псевдоспіновими операторами і містять  $\delta$ -символи Кронекера від вузлових індексів). Наведемо приклади таких діаграм,



В наших подальших розрахунках ми будемо нехтувати діаграмами типу 2, 3, 5, тобто тими діаграмами, які містять кумулянти вище першого порядку в межах однієї петлі (це означає, що ланцюгові фрагменти діаграм формують одноелектронну функцію Гріна в наближенні Хаббард-I), а також діаграмами що з'єднують дві петлі більше ніж одним кумулянтом (це означає, що ми враховуємо самоузгоджене поле в нульовому наближенні; нехтування такими діаграмами в моделі Ізінга відповідало б відкиданню багатохвосток, які вносять поправки до самоузгодженого поля спінів).

### 2.3. ... функції ...

Перейдемо у виразах ... до ... представлення. Визначені ... вони розкладаються ... наступним чином

$$\check{g}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{i\omega_n \tau} \check{g}(\omega_n), \quad \tilde{g}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{i\omega_n \tau} \tilde{g}(\omega_n), \quad (2.19)$$

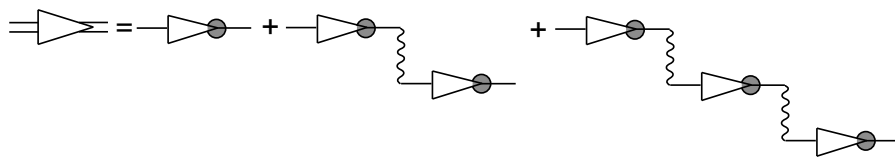
$$\check{g}(\omega_n) = -\frac{1}{i\omega_n - \varepsilon}, \quad \tilde{g}(\omega_n) = -\frac{1}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}}, \quad \omega_n = \frac{2n+1}{\beta} \pi.$$

Інтегрування за часовими змінними у виразах, які відповідають діаграмам, за рахунок співвідношення

$$\int_0^\beta e^{i(\sum \omega_n) \tau} d\tau = \beta \delta(\sum \omega_n) \quad (2.20)$$

приводить до умов, що означають рівність сумарної вхідної та вихідної частот у кожній з вершин діаграм (те саме після фур'є переходу відноситься і до хвильового вектора).

Характерною рисою, як наведених діаграм, так і діаграм інших порядків теорії збурень, є наявність фрагментів, які мають ланцюгову структуру (тобто таких, в яких окремі елементи з'єднуються послідовно хвилястими лініями  $t_k$ ). Найпростіший ряд діаграм ланцюгового типу має вигляд:



$$\Rightarrow = \rightarrow \bullet + \rightarrow \bullet \text{---} \rightarrow \bullet + \rightarrow \bullet \text{---} \rightarrow \bullet \text{---} \rightarrow \bullet + \dots, \quad (2.21)$$

де

$$\rightarrow \bullet = g(\omega_n) = \frac{\langle P^+ \rangle}{i\omega_n - \varepsilon} + \frac{\langle P^- \rangle}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}} \quad (2.22)$$

і відповідає, як і для моделі Хаббарда (див. [96, 98]), наближенню Хаббард-I для одноелектронні функції Гріна. Сумі діаграмного ряду (2.21) для однорідного випадку  $\langle S_i^z \rangle = \langle S^z \rangle$  в імпульсно-частотному представленні відповідає вираз:

$$\Rightarrow = G_{\mathbf{k}}(\omega_n) = \frac{1}{g^{-1}(\omega_n) - t_{\mathbf{k}}}. \quad (2.23)$$

Полюси функції Гріна  $G_k(\omega_n)$  дають спектр одноелектронних збуджень

$$\varepsilon_{I,II}(t_k) = \frac{1}{2}(-2\mu + t_k) \pm \frac{1}{2}\sqrt{g^2 + 4t_k\langle S^z \rangle g + t_k^2}. \quad (2.24)$$

Поведінка електронних зон як функції величини псевдоспін-електронної взаємодії представлена на рисунку 2.1. В даному наближенні гілки  $\varepsilon_I(t_k)$  і  $\varepsilon_{II}(t_k)$  формують дві електронні зони спектру, що завжди розділені щілиною, величина якої залежить від величини постійної взаємодії. Ширина зон залежить від середнього значення оператора псевдоспіну  $\langle S^z \rangle$  і у випадку сильної взаємодії ( $g \gg t$ ) півширина зон рівна  $t(\frac{1}{2} \pm \langle S^z \rangle)$  (де  $t$  ширина початкової електронної зони).

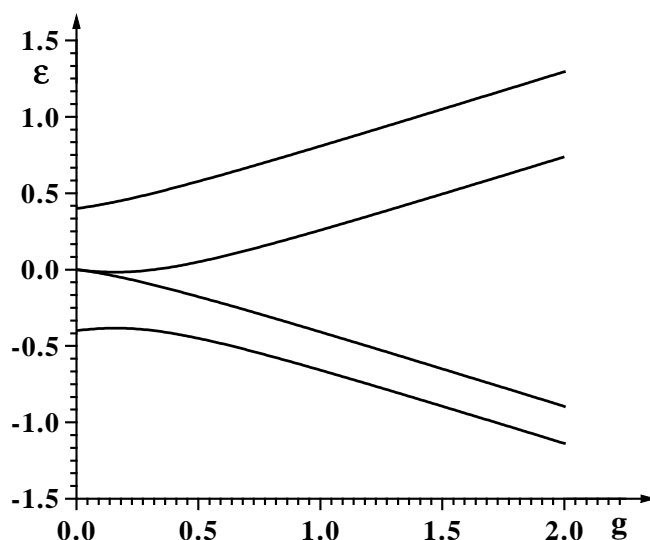


Рис. 2.1. Границі електронних зон ( $t_{k=0} = 0.4$ ,  $\langle S^z \rangle = 0.2$ ).

