

**ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ МОЛДОВЫ  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ**

На правах рукописи  
У.Д.К.: 517.958:538.9(043.3)

**ЧЕБОТАРЬ ИРИНА**

**ДИАГРАММНЫЙ АНАЛИЗ СИСТЕМ СИЛЬНО  
КОРРЕЛИРОВАННЫХ  
ЭЛЕКТРОНОВ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ МЕЖДУ СОБОЙ И  
С ОПТИЧЕСКИМИ ФОНОНАМИ**

**131.01 - МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА**

Автореферат диссертации  
на соискание ученой степени  
доктора физических наук

КИШИНЕВ, 2024

Диссертация была выполнена в лаборатории Квантовой Оптики, Института Прикладной Физики, Государственного Университета Молдовы

**Научный руководитель:**

Москаленко Всеволод, д-р хаб. физ.-мат. наук, проф., акад. АНМ

**Научный консультант:**

Дохотару Леонид д-р физ.-мат. наук, доц., Технический Университет Молдовы

**Официальные оппоненты:**

Клюканов Александр, д-р хаб. физ.-мат. наук, проф., Молдавский Государственный Университет  
Трончу Василий, д-р хаб. физ.-мат. наук, проф., Технический Университет Молдовы

**Состав Специализированного Ученого Совета:**

Клокишнер София, д-р хаб. физ.-мат. наук, проф., Институт Прикладной Физики, Государственный Университет Молдовы, *председатель Специализированного Ученого Совета*  
Островский Сергей, д-р хаб. физ.-мат. наук, проф., Институт Прикладной Физики, Государственный Университет Молдовы, *секретарь Специализированного Ученого Совета*  
Ника Денис, д-р хаб. физ.-мат. наук, доц., Молдавский Государственный Университет  
Русу Спиридон, д-р физ.-мат. наук, доц., Технический Университет Молдовы

Защита состоится 20 декабря 2024 г. в 12:30 часов при Институте Прикладной Физики Молдавского Государственного Университета на заседании Специализированного Ученого Совета D 131.01-24-27.0 по адресу: MD 2028, г. Кишинев, ул. Академическая, 5, каб. 230.

С диссертацией и авторефератом можно ознакомиться в библиотеке Государственного Университета Молдовы (ул. А. Матеевич, 60, MD-2009, Кишинев, Республика Молдова) и на сайте ANACEC ([www.anacec.md](http://www.anacec.md)). Автореферат разослан 20 ноября 2024 г.

Секретарь Ученого Совета,  
Островский Сергей, д-р. хаб., доц.



Научный консультант,  
Дохотару Леонид, д-р, доц.



Автор  
Чеботарь Ирина



## СОДЕРЖАНИЕ

КОНЦЕПТУАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ ИССЛЕДОВАНИЯ .....	4
СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ.....	8
ОБЩИЕ ВЫВОДЫ И РЕКОМЕНДАЦИИ.....	26
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ .....	29
АННОТАЦИЯ .....	32
ADNOTARE.....	33
ABSTRACT.....	34

## КОНЦЕПТУАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

**Актуальность и важность исследования.** Теории твердого тела, такие как зонная теория проводимости Уилсона-Блоха или теория сверхпроводимости Бардина-Купера-Шиффера (БКШ) адекватно описывают свойства лишь ограниченного числа материалов. Существует большая категория материалов, представленная переходными (редкоземельными) металлами и их химическими соединениями, а так же фуллеридами ( $A_nC_{60}$ , где  $A$  – щелочной металл), которая проявляет нехарактерные с точки зрения этих концепций физические свойства или в них реализуются необычайные явления. Речь идет о переходе металл-диэлектрик Мотта-Хаббарда, гигантском магнетосопротивлении с отрицательным знаком, высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП), сосуществовании магнетизма и сверхпроводимости и других. Эти явления вызывают множество вопросов фундаментального характера. Например, до конца не понятен механизм образования сверхпроводящих электронных пар в высокотемпературных сверхпроводниках.

Многие исследователи полагают, что эти явления возникают за счет эффекта сильных корреляций. Этот эффект ассоциирован с сильным кулоновским взаимодействием электронов между собой, а также с сильной электрон-фононной связью в кристаллах (в том числе молекулярных) и их взаимовлиянием [1]. Системы, в которых проявляется эффект сильной корреляции электронов друг с другом, электронов с фононами или оба эффекта вместе, называются сильно коррелированными.

Современная теория сильно коррелированных систем (СКС) основывается на гамильтоновом формализме, сформулированном на языке вторичного квантования. Модельные гамильтонианы, описывающие поведение электронов в таких системах, включают в себя параметр кулоновского взаимодействия электронов. К упомянутым относятся следующие модели: полярная модель Шубина-Вонсовского [2-4], модель Боголюбова-Тябликова [5-6], модель Хаббарда [7-12] и примесная модель Андерсона [13] (а также ее обобщение, такая как периодическая модель Андерсона) и другие.

Проблема разработки методов анализа моделей СКС остается актуальной, поскольку методы, разработанные для исследования систем со слабым взаимодействием, для этих систем не применимы. Для анализа этих систем были предложены различные концепции, приближения и методы, как аналитические, так и численные, пертурбативные и нептурбативные, некоторые из которых представлены в [14]. У каждого из этих методов есть свои преимущества и недостатки. Один из методов анализа моделей сильно

коррелированных систем, развиваемый и используемый в диссертации, был предложен В. А. Москаленко в 1990 г. [15, 16] и представляет собой диаграммный метод, основанный на теореме Вика, обобщенной на системы с сильными корреляциями [15, 16]. Преимущество этого метода по сравнению с другими методами состоит в том, что он позволяет вычислять температурные функции Грина, а метод функций Грина является одним из самых эффективных в квантовой статистике. Техника также подразумевает получение приближений, в рамках которых вычисляются функции Грина. Следует отметить также, что преимущество развиваемой в работе диаграммной техники Москаленко по сравнению с диаграммными техниками, предложенными другими авторами, состоит в том, что она основывается на простой алгебре Ферми и позволяет получать уравнение типа Дайсона.

В работе [17] было доказано свойство стационарности термодинамического потенциала (ТДП) периодической модели Андерсона. Изначально эта теорема была доказана для слабовзаимодействующих систем с помощью диаграммной техники для систем со слабым взаимодействием [18]. В настоящей диссертации доказывается свойство стационарности термодинамического потенциала модели Хаббарда, как в нормальной, так и в сверхпроводящей фазе. Это необходимо, в том числе для последующего исследования термодинамических свойств систем с сильной связью, которые можно описать моделью Хаббарда.

Во многих материалах с сильными корреляциями орбитальное вырождение полностью снято. Однако, в некоторых оксидах 3d- и 4d- переходных металлов (рутенаты), сверхпроводниках на основе железа (см., например, [19]) или фуллеридах [20], имеется орбитальное вырождение уровней локализованных электронов. В этих системах возникает так называемый межорбитальный корреляционный эффект, который обуславливается величиной параметра Хунда  $I_H$ . В диссертации исследуется указанный эффект в электронных процессах таких как фазовые переходы, переход металл-диэлектрик Мотта и сверхпроводимость в многоорбитальных системах.

Роль сильного электрон-фононного взаимодействия в этих явлениях так же недостаточно ясна, особенно это касается высокотемпературной сверхпроводимости. Экспериментальные данные, полученные при изучении изотопического эффекта в высокотемпературных сверхпроводниках (показывающего зависимость температуры сверхпроводящего перехода от массы соответствующего изотопа иона в узле кристаллической решетки) достаточно противоречивы (см., например, [21-23]).

Что касается теоретических исследований роли сильного электрон-фононного взаимодействия в ВТСП, то ясно, что чисто электрон-фононный механизм образования куперовских пар при высокотемпературной сверхпроводимости маловероятен. Однако

некоторые исследователи полагают, что электрон-фононное взаимодействие благоприятствует образованию сверхпроводящих электронных пар, в то время как другие полагают, что оно может непосредственно участвовать в механизме образования сверхпроводящих пар (см., например, [24-26]). В отношении явления фазового перехода металл-диэлектрик Мотта в зависимости от значения соответствующих параметров (по крайней мере, энергии кулоновского отталкивания  $U$  и константы электрон-фононного взаимодействия  $g$ ) может реализовываться различная физическая картина. Для выяснения роли сильного взаимодействия электронов друг с другом и с оптическими фононами (которое проявляется, например, в манганатах [27] и фуллеридах) в диссертации анализируется примесная модель Андерсона, дополненная гамильтонианом Холстейна, отвечающим за систему фононов и ее взаимодействие с локализованными электронами примесного атома (как в нормальной, так и в сверхпроводящей фазах).

Фундаментальное исследование этих систем важно в будущем и для прикладных задач. Например, понимание механизма перехода Мотта-Хаббарда металл-изолятор и управление им может привести к созданию элементов приборов с новыми функциональными возможностями, а изучение свойств высокотемпературных сверхпроводников и понимание механизма этого явления перспективны с точки зрения возможности их использования в качестве линий электропередачи. Проблема сильного электрон-фононного взаимодействия в огромных молекулах органического происхождения представляет интерес для молекулярной электроники и т. д.

Таким образом, актуальность и значимость исследований диктуются потребностью фундаментального изучения материалов с сильными корреляциями и реализующихся в них явлений, в том числе для решения прикладных задач в будущем, а именно: роли в электронных процессах электрон-фононного взаимодействия в системах с сильным кулоновским взаимодействием электронов друг с другом, а так же с сильной электрон-фононной связью; межорбитального корреляционного эффекта в многозонных системах, исследования термодинамических свойств СКС, а так же потребностью развития новых методов исследования СКС.

#### **Цели и задачи исследования:**

- 1) Доказать свойство стационарности термодинамического потенциала модели Хаббарда, как в нормальной, так и сверхпроводящей фазе;
- 2) Обобщить диаграммную технику, развитую ранее для орбитально невырожденных систем [15, 16, 28-31], для анализа моделей сильно коррелированных электронных систем с орбитальным вырождением электронных уровней. Учесть как

- межорбитальное, так и внутриорбитальное кулоновское взаимодействие в электронных процессах сильно коррелированных систем. Исследовать роль параметра Хунда в процессе фазового перехода Мотта в рамках двукратно-вырожденной модели Хаббарда и двукратно-вырожденной примесной модели Андерсона. Определить условие появления синглетной сверхпроводимости в модели Андерсона;
- 3) Исследовать роль совместного влияния сильного взаимодействия электронов друг с другом, а также с фононами в высокотемпературной сверхпроводимости в рамках модели Андерсона-Холстейна.

#### **Гипотеза диссертационной работы:**

1) Используя диаграммную технику сильной связи, можно установить свойство стационарности термодинамического потенциала модели Хаббарда аналогично тому, как это было выполнено для периодической модели Андерсона [17] и для систем со слабым взаимодействием Люттинджером и Уордом [18].

2) Межорбитальный корреляционный эффект может играть существенную роль в электронных процессах многоорбитальных сильно коррелированных систем: определять диэлектрическое состояние в модели Хаббарда и усиливать при низкой температуре металлическое состояние в примесной модели Андерсона. Предполагается, что в двукратно вырожденной примесной модели Андерсона возможна реализация сверхпроводимости. С помощью диаграммной техники можно определить и проанализировать уравнения для сверхпроводящих параметров порядка и определить условия для определения критической температуры сверхпроводящего перехода. 3) Куперовские пары, образованные парами  $d(f)$ -электронов в состоянии с тяжелыми фононными облаками, могут вносить существенный вклад в сверхпроводимость в модели Андерсона-Холстейна.

