разл. варианты приближений типа ср. поля, приводят к ферромагн. области на плоскости (U, n) при достаточно больших U и электронных концентрациях, близких к $n=1$. Значения критич. концентрации, при к-рой ферромагнетизм исчезает (в пределе $U\to\infty$), сильно расходятся друг с другом, так что проблема ферромагн. состояния в Х. м. требует дополнит. исследования.

Вариационные методы. Для промежуточных значений $U\approx W$ эффективен вариац. метод с заданной пробной волновой ф-цией Ψ_0. Гутцвиллер [13] предложил выразить Ψ_0 в виде

$$\Psi_0=\prod_i\left[1-(1-g)\,D_i\right]|0\rangle=g^D|0\rangle, \qquad (13)$$

где $|0\rangle$ — «вакуумная» волновая ф-ция; $D_i=n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$; $D=\sum_i D_i$ — оператор числа двоек на решётке; $0<g<1$ — вариац. параметр, к-рый глобальным образом учитывает уменьшение вероятности состояний с большим числом двоек. Даже столь простой способ учёта корреляц. эффектов даёт хорошие результаты, особенно при расчёте энергии осн. состояния.

Выбор «вакуума» в (13) определяется типом осн. состояния. Для парамагн. фазы

$$|0\rangle=\prod_{k\sigma}a^+_{k\sigma}|vac\rangle, \qquad (14)$$

где $|vac\rangle$ — волновая ф-ция полного вакуума, а для осн. состояния со *спонтанным нарушением симметрии* $|0\rangle$ выбирается как волновая ф-ция в приближении Хартри — Фока. Напр., для антиферромагн. состояния с волновым вектором Q

$$|0\rangle=\prod_{k\sigma}\left[u_k a^+_{k\sigma}+\sigma v_k a^+_{k+Q\sigma}\right]|vac\rangle, \qquad (15)$$

где u_k и v_k — параметры *Боголюбова канонических преобразований.*

При вычислении энергии осн. состояния с помощью волновой ф-ции (13) Гутцвиллер использовал приближение, при к-ром подсчёт числа спиновых конфигураций производится классич. методом с помощью комбинаторных приёмов; оно оказалось точным в пределе $d\to\infty$. Расчёт E_0 с волновой ф-цией (13) в пределе $d\to\infty$ даёт хорошее согласие с результатами численных расчётов по квантовому методу Монте-Карло для $d=2$ и $d=3$, так что поправки порядка $1/d$ к пределу $d=\infty$ являются в этом случае очень малыми и энергия осн. состояния слабо чувствительна к размерности пространства. Сравнение энергий парамагн. (P), ферромагн. (F) и антиферромагн. (AF) фаз приводит к магн. фазовой диаграмме на плоскости (U, n) (рис. 6).

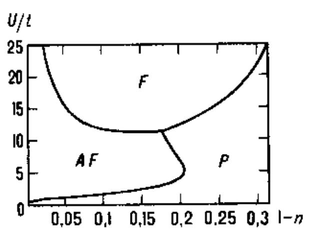

Рис. 6. Магнитная фазовая диаграмма для $d=\infty$ при $T=0$, полученная вариационным методом [14].

Эта диаграмма учитывает только однородные фазы; учёт неоднородных состояний изменяет границы фаз, но качеств. характер фазовой диаграммы остаётся прежним.

Операторы Хаббарда и метод вспомогательных бозонов. В условиях сильного кулоновского взаимодействия ($U\gg W$) в качестве нулевого приближения выбирается кулоновский член в гамильтониане (1). Тогда задача нулевого приближения сводится к одноузельной и может быть решена точно в базисе локализованных атомных ф-ций $|ip\rangle$: $|i0\rangle$, $|i\uparrow\rangle$, $|i\downarrow\rangle$, $|i2\rangle$, описывающих соответственно состояние без электрона, с одним электроном (со спином вверх или вниз) и с двумя электронами на узле. Переходы между этими состояниями описываются матрицами размерностью 4×4, соответствующими о п е р а т о р а м Х а б б а р д а

$$X_i^{pq}=|ip\rangle\langle iq|. \qquad (16)$$

Все элементы такой матрицы равны нулю, кроме одного, стоящего на пересечении p-строки и q-столбца и равного 1. Для них имеют место правило умножения