## 2.4. Сумування ... для ...

Зупинимося на розгляді лише ..., в якій ... З врахуванням наведених вище міркувань, щодо класифікації ..., рівняння ... можна записати у вигляді ...:

$$\langle S_l^z \rangle = \bullet = \odot - \text{[diagram]} + \frac{1}{2!} \text{[diagram]} - \frac{1}{3!} \text{[diagram]} + \dots \quad (2.25)$$

Аналiтичний вираз для ... є наступним:

$$\begin{aligned} \text{Diagram} &= \frac{2}{N} \sum_{n,\mathbf{k}} \frac{t_{\mathbf{k}}^2}{g^{-1}(\omega_n) - t_{\mathbf{k}}} \left( \frac{P_i^+}{i\omega_n - \varepsilon} + \frac{P_i^-}{i\omega_n - \tilde{\varepsilon}} \right) \\ &= \beta(\alpha_1 P_i^+ + \alpha_2 P_i^-), \end{aligned} \quad (2.26)$$

де введено позначення

$$\alpha_1 = \frac{2}{N\beta} \sum_{n,\mathbf{k}} \frac{t_{\mathbf{k}}^2}{(g^{-1}(\omega_n) - t_{\mathbf{k}})} \frac{1}{(i\omega_n - \varepsilon)}, \quad \alpha_2 = \frac{2}{N\beta} \sum_{n,\mathbf{k}} \frac{t_{\mathbf{k}}^2}{(g^{-1}(\omega_n) - t_{\mathbf{k}})} \frac{1}{(i\omega_n - \tilde{\varepsilon})}.$$

Використовуючи ... отримаємо:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}} [A_1 n(\varepsilon_I(t_{\mathbf{k}})) + B_1 n(\varepsilon_{II}(t_{\mathbf{k}}))], \\ \alpha_2 &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}} [A_2 n(\varepsilon_I(t_{\mathbf{k}})) + B_2 n(\varepsilon_{II}(t_{\mathbf{k}}))], \end{aligned}$$

тут

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{\varepsilon_I(t_{\mathbf{k}}) - \tilde{\varepsilon}}{\varepsilon_I(t_{\mathbf{k}}) - \varepsilon_{II}(t_{\mathbf{k}})}, & B_1 &= \frac{\varepsilon_{II}(t_{\mathbf{k}}) - \tilde{\varepsilon}}{\varepsilon_{II}(t_{\mathbf{k}}) - \varepsilon_I(t_{\mathbf{k}})}, \\ A_2 &= \frac{\varepsilon_I(t_{\mathbf{k}}) - \varepsilon}{\varepsilon_I(t_{\mathbf{k}}) - \varepsilon_{II}(t_{\mathbf{k}})}, & B_2 &= \frac{\varepsilon_{II}(t_{\mathbf{k}}) - \varepsilon}{\varepsilon_{II}(t_{\mathbf{k}}) - \varepsilon_I(t_{\mathbf{k}})}, \end{aligned}$$

і  $n(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{\beta\varepsilon}}$  є розподіл Фермі.

В аналітичній формі ... може бути переписано у вигляді:

$$\begin{aligned} \langle S_l^z \rangle &= \langle S_l^z \rangle_0 - \langle S_l^z \beta(\alpha_1 P_l^+ + \alpha_2 P_l^-) \rangle_0^c \\ &+ \frac{1}{2!} \langle S_l^z \beta^2 (\alpha_1 P_l^+ + \alpha_2 P_l^-)^2 \rangle_0^c - \dots = \langle S_l^z e^{-\beta(\alpha_1 P_l^+ + \alpha_2 P_l^-)} \rangle_0^c. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Таким чином, ... є еквівалентним ...

$$H_{\text{eff}} = \sum_i \{ \varepsilon(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + \tilde{\varepsilon}(\tilde{n}_{i\uparrow} + \tilde{n}_{i\downarrow}) - y S_i^z \}, \quad (2.28)$$

де  $y = h + \alpha_2 - \alpha_1$  визначає ... Аналітичний вигляд ... запишеться:

$$y = h + \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon - \tilde{\varepsilon}}{\varepsilon_I(t_{\mathbf{k}}) - \varepsilon_{II}(t_{\mathbf{k}})} [n(\varepsilon_{II}(t_{\mathbf{k}})) - n(\varepsilon_I(t_{\mathbf{k}}))]. \quad (2.29)$$

Остаточне рівняння для ... є наступним:

$$\langle S_l^z \rangle = \langle S^z \rangle_{\text{eff}} = b(y), \quad (2.30)$$

$$\text{де} \quad b(y) = \frac{1}{2} \tanh \left\{ \frac{\beta}{2} y + \ln \frac{1 + e^{-\beta \varepsilon}}{1 + e^{-\beta \tilde{\varepsilon}}} \right\}. \quad (2.31)$$

Ряд для оператора  $\langle n \rangle$  (після використання теорії, теореми) можна записати у вигляді:

$$\langle n_i \rangle = \blacksquare = \square \ominus \text{[diagram]} + \frac{1}{2!} \text{[diagram]} - \frac{1}{3!} \text{[diagram]} + \dots + \sum_{\alpha} \text{[diagram]}, \quad (2.32)$$

де введено нові позначення:

$$\begin{aligned} \text{[diagram]} &= \frac{\langle P^{\alpha} \rangle}{i\omega_n - \varepsilon^{\alpha}}, & \text{[diagram]} &= \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon^{\alpha}}, & \square &= \hat{n}_i, \\ P^{\alpha} &= (P^{+}; P^{-}), & \varepsilon^{\alpha} &= (\varepsilon; \tilde{\varepsilon}) \end{aligned}$$

Останній доданок з'являється за рахунок ...

Аналітичний вираз для (2.32) запишемо у вигляді:

$$\langle n_i \rangle = \langle n_i \rangle_{\text{eff}} + \frac{2}{N\beta} \sum_{n, \mathbf{k}, \alpha} \frac{t_{\mathbf{k}}^2}{(g^{-1}(\omega_n) - t_{\mathbf{k}})} \frac{\langle P^{\alpha} \rangle}{(i\omega_n - \varepsilon^{\alpha})^2}. \quad (2.33)$$

де

$$\langle n \rangle_{\text{eff}} = \frac{\text{Sp}(ne^{-\beta H_{\text{eff}}})}{\text{Sp}(e^{-\beta H_{\text{eff}}})} = 2 \frac{e^{-\beta(\varepsilon - \frac{\hbar}{2} + \alpha_1)}(1 + e^{-\beta \varepsilon}) + e^{-\beta(\tilde{\varepsilon} + \frac{\hbar}{2} + \alpha_2)}(1 + e^{-\beta \tilde{\varepsilon}})}{e^{\beta(h/2 - \alpha_1)}(1 + e^{-\beta \varepsilon})^2 + e^{-\beta(h/2 + \alpha_2)}(1 + e^{-\beta \tilde{\varepsilon}})^2} \quad (2.34)$$

Якщо ..., отримаємо:

$$\langle n \rangle = \langle n \rangle_{\text{eff}} + \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \{n(\varepsilon_{\text{I}}(t_{\vec{k}})) + n(\varepsilon_{\text{II}}(t_{\vec{k}}))\} - 2(n(\varepsilon) + n(\tilde{\varepsilon})) \quad (2.35)$$

Використовуючи наступне співвідношення:

$$\langle n \rangle_{\text{eff}} - n(\varepsilon) - n(\tilde{\varepsilon}) = 2\langle S^z \rangle (n(\varepsilon) - n(\tilde{\varepsilon}))$$

Остаточний вираз ... залишемо у вигляді:

$$\langle n_i \rangle = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} [n(\varepsilon_{\text{I}}(t_{\mathbf{k}})) + n(\varepsilon_{\text{II}}(t_{\mathbf{k}}))] - 2\langle P^+ \rangle n(\tilde{\varepsilon}) - 2\langle P^- \rangle n(\varepsilon). \quad (2.36)$$