#### **Синтез методологии исследования:**

Методы анализа и синтеза литературы были использованы при подготовке гипотезы, введения и главы, посвященной анализу ситуации в области диссертационной работы. Расчеты, выполненные в диссертации, основаны на аппарате квантово-статистических функций Грина, теории возмущений и диаграммном методе сильной связи Москаленко [16]

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В **Главе 1** рассмотрена современная ситуация в области изучения фазовых переходов металл-диэлектрик Мотта и ВТСП в концепции физики СКС. Рассмотрены особенности материалов, приводящие к эффекту сильной корреляции в них, а также явления, исследуемые в работе: переход металл-диэлектрик Мотта и ВТСП. Представлены результаты исследования роли межорбитального корреляционного эффекта в системах с орбитальным вырождением электронных уровней, а также электрон-фононного взаимодействия в системах с одновременно сильным электрон-фононным и кулоновским взаимодействиями. С этой целью был проведен анализ и синтез ряда работ, в которых изучались модели Хаббарда-Холстейна, Андерсона-Холстейна, а также многократно вырожденные модели Хаббарда и примесная модель Андерсона. Прослеживается развитие метода диаграммной техники сильной связи [16], и рассмотрены некоторые результаты, полученные этим методом.

Во **Главе 2** обсуждается диаграммный метод исследования сильно коррелированных систем. Первая часть посвящена изложению квантово-статистического аппарата функций Грина и диаграммной техники для систем со слабым взаимодействием, а вторая часть посвящена основным элементам диаграммной техники сильной связи, развиваемой в диссертации.

В **Главе 3** получил развитие диаграммный подход сильной связи, предложенный В.А. Москаленко [16]. С помощью этого подхода в работе было доказано свойство стационарности термодинамического потенциала модели Хаббарда, как в нормальной, так и в сверхпроводящей фазах.

Прежде всего, в гамильтониан модели Хаббарда была введена вспомогательная величина – константа разложения  $\lambda$  (в конце расчета она была положена равной 1):

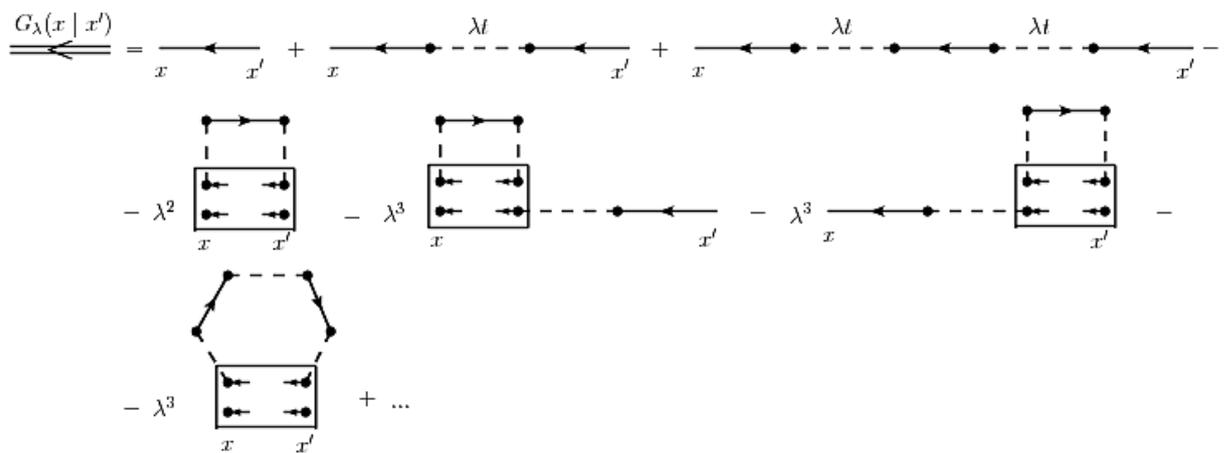
$$\begin{aligned} H &= H^0 + \lambda H', \\ H^0 &= \sum_i H_i^0, \\ H_i^0 &= -\mu \sum_{\sigma} C_{i\sigma}^{\dagger} C_{i\sigma} + U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \\ H' &= \sum_{i,j} \sum_{\sigma} t(j-i) C_{j\sigma}^{\dagger} C_{i\sigma}, \quad n_{i\sigma} = C_{i\sigma}^{\dagger} C_{i\sigma} \end{aligned} \quad (1)$$

где  $C_{i\sigma}^{\dagger}$  ( $C_{i\sigma}$ ) – оператор рождения (уничтожения) электронов  $i$ -ого узла с проекцией спина  $z=1/2\sigma$ ,  $\sigma=\pm 1$ .  $\mu$  – химический потенциал системы электронов,  $U$  – энергия кулоновского отталкивания электронов одного узла со спинами противоположного направления,  $n_{i\sigma}$  – оператор числа электронов со спином  $\sigma$  на  $i$ -ом узле кристаллической решетки,  $t(i-j)$  – матричный элемент энергии перескока электрона с узла  $i$  на узел  $j$ ,

связанный с дисперсией электрона  $\epsilon(\vec{k})$ , где  $\vec{k}$  - импульс электрона. Отметим, что все функции и физические величины, содержащие константу разложения  $\lambda$  снабжены индексом « $\lambda$ ».

При построении теории возмущений гамильтониан электронов одного атома  $H_0$ , включающий в себя параметр кулоновского отталкивания  $U$ , был принят за гамильтониан нулевого приближения, а интеграл перескока  $t(i-j)$  за возмущение.

На основании Обобщенной Теоремы Вика (ОТВ) выполнено диаграммное разложение одночастичной электронной функции Грина (ФГ) для модели Хаббарда в ряд теории возмущений по интегралу перескока  $t(i-j)$ . (Рис.1)



**Рис. 1. Первые три порядка теории возмущений для одночастичной функции Грина  $G_\lambda(x|x')$ . Сплошная двойная линия со стрелкой соответствует перенормированной одночастичной функции Грина  $G_\lambda(x|x')$ . Сплошные тонкие линии со стрелками изображают одночастичных функции Грина нулевого порядка, прямоугольники изображают двухчастичные неприводимые функции Грина  $G_2^{(irr)}$ . Тонкие пунктирные линии соответствуют туннельным матричным элементам, а точки - это вершины диаграмм, направление стрелок указывает на оператор рождения или уничтожения.**

Помимо обычных функций Грина сверхпроводящее состояние описывается также аномальными функциями Грина. После использования обобщенной теоремы Вика появляются аномальные многочастичные неприводимые функции Грина, которые могут содержать любое количество операторов рождения и уничтожения. В связи с этим, при рассмотрении сверхпроводящего состояния было введено понятие квантового зарядового числа  $\alpha$ , которое позволяет учесть все эти возможности:

$$C^\alpha = \begin{cases} C, & \alpha = 1 \\ C^+, & \alpha = -1 \end{cases} \quad (2)$$

Матцубаровская функция Грина  $G^{\alpha\alpha'}(x|x')$  в представлении взаимодействия в терминах квантового зарядового числа  $\alpha$ . определяется как

$$G^{\alpha\alpha'}(x|x') = -\langle T_\tau C_{\mathbf{x}\sigma}^\alpha(\tau) C_{\mathbf{x}'\sigma'}^{-\alpha'}(\tau') U_\lambda(\beta) \rangle_0^c \quad (3)$$

где  $x$  соответствует  $(\mathbf{x}, \sigma, \tau)$ , а  $x'$  –  $(\mathbf{x}', \sigma', \tau')$ ,  $\mathbf{x}, \mathbf{x}'$  – индексы узлов,  $\langle \dots \rangle_0$  означает термодинамическое среднее по статистической функции первого порядка, индекс  $c$  в  $\langle \dots \rangle_0^c$  означает часть связанных диаграмм.  $U_\lambda(\beta)$  – унитарный оператор эволюции

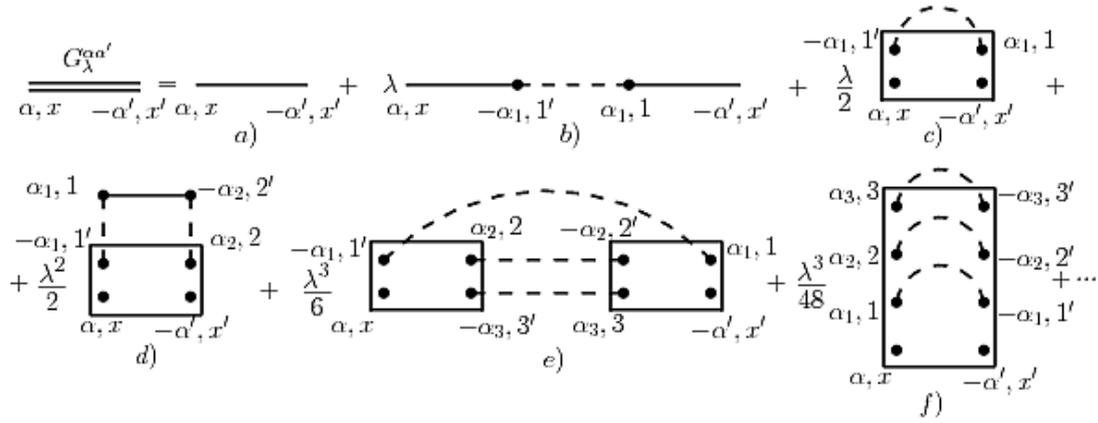
$$U_\lambda(\beta) = T_\tau \exp(-\lambda \int_0^\beta H'(\tau) d\tau). \quad (4)$$

Здесь  $\tau$  и  $\tau'$  соответствуют мнимому времени  $0 \leq \tau \leq \beta$ ,  $0 \leq \tau' \leq \beta$ ,  $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура,  $T_\tau$  – оператор хронологического упорядочения. Соответствие между обычным определением нормальных  $G_{\sigma, \sigma'}^\lambda(\mathbf{x}, \tau | \mathbf{x}', \tau')$  и аномальных,  $\bar{F}_{\bar{\sigma}, \sigma'}^\lambda(\mathbf{x}, \tau | \mathbf{x}', \tau')$  функций Грина и функций Грина в терминах квантового зарядового числа  $G^{\alpha\alpha'}(x|x')$  имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} G_\lambda^{1,1}(x|x') &= -\langle T_\tau C_{\mathbf{x}\sigma}(\tau) \bar{C}_{\mathbf{x}'\sigma'}(\tau') U_\lambda(\beta) \rangle_0^c = G_{\sigma, \sigma'}^\lambda(\mathbf{x}, \tau | \mathbf{x}', \tau'), \\ G_\lambda^{1,-1}(x|x') &= -\langle T_\tau C_{\mathbf{x}\sigma}(\tau) C_{\mathbf{x}'\sigma'}(\tau') U_\lambda(\beta) \rangle_0^c = F_{\sigma, \bar{\sigma}'}^\lambda(\mathbf{x}, \tau | \mathbf{x}', \tau'), \\ G_\lambda^{-1,1}(x|x') &= -\langle T_\tau \bar{C}_{\mathbf{x}\sigma}(\tau) \bar{C}_{\mathbf{x}'\sigma'}(\tau') U_\lambda(\beta) \rangle_0^c = \bar{F}_{\bar{\sigma}, \sigma'}^\lambda(\mathbf{x}, \tau | \mathbf{x}', \tau'), \\ G_\lambda^{-1,-1}(x|x') &= -G_\lambda^{1,1}(x'|x). \end{aligned} \quad (5)$$

Было получено также диаграммное разложение функций Грина  $G_\lambda^{\alpha\alpha'}$  для сверхпроводящего состояния (см. Рис. 2). Отметим, что в сверхпроводящем состоянии, в отличие от нормального, линии функций Грина не содержат стрелки, которые определяют процессы рождения и уничтожения электронов, в связи с тем, что индексы  $\alpha$  могут принимать два значения  $\alpha = \pm 1$ , и каждая вершина диаграммы содержит различные возможности.

При рассмотрении обеих фаз было введено понятие туннельной функции Грина  $T_\lambda(k)$ , которая получается в результате процесса перенормировки матричного элемента перескока  $t(i-j)$ .



**Рис. 2.** Диаграммы теории возмущений третьего порядка для  $G_\lambda^{aa'}(x|x')$ . Сплошная двойная линия соответствует перенормированной  $G_\lambda^{aa'}(x|x')$ . Сплошные тонкие линии изображают одночастичную функцию Грина нулевого порядка, прямоугольники изображают двух- и четырехчастичные неприводимые функции Грина. Тонкие пунктирные линии соответствуют туннельным матричным элементам. Точки – вершины диаграмм.

