

**ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ МОЛДОВЫ  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ**

На правах рукописи  
У.Д.К.:517.958:538.9(043.2)

**ЧЕБОТАРЬ ИРИНА**

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

**131.01 – МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА**

Диссертация на соискание ученой степени  
доктора физических наук

Научный руководитель:

Москаленко Всеволод, доктор хабилитат  
физико-математических наук, профессор,  
академик АНМ

Научный консультант:



Дохотару Леонид, доктор физико-  
математических наук, доцент

Автор:



Чеботарь Ирина

**КИШИНЕВ, 2024**

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

Cu titlu de manuscris  
C.Z.U.:517.958.538.9(043.2)

**CEBOTARI IRINA**

**ANALIZA DIAGRAMATICĂ A SISTEMELOR CU ELECTRONI PUTERNIC  
CORELAȚI CE INTERACȚIONEAZĂ ÎNTRE EI ȘI CU FONONII OPTICI**

**131.01 – FIZICA MATEMATICĂ**

Teză de doctor în științe fizice

Conducator științific:

Moscalenco Vsevolod, doctor habilitat în  
științe fizico-matematice, academician al AȘM

Consultant științific:



Dohotaru Leonid, doctor în științe fizico-  
matematice, confirențiar universitar

Autor :



Cebotari Irina

**CHIȘINĂU, 2024**

© Cebotari Irina. 2024

## СОДЕРЖАНИЕ

АННОТАЦИЯ.....	6
ADNOTARE .....	7
ABSTRACT .....	8
ВВЕДЕНИЕ .....	10
1 МАТЕРИАЛЫ С СИЛЬНЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ.....	21
1.1 Особенности электронного поведения в материалах с сильными корреляциями .....	21
1.2 Переход металл-диэлектрик Мотта-Хаббард.....	23
1.3 Сильно коррелированная сверхпроводимость.....	27
1.3.1 Классификация сверхпроводников с сильными корреляциями .....	27
1.3.2 Основы микроскопической теории сверхпроводимости.....	29
1.4 Развитие диаграммной техники для исследования СКС. ....	33
1.5 Межорбитальный корреляционный эффект.....	37
1.6 Системы с одновременно сильным взаимодействием электронов друг с другом и с фононами .....	39
1.7 Заключение по первой главе.....	43
2 ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА СИЛЬНОЙ СВЯЗИ МОСКАЛЕНКО.....	46
2.1 Мацубаровские функции Грина .....	46
2.1.1 Аномальные функции Грина. Матричный формализм Горькова-Набу.....	48
2.1.2 Запаздывающие Функции Грина. Спектральная функция .....	49
2.2 Теория возмущений для функции Грина.....	50
2.2.1 Диаграммная техника «Мацубары-Блоха» слабого взаимодействия. Теорема Вика. Уравнение Дайсона.....	54
2.2.2 Диаграммная техника сильной связи на примере модели Хаббарда. Обобщенная теорема Вика .....	58
2.3 Заключение по второй главе .....	66
3 СВОЙСТВО СТАЦИОНАРНОСТИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА МОДЕЛИ ХАББАРДА. ДИАГРАММНЫЙ ПОДХОД СИЛЬНОЙ СВЯЗИ .....	68
3.1 Нормальное состояние. ....	68
3.1.1 Диаграммная теория для модели Хаббарда .....	68
3.1.2 Свойство стационарности термодинамического потенциала .....	75

3.2	Сверхпроводящее состояние .....	77
3.2.1	Построение диаграммной теории .....	78
3.2.2	Свойство стационарности термодинамического потенциала. ....	83
3.3	Заключение по третьей главе.....	88
4	ДИАГРАММНЫЙ АНАЛИЗ МОДЕЛЕЙ ОРБИТАЛЬНО ВЫРОЖДЕННЫХ СКС ....	90
4.1	Двукратно вырожденная модель Хаббарда.....	90
4.1.1	Построение диаграммной теории в локальном приближении .....	91
4.1.2	Процессы делокализации.....	94
4.1.3	Вычисление плотности электронных состояний в приближение цепочечных диаграмм .....	97
4.2	Диаграммная теория двукратно вырожденной примесной Модели Андерсона ..	101
4.2.1	Двукратно вырожденная примесная модель Андерсона .....	101
4.2.2	Локальные свойства .....	102
4.2.3	Процесс делокализации. ....	105
4.2.4	Вычисление простейших корреляционных функций .....	110
4.2.5	Анализ основных уравнений .....	114
4.2.6	Сверхпроводящее состояние. Условия для определения критической температуры.....	117
4.3	Заключение по четвертой главе.....	123
5	ДИАГРАММНЫЙ АНАЛИЗ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА-ХОЛСТЕЙНА .....	126
5.1	Гамильтониан модели Андерсона-Холстейна .....	126
5.2.	Средние для операторов фононных облаков в режиме сильно связанных поляронов .....	128
5.3.	Динамика поляронных облаков.....	131
5.4.	Поляронные функции Грина.....	135
5.5.	Заключение по пятой главе .....	138
	СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	144
	ДЕКЛАРАЦИЯ ОБ ОТВЕТСТВЕННОСТИ .....	158
	CURICULUM VITAE .....	159

## 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 supraconductor 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", Chişinău, 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).

## СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ

**СКЭС** – сильно коррелированные электронные системы

**КС** – сильно коррелированные системы

**ВТСП** – высокотемпературная сверхпроводимость

**ПМХ** – переход Мотта-Хаббарда

**ТДП** – термодинамический потенциал

**ФГ** – функция Грина

**МХ** – модель Хаббарда

**ПМА** – примесная модель Андерсона

**НФГ** – неприводимая функция Грина

**ОТВ** – обобщенная теорема Вика

**ДТСП** – динамическая теория среднего поля

**DMFT** – Dynamical mean field theory

**АФМ** – антиферромагнетизм

## ВВЕДЕНИЕ

**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), которые проявляют 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 много вопросов фундаментального характера. Например, до конца не понятен механизм образования сверхпроводящих электронных пар в высокотемпературных сверхпроводниках.

Многие исследователи сходятся во мнении, что эти явления обусловлены эффектом сильной корреляции. Этот эффект ассоциирован, в первую очередь, с сильным кулоновским взаимодействием электронов друг с другом, а так же 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 то и другое вместе – называют сильно коррелированными. Сущность проблемы физики сильно коррелированных систем (СКС) заключается в возникающей в них конкуренции между стремлением электронов к локализации вблизи атомных остовов и к коллективизации и перемещению по узлам решетки.

Современная теория СКС основывается на гамильтоновом формализме, сформулированном на языке вторичного квантования. Модельные гамильтонианы, описывающие поведение электронов в таких системах, включают в себя параметр величины кулоновского взаимодействия электронов. Это полярная модель Шубина-Вонсовского [2-4], Боголюбова-Тябликова [5-6], Хаббарда [7-12] и Андерсона [13] (примесная, и ее обобщение – периодическая) и другие. Модель Хаббарда является самой простой из них и содержит минимум параметров. Она предложена Хаббардом в начале 60-ых гг. для описания поведения электронов в узкозонных системах, представленных соединениями переходных металлов, и опубликована в серии работ [7-12]. Основное допущение модели заключается в том, что на одном узле решетки может «находиться» не

более двух электронов в  $d(f)$ - состояниях с противоположно направленными проекциями спинов, которые взаимодействуют друг с другом с энергией кулоновского отталкивания  $U$ . Часть оператора Гамильтона, которая отвечает энергии взаимодействия в этой модели, может быть представлена в виде суммы гамильтонианов отдельных узлов. В модель входит так же член, ответственный за вероятность туннелирования электрона (кинетическую энергию) – интеграл перескока  $t(i-j)$  и, соответственно, определяющий ширину зоны проводимости  $W$ . При этом учитывается взаимодействие только электронов одного узла, в отличие от модели Боголюбова-Тябликова, в которой так же учитываются взаимодействие электронов соседних узлов. Соотношение  $U/W$  в некотором смысле является мерой электронных корреляций.

Немного ранее другая модель, рассматривающее сильное локальное взаимодействие электронов, была разработана Андерсоном в 1960 г. [13] для объяснения образования магнитных моментов в материалах, которые содержат примесные атомы из группы переходных материалов (в дальнейшем она находит более широкое применение при описании свойств СКС). Модель рассматривает две взаимодействующие системы электронов в твердом теле: систему электронов проводимости (электроны  $s$ ,  $p$ -оболочек атомов решетки) и систему локализованных электронов (спинов), в качестве которой рассмотрены электроны  $d$ - ( $f$ -) оболочек примесного атома переходного или редкоземельного металла. При этом локализованные электроны сильно коррелируют между собой с энергией взаимодействия  $U$ , испытывают обменное взаимодействие, а так же происходит гибридизация состояний локализации и проводимости ( $s(p)$ - $d$  гибридизация).

Во многих материалах орбитальное вырождение снимается полностью. Однако существуют системы, такие как некоторые оксиды  $3d$ - и  $4d$ - переходных металлов (рутенаты), сверхпроводники на основе железа (см., например, [14]) или фуллериды [15], в которых имеется орбитальное вырождение уровней локализованных электронов. В этих системах возникает так называемый межорбитальный корреляционный эффект, который обуславливается величиной обменного интеграла Хунда  $I_H$  (связи Хунда).

Такие системы называют «металлы Хунда». Связь Хунда – это величина, имеющая размерность энергии, ассоциированная с внутриатомным обменным взаимодействием, и которая уменьшает значение кулоновской энергии отталкивания двух электронов с параллельным спинами различных орбиталей, в отличие от двух электронов одной орбитали (цит. по [16], с. 138). Параметр Хунда может значительно влиять на физическую

картину, реализующуюся в этих материалах, как на сверхпроводящие свойства, так и на поведение перехода металл-диэлектрик Мотта. Минимальной моделью для изучения таких систем является двух орбитальная модель Хаббарда. Так же интерес представляет анализ моделей квантовых точек и магнитных примесей, таких как модели Кондо или примесная модель Андерсона с двукратным вырождением. Один из вопросов, который будет рассмотрен в работе, относится к межорбитальному корреляционному эффекту в определении таких фазовых переходов, как переход металл-диэлектрик Мотта и сверхпроводимость в многозонных системах.

Роль сильного электрон-фононного взаимодействия в этих явлениях так же недостаточно ясна, особенно это касается ВТСП. Экспериментальные данные, полученные при изучении изотопического эффекта в высокотемпературных сверхпроводниках (показывающего зависимость температуры сверхпроводящего перехода от массы изотопа соответствующего иона) достаточно противоречивы. Так, одни исследования показывают, что во многих высокотемпературных металлооксидах имеет место изотопический эффект по кислороду, и даже известны соединения, в которых его величина превышает предсказание теории сверхпроводимости БКШ. Например, исследование с использованием фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением [17] показало сильный необычный изотопический эффект, наблюдавшийся в образцах  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_y$  ( $\text{Bi-}^{221}\text{2}$ ) с различными изотопами кислорода. В более ранних работах [18] не было обнаружено значительной корреляции между температурой сверхпроводящего перехода и массами ионов решетки.

Еще более сложная картина вырисовывается в сверхпроводниках на основе железа (см. [19] и цитируемую литературу). Например, сильный изотопический эффект (и даже сильнее, чем в обычных сверхпроводниках) обнаруживается в  $\text{SmFeAs}(\text{O}, \text{F})$  и  $(\text{Ba}, \text{K})\text{Fe}_2\text{As}_2$  при замещении железа [20]. Наоборот, в  $(\text{Ba}, \text{K})\text{Fe}_2\text{As}_2$  наблюдается обратный изотопический эффект при различных изотопных замещениях [21]. Позже было высказано предположение, что изотопные замещения могут приводить к структурным изменениям [22], что еще больше усложняет картину.

Что касается теоретических исследований ясно, что чисто электрон-фононный механизм образования куперовских пар маловероятен, однако некоторые исследователи полагают, что электрон-фононное взаимодействие благоприятствует формированию сверхпроводящих пар электронов, а другие считают, что оно может непосредственно участвовать в механизме образования сверхпроводящих пар (см., например, [23-25]).

В зависимости от значения соответствующих параметров (как минимум, энергии кулоновского отталкивания  $U$  и константы электрон-фононного взаимодействия  $g$ ) может реализовываться различная физическая картина в отношении явления фазового перехода металл-диэлектрик Мотта.

Модель Холстейна [26] используется для изучения электрон-фононных взаимодействий. Самой простой моделью сильно-коррелированных электронов взаимодействующей с фононами является модель Хаббарда-Холстейна. Так же представляет интерес модель Андерсона-Холстейна. Модели Хаббарда и примесная Андерсона в данном случае дополняются системой фононов и членом ответственным за взаимодействие систем электронов с фононами. С целью выяснения роли одновременно сильного взаимодействия электронов друг с другом и оптическими фононами (что имеет место, например, в манганатах [27] и фуллеридах) мы проанализируем модель Андерсона-Холстейна как в нормальной, так и в сверхпроводящей фазах.

Актуальным остается так же вопрос развития методов анализа этих моделей, ведь разработанные для исследования систем со слабым взаимодействием методы не применимы. Предложены различные математические концепции, приближения и методы, как и аналитические, так и численные, пертурбативные, так и не пертурбативные, часть из которых представлена в работе [28]. Все они имеют свои преимущества и недостатки.

Один из методов анализа моделей СКС, который получает свое развитие в работе, предложен В. А. Москаленко в 1990 [29, 30]. Это метод диаграммной техники, основанный на обобщенной на системы с сильными корреляциями теореме Вика. Невозможность использования обычной теоремы Вика [31] из-за не билинейности гамильтонианов основного приближения, отвечающих системам с сильным взаимодействием по причине необходимости включить энергию взаимодействия в этот гамильтониан, решается благодаря учету многочастичных структур – неприводимых функций Грина или кумулянтов Куба. С помощью этого метода Москаленко В. А. и его коллегами проведен анализ модели Хаббарда [30] в целях изучения перехода металл-диэлектрик [32] и возможности возникновения сверхпроводимости в модели Хаббарда [33-34], а так же примесной модели Андерсона [35], в том числе и периодической [36,37], а так же изучены системы с сильной электрон-фононной связью [38-42] и др. Для периодической модели Андерсона с помощью диаграммной техники было доказано свойство стационарности термодинамического потенциала (ТДП) [43]. Изначально эта теорема была доказана для слабовзаимодействующих систем в нормальном состоянии с помощью диаграммной техники систем со слабым взаимодействием [44]. В этой работе

будет доказано свойство стационарности для модели Хаббарда, как в нормальной так и в сверхпроводящей фазе. Это необходимо, в том числе для последующего исследования термодинамических свойств систем с сильной связью.

Фундаментальное исследование этих систем имеет смысл в перспективе и для прикладных задач. Например, понимание механизма перехода металл-диэлектрик Мотта-Хаббарда (ПМХ) и управление им может привести к созданию элементов устройств с новой функциональностью, а исследование свойств высокотемпературных сверхпроводников и понимание механизмов этого явления перспективно с точки зрения возможности их использования в качестве линий электропередач. Задача сильного электрон-фононного взаимодействия в огромных молекулах на органической основе представляет интерес для молекулярной электроники и т. д.

Таким образом, актуальность и важность исследования диктуется фундаментальной (в том числе для решения прикладных задач в будущем) потребностью изучения материалов с сильными корреляциями и явлений, реализуемых в них. А именно изучения роли электрон-фононного взаимодействия в системах с сильным кулоновским взаимодействием электронов друг с другом, а так же сильной электрон-фононной связью, межорбитального корреляционного эффекта в многозонных системах в электронных процессах, исследования термодинамических свойств СКС, а так же и потребностью развития новых методов исследования.

#### **Цели и задачи исследования:**

##### **Цели работы:**

- 1) доказать свойство стационарности термодинамического потенциала модели Хаббарда, как в нормальном, так и сверхпроводящем состояниях;
- 2) учесть как межорбитальное, так и внутриорбитальное кулоновское взаимодействие в электронных процессах, а также исследовать роль связи Хунда в процессе фазового перехода Мотта в рамках двукратно вырожденной модели Хаббарда;
- 3) учесть как межорбитальное, так и внутриорбитальное кулоновское взаимодействие в электронных процессах, а также исследовать роль связи Хунда в процессе фазового ПМХ и при рассмотрении сверхпроводящей фазы в рамках двукратно вырожденной модели Андерсона;

- 4) исследовать роль совместного влияния сильного взаимодействия электронов друг с другом, а так же с фононами в высокотемпературной сверхпроводимости в рамках модели Андерсона-Холстейна;

Для выполнения этих целей работы необходимо решить следующие задачи:

1. используя предложенную в работах [29, 30, 32-34] диаграммную технику доказать свойство стационарности термодинамического потенциала систем, описываемых моделью Хаббарда в нормальной и сверхпроводящих фазах
  - сформулировать обобщенную теорему Вика для сильно коррелированных систем [15, 30], с помощью которой получить диаграммное разложение электронной функции Грина для модели Хаббарда;
  - определить с помощью диаграммного представления электронных функций Грина, как нормальных, так и аномальных (в случае сверхпроводящего состояния) корреляционную функцию и сформулировать уравнения типа Дайсона для этих функций;
  - установить точное соотношение между термодинамическим потенциалом и одночастичной электронной функцией Грина на основании известного соотношения между термодинамическим потенциалом системы и термодинамическим средним от оператора эволюции помощью введения специального функционала, который выражается через вакуумные скелетные диаграммы;
  - установить свойство стационарности термодинамического потенциала по отношению к изменению электронной корреляционной функции.
2. Обобщить диаграммную теорию, развитую для невырожденной модели Хаббарда [29, 30, 32] на орбитально вырожденную систему.
  - сформулировать термодинамическую теорию возмущений в локальном приближении, т.е. определить собственные функции и значения локальной части гамильтониана модели Хаббарда с двукратным вырождением – гамильтониана электронов одного узла решетки, который примем за гамильтониан основного приближения. Вычислить в этом приближении мацубаровские функции Грина;
  - получить уравнение типа Дайсона для одночастичной электронной функции Грина;

- исследовать переход Мотта-Хаббарда на основании приближения Хаббарда I, которое представляет собой приведение к суммированию только цепочечных диаграмм;
  - с помощью полученных функций Грина в приложении Хаббарда-I определить плотность электронных состояний на уровне Ферми и исследовать фазовый переход металл-диэлектрик.
3. Обобщить диаграммную теорию, развитую для невырожденной примесной модели Андерсона [35] на орбитально вырожденную систему.
- разработать теорию возмущений в локальном пределе (т.е. определить собственные функции и значения локальной части гамильтониана примесной модели Андерсона с двукратным вырождением – гамильтониана электронов системы без члена ответственного за  $d(f)-s(p)$  гибридизацию, который примем за гамильтониан основного приближения) и определить мацубаровские функции Грина в нормальном и сверхпроводящем состояниях;
  - сформулировать уравнения типа Дайсона для функций Грина примесных электронов;
  - получить и исследовать уравнения для сверхпроводящих параметров порядка, на основании которых сформулировать условие для реализации сверхпроводимости и определения критической температуры.
4. Обобщить диаграммную теорию, предложенную для сильно коррелированных электронов [30], на примесную модель Андерсона с учетом взаимодействия Холстейна между сильно коррелированными электронами и оптическими фононами.
- воспользоваться каноническим преобразованием Ланг-Фирсова [45] для исключения линейной по фононной координате члена гамильтониана модели Андерсона-Холстейна и появления взаимодействий между перенормированными электронами благодаря фононам;
  - сформулировать Обобщенную Теорему Вика для пропагаторов фононных облаков и исследовать динамику фононных облаков;
  - определить при помощи диаграммной техники и уравнение типа Дайсона для фононных функций Грина и корреляционные функции;

- определить и вычислить функции Грина электронов и поляронов в сверхпроводящем состоянии и определить необходимые условия для этой фазы.

### **Гипотеза диссертационной работы:**

Предполагается, что термодинамический потенциал (ТДП) модели Хаббарда (МХ) стационарен относительно массового оператора. И это можно доказать с помощью диаграммной техники сильной связи [29, 30].

Межорбитальный корреляционный эффект может играть существенную роль в явлениях фазовых переходов ПМХ и ВТСП в многоорбитальных СКС. Определять диэлектрическое состояние в модели Хаббарда (в приближении Хаббарда-I) и усиливать при низкой температуре металлическое – в примесной модели Андерсона (ПМА). Предполагается так же, что в двукратно вырожденной примесной модели Андерсона (ПМА) 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.

Следующее предположение, что куперовские пары, образованные парами электронов примесных атомов в  $d$ - или  $f$ - состояниях, находящимися в состоянии с тяжелыми фононными облаками, могут давать значимый вклад в сверхпроводимость в модели Андерсона-Холстейна.

### **Методы:**

Анализ, синтез, обобщение справочной и научной литературы были использованы при подготовке гипотезы, вводной и обзорной частей работы.

Вычисления, выполняемые в работе, основываются на аппарате квантово-статистических мацубаровских функций Грина (ФГ). Физические величины, в том числе плотность электронных состояний, можно получить, зная временные, запаздывающие ФГ. Последние получаются через мацубаровские путем аналитического продолжения в верхнюю комплексную полуплоскость.

Для расчета функций Грина используется пертурбативный метод сильной связи. В гамильтониан нулевого приближения включается взаимодействие в системе, которое полагается сильным, он легко диаганализируются с помощью методики операторов Хаббарда [11]. С помощью этой методики вычисляются ФГ нулевого приближения.

