

УДК 538.22

**А. В. Силантьев****A. V. Silant'ev**

Марийский государственный университет, г. Йошкар-Ола

Mari State University, Yoshkar-Ola

**ДИМЕР В МОДЕЛИ ХАББАРДА В ПРИБЛИЖЕНИИ СТАТИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ****HUBBARD MODEL DIMER IN THE APPROXIMATION OF STATICAL FLUCTUATIONS**

В приближении статических флуктуаций вычислены антикоммутирующие функции Грина и энергетический спектр для димера в модели Хаббарда, а также энергетический спектр молекулы водорода в модели Хаббарда.

Anticommutator Green functions and the dimer energy spectrum in Hubbard model and the hydrogen molecule energy spectrum in Hubbard model are calculated in the approximation of stational fluctuations.

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

*Key words:* Hubbard model, Green functions, energy spectrum, nanosystems, dimer, molecule of hydrogen.

Модель Хаббарда [8] является одной из моделей, которая широко используется для теоретического описания сильно коррелируемых электронных систем [3]. В настоящее время эта модель также используется для описания свойств наносистем [6].

Целью данной работы является изучение димера в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. Как известно [9], структурным элементом  $\kappa-(ET)_2X$  и  $\theta-(ET)_2X$  солей является димер, который образован двумя молекулами  $ET$ , причем в качестве модели для описания димера используется модель Хаббарда. Кроме того, димер в рамках модели Хаббарда используется в качестве модели двухатомных молекул. Например, в [1] димер используется в качестве модели молекулы водорода, а в [10] димер используется в качестве модели как молекулы водорода, так и двухатомных гетерополярных молекул, таких как LiH.

Димер в модели Хаббарда описывается следующим Гамильтонианом:

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

где  $c_{i\sigma}^+$ ,  $c_{i\sigma}$  — операторы рождения и уничтожения электронов со спином  $\sigma$  на узле  $i$ ;  $n_{i\sigma}$  — оператор числа частиц со спином  $\sigma$  на узле  $i$ ;  $\varepsilon$  — собственная энергия электрона;  $t$  — интеграл переноса, описывающий перескоки электронов с одного узла на другой узел;  $U$  — энергия кулоновского отталкивания двух электронов, находящихся на одном узле;  $\bar{\sigma} = -\sigma$ .

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

$$\frac{dc_{f\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon \cdot c_{f\sigma}^+ + t \cdot c_{j\sigma}^+ + U \cdot c_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}}, \quad (2)$$

где  $\tau = it$ ,  $j \neq f$ .

Решение уравнения (2) будем искать, используя метод статических флуктуаций [7]. Следуя этому методу, оператор числа электронов  $n_{f\bar{\sigma}}$  на узле  $f$  со спином  $\bar{\sigma}$  запишем в виде

$$n_{f\bar{\sigma}} = \langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle + \Delta n_{f\bar{\sigma}}, \quad (3)$$

где  $\langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle$  — среднее число электронов на узле  $f$  со спином  $\bar{\sigma}$ ;  $\Delta n_{f\bar{\sigma}}$  — оператор флуктуации числа электронов на узле  $f$  со спином  $\bar{\sigma}$ , при чем предполагается, что оператор  $\Delta n_{f\bar{\sigma}}$  не зависит от времени.

После подстановки (3) в (2) уравнение движения для оператора  $c_{f\sigma}^+(\tau)$  примет вид

$$\frac{dc_{f\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon'_{f\sigma} c_{f\sigma}^+ + t \cdot c_{i\sigma}^+ + U_f c_{f\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}}, \quad (4)$$

где  $\varepsilon'_{f\sigma} = \varepsilon_f + U_f \langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle$ ,  $i \neq f$ .

Умножим (4) на оператор  $\Delta n_{f\bar{\sigma}}$  и учтем, что

$$(\Delta n_{f\bar{\sigma}})^2 = \alpha_{f\bar{\sigma}} \Delta n_{f\bar{\sigma}} + \beta_{f\bar{\sigma}}^2, \quad \text{где } \alpha_{f\bar{\sigma}} = 1 - 2 \langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle, \quad \beta_{f\bar{\sigma}}^2 = \langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle [1 - \langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle].$$

В результате получим

$$\frac{d(c_{f\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}})}{d\tau} = (\varepsilon'_{f\sigma} + U_f \alpha_{f\bar{\sigma}}) c_{f\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}} + t \cdot c_{i\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}} + U_f \beta_{f\bar{\sigma}}^2 c_{f\sigma}^+, \quad (5)$$

где  $i \neq f$ .

