

УДК 538.22

А. В. Силантьев**A. V. Silantiev***Марийский государственный университет, г. Йошкар-Ола**Mari State University, Yoshkar-Ola***ПРИБЛИЖЕНИЕ СТАТИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ ДЛЯ МОДЕЛИ ХАББАРДА****THE APPROXIMATION OF STATISTICAL FLUCTUATIONS FOR THE HUBBARD MODEL**

В работе представлено краткое описание, анализ и сравнение четырех разных методов, которые используются при вычислении функций Грина в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. Вычислены функции Грина в приближении статических флуктуаций для фуллерена C_{20} с группой симметрии I_h и для фуллерена C_{24} с группой симметрии O_h .

We analysed, compared and briefly described four different models used to calculate Green's functions in the Hubbard model at the approximation of statistical fluctuations. We calculated Green's functions at the approximation of statistical fluctuations for C_{20} fullerene with I_h group of symmetry and for C_{24} fullerene with O_h group of symmetry.

Ключевые слова: модель Хаббарда, функции Грина, наносистемы, фуллерены, фуллерен C_{20} , фуллерен C_{24} .

Key words: the Hubbard model, Green's functions, nanosystems, fullerenes, C_{20} fullerene, C_{24} fullerene.

Модель Хаббарда [13] широко используется для теоретического описания сильно коррелируемых электронных систем (СКЭС). Например, эта модель применяется для описания переходов металл-изолятор, магнитных явлений, органических сверхпроводников и свойств высокотемпературных сверхпроводников. В настоящее время большое число теоретических исследований посвящено изучению наносистем, как в модели Хюккеля, так и в модели Хаббарда. Так, в работе [12] для исследования наносистем используется модель Хюккеля, а в работе [4] — модель Хаббарда.

Для исследования физических свойств СКЭС в рамках модели Хаббарда используются разнообразные приближенные методы, например, приближение хаотических фаз, приближение самосогласованного поля, метод континуального интегрирования [1]. Относительно недавно появились работы [2; 3; 6–11], в которых для исследования СКЭС в рамках модели Хаббарда используется приближение статических флуктуаций (ПСФ), которое было предложено в работе [5] при исследовании модели Гейзенберга. Методы, разработанные в работах [2; 3; 6–11], отличаются друг от друга способами получения и решения системы дифференциальных уравнений, которые получаются из уравнений движения для операторов рождения. Можно выделить четыре метода, применяемых при вычислении функций Грина в рамках модели Хаббарда в ПСФ. Рассмотрим каждый из этих методов.

Модель Хаббарда в приближении статических флуктуаций I. В рамках модели Хаббарда [13] СКЭС описывается гамильтонианом вида:

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

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

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

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

где $\tau = it$, t — время.

Решение уравнения (2) будем искать, используя ПСФ [5]. Следуя данному приближению, 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 $\bar{\sigma}$, причем 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:

$$\frac{dc_{f\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon'_f c_{f\sigma}^+ + \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ + U_f c_{f\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}}, \quad (4)$$

где

$$\varepsilon'_f = \varepsilon_f + U_f \langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle. \quad (5)$$

Умножим (4) на оператор $\Delta n_{f\bar{\sigma}}$:

$$\begin{aligned} \frac{d(c_{f\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}})}{d\tau} &= \\ &= \varepsilon'_{f\sigma} c_{f\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}} + \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}} + U_f c_{f\sigma}^+ (\Delta n_{f\bar{\sigma}})^2, \end{aligned} \quad (6)$$

где учтено, что оператор $\Delta n_{f\bar{\sigma}}$ не зависит от времени.

