第 44 卷 第 10 期
1995 年 10 月

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 44, No. 10
Oct., 1995

巡游电子反铁磁性的变分泛函积分方法

蒋开明　施发健
(北京大学物理系，北京 100871)

林宗涵
(中国科学院理论物理研究所，北京 100080；北京大学物理系，北京 100871)

(1994 年 7 月 18 日收到)

从双子晶格 Hubbard 模型出发，应用变分泛函积分方法，研究了巡游电子反铁磁性. 该方法的关键在于：对 Hubbard 哈密顿量的相互作用部分作 Stratonovich-Hubbard 变换时，采用连续分解方案，导致自旋涨落与电荷涨落的分离，从而能更好地描述两类涨落所具有的相反倾向的性质. 在连续分解中所引入的参数由变分原理确定，从而消除了泛函积分理论中的"不确定性"困难. 本文还对半满带情形作了数值研究，计算了基态性质，奈耳温度，磁化强变以及顺磁磁化率等. 与 Hasegawa 理论比较，在磁化率的温度依赖行为方面有一定改进.

PACC: 7510L; 7550E; 7520E

1 引　言

在过去 20 年中，由于 Cyrot[1], Schrieffer[2], Moriya[3], Hubbard[4], Hasegawa[5] 等的努力，巡游电子磁性理论获得了显著的进展，从而对金属磁性的认识大大前进了一步. 金属磁性理论的主要目标是建立一个使过渡金属及其合金的磁性的局域性与巡游性这两个方面都能得到统一解释的理论. 在探索过程中，逐步认识到自旋涨落起着关键性的作用. 在已发展的各种巡游电子磁性理论中，泛函积分理论占有突出的地位. 这一理论的要点是从 Hubbard 模型出发，应用 Stratonovich-Hubbard 变换，把哈密顿量中的双费密子相互作用项 (Hubbard 项)变换为有效单费密子项，其代价是引进了时空变化的无规涨落场.

Cyrot[1] 最先应用泛函积分方法，在静态近似下，采用合金类比和鞍点近似，研究了金属磁性，指出泛函积分理论具有介于局域与巡游行为之间的内插特征. 随后，Hubbard[4] 与 Hasegawa[5] 各自独立地发展了自洽单点自旋涨落理论. 在他们的理论中，自旋涨落场和电荷涨落场被类比成无序合金中的无规原子势，并用相干势近似 (CPA) 决定自旋场与电荷场的平均效果. Hubbard-Hasegawa 理论(以下简记为 HH 理论)对有限温度下巡游电子磁性的描述可以涵盖弱耦合和强耦合极限. 以后，HH 理论被广泛应用于各种不同的巡游电子磁性系统，包括铁磁与反铁磁金属[5]，代位合金[6]，表面[7]，液态金属[8]，以及非晶系统[9]等，定性或半定量地解释了许多基本性质，诸如居里温度，局域矩的大小，磁化率及比热随温度变化的行为，等等.

然而，HH 理论与其它泛函积分理论都有一个共同的困难：由于 Hubbard 项可以表达成自旋算符与粒子算符的不同形式的二次型，在 Stratonovich-Hubbard 变换后，若作近似计算(最主要的是静态近似)，则不同的分解形式结果不同．这就是熟知的泛函积分理论中的"不确定性"困难．

为了消除泛函积分方法中的上述"不确定性"困难，Macedo[10]，Hirooka 与 Shimizu[11] 将 Hubbard 项表为自旋算符与粒子数算符平方项的连续分解形式并用变分原理．Macedo 所研究的是 Anderson 杂质模型，Hirooka 与 Shimizu 在 Hertz 与 Klenin[12] 的动态自旋涨落理论的框架下研究了 Hubbard 模型，但仅仅局限于小的动态自旋涨落的情形[13]．

不久前，施发健与林宗涵[14]在 HH 理论框架下，提出了研究巡游电子铁磁性的变分泛函积分方法．他们指出，将 Hubbard 项表达为自旋与粒子数算符平方项的连续分解形式导致了自旋涨落与电荷涨落在一定程度上的分离，并强调自旋涨落与电荷涨落有相反的倾向性，因而当在位库仑排斥 (U) 越强，电荷涨落越受到抑制，自旋涨落反而越强烈．连续分解方案中所引入的参数 λ 决定了自旋涨落场和电荷涨落场的相对强度．参数 λ 的不同选择在静态近似下将导致不同的结果，这就是前述之"不确定性"(HH 理论相当于选 $\lambda=1$)．在变分泛函积分方法中，参数 λ 由费曼变分原理确定，由此，泛函积分理论中的"不确定性"困难被消除，但 HH 理论能适用于宽的参数范围的优点却被保留下来．研究表明，参数 λ 与在位库仑作用 U 及温度 T 等有关[14]．

本文将沿用变分泛函积分方法[14]研究巡游电子反铁磁性．给出双子晶格 Hubbard 模型的变分泛函积分理论，并介绍数值计算结果及讨论．

2 模型与理论表达

设晶格可分成互为近邻的两套子晶格 A 和 B，Hubbard 哈密顿量在此晶格上可表为

$$
\begin{aligned}
&H = H_0 + H_1 = H_0^{(1)} + H_0^{(2)} + H_1,\\
&H_0^{(1)} = \sum_\sigma \sum_j \sum_{j'} t_{jj'} c_{j\sigma}^+ c_{j'\sigma} + \sum_\sigma \sum_l \sum_{l'} t_{ll'} c_{l\sigma}^+ c_{l'\sigma},\\
&H_0^{(2)} = \sum_\sigma \sum_j \sum_l t_{jl} (c_{j\sigma}^+ c_{l\sigma} + c_{l\sigma}^+ c_{j\sigma}),\\
&H_1 = U_A \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} + U_B \sum_l n_{l\uparrow} n_{l\downarrow},
\end{aligned}
\tag{1}
$$

其中 $c_{j\sigma}(c_{l\sigma})$ 是 $A(B)$ 子晶格中第 $j(l)$ 格点上自旋为 σ 的 Warmier 态的湮没算符；$c_{j\sigma}^+(c_{l\sigma}^+)$ 则是相应的产生算符；$t_{jj'}, t_{ll'}$ 分别是 A, B 子晶格中转移积分；t_{jl} 则是 A 中格点 j 和 B 中格点 l 之间的转移积分；$n_{j\sigma} = c_{j\sigma}^+ c_{j\sigma}$ 是电子密度算符；U 是原子内电子与电子的库仑相互作用．配分函数可表为

$$
Z = \mathrm{e}^{-\beta F} = \mathrm{Tr}\left\{T_\tau \exp\left[-\int_0^\beta \mathrm{d}\tau [H_0(\tau) + H_1(\tau)]\right]\right\}, \tag{2}
$$