Аналогичным образом можно получить уравнения движения и для операторов  $c_{i\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}}$ ,  $c_{i\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}} \Delta n_{g\bar{\sigma}}$ . Для

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

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dc_{1\sigma}^+}{d\tau} &= \varepsilon'_{1\sigma} c_{1\sigma}^+ + t \cdot c_{2\sigma}^+ + U \cdot c_{1\sigma}^+ \Delta n_{1\bar{\sigma}}, \\ \frac{d(c_{1\sigma}^+ \Delta n_{1\bar{\sigma}})}{d\tau} &= (\varepsilon'_{1\sigma} + U \alpha_{1\bar{\sigma}}) c_{1\sigma}^+ \Delta n_{1\bar{\sigma}} + t \cdot c_{2\sigma}^+ \Delta n_{1\bar{\sigma}} + \\ &\quad + U \cdot \beta_{1\bar{\sigma}}^2 c_{1\sigma}^+, \\ \frac{d(c_{1\sigma}^+ \Delta n_{2\bar{\sigma}})}{d\tau} &= \varepsilon'_{1\sigma} c_{1\sigma}^+ \Delta n_{2\bar{\sigma}} + t \cdot c_{2\sigma}^+ \Delta n_{2\bar{\sigma}} + U \cdot c_{1\sigma}^+ \Delta n_{1\bar{\sigma}} \Delta n_{2\bar{\sigma}}, \\ \frac{d(c_{1\sigma}^+ \Delta n_{1\bar{\sigma}} \Delta n_{2\bar{\sigma}})}{d\tau} &= (\varepsilon'_{1\sigma} + U \alpha_{1\bar{\sigma}}) c_{1\sigma}^+ \Delta n_{1\bar{\sigma}} \Delta n_{2\bar{\sigma}} + \\ &\quad + t \cdot c_{2\sigma}^+ \Delta n_{1\bar{\sigma}} \Delta n_{2\bar{\sigma}} + U \cdot \beta_{1\bar{\sigma}}^2 c_{1\sigma}^+ \Delta n_{2\bar{\sigma}}, \\ \frac{dc_{2\sigma}^+}{d\tau} &= \varepsilon'_{2\sigma} c_{2\sigma}^+ + t \cdot c_{1\sigma}^+ + U \cdot c_{2\sigma}^+ \Delta n_{2\bar{\sigma}}, \\ \frac{dc_{2\sigma}^+}{d\tau} &= \varepsilon'_{2\sigma} c_{2\sigma}^+ + t \cdot c_{1\sigma}^+ + U \cdot c_{2\sigma}^+ \Delta n_{2\bar{\sigma}}, \\ \frac{dc_{2\sigma}^+}{d\tau} &= \varepsilon'_{2\sigma} c_{2\sigma}^+ + t \cdot c_{1\sigma}^+ + U \cdot c_{2\sigma}^+ \Delta n_{2\bar{\sigma}}, \\ \frac{d(c_{2\sigma}^+ \Delta n_{1\bar{\sigma}})}{d\tau} &= \varepsilon'_{2\sigma} c_{2\sigma}^+ \Delta n_{1\bar{\sigma}} + t \cdot c_{1\sigma}^+ \Delta n_{1\bar{\sigma}} + U \cdot c_{2\sigma}^+ \Delta n_{2\bar{\sigma}} \Delta n_{1\bar{\sigma}}, \\ \frac{d(c_{2\sigma}^+ \Delta n_{2\bar{\sigma}} \Delta n_{1\bar{\sigma}})}{d\tau} &= (\varepsilon'_{2\sigma} + U \alpha_{2\bar{\sigma}}) c_{2\sigma}^+ \Delta n_{2\bar{\sigma}} \Delta n_{1\bar{\sigma}} + \\ &\quad + t \cdot c_{1\sigma}^+ \Delta n_{2\bar{\sigma}} \Delta n_{1\bar{\sigma}} + U \cdot \beta_{2\bar{\sigma}}^2 c_{2\sigma}^+ \Delta n_{1\bar{\sigma}}. \end{aligned} \right. \quad (6)$$