Было найдено уравнение типа Дайсона для этой функции. В нормальной фазе для одночастичной электронной функции Грина  $G_\lambda(k)$  и туннельной функции Грина  $T_\lambda(k)$  соответственно уравнения типа Дайсона имеют вид:

$$G_\lambda(k) = \frac{\Lambda_\lambda(k)}{1 - \lambda \Sigma(k) \Lambda_\lambda(k)}$$

$$T_\lambda(k) = \lambda T_\lambda(k),$$

$$\tilde{T}_\lambda(k) = \frac{\epsilon(k)}{1 - \lambda \epsilon(k) \Lambda_\lambda(k)} \quad (6)$$

В сверхпроводящей фазе:

$$\hat{T} = (1 - \hat{\Lambda})^{-1} = (1 - \hat{T}^0 \hat{\Lambda})^{-1} \hat{T}^0, \quad (7)$$

$$\hat{T} = \hat{T}^0 + \hat{T}^0 \hat{\Sigma} \hat{T}.$$

где

$$\hat{\Lambda} = \begin{pmatrix} \Lambda_\sigma(k) & Y_{\sigma\bar{\sigma}}(k) \\ \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}(k) & -\Lambda_{\bar{\sigma}}(-k) \end{pmatrix}, \quad \hat{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon(k) & 0 \\ 0 & -\epsilon(-k) \end{pmatrix} \quad (8)$$

здесь  $k$  – импульс электрона,  $k$  стоящий в  $\Sigma(k, i\omega_n)$  соответствует нечетным мацубаровским частотам. Роль массового оператора  $\Sigma_\lambda$  осуществляется корреляционной функцией  $\Lambda_\sigma(k)$ ,

которая представляет собой сумму сильно связанных диаграмм, содержащих неприводимые функции Грина, умноженную на константу разложения  $\lambda$

$$\Sigma_\lambda(k) = \lambda \Lambda_\lambda(k).$$

Было определено, что при  $\lambda=1$  массовый оператор  $\Sigma_\lambda(k)$  туннельной ФГ равен корреляционной функции  $\Lambda$ . В сверхпроводящем состоянии  $\hat{\Lambda}$  представляет собой матрицу, в которой помимо нормальной корреляционной функции  $\Lambda_\sigma(k)$  так же присутствуют аномальные корреляционные функции  $Y_{\bar{\sigma}\sigma}(k), \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}(k), -\Lambda_\sigma(-k)$  соответствующие аномальным функциям Грина.

На основании известного соотношения между термодинамическим потенциалом  $F$  и частью из сильно связанных диаграмм разложения термодинамического среднего оператора эволюции:

$$F(\beta) = F_0 - \frac{1}{\beta} \langle U_\lambda(\beta) \rangle_0^c, \quad (9)$$

$$F_0 = -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 - \frac{2}{\beta} \sum_k \ln[1 + \exp(-\beta\epsilon(k))]$$

Где  $Z_0$  статистическая сумма по гамильтониану нулевого приближения. Было установлено точное соотношение между термодинамическим потенциалом системы и одночастичной функцией Грина (путем сравнения диаграммных рядов для одночастичной функции Грина и оператора эволюции  $U(\beta)$ ). В нормальной фазе оно имеет вид:

$$\lambda \frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = \sum_{\bar{k}\sigma} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} T_\lambda(k) \Sigma_\lambda(k) \exp(i\omega_n 0^+) = \frac{1}{\beta} \text{Tr}(T_\lambda \Sigma_\lambda). \quad (10)$$

здесь  $\omega_n$  - матцубаровская частота,  $0^+$  - положительное бесконечно малое.

В сверхпроводящей фазе было получено, что:

$$\lambda \frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = \frac{1}{2\beta} \text{Tr}(\hat{T}_\lambda \hat{\Sigma}_\lambda). \quad (11)$$

Это соотношение содержит дополнительное интегрирование по вспомогательной константе разложения  $\lambda$ . Мы обошли эту необходимость интегрирования, построив специальный функционал  $Y(\lambda)$  на основании скелетных диаграмм для функции Грина и оператора эволюции (Рис. 3), который содержит неприводимые функции Грина и полные туннельные функции Грина.

$$Y(\lambda) = Y_1(\lambda) + Y'(\lambda), \quad (12)$$

где



В Главе 4 было исследовано влияние параметра Хунда на электронные процессы в многоорбитальных сильно коррелированных системах. Для этого диаграммная теория, развитая для орбитально невырожденной модели Хаббарда и примесной модели Андерсона, была обобщена на системы с двукратным орбитальным вырождением.

Гамильтониан двукратно вырожденной модели Хаббарда имеет вид:

$$H = H_L + H', \quad (14)$$

$$\begin{aligned} H' &= -\sum_{i,j} \sum_{l,l'} \sum_{\sigma} t_{l,l'}(j-i) C_{j'l'\sigma}^{\dagger} C_{il\sigma}, \\ H_L &= \sum_i H_{Li}, \\ H_{Li} &= U \sum_l n_{il\uparrow} n_{il\downarrow} + \frac{J}{2} \sum_{l \neq l'} \sum_{\sigma} C_{il\sigma}^{\dagger} C_{il\bar{\sigma}}^{\dagger} C_{il'\bar{\sigma}} C_{il'\sigma} - \\ & - \mu \sum_{i,l,\sigma} C_{il\sigma}^{\dagger} C_{il\sigma} + \sum_{l \neq l'} \sum_{\sigma, \sigma'} \left\{ \frac{U'}{2} n_{il\sigma} n_{il'\sigma'} + \frac{J}{2} C_{il\sigma}^{\dagger} C_{il'\sigma'}^{\dagger} C_{il\sigma} C_{il'\sigma'} \right\}, \end{aligned} \quad (15)$$

где  $C_{j'\sigma}^{\dagger}, C_{j\sigma}$  - операторы рождения и уничтожения электрона в узле решетки  $i$  с орбитальным квантовым числом ( $l=1$  или  $2$ ) и спином  $\sigma = \uparrow$  или  $\downarrow$ ,  $n_{il\sigma} = C_{il\sigma}^{\dagger} C_{il\sigma}$  и  $n_{il} = \sum_{\sigma} n_{il\sigma}$ . Обозначения  $U$ ,  $U'$  и  $J$  означают величину внутри- и межорбитального кулоновского взаимодействия электронов и константу связи Хунда соответственно. В дальнейшем используется соотношение  $U = U' + 2J$ , которое выполняется в некоторых орбитально вырожденных моделях [13]. Величины  $t_{l'l'}(j-i)$  являются матричными элементами туннельных переходов электронов ( $J > 0$ ) между узлами решетки. Учитываются внутриорбитальные ( $l = l'$ ) и межорбитальные ( $l \neq l'$ ) перескоки электронов.

Полная Матцубаровская функция Грина в представлении взаимодействия имеет вид :

$$G(\vec{x}l\sigma\tau | \vec{x}'l'\sigma'\tau') = -\langle T_{\tau} C_{\vec{x}l\sigma}(\tau) \bar{C}_{\vec{x}'l'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c \quad (16)$$

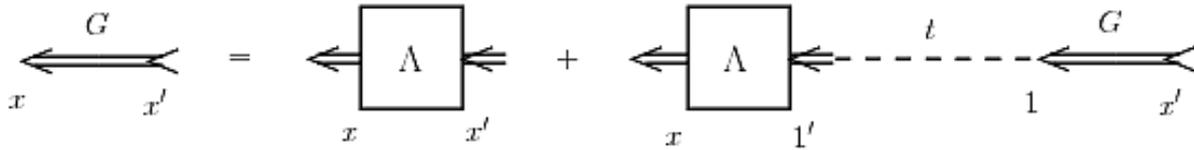
здесь  $\tau$  и  $\tau'$  - соответствуют мнимому времени с  $0 \leq \tau \leq \beta$ ,  $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  - постоянная Больцмана,  $T$  - температура,  $T_{\tau}$  - оператор хронологического упорядочения.

Оператор эволюции определяется выражением

$$U(\beta) = T_{\tau} \exp\left(-\int_0^{\beta} H_{int}(\tau) d\tau\right) \quad (17)$$

В первую очередь были определены собственные функции и собственные значения  $E_n$  ( $n$  принимает значения от 1 до 16) части гамильтониана, соответствующей энергии взаимодействия локализованных электронов, и была установлена их зависимость от внутри- и межорбитальных кулоновских взаимодействий и параметра Хунда и развита теория

возмущений в атомном пределе. Далее было записано уравнение типа Дайсона для модели Хаббарда и определена корреляционная функция  $\Lambda$ , которая учитывает существование неприводимых многочастичных функций Грина



**Рис. 4. Схематическое изображение уравнения типа Дайсона. Двойные линии со стрелками соответствуют перенормированной одночастичной функции Грина, прямоугольники изображают корреляционные функции  $\Lambda(x, x')$ , а пунктирные линии обозначают матричные элементы туннелирования.**

В аналитической форме это уравнение имеет вид:

$$G(\bar{x}l\sigma\tau | \bar{x}'l'\sigma'\tau') = \Lambda(\bar{x}l\sigma\tau | \bar{x}'l'\sigma'\tau') + \sum_{l_1'} \sum_{\sigma_1} \int \Lambda(\bar{x}l\sigma\tau | \bar{l}'l_1'\sigma_1\tau_1) \times t_{l_1}(\bar{l}' - \bar{l}) G(\bar{l}l_1\sigma_1\tau_1 | \bar{x}'l'\sigma'\tau') d\tau_1 \quad (18)$$

В матричной форме:

$$\hat{\Lambda}_\sigma^{-1}(k) = \hat{G}_\sigma^{-1}(k) + \hat{E}(k).$$

где

$$\hat{G}_\sigma(k) = \begin{pmatrix} G_\sigma^{11}(k) & G_\sigma^{12}(k) \\ G_\sigma^{21}(k) & G_\sigma^{22}(k) \end{pmatrix}, \hat{\Lambda}_\sigma(k) = \begin{pmatrix} \Lambda_\sigma^{11}(k) & \Lambda_\sigma^{12}(k) \\ \Lambda_\sigma^{21}(k) & \Lambda_\sigma^{22}(k) \end{pmatrix}, \hat{E}_\sigma(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_\sigma^{11}(\vec{k}) & \varepsilon_\sigma^{12}(\vec{k}) \\ \varepsilon_\sigma^{21}(\vec{k}) & \varepsilon_\sigma^{22}(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad \text{Здесь}$$

диагональные элементы соответствуют внутриорбитальным процессам, а не- диагональные межорбитальным. Сравнив с известными результатами для орбитально невырожденной системы, было показано, что с диаграммной точки зрения, орбитально вырожденная теория оказывается аналогичной орбитально невырожденной теории, если в последней заменить числовые функции Грина двухрядными матрицами, в которых диагональные элементы соответствуют межорбитальным переходам, а недиагональные элементы внутриорбитальным переходам.

В простейшем приближении Хаббарда-I, в котором учитываются только диаграммы цепочечного типа (не содержащие неприводимые функции Грина и соответствующие обычной теореме Вика) была вычислена плотность электронных состояний  $\rho^{11}(E)$ :

$$\rho^{11}(E) = \frac{1}{2}(\rho_0(\varepsilon_A) + \rho_0(\varepsilon_B)) \quad (19)$$

Она определяется нулевой плотностью электронных состояний  $\rho_0(E)$ , т.е. плотностью электронных состояний в исходной зоне без учета кулоновского взаимодействия.

Аргументы функции  $\varepsilon_A$  и  $\varepsilon_B$  в (19) были вычислены и определяются параметрами модели.

Аргумент функции  $\rho^{11}(E)$  в (19) равен  $-\infty$ , что находится вне интервала  $\left(-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right)$ , в котором функция отлична от нуля. Здесь  $W$  ширина энергетической зоны. Следовательно, в этом приближении и частный случай половинного заполнения электронных энергетических зон системы соответствует только диэлектрическому состоянию.