其中 $\beta = 1/T(k_B \equiv 1)$，$\tau$ 是虚时，Tr 是编虚时算符，$A(\tau)$ 是相互作用表象中的算符 A，

$$A(\tau) = e^{\tau H_0} A e^{-\tau H_0}. \tag{3}$$

按文献[14]类似做法，可以把相互作用项 H_1 写成下面的形式：

$$H_1 = \sum_i \left(-\frac{1}{4}\tilde{J}_A\sigma_{iz}^2 + \frac{1}{4}\tilde{U}_A n_i^2 + W_A n_i\right) + \sum_l \left(-\frac{1}{4}\tilde{J}_B\sigma_{lz}^2 + \frac{1}{4}\tilde{U}_B n_l^2 + W_B n_l\right), \tag{4}$$

其中

$$\tilde{J}_A = \lambda_A U_A,\ \tilde{U}_A = (2-\lambda_A)U_A,\ W_A = \frac{1}{2}(\lambda_A - 1)U_A,$$

$$\tilde{J}_B = \lambda_B U_B,\ \tilde{U}_B = (2-\lambda_B)U_B,\ W_B = \frac{1}{2}(\lambda_B - 1)U_B,$$

$$\sigma_{iz} = n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow},\ n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow},$$

$$\sigma_{lz} = n_{l\uparrow} - n_{l\downarrow},\ n_l = n_{l\uparrow} + n_{l\downarrow},$$

σ_{iz} 是 Pauli 自旋算符的 z 分量，λ_A，λ_B 是两个任意参数. 这里对 A，B 子晶格分别用了 λ_A，λ_B，对同种原子组成的反铁磁物质可取 $\lambda_A = \lambda_B = \lambda$。利用 Stratonovich-Hubbard 变换，配分函数(2)式可以变换成下面的泛函积分形式(参看文献[14])：

$$Z = e^{-\beta F} = \int \prod_i \delta\xi_i(\tau)\delta\eta_i(\tau) \prod_l \delta\xi_l(\tau)\delta\eta_l(\tau) \exp\left\{(-U/4)\int_0^\beta d\tau \left[\sum_i (\xi_i^2(\tau) + \eta_i^2(\tau)) + \sum_l (\xi_l^2(\tau) + \eta_l^2(\tau))\right]\right\} Z_1(\xi,\eta), \tag{5}$$

$$Z_1(\xi,\eta) = \mathrm{Tr}\left[T_\tau \exp\left\{-\int_0^\beta d\tau \tilde{H}_1(\tau)\right\}\right], \tag{6}$$

$\xi_i(\tau)(\xi_l(\tau))$，$\eta_i(\tau)(\eta_l(\tau))$ 分别称为自旋场和电荷场，分别与自旋算符 $\sigma_{iz}(\tau)(\sigma_{lz}(\tau))$ 和电荷密度算符 $n_i(\tau)(n_l(\tau))$ 相对应. 在(5)式中泛函积分 $\int \delta\xi_i$ 被定义为

$$\int \delta\xi_i = \lim_{N'\to\infty} \prod_{n=1}^{N'} \int (\beta U_A/4\pi N')^{1/2} d\xi_i(\tau_n), \tag{7}$$

$\int \delta\eta_i$，$\int \delta\xi_l$，$\int \delta\eta_l$ 按同样的方式被定义。$Z_1(\xi,\eta)$ 是一个新的无相互作用哈密顿量 $\tilde{H}_1(\tau)$ 的配分函数，而 $\tilde{H}_1(\tau)$ 依赖于无规涨落场.

$$\tilde{H}_1(\tau) = \sum_\sigma \sum_{\substack{i\\(i\neq i')}} \sum_{i'} t_{ii'} c_{i\sigma}^+(\tau) c_{i'\sigma}(\tau) + \sum_\sigma \sum_{\substack{l\\(l\neq l')}} \sum_{l'} t_{ll'} c_{l\sigma}^+(\tau) c_{l'\sigma}(\tau) + \sum_\sigma \sum_i \sum_l t_{il}(c_{i\sigma}^+(\tau)c_{l\sigma}(\tau) + c_{l\sigma}^+(\tau)c_{i\sigma}(\tau)) + \sum_\sigma \left(\sum_i (\varepsilon_0 + W + v_{i\sigma}^1(\tau))n_{i\sigma}(\tau) + \sum_l (\varepsilon_0 + W + v_{l\sigma}^1(\tau))n_{l\sigma}(\tau)\right), \tag{8}$$

$$v_{i\sigma}^1(\tau) = -(U_A^{1/2}/2)(\sigma\tilde{J}^{1/2}\xi_i(\tau) + i\tilde{U}_A^{1/2}\eta_i(\tau)),$$

$$v_{l\sigma}^1(\tau) = -(U_B^{1/2}/2)(\sigma\tilde{J}^{1/2}\xi_l(\tau) + i\tilde{U}_B^{1/2}\eta_l(\tau)), \tag{9}$$

$v_{i\sigma}^{\lambda}(\tau)$ 包含自旋场 $\xi_i(\tau)$ 和电荷场 $\eta_i(\tau)$，而 $v_{l\sigma}^{\lambda}(\tau)$ 包含自旋场 $\xi_l(\tau)$ 和电荷场 $\eta_l(\tau)$。注意到无相互作用哈密顿量(8)式与无序合金中 Anderson 哈密顿量有相同的形式，虚场 $v_{i\sigma}^{\lambda}(\tau)$ 可以类比成无规原子势能。

基于 $\tilde{H}_{\lambda}(\tau)$，可定义下面松原格林函数：

$$G_{jj'\sigma}^{\lambda}(\tau,\tau')=-\langle T_{\tau}c_{j\sigma}(\tau)c_{j'\sigma}^{+}(\tau')\rangle_{\lambda}=-\frac{\mathrm{Tr}\{T_{\tau}c_{j\sigma}(\tau)c_{j'\sigma}^{+}(\tau')\mathrm{e}^{-\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\tilde{H}_{\lambda}(\tau)}\}}{\mathrm{Tr}\{T_{\tau}\mathrm{e}^{-\int_0^{\beta}\tilde{H}_{\lambda}(\tau)\mathrm{d}\tau}\}}, \tag{10}$$

$$G_{ll'\sigma}^{\lambda}(\tau,\tau')=-\langle T_{\tau}c_{l\sigma}(\tau)c_{l'\sigma}^{+}(\tau')\rangle_{\lambda}=-\frac{\mathrm{Tr}\{T_{\tau}c_{l\sigma}(\tau)c_{l'\sigma}^{+}(\tau')\mathrm{e}^{-\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\tilde{H}_{\lambda}(\tau)}\}}{\mathrm{Tr}\{T_{\tau}\mathrm{e}^{-\int_0^{\beta}\tilde{H}_{\lambda}(\tau)\mathrm{d}\tau}\}}. \tag{11}$$

同样地，对 Hubbard 哈密顿量，可以定义下面松原格林函数：

$$G_{jj'\sigma}(\tau,\tau')=-\langle T_{\tau}c_{j\sigma}(\tau)c_{j'\sigma}^{+}(\tau')\rangle=-\frac{\mathrm{Tr}\{T_{\tau}c_{j\sigma}(\tau)c_{j'\sigma}^{+}(\tau')\mathrm{e}^{-\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau H(\tau)}\}}{\mathrm{Tr}\{T_{\tau}\mathrm{e}^{-\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau H(\tau)}\}}, \tag{12}$$

$$G_{ll'\sigma}(\tau,\tau')=-\langle T_{\tau}c_{l\sigma}(\tau)c_{l'\sigma}^{+}(\tau')\rangle=-\frac{\mathrm{Tr}\{T_{\tau}c_{l\sigma}(\tau)c_{l'\sigma}^{+}(\tau')\mathrm{e}^{-\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau H(\tau)}\}}{\mathrm{Tr}\{T_{\tau}\mathrm{e}^{-\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau H(\tau)}\}} \tag{13}$$