## 2.5. ... потенціал

Для розрахунку ..., ми введемо ...:

$$H_{\lambda} = H_0 + \lambda H_{\text{int}}, \quad (2.37)$$

так, що  $H \rightarrow H_0$  для  $\lambda = 0$  і  $H \rightarrow H_0 + H_{\text{int}}$  для  $\lambda = 1$ .

$$Z_{\lambda} = \text{Sp}(e^{-\beta H_{\lambda}}) = \text{Sp}(e^{-\beta H_0} \hat{\sigma}_{\lambda}(\beta)) = Z_0 \langle \hat{\sigma}_{\lambda}(\beta) \rangle_0,$$

де

$$\hat{\sigma}_{\lambda}(\beta) = T_{\tau} \exp \left\{ -\lambda \int_0^{\beta} H_{\text{int}}(\tau) d\tau \right\},$$

відповідно

$$\Omega_{\lambda} = -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 - \frac{1}{\beta} \ln \langle \hat{\sigma}_{\lambda}(\beta) \rangle_0, \quad (2.38)$$

$$\Delta\Omega_{\lambda} = \Omega_{\lambda} - \Omega_0 = -\frac{1}{\beta} \ln \langle \hat{\sigma}_{\lambda}(\beta) \rangle_0.$$

Тут  $\Omega_0$  це термодинамічний потенціал розрахований на одновузловій частині вихідного гамільтоніану.

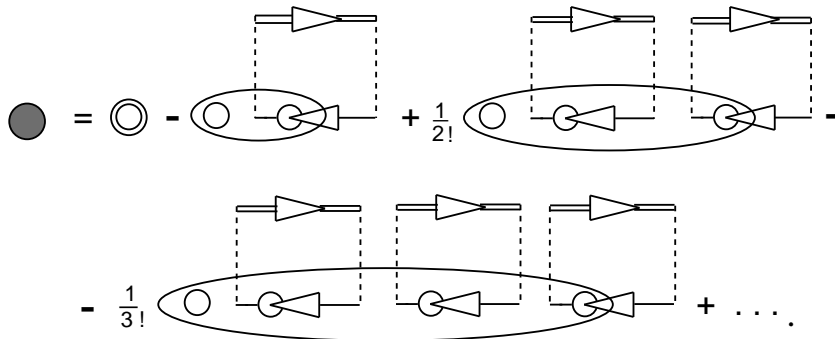
Таким чином маємо,

$$\Delta\Omega = \int_0^1 d\lambda \left( \frac{d\Omega_{\lambda}}{d\lambda} \right). \quad (2.39)$$

Для величини  $d\Omega_{\lambda}/d\lambda$ , ми можемо записати діаграмний ряд у вигляді:

$$\beta \frac{d\Omega_{\lambda}}{d\lambda} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots, \quad (2.40)$$

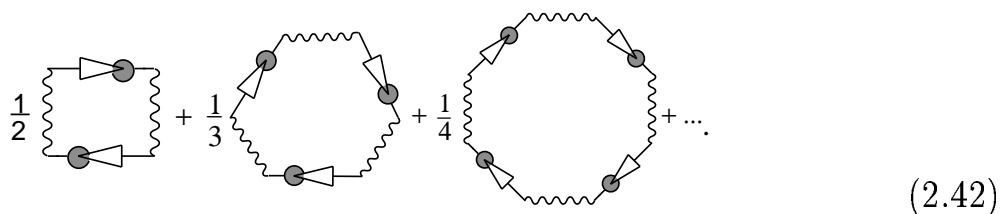
де  $\lambda t$ , а хвиляста лінія це єдина лінія в діаграмному ряду (2.40) біля якої не стоїть параметр  $\lambda$ . Слід зауважити, що цей параметр стоїть також біля будь-якої лінії, що отримується після розписування  $\langle S^z \rangle$  згідно з:



В аналітичній формі вираз (2.39) запишемо як

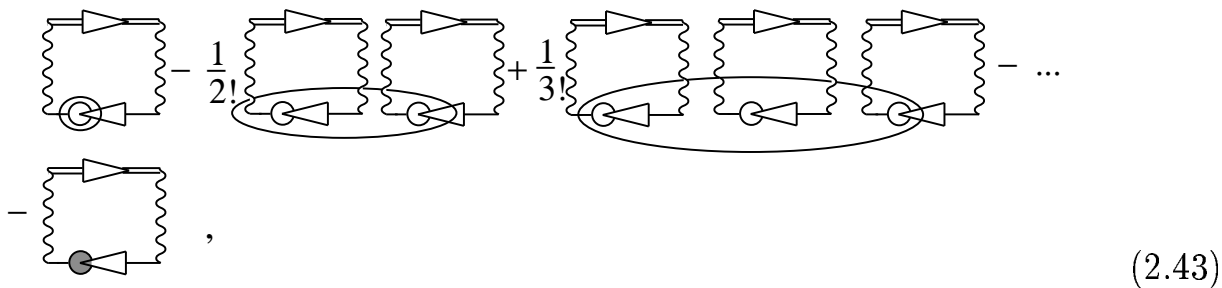
$$\begin{aligned} \Delta\Omega &= \frac{2}{N\beta} \sum_{n,\mathbf{k}} \int_0^1 \lambda t_{\mathbf{k}}^2 g_{\lambda}^2(\omega_n) \frac{1}{1 - \lambda t_{\mathbf{k}} g_{\lambda}(\omega_n)} d\lambda \\ &= -\frac{2}{N\beta} \sum_{n,\mathbf{k}} \ln(1 - t_{\mathbf{k}} g(\omega_n)) - \frac{2}{N\beta} \sum_{n,\mathbf{k}} \int_0^1 \frac{\lambda t_{\mathbf{k}} \frac{dg_{\lambda}(\omega_n)}{d\lambda}}{1 - \lambda t_{\mathbf{k}} g_{\lambda}(\omega_n)} d\lambda. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Перший доданок (2.41) можна представити в діаграмному вигляді:



Діаграмний ряд (2.42) описує електронний газ, енергетичний спектр якого визначається загальним полем псевдоспінів.

Другий доданок в (2.41) можна проінтегрувати і записати у формі діаграмного ряду:



що з'являється за рахунок наявності псевдоспінової підсистеми.