Метод диаграммной техники, используемый в работе, по сути, является графическим представлением теории возмущений и графическим способом вычисления мацубаровских функций Грина, посредством выделения и суммирования неких «главных» членов разложения. Развиваемый в работе метод диаграммной техники сильной связи является обобщением диаграммной техники для систем многих тел со слабым взаимодействием. Он основывается на обобщенной для сильно коррелированных систем теореме Вика (ОТВ) [30]. ОТВ была использована для сильно коррелированных электронов в  $d(f)$ -состояниях, для подсистемы же  $s(p)$ -электронов в двукратно вырожденной примесной модели Андерсона и оптических фононов в модели Андерсона-Холстейна была использована обычная теорема Вика.

В работе вычисляются, как одночастичные ФГ, так и двухчастичные неприводимые функции Грина (НФГ), которые возникают в результате применения ОТВ. В случае рассмотрения сверхпроводящей фазы, система описывается помимо обычных функций Грина, так же аномальными функциями Грина. В этом случае предполагается существование сверхпроводящих пар электронов и ненулевых квазисредних Боголюбова.

### **Содержание работы:**

В **первой Главе**, являющейся обзорной, рассмотрены результаты исследования фазовых переходов металл-диэлектрик Мотта и ВТСП в рамках физики СКС. А именно роли межорбитального корреляционного эффекта в системах с орбитальным вырождением электронных уровней, а так же электрон-фононного взаимодействия в системах с одновременно сильным электрон-фононным и кулоновским взаимодействием. Для этого проведен анализ и синтез работ, в которых изучены модель Хаббарда-Холстейна, Андерсона-Холстейна, а так же многократно вырожденные модели Хаббарда и примесная Андерсона. Прослеживается так же развитие метода диаграммной техники сильной связи и рассмотрены некоторые результаты, которые этот подход позволил получить при исследовании проблем СКС.

Во **второй Главе** рассмотрен диаграммный метод исследования СКС. Первая часть посвящена изложению аппарата квантово-статистических функций Грина и диаграммной техники для систем со слабым взаимодействием, а вторая часть – основам диаграммной техники сильной связи, развиваемой в работе.

В **третьей Главе** с помощью диаграммной техники сильной связи доказывается теорема стационарности термодинамического потенциала  $\bar{M}\bar{X}$  относительно массового оператора в нормальной и сверхпроводящей фазах. В разделе 3.1. рассматривается нормальная фаза. В первую очередь была описана  $\bar{M}\bar{X}$  и построена теория возмущений для  $\bar{M}\bar{X}$  в нормальном состоянии. При этом в качестве возмущения был принят интеграл перескока, а кулоновское взаимодействие включено в гамильтониан нулевого приближения. Далее доказывается свойство стационарности термодинамического потенциала для системы в нормальном состоянии. Раздел 3.2. посвящен рассмотрению сверхпроводящей фазы  $\bar{M}\bar{X}$ . Была построена диаграммная теория для  $\bar{M}\bar{X}$  в сверхпроводящей фазе. При этом так же принимаются в расчет аномальные ФГ. Затем доказывается свойство стационарности для системы в сверхпроводящем состоянии. Выводы по второй главе представлены в разделе 3.3.

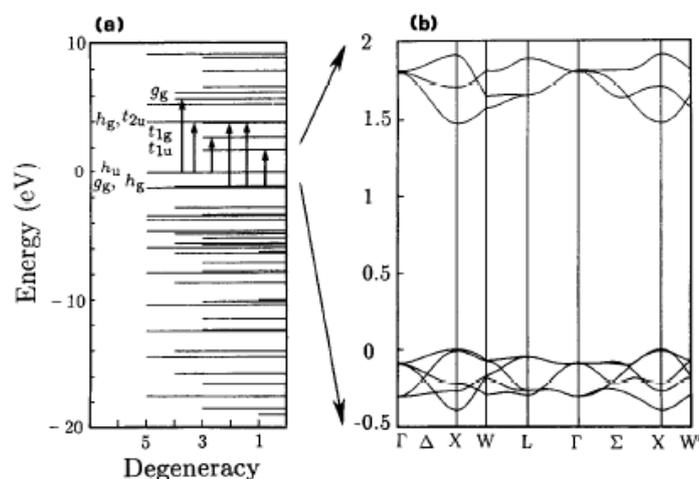
В **четвертой Главе** диаграммный подход обобщается на анализ двукратно вырожденной модели Хаббарда и Андерсона. В разделе 4.1 проведен анализ двухорбитальной модели Хаббарда. Описывается модель и обсуждается ее локальная часть, были получены точные решения для ФГ этой модели. В гамильтониан нулевого приближения включено как межорбитальное, как и внутриорбитальное кулоновское взаимодействие, а так же константа взаимодействия Хунда. Были исследованы процессы делокализации и сформулировано уравнение типа Дайсона для одночастичной перенормированной ФГ, а также обсуждается суммирование цепочечных диаграмм. Последний подраздел этого раздела посвящен вычислению функции плотности электронных состояний в приближении цепочечных диаграмм. В разделе 4.2. выполнен диаграммный анализ двукратно вырожденной примесной модели. Была описана двукратно вырожденная примесная модель Андерсона и обсуждаются свойства локализованной части модели. Была сформулирована теория возмущений в пределе примесного иона. В гамильтониан нулевого приближения включены как межорбитальное, так и внутриорбитальное кулоновское взаимодействие, а так же константа Хунда. В этом разделе так же рассматриваются процессы делокализации и перенормировки динамических величин, вычисляется простейшая неприводимая функция Грина. Затем обсуждаются основные уравнения и фазовый ПМХ. Были сформулированы основные уравнения для сверхпроводящего состояния и разработаны необходимые приближения. Корреляционная функция  $\bar{Y}$  определяется в обоих случаях, когда реализуется триплетная или синглетная сверхпроводимость. Были проанализированы условия, определяющие критическую температуру, а последний раздел главы содержит выводы.

В пятой Главе выполнен диаграммный анализ модели Андерсона-Холстейна. В разделе 5.1. обсуждается модель Андерсона-Холстейна, выполнено каноническое преобразование Ланг-Фирсова. В разделе 5.2. введены температурных мацубаровских функций Грина для электронов проводимости и примесных электронов в представлении взаимодействия. Раздел 5.3. посвящен анализу динамики фононных облаков. В разделе 5.4 приведены явные примеры диаграммного вычисления полных ФГ. В разделе 5.5. проанализированы результаты и сделаны выводы.

# 1 МАТЕРИАЛЫ С СИЛЬНЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ

## 1.1 Особенности электронного поведения в материалах с сильными корреляциями

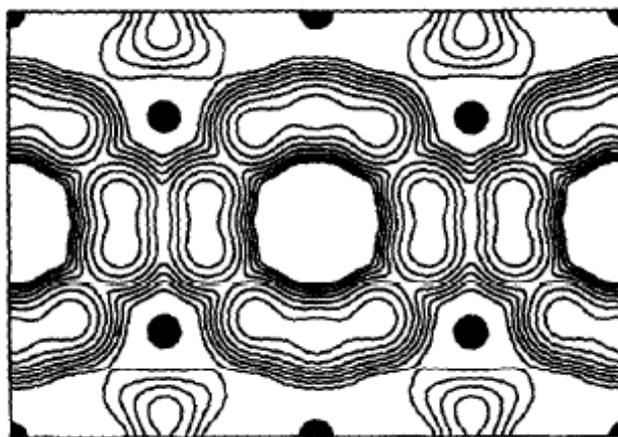
Примерами материалов с сильными корреляциями являются соединения переходных (редкоземельных) металлов, такие как купраты, манганаты, а так же фуллериды. Рассмотрим ряд особенностей этих материалов, которые обуславливают эффект сильных корреляций. В переходных металлах эти особенности в первую очередь связаны с наличием незаполненных  $d(f)$ -оболочек. Волновые функции электронов в  $d(f)$ -состояниях обладают малой пространственной протяженностью, соответственно эти электроны проявляют тенденцию к локализации возле своих атомных остовов (в отличие от электронов в  $s$ - или  $p$ - состояниях). Это обстоятельство проявляется в наличии магнитного упорядочения (ферро- и антиферромагнетизма) в этих материалах. В тоже время, плотность электронных состояний на уровне Ферми высока в большинстве из них, и ее основу составляют именно  $d(f)$ -состояния. Поверхность Ферми часто является сильно анизотропной (на ее поверхности присутствует несколько энергетических зон).



**Рис. 1.1. Электронные уровни энергии изолированного C<sub>60</sub> (а) и энергетическая структура fcc C (б) Верхняя граница валентной зоны в X точки определена как нулевая энергия. Оптически разрешенные переходы с энергией возбуждения меньшей, чем 6 эВ обозначены стрелками. [47]**

Другая особенность заключается в том, что в переходных металлах и их соединениях имеется сильный электрон-фононный потенциал. Он зависит от углового момента  $l$ , и при его значениях  $l=2$  (соответствующим  $d$ -состояниям), возникает яма, глубина которого варьирует в зависимости от элемента. При рассеивании электрона на таком потенциале возможно в сечении рассеяния появление резкого пика,

соответствующего резонансному состоянию [46]. Ширина резонанса зависит от матричных элементов s-d-гибридизации и определяет время жизни электрона вблизи данного иона, который близок к атомной функции. Наличие резонансного рассеяния d-состояния на изолированном ионном потенциале приводит к тому, что когерентное рассеяние электронов в кристалле образует узкую d-зону (по мере сужения резонанса) [46]. Она намного уже зон, образованных волновыми функциями электронов в s(p)-состояниях, имеющих более обширную пространственную протяженность. Для многих переходных металлов этот резонанс близок к уровню Ферми. В этом смысле часто такие системы называют узкополосными.



**Рис. 1.2. Контурная карта плотности валентных электронов СКУ на плоскости (110). Сплошные кружки обозначают тетраэдрические и октаэдрические междуузлия, в которых находятся атомы щелочных металлов. Контур с наибольшей плотностью составляет 0,9 электрон/мкм, а каждый контур представляет двойную половину плотности соседнего контура. [47]**

Фуллериды это интеркалированные щелочными металлами фуллериты. Фуллерит представляет собой кристаллический фуллерен, имеющий гранцентрированную кубическую решетку, в узлах которого расположены кластеры  $C_{60}$ . При интеркаливании щелочными металлами фуллеритов атомы щелочных металлов располагаются в междуузельных пустотах, и при достаточно высоких концентрациях интеркалирования, в узлах кристалла образуются положительно заряженные кластеры  $C_{60}$ . Электроны s-орбитали щелочного металла передаются в  $t_{1u}$  зону проводимости чистого  $C_{60}$  кристалла, которая трижды вырождена в точке  $\Gamma$  зону (см. Рис. 1.1) [47]. Таким образом, фуллериды проявляются как сильно связанный ионный кристалл. При этом, в связи участвуют, как

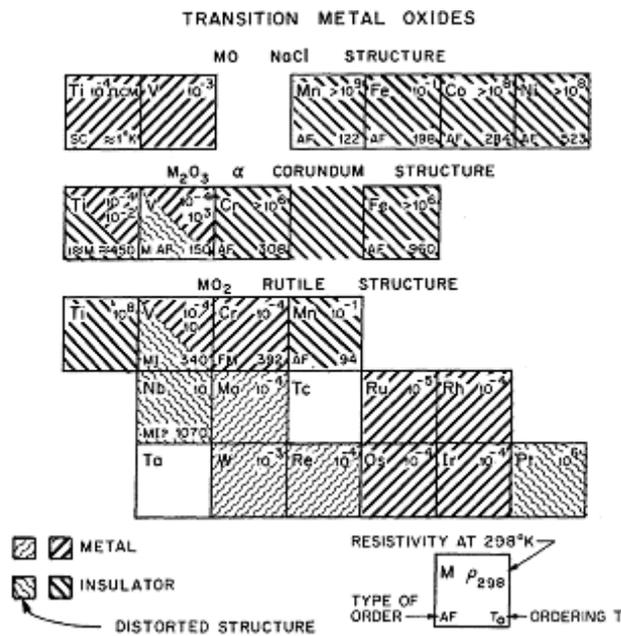
зонные энергии, так и энергия Моделунга [47]. Электронные системы в фуллеридах являются узкополосными, с вырождением основных состояний (см. Рис. 1.1. и Рис. 1.2.).

Узкополосная или сильно коррелированная электронная система и вырожденные основные состояния имеют отношение к объяснению высокотемпературной сверхпроводимости в кристаллических фуллеридах.

## 1.2 Переход металл-диэлектрик Мотта-Хаббард.

В 1937 году Бур и Фервей в своей работе [48] впервые выносят на обсуждение вопрос проводимости соединений переходных металлов. Они отметили, что оксиды переходных металлов, типа оксида никеля NiO ведут себя нехарактерно с точки зрения зонной теории проводимости. Зная электронную конфигурацию атомов кристалла и структуру решетки, можно предположить, какие вещества при низких температурах будут проводниками, какие диэлектриками, а какие полупроводниками. Так, изоляторами будут те вещества, количество электронов в которых достаточно для того, чтобы полностью заполнить зоны Бриллюэна, и между самой нижней незанятой зоной Бриллюэна и занятой зоной Бриллюэна с наибольшей энергией имеется большое расстояние, то есть широкая энергетическая щель. А лишь частичное заполнение последней разрешенной зоны обуславливает кристалл с металлическими свойствами. Например, такие ионные соединения как NaCl, MgO, AgCl, ZnO, TiCl содержат ионы с заполненными электронными зонами или подзонами и, таким образом, только полностью заполненные зоны Бриллюэна, а они, как известно, в чистом виде и стехиометрического состава очень плохие проводники. А такие соединения с незаполненными внутренними 3d-оболочками, как NiO, CoO в терминах зонной теории при низких температурах должны быть проводниками. Действительно, уровни энергии электронов 3d-оболочки атома кристаллов типа NiO образуют энергетическую зону, рассчитанную на 10 электронов, которая в соответствии со структурой решетки, разделяется на две подзоны из 6 и 4 электронов [49]. Одна из этих подзон окажется частично пустой (Ni, например, имеет конфигурацию 3d8s) и, согласно ожиданиям, зонной теории с понижением температуры проводимость должна только увеличиваться. Однако, несмотря на это, при низкой температуре материалы этого типа являются полупроводниками или изоляторами (CoO ( $\lg(\rho) = 8$ ), MnO ( $\lg(\rho) = 7$ ), FeO ( $\lg(\rho)=10$ )), CuO ( $\lg(\rho)=7$ ) [49], где  $\rho$  удельное сопротивление в ом/см). На Рис. 1.3 представлена таблица электрических свойств различных оксидов переходных металлов [50].

Резкий переход (до 9 порядков) при изменении условий, таких как температура, давление, легирование материала из состояния, когда он является проводником в состояние, когда его проводимость падает, и он становится полуметаллом или диэлектриком и, соответственно, наоборот называют переходом Мотта (иногда переходом Мотта-Хаббарда). Переход Мотта-Хаббарда отличается от другого типа перехода металл-диэлектрик (Пайерлса) тем, что для него не значительны структурные изменения решетки, а основную роль, как как будет показано ниже, играют перестройки в электронной системе. При этом в спектре электронов появляется щель.

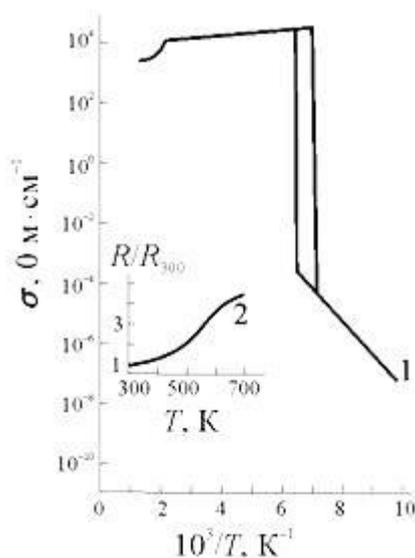


**Рис.1.3. Сравнение электрических свойств различных оксидов переходных металлов [50].**

Это явление иногда так же называют «сверхпроводимость наоборот». В качестве классического примера перехода Мотта-Хаббарда на Рис. 1.4 представлена зависимость электропроводности оксида ванадия  $V_2O_3$  от температуры вблизи точки фазового ПМХ. Критическая температура перехода в соединении  $V_2O_3$  равна 150 К. Ниже этой температуры он полупроводник, а выше проводник. На данный момент это одно из наиболее высоких значений скачка проводимости для ПМХ.

Мотт и Пайерлс [52] интуитивно попытались дать качественную картину поведения электронов в моттовских диэлектриках, выдвинув предположение, что электростатическое взаимодействие электронов в d-состояниях переходных атомов может обуславливать такой характер проводимости материалов. Если проникаемость межатомных потенциальных барьеров низка (имеется глубокая яма), рассуждали они, при низких температурах, большинство электронов не будут покидать своих атомных островов,

а движению остальных электронов, которым удастся преодолеть межатомный потенциальный барьер, будет препятствовать электростатическое отталкивание электронов локализованных на соседнем атоме.



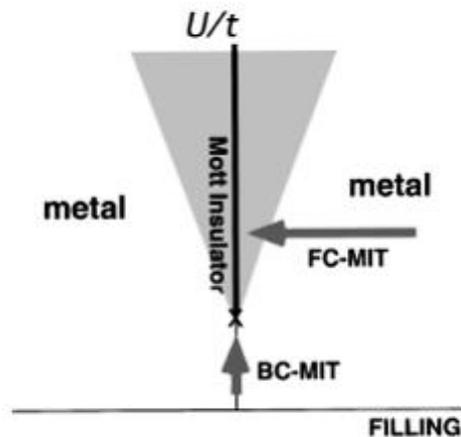
**Рис. 1.4** Температурная зависимость электропроводности  $V_2O_3$  1 – в области фазового перехода; 2 – в температурном диапазоне, соответствующем металлической фазе [51].

Далее в работе [53] Мотт предположил, что кристаллы типа NiO можно описывать в приближении, которое обычно используется для описания диэлектриков типа NaCl и в ситуации, когда расстояние между ионами в кристалле достаточно велико, такое, что полная электронная волновая функция может быть представлена произведением волновых функций электронов изолированных атомов. В последующих работах [54, 55] переход Мотта-Хаббарда рассматривается в рамках приближения решетки водородоподобных атомов с постоянной решетки  $a$ , которая может меняться. В этих работах он так же произвел количественную оценку эффектов корреляции, показав, что правильный их учет при условии изменения постоянной решетки  $a$  допускает существование диэлектрического состояния при не полностью заполненной электронами энергетической зоне. Если межатомное расстояние  $a$  меньше некоторого критического значения  $a_0$  ( $a < a_0$ ), то кристалл обладает металлическими свойствами, а при большем значении  $a > a_0$  – он является изолятором.

На данный момент проблема моттовских диэлектриков решается с помощью модельных гамильтонианов теории сильной связи, каковыми являются полярная модель

Шубина-Вонсовского, Боголюбова-Тябликова и Хаббарда (а так же примесные модели, такие как, примесная модель Андерсона) [56]. Переход Мотта-Хаббарда управляется соотношением двух параметров, которые включены в модели: величиной кулоновского взаимодействия между электронами  $U$  и шириной зоны проводимости  $W$ , которую определяет интеграл перескока  $t$ , т.е. или  $U/W$  или  $U/t$ , а так же заполнением зоны [57]. На Рис. 5 показаны способы контроля перехода: ВС-МІТ (контроль шириной зоны), FC-МІТ (контроль заполнением зоны).

При высоких значениях постоянной решетки  $a$ , модель Хаббарда приводит к состоянию антиферромагнитного изолятора, так что уровни энергии электронов образуют 2 зоны: полностью заполненную и пустую. Их называют нижней и верхней хаббардовскими подзонами соответственно. В этой интерпретации переход металл-изолятор проявляется как переход от антиферромагнитного металла к антиферромагнитному изолятору, связанный с расщеплением подзон. Наиболее благоприятным для реализации перехода является состояние половинного заполнения электронной энергетической зон, то есть 1 электрон на атом. В этом случае имеет место электрон-дырочная симметрия.



**Рис. 1.5. Фазовая диаграмма металл-изолятор в плоскости  $U/t$  и заполнения зоны  $n$ . [57] показы два способа контроля перехода: ВС-МІТ (контроль шириной зоны), FC-МІТ (контроль заполнением зоны)**

### 1.3 Сильно коррелированная сверхпроводимость

#### 1.3.1 Классификация сверхпроводников с сильными корреляциями

Рассмотрим другое необычное явление, которое реализуется в материалах с сильными корреляциями – ВТСП.

Долгое время переход в сверхпроводящее состояние наблюдался только при низких температурах (близких к 0 К), при этом так же имел место эффект Мейсснера (выталкивание магнитного поля из объема сверхпроводника). Однако в сплавах и химических соединениях переходных металлов температуры сверхпроводящих переходов наблюдались более высокие (4-23 К). В 1979 г. в системах с тяжелыми фермионами, то есть в системах с сильно коррелированными электронами 4f-оболочек соединений некоторых переходных металлов с высокой эффективной массой, обнаруживается объемная сверхпроводимость [58, 59]. И настоящим открытием стало обнаружение Беднорцом и Мюллером [60], что температура сверхпроводящего перехода керамики на основе оксида меди, лантана и бария составляет 30 К. Это открытие высокотемпературной сверхпроводимости породило волну экспериментальных исследований, направленных на получение керамик на основе купратов и изучение их сверхпроводящей фазы. Со структурной точки зрения купраты представляют собой слои меди и кислорода, зажатые между другими веществами (La, Ba, Hg).