Была также построена теория возмущений на основании диаграммной техники сильной связи для исследования двукратной вырожденной модели Андерсона, которая включает следующие соотношения:

$$H = H^0 + H_{int}, \quad (20)$$

$$H^0 = H_c^0 + H_d^L, \quad (21)$$

$$H_c^0 = \sum_{\vec{k}l\sigma} \varepsilon_l(\vec{k}) C_{\vec{k}l\sigma}^+ C_{\vec{k}l\sigma}, \quad (22)$$

$$H_d^L = \sum_{l,\sigma} \varepsilon^d d_{l\sigma}^+ d_{l\sigma} + U \sum_l n_{l\uparrow} n_{l\downarrow} + U' n_1 n_2 + I_H \sum_{\sigma\sigma'} d_{1\sigma}^+ d_{2\sigma}^+ d_{1\sigma} d_{2\sigma'} + I_H' (d_{1\uparrow}^+ d_{1\downarrow}^+ d_{2\downarrow} d_{2\uparrow} + h.c.), \quad (23)$$

$$H_{int} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}l\sigma} (V_{\vec{k}l} d_{l\sigma}^+ C_{\vec{k}l\sigma} + V_{\vec{k}l}^* C_{\vec{k}l\sigma}^+ d_{l\sigma}), \quad (24)$$

Здесь  $H_d^L$  – локальный (узельный) гамильтониан,  $C_{\vec{k}l\sigma}$  – оператор уничтожения электрона проводимости с импульсом  $\vec{k}$ , орбитальным числом  $l=1,2$  и спином  $\sigma = \pm 1(\uparrow, \downarrow)$ ,  $d_{l\sigma}$  – оператор уничтожения локализованного d-электрона. Волновая функция электрона проводимости в l-ом орбитальном состоянии перекрывается только с волновой функцией локализованного электрона, находящегося в таком же орбитальном состоянии  $n_{l\sigma} = d_{l\sigma}^+ d_{l\sigma}$ ,  $n_l = \sum_{\sigma} n_{l\sigma}$   $V_{\vec{k}l}$  – матричный элемент гибридизации,  $U$  – кулоновское отталкивание между d – электронами одного и того же орбитального состояния, а  $U'$  – между электронами различных орбитальных состояний,  $I_H, I_H'$  – константа Хунда,  $\varepsilon_l(\vec{k})$  – зонная дисперсия и  $\varepsilon_d(\vec{k})$  – энергия примесного иона, отсчитываемая от уровня химического потенциала  $\mu$ ,  $N$  – число узлов решетки.

Как и в предыдущем случае предполагается, что выполняется соотношение:

$$U' = U - 2I_H, I'_H = I_H.$$

Функции Грина электронов проводимости и локализованных определяются соответственно

$$\begin{aligned} G(\vec{k}l\sigma\tau | \vec{k}'l'\sigma'\tau') &= -\langle T_\tau C_{\vec{k}l\sigma}(\tau) \bar{C}_{\vec{k}'l'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ g(l\sigma\tau | l'\sigma'\tau') &= -\langle T_\tau d_{l\sigma}(\tau) \bar{d}_{l'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c. \end{aligned} \quad (25)$$

Аномальные функции Грина электронов проводимости  $F(\vec{k}l\sigma\tau | \vec{k}'l'\sigma'\tau')$ ,  $\bar{F}(\vec{k}l\sigma\tau | \vec{k}'l'\sigma'\tau')$  и примесных локализованных атомов  $f(l\sigma\tau | l'\sigma'\tau')$ ,  $\bar{f}(l\sigma\tau | l'\sigma'\tau')$  определяются следующим образом

$$\begin{aligned} F(\vec{k}l\sigma\tau | \vec{k}'l'\sigma'\tau') &= -\langle T_\tau C_{\vec{k}l\sigma}(\tau) C_{\vec{k}'l'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c \\ \bar{F}(\vec{k}l\sigma\tau | \vec{k}'l'\sigma'\tau') &= -\langle T_\tau \bar{C}_{\vec{k}l\sigma}(\tau) \bar{C}_{\vec{k}'l'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c \\ f(l\sigma\tau | l'\sigma'\tau') &= -\langle T_\tau d_{l\sigma}(\tau) d_{l'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c \\ \bar{f}(l\sigma\tau | l'\sigma'\tau') &= -\langle T_\tau \bar{d}_{l\sigma}(\tau) \bar{d}_{l'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c \end{aligned} \quad (26)$$

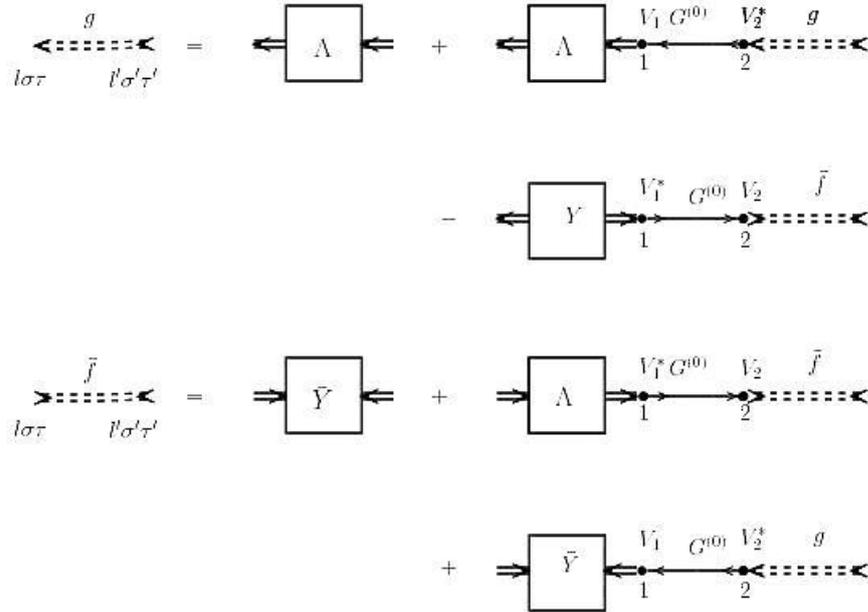
Статистическое усреднение в (25) и (26) проводится с помощью матрицы плотности нулевого порядка примесных электронов и электронов проводимости. Индекс «с» означает связанные диаграммы.

Для этой модели также были определены собственные функции и собственные значения  $E_n$  части гамильтониана ( $n$  принимает значения от 1 до 16), отвечающего энергии локализованных d-электронов, и была установлена их зависимость от внутри - и межорбитальных кулоновских взаимодействий  $U$ ,  $U'$  и константы связи Хунда  $I_H$ . Была разработана теория возмущений в атомном пределе и определены мацубаровские функции Грина в нормальном и сверхпроводящем состояниях. Была получена спектральная плотность электронных состояний  $A^{(0)}(E)$  в локальном приближении:

$$\begin{aligned} A^{(0)}(E) &= \frac{2\pi}{Z_0} \{ (e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2}) \delta(E + E_1 - E_2) + (e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_6}) \delta(E + E_2 - E_6) + \\ &+ \frac{1}{2} (e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_7}) \delta(E + E_2 - E_7) + \frac{3}{2} (e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_9}) \delta(E + E_2 - E_9) + \\ &+ (e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_{12}}) \delta(E + E_6 - E_{12}) + \frac{1}{2} (e^{-\beta E_7} + e^{-\beta E_{12}}) \delta(E + E_7 - E_{12}) + \\ &+ \frac{3}{2} (e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_{12}}) \delta(E + E_9 - E_{12}) + (e^{-\beta E_{12}} + e^{-\beta E_{16}}) \delta(E + E_{12} - E_{16}) \}, \end{aligned} \quad (27)$$

$Z_0 = Tr e^{-\beta H_0}$  статистическая сумма по гамильтониану нулевого приближения.  $\delta$  - функция Дирака.

Для функции Грина электронов проводимости и электронов примесных атомов (Рис. 5) были получены уравнения Дайсона и типа Дайсона соответственно.



**Рис. 5. Уравнение типа Дайсона для примесных электронов.  $\Lambda$ ,  $Y$ ,  $\bar{Y}$ , – корреляционные функции.**

Перенормированная функция Грина для электронов проводимости определяется как:

$$G_{l\sigma l'\sigma'}(\vec{k}\vec{k}' | i\omega_n) = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{ll'} \delta_{\sigma\sigma'} G_{l\sigma}^{(0)}(\vec{k} | i\omega_n) + \frac{V_{\vec{k}l}^* V_{\vec{k}'l'}}{N} G_{l\sigma}^{(0)}(\vec{k} | i\omega_n) g_{l\sigma, l'\sigma'}(i\omega_n) G_{l'\sigma'}^{(0)}(\vec{k}' | i\omega_n), \quad (28)$$

где  $g_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n)$  – полная функция Грина примесных электронов,  $G_{l\sigma}^{(0)}(\vec{k} | i\omega_n)$  – функция Грина электронов проводимости нулевого приближения

Аналогичное выражение имеет место для аномальной функции электронов в сверхпроводящем состоянии:

$$F_{l\sigma l'\sigma'}(\vec{k}, -\vec{k}' | i\omega_n) = \frac{V_{\vec{k}l}^* V_{\vec{k}'l'}}{N} G_{l\sigma}^{(0)}(\vec{k} | i\omega_n) f_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) G_{l'\sigma'}^{(0)}(-\vec{k}' | -i\omega_n) \quad (29)$$

На Рис.5. двойные штриховые линии со стрелками изображают перенормированные функции Грина локализованных электронов  $g$  и  $f$ , а сплошные жирные линии представляют функцию Грина электронов проводимости нулевого приближения  $G^{(0)}$ . Величина  $V_1$  означает  $V_{\vec{k}l_1}$ , предполагается суммирование по повторяющимся индексам.  $\Lambda$ ,  $Y$ ,  $\bar{Y}$ , – корреляционные функции, содержащие сильно связанные неприводимые диаграммы. Простейший пример таких диаграмм представлен на Рис. 6

$$Z_{\sigma\sigma'}^{l\bar{l}}(\tau - \tau') = -1 \quad G_2^{(0)ir} [l\sigma\tau, l_1\bar{\sigma}_1\tau_1 | l_2\sigma_2\tau_2, l'\sigma'\tau'] V_1^* G[\vec{k}_2 l_2\sigma_2\tau_2 | \vec{k}_1 l_1\sigma_1\tau_1] V_2$$

$$Y_{l\bar{l}\sigma\sigma'}^{l\sigma}(\tau - \tau') = -\frac{1}{2} \quad G_2^{(0)ir} [l\sigma\tau, l'\bar{\sigma}'\tau' | l_1\sigma_1\tau_1, l_2\bar{\sigma}_2\tau_2] V_1 F[\vec{k}_1 l_1\sigma_1\tau_1 | -\vec{k}_2 l_2\bar{\sigma}_2\tau_2] V_2$$

$$\bar{Y}_{l\bar{l}\sigma\sigma'}^{l\bar{l}}(\tau - \tau') = -\frac{1}{2} \quad G_2^{(0)ir} [l_1\bar{\sigma}_1\tau_1, l_2\sigma_2\tau_2 | l\bar{\sigma}\tau, l'\sigma'\tau'] V_1^* \bar{F}[-\vec{k}_1 l_1\bar{\sigma}_1\tau_1 | \vec{k}_2 l_2\sigma_2\tau_2] V_2^*$$

**Рис. 6. Главное приближение для корреляционных функций  $Z$ ,  $Y$ ,  $\bar{Y}$ . Сплошные двойные линии со стрелками изображают полную функцию Грина электронов проводимости. Прямоугольники изображают неприводимые функции Грина примесных электронов.**

Аналитическая форма уравнений, изображенных на Рис. 6. имеет следующий вид

$$g_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) = \Lambda_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) + \Lambda_{l\sigma l_1\sigma_1}(i\omega_n) \mathcal{G}_{l_1\sigma_1}^{(0)}(i\omega_n) g_{l_1\sigma_1 l'\sigma'}(i\omega_n). \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \bar{f}_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) = & \bar{Y}_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) + \Lambda_{l_1\sigma_1 l\sigma}(-i\omega_n) \mathcal{G}_{l_1\sigma_1}^{(0)}(-i\omega_n) \bar{f}_{l_1\sigma_1 l'\sigma'}(i\omega_n) \\ & + \bar{Y}_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) \mathcal{G}_{l_1\sigma_1}^{(0)}(i\omega_n) g_{l_1\sigma_1 l'\sigma'}(i\omega_n) \end{aligned} \quad (31)$$