Остаточно, діаграмний ряд для термодинамічного потенціалу в який не входить додатковий параметр  $\lambda$  можна записати у вигляді:

$$\Delta\Omega = \frac{1}{2} \text{[diagram 1]} + \frac{1}{3} \text{[diagram 2]} + \dots + \text{[diagram 3]} - \frac{1}{2!} \text{[diagram 4]} + \dots - \text{[diagram 5]}, \quad (2.44)$$

В аналітичному вигляді:

$$\Omega_{\text{eff}} = -\frac{2}{N\beta} \sum_{n,\mathbf{k}} \ln(1-t_{\mathbf{k}}g(\omega_n)) - \frac{2}{N\beta} \sum_{n,\mathbf{k}} \frac{g(\omega_n)t_{\mathbf{k}}^2}{g^{-1}(\omega_n) - t_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{\beta} \ln \text{Sp}(e^{-\beta H_{\text{eff}}}) \quad (2.45)$$

Виділивши полюси функцій, просумувавши по частотах і зробивши деякі нескладні перетворення, запишемо остаточний вираз для термодинамічного потенціалу:

$$\begin{aligned} \Delta\Omega = & -\frac{2}{N\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln \frac{(\cosh \frac{\beta}{2} \varepsilon_{\text{I}}(t_{\mathbf{k}}))(\cosh \frac{\beta}{2} \varepsilon_{\text{II}}(t_{\mathbf{k}}))}{(\cosh \frac{\beta}{2} \varepsilon)(\cosh \frac{\beta}{2} \tilde{\varepsilon})} \\ & - \frac{1}{\beta} \ln \cosh \left\{ \frac{\beta}{2}(h + \alpha_2 - \alpha_1) + \ln \frac{1 + e^{-\beta\varepsilon}}{1 + e^{-\beta\tilde{\varepsilon}}} \right\} \\ & + \frac{1}{\beta} \ln \cosh \left\{ \frac{\beta}{2}h + \ln \frac{1 + e^{-\beta\varepsilon}}{1 + e^{-\beta\tilde{\varepsilon}}} \right\} + \langle S^z \rangle (\alpha_2 - \alpha_1). \end{aligned} \quad (2.46)$$

Далі, оскільки термодинамічний потенціал є функцією від середнього значення оператора псевдоспіну, перевіримо узгодженість наближень використаних при розрахунку середнього від оператора псевдоспіну і кількості частинок та при розрахунку термодинамічного потенціалу

$$\frac{d\Omega}{d(-\mu)} = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} [n(\varepsilon_{\text{I}}(t_{\mathbf{k}})) + n(\varepsilon_{\text{II}}(t_{\mathbf{k}}))] - 2\langle P^+ \rangle n(\tilde{\varepsilon}) - 2\langle P^- \rangle n(\varepsilon),$$

$$\frac{d\Omega}{d(-h)} = \frac{1}{2} \tanh \left\{ \frac{\beta}{2}(h + \alpha_2 - \alpha_1) + \ln \frac{1 + e^{-\beta\varepsilon}}{1 + e^{-\beta\tilde{\varepsilon}}} \right\}.$$

Таким чином ми отримуємо

$$\frac{d\Omega}{d(-\mu)} = \langle n \rangle, \quad \frac{d\Omega}{d(-h)} = \langle S^z \rangle.$$

Отже проведений розрахунок термодинамічних функцій здійснено в рамках одного і того ж наближення.

## 2.6. Дослідження ефектів ..., фазових ...

При дослідженні ... ми виділяємо два режими в яких може існувати наша система:

а) режим ...; коли вважається що ... В цьому випадку ... визначає умову ...

б) режим ...; цей випадок є більш ... і означає, що ... .. є рівноважною умовою в цьому випадку.

### 2.6.1. Режим ...

Для режиму ... визначається умовою ... Ця умова  $\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \langle S^z \rangle}\right)_{T, \mu, h} = 0$  формує рівняння на середнє від оператора псевдоспіну (2.30).

Проведемо послідовне дослідження поведінки ...

Нагадаємо вигляд рівняння для ...:

$$\langle S_l^z \rangle = \frac{1}{2} \tanh \left\{ \frac{\beta}{2} (h + \alpha_2 - \alpha_1 + \frac{2}{\beta} \ln \frac{1 + e^{-\beta \varepsilon}}{1 + e^{-\beta \tilde{\varepsilon}}}) \right\}. \quad (2.47)$$

Для випадку  $T \rightarrow 0$  або  $\beta \rightarrow \infty$  ...:

$$\Upsilon = \frac{2}{\beta} \ln \frac{1 + e^{-\beta \varepsilon}}{1 + e^{-\beta \tilde{\varepsilon}}} = \begin{cases} -2g; & \mu \geq \frac{g}{2}, \quad (\varepsilon < 0, \tilde{\varepsilon} < 0), \\ -2\mu - g; & -\frac{g}{2} < \mu < \frac{g}{2}, \quad (\varepsilon > 0, \tilde{\varepsilon} < 0), \\ 0, & \mu \leq -\frac{g}{2}; \quad (\varepsilon > 0, \tilde{\varepsilon} > 0), \end{cases} \quad (2.48)$$

$$\varepsilon = -\mu + \frac{g}{2}, \quad \tilde{\varepsilon} = -\mu - \frac{g}{2},$$

$$\alpha_2 - \alpha_1 = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}} \frac{g}{\sqrt{g^2 + 4t_{\mathbf{k}} \langle S^z \rangle g + t_{\mathbf{k}}^2}} [n(\varepsilon_{\text{II}}(t_{\mathbf{k}})) - n(\varepsilon_{\text{I}}(t_{\mathbf{k}}))], \quad (2.49)$$

$$\text{де } n(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{\beta \varepsilon}}, \text{ і при } \beta \rightarrow \infty \text{ маємо } \begin{cases} n(\varepsilon) = 1, \quad \varepsilon < 0, \\ n(\varepsilon) = 0, \quad \varepsilon > 0. \end{cases} \quad (2.50)$$

Вираз для ... має вигляд:

$$\langle n \rangle = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} [n(\varepsilon_{\text{I}}(t_{\mathbf{k}})) + n(\varepsilon_{\text{II}}(t_{\mathbf{k}}))] - (1 + 2\langle S^z \rangle)n(\tilde{\varepsilon}) - (1 - 2\langle S^z \rangle)n(\varepsilon). \quad (2.51)$$

Використовуючи наступне співвідношення

$$\frac{1}{\beta} \ln \cosh \frac{\beta}{2} X \rightarrow \frac{|X|}{2} \quad \text{при} \quad \beta \rightarrow \infty, \quad (2.52)$$

можна записати ... при  $T \rightarrow 0$  як:

$$\begin{aligned} \Delta\Omega = \Omega - \Omega_0 &= |\varepsilon| + |\tilde{\varepsilon}| - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (|\varepsilon_{\text{I}}(t_{\mathbf{k}})| + |\varepsilon_{\text{II}}(t_{\mathbf{k}})|) + \langle S^z \rangle (\alpha_2 - \alpha_1) \\ &\quad - \frac{1}{2} |h + \alpha_2 - \alpha_1 + \Upsilon| + \frac{1}{2} |h + \Upsilon|, \end{aligned} \quad (2.53)$$