В 1987 году была получена керамика с температурой сверхпроводящего перехода под давлением 93 К, что выше точки кипения азота [61]. В связи с этим, согласно одной классификации высокотемпературными считаются сверхпроводники, критическая температура которых выше 30 К (мы будем придерживаться этой классификации), другой – не ниже точки кипения азота. Рекордная и по сей день при нормальном давлении критическая температура сверхпроводящего перехода (до 135 К) была обнаружена в ртутьсодержащих керамиках [62, 63], а при высоком давлении – в гидридах  $\text{LaH}_{10}$  и супергидридах лантана  $\text{LaH}_{16}$  [64]. При этом температуры сверхпроводящего перехода таких систем могут приближаться к комнатной.

Высокотемпературная сверхпроводимость реализуется так же в фуллеридах. Так в 1991 было обнаружено, что фуллерид  $\text{RbCs}_2\text{C}_{60}$  имеет температуру сверхпроводящего перехода 33 К [65], а  $\text{Cs}_3\text{C}_{60}$  под давлением показал температуру сверхпроводящего перехода 40 К [66]. Начиная с 1999 г. высокие критические температуры обнаруживаются в «без медных» сверхпроводниках (это оксидные сверхпроводники, не содержащие медь, такие как, например, монокристалл перовскитного диэлектрика оксида вольфрама

$\text{Na}_{0.05}\text{WO}_3$ , допированного натрием, его критическая температура имеет значение 91 К [67, 68]).

В 2001 группа японских ученых обнаружила способность простого соединения интерметаллида  $\text{MgB}_2$  переходить в сверхпроводящее состояние при температуре около 39 К [69, 70]. Следующим важным экспериментальным открытием являлось открытие нового класса сверхпроводников – железосодержащих сверхпроводников [71]. Эта группа высокотемпературных сверхпроводящих материалов представлена ферропниктидами (соединения железа с элементами из группы пниктидов) и феррохалькогениды (соединения железа с элементами из группы халькогенидов). Это так же, как и купраты, слоистые соединения, структурной особенностью которых является наличие слоев железа и элементов из групп халькогенидов или пниктидов (кислородосодержащие и не кислородные), зажатых между слоями других элементов, типа Ва. Температура сверхпроводящего перехода у сверхпроводников этого класса составляет около 56 К.

Недавнее открытие сверхпроводимости в бесконечнослойных

В высокотемпературных сверхпроводниках, таких как купраты, железосодержащие сверхпроводники, а так же низкотемпературные органические сверхпроводники наблюдается еще одно удивительное свойство – возможность одновременного сосуществования двух дальних упорядочений: магнитного порядка и сверхпроводимости. Обнаруживается, что сверхпроводящая фаза керамик на основе купратов может сопровождаться антиферромагнетизмом и ферромагнетизмом, а железосодержащих сверхпроводников – состоянием волны спиновой плотности, зарядовой плотности и недавно наблюдаемое магнитное упорядочение – спин-вихревой кристалл (spin-vortex crystal) [72].

Недавно была открыта сверхпроводимость в бесконечнослойных никелатах  $\text{RE}_{1-\delta}\text{Sr}_\delta\text{NiO}_2$  ( $\text{RE} \frac{1}{4} \text{Nd, Pr}$ ) [72, 73]. С химической и структурной точки зрения они схожи с купратами, однако проявляют совершенно разные физические свойства. Так, это металлы без дальнего магнитного порядка и проявляющие не Ферми-жидкостное поведение [73, 74].

Таким образом, на данный момент высокотемпературная сверхпроводимость наблюдается в следующих основных классах материалов: керамики на основе купратов, а так же монокристаллы и тонкие пленки на основе оксида меди, без медные сверхпроводники (например,  $\text{Na}_{0.05}\text{WO}_3$ ), фуллериды, железосодержащие сверхпроводники (ферропниктиды, феррохалькогениды), супер гидриды, бесконечнослойные никелаты и в отдельную группу следует отнести диборид магния.

Каждый из этих классов сверхпроводников имеет свои особенности. Например, купраты, железосодержащие сверхпроводники, диборид магния являются многозонными системами и т.д. По-видимому, при рассмотрении каждого из этих классов сверхпроводников требуется отдельный теоретический подход.

### 1.3.2 Основы микроскопической теории сверхпроводимости

Долгое время механизм сверхпроводимости оставался тайной. Лишь в конце 50-ых годов микроскопическая теория сверхпроводимости предложена и развита Бардиным, Купером, Шриффером [75-77], а так же Боголюбовым [78] (БКШ) и Горьковым [79]. Это стало возможным благодаря обнаружению изотопического эффекта [80] (изотопический эффект показывает корреляцию между температурой сверхпроводящего перехода  $T_c$  и массой ионов в узлах кристаллов  $T_c \sqrt{M} = const$ ) поскольку это подтвердило предположение о причастности к этому явлению взаимодействия электронов с фононами. БКШ предлагает следующий механизм появления сверхпроводимости. При низких температурах (близких к 0 К!) за счет косвенного взаимодействия движущихся электронов и положительно заряженных ионов возникает отрицательный потенциал, притягивающий к электрону ближайший электрон с противоположным спином и импульсом. Это происходит в слое  $k$ -пространства вблизи поверхности Ферми и глубины порядка предельной частоты фононных колебаний, то есть дебаевской частоты. Связанные между собой таким образом пары электронов представляют собой квазичастицы, которые ведут себя как бозоны. Их называют куперовскими парами. Они являются квази-бозонами и способны образовывать «бозе-эйнштейновский» конденсат. В основном состоянии они все покоятся либо движутся когерентно. Согласно БКШ, Бозе-эйнштейновская конденсация пар электронов связанных через колебания ионов решетки (фононов) и есть причина когерентного движения пар электронов без сопротивления и появления сверхпроводимости.

Мерой связи электронов является величина  $\Delta_k$ , определяющая щель в спектре одночастичных возбуждений сверхпроводника, энергия которого выражается формулой

$$E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2} \quad (1.2)$$

где  $\varepsilon_k$  – энергия электрона в нормальной фазе с импульсом  $k$ , отсчитанная от поверхности Ферми.

Сверхпроводимость в теории БКШ рассматривается в рамках модели Фрелиха. Электрон-фононное взаимодействие вблизи поверхности Ферми в сверхпроводящих

системах достаточно велико, чтобы его можно было рассматривать как возмущение. Боголюбов ввел каноническое  $u$ - $v$ -преобразование для Ферми-амплитуд для того, чтобы можно было использовать теорию возмущений, так же он ввел концепцию квазисредних [81]

Величина энергетической щели  $\Delta$  и критическая температуры  $T_c$  определяются плотностью электронных состояний на поверхности Ферми  $N(0)$

$$\Delta = 2\omega_D \exp\left(-\frac{1}{N(0)V}\right) \quad (1.3)$$

$$T_c = 1.4\omega_D \exp\left(-\frac{1}{N(0)V}\right)$$

Эти величины связаны следующим универсальным соотношением

$$2\Delta / T_c = 3,52$$

Где  $\omega_D$  – частота Дебая.

Модель БКШ применима для описания сверхпроводимости узкого класса материалов: изотропных сверхпроводников со слабым кулоновским взаимодействием.

Учет кулоновского взаимодействия был произведен Боголюбовым, Толмачевым и Ширковым [82], которые показали, что температура сверхпроводящего перехода определяется соотношением:

$$T_c = 1,14\omega_D \left(-\frac{1}{(\lambda - \mu)}\right) \quad (1.4)$$

Где  $\lambda \equiv N(0)V$ , а псевдо потенциал  $\mu$  – определяется соотношением, где  $V_c$

$$\mu = \frac{N(0)V_c}{1 + N(0)V_c \ln \frac{E_F}{\omega_D}} \quad (1.5)$$

Моделью, учитывающей анизотропию поверхности Ферми сверхпроводников с перекрывающимися энергетическими зонами, является предложенная в 1959 г. В. А. Москаленко [83] и независимо Сухлом [84] обобщенная версия модели БКШ – двузонная

модель сверхпроводимости. В модели предполагается наличие двух энергетических зон и возможность перехода пар электронов образованных внутри одной зоны в другую. Благодаря возникновению как внутри-зонного, так и межзонного косвенного электронного взаимодействия, приводящего к дополнительному притяжению между электронами, такие сверхпроводники могут обладать более высокой критической температурой сверхпроводящего перехода.

Критическая температура определяется выражением:

$$T_c = 1,14\omega_D e^{-\xi}$$

$$\xi_{\pm} = \frac{\rho_1 + \rho_2 \pm \sqrt{(\rho_1 + \rho_2)^2 - 4\rho_1\rho_2(1-\tau)}}{2\rho_1\rho_2(1-\tau)} \quad (1.6)$$

$$\rho_1 = I_1^2 N_1(0); \rho_2 = I_2^2 N_2(0);$$

$N_1(0)$ ,  $N_2(0)$  – плотности электронных состояний вблизи поверхности Ферми для первой и второй энергетических зон, соответственно,  $I_1$ ,  $I_2$  – интенсивность электрон-фононного взаимодействия в пределах первой и второй зон соответственно.

Эта модель и развитые на ее основании методы расчета физических параметров получили хорошее экспериментальное подтверждение полвека спустя (см., например, [85, 86]) после обнаружения температуры сверхпроводящего перехода у интерметаллида  $\text{MgB}_2$  около 39 К. Кроме того, она подходит так же для описания многозонных высокотемпературных сверхпроводников, таких как сверхпроводники на основе железа, в которых можно пренебречь учетом сильных корреляций [87].

Высокие температуры сверхпроводимости не вписываются в классическую модель БКШ, так же непонятным до конца остается и механизм образования куперовских пар (хотя роль фононов не исключена, чисто фононный механизм в связи с высокими температурами маловероятен).

По-видимому, механизм образования куперовских пар может отличаться у различных типов высокотемпературных сверхпроводников. В этом механизме могут участвовать спиновые флуктуации (см., например, [88]), сильное кулоновское и электрон-фононное взаимодействия.

Если речь идет об узкозонных системах, то сверхпроводимость в них является скорее атомистическим свойством, и такие характеристики сверхпроводника, как

температура сверхпроводящего перехода и другие, должны определяться в первую очередь локальными характеристиками. Это обстоятельство послужило поводом для анализа моделей Хаббарда и примесной модели Андерсона в качестве кандидатов на возникновение сверхпроводимости в рамках этих моделей.

В работе [89] было показано, что возможно возникновение эффективного притяжения между ближайшими электронами с антипараллельными спинами (а значит и сверхпроводимости) в моделях примесной Андерсона и Хаббарда в пределе большого кулоновского отталкивания электронов одного узла  $U \rightarrow \infty$ . Так же при рассмотрении трехмерной модели Хаббарда было показано, что спиновые флуктуации (обусловленные обменом парамагнонами) возле неустойчивости состояния волны спиновой плотности (ВСП) обуславливают сильное синглетное d-волновое спаривание электронов с антипараллельными спинами [90].

Андерсон предположил, что механизм сверхпроводимости в керамиках на основе оксида меди имеет чисто электронную и магнитную природу, а взаимодействие с фононами может этому благоприятствовать [91]. Подходящей моделью для описания этих сверхпроводников Андерсон считает модель Хаббарда с половинным заполнением зоны и с сильным кулоновским взаимодействием  $U$ , а так же константой обменного антиферромагнитного взаимодействия  $J = (t(-j))^2 / U$ , где  $t(-j)$  – интеграл перескока между узлами. В работе [92] методом теории возмущений в приближении малого  $t(-j)$  и  $U \rightarrow \infty$  показано, что в многозонной модели Хаббарда возможно возникновение сверхпроводимости обусловленной спариванием d-электронов (механизм сверхпроводимости благодаря зарядовым флуктуациям). Так же в периодической модели Андерсона эти же авторы пришли к выводу, что возможно возникновение сверхпроводимости по причине появления эффективного притяжения и образования куперовских пар d-электронов [93]. В последующем, в обобщенной периодической модели Андерсона, описывающей две группы сильно коррелированных (dd и ff) электронов с локальной гибридизацией состояний и перескоком dd-электронов между узлами решетки исследуется с точки зрения возможных механизмов появления связанных электронных пар, например, с использованием метода среднего поля в работе [94]. Здесь авторы пришли к выводу, что имеется несколько факторов способствующих образованию сверхпроводящих пар. Во-первых, это синглетное состояние с отрицательной энергией, которое содержит выигрыш энергии благодаря эффекту Кондо, который приводит к появлению притяжения между электронами. Во-вторых, наличие корреляционных

переходов, которые порождают флуктуирующие пары электронов с противоположными спинами, принадлежащие к обеим орбиталам (спин-флуктуационный механизм). Туннелирование электронных пар между различными зонами так же способно привести к дополнительному притяжению между электронами.

Несмотря на интенсивность изучения моделей СКС, в частности существования сверхпроводимости в модели Хаббарда, до сих пор исследования показывают противоречивые результаты. В недавней работе 2020 г. было показано отсутствие сверхпроводимости в двухмерной модели Хаббарда [95]. При этом авторы использовали такие современные вычислительные методы как, квантовый метод Монте-Карло и метод ренорм-группы матрицы плотности. В работе 2022 [96] в рамках динамической теории среднего поля (ДТСП) авторы предлагают в качестве механизма образования сверхпроводящих пар в модели Хаббарда – антиферромагнитные флуктуации, причем как в не допированном, так и в сильно допированном режимах

Возможно, эти противоречивые результаты связаны с использованием различных теоретических методов и приближений.

#### **1.4 Развитие диаграммной техники для исследования СКС.**

В рамках теории динамического среднего поля (ТДСП, DMFT) [97-99] достигнуты значительные успехи в понимании явлений СКС, что связано, в том числе с возможностью комбинирования этого метода с методом производящего функционала и другими (DMF + DFT) (см., например, обзор [100]).

Одним из самых эффективных методов исследования квантовой статистики является аппарат функций Грина. Для вычисления функций Грина используется метод расщепления цепочки уравнений движения, метод вспомогательных бозонных полей, метод резольвенты, численный метод Монте-Карло, метод вариационных производных, диаграммный метод и др.

Рассмотрим метод диаграммной техники, являющийся графическим представлением теории возмущений для функции Грина. Он позволяет получать такие физические величины, как, например, плотность электронных состояний. В теории слабого взаимодействия он основывается на разложении  $S$ -матрицы и теореме Вика. За гамильтониан нулевого приближения обычно принимается гамильтониан системы свободных частиц, который имеет билинейную форму. В случае же сильной связи взаимодействие необходимо включать в гамильтониан нулевого приближения, в связи, с

чем теорема Вика не применима. В случае сильных корреляций кулоновское взаимодействие  $U$  значительно превышает ширину зону проводимости  $W$ , определяемую параметром интеграла перескока  $t$ , поэтому оператор, ответственный за взаимодействие в качестве возмущения мы брать не можем, и параметр интеграла перескока принимается за возмущение.

Впервые Хаббард выполнил разложение в ряд теории возмущений для модели Хаббарда на основе кумулянтного разложения Кубо [901] и методики операторов Хаббарда [11]. Вакс, Ларкин и Пикин [102], Изюмов, Кассан-оглы и Скрябин [103] разработали диаграммную технику для спиновых операторов. Слободян и Стасюк [104] и Зайцев [105] предложили диаграммную технику для операторов Хаббарда, базирующуюся на теореме Вика и кумулянтных разложениях, и способ вычисления функций Грина и корреляционных функций, построенных на таких операторах. Она была использована для изучения, как магнитных, так и сверхпроводящих фаз модели (см., например, [106]). Аналогичный подход развивается Барабановым, Кикоиным и Максимовым для модели Хаббарда в работе [107] и для примесной модели Андерсона в [108].

Диаграммные техники сильной связи, основанные на более простой алгебре Ферми-операторов впервые была разработаны в 1991 Мейцнером [109] и Москаленко В.А. [29, 30]. Последняя в отличие от диаграммной техники [109] позволяет сформулировать для ФГ сильно коррелированных электронов уравнение типа Дайсона.

Другая диаграммная техника сильной связи предложена в работе [110]. Эта диаграммная техника развивается на основании формализма интегралов по траектории. Проблема невозможности использования теоремы Вика решается с помощью преобразования Хаббарда-Стратоновича, которое заключается в выражении части действия возмущения в модели Хаббарда через интеграл Гаусса по дополнительному полю Грассмана [111]. Теория возмущений сильной связи, основанная на формализме интегралов по траекториям, так же развивается в работе [112].

Диаграммная техника [113] сформулирована для среднего значения величины кулоновского отталкивания. Разложение по интегралу перескока выражается, так же как и диаграммной теории Москаленко, в терминах одноузельных кумулянт операторов рождения и уничтожения электронов. Однако для функции Грина было получено уравнение типа Ларкина [114], которое было решено в однопетлевом приближении, в двумерном случае, а так же в приближении соседних перескоков и в случае половинного заполнения зоны проводимости.

Диаграммная техника [29, 30], которой посвящена эта работа, обходит невозможность применения теоремы Вика с помощью обобщения этой теоремы на не билинейные гамильтонианы. Эта не билинейность обуславливает возникновение неприводимых многочастичных локальных структур (одного атома или узла) – кумулянтов Кубо, называемых так же неприводимыми функциями Грина. Они учитывают, как спиновые, зарядовые, так и парные флуктуации системы. Кумулянты образуются по правилу вычитания из полной функции Грина тех структур, которые характерны для обычной теоремы Вика. В случае, когда гамильтониан  $H_0$  описывает систему без взаимодействия, эти неприводимые структуры тождественно обращаются в нуль, а обобщенная теорема Вика переходит в обычную теорему Вика. Все знаковые множители слагаемых ОТВ определяются четностью перестановок электронных операторов, необходимых для образования из исходного произведения операторов данной структуры. При этом следует соблюдать условие, чтобы под знаком Т-произведений всегда оставалось одинаковое число операторов рождения и уничтожения электронов, если речь идет о нормальной системе, и четное число операторов для сверхпроводящей системы.

Функции Грина нулевого приближения, определяющие локальные или атомные свойства системы, можно точно вычислять с помощью методики Х-операторов (или операторов Хаббарда), либо на основе представления электронных операторов в терминах вспомогательных бозонных полей (slave-boson) [115-117].

На основании ОТВ исследовательская группа Москаленко В.А. в дальнейшем развивает диаграммную технику для модели Хаббарда в целях изучения перехода металл-диэлектрик Мотта [32] и для исследования вопроса существования сверхпроводимости в модели в предположении половинного заполнения зоны [33, 34]. Для исследования сверхпроводящей фазы предполагается существование сверхпроводящих пар, и разложение в ряд теории возмущений по интегралу перескока так же выполняется для аномальных функций Грина.

Для ФГ были получены уравнения типа Дайсона. Роль сильных меж электронных корреляций, содержащихся в модели Хаббарда, проявляется в структуре величины  $Z_0(k/i\omega_0)$ , которую авторы называют корреляционной функцией. Она содержит в себе все флуктуации системы и связана с величиной (массовым оператором)  $\Lambda_\sigma$  равенством:

$$\Lambda_\sigma(k, i\omega) = G_\sigma^0(k, i\omega) + Z_\sigma(k, i\omega) \quad (1.1)$$

Здесь  $G_{\sigma}^0(k, i\omega)$  — функция Грина нулевого приближения модели Хаббарда.

В аппроксимации Хаббарда-I (или среднего поля)  $Z_{\sigma}(k, i\omega) = 0$ . Обычно этой аппроксимации достаточно для описания нормальной фазы модели Хаббарда. В этом приближении была получена система уравнений, определяющая сверхпроводящую фазу модели Хаббарда [33]. По-видимому, это уравнение не имеет решения и авторы пришли к выводу, что сверхпроводящая фаза не может реализоваться при данном приближении. В другой работе рассматривается модель Хаббарда в случае отклонения от половинного заполнения зоны, здесь так же получено уравнение определяющее температуру сверхпроводящего перехода [34].

Диаграммная техника так же была развита для анализа примесной [35] и периодической моделей Андерсона [36, 37, 118, 119], которая представляет особый интерес при исследовании сверхпроводимости. При этом для подсистемы сильно коррелированных локализованных электронов применяется обобщенная теорема Вика, а для подсистемы электронов проводимости обычная теорема Вика. Для одночастичных функции Грина электронов проводимости были получены уравнения Дайсона и уравнения типа Дайсона для подсистемы сильно коррелированных локализованных электронов. В работе [36] при исследовании сверхпроводящего состояния периодической модели Андерсона для равноправного описания как нормальных, так и аномальных функций Грина вводится дополнительное зарядовое квантовое число, которое отличает операторы рождения электронов от операторов уничтожения. Полученные в результате уравнения допускают существование как синглетной, так и триплетной сверхпроводимости.

Медведев использует ОТВ для примесной модели Андерсона при вычислении функций Грина и определения термодинамического потенциала системы [120]. В работе [43] так же было найдено соотношение между ФГ и термодинамическим потенциалом модели Андерсона и доказано свойство стационарности термодинамического потенциала относительно изменения массового оператора. В работе [121], посвященной рассмотрению конкурирующей фаз — состоянию волны спиновой плотности антиферромагнетизма и сверхпроводимости (обусловленной корреляциями), получен удивительный результат: появляется триплетная сверхпроводимость при условии, что существует синглетная сверхпроводимость и антиферромагнетизма.