В работе [2], для того чтобы получить замкнутую систему дифференциальных уравнений по аналогии с работой [5], предложено следующее приближение:

$$(\Delta n_{f\bar{\sigma}})^2 \approx \langle (\Delta n_{f\bar{\sigma}})^2 \rangle \langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle [1 - \langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle]. \quad (7)$$

Подставляя (7) в (6), получим

$$\begin{aligned} \frac{d(c_{f\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}})}{d\tau} &= \\ &= \varepsilon'_{f\sigma} c_{f\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}} + \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}} + U_f \langle (\Delta n_{f\bar{\sigma}})^2 \rangle \cdot c_{f\sigma}^+. \end{aligned} \quad (8)$$

Запишем уравнения (4) и (8) в виде системы

$$\begin{cases} \frac{dc_{f\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon'_{f\sigma} c_{f\sigma}^+ + \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ + U_f c_{f\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}}; \\ \frac{d(c_{f\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}})}{d\tau} = \varepsilon'_{f\sigma} c_{f\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}} + \\ + \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}} + U_f \langle (\Delta n_{f\bar{\sigma}})^2 \rangle \cdot c_{f\sigma}^+. \end{cases} \quad (9)$$

Если СКЭС представляет собой бесконечную решетку, то с помощью преобразования Фурье, как показано в [2], система уравнений (9) сводится к конечной системе дифференциальных уравнений первого порядка. Если же число узлов в СКЭС конечно и равно N и оператор флуктуации числа электронов не зависит от номера узла, т. е. $\Delta n_{f\bar{\sigma}} = \Delta n_{\bar{\sigma}}$, то, записав (9) для каждого узла, мы получим замкнутую систему, состоящую из $2N$ дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\begin{cases} \frac{dc_{1\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon'_\sigma c_{1\sigma}^+ + \sum_i t_{i1} c_{i\sigma}^+ + U c_{1\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}}; \\ \frac{d(c_{1\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}})}{d\tau} = \varepsilon'_\sigma c_{1\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}} + \sum_i t_{i1} c_{i\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}} + U \langle (\Delta n_{\bar{\sigma}})^2 \rangle \cdot c_{1\sigma}^+; \\ \dots \\ \frac{dc_{N\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon'_\sigma c_{N\sigma}^+ + \sum_i t_{iN} c_{i\sigma}^+ + U c_{N\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}}; \\ \frac{d(c_{N\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}})}{d\tau} = \varepsilon'_\sigma c_{N\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}} + \sum_i t_{iN} c_{i\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}} + U \langle (\Delta n_{\bar{\sigma}})^2 \rangle \cdot c_{N\sigma}^+. \end{cases} \quad (10)$$

Таким образом, нахождение операторов рождения в ПСФ, которое предложено в [2], в случае конечных СКЭС приводит к решению системы из $2N$ дифференциальных уравнений (10).

Отметим, что приближение (7) является достаточно грубым, поскольку

$$(\Delta n_{f\bar{\sigma}})^2 = \alpha_{f\bar{\sigma}} \Delta n_{f\bar{\sigma}} + \beta_{f\bar{\sigma}}^2, \quad (11)$$

где

$$\alpha_{f\bar{\sigma}} = 1 - 2 \langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle, \quad \beta_{f\bar{\sigma}}^2 = \langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle [1 - \langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle]. \quad (12)$$

Подставляя (11) в (7), получим

$$\alpha_{f\bar{\sigma}} = 0. \quad (13)$$

Подставляя (12) в (13), получим условие, при котором выполняется приближение (7):

$$\langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle = \frac{1}{2}. \quad (14)$$

Таким образом, ПСФ, предложенное в [2], которое основано на приближении (7), можно применять только в случае полузаполненной зоны.

Модель Хаббарда в приближении статических флуктуаций II. Рассмотрим теперь метод, предложенный в работе [3]. В данном методе для нахождения операторов рождения $c_{i\sigma}^+(\tau)$ вводятся вспомогательные операторы

$$\tilde{c}_{i\sigma}^+(\tau) = \exp(-H_0\tau) c_{i\sigma}^+(\tau) \exp(H_0\tau), \quad (15)$$

где

$$H_0 = \sum_{\sigma_1, i} \varepsilon_i n_{i\sigma_1} + \sum_{\sigma_1, i \neq j} t_{ij} c_{i\sigma_1}^+ c_{j\sigma_1}. \quad (16)$$

Можно показать, что вспомогательные операторы $\tilde{c}_{i\sigma}^+(\tau)$ удовлетворяют следующим уравнениям:

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{c}_{i\sigma}^+(\tau)}{d\tau} = -U (\Delta \tilde{n}_{i\bar{\sigma}}(\tau) \tilde{c}_{i\sigma}^+(\tau)); \\ \frac{d(\Delta \tilde{n}_{i\bar{\sigma}}(\tau) \tilde{c}_{i\sigma}^+(\tau))}{d\tau} = \\ = -U (1 - 2 \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle) (\Delta \tilde{n}_{i\bar{\sigma}}(\tau) \tilde{c}_{i\sigma}^+(\tau)) - \\ - U \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle (1 - \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle) \tilde{c}_{i\sigma}^+(\tau), \end{cases} \quad (17)$$

где

$$\Delta \tilde{n}_{i\bar{\sigma}} = \exp(-H_0\tau) \Delta n_{i\bar{\sigma}}(\tau) \exp(H_0\tau). \quad (18)$$

Из (15) и (17) следует, что

$$\begin{aligned} c_{i\sigma}^+(\tau) &= \tilde{c}_{i\sigma}^+(\tau) \left\{ (1 - \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle) \exp(-\langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle U \tau) + \right. \\ &+ \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle \exp((1 - \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle) U \tau) \left. \right\} + \\ &+ \Delta n_{i\bar{\sigma}}(0) \tilde{c}_{i\sigma}^+(\tau) \left\{ \exp((1 - \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle) U \tau) - \right. \\ &\left. - \exp(-\langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle U \tau) \right\}, \end{aligned} \quad (19)$$

где

$$\tilde{c}_{i\sigma}^+ = \exp(H_0\tau) \tilde{c}_{i\sigma}^+(0) \exp(-H_0\tau). \quad (20)$$

Нахождение операторов $\tilde{c}_{i\sigma}^+$ сводится к решению следующей системы дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{c}_{1\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon'_\sigma \tilde{c}_{1\sigma}^+ + \sum_i t_{i1} \tilde{c}_{i\sigma}^+; \\ \dots \\ \frac{d\tilde{c}_{N\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon'_\sigma \tilde{c}_{N\sigma}^+ + \sum_i t_{iN} \tilde{c}_{i\sigma}^+. \end{cases} \quad (21)$$

Таким образом, в работе [3] для нахождения операторов рождения вводится так называемое «представление типа взаимодействия», в результате чего вводятся вспомогательные операторы, для которых составляется система дифференциальных уравнений (21). Решая эту систему, находят вспомогательные операторы, подставив которые в (19), получают искомые операторы рождения. Таким образом, метод, предложенный в [3], является довольно громоздким.

Модель Хаббарда в приближении статических флуктуаций III. Рассмотрим теперь метод, предложенный в работах [6–9]. В данном методе, для того чтобы получить дифференциальное уравнение для оператора $c_{f\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}}$, вместо приближения (7) было применено точное равенство (11), с учетом которого уравнение (6) примет вид:

$$\frac{d(c_{f\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}})}{d\tau} = (\varepsilon'_{f\sigma} + U_f \alpha_{f\bar{\sigma}}) c_{f\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}} + \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}} + U_f \beta_{f\bar{\sigma}}^2 c_{f\sigma}^+ \quad (22)$$

Аналогичным образом можно получить уравнения движения и для операторов $c_{i\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}}$, $c_{i\sigma}^+ \Delta n_{f\bar{\sigma}} \Delta n_{g\bar{\sigma}}$, ... В результате можно получить замкнутую систему дифференциальных уравнений, решив которую, можно найти операторы рождения. Отметим, что введение операторов более высокого порядка позволяет учесть корреляционные эффекты, которые не учитываются в методах [2; 3]. Это продемонстрировано на примере димера в работах [7; 9].

Наиболее простым вариантом ПСФ является случай, когда оператор флуктуации числа электронов не зависит от номера узла $\Delta n_{f\bar{\sigma}} = \Delta n_{\bar{\sigma}}$. В этом случае, для того чтобы получить замкнутую систему дифференциальных уравнений, достаточно записать уравнения (4) и (22) для всех N узлов наносистемы:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dc_{1,\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon'_{1,\sigma} c_{1,\sigma}^+ + \sum_i t_{i1} c_{i,\sigma}^+ + U c_{1,\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}}; \\ \frac{d(c_{1,\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}})}{d\tau} = (\varepsilon'_{1,\sigma} + U \alpha_{1,\bar{\sigma}}) c_{1,\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}} + \\ \quad + \sum_i t_{i1} c_{i,\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}} + U \beta_{1,\bar{\sigma}}^2 c_{1,\sigma}^+; \\ \dots \\ \frac{dc_{N,\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon'_{N,\sigma} c_{N,\sigma}^+ + \sum_i t_{iN} c_{i,\sigma}^+ + U c_{N,\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}}; \\ \frac{d(c_{N,\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}})}{d\tau} = (\varepsilon'_{N,\sigma} + U \alpha_{N,\bar{\sigma}}) c_{N,\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}} + \\ \quad + \sum_i t_{iN} c_{i,\sigma}^+ \Delta n_{\bar{\sigma}} + U \beta_{N,\bar{\sigma}}^2 c_{N,\sigma}^+ \end{array} \right. \quad (23)$$