де

$$\Omega_0 = -\frac{1}{\beta} \ln \left( e^{\frac{\beta h}{2}} (1 + e^{-\beta \varepsilon})^2 + e^{-\frac{\beta h}{2}} (1 + e^{-\beta \tilde{\varepsilon}})^2 \right). \quad (2.54)$$

Розглянемо випадок, коли ...

$$\mu < -\frac{g}{2} - t,$$

при цьому  $\varepsilon, \varepsilon_{\text{I}}, \tilde{\varepsilon}, \varepsilon_{\text{II}} > 0$ ,  $\alpha_2 - \alpha_1 = 0$ ,  $\Upsilon = 0$ . Рівняння ... перейде у наступний вираз:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \tanh \frac{\beta h}{2} \quad (2.55)$$

Отже в даному випадку ... наступним чином:

$$\text{при } h > 0 \quad \langle S^z \rangle = \frac{1}{2}, \quad \Omega = -\frac{h}{2}, \quad \langle n \rangle = 0; \quad (2.56)$$

$$\text{для } h < 0 \quad \langle S^z \rangle = -\frac{1}{2}, \quad \Omega = \frac{h}{2}, \quad \langle n \rangle = 0. \quad (2.57)$$

Дослідження випадку

$$-\frac{g}{2} - t < \mu < -\frac{g}{2} + t,$$

коли ... розіб'ємо на два випадки.

Перший випадок - ..., коли

$$-\frac{g}{2} - t < \mu < -\frac{g}{2} \quad \text{отже,} \quad \varepsilon_{\text{I}} > 0, \quad \Upsilon = 0.$$

Розв'язок рівняння ... (2.47), ... можуть бути записані в наступному вигляді:

$$\text{при значенні } h > 0 \quad \langle S^z \rangle = \frac{1}{2}, \quad \Omega = -\frac{h}{2}, \quad \langle n \rangle = 0; \quad (2.58)$$

$$h = 0, \quad \Omega = 0, \quad \langle n \rangle = 0, \quad \text{для всіх значень } \langle S^z \rangle \geq \frac{1}{2} + \frac{\mu + g/2}{t}; \quad (2.59)$$

$$h = \frac{2\langle S^z \rangle}{3gt} \left[ \left( \frac{\mu + g/2}{1/2 - \langle S^z \rangle} \right)^3 + t^3 \right] - \frac{1}{2t} \left[ \left( \frac{\mu + g/2}{1/2 - \langle S^z \rangle} \right)^2 - t^2 \right], \quad (2.60)$$

$$\Omega = (h - t/2)(1/2 - \langle S^z \rangle) - (\mu + g/2) \left[ 1 + \frac{\mu + g/2}{2t(1/2 - \langle S^z \rangle)} \right] - \frac{h}{2},$$

$$\langle n \rangle = \frac{\mu + g/2}{t(1/2 - \langle S^z \rangle)} + 1, \quad \text{коли } \langle S^z \rangle < \frac{1}{2} + \frac{\mu + g/2}{t};$$

$$\text{при } h \leq -\frac{(\mu + g/2)^3 + t^3}{3gt} - \frac{(\mu + g/2)^2 - t^2}{2t}, \quad (2.61)$$

$$\text{маємо } \langle S^z \rangle = -\frac{1}{2}, \quad \langle n \rangle = \frac{\mu + g/2}{t} + 1,$$

$$\Omega = \frac{h}{2} - \frac{t}{2} - \mu - \frac{g}{2} - \frac{(\mu + g/2)^2}{2t},$$

Отримані результати зображені у вигляді ...:

$$\mu = -0.6, \quad t = 0.2, \quad g = 1 \quad \text{в границі } T \rightarrow \infty,$$

на рисунках 2.2 та 2.3. В режимі  $\mu = const$  мінімум термодинамічного потенціалу  $\Omega$  визначає умову рівноваги в системі. З отриманої поведінки ..., слідує, що при певному ..., що в свою чергу, приводить до ...

Для другого випадку, коли

$$-\frac{g}{2} < \mu < -\frac{g}{2} + t, \quad \varepsilon_1 > 0, \quad \Upsilon = -2\mu - g,$$

і ..., розв'язок рівняння (2.47) може бути записаний наступним чином:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2}, \quad \langle n \rangle = 0, \quad \Omega = -\frac{1}{2} \max(h, 4|\tilde{\varepsilon}| - h) \quad \text{коли } h > \frac{2t^2}{3g} - \Upsilon, \quad (2.62)$$

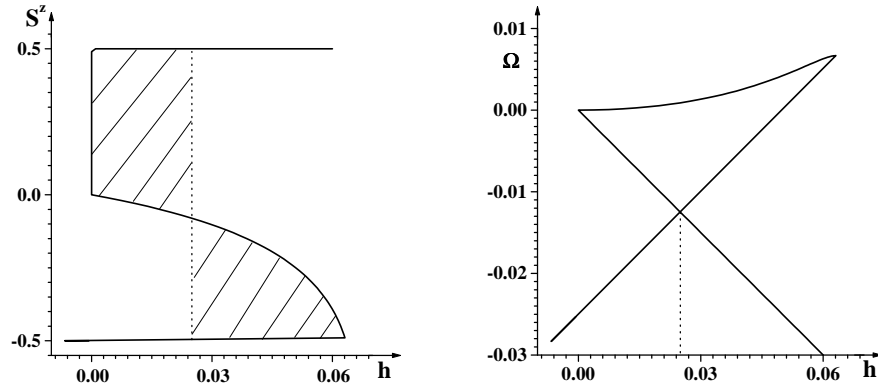


Рис. 2.2. ... залежності ...

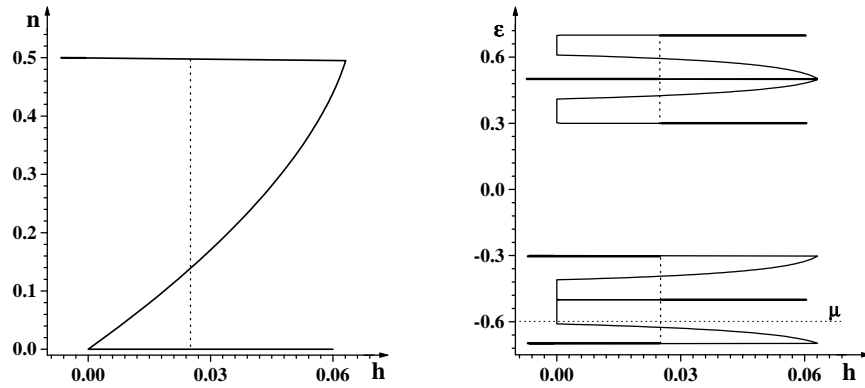


Рис. 2.3. Поведінка ... в залежності від ...