## 1.5 Межорбитальный корреляционный эффект

Значительные результаты в исследовании роли связи Хунда (обменного взаимодействия Хунда или интеграла Хунда)  $I_H$  в определении перехода металл-диэлектрик Мотта-Хаббарда и сверхпроводимости в многоорбитальных системах достигнуты так же благодаря развитию метода ДТСП. Так, в рамках ДТСП исследуется роль связи Хунда в переходе Мотта в рамках двузонной модели Хаббарда при  $T = 0$  с использованием метода численной ренорм-группы Вильсона [122]. В работе [123] с помощью приближения обобщенного среднего поля была вычислена одночастичная электронная функция Грина, исследуется переход металл-диэлектрик при различных целочисленных значениях концентрации электронов.

Путем комбинирования ДТСП с методом точной диагонализации [124] и квантового метода Монте-Карло [125] исследуется стабильность металлического состояния в двухорбитальной модели Хаббарда при половинном заполнении зоны. Было исследовано влияние внутризонных и межзонных кулоновских взаимодействий совместно со связью Хунда на поведение перехода металл-диэлектрик. Обнаружено, что когда внутризонное и межзонное кулоновские взаимодействия почти равны, то Ферми-жидкостное состояние стабилизируется за счет орбитальных флуктуаций вплоть до достаточно больших взаимодействий, пока система переводится в моттовскую изолирующую фазу из этого состояния.

Так же была проанализирована двухорбитальная Модель Хаббарда при произвольном заполнении зоны с помощью подхода функционала собственной энергии [126]. В работе обсуждается конкуренция между металлическим и диэлектрическим состояниями в системах с одинаковой и разной шириной зоны. Установлено, что диэлектрическая фаза Мотта реализуются при соизмеримых заполнениях зон. Кроме того, выясняется, что орбитально-селективная фаза Мотта, в которой одна орбиталь локализована, а другая нет, стабилизируется даже при частичном заполнении зон в системе с различной шириной зоны. Путем комбинирования методов ДТСП и точной диагонализации была проанализирована многоорбитальная модель Хаббарда [127].

Модель Хаббарда с двукратным и четырехкратным орбитальным вырождением проанализирована так же в работе [128] с использованием метода вспомогательных бозонных полей для исследования роли связи Хунда в переходе Мотта реализуемом в ферропниктидах. Авторы нашли, что в двукратно вырожденной модели Хаббарда переход Мотта так же осуществляется при половинном заполнении зоны. Природа моттовского

диэлектрика зависит от отношения  $U/U'$  (где  $U, U'$  внутри- и межорбитального взаимодействия соответственно). При  $U > U'$  изолятор представляет собой высокоспиновое моттовское состояние с нулевой двойной заселенностью, но триплетное. При  $U' > U$ , напротив, изолятор является синглетным моттовским состоянием с ненулевым двойным заселением. При сильном значении связи Хунда, происходит всегда переход в локализованное высоко-спиновое состояние моттовского изолятора, а при нулевом и слабом – в средне спиновое изолирующее состояние. Этот переход можно рассматривать как орбитально-селективный переход металл-изолятор. Низкоспиновое орбитально-моттовское состояние неустойчиво по отношению к зонному изолятору. В случае, когда орбитальное вырождение снимается, его можно рассматривать как частный случай орбитально поляризованного изолятора.

В связи с недавним открытием сверхпроводимости в бесконечнослойных никелатах [72, 73] роль связи Хунда в четверть заполненной дву-орбитальной модели Хаббарда изучена в работе [129]. Обнаружено, что область отрицательного эффективного кулоновского взаимодействия этой модели отличается от трех- и пяти-орбитальных моделей. Авторы выделили различные режимы, включающие четыре различных коррелированных металла: один из них обусловлен близостью к изолятору Мотта, а три других были названы: «промежуточным» металлом, слабым металлом Хунда и *valence-skipping* металлом. Авторами определены критерии, характеризующие эти металлы, устанавливающие существование хундовской металличности в двухорбитальных системах. на четверть заполненной

Роль интеграла Хунда  $I_H$  была изучена в рамках  $t$ -модели, которая была введена в контексте сверхпроводимости вблизи квантовой критической точки (см. [130] и цитируемую литературу), а также других моделей магнитных примесей и квантовых точек, таких как примесная модель Кондо и примесная модель Андерсона с двукратным вырождением [131]. Квантовым методом Монте-Карло была изучена двукратно вырожденная модель Андерсона [132]. Авторы нашли, что при слабом или среднем взаимодействии основное состояние остается Ферми-жидкостью. Кроме того, было найдено, что внутриатомное обменное взаимодействие приводит к возникновению притяжения между электронами проводимости с параллельными спинами в одном орбитальном состоянии.

Исследование модели Андерсона с двукратным вырождением в работах [133, 134] привело к различным предсказаниям относительно поведения в этих системах

температуры Кондо как функции от  $I_H$ . Этот вопрос исследуется путем применения к некоторым различным моделям комбинированного метода численной ренорм-группы и перенормированной теории возмущений. Была исследована фазовая диаграмма примесной модели Андерсона с использованием метода численной ренорм-группы Вильсона. Было показано, что физическое поведение примесной модели Андерсона в окрестности нетривиальной неподвижной точки напоминает поведение двухпримесной модели Кондо. Эта неподвижная точка находится в непосредственной близости к переходу металл-диэлектрик при изменении интеграла Хунда.

### **1.6 Системы с одновременно сильным взаимодействием электронов друг с другом и с фононами**

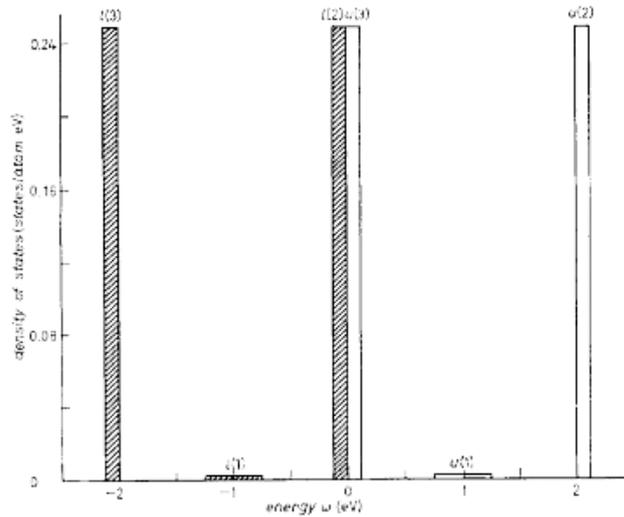
Роль электрон-фононного взаимодействия в системах, в которых имеется как сильная электрон-фононная связь, так и сильное кулоновское взаимодействие локализованных электронов анализируется в основном в рамках модели Хаббарда-Холстейна. Модель Хаббарда-Холстейна была исследована многими методами. Например, методом уравнения движения для двухвременной запаздывающей функций Грина [135], методом ренорм-группы матрицы плотности [136], квантовым методом Монте-Карло [137] и др.

При исследовании перехода Мотта-Хаббарда в  $Ti_2O_3$  в рамках модели Хаббарда-Холстейна было выявлено, что для s.c. и b.c.c. зонных структур с сильной связью и для доминирующей моды оптических фононов, равной половине вектора обратной решетки, при возрастании температуры в системе реализуется непрерывный переход металл-диэлектрик. Он происходит в результате перекрытия пиков в функции плотности состояний при увеличении температуры [135]. (см. рис. 1.7.)

Изменение удельной теплоемкости так же характерно для перехода «изолятор-металл».

Исследование влияния электрон-фононного взаимодействия и конкуренции его с электрон-электронным на переход металл-диэлектрик было изучено как в случае половинного заполнения зоны [136, 137], так отклонения от него. Эти исследования продемонстрировали, что при доминировании взаимодействия локализованных электронов друг с другом  $U$  переход осуществляется в моттовский изолятор, а если доминирует величина электрон-фононного взаимодействия  $g$ , то переход осуществляется в так называемое биполярное локализованное состояние (биполярный изолятор). В последнем случае локализованные электроны проявляют тенденцию образовывать биполярон, т.е. пару сильно связанных между собой электронов за счет общих фононов

(возбужденные ими). Исследование фазовой диаграммы модели Хаббарда-Холстейна так же показало, что в случае половинного заполнения зоны основное состояние является антиферромагнитным изолятором при доминировании  $U$  и состояние волны зарядовой плотности (или биполярного изолятора) при доминировании  $g$  [138]



**Рис.1.7. Плотность электронных состояний  $Ti_2O_3$  при температуре  $T=T_c=615$  К. Два пика  $u(2)$  и  $u(3)$  начинают перекрываться, и имеет место переход полупроводник-металл [135]**

Касательно роли электрон-фононного взаимодействия в сверхпроводниках, в которых эта связь велика, теоретические исследования демонстрируют как благоприятствующее спариванию электронов влияние, так и возможный поляронный (биполяронный механизм) сверхпроводимости. Так, работе [139] было найдено, что электрон-фононное взаимодействие может индуцировать s-компоненту в d-волновую яму в (d+s) форме с анизотропией взаимодействия и в (d+is)-форме без анизотропии соответственно. Однако в любом случае  $T_c$  не увеличивается по сравнению с чистым d-спариванием (без взаимодействия с фононами). С другой стороны, анизотропное взаимодействие фононов может значительно усиливать само d-спаривание и, следовательно, критическую температуру вместе с взаимодействием спиновых флуктуаций АФМ. Интересно, что спаривание этого типа (d-волновые антиферромагнитные спиновые флуктуации + электрон-фононное взаимодействие) демонстрирует сильно уменьшенный изотопический коэффициент, несмотря на значительное усиление  $T_c$  за счет фононного взаимодействия.

Было так же показано [139], что для одномерного электронного газа с сильным электрон-электронным взаимодействием и слабым притягательным косвенным электрон-фононным взаимодействием сверхпроводящие флуктуации могут происходить при высоких температурах. При этом доминантный вклад так же принадлежит электрон-электронному отталкиванию. Была найдена сверхпроводящая фаза модели, которая возникает, когда оба взаимодействия малы.

Этот вопрос требует отдельного подхода при рассмотрении соединений из класса ферропниктидов и феррохалькогенидов; здесь возникают разные представления о механизме возникновения сверхпроводимости в этих системах. Одно из этих представлений заключается в том, что в системах, в которых имеются электронные зоны на поверхности Ферми, основным механизмом взаимодействия при возникновении сверхпроводимости являются спиновые флуктуации. В других соединениях (с другой базовой сверхпроводящей плоскостью) такой механизм не может быть реализован из-за отсутствия «вложенности» в электронном энергетическом спектре и отсутствия магнитного обменного взаимодействия.

В железосодержащих сверхпроводниках роль электрон-фононного взаимодействия на сверхпроводящие характеристики была исследована методом ренорм-группы в работе [140]. Это исследование показало, что в механизме спаривания электронов доминантную роль играет взаимодействие между электронами (в том числе в различных орбитальных состояниях). А «аномальный» изотопический эффект, который наблюдается в этих соединениях, объясняется многозонностью – включением субдоминантных взаимодействий (межзонных и внутризонных). Примечательно так же то, что знак показателя степени изотопического коэффициента  $\alpha$  зависит от того, подвергаются ли меж – и/или внутризонные взаимодействия изотопным заменам.

Сильно коррелированные электронные системы при сильном взаимодействии с фононами так же были проанализированы с помощью диаграммной техники сильной связи в рамках модели Хаббарда-Холстейна [38-42]. Этот подход использует каноническое преобразование Ланг-Фирсова, которое позволяет исключить линейные по фононной координате члены гамильтониана и сводит задачу к рассмотрению движущихся поляронов (электронов окруженных фононными облаками). При этом возникает новая группа средних произведений, сформированная из операторов фононных облаков. Для этой группы предложена обобщенная теорема Вика [39, 40]. Исследование модели Хаббарда-Холстейна позволило предложить новый механизм сверхпроводимости – поляронный [41]. Он основывается на предположении о спаривании поляронов путем

обмена фоннными облаками. Под поляроном в общепринятом широком смысле понимают квазичастицу, возникающую в результате динамического взаимодействия носителя заряда (как правило, электрона) с кристаллической средой. В этой работе получено уравнение, определяющее критическую температуру в предположении высокого значения частоты коллективной моды и случая близкого к половинному заполнению зоны. Параметры, определяющие критическую температуру:  $\omega_c$  ( $\omega_c \geq W/4$ ),  $\varepsilon = 0$  (случай половинного заполнения зоны). В пределе сильной связи, было получено значение критической температуры порядка частоты коллективной моды  $\omega_c/3$ . В работе [42] обсуждается спаривание электронов в присутствии акустических фоннных облаков и определяется критическая температура сверхпроводящего фазового перехода.

Исследование поляронной сверхпроводимости в модели Хаббарда-Холстейна [141] показали, что остаточное кинематическое взаимодействие пропорциональное квадрату энергии перескока электрона между поляронами и фононами обуславливает условие для спаривания поляронов. Авторы пришли к выводу, что сверхпроводящая нестабильность в d-волновом канале возможна при низких температурах перехода, и достигает своего максимума в регионе перехода (cross-over) от большого к малому полюрону. Было найдено, что S-волновая нестабильность невозможна, когда эффективное одноузельное взаимодействие поляронов отталкивающее.

Основные результаты последовательного изучения электронно-фонного взаимодействия в кристаллах в пределе сильной связи и предположении возможного поляронного механизма сверхпроводимости можно найти в работах [23, 24]. В обзорах показано, что образование малых поляронов и биполяронов обеспечивает ряд новых физических явлений, как в нормальном, так и в сверхпроводящем состояниях системы и рассматриваются два механизма сверхпроводимости. Первый возникает из-за куперовского спаривания малых поляронов в импульсном пространстве (поляронная сверхпроводимость). Второй связан со спариванием поляронов в реальном пространстве, что приводит к образованию локализованного биполярона (или между узлами) со сверхпроводимостью, аналогичной сверхтекучести.

Модель Андерсона-Холстейна была исследована методом приближения спектральной плотности. В результате была вычислена спектральная функция магнитной примеси в немагнитном металле и изучено влияние на нее электрон-фонного взаимодействия [142] Авторы пришли к выводу, что по мере увеличения электрон-фонного взаимодействия уменьшается как и значение функции спектральной

плотности, так и ее ширины. Поскольку ширина функции спектральной плотности обратно пропорциональна времени жизни возбуждения на примеси, согласно исследованию, с ростом константы электрон-фононного взаимодействия примесные электроны становятся более локализованные, в результате чего проводимость падет.

## 1.7 Заключение по первой главе

Переход металл–диэлектрик Мотта и высокотемпературная сверхпроводимость – явления, ассоциируемые с физикой сильно коррелированных систем. Они реализуются в таких материалах, как соединения переходных металлов, молекулярных органических кристаллах и др. Эти явления невозможно описать, используя только классические теории, такие как зонная теория Вильсона-Блоха или теория сверхпроводимости БКШ. Большинство исследователей сходятся во мнении, что важную роль в формировании этих явлений играет эффект сильных корреляций, т. е. сильное взаимодействие электронов, электронов с фононами и их взаимное влияние; в многоорбитальных системах особую роль играют процессы, обусловленные параметром связи Хунда, а также внутри- и межорбитальными электронными взаимодействиями.

Тот факт, что эти материалы представляют собой узкозонные системы, привел к идее, что как транспортные, так и сверхпроводящие свойства этих материалов определяются в первую очередь атомистическими характеристиками. Эти явления рассматриваются в рамках модельных гамильтонианов сильно коррелированных систем, таких как модель Хаббарда или примесная модель Андерсона. Часто в этих системах имеется сильная электрон-фононная связь или они являются многоорбитальными системами. Орбитальное вырождение приводит к появлению обменного взаимодействия Хунда. Последнее вместе с электрон-фононным взаимодействием может играть существенную роль как в высокотемпературной сверхпроводимости, в частности, в механизме образования сверхпроводящих электронных пар, так и в переходе Мотта металл-диэлектрик. Причем эти механизмы могут различаться для разных классов ВТСП. Для выяснения роли электрон-фононного взаимодействия в системах, где оно также велико, модельные гамильтонианы СКС часто дополняются гамильтонианом Холстейна, а в многоорбитальных системах учитываются взаимодействие электронов в различных орбитальных состояниях и их переходы, а также наличие параметра Хунда.

Наибольшие успехи в исследовании СКС были достигнуты на основе динамической теории среднего поля в сочетании с теорией производящего функционала (ДТСП + ТПФ), а также метода численной ренормгруппы.

Еще одним наиболее эффективным является пертурбативный метод вычисления функций Грина, в том числе и его графическое представление, позволяющее суммировать некие «главные» поправки к функции Грина нулевого приближения. Он основывается на теореме Вика для статистических средних упорядоченного во времени произведения операторов, а одним из способов суммирования «главных» диаграмм является уравнение Дайсона, выражающее полную функцию Грина через функцию Грина нулевого приближения и массовый оператор. В случае сильной связи обычная теорема Вика не применима из-за не билинейной формы гамильтониана основного приближения, в который необходимо включать члены, ответственные за сильные взаимодействия.

Предлагались различные пути решения этой проблемы: 1) с помощью кумулятивного разложения Кубо и операторной техники Хаббарда можно построить теорию возмущений и диаграммную технику на основе операторов Хаббарда; 2) используя преобразования Хаббарда–Стратоновича, заключающееся в выражении части возмущения действия в модели Хаббарда в виде интеграла Гаусса по дополнительному полю Грассмана; 3) с помощью обобщенной теоремы Вика. Техника последнего типа, предложенная В.А. Москаленко и независимо Мещнером, работает с простой алгеброй Ферми-операторов, а диаграммная техника Москаленко позволяет также получить уравнение типа Дайсона. Диаграммная техника Москаленко успешно разработана для анализа модели Хаббарда, примесной и периодической моделей Андерсона, а также модели Хаббарда–Холстейна и др. Для исследования явления перехода Мотта рассмотрена нормальная фаза модели, а также сверхпроводящая фаза – для изучения возможного появления сверхпроводимости и механизмов образования куперовских пар (появления эффективного притяжения между электронами и их коллективизации). Невозможность использования теоремы Вика решается с помощью обобщенной теоремы Вика на сильно коррелированные системы. Когда взаимодействие слабо, эта теорема переходит в обычную теорему Вика. Это обобщение основывается на статистическом кумулянтном разложении Кубо. Помимо членов, соответствующих обычной теореме Вика, возникают многочастичные структуры – неприводимые функции Грина или кумулянты Кубо, в которых отражены все флуктуации системы, обусловленные взаимодействием. Для одночастичных функций Грина электронов и фононов различных моделей получены уравнения типа Дайсона. Массовый оператор в этом уравнении содержит сумму неприводимых функций Грина.

Роль параметра Хунда  $I_H$  в основном изучалась также в рамках метода ДТСП. При изучении модели Хаббарда с двукратным вырождением этим методом с использованием численной ренормгруппы, а также методами вспомогательных бозонных полей было обнаружено, что природа моттовского диэлектрика зависит от отношения  $U/U'$  (где  $U, U'$  – внутри- и межорбитальное взаимодействия соответственно).

Связь Хунда также имеет отношение к объяснению необычного изотопического эффекта в многоорбитальных системах типа железосодержащих сверхпроводников. Роль этой связи исследована в рамках магнитных примесей и квантовых точек, таких как  $\gamma$ -модель, модель Кондо и примесная модель Андерсона с двукратным вырождением, что привело к различным предсказаниям поведения в этих системах температуры Кондо как функции от  $I_H$ .

Системы, в которых имеется как сильное взаимодействие электронов друг с другом, а так же с фононами исследуются в основном в рамках Модели Хаббарда–Холстейна. Исследования этой модели показали, что при определенных значениях доминирующей фононной моды в модели возможна реализация перехода металл-диэлектрик Мотта при возрастании температуры. В зависимости от того, какое взаимодействие является доминирующим в системе, а так же от заполнения зоны  $n$ , наблюдается различная физическая картина. Система находится в состоянии антиферромагнитного моттовского изолятора в случае, когда доминирует кулоновское взаимодействие  $U$ , либо в так называемом биполярном локализованном состоянии (или в состоянии волны зарядовой плотности) в случае доминирования константы электрон-фононного взаимодействия  $g$ .

В сверхпроводящих системах, в которых электрон-фононное взаимодействие предполагается значительным, исследования демонстрируют, что оно либо несущественно влияет на сверхпроводимость, либо благоприятствует  $d$ -спариванию электронов. Предложены два механизма появления сверхпроводящих электронных пар в таких системах: поляронный и биполяронный. При исследовании модели Хаббарда–Холстейна в системах с сильным взаимодействием с оптическими фононами с помощью диаграммной техники предложен поляронный механизм сверхпроводимости, который основывается на предположении о спаривании поляронов путем обмена фононными облаками, а в случае взаимодействия с акустическими фононами в модели Хаббарда этим же методом показано, что вклад от поляронов несуществен.