可以导出 $G_{jj'\sigma}(\tau,\tau')(G_{ll'\sigma}(\tau,\tau'))$ 等于 $G_{jj'\sigma}^{\lambda}(\tau,\tau')(G_{ll'\sigma}^{\lambda}(\tau,\tau'))$ 对无规涨落场的所有可能位形 $\{\xi_j(\tau),\eta_j(\tau)\}(\{\xi_l(\tau),\eta_l(\tau)\})$ 的平均值，即

$$G_{jj'\sigma}(\tau,\tau')=\overline{G_{jj'\sigma}^{\lambda}(\tau,\tau')}$$

$$=\frac{\int \mathrm{D}\xi\mathrm{D}\eta G_{jj'\sigma}^{\lambda}(\tau,\tau')\mathrm{e}^{-(\beta U/4)\{\sum_j(\xi_j^2+\eta_j^2)+\sum_l(\xi_l^2+\eta_l^2)\}}Z_{\lambda}(\xi,\eta)}{\int \mathrm{D}\xi\mathrm{D}\eta\mathrm{e}^{-(\beta U/4)\{\sum_j(\xi_j^2+\eta_j^2)+\sum_l(\xi_l^2+\eta_l^2)\}}Z_{\lambda}(\xi,\eta)}, \tag{14}$$

$$G_{ll'\sigma}(\tau,\tau')=\overline{G_{ll'\sigma}^{\lambda}(\tau,\tau')}\ .\ (\text{略}) \tag{15}$$

这里为了计算简单，令 $U_A=U_B=U$。Hubbard 模型的磁性质可以从上面定义的松原格林函数得到。然而，精确地计算泛函积分仍然非常困难，所以不得不作进一步的近似。

一个合适的近似是静态近似，它忽略了 τ 时刻和 $\tau+\Delta\tau$ 时刻无规涨落场 $\{\xi_j(\tau),\eta_j(\tau),\xi_l(\tau),\eta_l(\tau)\}$ 之间的关联，泛函积分变成了一个明显依赖于 λ 参数的多重积分。近似的配分函数表示为

$$Z(\lambda)=\mathrm{e}^{-\beta F(\lambda)}=\int \mathrm{D}\xi\mathrm{D}\eta\exp[-\beta\Psi_{\lambda}(\xi,\eta)], \tag{16}$$

$$\Psi_{\lambda}(\xi,\eta)=\frac{U}{4}\left[\sum_j(\xi_j^2+\eta_j^2)+\sum_l(\xi_l^2+\eta_l^2)\right]-\beta^{-1}\ln\ \mathrm{Tr}\left\{T_{\tau}\exp\left[-\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\tilde{H}_{\lambda}(\tau)\right]\right\}. \tag{17}$$

(17)式等号右端第一项是场平方形式的无规涨落场自身能量，第二项很复杂，相当于跳跃能量以及电子和无规涨落场之间的相互作用。其中

$$\tilde{H}_{\lambda}(\tau)=\sum_{\sigma}\sum_{\substack{j\\(j\neq j')}}\sum_{j'}t_{jj'}c_{j\sigma}^{+}(\tau)c_{j'\sigma}(\tau)+\sum_{\sigma}\sum_{\substack{l\\(l\neq l')}}\sum_{l'}t_{ll'}c_{l\sigma}^{+}(\tau)c_{l'\sigma}(\tau)$$

$$+\sum_{\sigma}\sum_{j}\sum_{l}t_{jl}(c_{j\sigma}^{+}(\tau)c_{l\sigma}(\tau)+c_{l\sigma}^{+}(\tau)c_{j\sigma}(\tau))$$

$$+\sum_{\sigma}\sum_{j}(\varepsilon_0+W+v_{j\sigma}^{\lambda})n_{j\sigma}(\tau)+\sum_{\sigma}\sum_{l}(\varepsilon_0+W+v_{l\sigma}^{\lambda})n_{l\sigma}(\tau), \tag{18}$$

$$v_{j\sigma}^{\lambda}=-(U^{1/2}/2)(\sigma\tilde{J}^{1/2}\xi_j+\mathrm{i}\tilde{U}^{1/2}\eta_j), \tag{19}$$

$$v_{l\sigma}^{\lambda}=-(U^{1/2}/2)(\sigma\tilde{J}^{1/2}\xi_l+\mathrm{i}\tilde{U}^{1/2}\eta_l), \tag{20}$$

$$\mathrm{D}\xi\equiv\prod_{j}\mathrm{d}\xi_j\prod_{l}\mathrm{d}\xi_l,\quad \mathrm{D}\eta\equiv\prod_{j}\mathrm{d}\eta_j\prod_{l}\mathrm{d}\eta_l,$$

$F(\lambda)$ 是依赖于参数 λ 的自由能，ϕ_λ 是具有特定位形的无规涨落场 $\{\xi_j,\eta_j;\xi_l,\eta_l\}$ 的单电子体系的能量，涨落场在$-\infty$到$+\infty$之间变化。

根据变分原理，Feynman (1951) 为特定路径积分的近似计算提出了一个方法，考虑一个尝试自由能 F_t，有不等式

$$F<F_t=F(\lambda)-\langle\phi-\phi_\lambda\rangle, \tag{21}$$

$$\mathrm{e}^{-\beta F(\lambda)}=\int\mathrm{D}\xi\mathrm{D}\eta\mathrm{e}^{-\beta\phi_\lambda(\xi,\eta)}, \tag{22}$$

$$\langle A_\lambda(\xi,\eta)\rangle=\int\mathrm{D}\xi\mathrm{D}\eta A_\lambda(\xi,\eta)\mathrm{e}^{-\beta\phi_\lambda(\xi,\eta)}\Big/\int\mathrm{D}\xi\mathrm{D}\eta\mathrm{e}^{-\beta\phi_\lambda(\xi,\eta)}, \tag{23}$$

$F(\lambda)$，ϕ_λ 是静态近似下的自由能和能量函数，F_t 的最小值被认为是由变分方程 $\partial F_t/\partial\lambda=0$ 求得的最佳近似。实际上，F_t 的计算仍然非常困难，简单取最低自由能 $F(\lambda)$ 作为最佳近似，于是变分方程变成

$$\partial F(\lambda)/\partial\lambda=0. \tag{24}$$

应用在 (10)，(11) 式中定义的松原格林函数，得到方程

$$\sum_{j}\sum_{l}\left\langle[2-\sigma\xi_j\lambda^{-1/2}+\mathrm{i}\eta_j(2-\lambda)^{-1/2}]\int_0^\beta\mathrm{d}\tau G_{j\sigma}^{\lambda}(\tau,\tau^+)\right\rangle=0, \tag{25}$$

$$\sum_{j}\sum_{l}\left\langle[2-\sigma\xi_l\lambda^{-1/2}+\mathrm{i}\eta_l(2-\lambda)^{-1/2}]\int_0^\beta\mathrm{d}\tau G_{l\sigma}^{\lambda}(\tau,\tau^+)\right\rangle=0, \tag{26}$$