$$h = \frac{4t^2}{3g} \langle S^z \rangle - \Upsilon, \quad \Omega = \frac{1}{2} |h + \Upsilon| - \langle S^z \rangle (h + \Upsilon) - \frac{1}{2} \max(h, 4|\tilde{\varepsilon}| - h), \quad (2.63)$$

$$\langle n \rangle = 1 - 2\langle S^z \rangle, \quad \text{для} \quad \langle S^z \rangle \geq \frac{1}{2} - \frac{\mu + g/2}{t},$$

$$h = \frac{2\langle S^z \rangle}{3gt} \left[ \left( \frac{\mu + g/2}{1/2 - \langle S^z \rangle} \right)^3 + t^3 \right] - \frac{1}{2t} \left[ \left( \frac{\mu + g/2}{1/2 - \langle S^z \rangle} \right)^2 - t^2 \right] - \Upsilon, \quad (2.64)$$

$$\Omega = \frac{1}{2} |h + \Upsilon| - \langle S^z \rangle (h + \Upsilon) - \frac{1}{2} \max(h, 4|\tilde{\varepsilon}| - h) - \frac{t}{2} (1/2 - \langle S^z \rangle) + \mu + \frac{g}{2} - \frac{(\mu + g/2)^2}{2t(1/2 - \langle S^z \rangle)},$$

$$\langle n \rangle = \frac{\mu + g/2}{t(1/2 - \langle S^z \rangle)} - 2\langle S^z \rangle, \quad \text{для} \quad \langle S^z \rangle < \frac{1}{2} - \frac{\mu + g/2}{t};$$

$$\text{при} \quad h < -\frac{(\mu + g/2)^3 + t^3}{3gt} - \frac{(\mu + g/2)^2 - t^2}{2t} - \Upsilon, \quad (2.65)$$

$$\begin{aligned} \text{маємо } \langle S^z \rangle &= -\frac{1}{2}, \quad \langle n \rangle = \frac{\mu + g/2}{t} + 1, \\ \Omega &= \frac{1}{2}|h + \Upsilon| - \frac{1}{2}(h + \Upsilon) - \frac{1}{2}\max(h, 4|\tilde{\varepsilon}| - h) \\ &\quad - \frac{t}{2} + \mu + \frac{g}{2} - \frac{1}{2t}(\mu + g/2)^2. \end{aligned}$$

На рисунках 2.4 – 2.7 представлено залежності ... для випадку

$$\mu = -0.4, \quad t = 0.2, \quad g = 1 \quad \text{як в границі } T \rightarrow \infty,$$

так і для ...

В точці ... маємо ... З іншого боку, цю ...

Як видно з графіків на рисунку 2.6, ... може з'являтися ... за рахунок ...

Таким чином, ..., в системі ... виникає можливість ... Оскільки ..., маємо відповідну зміну ...

При ...

$$-\frac{g}{2} + t < \mu < 0, \quad \Upsilon = -2\mu - g,$$

можемо записати

$$\varepsilon_I > 0, \quad n(\varepsilon_I) = 0; \quad \varepsilon_{II} < 0, \quad n(\varepsilon_{II}) = 1; \quad \alpha_2 - \alpha_1 = -\frac{4t^2}{3g}\langle S^z \rangle.$$

В результаті отримуємо:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2}, \quad \langle n \rangle = 0, \quad \Omega = -\frac{1}{2}\max(h, 4|\tilde{\varepsilon}| - h), \quad \text{при } h > \frac{2t^2}{3g} - \Upsilon; \quad (2.66)$$

$$h = \frac{4t^2}{3g}\langle S^z \rangle - \Upsilon, \quad \text{для } \langle S^z \rangle \neq \pm\frac{1}{2}, \quad \langle n \rangle = 1 - 2\langle S^z \rangle, \quad (2.67)$$

$$\begin{aligned} \Omega &= \frac{1}{2}|h + \Upsilon| - \langle S^z \rangle(h + \Upsilon) - \frac{1}{2}\max(h, 4|\tilde{\varepsilon}| - h); \\ \langle S^z \rangle &= -\frac{1}{2}, \quad \langle n \rangle = 2, \quad \Omega = -\frac{1}{2}\max(h, 4|\tilde{\varepsilon}| - h), \quad \text{коли } h < -\frac{2t^2}{3g} - \Upsilon. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Виписані аналітичні результати представлено на рисунках 2.8 і 2.9. Як видно з рисунків 2.8, в ... випадку існує ..., що дає ... вказівку на можливість появи ...

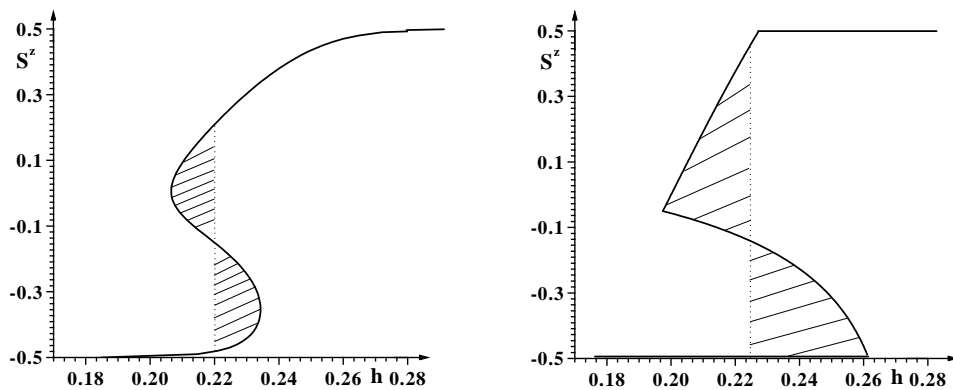


Рис. 2.4. Польова залежність  $\langle S^z \rangle$  ( $t_{k=0} = 0.2$ ,  $\mu = -0.4$ ,  $g = 1.0$ ) для режиму  $\mu = \text{const}$ ;  $T = 0.01$  and  $T = 0$ .

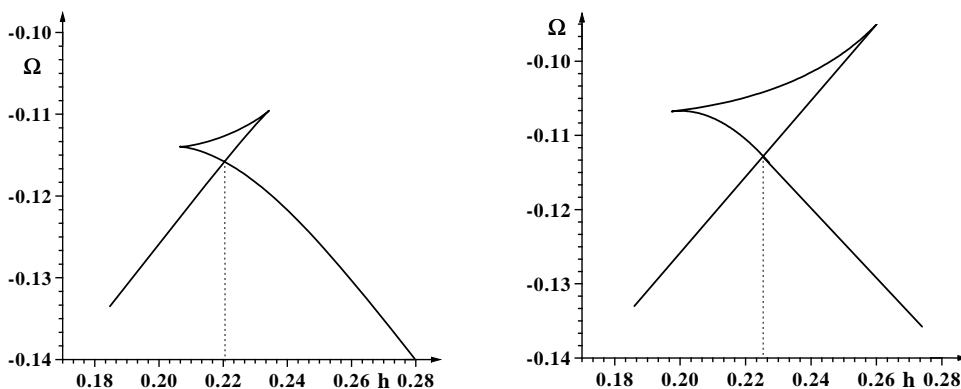


Рис. 2.5. Польова залежність термодинамічного потенціалу ( $t_{k=0} = 0.2$ ,  $\mu = -0.4$ ,  $g = 1.0$ );  $T = 0.01$  і  $T = 0$ .