Система уравнений (6) имеет точное аналитическое решение используя которое можно вычислить фурье-образ антикоммутирующих функций Грина:

$$\langle\langle c_{j\sigma}^+ | c_{j\sigma} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \cdot \sum_{m=1}^6 \frac{\langle F_{j\sigma m} \rangle}{E - E_m + ih}, \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} \langle F_{1\sigma 1} \rangle &= \langle F_{1\sigma 3} \rangle = \langle F_{2\sigma 1} \rangle = \langle F_{2\sigma 3} \rangle = \frac{1}{2} (1 - \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}} \rangle), \\ \langle F_{1\sigma 2} \rangle &= \langle F_{1\sigma 4} \rangle = \langle F_{2\sigma 2} \rangle = \langle F_{2\sigma 4} \rangle = \frac{1}{2} \langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}} \rangle, \\ \langle F_{1\sigma 5} \rangle &= \langle F_{2\sigma 5} \rangle = \frac{1}{2} \left( \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle - 2 \langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}} \rangle + \frac{U}{g} [\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle] \right), \\ \langle F_{1\sigma 6} \rangle &= \langle F_{2\sigma 6} \rangle = \frac{1}{2} \left( \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle - 2 \langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}} \rangle - \frac{U}{g} [\langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle - \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle] \right), \\ E_1 &= \varepsilon + t, \quad E_2 = \varepsilon - t + U = E_3, \quad E_4 = \varepsilon - t, \quad E_5 = \varepsilon + t + U, \\ E_6 &= \frac{1}{2} (2\varepsilon + U + g) = E_6, \quad \frac{1}{2} (2\varepsilon + U - g) = g \sqrt{U^2 + 4t^2}. \end{aligned} \quad (8)$$

Энергетический спектр димера определяется полюсами  $E_1 - E_6$  функций Грина (7). Для того чтобы найти спектральный вес каждого энергетического состояния необходимо, как видно из (8), вычислить  $\langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}} \rangle, \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle, \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle$ . Используя спектральную тео-

рему [2] и функции Грина (7) мы получим:

$$\langle n_{j\sigma} \rangle = \sum_{m=1}^6 \langle F_{j\sigma m} \rangle \cdot f_F(E_m), \quad (10)$$

где  $f_F$  — функция распределения Ферми.

Аналогичным образом можно получить выражения для других корреляционных функций. В результате получается замкнутая система уравнений, решая которую получим

$$\langle n_{1\sigma} \rangle = \langle n_{1\bar{\sigma}} \rangle = \langle n_{2\sigma} \rangle = \langle n_{2\bar{\sigma}} \rangle = \frac{K_1}{2K}, \quad (11)$$

$$\langle n_{1\sigma} n_{2\sigma} \rangle = \langle n_{1\bar{\sigma}} n_{2\bar{\sigma}} \rangle = \frac{K_2}{K},$$

где

$$\begin{aligned} K_1 &= [2f_F(E_5)f_F(E_6) + f_F(E_2) + \\ &\quad + f_F(E_4) - 2f_F(E_2)f_F(E_4)] \cdot [f_F(E_1) + f_F(E_3)], \\ K_2 &= f_F(E_5)f_F(E_6) \cdot [f_F(E_1) + f_F(E_3)], \\ K &= [1 - f_F(E_2) + f_F(E_3) + f_F(E_1) - f_F(E_5) - f_F(E_6)] f_F(E_4) + \\ &\quad + [1 + f_F(E_3) + f_F(E_1) - f_F(E_5) - f_F(E_6)] f_F(E_2) + \\ &\quad + 2[f_F(E_5) + f_F(E_6) - f_F(E_1) - f_F(E_3)] f_F(E_4) f_F(E_2) + \\ &\quad + [2 + f_F(E_1) - f_F(E_2) + f_F(E_3) - f_F(E_4)] f_F(E_5) f_F(E_6). \end{aligned} \quad (12)$$

Уравнение на химпотенциал имеет вид

$$2 \langle n_{j\sigma} \rangle = n, \quad (13)$$

где  $n$  — это средняя концентрация электронов в системе.