где функция Грина нулевого приближения примесных электронов:

$$G_{l\sigma}^{(0)}(i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} |V_{\vec{k}l}|^2 G_{l\sigma}^0(\vec{k} | i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}l}|^2}{i\omega_n - \varepsilon(\vec{k})}$$

Эта система уравнений позволяет обсудить нормальное состояние системы и синглетное состояние сверхпроводимости на парамагнитном фоне ( $\bar{\sigma} = -\sigma$ )

Наличие на Рис. 6. полной функции Грина электронов проводимости является результатом лестничного суммирования главных диаграмм. Это приближение представляет собой обобщение приближения случайных фаз теории возмущений слабой связи. Был проведен расчет простейшей двухчастичной неприводимой функции Грина  $\Lambda = g^0 + Z$  (для краткости орбитальные и спиновые индексы опущены). Эта величина, которая может быть

вычислена только в пределе низких температур, она также аппроксимируется с учетом вклада статистического веса  $e^{-\beta E_9}$ . Предполагается, что основным состоянием исследуемой системы является двух-частичное триплетное состояние  $E_9$ . Вычислением этой величины и суммированием некоторого класса диаграмм (Рис. 6) была получена корреляционная функция  $\Lambda_{l\sigma l'\sigma'}$ .

$$\Lambda_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega) = \delta_{ll'}\delta_{\sigma\sigma'}[m_l(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2}\mathcal{G}_l^{(0)}(i\omega)] + \frac{p^2(i\omega)}{2}\mathcal{G}_l^{(0)}(i\omega)\mathcal{G}_{l'}^{(0)}(i\omega)g_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega), \quad (32)$$

со следующими реализациями:

$$\begin{aligned} \Lambda_{11}(i\omega) &= m_1(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2}\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2}[\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)]^2 g_{11}(i\omega), \\ \Lambda_{22}(i\omega) &= m_2(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2}\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2}[\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)]^2 g_{22}(i\omega), \end{aligned} \quad (33)$$

$$\Lambda_{12}(i\omega) = \frac{p^2(i\omega)}{2}\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)g_{12}(i\omega),$$

$$p(i\omega) = \left( \frac{1}{i\omega + E_2 - E_9} - \frac{1}{i\omega + E_9 - E_{12}} \right). \quad (34)$$

$$m_l(i\omega) = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{i\omega + E_2 - E_9} + \frac{1}{i\omega + E_9 - E_{12}} \right)$$

В итоге, было найдено два решения для перенормированных функций Грина d-электронов

Первое из них:

$$\begin{aligned} \Lambda_{11}(i\omega) &= m_1(i\omega), \quad g_{11}(i\omega) = -\frac{1}{\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)}, \\ \Lambda_{22}(i\omega) &= \frac{1}{\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)}, \quad g_{22}(i\omega) = -\frac{1}{\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)} \left( 1 + \frac{m_2(i\omega)\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega) - 1}{\frac{p^2(i\omega)}{2}(\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega))^2} \right), \\ \Lambda_{12}(i\omega) &= \Lambda_{21}(i\omega) = \pm \frac{ip(i\omega)}{\sqrt{2}}, \quad g_{12}(i\omega) = \pm \frac{i\sqrt{2}}{p(i\omega)\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)}, \end{aligned} \quad (35)$$

при условии, что

$$\frac{1}{\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)} - m_1(i\omega) = \frac{1}{\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)} - m_2(i\omega)$$

Второе решение получается из (35) заменой индексов 1 и 2.

Для анализа перехода металл-диэлектрик Мотта была определена плотность электронных состояний:

Внутриорбитальный вклад, например, имеет вид

$$\rho_{11}(E) = -\frac{2 \operatorname{Im} \mathcal{G}_1^{(0)}(E + i\delta)}{(\operatorname{Re} \mathcal{G}_1^{(0)})^2 + (\operatorname{Im} \mathcal{G}_1^{(0)})^2}, \quad (36)$$

$$\operatorname{Im} \mathcal{G}_1^{(0)}(E + i\delta) = -\pi \rho_0(E) |V_1|^2.$$

Величина  $\rho_{11}(E)$  отлична от нуля благодаря существованию матричного элемента гибридизации и нулевой плотности состояний  $\rho_0(E)$  (плотность состояний без взаимодействия).

Вместе с тем существует дополнительный вклад, обусловленный межорбитальным корреляционным эффектом, который следует из полученного нами решения (35) и имеющий вид

$$\rho_{12}(E) = -\operatorname{Im} g_{12}(E + i\delta) = \frac{2(E + \Delta E_1)(\Delta E_2 - E)}{\operatorname{Im} \mathcal{G}_1^{(0)}(0) \operatorname{Im} \mathcal{G}_2^{(0)}(0)(\Delta E_1 + \Delta E_2)}, \quad (37)$$

где

$$\Delta E_1 = E_2 - E_9 > 0, \quad \Delta E_2 = E_{12} - E_9 > 0. \text{ Эта величина положительна для } -\Delta E_1 < E < \Delta E_2$$

Таким образом, было показано, что при низких температурах благодаря межорбитальным переходам состояние системы может быть только металлическим.

Было получено нами также приближенное выражение для корреляционных функций и, в частности, для сверхпроводящих параметров порядка  $\bar{Y}''$  (поскольку корреляционные функции в сверхпроводящем состоянии могут играть роль сверхпроводящего параметра порядка).

$$\bar{Y}'''(i\omega_n) = \lambda q_l(-i\omega_n) q_l(i\omega_n) \bar{f}'''(i\omega_n),$$

где

$$q_{l\sigma} = p(i\omega_n) \mathcal{G}_{l\sigma}^{(0)}(i\omega_n). \quad (38)$$

$$\lambda = -\frac{1}{2} \text{ для синглета и } \lambda = \frac{1}{6} \text{ для триплетной сверхпроводимости.}$$

Были сформулированы и проанализированы линейные уравнения для параметров порядка (полученные из уравнений типа Дайсона, переписанных для сверхпроводящего состояния) и также найдено условие для реализации синглетной сверхпроводимости и определения критической температуры:

$$\begin{vmatrix}
Q_\sigma^2(k)Q_\sigma^2(-k) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_1(-k)q_1(k)} & G_2^{(0)}(k)Q_\sigma^2(-k)\Lambda_\sigma^{21}(k) & G_2^{(0)}(-k)Q_\sigma^2(k)\Lambda_\sigma^{21}(-k) & G_2^{(0)}(-k)G_2^{(0)}(k)\Lambda_\sigma^{21}(k)\Lambda_\sigma^{21}(-k) \\
G_1^{(0)}(k)Q_\sigma^2(-k)\Lambda_\sigma^{12}(k) & Q_\sigma^1(k)Q_\sigma^2(-k) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_1(-k)q_2(k)} & G_2^{(0)}(-k)G_1^{(0)}(k)\Lambda_\sigma^{12}(k)\Lambda_\sigma^{21}(-k) & G_2^{(0)}(-k)Q_\sigma^1(k)\Lambda_\sigma^{21}(-k) \\
G_1^{(0)}(-k)Q_\sigma^2(k)\Lambda_\sigma^{21}(-k) & G_1^{(0)}(-k)G_2^{(0)}(k)\Lambda_\sigma^{21}(k)\Lambda_\sigma^{12}(-k) & Q_\sigma^2(k)Q_\sigma^1(-k) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_2(-k)q_1(k)} & Q_\sigma^2(k)Q_\sigma^1(-k) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_2(-k)q_1(k)} \\
G_1^{(0)}(-k)G_1^{(0)}(k)\Lambda_\sigma^{12}(k)\Lambda_\sigma^{12}(-k) & G_1^{(0)}(-k)Q_\sigma^1(k)\Lambda_\sigma^{12}(-k) & G_1^{(0)}(k)Q_\sigma^1(-k)\Lambda_\sigma^{12}(k) & Q_\sigma^1(k)Q_\sigma^1(-k) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_2(-k)q_2(k)}
\end{vmatrix} = 0, \quad (39)$$

где  $k = i\omega_n$ .  $Q_\sigma^l(i\omega_n) = 1 - \Lambda_\sigma^l(i\omega_n)G_\sigma^{l(0)}(i\omega_n)$

Это условие определяется свободными параметрами теории и определяет критическую температуру  $T_c$ . В нашем случае критическая температура представлена зависимостью от  $T_c$  мацубаровской частоты  $\omega_n = (2n+1)\pi k_B T_c$ . Для того чтобы определить критическую температуру  $T_c$   $\lambda$  в (39) полагается равным  $-\frac{1}{2}$ , величине отвечающей синглетному состоянию и уравнению сохранения. Другой аргумент в пользу выбора  $\lambda = -\frac{1}{2}$  это приближение, основанное на равенстве нулю функций  $Q_\sigma^l(i\omega_n) = 0$ .

В этом частном случае

$$D_s = (\Delta_4^{(0)})^2 \left[ \frac{\Delta_4^{(0)}}{\lambda^2 q_1(-i\omega_n)q_1(i\omega_n)q_2(-i\omega_n)q_2(i\omega_n)} - 1 \right]^2, \quad (40)$$

где  $\Delta_4^{(0)}$  это  $\Delta_4$  с условием  $Q_\sigma^l(i\omega_n) = 0$ :

$$\Delta_4^{(0)} = G_1^{(0)}(i\omega_n)G_1^{(0)}(-i\omega_n)G_2^{(0)}(i\omega_n)G_2^{(0)}(-i\omega_n)\Lambda_\sigma^{12}(i\omega_n)\Lambda_\sigma^{12}(-i\omega_n)\Lambda_\sigma^{21}(i\omega_n)\Lambda_\sigma^{21}(-i\omega_n). \quad (41)$$

Принимая во внимание решение (35)

$$\Lambda_\sigma^{12}(i\omega_n)\Lambda_\sigma^{21}(i\omega_n) = -\frac{p^2(i\omega_n)}{2}, \quad (42)$$

и определение  $q_\sigma^l$  можно получить

$$D_s = (\Delta_4^{(0)})^2 \left( \frac{1}{(2\lambda)^2} - 1 \right)^2 = 0 \quad (43)$$

Видно, что это условие равенства нулю этого детерминанта соответствует случаю равенства  $\lambda = \pm \frac{1}{2}$ , что соответствует синглетной сверхпроводимости.

В Главе 5 был развит диаграммный подход анализа модели Андерсона-Холстейна в предположении сильного кулоновского взаимодействия примесных электронов, а также сильного электрон-фононного взаимодействия этих электронов с оптическими фононами.

Гамильтониан модели Андерсона-Холстейна имеет вид

$$\begin{aligned}
H &= H_{el} + H_{ph} + H_{hyb} + H_{el-ph}, \\
H_{el} &= \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon(\vec{k}) C_{\vec{k}\sigma}^+ C_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_f^0 f_{\sigma}^+ f_{\sigma} + U_0 n_{\uparrow} n_{\downarrow}, \\
H_{ph} &= \hbar\omega_0 (a^+ a + \frac{1}{2}), \quad q = \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^+), \quad p = \frac{i}{\sqrt{2}} (a^+ - a), \\
H_{hyb} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}\sigma} (V_{\vec{k}} f_{\sigma}^+ C_{\vec{k}\sigma} + V_{\vec{k}}^* C_{\vec{k}\sigma}^+ f_{\sigma}), \\
H_{el-ph} &= \bar{g} q n, \quad n = \sum_{\sigma} n_{\sigma}, \quad n_{\sigma} = f_{\sigma}^+ f_{\sigma}
\end{aligned} \tag{44}$$

где  $q$  и  $p$  – локальная координата и импульс оптических фононов,  $\omega_0$  – их частота,  $a(a^+)$ ,  $C_{\vec{k}\sigma} (C_{\vec{k}\sigma}^+)$  и  $f_{\sigma} (f_{\sigma}^+)$  – операторы уничтожения (рождения) фононов, электронов проводимости и примесных электронов соответственно,  $\varepsilon(\vec{k})$  – кинетическая энергия электронов проводимости,  $\varepsilon_f^0$  – локальная энергия примесных электронов (обе величины энергии отсчитываются от химического потенциала системы  $\mu_0$ :  $\varepsilon(\vec{k}) = \xi(\vec{k}) - \mu_0$ ,  $\varepsilon_f^0 = \bar{\varepsilon}_f^0 - \mu_0$ ),  $U_0$  – одноузельное кулоновское отталкивание примесных электронов с противоположными спинами,  $V_{\vec{k}}$  – матричный элемент гибридизации,  $N$  – число узлов решетки,  $\bar{g}$  – константа электрон-фононного взаимодействия.