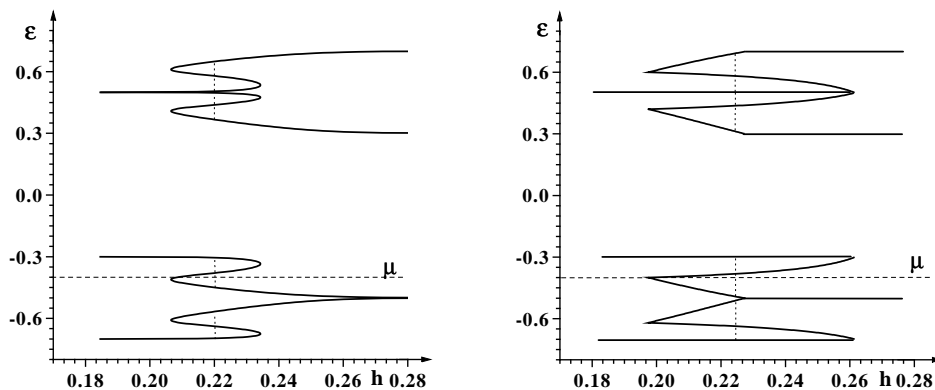


Рис. 2.6. Поведінка границь електронних зон від величини повздовжнього поля  $h$  ( $t_{k=0} = 0.2$ ,  $\mu = -0.4$ ,  $g = 1.0$ );  $T = 0.01$  і  $T = 0$ .

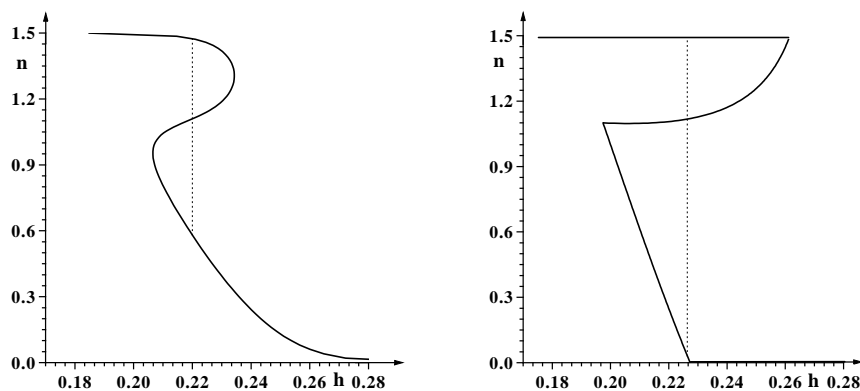


Рис. 2.7. Польова залежність електронної концентрації  $n$  ( $t_{k=0} = 0.2$ ,  $\mu = -0.4$ ,  $g = 1.0$ );  $T = 0.01$  and  $T = 0$ .

Проведене вище аналітичне дослідження ... здійснено у випадку коли  $\mu \in (-\infty, 0)$ . Випадок коли ... легко отримати з ...:

$$\mu \rightarrow -\mu, \quad h \rightarrow 2g - h, \quad n \rightarrow 2 - n, \quad S^z \rightarrow -S^z. \quad (2.69)$$

Зобразимо отримані результати в ..., а також результати чисельних розрахунків ..., у вигляді ...

На представлених рисунках є ... В межах цих областей, ..., мають місце ...

З ростом ..., як це зображено на ... Залежність ... від ... проілюстрована на рисунку 2.11 для двох різних значень ... Як видно, ефект зумовлений ...; область значень ..., що пов'язано з ... Нахил ... означає можливість ...

Існування ... вперше було отримано в роботі [77] для ... моделі ...

Аналіз поведінки ... демонструє, що ... відповідає ... (рисунок 2.12).

Слід зауважити, що ..., у випадку коли ..., може бути ... В області значень ... існує можливість ...

### 2.6.2. Режим ...

Умовою ... для режиму  $n = const$  є ... Ця умова формує ... (2.36).

Результати аналітичного розрахунку ... представлено у вигляді залежностей ... на рисунках 2.14.

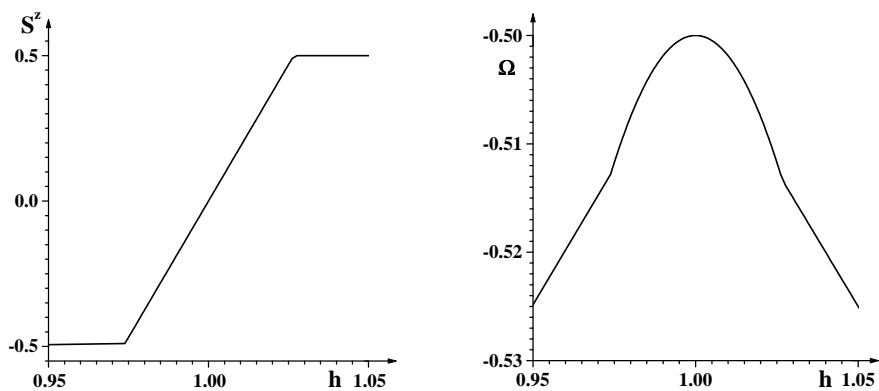


Рис. 2.8. ... залежності ... від ...

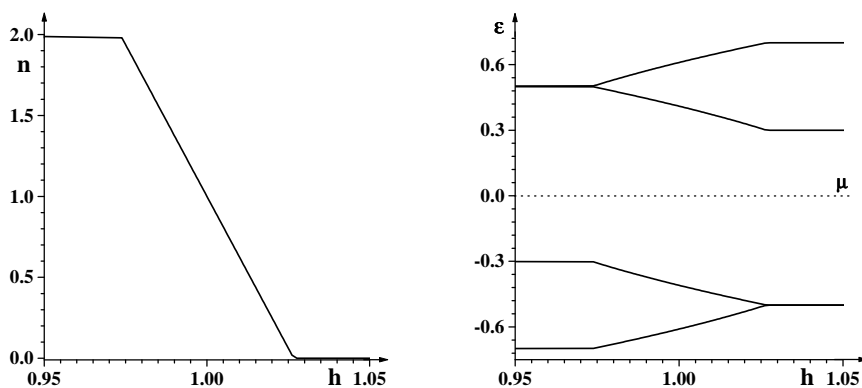


Рис. 2.9. Поведінка електронної концентрації  $n$  і границь спектру в залежності від величини поля  $h$  ( $t_{k=0} = 0.2$ ,  $\mu = -0.0$ ,  $g = 1.0$ ,  $T = 0$ ).