Таким образом, нахождение операторов рождения в ПСФ, которое предложено в работах [6–9], для конечных СКЭС в случае однородных флуктуаций, как и в работе [2], сводится к решению системы из $2N$ дифференциальных уравнений. Очевидно, что решение, полученное по методу [6–9] является более точным, чем по методу [2]. Эти решения совпадают

только в случае полузаполненной зоны. Отметим, что в работе [6] рассмотрены как конечные, так и бесконечные СКЭС.

Модель Хаббарда в приближении статических флуктуаций IV. Рассмотрим теперь метод, предложенный в работах [10; 11], который является усовершенствованием метода, предложенного в работах [6–9].

Продифференцируем по времени соотношение (3):

$$\frac{dn_{f\bar{\sigma}}}{dt} = \frac{d(\langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle + \Delta n_{f\bar{\sigma}})}{dt} = 0. \quad (24)$$

Таким образом, в ПСФ оператор $n_{f\bar{\sigma}}$ является интегралом движения. Как известно, для фермиевских операторов имеет место следующее соотношение:

$$(n_{i\bar{\sigma}})^2 = n_{i\bar{\sigma}}. \quad (25)$$

Умножим (2) на оператор $n_{f\bar{\sigma}}$ и учтем соотношение (25). В результате получим

$$\frac{d(c_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}})}{d\tau} = (\varepsilon_{f\sigma} + U_f) c_{f\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}} + \sum_i t_{if} c_{i\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}}. \quad (26)$$

Аналогичным образом можно получить уравнения движения и для операторов $c_{i\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}}$, $c_{i\sigma}^+ n_{f\bar{\sigma}} n_{g\bar{\sigma}}$, ... В результате можно получить замкнутую систему уравнений, решив которую можно найти операторы рождения. Отметим, что введение операторов более высокого порядка позволяет учесть корреляционные эффекты, которые не учитываются в методах [2; 3]. Это продемонстрировано на примере димера в работе [11].

Наиболее простым вариантом ПСФ является случай, когда оператор числа электронов не зависит от номера узла $n_{f\bar{\sigma}} = n_{\bar{\sigma}}$. В этом случае, для того чтобы получить замкнутую систему дифференциальных уравнений, достаточно записать уравнения (2) и (26) для всех N узлов наносистемы:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dc_{1,\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon_{1,\sigma} c_{1,\sigma}^+ + \sum_i t_{i1} c_{i,\sigma}^+ + U_1 c_{1,\sigma}^+ n_{\bar{\sigma}}; \\ \frac{d(c_{1,\sigma}^+ n_{\bar{\sigma}})}{d\tau} = (\varepsilon_{1,\sigma} + U_1) c_{1,\sigma}^+ n_{\bar{\sigma}} + \sum_i t_{i1} c_{i,\sigma}^+ n_{\bar{\sigma}}; \\ \dots \\ \frac{dc_{N,\sigma}^+}{d\tau} = \varepsilon_{N,\sigma} c_{N,\sigma}^+ + \sum_i t_{iN} c_{i,\sigma}^+ + U_N c_{N,\sigma}^+ n_{\bar{\sigma}}; \\ \frac{d(c_{N,\sigma}^+ n_{\bar{\sigma}})}{d\tau} = (\varepsilon_{N,\sigma} + U_N) c_{N,\sigma}^+ n_{\bar{\sigma}} + \sum_i t_{iN} c_{i,\sigma}^+ n_{\bar{\sigma}} \end{array} \right. \quad (27)$$

Можно показать, что решение системы из $2N$ дифференциальных уравнений первого порядка (ДУП) (27) сводится к решению системы из N ДУП, в то время как в методе, предложенном в [6–9], для нахождения операторов $c_{f\sigma}^+$ необходимо решить систему из $2N$ ДУП. Таким образом, метод, предложенный в [10; 11], является более простым, чем в [6–9].