其中

$$G_{j\sigma}^{\lambda}(\tau,\tau^+)\equiv G_{jj\sigma}^{\lambda}(\tau)=-\langle T_\tau c_{j\sigma}(\tau)c_{j\sigma}^{+}(\tau^+)\rangle_\lambda=\langle n_{j\sigma}(\tau)\rangle_\lambda, \tag{27}$$

$$G_{l\sigma}^{\lambda}(\tau,\tau^+)\equiv\langle n_{l\sigma}(\tau)\rangle_\lambda. \tag{28}$$

引进傅里叶变换

$$G_{j'j'\sigma}^{\lambda}(\tau,\tau')=\frac{1}{\beta}\sum_{n}\sum_{n'}\exp(-\mathrm{i}\omega_n\tau+\mathrm{i}\omega_{n'}\tau')G_{j,j'\sigma}^{\lambda}(\omega_n,\omega_{n'}), \tag{29}$$

$$\omega_n=(2n+1)\pi T,\quad \omega_{n'}=(2n'+1)\pi T,$$

于是积分 $\int\mathrm{d}\tau G_{j\sigma}^{\lambda}(\tau,\tau^+)$ 能在复频率空间展开，

$$\int\mathrm{d}\tau G_{j\sigma}^{\lambda}(\tau,\tau^+)=\sum_{n}G_{j\sigma}^{\lambda}(\omega_n)=-\frac{\beta}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon f(\varepsilon)\mathrm{Im}G_{j}^{\lambda}(\varepsilon+\mathrm{i}\delta),(\delta\to0^+). \tag{30}$$

$f(\varepsilon)$ 是费密分布函数，于是 (25)，(26) 式可写成

$$N-\sum_{j}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon f(\varepsilon)\sum\left\langle[\sigma\xi_j\lambda^{-1/2}-\mathrm{i}\eta_j(2-\lambda)^{-1/2}]\left(-\frac{1}{\pi}\right)\mathrm{Im}\,G_{j\sigma}^{\lambda}(\varepsilon+\mathrm{i}\delta)\right\rangle=0, \tag{31}$$

$$N-\sum_l\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\varepsilon f(\varepsilon)\sum_\sigma\left\langle[\sigma\xi_l\lambda^{-1/2}-\mathrm{i}\eta_l(2-\lambda)^{-1/2}]\left(-\frac{1}{\pi}\right)\mathrm{Im}\,G^\lambda_{l\sigma}(\varepsilon+\mathrm{i}\delta)\right\rangle=0, \tag{32}$$

N是晶体中电子总数，(31),(32)式是决定 λ 参数的变分方程，于是"不确定性"被完全去掉。

有无规涨落场的无相互作用电子系统在有限温度 T 时处于热平衡态，分布函数为

$$P_\lambda(\{\xi_i,\eta_i\};\{\xi_l,\eta_l\})=\mathrm{e}^{-\beta\psi_\lambda(\xi,\eta)}\Big/\int\mathrm{D}\xi\mathrm{D}\eta\mathrm{e}^{-\beta\psi_\lambda(\xi,\eta)}. \tag{33}$$

为简便起见、采取单体近似，忽略空间关联，分布函数假设为

$$P_\lambda(\{\xi_i,\eta_i\};\{\xi_l,\eta_l\})=\prod_i p_\lambda(\xi_i,\eta_i)\prod_l p_\lambda(\xi_l,\eta_l). \tag{34}$$

把(34)式中单体分布函数 $p_\lambda(\xi_i,\eta_i)$，$p_\lambda(\xi_l,\eta_l)$ 和(18)式中 Anderson 型 $\tilde{H}_\lambda(\tau)$ 结合起来可得到一个无序电子系统的图象：无相互作用电子系统不仅受到周期性晶格势场的作用而且也受到每个格点上独立涨落场 $\{\xi_i,\eta_i\}$，$\{\xi_l,\eta_l\}$ 的作用。涨落场 $\{\xi_i,\eta_i\}$，$\{\xi_l,\eta_l\}$ 分别由 $p_\lambda(\xi_i,\eta_i)$，$p_\lambda(\xi_l,\eta_l)$ 描述。电子在整个晶格格点上运动且被每个格点上的无规涨落场散射，涨落场分布函数必须自洽地决定。

应用相干势近似（CPA）来计算无规涨落场散射的平均效果[15-17]。相干势（自能）$\Sigma_{A\sigma}(\varepsilon)$，$\Sigma_{B\sigma}(\varepsilon)$ 可以由下面 CPA 方程组决定：

$$\int\mathrm{d}\xi_i\mathrm{d}\eta_i T^\lambda_{i\sigma}(\xi_i,\eta_i)p_\lambda(\xi_i,\eta_i)=0, \tag{35}$$

$$\int\mathrm{d}\xi_l\mathrm{d}\eta_l T^\lambda_{l\sigma}(\xi_l,\eta_l)p_\lambda(\xi_l,\eta_l)=0, \tag{36}$$

$$T^\lambda_{i\sigma}(\xi_i,\eta_i)=\epsilon^\lambda_{i\sigma}(\xi_i,\eta_i)/\{1-\epsilon^\lambda_{i\sigma}(\xi_i,\eta_i)F_{A\sigma}(\varepsilon)\}, \tag{37}$$

$$T^\lambda_{l\sigma}(\xi_l,\eta_l)=\epsilon^\lambda_{l\sigma}(\xi_l,\eta_l)/\{1-\epsilon^\lambda_{l\sigma}(\xi_l,\eta_l)F_{B\sigma}(\varepsilon)\}, \tag{38}$$

$$\epsilon^\lambda_{i\sigma}(\xi_i,\eta_i)=\epsilon_0+W+v^\lambda_{i\sigma}(\xi_i,\eta_i)-\Sigma_{A\sigma}(\varepsilon), \tag{39}$$

$$\epsilon^\lambda_{l\sigma}(\xi_l,\eta_l)=\epsilon_0+W+v^\lambda_{l\sigma}(\xi_l,\eta_l)-\Sigma_{B\sigma}(\varepsilon), \tag{40}$$

$T^\lambda_{i\sigma}(\xi_i,\eta_i)$，$T^\lambda_{l\sigma}(\xi_l,\eta_l)$ 是散射矩阵，$F_{A\sigma}(\varepsilon)$，$F_{B\sigma}(\varepsilon)$ 是格点对角的格林函数，可由下面方程得到：

$$F_{A\sigma}(\varepsilon)=\{[\varepsilon-\Sigma_{B\sigma}(\varepsilon)]/[\varepsilon-\Sigma_{A\sigma}(\varepsilon)]\}^{1/2}F^0(\Omega_\sigma), \tag{41}$$

$$F_{B\sigma}(\varepsilon)=\{[\varepsilon-\Sigma_{A\sigma}(\varepsilon)]/[\varepsilon-\Sigma_{B\sigma}(\varepsilon)]\}^{1/2}F^0(\Omega_\sigma), \tag{42}$$

$$\Omega_\sigma=\{[\varepsilon-\Sigma_{A\sigma}(\varepsilon)][\varepsilon-\Sigma_{B\sigma}(\varepsilon)]\}^{1/2}, \tag{43}$$