## 2 ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА СИЛЬНОЙ СВЯЗИ МОСКАЛЕНКО

### 2.1 Мацубаровские функции Грина

Будем основываться на аппарате мацубаровских квантово-статистических функций Грина (ФГ). Заимствованный из теории поля и адаптированный для систем не равных нулю температур, он стал ключевым аппаратом для решения задач квантовой статистики. ФГ наряду с корреляционными функциями, обобщением которых являются, имеют простой физический смысл. Они представляют собой в некотором смысле функции, описывающие усредненное поведение типичной частицы в твердом теле (электрона или фонона). Одночастичная – одной частицы, двухчастичная – двух и так далее. Знание одночастичной ФГ позволяет найти ТДП системы, распределение количества частиц по энергии, импульсу, спинам и т.д.; двухчастичной – те макроскопические характеристики, которые обусловлены реакцией системы на внешнее воздействие (например, при приложении электрического и магнитного полей). Физические величины, такие как, проводимость и восприимчивость, по сути, являются запаздывающими корреляционными функциями, обобщением которых являются запаздывающие ФГ [143]. Однако вычислять часто удобнее не запаздывающие ФГ, а ФГ в форме, предложенной Мацубарой [144]. Запаздывающие ФГ и мацубаровские эквиваленты. Запаздывающие ФГ можно получить из мацубаровских простой заменой  $i\omega_n$  на  $i\omega_n + \delta$ ,  $\delta$  – бесконечно малое.

Мацубаровские ФГ вычисляются с помощью метода теории возмущений, и в частности ее графического представления – диаграммной техники. Для облегчения восприятия основной части работы, основываясь на трудах [79, 81, 143-146], законспектируем общую схему диаграммной техники для систем со слабым взаимодействием. Поскольку диаграммная техника для систем с сильным взаимодействием, развиваемая в работе, является прямым ее обобщением. Одночастичная мацубаровская функция Грина определяется как

$$G(x, \tau, \tau') = -\langle T_\tau \psi_x(\tau) \bar{\psi}_{x'}(\tau') \rangle \quad (2.1)$$

Скобки  $\langle \hat{A} \rangle$  означают усреднение (математическое ожидание) некоего оператора  $\hat{A}$  по энергетическому распределению системы с матрицей плотности  $\rho$  и статистической суммой  $Z$ , т.е.

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{Tr[\rho \hat{A}]}{Tr \rho} \quad (2.2)$$

Tr означает суммирование по полной системе собственных векторов  $|n\rangle$ .

В случае квантово-статистических функций Грина усреднение производят по большому каноническому ансамблю отвечающему системе с переменным числом частиц. Матрица плотности  $\rho$  и статистическая сумма  $Z$  которого соответственно:

$$\rho = \exp(-(H - \mu N)\beta)$$

$$Z = \text{Tr} \rho = \exp(-\beta \Omega) = \text{Tr} [\exp(-(H - \mu N)\beta)] = \sum_n \exp(-E_n - \mu N)\beta \quad (2.3)$$

$$\langle \dots \rangle = \frac{\text{Tr}(\exp(-(H - \mu N)\beta) \dots)}{\text{Tr}(\exp(-(H - \mu N)\beta))} \quad (2.4)$$

Здесь  $\mu$  – химический потенциал,  $N$  оператор полного числа частиц,  $\beta = 1/k_B T$ ,  $T$  – температура,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $E_n$  – собственные значения энергии гамильтониана  $H$ ,  $\psi_x(\tau)$ ,  $\bar{\psi}_x(\tau')$  в (2.1) соответственно операторы рождения и уничтожения (фермионные или бозонные) в представлении Гейзенберга

$$\psi_x(\tau) = e^{H\tau} \psi_x(0) e^{-H\tau}, \quad \bar{\psi}_x(\tau') = e^{H\tau'} \psi_x^\dagger(0) e^{-H\tau'}$$

$x, x'$  – совокупность координат и спиновых индексов,  $H$  – гамильтониан системы,  $\tau$  – «мнимое время». В квантово-статистических функциях Грина, в форме предложенной Мацубарой, время  $t$ , от которого зависят операторы  $\psi_x(t)$ , а точнее  $it$  заменено на «мнимое время»  $\tau$  (так же его называют термодинамическим временем). Смысл этой замены заключается в рассмотрении температуры входящей в  $e^{-H\beta}$  и времени  $t$ , от которого зависят операторы, как реальную и мнимую части одной комплексной переменной. Это позволяет выполнять разложение в ряд теории возмущений по одной переменной  $\tau$  изменяющейся в интервале  $0 \leq \tau \leq \beta$ .

$T_\tau$  в (2.1) – оператор хронологического упорядочения, который располагает операторы в порядке возрастания времен, от которых они зависят (справа налево), то есть

$$T_\tau [\psi(\tau) \psi^\dagger(\tau')] = \Theta(\tau - \tau') \psi(\tau) \bar{\psi}_{x'}(\tau') + \eta \Theta(\tau' - \tau) \bar{\psi}_{x'}(\tau') \psi(\tau), \quad (2.5)$$

где  $\Theta(\tau - \tau')$  ступенчатая функция. Знак  $\eta$  обычно для фермионных операторов ставится «-» для бозонных «+».

Таким образом, эквивалентное определение ФГ Мацубары

$$G(x, \tau, \tau') = -Tr \left[ e^{-(H-\mu N-\Omega)\beta} T_\tau e^{(H-\mu N)\tau} \psi_x(\tau) \bar{\psi}_{x'}(\tau') e^{-(H-\mu N)\tau} \right] \quad (2.6)$$

Воспользовавшись теоремой о неизменности значения следа при циклическом изменении расположения операторов, а так же тем фактом, что операторы в экспонентах коммутируют, перепишем (2.6) в виде

$$G(x, \tau, \tau') = -\Theta(\tau - \tau') Tr \left[ e^{-\beta(H-\mu N-\Omega)} e^{(H-\mu N)(\tau-\tau')} \psi_x e^{-(H-\mu N)(\tau-\tau')} \bar{\psi}_{x'} \right] + \\ + \eta \Theta(\tau' - \tau) Tr \left[ e^{-\beta(H-\mu N-\Omega)} e^{(H-\mu N)(\tau'-\tau)} \bar{\psi}_{x'} e^{-(H-\mu N)(\tau'-\tau)} \psi_x \right] \quad (2.7)$$

Таким образом, функция Грина зависит только от разности мнимого времени  $\tau - \tau'$ .

Записав вместо  $\tau - \tau'$  просто  $\tau$ , получим еще одно эквивалентное определение температурной ФГ

$$\langle T_\tau \psi_x(\tau) \bar{\psi}_{x'}(\tau) \rangle = -Tr \left[ e^{-\beta(H-\mu N-\Omega)} T_\tau e^{(H-\mu N)\tau} \psi_x e^{-(H-\mu N)\tau} \bar{\psi}_{x'} \right] \quad (2.8)$$

### 2.1.1 Аномальные функции Грина. Матричный формализм Горькова-Набу

Горьков адаптировал аппарат квантово-статистических функций Грина так же для сверхпроводящих систем [77]. Он показал, что сверхпроводящее состояние описывается как «обычными» функциями Грина, так и функциями Грина, соответствующими только сверхпроводящему состоянию – аномальными функциями Грина. Основное состояние сверхпроводящих систем отличается от обычного наличием связанных пар электронов, которые в состоянии покоя ведут себя как целое и имеют целый спин, а их общий импульс равен нулю. Это обстоятельство способствует появлению помимо средних  $\langle T \psi_x(\tau) \bar{\psi}_{x'}(\tau') \rangle$  имеющих размерность плотности числа частиц величины  $\langle N | T \psi_x(\tau) T \psi_{x'}(\tau') | N+2 \rangle \langle N+2 | T \psi_x(\tau)^\dagger \psi_{x'}(\tau')^\dagger | N \rangle$  имеющие размерность плотности пар электронов. Средние типа  $\langle N | T \psi(\tau) \psi(\tau') | N+2 \rangle$  и  $\langle N+2 | T \psi^\dagger(\tau) \psi^\dagger(\tau') | N \rangle$  или  $\langle \psi_\downarrow(x) \psi_\uparrow(x) \rangle$  и  $\langle \psi(x)_\uparrow^\dagger \psi(x)_\downarrow^\dagger \rangle$  называются аномальными средними (здесь индексы «x», «x'» для простоты упущены), поскольку, усреднение производится по произведению операторов рождения или уничтожения друг с другом.

Сверхпроводящее состояние описывается следующими функциями Грина

$$G_{\alpha\beta}(x, x', \tau, \tau') = -\langle T_\tau \psi_\alpha(\tau) \psi_\beta^\dagger(x)(\tau') \rangle$$

$$F_{\alpha\beta}(x-x') = e^{i\mu\tau} \langle N | T_{\tau} \psi_{\alpha}(x) T \psi_{\beta}(x) | N+2 \rangle \quad (2.9)$$

$$F_{\alpha\beta}(x-x') = e^{-i\mu\tau} \langle N+2 | T_{\tau} \psi_{\alpha}^{\dagger}(x) T \psi_{\beta}^{\dagger}(x) | N \rangle$$

Здесь  $\alpha, \beta$  – спиновые индексы, записанные в общей форме

Или в матричном представлении (индексы опущены для простоты):

$$g(x, x') = \begin{pmatrix} G & F^{\dagger} \\ -F & G \end{pmatrix}$$

Этот формализм называется формализмом Горькова-Намбу, поскольку Намбу пришел к аналогичной идее описания сверхпроводника, однако с помощью двухкомпонентных операторов поля

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \Psi_{\downarrow}(x) \\ \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(x) \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(x) = (\psi_{\uparrow}^{\dagger}(x), \psi_{\downarrow}(x))$$

которые отвечающих электрон-дырочному формализму и автоматически приводят к той же матричной структуре теории

$$g(x, x') = -\langle T_{\tau} \Psi(x) \Psi(x') \rangle$$

$$g(x, x') = \begin{pmatrix} -\langle T_{\tau} \psi_{\uparrow}(x) \bar{\psi}_{\uparrow}(x') \rangle & -\langle T_{\tau} \psi_{\uparrow}(x) \psi_{\downarrow}(x') \rangle \\ -\langle T_{\tau} \bar{\psi}_{\downarrow}(x) \bar{\psi}_{\uparrow}(x') \rangle & -\langle T_{\tau} \bar{\psi}_{\downarrow}(x) \psi_{\downarrow}(x') \rangle \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

### 2.1.2 Запаздывающие Функции Грина. Спектральная функция

Многие физические величины вычисляются не с помощью мацубаровской ФГ, а запаздывающих функций Грина. Последние получаются заменой

$$G(k, i\omega_n)_{i\omega_n \rightarrow \omega_n + i\delta} = G_{ret}(k, \omega) \quad (2.11)$$

Очень важная физическая величина, такая как спектральная функция (или плотности вероятности)  $A(k, \omega)$  определяется как мнимая часть запаздывающей ФГ, помноженной на -2:

$$A(k, \omega) = -2\text{Im}G_{ret}(k, \omega) \quad (2.12)$$

Эта функция обычно интерпретируется как функция вероятности обнаружения электрона с импульсом  $k$  и энергией  $\omega$  и обладает следующим свойством:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A(k, \omega) \quad (2.13)$$

А такая важная величина в физике твердого тела, как спектральная плотность электронных состояний  $\rho(E)$  определяется

$$\rho(E) = -\frac{1}{N} \sum_k A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_k \text{Im} G_{\text{ret}}(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.14)$$

Суммирование по  $k$  в этой формуле можно заменить интегрированием по энергии электрона  $\varepsilon$

$$\frac{1}{N} \sum_k \dots = \int \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon \quad (2.15)$$

В результате получим выражение для нахождения спектральной плотности электронных состояний.

$$\rho(E) = \int A(\mathbf{k}, \omega) \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon \quad (2.16)$$

## 2.2 Теория возмущений для функции Грина

Теперь перейдем к рассмотрению метода вычисления мацубаровской ФГ – диаграммной технике. По сути, она является графическим представлением теории возмущений, и здесь мы сталкиваемся с теми же трудностями, такими как сходимость разложения [81].

Первый шаг состоит в представлении исходного гамильтониана системы в виде суммы двух частей:

$$H = H_0 + H' \quad (2.17)$$

Интервал значений энергий, отвечающий  $H$  должен быть достаточно малым, такой чтобы было возможно по степеням  $H'$  произвести разложение (в случае

слабовзаимодействующих систем обычно это гамильтониан отвечающий взаимодействию);  $H_0$ , в свою очередь, соответствует гамильтониану свободных частиц.

ФГ являются периодическими функциями, соответственно могут быть разложены в ряд Фурье:

$$G(x, \omega_n) = \int_0^\beta \exp(-i\omega_n \tau) G(x, \tau) d\tau; \quad (2.18)$$

$$G(x, \omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_n \exp(-i\omega_n \tau) G(x, \tau) \quad (2.19)$$

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \quad \text{для системы электронов,}$$

$$\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta} \quad \text{для системы фононов}$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Фурье-образ функций Грина системы невзаимодействующих частиц можно рассчитать точно, поскольку известны энергетические распределения невзаимодействующих фермионов и бозонов. Найдем в качестве примера функцию Грина системы невзаимодействующих электронов в импульсном представлении  $G_0(\mathbf{k}, \omega_n)$ . Здесь  $\mathbf{k}$  – импульс электрона.

Гамильтониан системы невзаимодействующих электронов

$$H_0 = \sum_k \xi_k C_k C_k^\dagger \quad (2.20)$$

$\xi_k = \epsilon_k - \mu$ ,  $\epsilon_p$  – энергия электрона с импульсом  $k$

Соответственно,

$$C_k(\tau) = e^{H_0 \tau} C_k e^{-H_0 \tau} = e^{-\xi_k \tau} C_k$$

$$C_k^\dagger(\tau) = e^{H_0 \tau} C_k^\dagger e^{-H_0 \tau} = e^{\xi_k \tau} C_k^\dagger$$

Это следует из теоремы Бейкера-Хаусдорфа:

$$e^A C e^{-A} = C + [A, C] + \frac{1}{2!} [A, [A, C]] + \frac{1}{3!} [A, [A, [A, C]]] + \dots \quad (2.21)$$

где  $A, C$ - операторы

Преобразуем вначале

$$G_0(k, \tau) = -\Theta(\tau)e^{-\xi_k \tau} C_k C_k^\dagger + \Theta(-\tau)e^{-\xi_k \tau} C_k^\dagger C_k = -e^{-\xi_k \tau} \left[ \Theta(\tau)(1 - n_F(\xi_k)) - \Theta(-\tau)n_F(\xi_k) \right] = \quad (2.22)$$

$$= -e^{-\xi_k \tau} \left[ \Theta(\tau) - n_F(\xi_k)(\Theta(\tau) + \Theta(-\tau)) \right] = -e^{-\xi_k \tau} \left[ \Theta(\tau) - n_F(\xi_k) \right]$$

Здесь учтено, что  $C_k^\dagger C_k = n_F(\xi_k)$  и представляет собой распределение по энергиям системы не взаимодействующих фермионов (нулевого приближения).

Как известно, это распределение имеет вид

$$n_F(\xi_k) = \frac{1}{1 + e^{\xi_k \beta}} \quad (2.23)$$

Тогда Фурье-образ

$$G_0(k, \omega_n) = -\left[1 - n_F(\xi_k)\right] \int_0^\beta \exp[(i\omega_n - \xi_k)\tau] d\tau = \frac{-\left[1 - n_F(\xi_k)\right] (\exp(i\omega_n - \xi_k)\beta - 1)}{i\omega_n - \xi_k}$$

$$= \frac{(1 - \exp(i\omega_n \beta) \exp(-\xi_k \beta))}{(1 + e^{-\xi_k \beta})(i\omega_n - \xi_k)} \quad (2.24)$$

Учитывая, что  $\beta i\omega_n = i(2n+1)\pi$ ;  $\exp(\beta i\omega_n) = -1$

Получим,

$$G_0(p, \omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_p}; \quad (2.25)$$

Функция Грина невзаимодействующих фононов приведем для справки без вычисления.

Фононная функция Грина определяется как

$$D(q, \tau) = -T_\tau A(q, \tau) A(-q, 0) \quad (2.26)$$

$$A(q, \tau) = e^{H\tau} (a_q + a_{-q}^\dagger) e^{-H\tau}$$

Где  $a_q$  – оператор уничтожения фонона,  $q$  – фононная координата.

Функция Грина нулевого приближения (свободных фононов):

$$D_0(q, \omega_n) = -\frac{2\omega_q}{\omega_n^2 + \omega_q^2} \quad (2.27)$$

Следующий шаг состоит в представлении матрицы плотности большого канонического ансамбля  $\rho = \exp(-\beta H - \mu N)$  через матрицу плотности соответствующую гамильтониану нулевого приближения  $H_0$  и так называемую S-матрицу плотности, т.е.

$$\rho = \exp(-\beta H - \mu N) = \exp(-\beta H_0 - \mu N) S(\beta) \quad (2.28)$$

Матрица плотности  $\rho$  удовлетворяет уравнению Блоха

$$-\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = (H_0 + H') \rho \quad (2.29)$$

Это же уравнение для S-матрицы

$$-\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta} = H'(\beta) S(\beta) \quad (2.30)$$

где  $H'(\tau) = e^{H_0 \tau} H' e^{-H_0 \tau}$ ,  $\tau$  изменяется в интервале  $-\beta \leq \tau \leq \beta$

Решение этого уравнения при начальном условии  $S(0)=1$  будет иметь вид

$$S(\beta) = 1 - \int_0^\beta H'(\tau_1) S(\tau_1) d\tau_1 = 1 - \int_0^\beta H'(\tau_1) d\tau_1 + (-1)^2 \int_0^\beta H'(\tau_1) d\tau_1 \int_0^{\tau_1} H'(\tau_2) S(\tau_2) d\tau_2 \quad (2.31)$$

$$S(\beta) = 1 + S_1(\beta) + S_2(\beta) + S_3(\beta) + \dots + S_n(\beta)$$

Где  $S_n$  выражается n-кратным интегралом по произведению операторов рождения и уничтожения, определяемое  $H'(\tau)$ .

Это разложение является ключевым при расчете ФГ. Функцию Грина в представлении взаимодействия можно записать в аналогичном теории поля виде. Усреднение будет производиться не по основному вакуумному состоянию, а по гамильтониану нулевого приближения.

Электронную температурную функцию Грина можно записать

$$G(x, x') = -\frac{\langle T_\tau C(\mathbf{x}) \bar{C}(\mathbf{x}') S(\beta) \rangle_0}{S(\beta)_0} \quad (2.32)$$

Здесь  $\mathbf{x}, \mathbf{x}'$  – совокупность координат и «термодинамического времени».

И, согласно теореме о связанном кластере [130] формулу (2.26) можно упростить

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\langle T_\tau C(\mathbf{x}) \bar{C}(\mathbf{x}') S(\beta) \rangle_0^c \quad (2.33)$$

Нижний индекс «0» в  $\langle \dots \rangle_0^c$  означает, что усреднение производится для системы с гамильтонианом  $K_0 = H_0 - \mu N$ , а верхний «с», что учитывать нужно только связанные диаграммы (подробнее об этом ниже), а разложение в знаменателе (2.32) исчезает.

Отметим, что S-матрицу плотности так же определяют как унитарный оператор эволюции (или унитарную матрицу  $U$ ).

Введем определения

$$U(\tau) = \exp(\tau K_0) \exp(-\tau K)$$

$$\bar{U}^{-1}(\tau) = \exp(+\tau K) \exp(\tau K_0)$$

$$S(\tau_1, \tau_2) = T \exp\left(-\int_{-\tau_1}^{\tau_2} d\tau H'(\tau)\right) = U(\tau_1) U^{-1}(\tau_2)$$

В связи с этим встречается другое название S-матрицы – оператор эволюции  $U(\beta)$

$$U(\beta) = T_\tau \left\{ \exp\left(-\int_0^\beta H'(\tau) d\tau\right) \right\}.$$

### 2.2.1 Диаграммная техника «Мацубары-Блоха» слабого взаимодействия. Теорема Вика. Уравнение Дайсона

После того, как мы подставим разложение для  $S(\beta)$  (2.31) в (3.33), возникнет сумма многочастичных структур, представленных  $n$ -кратным интегралом по  $(\tau_1, \tau_2, \tau_3 \dots \tau_n)$  средних  $\langle \dots \rangle_0$  от произведения упорядоченных по мнимому времени  $\tau$  операторов рождения и уничтожения из одной, двух, трех и т.д. пар операторов, определяемых ФГ и

типом взаимодействия. Количество этих пар зависит от порядка разложения  $n$ . В первом порядке (в нулевом приближении) эта пара всегда одна – невозмущенная функция Грина. Во втором приближении к ней прибавляется интеграл по  $\tau_1$  от среднего произведения, содержащего кроме операторов из определения ФГ так же операторы рождения (уничтожения) определяемые оператором  $H'(\tau_1)$ . В третьем – к этим двум прибавляется двойной интеграл  $d\tau_1, d\tau_2$  от среднего произведения, составленного из упорядоченных по времени операторов из определения ФГ и двух совокупностей операторов из  $H(\tau_1)H(\tau_2)$  и так далее. Эти произведения, в общем, могут содержать как фермионные, так и бозонные операторы, что определяется типом ФГ и видом взаимодействия  $H'(\tau)$ .

Далее, применяем теорему Вика.