Функции Грина в приближении однородных статических флуктуаций. Вычислив операторы рождения, можно найти антикоммутирующие функции

Грина для каждого узла наносистемы. В случае, когда оператор числа электронов не зависит от номера узла $n_{j\bar{\sigma}} = n_{\bar{\sigma}}$, антикоммутирующие функции Грина имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \langle\langle c_{j\sigma}^+ | c_{j\sigma} \rangle\rangle &= \frac{i}{2\pi} \cdot \sum_{m=1}^p \frac{F_{j,m}}{E - E_m + ih}, \\ E_k &= \varepsilon + e_k, \quad \varepsilon_{k+p/2} = E_k + U, \quad \varepsilon_{j,m} = q_m \cdot Q_{j,m}, \\ Q_{j,k+p/2} &= Q_{j,k}, \quad k = 1 \dots p/2, \end{aligned} \quad (28)$$

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

где $F_{j,m}$ — спектральная плотность энергетического состояния E_m , p — число энергетических состояний системы.

Зная функцию Грина, можно найти энергетический спектр E_m наносистемы, спектральную плотность энергетических состояний $F_{j,m}$, а также можно определить целый ряд физических величин, характеризующих физические и химические свойства наносистемы, например, электроотрицательность по Малликену χ_M , химический потенциал μ , энергию ионизации E_I , энергию сродства E_A , глобальную химическую жесткость η , глобальную химическую мягкость S и глобальную электрофильность ω :

$$\begin{aligned} \chi_M &= -\frac{1}{2}(E_{LUMO} + E_{HOMO}), \quad \mu = -\chi_M, \\ E_I &= -E_{HOMO} + U_1, \quad E_A = -E_{LUMO} - U_1, \\ \eta &= \frac{1}{2}(E_{LUMO} - E_{HOMO}) + U_1, \quad S = \frac{1}{\eta}, \quad \omega = \frac{\mu^2}{2\eta}, \end{aligned} \quad (29)$$

где E_{LUMO} — энергия самой нижней незанятой молекулярной орбитали, а E_{HOMO} — энергия самой верхней занятой молекулярной орбитали, U_1 — энергия, на которую смещаются E_{HOMO} и E_{LUMO} при удалении и добавлении одного электрона.

Для того чтобы найти характер распределения электронов в наносистеме, можно, зная функцию Грина, определить вероятность нахождения электрона с энергией E_i на узле j следующим образом:

$$w_{j,i} = \frac{Q_{j,i}}{g_i}, \quad (30)$$

где g_i — степень вырождения i -го энергетического уровня, которую можно найти из следующего соотношения:

$$g_i = \sum_{j=1}^N Q_{j,i}, \quad (31)$$

где N — число узлов наносистемы.

Приведем функции Грина для фуллеренов C_{20} и C_{24} в случае, когда оператор числа электронов не зависит от номера узла $n_{j\bar{\sigma}} = n_{\bar{\sigma}}$. В этом случае функции Грина можно представить в виде (28).

1. Для фуллерена C_{20} с группой симметрии I_h , состоящего из 12 пентагонов:

$$\begin{aligned} Q_{j,1} &= \frac{1}{20}, \quad Q_{j,2} = Q_{j,6} = \frac{3}{20}, \quad Q_{j,3} = \frac{1}{4}, \\ Q_{j,4} &= \frac{1}{5}, \quad b = -t, \\ e_1 &= -3b, \quad e_2 = -\sqrt{5}b, \quad e_3 = -b, \quad e_4 = 0, \\ e_5 &= 2b, \quad e_6 = \sqrt{5}b, \quad p = 2. \end{aligned} \quad (32)$$