F^0 是无涨落场时格林函数，由下式表示：

$$F^0(\varepsilon)=\int\mathrm{d}\omega\,\frac{\rho^0(\omega)}{\varepsilon-\omega}, \tag{44}$$

此处 $\rho^0(\omega)$ 是无涨落场时电子系统的态密度。在相干势近似下，经过一些计算可得

$$p_\lambda(\xi_i,\eta_i)=\mathrm{e}^{-\beta\psi_\lambda(\xi_i,\eta_i)}\Big/\int\mathrm{d}\xi_i\mathrm{d}\eta_i\mathrm{e}^{-\beta\psi_\lambda(\xi_i,\eta_i)}, \tag{45}$$

$$p_\lambda(\xi_l,\eta_l)=\mathrm{e}^{-\beta\psi_\lambda(\xi_l,\eta_l)}\Big/\int\mathrm{d}\xi_l\mathrm{d}\eta_l\mathrm{e}^{-\beta\psi_\lambda(\xi_l,\eta_l)}, \tag{46}$$

$$\phi_\lambda(\xi_i,\eta_i)=\frac{U}{4}(\xi_i^2+\eta_i^2)+\int d\varepsilon f(\varepsilon)(1/\pi)\mathrm{Im}\sum_\sigma \ln\{1-e^{\lambda}_{i\sigma}(\xi_i,\eta_i)F_{A\sigma}(\varepsilon)\},\quad(47)$$

$$\phi_\lambda(\xi_I,\eta_I)=\frac{U}{4}(\xi_I^2+\eta_I^2)+\int d\varepsilon f(\varepsilon)(1/\pi)\mathrm{Im}\sum_\sigma \ln\{1-e^{\lambda}_{I\sigma}(\xi_I,\eta_I)F_{B\sigma}(\varepsilon)\}.\quad(48)$$

原则上，结合 (35)—(44) 式，可以自洽解得 $\Sigma_{A\sigma}(\varepsilon)$，$\Sigma_{B\sigma}(\varepsilon)$.

还须作二点简化，才能真正求解 CPA 方程组(35),(36). 1) 对电荷场的积分 $\int d\eta_i$，$\int d\eta_I$ 可由它的作为 ξ_i,ξ_I 的函数的鞍点值代替，它由方程 $\partial\phi_\lambda(\xi_i,\eta_i)/\partial(i\eta_i)=0,\partial\phi_\lambda(\xi_I,\eta_I)/\partial(i\eta_I)=0$ 给出. 由 (47),(48) 可得

$$-i(U/\tilde{U})^{1/2}\eta_i(\xi_i)=n_\lambda(\xi_i)=\int d\varepsilon f(\varepsilon)(-1/\pi)\mathrm{Im}\sum_\sigma\left\{\frac{F_{A\sigma}(\varepsilon)}{1-e^{\lambda}_{i\sigma}(\xi_i)\cdot F_{A\sigma}(\varepsilon)}\right\},\quad(49)$$

$$e^{\lambda}_{i\sigma}(\xi_i)=\varepsilon_0+W+(\tilde{U}/2)n_\lambda(\xi_i)-\frac{1}{2}(U\tilde{J})^{1/2}\sigma\xi_i-\Sigma_{A\sigma}(\varepsilon),\quad(50)$$

$$-i(U/\tilde{U})^{1/2}\eta_I(\xi_I)=n_\lambda(\xi_I)=\int d\varepsilon f(\varepsilon)(-1/\pi)\mathrm{Im}\sum_\sigma\left\{\frac{F_{B\sigma}(\varepsilon)}{1-e^{\lambda}_{I\sigma}(\xi_I)F_{B\sigma}(\varepsilon)}\right\},\quad(51)$$

$$e^{\lambda}_{I\sigma}(\xi_I)=\varepsilon_0+W+(\tilde{U}/2)n_\lambda(\xi_I)-\frac{1}{2}(U\tilde{J})^{1/2}\sigma\xi_I-\Sigma_{B\sigma}(\varepsilon).\quad(52)$$

同样地，磁矩 $m_\lambda(\xi_i)$ 依赖于自旋场，有

$$m_\lambda(\xi_i)=\int d\varepsilon f(\varepsilon)(-1/\pi)\sum_\sigma \mathrm{Im}\{\sigma F_{A\sigma}(\varepsilon)/[1-e^{\lambda}_{i\sigma}(\xi_i)F_{A\sigma}(\varepsilon)]\},\quad(53)$$

$$m_\lambda(\xi_I)=\int d\varepsilon f(\varepsilon)(-1/\pi)\sum_\sigma \mathrm{Im}\{\sigma F_{B\sigma}(\varepsilon)/[1-e^{\lambda}_{I\sigma}(\xi_I)F_{B\sigma}(\varepsilon)]\}.\quad(54)$$

于是方程 (35),(36) 中双重积分 $\iint d\xi_i d\eta_i$，$\iint d\xi_I d\eta_I$ 由单重积分 $\int d\xi_i$，$\int d\xi_I$ 代替.

2) 可以简化 CPA 方程组 (35) 和 (36)，通过忽略诸如 $\xi_i^2-\langle\xi_i^2\rangle$ 之类的项. 被简化的方程组表示为

$$\tilde{\Sigma}_{A\sigma}(\varepsilon)=-\frac{\sigma}{2}(U\tilde{J})^{1/2}\langle\xi_i\rangle+\left\{\frac{1}{4}U\tilde{J}\langle\xi_i^2\rangle-\tilde{\Sigma}_{A\sigma}(\varepsilon)\right\}F_{A\sigma}(\varepsilon),\quad(55)$$

$$\tilde{\Sigma}_{B\sigma}(\varepsilon)=-\frac{\sigma}{2}(U\tilde{J})^{1/2}\langle\xi_I\rangle+\left\{\frac{1}{4}U\tilde{J}\langle\xi_I^2\rangle-\tilde{\Sigma}_{B\sigma}(\varepsilon)\right\}F_{B\sigma}(\varepsilon),\quad(56)$$

$$\tilde{\Sigma}_{A\sigma}(\varepsilon)\equiv\Sigma_{A\sigma}(\varepsilon)-\varepsilon_0-W-\frac{1}{2}\tilde{U}n_0,\quad(57)$$

$$\tilde{\Sigma}_{B\sigma}(\varepsilon)\equiv\Sigma_{B\sigma}(\varepsilon)-\varepsilon_0-W-\frac{1}{2}\tilde{U}n_0,\quad(58)$$

n_0 为每个格点上的平均电子数. $\langle\xi_i\rangle,\langle\xi_I\rangle,\langle\xi_i^2\rangle,\langle\xi_I^2\rangle$ 分别由下面式子表示：

$$\langle\xi_i\rangle=\int d\xi_i\xi_i p_\lambda(\xi_i),\quad(59)$$

$$\langle\xi_I\rangle=\int d\xi_I\xi_I p_\lambda(\xi_I),\quad(60)$$

$$\langle\xi_i^2\rangle=\int d\xi_i\xi_i^2 p_\lambda(\xi_i),\quad(61)$$

$$\langle \xi_i^l \rangle = \int d\xi_i \xi_i^l p_\lambda(\xi_i), \tag{62}$$

$$p_\lambda(\xi_i) = e^{-\beta\psi_\lambda(\xi_i)} \Big/ \int e^{-\beta\psi_\lambda(\xi_i)} d\xi_i, \tag{63}$$

$$p_\lambda(\xi_l) = e^{-\beta\psi_\lambda(\xi_l)} \Big/ \int e^{-\beta\psi_\lambda(\xi_l)} d\xi_l, \tag{64}$$