Поскольку оба взаимодействия полагаются сильными, то при построении теории возмущений они были включены в гамильтониан нулевого приближения, в то время как оператор гамильтониана, отвечающий гибридизации d-состояний локализованных электронов с s(p)- состояниями электронов проводимости был принят за возмущение. Для исключения линейного по фононной координате члена было использовано преобразование Ланга-Фирсова [32].

В этом случае сильное электрон-фононное взаимодействие определяет формирование поляронов с «тяжелыми» фононными облаками, окружающими атом примеси. При этом возникает новая группа средних произведений, сформированная из операторов фононных облаков  $\Phi_0(\tau_1\tau_2|\tau_3\tau_4)$ . Для этой группы была предложена обобщенная теорема Вика, полученная с помощью приближения Лапласа сильной связи.

$$\Phi_0(\tau_1\tau_2|\tau_3\tau_4) \cong \Phi_0(\tau_1|\tau_3)\Phi_0(\tau_2|\tau_4) + \Phi_0(\tau_1|\tau_4)\Phi_0(\tau_2|\tau_3) \tag{45}$$

Обобщение (45) на многовременные аргументы рассматривается как теорема Вика для функций Грина фононных облаков в режиме сильно связанных поляронов.

В рассматриваемом пределе сильной связи  $\alpha \gg 1$  с помощью приближения Лапласа, Фурье-образ функций Грина нулевого приближения фононных облаков был вычислен в работах [33, 34] и имеет вид:

$$\Phi_0(i\Omega) = \frac{2\omega_c}{\Omega^2 + \omega_c^2}, \quad \omega_c = \alpha\omega_0. \quad (46)$$

Это выражение представляет собой гармонический пропагатор коллективной моды фононов, принадлежащих поляронному облаку с коллективной частотой  $\omega_c$  (концепция свободных коллективных осцилляций фононных облаков, окружающих поляроны).

С помощью диаграммной техники была исследована динамика фононных облаков поляронов, и установлен процесс перенормировки их коллективной частоты.

$$\Phi(i\Omega) = \frac{\omega_c}{\Omega^2 + \omega_c^2 + 2\omega_c\Pi(i\Omega)} \quad (47)$$

Полюс этого уравнения определяет перенормировку коллективной фононной частоты  $\omega_c$ . Новая частота определяется из уравнения

$$E^2 - \omega_c^2 + 2\omega_c\Pi(E) = 0. \quad (48)$$

Простейшая поляризационная функция  $\Pi_2(i\Omega)$  в условиях парамагнетизма ( $\bar{\sigma} = -\sigma$ ) нормального состояния определяется простейшими функциями Грина нулевого приближения электронов проводимости и локализованных примесных атомов

$$\Pi_2(i\Omega) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega} G_{\sigma}^0(i\omega) g_{\sigma}^0(i\omega - i\Omega). \quad (49)$$

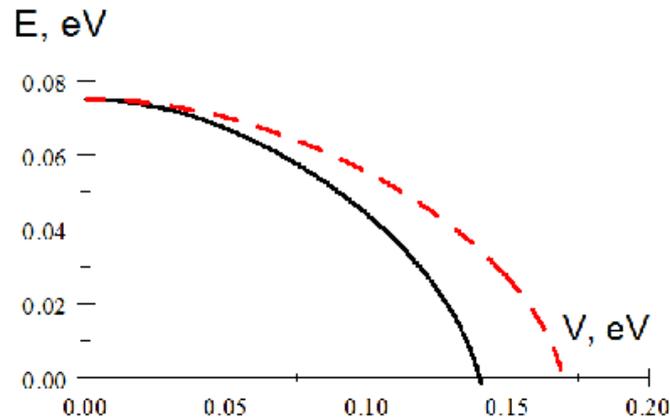
Эти функции были вычислены в простейшем приближении и с их учетом (49) имеет вид:

$$\begin{aligned} \Pi_2(i\Omega) = & \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\sigma} |V_{\vec{k}}|^2 \left\{ \frac{1-n_{\bar{\sigma}}}{i\Omega - \varepsilon(\vec{k}) + \varepsilon_f} \left[ \frac{1}{e^{\beta\varepsilon(\vec{k})} + 1} - \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_f} + 1} \right] + \right. \\ & \left. + \frac{n_{\bar{\sigma}}}{i\Omega - \varepsilon(\vec{k}) + U + \varepsilon_f} \left[ \frac{1}{e^{\beta\varepsilon(\vec{k})} + 1} - \frac{1}{e^{\beta(U+\varepsilon_f)} + 1} \right] \right\} \end{aligned} \quad (50)$$

С помощью уравнения (48) для частного случая  $T = 0$  и нулевой плотности электронных состояний  $\rho(E)$ :

$$\rho(E) = \frac{1}{2W} \begin{cases} 1, E < |W| \\ 0, E > |W| \end{cases} \quad (51)$$

где  $W$  – ширина зоны, в настоящей работе была исследована зависимость энергии коллективной моды  $E$  от параметра гибридизации  $V$ . В результате было получено, что коллективная мода фононных облаков в случае  $T=0$  затухает по мере усиления гибридизации.



**Рис.7.** Энергия коллективной моды  $E$  в зависимости от параметра гибридизации  $V$  для различных значений ширины зоны:  $W=0.5$  эВ (сплошная линия) и  $W=1$  эВ (штриховая линия). При расчете для других параметров были взяты следующие значения:

$$\omega c = 0.075 \text{ эВ}, U = 5.85 \text{ эВ}, \varepsilon_f = -0.095 \text{ эВ}$$

Нами была сформулирована система уравнений типа Дайсона, определяемая соотношением между полными функциями Грина примесных электронов и их корреляционными функциями, а также система уравнений Дайсона для полных ФГ электронов проводимости и их массовых операторов. Были получены диаграммы для корреляционных функций в первом порядке теории возмущений, как в нормальном, так и сверхпроводящем состоянии. Было доказано, что корреляционные функции уравнения типа Дайсона локализованных электронов  $\Lambda$ ,  $Y$  и  $\bar{Y}$  совпадают с массовыми операторами уравнений Дайсона для функций Грина электронов проводимости.

## ОБЩИЕ ВЫВОДЫ И РЕКОМЕНДАЦИИ

Все цели диссертации были выполнены. В работе развит диаграммный подход сильной связи, предложенный В.А. Москаленко в 1991 г. [15, 16] для исследования термодинамических свойств систем, описываемых моделью Хаббарда, межорбитального корреляционного эффекта, а также совместного эффекта сильного кулоновского и электрон-фононного взаимодействия на электронные процессы в этих системах.

Исследования были выполнены на основании модели Хаббарда, двукратно вырожденных моделей Хаббарда и примесной Андерсона и модели Андерсона-Холстейна, которая учитывает также помимо сильного взаимодействия электронов друг с другом электрон-фононное взаимодействие. В последнем случае оба взаимодействия полагаются сильными.

Диаграммная техника, развиваемая в работе, основывается на теореме Вика, обобщенной на сильно коррелированные системы. Невозможность использования обычной теоремы Вика из-за не билинейности гамильтонианов нулевого приближения, включающих в себя энергию взаимодействия, преодолевается благодаря учету многочастичных структур – неприводимых функций Грина. В этих неприводимых функциях Грина отражены как спиновые, зарядовые, так и парные флуктуации системы. Обобщенная теорема Вика была использована для систем локализованных электронов в  $d(f)$ -состояниях во всех моделях, для подсистемы же  $s(p)$ -электронов в двукратно вырожденной примесной модели Андерсона и «свободных» оптических фононов в модели Андерсона-Холстейна была использована обычная теорема Вика. Была сформулирована также теорема Вика для пропагаторов фононных облаков в режиме сильного электрон-фононного взаимодействия.

**Во-первых**, в диссертации развивается диаграммная техника для модели Хаббарда, и с ее помощью доказано свойство стационарности термодинамического потенциала модели. Было введено понятие туннельной функции Грина, и получено для нее уравнение типа Дайсона. Найден массовый оператор, который при константе разложения в ряд теории возмущений  $\lambda$  равной 1 (введенной нами в гамильтониан), совпадает с корреляционной функцией. Далее нами установлено точное соотношение между одночастичной ФГ и термодинамическим потенциалом системы (благодаря тому, что последний выражается через среднее сильно связанных диаграмм оператора эволюции). Это соотношение содержит дополнительное интегрирование по константе разложения  $\lambda$ . С целью обойти это интегрирование, нами был введен специальный функционал, составленный из скелетных диаграмм оператора эволюции, и произведена вариация этого функционала по найденному

нами массовому оператору и найдено, что она равна нулю. Затем положив  $\lambda = 1$  и сравнив этот функционал с диаграммами для термодинамического потенциала  $\Omega$ , выявив их совпадение, нами было установлено свойство стационарности термодинамического потенциала модели Хаббарда. Аналогичная теорема была доказана и для сверхпроводящего состояния. В этом случае предполагалось существование сверхпроводящих пар электронов и ненулевых квазисредних Боголюбова. Поскольку неприводимые функции Грина в фазе сверхпроводимости могут содержать любое четное число операторов рождения и уничтожения фермионов, тогда как в нормальном – число обоих типов одинаково, было использовано понятие квантового зарядового числа, которое автоматически учитывает все возможности рассматривать интерференции частиц и дырок в сверхпроводящем состоянии. На основании сравнения полученных результатов с аналогичными для периодической модели Андерсона [17], мы пришли к выводу, что с термодинамической точки зрения периодическая модель Андерсона переходит в модель Хаббарда, если заменить функции Грина электронов проводимости в периодической модели Андерсона туннельными функциями Грина модели Хаббарда.

**Во-вторых**, диаграммная теория сильной связи была обобщена на системы с орбитальным вырождением, а именно для анализа двукратно вырожденных моделей Андерсона (примесной) и Хаббарда. Была построена теория возмущений в атомном (локальном) пределе для обеих моделей. Для модели Андерсона в этом пределе также определена спектральная функция. В обеих моделях для одночастичных локализованных сильно взаимодействующих электронов были получены уравнения типа Дайсона. Было показано нами, что диаграммная теория орбитально вырожденной модели Хаббарда оказывается аналогичной орбитально невырожденной модели, если в последней заменить числовые функции Грина двухрядными матрицами, в которых диагональные элементы соответствуют межорбитальным переходам, а недиагональные элементы – внутриорбитальным переходам. В простейшем приближении цепочечных диаграмм для модели Хаббарда была вычислена плотность электронных состояний на уровне Ферми, которая определяется нулевой плотностью состояний. Мы показали, что в этом приближении частный случай половинного заполнения электронных энергетических зон системы соответствует только диэлектрическому состоянию системы. Аналогичный результат в этом приближении известен для невырожденной модели Хаббарда, когда плотность электронных состояний равна нулевой функции плотности состояний и имеет вид  $\rho_0(E^2 - \mu^2)/E$  [35].

В рамках двукратно вырожденной модели Андерсона, просуммировав бесконечный класс диаграмм определенного типа, мы получили приближенное выражение для

корреляционных функций (в частности, для сверхпроводящих параметров порядка) и определили плотность электронных состояний. Было показано нами, что при низких температурах, состояние системы может быть только металлическим, а межорбитальный корреляционный эффект дает положительный вклад в это металлическое состояние. Получены и проанализированы нами линейные уравнения для сверхпроводящих параметров порядка, и сформулировано условие для реализации синглетной сверхпроводимости и определения критической температуры в системе.