2. Для фуллерена C_{24} с группой симметрии O_h , состоящего из шести квадратов и восьми гексагонов:

$$\begin{aligned} e_1 &= -b - 2b_1, \quad e_2 = -\sqrt{b^2 + b_1^2} - b_1, \\ e_3 &= -\sqrt{b^2 - 2bb_1 + 4b_1^2}, \quad e_4 = -b, \\ e_5 &= b_1 - \sqrt{b^2 + b_1^2}, \quad e_6 = \sqrt{b^2 + b_1^2} - b_1, \\ e_7 &= b, \quad e_8 = \sqrt{b^2 - 2bb_1 + 4b_1^2}, \\ e_9 &= b_1 + \sqrt{b^2 + b_1^2}, \quad e_{10} = b + 2b_1, \\ p &= 20, \quad b = -t_1 b_1, \quad -t_1, \\ Q_{j,1} &= Q_{j,10} = 1/24, \\ Q_{j,2} &= Q_{j,4} = Q_{j,5} = Q_{j,6} = Q_{j,7} = Q_{j,9} = 1/8, \\ Q_{j,3} &= Q_{j,8} = 1/12, \end{aligned} \quad (33)$$

где t — интеграл переноса между атомами углерода на границе гексагон-гексагон, а t_1 — интеграл переноса между атомами углерода на границе гексагон-квадрат. Из (33) следует, что $e_3 = e_4$, $e_7 = e_8$ при $b_1 = b/2$. Это приводит к вырождению соответствующих энергетических уровней.

Из (31) получим степени вырождения энергетических уровней для фуллеренов C_{20} и C_{24} :

$$\begin{aligned} g_1 = g_7 &= 1, \quad g_2 = g_6 = g_8 = g_{12} = 3, \\ g_3 = g_9 &= 5, \quad g_4 = g_5 = g_{10} = g_{11} = 4. \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} g_1 = g_{10} = g_{11} = g_{20} &= 1, \\ g_3 = g_8 = g_{13} = g_{18} &= 2, \\ g_2 = g_4 = g_5 = g_6 = g_7 = g_9 = g_{12} = g_{14} &= 3, \\ g_{15} = g_{16} = g_{17} = g_{19} &= 3. \end{aligned} \quad (35)$$

Из (30) для фуллеренов C_{20} и C_{24} получим:

$$w_{j,i} = \frac{1}{20}, \quad w_{j,i} = \frac{1}{24}. \quad (36)$$

Таким образом, у фуллеренов C_{20} и C_{24} вероятность нахождения электрона с энергией E_i на каждом узле одинакова. Это можно объяснить тем, что в данных системах все узлы эквивалентны.

Таким образом, имеется четыре разных подхода к нахождению операторов рождения $c_{i\sigma}^+(\tau)$ в рамках модели Хаббарда в ПСФ. Эти методы разработаны в работах [2], [3], [6–9] и [10; 11] соответственно. Из вышеизложенного следует:

1. Метод, разработанный в [2], является более грубым, чем методы, разработанные в [3; 6–11]. Он применим только в случае полузаполненной зоны.

2. Методы, разработанные в [6–11], являются более простыми, чем метод, разработанный в работе [3], так как при нахождении операторов рождения система дифференциальных уравнений в этих методах решается

ется непосредственно без перехода к вспомогательным операторам.

3. В методах, разработанных в [6–11], кроме уравнений движения для операторов рождения, составляются уравнения движения еще и для операторов более высокого порядка. Введение операторов более высокого порядка позволяет учесть корреляционные эффекты, которые не учитываются в методах [2; 3].

4. В случае когда оператор числа электронов не зависит от номера узла, нахождение операторов рождения для наносистемы из N узлов методом, разработанным в [10; 11], сводится к решению N дифференциальных уравнений первого порядка, в то время как в методе, предложенном в [6–11], для нахождения операторов рождения необходимо решить систему из $2N$ дифференциальных уравнений первого порядка. Таким образом, метод, предложенный в [10; 11], является более простым, чем метод, предложенный в [6–9].

5. В случае когда оператор числа электронов не зависит от номера узла, результаты, получаемые методами [3; 6–11], совпадают.



1. Изюмов Ю. А., Кацнельсон М. И., Скрябин Ю. Н. Магнетизм коллективизированных электронов. М.: Наука, 1994. С. 367.

2. Лоскутов В. В., Миронов Г. И., Нигматуллин Р. Р. Приближение статических флуктуаций для модели Хаббарда // ФНТ. 1996. Т. 22. С. 282–286.