此处 $\psi_\lambda(\xi_i) \equiv \psi_\lambda(\xi_i, \eta_i(\xi_i))$, $\psi_\lambda(\xi_l) \equiv \psi_\lambda(\xi_l, \eta_l(\xi_l))$. 平均磁矩 $\langle m \rangle$, 局域矩 $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$ 以及平均电子数 $\langle n \rangle$ 可分别表示为

$$\langle m_\lambda(\xi_i) \rangle = \int d\xi_i m_\lambda(\xi_i) p_\lambda(\xi_i) = \lambda^{-1/2} \langle \xi_i \rangle, \tag{65}$$

$$\langle m_\lambda(\xi_l) \rangle = \int d\xi_l m_\lambda(\xi_l) p_\lambda(\xi_l) = \lambda^{-1/2} \langle \xi_l \rangle, \tag{66}$$

$$\langle m_\lambda^2(\xi_i) \rangle = \int d\xi_i m_\lambda^2(\xi_i) p_\lambda(\xi_i) = \lambda^{-1}(\langle \xi_i^2 \rangle - 2T/U), \tag{67}$$

$$\langle m_\lambda^2(\xi_l) \rangle = \int d\xi_l m_\lambda^2(\xi_l) p_\lambda(\xi_l) = \lambda^{-1}(\langle \xi_l^2 \rangle - 2T/U), \tag{68}$$

$$\langle n_\lambda(\xi_i) \rangle = \int d\xi_i n_\lambda(\xi_i) p_\lambda(\xi_i) = n_0, \tag{69}$$

$$\langle n_\lambda(\xi_l) \rangle = \int d\xi_l n_\lambda(\xi_l) p_\lambda(\xi_l) = n_0 \tag{70}$$

方程 (69),(70) 经单点近似和 CPA 之后变成

$$2n_0 = \lambda^{-1/2} \langle \xi_i n_\lambda(\xi_i) \rangle + \langle n_\lambda^2(\xi_i) \rangle, \tag{71}$$

$$2n_0 = \lambda^{-1/2} \langle \xi_l n_\lambda(\xi_l) \rangle + \langle n_\lambda^2(\xi_l) \rangle. \tag{72}$$

在铁磁态,有完全对称的关系,

$$\langle \xi_i \rangle = \langle \xi_l \rangle = \langle \xi \rangle, \tag{73}$$

$$\langle \xi_i^2 \rangle = \langle \xi_l^2 \rangle = \langle \xi^2 \rangle, \tag{74}$$

$$\Sigma_{A\sigma}(\varepsilon) = \Sigma_{B\sigma}(\varepsilon) \equiv \Sigma_\sigma(\varepsilon), \tag{75}$$

$$F_{A\sigma}(\varepsilon) = F_{B\sigma}(\varepsilon) \equiv F_\sigma(\varepsilon) = F^0(\varepsilon - \Sigma_\sigma(\varepsilon)), \tag{76}$$

$$\langle n_\lambda(\xi_i) \rangle = \langle n_\lambda(\xi_l) \rangle = n_0. \tag{77}$$

这样就完全回到施发健和林宗涵的工作[14].

在反铁磁态,有

$$\langle \xi_i \rangle = -\langle \xi_l \rangle \equiv \langle \xi \rangle, \tag{78}$$

$$\langle \xi_i^2 \rangle = \langle \xi_l^2 \rangle \equiv \langle \xi^2 \rangle, \tag{79}$$

$$\Sigma_{A\sigma}(\varepsilon) = \Sigma_{B-\sigma}(\varepsilon) \equiv \Sigma_\sigma(\varepsilon), \tag{80}$$

$$F_{A\sigma}(\varepsilon) = F_{B-\sigma}(\varepsilon) \equiv F_\sigma(\varepsilon), \tag{81}$$

$$\langle n_\lambda(\xi_i) \rangle = \langle n_\lambda(\xi_l) \rangle = n_0. \tag{82}$$

本文中只考虑反铁磁情况.

当 $T > T_N$ 时,反铁磁物质的反铁磁序消失,成为顺磁态,可以在顺磁态时加一个小的均匀外磁场 h_u (或一个周期性的交错场 h_s) 到电子系统上. 顺磁态时有

$$\Sigma_+(\varepsilon) = \Sigma_-(\varepsilon) \equiv \Sigma_p(\varepsilon),$$

只考虑物理量的变化到 h_u (h_s) 的一次数量级,磁化率的推导结果如下:

$$\Sigma_\sigma(\varepsilon) = \Sigma(\varepsilon) - \sigma\delta\Sigma_v(\varepsilon) \quad (v = u \ \ or \ \ s), \tag{83}$$

$$\delta\Sigma_v(\varepsilon) = \left\{\frac{1}{2}\tilde{J}\langle m_i(\xi_j)\rangle_v + \left[1 + 2\left(\Sigma_p(\varepsilon) - \varepsilon_0 - W - \frac{1}{2}\tilde{U}n_0\right)F_p(\varepsilon)\right]h_v\right\} Y_v(\varepsilon), \tag{84}$$

$$Y_v^{-1}(\varepsilon) = 1 + 2\left(\Sigma_p(\varepsilon) - \varepsilon_0 - W - \frac{1}{2}\tilde{U}n_0\right)F_p(\varepsilon) + \left[\left(\Sigma_p(\varepsilon) - \varepsilon_0 - W - \frac{1}{2}\tilde{U}n_0\right)^2 - \frac{1}{4}U\tilde{J}\langle\xi^2\rangle\right]H_v(\varepsilon), \tag{85}$$

$$H_0(\varepsilon) = \int d\omega \frac{\rho^0(\omega)}{(\varepsilon - \Sigma_p(\varepsilon) - \omega)^2}, \tag{86}$$

$$H_v(\varepsilon) = \int d\omega \frac{\rho^0(\omega)}{(\varepsilon - \Sigma_p(\varepsilon))(\varepsilon - \Sigma_p(\varepsilon) - \omega)} = \frac{F_p(\varepsilon)}{\varepsilon - \Sigma_p(\varepsilon)}, \tag{87}$$

$$F_p(\varepsilon) = \int d\omega \frac{\rho^0(\omega)}{\varepsilon - \Sigma_p(\varepsilon) - \omega}, \tag{88}$$