$$X_i^{pq}X_i^{rs}=\delta_{qr}X_i^{ps} \qquad (17)$$

и условие полноты

$$\sum_p X_i^{pp}=1. \qquad (18)$$

Из 16 X-операторов часть является фермиподобными, или f-операторами ($X^{0\sigma}$, $X^{\sigma2}$, $X^{\sigma0}$, $X^{2\sigma}$), часть — бозе-подобными, или b-операторами (X^{+-}, X^{-+}, X^{20}, X^{02}), поскольку они меняют число электронов на узле на нечётное и чётное число соответственно; остальные (X^{00}, $X^{\sigma\sigma}$, X^{22}) — диагональные. Алгебры f- и b-операторов различны: они удовлетворяют антикоммутаторным и коммутаторным перестановочным соотношениям соответственно

$$\left[X_i^{rs}, X_i^{pq}\right]_\pm=\delta_{ij}\left(\delta_{sp}X_i^{rq}\pm\delta_{rq}X_i^{ps}\right). \qquad (19)$$

Фермиевские операторы выражаются линейной комбинацией X-операторов f-типа

$$a^+_{i\sigma}=X_i^{\sigma0}+\sigma X_i^{2\bar\sigma}, \qquad (20)$$

так что гамильтониан (1) в терминах X-операторов имеет вид

$$H=\sum_i\{-\mu X_i^{++}-\mu X_i^{--}+(U-2\mu)X_i^{22}\}+ \\ +t\sum_{ij}\left\{(X_i^{+0}+X_i^{2-})(X_j^{0+}+X_j^{-2})+(X_i^{-0}-X_i^{2+})(X_j^{0-}-X_j^{2+})\right\} \qquad (21)$$

(в первое слагаемое включён член с *химическим потенциалом* μ).

Очевидно, что в этом представлении кулоновский член стал линейным, а кинетический член представляет собой билинейную форму по X-операторам. Это открывает возможность построения регулярной теории возмущений по параметру t/U в форме диаграммной техники с X-операторами. Такая техника для Х. м. была построена Зайцевым [15], а для $t-J$-модели — Изюмовым и Летфуловым [16]. В последнем случае было разработано обобщённое приближение хаотических фаз (GRPA), аналогичное RPA для обычных ферми-систем и основанное на суммировании всех петлевых диаграмм. В рамках GRPA вычислена динамич. магн. восприимчивость $\chi(q, \omega)$, к-рая при изменении электронной концентрации описывает кроссовер от чисто коллективизированного магнетизма к магнетизму с локализованными магн. моментами.

Поскольку алгебра X-операторов и соответствующая диаграммная техника сложны, существуют попытки выразить X-операторы через произведения обычных ферми- и бозе-операторов. Такие представления неоднозначны и составляют т. н. технику в с п о м о г а т е л ь н ы х б о з о н о в (и ф е р м и о н о в); напр., один из возможных вариантов:

$$X_i^{0\sigma}=b_i^+f_{i\sigma},\quad X_i^{+-}=f^+_{i\uparrow}f_{i\downarrow}, \qquad (22)$$

где b_i — бозе-, а $f_{i\sigma}$ — ферми-операторы. В данном случае индекс состояния (проекция спина σ) приписывается ферми-оператору, поэтому бозе-операторы являются вспомогательными; возможны и др. представления (напр., со вспомогат. фермионами). Выражения (22) удовлетворяют перестановочным соотношениям (18) для X-операторов только при дополнит. условии (к о н с т р е й н е):

$$b_i^+b_i+\sum_\sigma f^+_{i\sigma}f_{i\sigma}=1. \qquad (23)$$

В технике со вспомогат. бозонами (или фермионами) трудности со сложной алгеброй X-операторов переносятся на необходимость учёта констрейнов. Обычно это делается при вычислении статистич. суммы в виде континуального интеграла (см. *Функциональный интеграл*), при этом констрейны учитываются с помощью множителей Лагранжа λ_i, зависящих от номера узла. Континуальные интегралы вычисляются обычно по методу стационарной фазы, и при