**В третьих**, был развит диаграммный подход для модели Андерсона-Холстейна в предположении сильного кулоновского взаимодействия примесных электронов и сильного электрон-фононного взаимодействия этих электронов с оптическими фононами. При этом в гамильтониан нулевого приближения были включены все взаимодействия в системе, а разложение в ряд теории возмущений было выполнено по параметру гибридизации. Было применено каноническое преобразование Ланг-Фирсова, которое свело решаемую задачу к рассмотрению движущихся поляронов (электронов окруженных тяжелыми фононными облаками). При исследовании динамики фононных облаков, было показано, что с ростом параметра гибридизации энергия коллективной моды фононных колебаний падает. Были выведены уравнения типа Дайсона для поляронных функций Грина в общем случае (включая аномальные функции Грина), и получено совпадение их массовых операторов с массовыми операторами для системы электронов проводимости.

**Личный вклад автора в представленные результаты:** автор изучила и проанализировала литературу по тематике диссертации, освоила метод диаграммной техники для сильно коррелированных систем, выполнила все расчеты, провела анализ и синтез результатов и внесла свой вклад в написание статей и подготовку рисунков для этих статей, связанных с результатами, представленными в данной диссертации.

**Рекомендации:**

Представляет интерес учесть неприводимые функции Грина при анализе перехода металл - диэлектрик Мотта в рамках двукратно вырожденной модели Хаббарда, а также вычисление термодинамических характеристик модели, таких как, например, удельная теплоемкость.

Можно предположить, что куперовские пары, образованные d- электронами, находящимися в состоянии отсутствия окружения фононных облаков, дают более значимый вклад в сверхпроводимость примесной модели Андерсона, нежели, образованные электронами, находящимися в состоянии с тяжелыми фононными облаками. Это предположение может подтвердиться при дальнейшем исследовании модели Андерсона-Холстейна.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] KOLLER, W., MEYER, D., ONO, Y., HEWSON, A. C., Phase diagram and dynamic response functions of the Holstein-Hubbard model. In: *Europhys. Lett.*, 2004, vol. 66, nr. 4, pp. 559–564, arXiv: cond-mat/0312367.
- [2] SCHUBIN, S.P., WONSOWSKII, S.V. On the electron theory of metals. In: *Proc. Roy. Soc. A*, 1934, vol. 145, nr. 854, pp.159-180. ISSN 1364-5021, 1471-2946
- [3] SCHUBIN, S.P., WONSOWSKY, S. Zur Elektronentheorie der Metalle I. In: *Phys. Zs. UdSSR*. 1935, vol. 7, nr. 1, pp. 292-328. ISSN 0369-9811
- [4] SCHUBIN, Von. S., WONSOWSKY S. Zur Elektronentheorie der Metalle II. In: *Phys. Zs. UdSSR*. 1936, vol. 10, nr. 3, pp. 348-377. ISSN 0369-9811
- [5] БОГОЛЮБОВ, П.И., ТЯБЛИКОВ, С.В. Об одном применении теории возмущений к полярной модели металла. In: *ЖЭТФ*. 1949, vol. 19, nr.3 pp. 251-255. ISSN 0044-4510.
- [6] БОГОЛЮБОВ, П.И., ТЯБЛИКОВ, С.В. Приближенный метод нахождения низших энергетических уровней электронов в металле. In: *ЖЭТФ*. 1949, vol. 19, pp. 256-268. ISSN 0044-4510.
- [7] HUBBARD, J., Electron correlations in narrow energy bands. In: *Proc. Roy. Soc. A* 1963. vol. 236. nr. 1365. pp. 238-257. ISSN 1364-5021, 1471-2946
- [8] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands II. The degenerate band case. In: *Proc. Roy. Soc. A* 1964, vol. 277 nr. 1369, pp.237-259. ISSN 1364-5021, 1471-2946.
- [9] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands.III. An improved Solution. In: *Proc. Roy. Soc. A*. 1964, vol. 281, nr.1386, pp. 401-419. ISSN 1364-5021, 1471-2946.
- [10] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. IV. The atomic representation. In: *Proc. Roy. Soc. A*. 1965. vol. 285, nr. 1403, pp. 542-560. ISSN 1364-5021, 1471-2946.
- [11] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. V. A Perturbation Expansion about the Atomic Limit. In: *Proc. Roy. Soc. A*. 1967, vol. 296, nr. 1444, pp. 82-99. ISSN 1364-5021, 1471-2946.
- [12] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands.VI. The connection with many-body perturbation theory. In: *Proc. Roy. Soc. A*. 1967, vol. 296, nr. 1444, pp. 100-112. ISSN 1364-5021, 1471-2946.
- [13] ANDERSON, P.W. Localized Magnetic States in Metals. In: *Phys. Rev.* 1961, vol.124, nr. 1, pp. 41-53. ISSN 0031-899X, 1536-6065.
- [14] *Theoretical Methods for Strongly correlated electrons*. Editors: SEINEÏCHAL, D., TREMBLAY, A-M., BOURBONNAIS, C. Canada: CRM series in Mathematical Physics. 2004, 380 p. ISBN 13: 978-0387008950 ; ISBN 10: 0387008950.

- [15] МОСКАЛЕНКО, В.А., *Обобщенная теорема Вика для электронных систем с сильными корреляциями*. Вопросы квантовой теории конденсированных сред: [сб. ст.]. Кишинев: Штиинца. 1990, pp. 122-134. ISBN 5-376-00774-X.
- [16] ВЛАДИМИР, М.И., МОСКАЛЕНКО, В.А. Диаграммная техника для модели Хаббарда. In: *ТМФ* 1990, vol. 82, nr. 3, pp. 428–437, 2305-3135, 0564-6162 ; VLADIMIR, M.I., MOSKALENKO, V.A. Diagram technique for the Hubbard model. In: *Theoret. and Math. Phys.* 1990, vol. 82, nr. 3, pp. 301–308. ISSN 0040-5779, 1573-9333
- [17] МОСКАЛЕНКО, В.А., ДОХОТАРУ, Л.А., Читро, Р. Диаграммная теория для периодической модели Андерсона. Свойство стационарности термодинамического потенциала. In: *ТМФ*. 2010, vol. 162, nr. 3, pp. 439–458. ISSN 0564-6162, 2305-3135; MOSKALENKO, V.A., DOHOTARU, L.A., CITRO, R. Diagram theory for the periodic Anderson model: Stationarity of the thermodynamic potential. *Theoret. and Math. Phys.* 2010, vol. 162, nr. 3, pp. 366–382. ISSN 0040-5779, 1573-9333.
- [18] LUTTINGER, J.M., WARD, J.C. Ground-State Energy of a Many-Fermion System. II. In: *Phys. Rev.* 1960, vol. 118, nr. 5, pp. 1417-1427. ISSN 0031-899X, 1536-6065
- [19] RICHARD, P., SATO, T., NAKAYAMA, K., SOUMA, S. *et. al.* Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy of the Fe-Based Ba<sub>0.6</sub>K<sub>0.4</sub>Fe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> High Temperature Superconductor: Evidence for an Orbital Selective Electron-Mode Coupling. In: *Phys. Rev. Lett.* 2009, vol. 102, nr. 4, pp. 047003 {4}. ISSN 0031-9007; 1079-7114.
- [20] GUNNARSSON, O. Superconductivity in fullerenes In: *Rev. Modern Phys.* 1997, 69, nr. 2, pp. 575–606. ISSN 1539-0756.
- [21] GWEON, Gh., SASAGAWA, T., ZHOU, S. et al. An unusual isotope effect in a high-transition-temperature superconductor. In: *Nature*. 2004, vol. 430, pp. 187–190. ISSN 1476-4687, 0028-0836
- [22] FRANCK, J. Pm. *Physical Properties of High Temperature Superconductors IV*. Singapore: World Scientific. 1994, pp. 189–293. ISBN 9814525146, 9789814525145
- [23] WEN-MIN, H., HSIU-HAU, L. Anomalous isotope effect in iron-based superconductors. In: *Nature Sci Rep.* 2019, vol. 9, nr. 1, pp. 5547. ISSN 2045-2322
- [24] АЛЕКСАНДРОВ, А.С., КРЕБС А.Б., Поляроны в высокотемпературных сверхпроводниках. In: *УФН*. 1992, vol. 162, nr. 5, pp. 1–85; ISSN 0042-1294, 1996-6652 ALEXANDROV, A. S, KREBS A. B. Polarons in high-temperature superconductors. In: *Sov. Phys. Usp.* 1992, vol. 35, nr. 5, pp. 345–383. ISSN 1063-7869, 1468-4780
- [25] ALEXANDROV, A.S. Superconducting Polarons and Bipolarons. In: *Polarons in Advanced Materials*. Springer Series in Materials Science. 2007, vol. 103, pp. 257–310. ISBN 978-1-4020-6347-3; 978-1-4020-6348-0.
- [26] MOSKALENKO, V.A., ENTEL P., MARINARO, M., DIGOR, D.F. Strong interaction of correlated electrons with phonons: exchange of phonon clouds by polarons. In: *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 2003, vol. 124, nr. 3, pp. 700-713.; In: *JETP*, vol. 97, nr. 3, pp. 632-644. ISSN 0044-4510.
- [27] ARMITAGE, N.P., FOURNIER, P., and GREENE, R.L. Progress and perspectives on electron-doped cuprates. In: *Rev. Mod. Phys.* 2010, vol. 82, nr. 3, pp. 2421-2487. ISSN 0034-6861 , 1539-0756

- [28] ВАКАРУ, С.И., ВЛАДИМИР, М.И. МОСКАЛЕНКО, В.А. *Диаграммная техника для Модели Хаббарда II. Переход металл–диэлектрик*. In: *ТМФ*. 1990, vol. 85, nr. 2, pp. 248–257; ISSN 0564-6162, 2305-3135; VAKARU, S.I., VLADIMIR, M.I., MOSKALENKO, V.A. Diagram technique for the Hubbard model. II. Metal-insulator transition. In: *Theoret. and Math. Phys.* 1990, vol. 85, nr. 2, pp. 1185–1192. ISSN 0040-5779, 1573-9333.
- [29] БОГОЛЮБОВ, Н.Н., МОСКАЛЕНКО, В.А. К вопросу о существовании сверхпроводимости в модели Хаббарда. *ТМФ*. In: 1991, vol. 86, nr. 1, pp. 16–30; ISSN 0564-6162, 2305-3135; BOGOLYUBOV, N.N., MOSKALENKO, V.A. On the existence of superconductivity in the Hubbard model. In: *Theoret. and Math. Phys.* 1991, vol. 86, nr. 1, pp. 10–19. ISSN 0040-5779, 1573-9333.
- [30] БОГОЛЮБОВ, Н.Н., МОСКАЛЕНКО, В.А. Сверхпроводимость в модели Хаббарда с отклонением от половинного заполнения. In: *ТМФ*. 1992, vol. 92, nr. 2, pp. 182–190 ISSN 0564-6162, 2305-3135; Bogolyubov, N.N., Moskalenko, V.A. Superconductivity in the Hubbard model with deviation from half filling. In: *Theoret. and Math. Phys.* 1992, vol. 92, nr. 2, pp. 820–825. ISSN 0040-5779, 1573-9333
- [31] MOSKALENKO, V.A., ENTEL, P., DOHOTARU, L.A., DIGOR, D.F., CITRO, R. *Diagrammatic theory for Anderson impurity model* Dubna. 2008, 36 p. (Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research).
- [32] ЛАНГ, И.Г., ФИРСОВ, Ю.А. Кинетическая теория полупроводников с малой подвижностью. In: *ЖЭТФ*. 1962, vol. 43, nr. 11, pp. 1843–1860; LANG, I.G., FIRSOV, Y.A. Kinetic Theory of Semiconductors with Low Mobility. In: *Zh. Eksper. Teor. Fiz.* 1962, vol. 43, pp. 1843. ISSN 0044-4510.
- [33] MOSKALENKO, V.A. Electron-phonon interaction of strong correlated systems. In: *ТМФ*. 1997, vol. 111, nr. 3, 439–451. ISSN 0564-6162, 2305-3135; In: *Theoret. and Math. Phys.* 1997, vol. 111, nr. 3, pp. 744–753. ISSN 0040-5779, 1573-9333.
- [34] MOSKALENKO, V.A. Electron-phonon interaction of strongly correlated systems. II. Strong coupling limit. In: *ТМФ*. 1997, vol. 113, nr. 3, 432–437. ISSN 0564-6162, 2305-3135; *Theoret. and Math. Phys.* 1997, vol. 113, nr.3, pp. 1559–1563. ISSN 0040-5779, 1573-9333
- [35] ИЗЮМОВ, Ю.А., СКРЯБИН, Ю.Н., *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем*, Москва: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987, p. 264

## АННОТАЦИЯ

к диссертации «**Диаграммный анализ систем сильно коррелированных электронов, взаимодействующих между собой и с оптическими фононами**», представленной Ириной Чеботарь на соискание ученой степени доктора физических наук по специальности 131.01 «Математическая физика», Кишинэу, 2024

Диссертация написана на русском языке и состоит из введения, 5 глав, заключения и рекомендаций, списка литературы из 152 источников. Диссертация содержит 143 страниц основного текста, 29 рисунков и 307 формул. Результаты диссертации опубликованы в 16 работах.