$$\chi_v = \frac{\langle m\rangle_v}{h_v} = \frac{\Lambda_v(T)}{T - \Xi_v(T)}, \tag{89}$$

$$\Lambda_v(T) = \left\langle U\xi_i^2 \int d\varepsilon f(\varepsilon)(-1/\pi)\,\mathrm{Im}\left\{\left[\left(1 + 2\left(\Sigma_p(\varepsilon) - \varepsilon_0 - W - \frac{1}{2}\tilde{U}n_0\right)F_p(\varepsilon)\right)Y_v(\varepsilon) \times (F_p^2(\varepsilon) - H_v(\varepsilon)) - F_p^2(\varepsilon)\right] \Big/ D(\xi_j)\right\}\right\rangle, \tag{90}$$

$$\Xi_v(T) = \left\langle \frac{1}{2}U\tilde{J}\xi_i^2 \int d\varepsilon f(\varepsilon)(-1/\pi)\mathrm{Im}[Y_v(\varepsilon)(F_p^2(\varepsilon) - H_v(\varepsilon))/D(\xi_j)]\right\rangle, \tag{91}$$

$$D(\xi_j) = \left[1 - \left(\varepsilon_0 + W + \frac{1}{2}\tilde{U}n_i(\xi_j) - \Sigma_p(\varepsilon)\right)F_p(\varepsilon)\right]^2 - \frac{1}{4}U\tilde{J}\xi_i^2 F_p^2(\varepsilon), \tag{92}$$

令 $\chi_s^{-1} = 0$，可求出 Néel 温度 T_N。

3　计算结果与讨论

在本文所讨论的简化模型下，系统的性质由三个参量 U，ρ^0，n_0 决定，U 是库仑关联强度，n_0 是每个原子的平均电子数，本文中，取半满带情形 $n_0 = 1$，$\rho^0(\varepsilon)$ 是态密度，取钟型带：

$$\rho^0(\varepsilon) = (2/\pi)\sqrt{1 - \varepsilon^2} \qquad |\varepsilon| < 1;$$
$$= 0 \qquad |\varepsilon| > 1.$$

自洽地求解方程组要用迭代法，工作量较大。下面给出 $U = 1.0$ 时的计算结果，见图 1—6。

应该指出，Hasegawa 理论相当于对 λ 作了一种固定选择，并取单场近似，完全忽略了电荷涨落场，从 Hubbard 模型考虑是不自洽的，但结果在定性上还是正确的。本文引进了一个连续参数 λ，λ 由 Feynman 变分原理确定，计算表明 λ 随温度有变化。我们保留了电荷涨落场，用鞍点近似处理它。

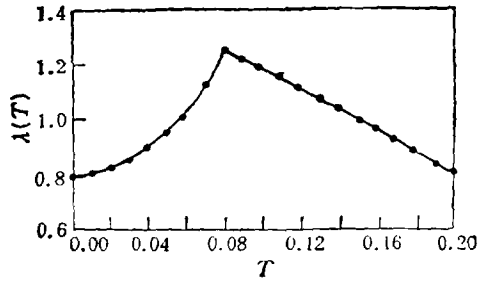


图1 参数λ随温度T变化的曲线 在 T_N 处有一极大峰，λ在1左右变化，温度 T、库仑排斥势 U 以半带宽为单位

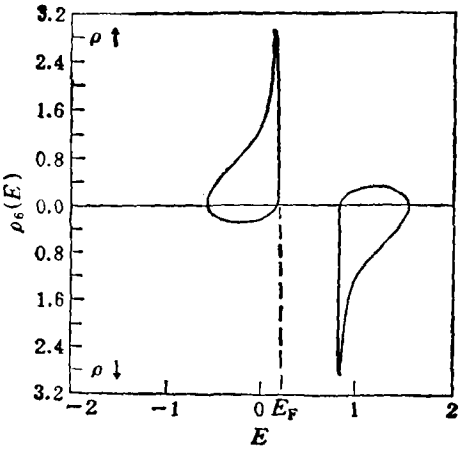


图2 $T=0$K 时上、下自旋带态密度 $\rho_\uparrow(\varepsilon)$，$\rho_\downarrow(\varepsilon)$ 每个自旋带都分裂成两个带，这对应于反铁磁绝缘体；在 $T>T_N$ 时，还得到了顺磁绝缘体(图略)

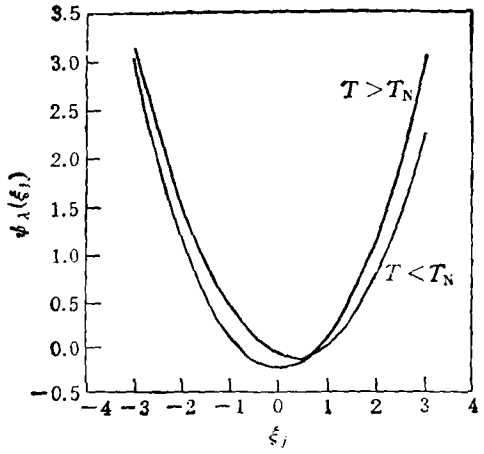


图3 能量 $\psi_\lambda(\xi_i)$ 随自旋涨落场 ξ_i 变化的曲线 $T>T_N$ 时，曲线是对称的；而 $T<T_N$ 时，曲线不对称，体现了 T_N 以下有自发磁化的特点. 曲线的形状与参数 U，ε_a 等选取有关

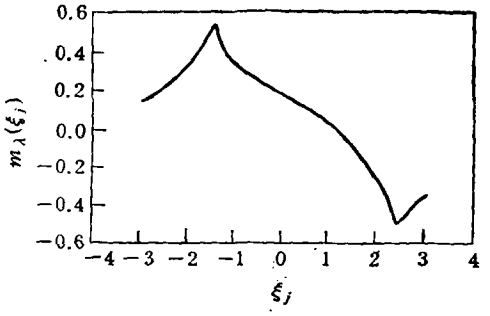


图4 $m_\lambda(\xi_i)$ 随自旋涨落场 ξ_i 变化的曲线 ($T<T_N$) 曲线相对于原点不对称

在第二部分，给出了一般泛函积分理论，在此理论能正确应用的领域中表明了自旋涨落与电荷涨落之间的相反性质. 应用了 Feynman 变分原理确定自旋涨落与电荷涨落，从而所谓"不确定性"得以消除. 下面对巡游电子系统中自旋涨落与电荷涨落之间的相反性质给出物理解释.