С учетом соотношений (11) и (13) выражения для спектральных плотностей энергетических состояний (8) примут следующий вид

$$\begin{aligned} \langle F_{1\sigma 1} \rangle &= \langle F_{1\sigma 3} \rangle = \langle F_{2\sigma 1} \rangle = \langle F_{2\sigma 3} \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \left[ 1 - n \cdot \frac{f_F(E_5)f_F(E_6) + f_F(E_2) + f_F(E_4) - 2f_F(E_2)f_F(E_4)}{2f_F(E_5)f_F(E_6) + f_F(E_2) + f_F(E_4) - 2f_F(E_2)f_F(E_4)} \right], \\ \langle F_{1\sigma 2} \rangle &= \langle F_{1\sigma 4} \rangle = \langle F_{2\sigma 2} \rangle = \langle F_{2\sigma 4} \rangle = \\ &= \frac{n}{2} \frac{f_F(E_5)f_F(E_6)}{2f_F(E_5)f_F(E_6) + f_F(E_2) + f_F(E_4) - 2f_F(E_2)f_F(E_4)}, \\ \langle F_{1\sigma 5} \rangle &= \langle F_{1\sigma 6} \rangle = \langle F_{2\sigma 5} \rangle = \langle F_{2\sigma 6} \rangle = \\ &= \frac{n}{2} \frac{f_F(E_2) + f_F(E_4) - 2f_F(E_2)f_F(E_4)}{2f_F(E_5)f_F(E_6) + f_F(E_2) + f_F(E_4) - 2f_F(E_2)f_F(E_4)}. \end{aligned} \quad (14)$$

Таким образом, энергетически спектр и спектральные плотности энергетических состояний димера определяется соотношениями (9) и (14) соответственно.

Отметим, что функция Грина (7) при  $t = 0$  переходит в функцию Грина модели Хаббарда в атомном пределе [4]:

$$\langle\langle c_{j\sigma}^+ | c_{j\sigma} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{E - E_1 + ih} + \frac{\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{E - E_2 + ih} \right\}, \quad (15)$$

$$E_1 = \varepsilon, \quad E_2 = \varepsilon + U.$$

Рассмотрим также случай, когда оператор флуктуации числа частиц не зависит от номера узла, т. е.

$\Delta n_{\bar{\sigma}} \Delta n_{\bar{\sigma}} \Delta n_{\sigma}$ . Тогда используя (11), можно показать, что в этом случае имеет место следующее соотношение

$$\langle n_{1\sigma} n_{2\sigma} \rangle = \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle. \quad (16)$$

Тогда антикоммутирующая функция Грина (7) примет следующий вид

$$\langle\langle c_{j\sigma}^+ | c_{j\sigma} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2} \left\{ \frac{1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{E - E_1 + ih} + \frac{\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{E - E_2 + ih} + \frac{1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{E - E_3 + ih} + \frac{\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{E - E_4 + ih} \right\}, \quad (17)$$

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

Выражение (17) совпадает с результатом работы [7], в которой функция Грина для димера была вычислена в приближении однородных статических флуктуаций.

Как известно из [10], димер в модели Хаббарда имеет точное решение, при этом энергетический спектр димера имеет следующий вид

$$E_1 = \frac{1}{2}(2\varepsilon + U - g_0), \quad E_2 = \frac{1}{2}(2\varepsilon + U + g_0), \quad (18)$$

$$E_3 = \varepsilon, \quad E_4 = \varepsilon + U, \quad g_0 = \sqrt{U^2 + 16t^2}.$$