Эта теорема для температурных функций Грина имеет две функции. Первая заключается в «парности». В случае нормальных функций Грина число операторов рождения должно быть равно числу операторов уничтожения. Если мы берем состояние  $|n\rangle$  и действуем на него оператором  $\psi_x(\tau)$ , то чтоб вернуться к состоянию  $\langle n|$  из другого конца операции следа, нам необходимо присутствие оператора вида  $\bar{\psi}_x(\tau)$  в произведении операторов. Хотя под скобками усреднения содержатся  $n$  операторов рождения и уничтожения, каждый оператор рождения должен соответствовать тому же состоянию, что и ему сопряженный оператор уничтожения и, наоборот, иными словами произведения пар операторов, которые соответствуют разным состояниям, равны нулю:

$$\langle T\psi_x(\tau)\bar{\psi}_{x'}(\tau') \rangle = 0 \text{ во всех случаях кроме } x = x'.$$

Вторая функция этой теоремы заключается в установлении правил разбиения средних произведений от упорядоченных по времени операторов на сумму более простых средних.

То есть

$$\langle ABC\dots \rangle_0 = ?$$

Обычно среднее от произведения операторов нельзя разбить на произведение средних от этих операторов.

$$\langle AB \rangle_0 \neq \langle A \rangle_0 \langle B \rangle_0$$

Однако эти средние можно разбить на сумму произведений, составленную из всевозможных комбинаций упорядоченных по времени средних  $\dots_0$  от произведения

одной пары операторов (попарных произведений). Попарные произведения это произведения оператора и рождения  $\bar{\psi}(\tau)$  и уничтожения  $\psi(\tau)$  частицы для системы, отвечающей гамильтониану  $H_0$ , т.е. на ФГ нулевого приближения. При этом мы должны расположить операторы рождения и уничтожения частиц таким образом, чтоб перед оператором уничтожения стоял оператор рождения (слева). Если мы совершили перестановку операторов, то знак меняется, т. е. . и перед комбинацией из средних от попарных произведений, в которой перестановка операторов при составлении комбинации была совершена нечетное количество раз, ставится знак «-», а четное – «+».

Например,

$$\langle T \psi_x(\tau) \bar{\psi}_{x_1}(\tau_1) \psi_{x'}(\tau_1) \bar{\psi}_x(\tau') \rangle_0 = \delta_{x,x_1} \delta_{x_1,x'} G^0(x, \tau - \tau_1) - \eta_{x_1} \delta_{x,x'} G^0(x, \tau - \tau')$$

$\eta_{x_1}$  определяется знаком перестановки

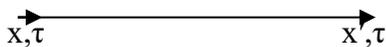
Эта теорема применима только для гамильтонианов нулевого приближения билинейных по операторам. Если имеется несколько типов операторов, то изначально структура из среднего по гамильтониану нулевого приближения разбивается на произведение средних от групп операторов одного типа.

Фурье-образ функции  $\langle T \psi_x(\tau) \psi_{x'}(\tau') \rangle_0 = G^0(x, \tau - \tau')$  можно вычислить точно. Это будут Фурье-образы ФГ свободных частиц.

Теперь это разложение и разбиение по теореме Вика для ФГ представим графически, то есть средние изобразим определенными рисунками. Средние попарных произведений (невозмущенные одночастичные ФГ) обычно договариваются изображать какой-нибудь линией, например, электронные свободные ФГ – сплошными линиями, а фононные – волнистыми. Пространственно-временные координаты  $\mathbf{x}$  (или импульса  $\mathbf{k}$ ), «термодинамическое» время, а так же индексы спинов указываются точками на концах этих линий, это узлы или вершины диаграмм. Интегрирование по пространственно-временным координатам и суммирование по внутренним спиновым индексам производится в вершинах диаграмм. В узлах удовлетворяются аддитивные законы сохранения, линии так же им удовлетворяют.

Отделить оператор рождения от уничтожения можно направлением стрелки на линии.

Например, среднее  $\langle T \psi_x(\tau) \bar{\psi}_{x'}(\tau') \rangle_0 = G^0(x, \tau - \tau')$  изобразиться



Каждое слагаемое в графическом представлении разложения ФГ представляет собой «диаграммный вклад». Такая отдельная диаграмма связана, если у нее только два свободных конца, а остальные концы соединяются в общих точках – вершинах диаграмм (в противном случае диаграмма не связана). Согласно теореме о связном кластере, при вычислении ФГ нужно учитывать только связанные диаграммы.

В первом порядке разложения одночастичной ФГ ограничиваются функцией Грина свободных частиц, а в следующих порядках появляются связки свободных функций Грина с линиями взаимодействия. Перед каждой диаграммой ( $n$ -ого порядка) выписывается множитель обусловленный множителем  $1/n!$  из разложения S-матрицей плотности. Диаграммы, которые полностью переходят друг в друга лишь при перестановке операторов  $H'$  в вершинах, являются типологически эквивалентными и дают равноценный вклад в поправки. Поэтому нужно принимать во внимание только типологически неэквивалентные диаграммы и спаривания, которые приводят к ним, множитель перед ними будет пропорционален  $\lambda^n$ , где  $\lambda$  – константа разложения. Вклад от каждой такой диаграммы уже не содержит множителя существенно зависящего от порядка диаграммы. Благодаря этому каждая диаграмма может быть разбита на элементы, которые можно рассматривать отдельно как поправку к той или иной ФГ. К числу несущественных зависимостей от  $n$  относится множитель  $\lambda^n$ . Такой множитель не мешает разбиению диаграммы на элементы, а множитель  $1/n!$  препятствовало бы такому разбиению и суммированию частей диаграмм по отдельности.

Другое обстоятельство, заслуживающее внимание, – это случай, когда времена в обоих аргументах одной из нулевых функций совпадают [141]. Это происходит только тогда, когда спариваются два оператора из одного гамильтониана  $H'$ . Ввиду того, что порядок операторов в  $H'$  задан (все « $\dagger$ » стоят слева от всех), такие  $G^0$  надо понимать как предел  $\lim_{\tau \rightarrow 0} G^0(\tau, \tau + \delta) = G^0(-\delta)$ . Если в выражении возникают ФГ от совпадающих временных аргументов  $G^0$ , их следует понимать, как  $\lim_{\tau \rightarrow 0} G^0(x, -\tau)$ .

Чаще всего в задачах квантовой статистики нельзя ограничиться несколькими первыми порядками теории возмущений, поэтому нам необходимо просуммировать бесконечную или конечную совокупность «главных» (дающих по порядку величины одинаковый вклад) членов теории возмущений. Этому суммированию можно сопоставить графическое суммирование. Диаграммы, изображающие такую сумму, составляется из

элементов, каждый из которых в свою очередь является результатом суммирования. Один из способов суммирования был предложен Дайсоном [147]

Можно выделить в диаграммном разложении для ФГ часть, не имеющую внешних линий и соединенную с остальной частью двумя линиями соответствующим свободным функциям Грина. Любую часть диаграмм соединенную с остатком двумя линиями соответствующим свободным функциям Грина называют собственно-энергетической частью. Неприводимой собственно-энергетической частью называют такую, которую нельзя разделить на две части, соединенные только одной свободной функцией Грина. Всякая диаграмма для функций Грина представляет собой основную «свободную» линию, с нанизанными на нее неприводимыми собственно энергетическими частями, которые могут повторяться бесконечное количество раз и в любой последовательности. Любая диаграмма из разложения ФГ начинается со свободной ФГ, затем следует любая неприводимая собственно энергетическая часть. Если отсечь эти два элемента, то остаток будет начинаться со свободной ФГ и содержать любое число любых собственно энергетических частей. Таким образом, остаток представляет собой опять полную функцию Грина. Поэтому функцию Грина можно записать как

$$G = G_0 - G_0 \Sigma G \quad (2.34)$$

Или

$$G^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma$$

$$\Sigma = \Sigma_1 + \Sigma_2 + \Sigma_3 + \Sigma_4 + \dots \quad (2.35)$$

В этом уравнении  $\Sigma$  представляет собой сумму всех неприводимых собственно энергетических частей. Эта сумма называется массовым оператором, а уравнение (2.34) уравнением Дайсона. Оно устанавливает связь между полной функцией Грина и массовым оператором.

### **2.2.2 Диаграммная техника сильной связи на примере модели Хаббарда. Обобщенная теорема Вика**

Теперь перейдем к рассмотрению диаграммной техники для ФГ отвечающей системе с сильными корреляциями на примере МХ.

МХ предложена для описания поведения электронов в узкозонных системах. Основное допущение модели состоит в том, что на одном узле решетки могут одновременно находиться не более двух взаимодействующих с энергией кулоновского

отталкивания  $U$  d-электронов (которые могут участвовать в проводимости). Модель предполагает приближение Гайтлера-Лондона, в связи с этим при описании локальных свойств такой системы можно рассматривать гамильтониан отдельного атома решетки. Таким образом, «локальный» гамильтониан, то есть часть гамильтониана без учета перескоков электронов, и соответствующий энергии взаимодействия электронов внутри зоны, образованной d-электронами, можно представить в виде суммы составленной из гамильтонианов отдельных атомов:

$$H^0 = \sum_i H_i^0,$$

Второй оператор гамильтониана Хаббарда  $H'$  – представляет собой гамильтониан перемещения электронов в потенциальном поле, обусловленном ядрами атомов, находящихся в узлах решетки, с самосогласованным полем электронов из других зон. В гамильтониан модели введен член  $-\mu\hat{n}_e$  поскольку при построении термодинамической теории возмущений, усреднение будем производить по большому каноническому ансамблю,  $n_i$  – количество электронов на узле решетки (его возможные значения 0, 1, 2).

Гамильтониан модели

$$\begin{aligned} H &= H^0 + H', H^0 = \sum_i H_i^0 \\ H_i^0 &= -\mu \sum_{\sigma} C_{i\sigma}^{\dagger} C_{i\sigma} + U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \\ H' &= \sum_{i,j} \sum_{\sigma} t(j-i) C_{j\sigma}^{\dagger} C_{i\sigma}, \quad n_{i\sigma} = C_{i\sigma}^{\dagger} C_{i\sigma} \\ t(i-j) &= t^*(j-i), \quad t(0) = 0, t(i-j) = N^{-1} \sum_k (\varepsilon_k - T_0) \exp(ik(x_i - x_j)) \end{aligned} \quad (2.36)$$

Здесь  $C_{i\sigma}^{\dagger}$  ( $C_{i\sigma}$ ) – оператор рождения (уничтожения) электронов в состоянии Ванье (с радиус-вектором  $R_i$  относительно атомного ядра) и с проекцией спина  $z = 1/2\sigma$ ,  $\sigma = \pm 1$ .  $\mu$  – химический потенциал системы электронов,  $U$  – энергия кулоновского отталкивания электронов одного узла с противоположными спинами,  $n_{i\sigma}$  – оператор числа электронов со спином  $\sigma$  на  $i$ -ом узле кристаллической решетки,  $t(i-j)$  – интеграл перескока электрона с узла  $i$  на узел  $j$ . Интеграл перескока электрона с узла  $i$  на соседний узел  $j$  (туннелирования) связан с блоховскими энергиями  $\varepsilon(k)$  отвечающим одноэлектронным состояниям в решетке следующим соотношением.

$$t(i-j) = N^{-1} \sum_k \exp[ik(R_i - R_j)] \quad (2.37)$$

В случае сильных корреляций кулоновское взаимодействие  $U$  значительно превышает ширину зону проводимости  $W$ , определяемую параметром перескока  $t(i-j)$ , поэтому оператор, ответственный за взаимодействие в качестве возмущения мы брать не можем. Формализм теории возмущений в рамках локального приближения позволяет точно вычислять локальные (атомные) физические свойства системы, и поэтому передача этой локальной информации соседним узлам, может быть рассмотрена в теории возмущений по степеням интеграла перескока. Таким образом, за гамильтониан нулевого приближения следует брать гамильтониан одного узла с взаимодействующими электронами, а вероятность перескоков электронов – в качестве возмущения

ФГ нулевого приближения и, соответственно, локальные или атомные свойства системы, можно точно вычислять с помощью методики  $X$ -операторов или операторов Хаббарда  $\hat{X}_i^{pq} = |i, p i, q\rangle$ , введенными Хаббардом в работе [11]. Смысл этих операторов (называемых операторами  $X$  или операторами Хаббарда) заключается в следующем:  $\hat{X}_i^{pq}$  уничтожает атом в состоянии  $|i, q\rangle$  на узле  $i$  и рождает его в состоянии  $|i, p\rangle$ , т. е. осуществляет переход из состояния  $|i, q\rangle$  в  $|i, p\rangle$ . Поскольку в МХ предполагается максимальное число электронов на узле равно 2, возможны следующие состояния одного переходного атома: (1) без электронов, (2) с одним электроном с проекцией спина  $\sigma = \uparrow$ , (3) с одним электроном с проекцией спина  $\sigma = \downarrow$ , (4) с двумя электронами с противоположно направленными спинами. Таким образом, из 4 состояний изолированного атома можно составить 16 операторов Хаббарда.

Выпишем правила алгебры операторов Хаббарда, для упрощения опускаем узельный индекс  $\hat{X}^{mn} | p = | mp |$

$$\hat{X}^{mn} | p = | mn | p = \delta_{np} | m, \hat{X}^{mn} \hat{X}^{pr} = \delta_{np} \hat{X}^{mr}, \hat{X}^{mn} \hat{X}^{nm} = \delta_{mn} \hat{X}^{mm}$$

$$\{ \hat{X}^{mn}, \hat{X}^{pr} \} = \hat{X}^{mn} \hat{X}^{pr} + \hat{X}^{pr} \hat{X}^{mn} = \delta_{np} \hat{X}^{mr} + \delta_{mn} \hat{X}^{pm} \quad (2.38)$$

$$[ \hat{X}^{mn}, \hat{X}^{pr} ] = \hat{X}^{mn} \hat{X}^{pr} - \hat{X}^{pr} \hat{X}^{mn} = \delta_{np} \hat{X}^{mr} - \delta_{mn} \hat{X}^{pm}$$

Здесь фигурные и прямоугольные скобки означают антикоммутиатор и коммутиатор соответственно.

Поскольку операторы Хаббарда действуют фактически на электроны  $i$ -ого атома, они могут выражаться посредством операторов рождения и уничтожения, а точнее через линейные комбинации произведений этих операторов, каждое из которых содержит  $n_{iq}$  операторов уничтожения и  $n_{ip}$  операторов рождения. Таким образом, соотношение количества операторов в каждом произведении равно соотношению  $n_{ip} - n_{iq}$ . Если это соотношение четное число, оператор имеет Ферми-дираковский характер, в четном случае – Бозе-эйнштейновский.

Фермионный оператор  $A$  можно записать в терминах операторов Хаббарда:

$$\left( A = \sum_{m,n} \langle m|A|n \rangle X^{mn} \right) \quad (2.39)$$

В отсутствие перескоков электронов (невозмущенная) одночастичная ФГ  $G^0(i, \sigma, \tau | j, \sigma' \tau')$  имеет вид:

$$G^0(i, \sigma, \tau | j, \sigma' \tau') = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} G_{\sigma}^{(0)}(\tau - \tau') \quad (2.40)$$

$\delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}$  – символы Кронекера.

Фурье-образ этой функции:

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} G(\omega_n) e^{-i\omega\tau}, \quad (2.41)$$

$$G(i\omega_n) = \int_0^{\beta} G(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau, \quad \omega_n = (2n+1) \frac{\pi}{\beta}$$

Найдем функцию Грина нулевого приближения с помощью методики операторов Хаббарда (2.38).

Вначале определим собственные функции и собственные значения  $MX$ . Возможны 4 состояния гамильтониана «изолированного атома»: (1) Без электронов (2) с одним электроном с проекцией спина «вверх»  $\uparrow$  (3) с одним электроном с проекцией спина «вниз»  $\downarrow$  (4) с двумя электронами с противоположно направленными проекциями спинов  $\downarrow\uparrow$ . Соответствующие этим состояниям собственные значения энергии:  $E_0 = 0$ ,  $E_{\sigma} = E_{-\sigma} = \varepsilon$ ,  $E_2 = 2\varepsilon + U$ ,  $\bar{\sigma} = -\sigma$

Тогда гамильтониан изолированного атома:

$$H_0 = \varepsilon_1 n_{\uparrow} + \varepsilon_{-1} n_{\downarrow} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} \quad (2.42)$$

А статистическая сумма  $Z_0 = \text{Tr} e^{-\beta H_{i0}} = e^{-\beta E_0} + \sum_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma}} + e^{-\beta E_2}$

Операторы рождения (уничтожения)  $C_{\sigma} (C_{\sigma}^{\dagger})$  электрона запишутся через операторы Хаббарда (2.38) в следующем виде:

$$\begin{aligned} C_{\uparrow} &= X_{12} + X_{34} = X_{0\sigma} + X_{\bar{\sigma}2}, & C_{\uparrow}^{\dagger} &= X_{21} + X_{43} = X_{\sigma 0} + X_{2\bar{\sigma}} \\ C_{\downarrow} &= X_{13} - X_{24} = X_{0\bar{\sigma}} - X_{\sigma 2}, & C_{\downarrow}^{\dagger} &= X_{31} - X_{42} = X_{\bar{\sigma} 0} - X_{2\sigma} \end{aligned} \quad (2.43)$$

Исходя из алгебраических свойств операторов Хаббарда (2.38), получим

$$\begin{aligned} C_{\uparrow}^{\dagger} C_{\downarrow} &= X_{\sigma\bar{\sigma}}; \\ C_{\downarrow} C_{\uparrow}^{\dagger} &= X_{\bar{\sigma}\sigma} \end{aligned}$$

Тогда ФГ нулевого приближения:

$$G_{\sigma}^0(\omega_n) = \int_0^{\beta} G_{\sigma}^0(\tau) e^{i\omega_n \tau} d\tau = \frac{1}{Z_0} \left[ \frac{e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_{\sigma}}}{i\omega_n + E_0 - E_{\sigma}} + \frac{e^{-\beta E_{\bar{\sigma}}} + e^{-\beta E_2}}{i\omega_n + E_{\bar{\sigma}} - E_2} \right], \quad (2.44)$$

Разложение же статистического среднего от произведения операторов Хаббарда на более простые элементы может быть осуществлено в терминах кумулянтного разложения Кубо [101], то есть:

$$\begin{aligned} \langle A_1(\tau_1) A_2(\tau_2) A_3(\tau_3) \rangle_0 &= \langle A_1(\tau_1) A_2(\tau_2) A_3(\tau_3) \rangle_0^c + \\ &+ \langle A_1(\tau_1) \rangle_0 \langle A_2(\tau_2) A_3(\tau_3) \rangle_0 + \langle A_2(\tau_1) \rangle_0 \langle A_1(\tau_1) A_3(\tau_3) \rangle_0 + \\ &+ \langle A_3(\tau_3) \rangle_0 \langle A_1(\tau_1) A_2(\tau_2) \rangle_0 + \langle A_1(\tau_1) \rangle_0 \langle A_2(\tau_2) \rangle_0 \langle A_3(\tau_3) \rangle_0 \end{aligned} \quad (2.45)$$

где  $A_i$  — операторы Хаббарда. Здесь  $\langle \dots \rangle_0$  — термодинамическое среднее нулевого приближения, которое выполняется на основе матрицы плотности отдельных атомов:

$$e^{-\beta H_0} = \prod_i e^{-\beta H_i^0}, \quad \langle A_i \rangle_0 = \frac{\text{Tr} A_i e^{-\beta H_i^0}}{\text{Tr} e^{-\beta H_i^0}} \quad (2.46)$$

$\langle \dots \rangle_0^c$  является кумулянтным средним, все операторы которого имеют одинаковые индексы узлов.

$$\begin{aligned} \langle T_{\tau} ABC \rangle &= \langle T_{\tau} ABC \rangle_0 - \langle A \rangle_0 \langle T_{\tau} BC \rangle_0 - \\ &- \langle C \rangle_0 \langle T_{\tau} AB \rangle_0 + 2 \langle A \rangle_0 \langle B \rangle_0 \langle C \rangle_0 \end{aligned} \quad (2.47)$$

Здесь  $T_{\tau}$  — оператор хронологического упорядочения.

На основе этого разложения Хаббард выполнил разложение в ряд теории возмущений для МХ [11, 12].

С помощью этой методики вычисляются ФГ нулевого приближения в диаграммной технике сильной связи Москаленко. Невозможность применения обычной теоремы Вика из-за не билинейности  $H_0$  решается с помощью обобщения этой теоремы на не билинейные гамильтонианы. Эта не билинейность обуславливает возникновение неприводимых многочастичных структур (одного атома или узла) – кумулянтов Кубо [99], называемых так же неприводимыми функциями Грина. Эти новые ФГ учитывают, как спиновые, зарядовые, так и парные флуктуации системы.

Согласно обобщенной теореме Вика (ОТВ) среднее от Т-произведения электронных операторов в представлении взаимодействия с гамильтонианом  $H_0$  может быть представлено в виде суммы, которая содержит помимо парных одноузельных произведений операторов (отвечающих обычной теореме Вика) так же неприводимые одноузельные многочастичные – кумулянты Куба или неприводимые функции Грина (НФГ). Они образуются по правилу вычитания из полной ФГ тех структур, которые характерны для обычной теоремы Вика. В случае, когда гамильтониан  $H_0$  описывает систему без кулоновского взаимодействия, эти неприводимые структуры тождественно обращаются в нуль, а обобщенная теорема Вика переходит в обычную теорему Вика. Все знаковые множители слагаемых ОТВМ определяются четностью перестановок фермиевских операторов, необходимых для образования из исходного произведения операторов данной структуры. При этом следует соблюдать условие, чтобы под знаком Т-произведений всегда оставалось одинаковое число операторов рождения и уничтожения электронов, если речь идет о нормальной системе, и четное число операторов для сверхпроводящей системы.