**Ключевые слова:** диаграммная техника, сильно коррелированные системы, теорема Вика, переход металл-диэлектрик Мотта, высокотемпературная сверхпроводимость, двукратно вырожденная модель Хаббарда, двукратно вырожденная модель Андерсона, модель Андерсона-Холстейна.

**Цели диссертации:** доказать свойство стационарности термодинамического потенциала модели Хаббарда; исследовать влияние как внутриорбитального, так и межорбитального корреляционного эффекта на электронные процессы орбитально вырожденных систем, а также роли сильного взаимодействия оптических фононов с электронами на свойства сильно коррелированных электронных систем.

**Задачи диссертации:** развить диаграммную технику для модели Хаббарда, двукратно вырожденных моделей Хаббарда и Андерсона, а так же Андерсона-Холстейна, с помощью которой получить соответствующие уравнения и динамические величины.

**Научная новизна и оригинальность результатов.** Было доказано свойство стационарности термодинамического потенциала модели Хаббарда. В рамках двукратно вырожденной модели показано, что в приближении Хаббарда-I случай половинного заполнения зоны, соответствует только диэлектрическому состоянию, а орбитально-вырожденная теория оказывается аналогичной орбитально невырожденной, если в последней заменить числовые функции Грина двухрядными матрицами, в которых диагональные элементы соответствуют межорбитальным переходам, а недиагональные – внутриорбитальным переходам. В рамках двукратно вырожденной модели Андерсона было показано, что при низких температурах, состояние системы может быть только металлическим, а межорбитальный корреляционный эффект дает положительный вклад в это металлическое состояние; были получены и проанализировали линейные уравнения для сверхпроводящих параметров порядка и сформулировано условие для реализации синглетной сверхпроводимости и определения критической температуры. С помощью диаграммной техники была проанализирована модель Андерсона-Холстейна, в рамках которой была исследована динамика фононных облаков. Показано, что коллективная мода фононных облаков в случае  $T=0$  затухает по мере усиления гибридизации.

**Полученные результаты, способствующие решению важной научной задачи,** заключаются в обобщении диаграммной техники сильной связи Москаленко для анализа модели Хаббарда, двукратно вырожденных моделей Хаббарда и Андерсона, а так же Андерсона-Холстейна, что позволяет исследовать свойства сильно коррелированных материалов, в том числе с орбитальным вырождением электронных уровней и с сильной электрон-фононой связью.

**Теоретическая значимость и прикладная ценность.** Диаграммный подход анализа сильно коррелированных систем и результаты, которые он позволяет получить представляет, как методологическую и фундаментальную, так и прикладную в перспективе ценность.

**Внедрение научных результатов:** исследования, представленные в этой диссертации, были успешно внедрены в рамках национального проекта (11.817.05.02F).

## ADNOTARE

**la teza „Analiza diagramatică a sistemelor cu electroni puternic corelați ce interacționează între ei și cu fononii optici”, elaborată de Irina Cebotari pentru conferirea gradului științific de Doctor în Științe Fizice doctor în științe fizice la Specialitatea 131.01”Fizică matematică”, Chișinău, 2024.**

Teza este scrisă în limba rusă și constă din introducere, 5 capitole, concluzii generale și recomandări, bibliografie din 152 de titluri. Teza conține 143 pagini de text de bază, 29 de figuri și 307 de formule. Rezultatele tezei au fost publicate în 16 lucrări științifice.

**Cuvinte cheie:** tehnica diagramatică, sisteme puternic corelate, teorema lui Wick, tranziție metal-izolator Mott, supraconductivitate la temperaturi înalte, modelul Hubbard dublu degenerat, modelul Anderson dublu degenerat, modelul Anderson-Holstein.

**Scopul tezei:** demonstrarea proprietății staționarității față de operatorul de masă al potențialului termodinamic al modelului Hubbard; studiul influenței efectelor de corelație atât intraorbitale, cât și interorbitale asupra proceselor electronice ale sistemelor orbital degenerate, precum și, rolul interacțiunii puternice a fononilor optici cu electronii asupra proprietăților supraconductoare ale sistemelor electronice puternic corelate.

**Obiectivele tezei:** dezvoltarea tehnicii diagramatice pentru modelul Hubbard, modelele Hubbard și Anderson dublu degenerate, precum și Anderson-Holstein, cu ajutorul căreia să se obțină ecuațiile și mărimile dinamice corespunzătoare.

**Noutatea științifică și originalitatea rezultatelor:** A fost demonstrată proprietatea de staționaritate a potențialului termodinamic al modelului Hubbard. În cadrul modelului dublu degenerat, se arată că în aproximarea Hubbard-I, cazul semi-ocupării benzii, doar starea dielectrică se observă, iar teoria orbital degenerată se dovedește a fi similară cu cea orbital nedegenerată, dacă în cel din urmă înlocuim funcțiile numerice ale lui Green cu matrici pătrate, în care elementele diagonale corespund tranzițiilor interorbitale, iar tranzițiile nediagonale – intra-orbitale. În cadrul modelului Anderson dublu degenerat, s-a demonstrat că la temperaturi scăzute, starea sistemului poate fi doar metalică, iar efectul de corelație interorbitală contribuie pozitiv la această stare metalică. Au fost obținute și analizate ecuații liniare pentru parametrii de ordine supraconductori și a fost formulată o condiție pentru realizarea supraconductivității singlet și pentru determinarea temperaturii critice. Tehnica diagramatică a fost dezvoltată pentru modelul Anderson-Holstein, și cu ajutorul acesteia a fost studiată dinamica norilor de fononi. Se arată că modul colectiv al norilor de fononi în cazul lui  $T=0$  se descompune odată cu creșterea parametrului de hibridizării.

**Rezultatul obținut care contribuie la soluționarea unei probleme științifice importante** constă în generalizarea tehnicii diagramatice a lui Moskalenko pentru analiza modelului Hubbard, modelelor Hubbard și Anderson dublu degenerate, precum și Anderson-Holstein, ceea ce îl face posibil să se studieze proprietățile materialelor puternic corelate, inclusiv cele cu niveluri electronice de degenerare orbitală și cu cuplare puternică electron-fononică.

**Semnificația teoretică și valoarea aplicativă.** Abordarea diagramatică a analizei sistemelor puternic corelate și a rezultatelor pe care le permite să le obțină este atât de valoare fundamentală, metodologica cât și aplicativă de perspectivă în viitor.

**Implementarea rezultatelor științifice:** cercetarea prezentată în această teză a fost implementată cu succes în cadrul unui proiect național (11.817.05.02F).

## ABSTRACT

**to the thesis "Diagram analysis of systems of strongly correlated electrons interacting with each other and with optical phonons", presented by Irina Chebotar for conferring the scientific degree of Ph.D. in Physics, Speciality 131.01"Mathematical Physics", Chişinau, 2024.**

The thesis has been written in Russian and consists of Introduction, 5 chapters, general Conclusions and recommendations, List of 152 references. The thesis contains 143 pages of basic text, 29 figures and 307 formulae. The results presented in the thesis are published in 16 scientific papers.

**Keywords:** diagram technique, strongly correlated systems, Wick's theorem, Mott metal-insulator transition, high-temperature superconductivity, twofold-degenerate Hubbard model, twofold-degenerate Anderson model, Anderson-Holstein model.

**The purpose of the Thesis:** the proof of the property of stationarity of the thermodynamic potential of the Hubbard model; studying the influence of both intra-orbital and inter-orbital correlation effects on the electronic processes of orbitally degenerate systems, as well as the role of the strong interaction of optical phonons with electrons on the superconducting properties of strongly correlated electronic systems.

**Research objectives:** the development of the diagram technique for the Hubbard model, twofold-degenerate Hubbard and Anderson models, as well as Anderson-Holstein, obtaining the corresponding equations and dynamic quantities.

**The scientific novelty and originality of the results:** The stationarity property of the thermodynamic potential of the Hubbard model was proved. Within the framework of the twofold-degenerate model, it is shown that in the Hubbard-I approximation, the case of half-filling of the band corresponds only to the dielectric state, and the orbitally degenerate theory turns out to be similar to the orbitally nondegenerate one, if in the latter we replace the numerical Green's functions with two-row matrices, in which the diagonal elements correspond to the interorbital transitions, and off-diagonal – intra-orbital transitions. Within the framework of twofold-degenerate Anderson model, it was shown that at low temperatures, the state of the system can only be metallic, and the interorbital correlation effect makes a positive contribution to this metallic state; linear equations for superconducting order parameters were obtained and analyzed, and a condition was formulated for the realization of singlet superconductivity and for determining the critical temperature. The diagram technique was developed for the Anderson-Holstein model, and the dynamics of polaron phonon clouds was studied using it. It is shown that the collective mode of phonon clouds in the case of  $T=0$  decays with increasing hybridization.

**The obtained result that contributes to the solution of an important scientific problem** consists in the generalization of Moskalenko's diagrammatic technique for the analysis of the Hubbard model, the two-fold degenerate Hubbard and Anderson models, as well as Anderson-Holstein, which allows us to study the properties of strongly correlated materials, including those with orbital degeneracy of electron levels and with strong electron-phonon coupling.

**Theoretical significance and applied value.** The diagrammatic approach to the analysis of strongly correlated systems and the results that it allows to obtain is of fundamental, methodological and applied value in the future.

**Implementation of scientific results:** the research presented in this thesis was successfully implemented within the framework of a national project (11.817.05.02F).

**UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA**  
**INSTITUTUL DE FIZICA APLICATĂ**

Cu titlu de manuscris  
C.Z.U. 517.958:538.9(043.3)

**CEBOTARI IRINA**

**ANALIZA DIAGRAMATICA A SISTEMELOR ELECTRONILOR  
PUTERNIC CORELAȚI, CARE INTERACȚIONEAZA ÎNTRE EI  
ȘI CU FONONII OPTICI**

**131.01 - FIZICA MATEMATICĂ**

Rezumatul tezei de doctor în științe fizice

**CHIȘINĂU, 2024**

**ЧЕБОТАРЬ ИРИНА**

**ДИАГРАММНЫЙ АНАЛИЗ СИСТЕМ СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ  
ЭЛЕКТРОНОВ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ МЕЖДУ СОБОЙ И С ОПТИЧЕСКИМИ  
ФОНОНАМИ**

**131.01 – МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА**

Автореферат диссертации на соискание ученой  
степени доктора физических наук

---

Aprobat spre tipar: 8.11.2024

Formatul hârtiei 60x84 1/16

Hârtie ofset. Tipar ofset.

Tiraj 25 ex.

Coli de tipar: 2.1

Comanda nr. 144/24

---

Centrul Editorial-Poligrafic al U.S.M.,  
str. A. Mateevici 60, MD-2009, Chişinău