В качестве примера рассмотрим молекулу водорода, рассматриваемую в виде димера. Как известно из квантовой химии [5], при образовании молекулы водорода атомные уровни двух атомов водорода расщепляются на два уровня. Нижний уровень соответствует связывающей орбитали, а верхний уровень — разрыхляющей орбитали. Таким образом, при образовании молекулы водорода из двух атомных орбиталей образуется две молекулярные орбитали. В случае димера два исходных энергетических уровня с энергией  $\varepsilon$ , как видно из (9), (17) и (18), порождают более двух энергетических уровней. Для того чтобы димер можно было рассматривать как модель молекулы водорода и иметь соответствие с методом молекулярных орбиталей лишние энергетические уровни следует отбросить. В работе [10] при рассмотрении молекулы водорода в виде димера энергетические уровни с энергиями  $E_3$  и  $E_4$  были отброшены, а энергетический уровень с энергией  $E_1$  был интерпретирован как энергетический уровень, который соответствует связывающей молекулярной орбитали, энергетический же уровень с энергией  $E_2$  был интерпретирован как энергетический уровень, который соответствует разрыхляющей молекулярной орбитали. Энергию этих орбиталей обозначим соответственно через  $E_{НОМО}^0$  и  $E_{ЛУМО}^0$ :

$$E_{ЛУМО}^0 = \frac{1}{2}(2\varepsilon + U + g_0), \quad E_{НОМО}^0 = \frac{1}{2}(2\varepsilon + U - g_0), \quad (19)$$

$$g_0 = \sqrt{U^2 + 16t^2},$$

где  $\varepsilon$  — энергия электрона, находящегося на 1s орбитали атома водорода, т. е.  $\varepsilon = -13,6$  эВ [10].

Как и в работе [10], в (9) отбросим энергетические уровни с энергиями  $E_1$  и  $E_2$ , а энергетическим уров-

ням  $E_3, E_4$ , которые по внешнему виду напоминают соответствующие выражения в (18), дадим ту же самую интерпретацию. Тогда в приближении статических флуктуаций энергетические уровни  $E_{ЛУМО}, E_{НОМО}$  будут определяться следующим образом:

$$E_{ЛУМО} = \frac{1}{2}(2\varepsilon + U + g), \quad E_{НОМО} = \frac{1}{2}(2\varepsilon + U - g), \quad (20)$$

$$g = \sqrt{U^2 + 4t^2}.$$

Зная энергетические уровни  $E_{ЛУМО}, E_{НОМО}$  можно найти глобальную электроотрицательность по Малликену  $\chi_M$  и химический потенциал  $\mu$ :

$$\chi_M = -\frac{1}{2}(E_{ЛУМО} + E_{НОМО}) - \varepsilon - \frac{U}{2}, \quad (21)$$

$$\mu = -\chi_M - \varepsilon + \frac{U}{2}.$$

Отметим, что полученный химический потенциал для молекулы водорода совпадает с химическим потенциалом для модели Хаббарда в атомном пределе в случае полузаполнения.

Для того чтобы получить численные значения для глобальной электроотрицательности по Малликену и химического потенциала запишем выражения для энергии ионизации и энергии сродства:

$$E_I = -E_{НОМО} + U_1 = -\frac{1}{2}(2\varepsilon + U - g) + U_1, \quad (22)$$

$$E_A = -E_{ЛУМО} - U_1 = -\frac{1}{2}(2\varepsilon + U + g) - U_1,$$

где  $U_1$  — энергия, на которую смещаются  $E_{НОМО}$  и  $E_{ЛУМО}$  при удалении и добавлении одного электрона, соответственно.

Как известно, для молекулы водорода  $E_I = 15,427$  эВ,  $E_A = -3,58$  эВ. Тогда из (22) можно определить  $U$ :

$$U = -2\varepsilon - E_I - E_A \approx 15,4 \text{ эВ}. \quad (23)$$

Подставляя (23) в (21) получим

$$\chi_M = 5,9 \text{ эВ}; \quad \mu = -5,9 \text{ эВ}. \quad (24)$$

Используя (19) и (20) вычислим  $E_{ЛУМО}, E_{НОМО}$  для двух предельных случаев, когда  $U = 0$  и  $t = 0$ . Соотношения (19) и (20) при  $U = 0$  принимают вид

$$E_{ЛУМО} = \varepsilon + |t|, \quad E_{НОМО} = \varepsilon - |t|, \quad (25)$$

где учтено, что  $t < 0$ .