Приведем пример применения ОТВ.

В процессе разложения в ряд теории возмущений, возникнут средние от произведения  $n$  пар операторов рождения и уничтожения или многочастичные ФГ

$$G_n^0(x_1 \dots x_n | \bar{x}_1 \dots \bar{x}_n) = (-1)^n \langle T_\tau C(x_1) \dots C(x_n) \bar{C}(\bar{x}_1) \dots \bar{C}(\bar{x}_n) \rangle_0 \quad (2.48)$$

$$x_k \equiv i_k, \sigma_k, \tau_k \quad \bar{x}_k \equiv j_k, \sigma'_k, \tau'_k$$

Пусть, например,  $G_2^0(1, 2 | \bar{1}, \bar{2}) = \langle T_\tau C(1) \bar{C}(\bar{1}) C(2) \bar{C}(\bar{2}) \rangle_0$  возникшее в процессе разложения полной ФГ «двухчастичное» Т-среднее или двухчастичная функция Грина. Здесь  $1 \equiv i_1, \sigma_1, \tau_1 \quad \bar{1} \equiv j_1, \sigma'_1, \tau'_1$   $i, j$  – индексы узлов

Согласно обобщенной теореме Вика можно разбить его следующим образом:

$$G_2^0(1,2 | \bar{1}, \bar{2}) = -G_1^0(1 | \bar{1})G_1^0(2 | \bar{2}) + G_1^{(0)}(1 | \bar{2})G_1^0(2 | \bar{1}) + G_2^{(0)ir}(1,2 | \bar{1}, \bar{2}) =$$

$$-\langle T_\tau C(1)\bar{C}(\bar{1}) \rangle_0 \langle T_\tau C(2)\bar{C}(\bar{2}) \rangle_0 + \langle T_\tau C(1)\bar{C}(\bar{2}) \rangle_0 \langle T_\tau C(2)\bar{C}(\bar{1}) \rangle_0 + G_2^{(0)ir}(1,2 | \bar{1}, \bar{2}) \quad (2.49)$$

Где

$$G_2^{(0)ir}(i_1\sigma_1\tau_1 | i_2\sigma_2\tau_2 | j_1\sigma'_1\tau'_1 | j_2\sigma'_2\tau'_2) = \delta_{i_1i_2} \delta_{i_1j_1} \delta_{i_1j_2} G_2^{(0)ir}(\sigma_1\tau_1, \sigma_2\tau_2 | \sigma'_1\tau'_1, \sigma'_2\tau'_2),$$

$$G_2^{(0)ir}(\sigma_1\tau_1, \sigma_2\tau_2 | \sigma'_1\tau'_1, \sigma'_2\tau'_2) = G_2^{(0)}(\sigma_1\tau_1, \sigma_2\tau_2 | \sigma'_1\tau'_1, \sigma'_2\tau'_2) - G_1^{(0)}(\sigma_1\tau_1 | \sigma'_1\tau'_1)G_1^{(0)}(\sigma_2\tau_2 | \sigma'_2\tau'_2) +$$

$$+ G_1^{(0)}(\sigma_1\tau_1 | \sigma'_1\tau'_1)G_1^{(0)}(\sigma_2\tau_2 | \sigma'_2\tau'_2)$$

$$G_2^{(0)ir}(1,2 | \bar{1}, \bar{2}) = \langle TC(1)C(2)\bar{C}(\bar{1})\bar{C}(\bar{2}) \rangle_0$$

Или

$$-\langle TC(1)\bar{C}(\bar{2})TC(2)\bar{C}(\bar{1}) \rangle_0 + \langle TC(1)\bar{C}(\bar{1})TC(2)\bar{C}(\bar{2}) \rangle_0$$

Теперь приведем графическое представление первых двух порядков теории возмущения для одночастичной ФГ для МХ  $G(x, x')$  (Рис. 2.1) При этом свободную электронная функция Грина будет изображена сплошной линией, интеграл перескока – пунктирной, НФГ (НФГ) изобразятся многоугольниками (двухчастичная НФГ прямоугольником, 3-х частичная шестиугольниками и т. д.). Типичное диаграммное разложение второго порядка для ФГ изображено на Рис. 2.2.

Соответствующее уравнение Дайсона для ФГ модели Хаббарда [29, 30]

$$G_\sigma(k, i\omega) = \frac{\Lambda_\sigma(k, i\omega)}{1 - \varepsilon(k, i\omega)\Lambda_\sigma(k, i\omega)} \quad (2.50)$$

Где  $\varepsilon(k)$  — Фурье-образ интеграла перескока, представляющий собой энергию электрона в зоне проводимости. Роль сильных межэлектронных корреляций, содержащихся в МХ, проявляется в структуре величины  $Z_0(k/i\omega)$ , которая связана с  $\Lambda_\sigma$  равенством:

$$\Lambda_\sigma(k, i\omega) = G_\sigma^0(k, i\omega) + Z_\sigma(k, i\omega) \quad (2.51)$$

где  $G_\sigma^0(k, i\omega)$  — нулевая функция Грина МХ.

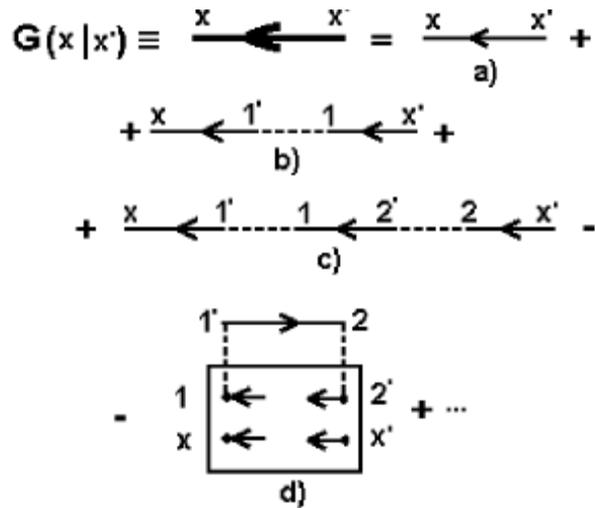


Рис 2.1. Первые два порядка теории возмущений для одночастичной функции Грина  $G(x, x')$

Сплошные линии со стрелками – одночастичные ФГ нулевого порядка, прямоугольники – двухчастичные НФГ, штриховые линии – туннельные матричные элементы, точки – вершины диаграмм, направление стрелок указывает на оператор рождения или уничтожения [148]

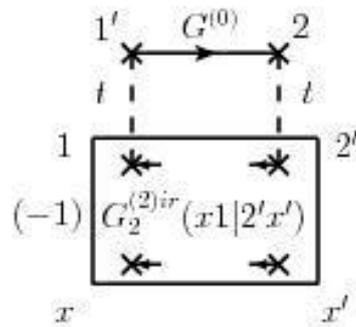


Рис 2.2. Диаграмма второго порядка теории возмущений для одночастичной ФГ.

Сплошная линия соответствует нулевой электронной ФГ, прямоугольник соответствует неприводимой двухчастичной НФГ  $G_2^{(0)ir}(x1|2'x')$ . Штриховые линии обозначают туннельные матричные элементы [29].

Во втором приближении корреляционная функция имеет  $Z_\sigma(k, i\omega)$  вид

$$Z^{(2)}(x|x') = \int_0^\beta d_1 d_{\bar{1}} d_2 d_{\bar{2}} G_2^{(0)ir}(x, 1|\bar{x}, \bar{2}) t(\bar{1}-1) t(\bar{2}-2) G(2|\bar{1}) \quad (2.52)$$

$$1 \equiv i_1, \sigma_1, \tau_1 \quad \bar{1} \equiv j_1, \sigma'_1, \tau'_1 \quad 2 \equiv i_2, \sigma_2, \tau_2, \quad 2\bar{2} \equiv i_2, \sigma'_2, \tau'_2$$

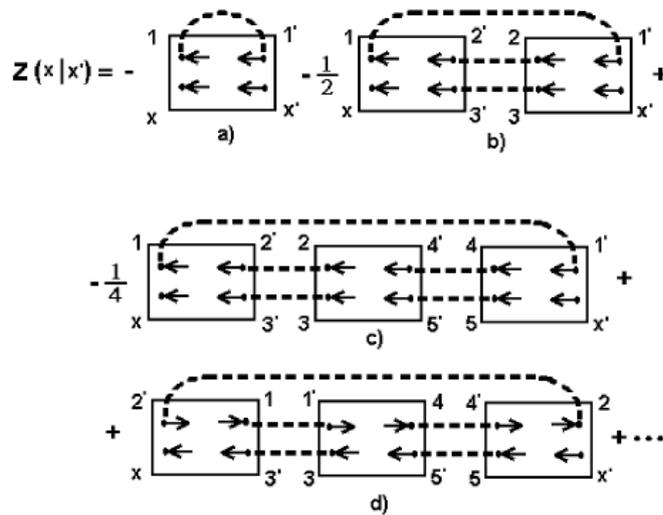
Где  $G_2^{(0)ir}(x, 1|\bar{x}, \bar{2}) = \delta_{x,1} \delta_{x,\bar{x}} \delta_{x,\bar{2}} \langle TC_{\sigma_1}(\tau_1) C_{\sigma_2}(\tau_2) C_{\sigma_3}^\dagger(\tau_3) C_{\sigma_4}^\dagger(\tau_4) \rangle_0$

В самом простом приближении (Хаббарда – I) все НФГ в (2.57) равны нулю.

В этом приближении уравнение типа Дайсона имеет вид:

$$G^I_\sigma(k, i\omega) = \frac{G_0(k, i\omega)}{1 - \varepsilon(k, i\omega) G_0(k, i\omega)} \quad (2.53)$$

Более точное суммирование, учитывающее двухчастичных корреляционный эффект – лестничное суммирование [148], продемонстрировано на Рис. 2.3. Это приближение является обобщением приближения случайных фаз теории слабой связи.



**Рис. 2.3** Лестничные диаграммы для функции  $Z_\sigma(k, i\omega)$ . Они повторяют бесконечное число раз двухчастичные НФГ. Пунктирные линии изображают перенормированный матричный элемент перескока. Прямоугольники соответствуют неприводимым двухчастичным ФГ  $G_2^{(0)ir}$  [144].

### 2.3 Заключение по второй главе

Работа основывается на аппарате квантово-статистической ФГ и диаграммной техники сильной связи, развитой ранее для МХ, ПМА и Хаббарда-Холстейна. Использование мацубаровских функций Грина при вычислении характеристик системы представляется нам удобным в связи с тем, что они вычисляются с помощью метода теории возмущений, в частности ее графического представления – диаграммной техники.

Невозможность использования теоремы Вика для статистических средних упорядоченного по времени произведения операторов по причине не билинейности

гамильтониана нулевого приближения (благодаря присутствию в нем члена ответственного за взаимодействие электронов друг с другом), решается обобщением этой теоремы на СКС. Когда взаимодействие слабо, эта теорема переходит в обычную теорему Вика. Помимо членов, соответствующих обычной теореме Вика, возникают многочастичные структуры – НФГ или кумулянты Кубо. Все флуктуации системы, зарядовые, спиновые и, обусловленные взаимодействием будут отражаться в этих структурах. Эта диаграммная техника позволяет просуммировать поправки к ФГ нулевого приближения, обусловленные возмущением, путем выделения неких «главных» членов разложения (в рамках приближений, учитывающих определенный класс диаграмм). Ранее для анализа моделей Хаббарда и примесной модели Андерсона для ФГ локализованных электронов были получены уравнения типа Дайсона. Массовый оператор в этом уравнении содержит сумму НФГ.

Самое простое приближение соответствуют первому приближению Хаббарда. Оно учитывают лишь диаграммы цепочечного типа, то есть диаграммы соответствующие обычной теореме Вика. Приближение, являющееся обобщением приближения случайных фаз теории слабого взаимодействия, основывается на выполнении лестничного суммирования диаграмм, учитывающее простейшие неприводимые функции Грина (двухчастичные).

### 3 СВОЙСТВО СТАЦИОНАРНОСТИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА МОДЕЛИ ХАББАРДА. ДИАГРАММНЫЙ ПОДХОД СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

#### 3.1 Нормальное состояние.

##### 3.1.1 Диаграммная теория для модели Хаббарда

В этой главе будет доказана теорема стационарности термодинамического потенциала (ТДП) модели Хаббарда с помощью диаграммной техники сильной связи [15]. Подобная теорема была доказана для некоррелированных систем с помощью диаграммной техники теории слабой связи [44] и сильной связи – для примесной модели Андерсона [43].

Мы ставим своей целью доказать следующую теорему: вариация термодинамического потенциала модели относительно массового оператора равна нулю.

$$\frac{\delta F}{\delta \Sigma} = 0. \quad (3.1)$$

Свойство стационарности термодинамического потенциала помогает получить такие термодинамические величины, как энтропия или удельная теплоемкость:  $S = dF / dT$ ,  $C = T(dS / dT)$ . ТДП зависит от температуры в двух формах: первая зависимость явная, а вторая через массовый оператор и благодаря  $dF / dT = \partial F / \partial T + (\delta F / \delta T)(d\Sigma / dT)$ . Вследствие равенства (3.1) второе слагаемое в последней формуле может быть опущено.

Доказательство выполним с помощью диаграммной техники по аналогии с процедурой доказательств, которые выполнили Люттингер и Уорд для систем со слабым взаимодействием. Будем основываться на том, что ТДП системы определяется частью из связанных диаграмм среднего значения оператора эволюции.

$$F(\lambda) = F_0 - \frac{1}{\beta} \langle U(\beta) \rangle_0^c, \quad (3.2)$$

Рассмотрение начнем с нормальной фазы МХ. В этом случае исходить будем с мацубаровской ФГ, для которой построим теорию возмущений на основании ОТВ и диаграммной техники, разработанной в [29, 30]. В результате чего определим уравнение типа Дайсона, и массовый оператор, затем установим соотношение между функцией Грина и термодинамическим потенциалом, в результате чего сможем произвести вариацию термодинамического потенциала относительно массового оператора.

Разложение в ряд теории возмущений будем производить по степеням интеграла перескока. Для того чтобы отметить порядок членов в разложении, введем в гамильтониан Хаббарда (1.1) константу разложения  $\lambda$ , то есть запишем  $\lambda H'$  вместо  $H'$ :

$$\begin{aligned} H &= H^0 + \lambda H', \\ H^0 &= \sum_i H_i^0, \\ H_i^0 &= -\mu \sum_{\sigma} C_{i\sigma}^+ C_{i\sigma} + U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \\ H' &= \sum_{i,j} \sum_{\sigma} t(j-i) C_{j\sigma}^+ C_{i\sigma}, \quad n_{i\sigma} = C_{i\sigma}^+ C_{i\sigma} \end{aligned} \quad (3.3)$$

Здесь  $C_{i\sigma}^{\dagger}(C_{i\sigma})$  – 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 с противоположными проекциями спинов,  $n_{i\sigma}$  – оператор числа электронов со спином  $\sigma$  на  $i$ -ом узле кристаллической решетки,  $t(i-j)$  – матричный элемент перескока электрона с узла  $i$  на узел  $j$ .

В присутствии параметра разложения  $\lambda$  отметим индексом « $\lambda$ » определения всех динамических величин, а в конце вычисления параметр  $\lambda$  положим равным 1.

Определение полной электронной ФГ в представлении взаимодействия:

$$G(\mathbf{x} | \mathbf{x}') = - \left\langle T C_{\mathbf{x}\sigma}(\tau) \bar{C}_{\mathbf{x}'\sigma'}(\tau') U(\beta) \right\rangle_0^c, \quad (3.4)$$

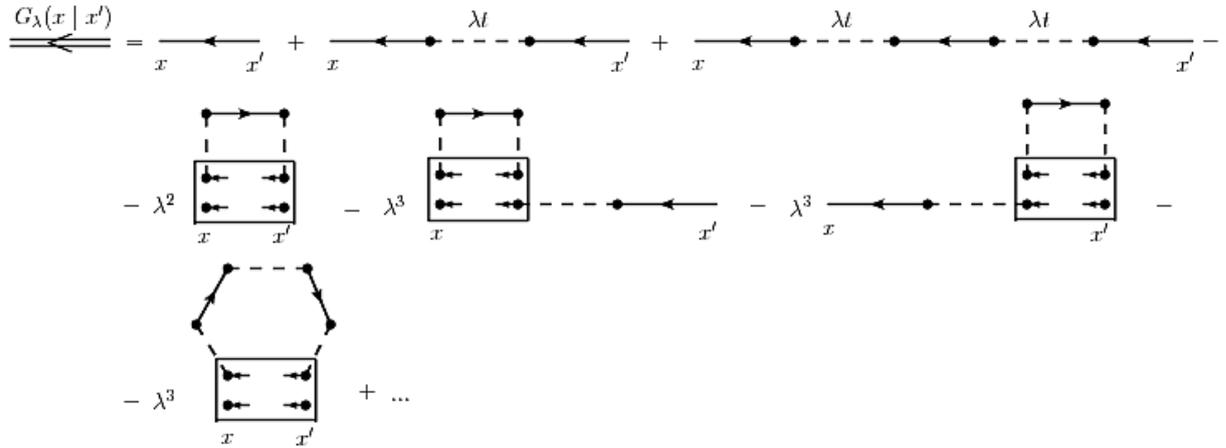
Здесь  $\mathbf{x}$  и  $\mathbf{x}'$  соответствуют  $i\sigma\tau$  и  $i'\sigma'\tau'$  соответственно,  $i, i'$  – индексы узлов решетки, а индекс "c" указывает на часть из связанных диаграмм, которые появляются в правой части (2.2).

Унитарный оператор эволюции будем разлагать по степеням  $\lambda H'$ :

$$U_{\lambda}(\beta) = T_{\tau} \exp(-\lambda \int_0^{\beta} H'(\tau) d\tau). \quad (3.5)$$

Используя развитую ранее диаграммную технику, получим первые 3 порядка теории возмущения для одночастичной ФГ (Рис. 3.1.). Благодаря тому факту, что НФГ локальны, а туннельные матричные элементы имеют свойство  $t(\mathbf{x}-\mathbf{x})=0$ , т. е. равны нулю на одном узле, все диаграммы, содержащие замкнутые на себя туннельные элементы, опущены. Первая диаграмма соответствует ФГ нулевого приближения, последующие 2 диаграммы – диаграммы цепочечного типа, соответствующие обычной

теореме Вика, остальные содержат неприводимые многочастичные ФГ, представленные многоугольниками.



**Рис. 3.1.** Первые три порядка теории возмущений для одночастичной функции Грина  $G_\lambda(x|x')$ . Сплошная двойная линия со стрелкой соответствует перенормированному одночастичному ФГ  $G_\lambda(x|x')$ . Сплошные тонкие линии со стрелками изображают одночастичные ФГ нулевого порядка, прямоугольники изображают двухчастичные НФГ  $G_2^{(irr)}$ . Тонкие пунктирные линии соответствуют туннельным матричным элементам, а точки это вершины диаграмм, направление стрелок указывает на оператор рождения или уничтожения.

Далее, из Рис. 3.1 видно, что процесс перенормировки электронной ФГ сопровождается аналогичным процессом перенормировки туннельных матричных элементов и заменой локальной величины (то есть с равными индексами узлов решетки  $\lambda t(x-x') = \lambda t(\vec{x}-\vec{x}')\delta(\tau-\tau'-0^+)$ ) на динамическую  $T_\lambda(x|x')$ , которая по структуре представляет собой ФГ:

$$T_\lambda(x|x') = \lambda t(\vec{x}-\vec{x}')\delta(\tau-\tau'-0^+) + \sum_{1,2} \lambda t(x-1)G_\lambda(1|2)\lambda t(2-x') \quad (3.6)$$

Фурье-образы  $t(\vec{x})$  и  $G_\lambda(x|x')$  соответственно

$$t(\vec{x}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) \exp(-i\vec{k}\vec{x}), \quad (3.7)$$

$$G_\lambda(x|x') = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} G_\lambda(\vec{k} | i\omega_n) \times \exp[-i\vec{k}(\vec{x}-\vec{x}') - i\omega_n(\tau-\tau')]$$

И Фурье-образ  $\tilde{T}_\lambda(\vec{k} | i\omega_n)$ :

$$T_\lambda(\vec{k} | i\omega_n) \equiv \lambda \tilde{T}_\lambda(\vec{k} | i\omega_n) = \epsilon(\vec{k})(1 + \lambda \epsilon(\vec{k}) G_\lambda(\vec{k} | i\omega_n)) \quad (3.8)$$

Перенормированный матричный туннельный элемент назовем туннельной функцией Грина и будем изображать на диаграммах двойной пунктирной линией.  $T_\lambda$  представлен такой же двойной линией умноженной на  $\lambda$ .

В работе [30] было введено понятие корреляционной функции  $Z_\lambda(x | x')$ , которая представляет собой сумму сильно связанных диаграмм, содержащих НФГ. Таким образом, на Рис. 3.1. четвертая и седьмая диаграммы справа принадлежат корреляционной функции (они сильно связаны, в них отсутствуют свободные концы).