З наведених рисунків, де зображено поведінку величини хімічного потенціалу від концентрації електронів при різних значеннях температури, видно область з від'ємною похідною  $d\mu/dn < 0$  в якій стани з однорідним розподілом кількості частинок є нестійкими. В режимі постійного значення хімічного потенціалу  $\mu = const$  в зазначеній області відбувається фазовий перехід першого роду зі стрибком параметра порядку і концентрації частинок; точка фазового переходу визначається з умови мінімуму термодинамічного потенціалу  $\Omega$  або за правилом Максвелла. В режимі постійного значення кількості частинок  $n = const$  в цій області значень електронної концентрації, вільна енергія має прогин вгору, що дає можливість провести дотичну лінію, яка лежить під

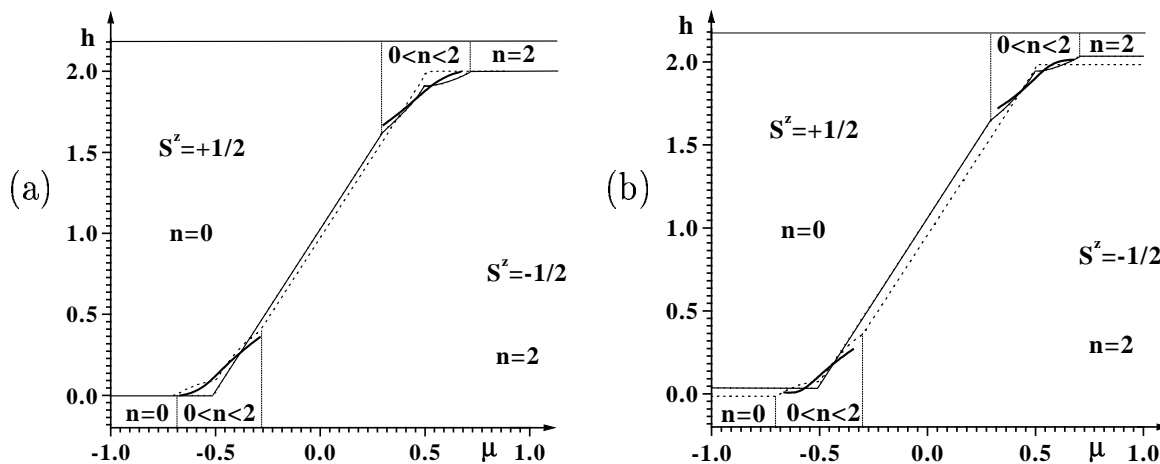


Рис. 2.10. Фазова діаграма  $\mu - h$ . Точкова і тонка суцільна лінії охоплюють області з значенням  $S^z = \pm \frac{1}{2}$ , відповідно. Наведена суцільна лінія зображає точки фазового переходу першого роду. (а) випадок нульової температури; (б)  $T = 0.002$  ( $t_{k=0} = 0.2$ ;  $g = 1$ ).

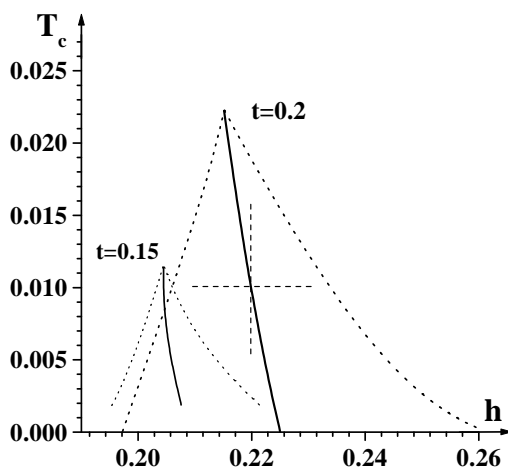


Рис. 2.11. Фазова діаграма  $T_c - h$  ( $t_{k=0} = 0.2$ ,  $\mu = -0.4$ ,  $g = 1$ ).

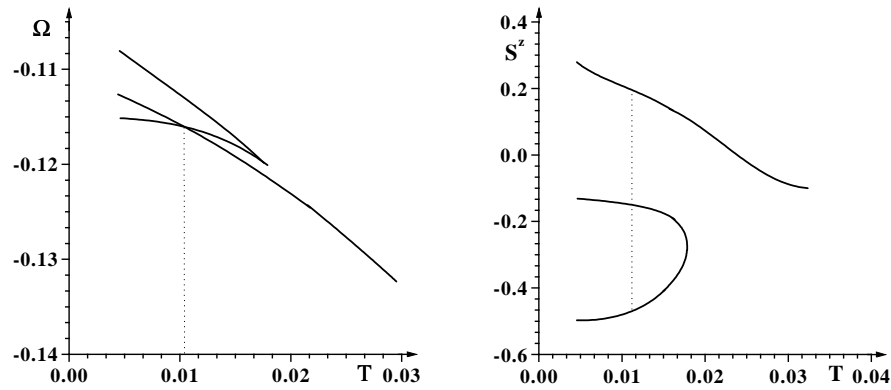


Рис. 2.12. ... залежність ...

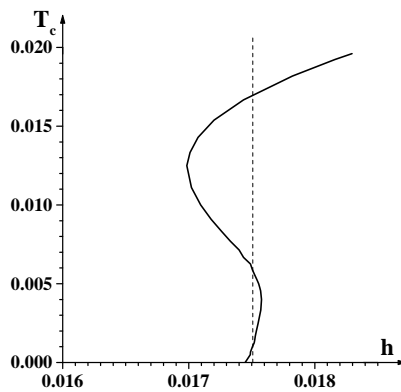


Рис. 2.13. Фазова діаграма  $T_c - h$  ( $\mu = -0.6$ ,  $g = 1$ ,  $t_{k=0} = 0.2$ ).

кривою  $F(n)$ . В результаті отримуємо, що термодинамічно більш стійкими, щодо однорідного випадку, є стани з різною концентрацією електронів (фазово розшаровані стани). Точки дотику до кривої  $F(n)$  на рисунку 2.14 визначають значення електронної концентрації і відповідного значення середнього від оператора псевдоспіну у розшарованих станах (рисунк 2.15 точкові лінії). Ці значення, також можна розрахувати за допомогою правила Максвела на графіку залежності хімічного потенціалу від концентрації  $\mu(n)$ .

Таким чином, при фіксованому значенні кількості частинок ( $n = const$ ), фазовий перехід першого роду (в режимі  $\mu = const$ ) переходить у фазове розшарування. Результуючі фазові діаграма  $n - h$  при різних значеннях температури представлені на рисунку 2.16 де суцільні лінії відповідають тим значенням електронної концентрації на які розшарується система при фік-