Соотношения (19) и (20) при  $t = 0$  принимают вид

$$E_{ЛУМО} = \varepsilon + U, \quad E_{НОМО} = \varepsilon. \quad (26)$$

Теперь рассмотрим молекулу водорода в модели Хаббарда в приближении однородных статических флуктуаций, т. е. когда оператор флуктуации числа частиц не зависит от номера узла. В этом случае, как видно из (9) и (17) энергетические состояния, которые выше были взяты в качестве энергетических состояний, которые соответствуют связывающей и разрыхляющей орбиталам, отсутствуют. Поэтому в этом приближении из четырех энергетических состояний

димера в (17) возьмем те, которые удовлетворяют предельным условиям (25) и (26):

$$E_{LUMO} = \varepsilon + |t| + U \mp E_{HOMO} \quad \varepsilon - |t|. \quad (27)$$

Подставляя (19) и (27) в (21), мы видим, что абсолютная электроотрицательность по Милликену, химический потенциал и энергия отталкивания двух электронов  $U$ , полученные тремя методами (точного решения, решения в приближении однородных статических флуктуаций и решения в приближении статических флуктуаций для произвольных  $\Delta n_{1\bar{\sigma}}$  и  $\Delta n_{2\bar{\sigma}}$ ), совпадают.

Отметим, что при рассмотрении молекулы водорода в приближении однородных статических флуктуаций мы фактически сформировали две хаббардовские подзоны молекулы водорода следующим образом. Из нижней хаббардовской подзоны димера мы отбросили энергетические состояния, которые соответствуют разрыхляющим орбиталям, а оставили энергетические состояния, которые соответствуют связывающим орбиталям. Из верхней хаббардовской подзоны димера мы отбросили энергетические состояния, которые соответствуют связывающим орбиталям, а оставили энергетические состояния, которые соответствуют разрыхляющим орбиталям. В приближении однородных статических флуктуаций можно использовать этот метод построения хаббардовских подзон для более сложных молекулярных систем. Согласно этому методу нижнюю хаббардовскую подзону молекулярной системы будут составлять энергетические состояния, которые соответствуют связывающим орбиталям, а верхнюю хаббардовскую подзону

будут составлять энергетические состояния, которые соответствуют разрыхляющим орбиталям. Поэтому при определении энергетического спектра молекулярной системы из всех энергетических состояний, получаемых из функции Грина, необходимо удалить лишние энергетические состояния. Из нижней хаббардовской подзоны необходимо удалить состояния, соответствующие разрыхляющим орбиталям, а из верхней хаббардовской подзоны удалить состояния, которые отвечают связывающим орбиталям.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Ашкрофт Н., Мермин Н.* Физика твердого тела. — М.: Мир, 1979. — Т. 2. — 422 с.
2. *Зубарев Д. Н.* Двухвременные функции Грина в статистической физике // УФН. — 1960. — Т. 1. — № 1. — С. 71–116.
3. *Исюмов Ю. А., Кацнельсон М. И., Скрябин Ю. Н.* Магнетизм коллективизированных электронов. — М.: Наука, 1994. — С. 367.
4. *Кузьмин Е. В., Петраковский Г. А., Завадский Э. А.* Физика магнитоупорядоченных веществ. — Новосибирск: Наука, 1976. — 287 с.
5. *Маррел Дж., Кетта С., Теддер Дж.* Теория валентности. — М.: Мир, 1968. — 520 с.
6. *Мурзаев А. И.* Изучение электронных свойств ионизированных углеродных нанотрубок в модели Хаббарда // Известия вузов. Физика — 2010. — Т. 10. — С. 47–51.
7. *Силантьев А. В.* Применение метода статических флуктуаций к модели Хаббарда // Известия вузов. Поволжский регион. Физико-математические науки. — 2011. — Т. 19. — С. 151–163.
8. *Hubbard J.* Electron correlations in narrow energy bands // Proceedings of the Royal Society A. — 1963. — V. 276. — P. 238–257.
9. *McKenzie R. H.* A strongly correlated electron model for the layered organic superconductors k-(BEDT-TTF)<sub>2</sub>X // Comments Cond. Mat. Phys. — 1998. — V. 18. — P. 309–317.
10. *Meniry E. J.* Introduction to the Hubbard Model. — University of Belfast, 2005. — 93 p.