3. Миронов Г. И. Исследование структурных элементов фуллеренов в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций // ФТТ. 2007. Т. 49. С. 527–534.

4. Мурзашев А. И. Изучение электронных свойств ионизированных углеродных нанотрубок в модели Хаббарда // Известия Вузов. Физика. 2010. Т. 10. С. 47–51.

5. Нигматуллин Р. Р., Тобоев В. А. Корреляционные функции для анизотропной модели Гейзенберга в нулевом магнитном поле // ТМФ. 1986. Т. 68. С. 88–97.

6. Силантьев А. В. Применение метода статических флуктуаций к модели Хаббарда // Известия Вузов. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2011. № 19. С. 151–163.

7. Силантьев А. В. Исследование наносистем в модели Хаббарда // Структура и динамика молекулярных систем. 2011. № 13А. С. 96–112.

8. Силантьев А. В. Исследование наноструктур в модели Хаббарда // Вестник Марийского государственного университета. 2012. № 8. С. 18–21.

9. Силантьев А. В. Димер в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций // Вестник Марийского государственного университета. 2012. № 8. С. 22–25.

10. Силантьев А. В. Модель Хаббарда в приближении статических флуктуаций // Известия вузов. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2011. № 20. С. 86–100.

11. Силантьев А. В. Исследование наносистем в рамках модели Хаббарда // Известия Вузов. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2012. № 24. С. 73–87.

12. R Haddon R. C., Brus L. E., Raghavachari K. Electronic structure and bonding in icosahedral C_{60} // Chem.Phys.Lett. 1986. V. 125. P. 459–464.

13. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands // Proceedings of the Royal Society A. 1963. V. 276. P. 238–257.

1. Izyumov Yu. A., Katselson M. I., Skryabin Yu. N. Magnetizm kolektivizirovannykh elektronov. M.: Nauka, 1994. S. 367.

2. Loskutov V. V., Mironov G. I., Nigmatullin R. R. Priblizhenie staticheskikh fluktuatsiy dlya modeli Habbarda // FNT. 1996. T. 22. S. 282–286.

3. Mironov G. I. Issledovanie strukturnykh elementov fullerenov v modeli Habbarda v priblizhenii staticheskikh fluktuatsiy // FTT. 2007. T. 49. S. 527–534.

4. Murzashev A. I. Izuchenie elektronnykh svoystv ionizirovannykh uglevodnykh nanotrubok v modeli Habbarda // Izvestiya Vuzov. Physics. 2010. T. 10. S. 47–51.

5. Nigmatullin R. R., Toboyev V. A. Korrelyatsionnye funktsii dlya anizotropnoy modeli Geinzberga v nulevom magnitnom pole // TMF. 1986. T. 68. S. 88–97.

6. Silantsev A.V. Primenenie metoda staticheskikh fluktuatsiy dlya modeli Habbarda // Izvestiya Vuzov. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki. 2011. № 19. S. 151–163.

7. Silantsev A.V. Issledovanie наносистем v modeli Habbarda // Struktura i dinamika molekulyarnykh sistem. 2011. № 13А. S. 96–112.

8. Silantsev A.V. Issledovanie nanostruktur v modeli Habbarda // Vestnik Mariyskogo gosudarstvennogo universiteta. 2012. № 8. S. 18–21.

9. Silantsev A.V. Dimer v modeli Habbarda v priblizhenii staticheskikh fluktuatsiy // Vestnik Mariyskogo gosudarstvennogo universiteta. 2012. № 8. S. 22–25.

10. Silantsev A.V. Model' Habbarda v priblizhenii staticheskikh fluktuatsiy // Izvestiya Vuzov. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki. 2011. № 20. S. 86–100.

11. Silantsev A.V. Issledovanie наносистем v ramkakh modeli Habbarda // Izvestiya Vuzov. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki. 2012. № 24. S. 73–87.

12. Haddon R. C., Brus L. E., Raghavachari K. Electronic structure and bonding in icosahedral C_{60} // Chem.Phys.Lett. 1986. V. 125. P. 459–464.

13. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands // Proceedings of the Royal Society A. 1963. V. 276. P. 238–257.