事实上，考虑量子自旋、电荷涨落，假定在一个很短的时间间隔内(大约 10^{-15}s)，能够"观察"单个电子的跳跃过程. 在一个晶格格点 i 上电子的占据态粒子数有三种情况：0，1，2；对应于自旋情形：0，$\pm\frac{1}{2}$，0 (以 $\hbar$ 为单位). 当一个格点上电子占据数从2变到0时，电荷涨落是最大的，为2，而自旋涨落是最小的，为0；另一方面，当格点 i 上的电子从

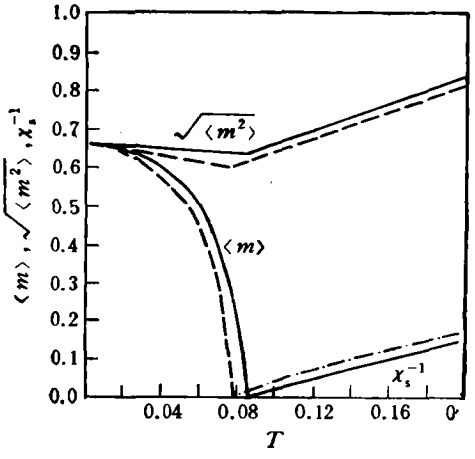


图 5　平均磁矩 $\langle m\rangle$、局域矩 $\sqrt{\langle m^2\rangle}$ 以及磁化率 χ_s^{-1} 随 T 变化的关系曲线　实线是计算结果；虚线是 Hasegawa 的结果．可以看到奈耳温度 T_N 有所提高，磁化率曲线更趋直线，$\sqrt{\langle m^2\rangle}$ 随 T 变化正是巡游电子模型的特征

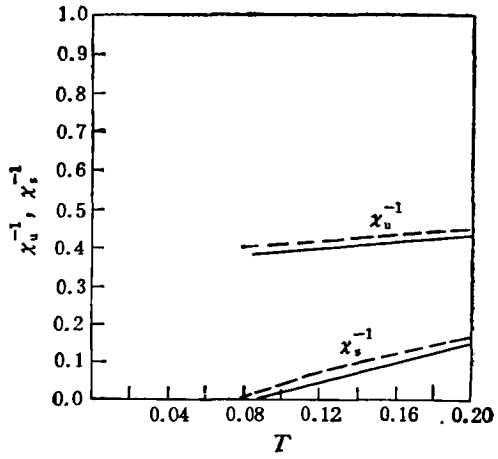


图 6　磁化率 χ_u^{-1}，χ_s^{-1} 随温度 T 变化的曲线

$+1/2$ 自旋态变到 $-1/2$ 自旋态时，电荷涨落是 0，但自旋涨落为 1．可见，在这种极快的实验里，量子自旋、电荷涨落有相反性质．而本文中自旋、电荷涨落是对量子涨落长时间的(大约 10^{-13}s) 平均效果．注意到上述关于自旋涨落与电荷涨落之间的相反性质的分析是在不考虑库仑相互作用 U 时的结果．然而，对强关联的电子系统，库仑排斥作用对这两种涨落起重要影响．库仑相互作用倾向于抑制大的电荷涨落，从而有利于加强自旋涨落．换言之，库仑排斥作用越大，越有利于导致磁有序．本文计算再次表明，连续分解的变分泛函积分方法提供了一种描述具有相反性质的自旋、电荷涨落的方法，自旋涨落与电荷涨落的相对强度可以自洽地决定．

我们得到了一些有意义的结果：1) λ 在 1 附近变化，表明电荷涨落起着不可忽略的作用；在临界点 T_N 处，λ 最大，出现一个峰，此时自旋涨落最强 ($\tilde{J}=\lambda U$)；2) 上、下自旋带态密度没有相对移动，与 Stoner 理论不同，对半满带，产生一个能隙，对应于反铁磁绝缘体；3)能量 $\phi_i(\xi_j)$ 出现单峰，由此可得涨落场分布函数；4)我们的计算与 Hasegawa 理论比较，在 T_N 以上的 χ_s^{-1} 更接近居里-外斯定律．

应该指出，本文与现有的所有泛函积分理论一样都是在静态近似下完成的．静态近似本质上是一种高温近似[18]．建立超越静态近似的泛函积分理论无疑是很有意义的．

[1] M. Cyrot, *J. Phys.* (*France*). **33**(1972) 25; *Phys. Lett.*, **37**(1971), 189.
[2] S. Q. Wang, W. E. Evanson and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev. Lett.*, **23**(1969), 92. *J. Appl. Phys.*, **41**(1970), 1199.
[3] T. Moriya and Y. Takahashi, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **44**(1978), 850.
[4] J. Hubbard, *Proc. R. Soc.* (*London*), **A276**(1963), 238; *Phys. Rev.*, **B19**(1979), 2626; **20**(1979), 4584; **23**(1981), 597.
[5] H. Hasegawa, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **46**(1979), 1504; **49**(1980), 17; **49**(1980), 963.
[6] Y. Kakehashi, *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, **101**(1990), 105; H. Hasegawa, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **50**(1981), 802.

[7] H. Hasegawa, *J. Phys.* F, **16**(1986), 347; **17**(1987), 165.
[8] Y. Kakehashi, *Phys. Rev.*, **B40**(1989), 11063.
[9] Y. Kakehashi, *Phys. Rev.*, **B41**(1990), 9207; **43**(1991), 10820.
[10] C. A. Macedo, *Phys. Rev.*, **B25**(1982), 5965.
[11] S. Hirooka and M. Shimizu, *J. Phys.* F, **18**(1988), 2223; **18**(1988), 2237.
[12] J. A. Hertz and M. A. Klenin, *Phys. Rev.*, **B10**(1974), 1084; *Physica B and C*, **91B**(1977), 49.
[13] Y. Kakehashi, *Phys. Rev.*, **B45**(1992), 7196.
[14] Fa-jian Shi and Tsung-han Lin, *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 12795.
[15] P. Soven, *Phys. Rev.*, **156**(1967), 809; B. Velicky, S. Kirkpatrick and H. Ehrenreich, *Phys. Rev.*, **175**(1968), 747.
[16] F. Ducastelle, *J. Phys. C*, **8**(1975), 3297.
[17] A. Mookerjee, *J. Phys. C*, **6**(1973), 1340; (1973), L205.
[18] P. Fulde, in Metallic Magnetism, edited by H. Capellmann (Springer-Verlag, Berlin, 1987).

A VARIATIONAL FUNCTIONAL-INTEGRAL APPROACH TO THE ITINERANT-ELECTRON ANTIFERROMAGNETISM

JIANG KAI-MING AND SHI FA-JIAN
(Department of Physics, Peking University, Beijing 100871)
LIN TSUNG-HAN
(Department of Physics, Peking University, Beijing 100871)
(Institute of Theoretical Physics, Academia Sinica, Beijing 100080)
(Received 18 July 1994)

ABSTRACT

Starting from a two-sublattice Hubbard model, a variational functional-integral method is used to study the itinerant-electron antiferromagnetism. The key point of this theory is to adopt a continuous decomposition of the interacting part of the Hubbard Hamiltonian in the Stratonovich-Hubbard transformation, leading to the separation of the charge fluctuations from the spin fluctuations. This separation makes a better description for the contrary nature between the two types of the fluctuations. By using the variational principle to determine the parameter introduced in the continuos decomposition scheme, the difficulty of the "ambiguity" in the conventional functional-integral method has been removed. The numerical studies are presented only for the halffilled band case. The grourd state properties, the Neél temperature, the magnetization, and the paramagnetic susceptibility, *etc.*, at finite temperature are cal culated. In comparison with Hasegawa's theory, a certain improvement for the critical temperature and the temperature-dependence of the susceptibility is obtained.

PACC: 7510L; 7550E; 7520E