Введем более удобную для дальнейших рассуждений функцию в  $\Lambda_\lambda$ :

$$\Lambda_\lambda(x | x') = G^0(x | x') + Z_\lambda(x | x'). \quad (3.9)$$

Если опустить из этих диаграмм все содержащие процесс перенормировки туннельного матричного элемента, получим скелетные диаграммы для этой функции. В этих скелетных диаграммах заменим пунктирные линии двойными пунктирными линиями. Скелетные диаграммы для корреляционной функции  $\Lambda_\lambda$  представлены на Рис. 3.2. Можно выделить два типа таких диаграмм. Первые две локальны и их Фурье-образ не зависит от импульса. Последние диаграммы и состоящие из нескольких прямоугольников – не локальны, и их Фурье-образ зависит от импульса.

В работах [30-31] было показано, что знание корреляционной функции  $\Lambda_\lambda$  позволяет сформулировать уравнение типа Дайсона

$$G_\lambda(k) = \frac{\Lambda_\lambda(k)}{1 - \lambda \Sigma(\vec{k}) \Lambda_\lambda(k)} \quad (3.10)$$

Здесь  $k$  стоящий в  $\Sigma(k, i\omega_n)$  соответствует нечетным мацубаровскими частотам.

$$\Lambda_\lambda(x | x') = \begin{array}{c} \xrightarrow{x \quad x'} \\ - \lambda \begin{array}{c} \text{1} \\ \begin{array}{|c|c|} \hline \bullet \leftarrow \bullet & \bullet \leftarrow \bullet \\ \hline \end{array} \\ \bar{1} \\ \hline x \quad x' \end{array} \\ - \frac{\lambda^2}{2} \begin{array}{c} \text{2} \\ \begin{array}{|c|c|} \hline \bullet \leftarrow \bullet & \bullet \leftarrow \bullet \\ \bullet \leftarrow \bullet & \bullet \leftarrow \bullet \\ \hline \end{array} \\ \bar{2} \\ \hline x \quad x' \end{array} \\ - \frac{\lambda^3}{6} \begin{array}{c} \text{3} \\ \begin{array}{|c|c|} \hline \bullet \leftarrow \bullet & \bullet \leftarrow \bullet \\ \bullet \leftarrow \bullet & \bullet \leftarrow \bullet \\ \bullet \leftarrow \bullet & \bullet \leftarrow \bullet \\ \hline \end{array} \\ \bar{3} \\ \hline x \quad x' \end{array} \\ - \frac{\lambda^3}{2} \begin{array}{c} \text{1} \\ \begin{array}{|c|c|} \hline \bullet \leftarrow \bullet & \bullet \leftarrow \bullet \\ \hline \end{array} \\ \text{2} \\ \text{3} \\ \hline x \quad \text{3} \end{array} \begin{array}{c} \text{2} \\ \text{3} \\ \hline \text{3} \\ \begin{array}{|c|c|} \hline \bullet \leftarrow \bullet & \bullet \leftarrow \bullet \\ \bullet \leftarrow \bullet & \bullet \leftarrow \bullet \\ \hline \end{array} \\ \bar{1} \\ \hline x' \end{array} \\ + \dots \end{array}$$

**Рис. 3.2.** Скелетные диаграммы для корреляционной функции  $\Lambda_\lambda$ . Сплошная жирная линия изображает ФГ нулевого порядка. Двойные пунктирные линии изображают туннельные матричные элементы  $T_\lambda$ , прямоугольники – неприводимые двухчастичные и трехчастичные ФГ, а точки – вершины диаграмм, определяют процессы рождения и уничтожения электронов

Из уравнений (3.9) и (3.10) получим уравнение для туннельной функции Грина  $\tilde{T}$

$$\begin{aligned} T_\lambda(k) &= \lambda T_\lambda(k), \\ \tilde{T}_\lambda(k) &= \frac{\epsilon(\vec{k})}{1 - \lambda \epsilon(\vec{k}) \Lambda_\lambda(k)} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Уравнение (3.11) имеет вид уравнения Дайсона для туннельных ФГ, и роль массового оператора  $\Sigma_\lambda$  осуществляется корреляционной функцией умноженной на константу разложения  $\lambda$

$$\Sigma_\lambda(k) = \lambda \Lambda_\lambda(k). \quad (3.12)$$

Итак, массовый оператор был определен.

Далее рассмотрим величину термодинамического потенциала (в присутствии параметра  $\lambda$ ):

$$F(\lambda) = F_0 - \frac{1}{\beta} \langle U_\lambda(\beta) \rangle_0^c, \quad (3.13)$$

и в конце положим  $\lambda = 1$ .

Используя термодинамическую теорию возмущений, получим первые порядки теории возмущений для  $\langle U_\lambda(\beta) \rangle_0^c$ , представленные на Рис. 3.3.

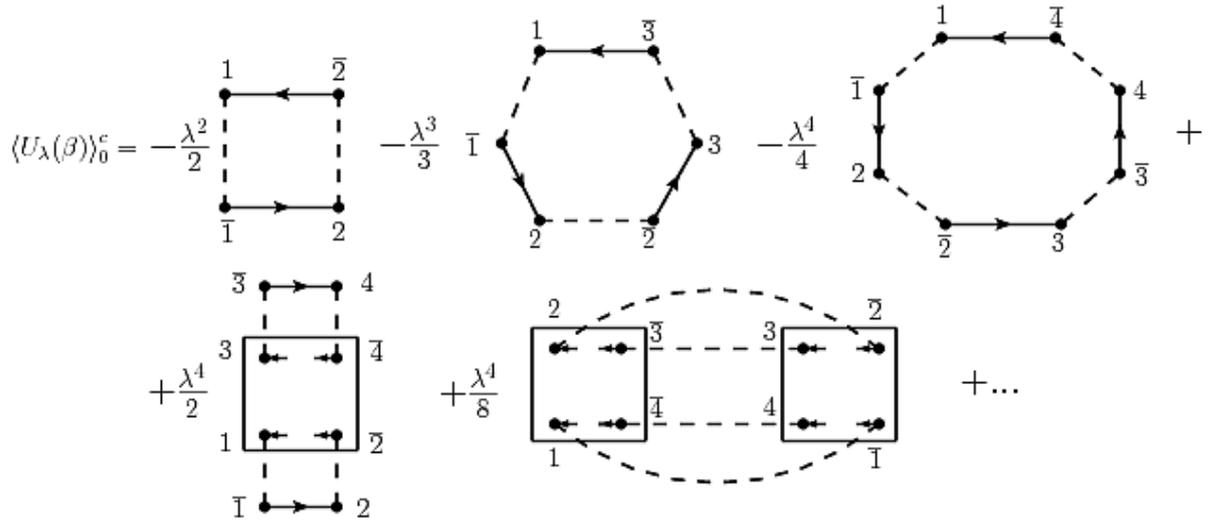


Рис. 3.3. Первые 4 порядка теории возмущений для  $U_\lambda(\beta)_0^c$ .

Для того чтобы лучше понять эти диаграммные вклады и установить соотношением между термодинамическим потенциалом и ФГ, рассмотрим выражение:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\bar{x}, \bar{x}'} G_\lambda(x | x') \lambda t(\bar{x}' - \bar{x}) \delta(\tau - \tau' - 0^+) \delta_{\sigma\sigma'} = \\
 & = -\beta \sum_{\bar{x}, \bar{x}'} \sum_{\sigma} G_{\lambda\sigma}(\bar{x} - \bar{x}' | -0^+) \lambda t(\bar{x}' - \bar{x}) = \\
 & = -\lambda \sum_{k\sigma} \sum_{\omega_n} \epsilon(\vec{k}) G_{\lambda\sigma}(\vec{k} | i\omega_n) \exp(i\omega_n 0^+).
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

Здесь двойные повторяющиеся индексы подразумевают суммирование и интегрирование, так же было произведено интегрирования по времени.

С диаграммной точки зрения (3.14) приводит к процедуре замыкания внешних линий ФГ  $G_\lambda$  диаграмм, изображенных на Рис.3.1. с туннельным матричным элементом  $t(\bar{x}' - \bar{x})$ , и полученные таким образом диаграммы без внешних линий, имеют сходство с диаграммами для  $\langle U_\lambda(\beta) \rangle_0^c$ , изображенными на Рис. 3.3. Эти два ряда диаграмм отличаются лишь стоящими перед ними коэффициентами. В выражении (3.14) перед каждой из диаграмм отсутствуют коэффициенты  $\frac{1}{n}$ , где n порядок теории возмущений.

Эти коэффициенты представлены на Рис. 3.3. Для того чтобы восстановить эти  $\frac{1}{n}$  коэффициенты в (3.14) и получить совпадение с  $\langle U_\lambda(\beta) \rangle_0^c$  рядами достаточно проинтегрировать выражение (3.16) по  $\lambda$ , то есть:

$$-\sum_{\vec{x}, \vec{x}'} \sum_{\sigma} \beta \int d\lambda t(\vec{x}' - \vec{x}) G_{\lambda\sigma}(\vec{x} - \vec{x}' | -0^+). \quad (3.15)$$

Выражение (3.15), отображенное в диаграммном представлении, в точности совпадает со средним значением оператора эволюции:

$$\langle U_\lambda(\beta) \rangle_0^c = -\sum_{\vec{x}\vec{x}'} \beta t(\vec{x}' - \vec{x}) \times \int_0^\lambda d\lambda' G_{\lambda'\sigma}(\vec{x} - \vec{x}' | -0^+). \quad (3.16)$$

Фурье-образ:

$$\langle U_\lambda(\beta) \rangle_0^c = -\int_0^\lambda d\lambda' \sum_{\vec{k}\sigma\omega_n} \epsilon(\vec{k}) G_{\lambda'\sigma}(\vec{k} | i\omega_n) \exp(i\omega_n 0^+). \quad (3.17)$$

Из (3.13) и (3.17) получим

$$F(\lambda) = F_0 + \int_0^\lambda d\lambda' \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \epsilon(\vec{k}) \times G_{\lambda'\sigma}(\vec{k} | i\omega_n) \exp(i\omega_n 0^+). \quad (3.18)$$

Таким образом, эта величина устанавливает соотношение между термодинамическим потенциалом и перенормированной одночастичной ФГ.

Используя определение (3.13), выражение (3.18) может быть записано в виде:

$$F(\lambda) = F_0 + \int_0^\lambda \frac{d\lambda'}{\lambda'} \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} T_{\lambda'}(k) \times \Sigma_{\lambda'}(k) \exp(i\omega_n 0^+). \quad (3.19)$$

из (3.19) получим

$$\lambda \frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} T_\lambda(k) \Sigma_\lambda(k) \exp(i\omega_n 0^+) = \frac{1}{\beta} \text{Tr}(T_\lambda \Sigma_\lambda). \quad (3.20)$$

Для того чтобы получить полную систему уравнений дополним (3.20) определением химического потенциала системы

$$N_e = \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} G_\sigma(\vec{k} | i\omega_n) \exp(i\omega_n 0^+), \quad (3.21)$$

где  $N_e$  число электронов.

### 3.1.2 Свойство стационарности термодинамического потенциала

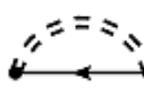
Выражение (3.20), устанавливающее связь между  $G$  и  $F$  зависит от параметра разложения  $\lambda$  и не очень удобно, поскольку содержит дополнительное интегрирование по ней. Как было доказано Люттингером и Уордом [31] для нормального состояния слабо взаимодействующих систем, можно получить другое выражение для термодинамического потенциала без дополнительного интегрирования. Это можно осуществить путем введения некоего специального функционала, состоящего из скелетных диаграмм и зависящий от  $\lambda$ :

$$Y(\lambda) = Y_1(\lambda) + Y'(\lambda), \quad (3.22)$$

$$\text{Здесь } Y_1(\lambda) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k}, \sigma, \omega_n} \left[ \ln(\epsilon(\vec{k})) \lambda \Lambda_\lambda(k) - 1 + T_\lambda(k) \lambda \Lambda_\lambda(k) \right] \exp(i\omega_n 0^+),$$

$Y'(\lambda)$  построен из скелетных диаграмм без внешних линий и изображен на Рис. 3.4.

Зависимость от  $\lambda$  в функционале  $Y'(\lambda)$  является неявной, через зависимость перенормированных функций Грина  $G_\lambda, T_\lambda, \Lambda_\lambda$  и  $\Sigma_\lambda$  явной через множители  $\lambda^n$ , стоящие перед каждой из диаграмм  $Y'_N(\lambda)$ .

$$Y'(\lambda) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k}, \sigma} \sum_{\omega_n} \left\{ \lambda \left[ \text{Diagram 1} \right] - \frac{\lambda^2}{2} \left[ \text{Diagram 2} \right] - \frac{\lambda^3}{6} \left[ \text{Diagram 3} \right] - \frac{\lambda^4}{24} \left[ \text{Diagram 4} \right] - \frac{\lambda^4}{8} \left[ \text{Diagram 5} \right] + \dots \right\}$$


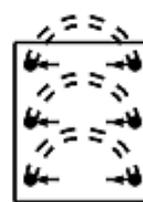
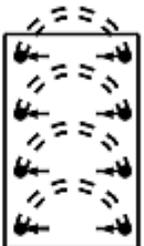
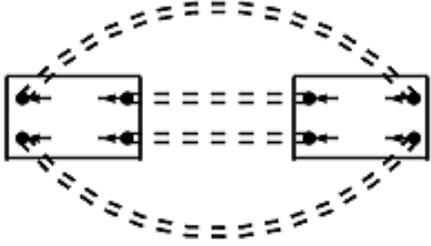




Рис. 3.4. Простейшие скелетные диаграммы для  $Y'(\lambda)$ . Двойные пунктирные линии изображают  $T_\lambda$ .

Теперь, используя вышеприведенные определения, докажем, что

$$\frac{\delta \beta Y_1(\lambda)}{\delta T_\lambda(k)} = -\lambda \Lambda_\lambda(k) = -\Sigma_\lambda(k), \quad (3.24)$$

$$\frac{\delta \beta Y'(\lambda)}{\delta T_\lambda(k)} = \lambda \Lambda_\lambda(k) = \Sigma_\lambda(k)$$

и в результате докажем свойство стационарности

$$\frac{\delta \beta Y(\lambda)}{\delta T_\lambda(k)} = 0 \quad (3.25)$$

Используя определение (3.11) массового оператора  $\Sigma_\lambda(k)$  можно переписать функционал  $Y_1(\lambda)$  как

$$Y_1(\lambda) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k}\sigma} \sum_{\omega_n} \left[ \ln(\epsilon(\vec{k})) \Sigma_\lambda(k) - 1 + T_\lambda(k) \Sigma_\lambda(k) \right] \exp(i\omega_n 0^+), \quad (3.26)$$

и докажем вторую форму свойства стационарности

$$\frac{\delta Y(\lambda)}{\delta \Sigma_\lambda(k)} = 0, \quad (3.27)$$

если учтем уравнение Дайсона для туннельной ФГ  $T_\lambda(k)$ .

Теперь исследуем производную по  $\lambda$  от функционала  $Y(\lambda)$  и докажем его совпадение при  $\lambda = 1$  с термодинамическим потенциалом. Используя свойство стационарности (3.27), получим

$$\frac{dY(\lambda)}{d\lambda} = \sum_k \frac{\delta Y(\lambda)}{\delta \Sigma_\lambda(k)} \frac{\delta \Sigma_\lambda(k)}{\delta \lambda} + \frac{\partial Y(\lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\Sigma_\lambda} = \frac{\partial Y'(\lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\Sigma_\lambda}. \quad (3.28)$$

Здесь был учтен тот факт, что  $Y_1(\lambda)$  (3.26) не имеет явной зависимости от  $\lambda$ .

С помощью Рис. 3.4. для  $Y'(\lambda)$  и определения  $\Lambda_\lambda$  на Рис. 3.2. легко установить свойство:

$$Y'(\lambda) \partial \lambda \Big|_{\Sigma_\lambda} = \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k}\sigma} \sum_{\omega_n} T_\lambda(k) \lambda \Lambda_\lambda(k) \exp(i\omega_n 0^+) = \frac{1}{\beta} \text{Tr}(T_\lambda \Lambda_\lambda) \quad (3.29)$$

Из (3.28) и (3.29) получим:

$$Y(\lambda) d\lambda = \frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k}\sigma} \sum_{\omega_n} T_\lambda(k) \Sigma_\lambda(k) = \frac{1}{\beta} \text{Tr}(T_\lambda \Sigma_\lambda). \quad (3.30)$$

Из уравнений (3.21) и (3.30) имеем

$$\lambda \frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = \lambda \frac{dY(\lambda)}{d\lambda} \quad (3.31)$$

и, в результате, получим

$$F(\lambda) = Y(\lambda) + \text{const} \quad (3.32)$$

Поскольку при константе разложения  $\lambda = 0$  возмущение отсутствует, и  $F(0) = F_0$   
 $Y(0) = Y_0$ , получим

$$F(\lambda) = Y(\lambda) + F_0. \quad (3.34)$$

Теперь положим  $\lambda = 1$  и получим

$$F(1) = Y(1) + F_0 \quad (3.35)$$

Таким образом, свойство стационарности термодинамического потенциала доказано

$$\frac{\delta F}{\delta \Sigma} = 0. \quad (3.36)$$

### 3.2 Сверхпроводящее состояние

Теперь обобщим результаты, полученные для нормальной фазы МХ, на сверхпроводящее состояние. Процедура доказательства свойства стационарности термодинамического потенциала МХ аналогична случаю нормального состояния, однако в этом случае предположим существование сверхпроводящих пар электронов и ненулевых квазисредних Боголюбова [79] и, следовательно, Горьковских аномальных функций Грина [77]. НФГ в сверхпроводящем состоянии могут содержать любое четное число операторов рождения и уничтожения фермионов, тогда как в нормальном – число обоих типов одинаково. Поэтому существует потребность в математическом аппарате, который бы автоматически учитывал все возможности рассматривать интерференции частиц и дырок в сверхпроводящем состоянии. С этой целью воспользуемся понятием квантового зарядового числа, введенного в [36] и названного  $\alpha$  – числом, которое может принимать два значения  $\alpha = \pm 1$  в соответствии с определением

$$C^\alpha = \begin{cases} C, & \alpha = 1 \\ C^+, & \alpha = -1 \end{cases}, \quad (3.37)$$

где  $C$  – фермионный оператор уничтожения. В этом новом представлении часть гамильтониана Хаббарда, ответственная за энергию туннелирования электронов, имеет вид:

$$H' = \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} t(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) C_{\mathbf{x}'\sigma}^{\dagger} C_{\mathbf{x}\sigma} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=-1,1} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} \alpha t_{\alpha}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) C_{\mathbf{x}'\sigma}^{-\alpha} C_{\mathbf{x}\sigma}^{\alpha}, \quad (3.38)$$

где туннельные матричные элементы определяются следующим образом:

$$\begin{aligned}
t_1(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) &= t(\mathbf{x}' - \mathbf{x}), \\
t_{-1}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) &= t(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \\
t(\mathbf{x} = \mathbf{0}) &= 0,
\end{aligned} \tag{3.39}$$

В этом представлении зарядового квантового числа оператор  $H'$  имеет дополнительный множитель  $\alpha$  для всех вершин диаграмм и дополнительное суммирование по этому индексу  $\alpha$ .

В представлении взаимодействия гамильтониан  $H'$  имеет вид:

$$H'(\tau) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\sigma} \sum_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} \alpha t_\alpha(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \times C_{\mathbf{x}'\sigma}^{-\alpha}(\tau + \alpha 0^+) C_{\mathbf{x}\sigma}^\alpha(\tau). \tag{3.40}$$

### 3.2.1 Построение диаграммной теории

Запишем мацубаровскую функцию Грина в представлении взаимодействия в терминах квантового зарядового числа

$$G^{\alpha\alpha'}(x|x') = -\left\langle TC_{\mathbf{x}\sigma}^\alpha(\tau) C_{\mathbf{x}'\sigma'}^{-\alpha'}(\tau') U_\lambda(\beta) \right\rangle_0^c \tag{3.41}$$

$x$  соответствует  $(\mathbf{x}, \sigma, \tau)$ , а  $x'$  —  $(\mathbf{x}', \sigma', \tau')$ ,  $x, x'$  — 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.

Соответствие между определением (3.41) и обычным для нормальных и аномальных ФГ имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
G_\lambda^{1,1}(x|x') &= -\left\langle TC_{\mathbf{x}\sigma}(\tau) \bar{C}_{\mathbf{x}'\sigma'}(\tau') U_\lambda(\beta) \right\rangle_0^c = G_{\sigma, \sigma'}^\lambda(\mathbf{x}, \tau | \mathbf{x}', \tau'), \\
G_\lambda^{1,-1}(x|x') &= -\left\langle TC_{\mathbf{x}\sigma}(\tau) C_{\mathbf{x}'\sigma'}(\tau') U_\lambda(\beta) \right\rangle_0^c = F_{\sigma, \sigma'}^\lambda(\mathbf{x}, \tau | \mathbf{x}', \tau'), \\
G_\lambda^{-1,1}(x|x') &= -\left\langle T\bar{C}_{\mathbf{x}\sigma}(\tau) \bar{C}_{\mathbf{x}'\sigma'}(\tau') U_\lambda(\beta) \right\rangle_0^c = \bar{F}_{\sigma, \sigma'}^\lambda(\mathbf{x}, \tau | \mathbf{x}', \tau'), \\
G_\lambda^{-1,-1}(x|x') &= -G_\lambda^{1,1}(x'|x).
\end{aligned} \tag{3.42}$$

Применим теорему, и вклады в третьем порядке теории возмущений представлены для функции (3.40) представлены на Рис. 3.5.

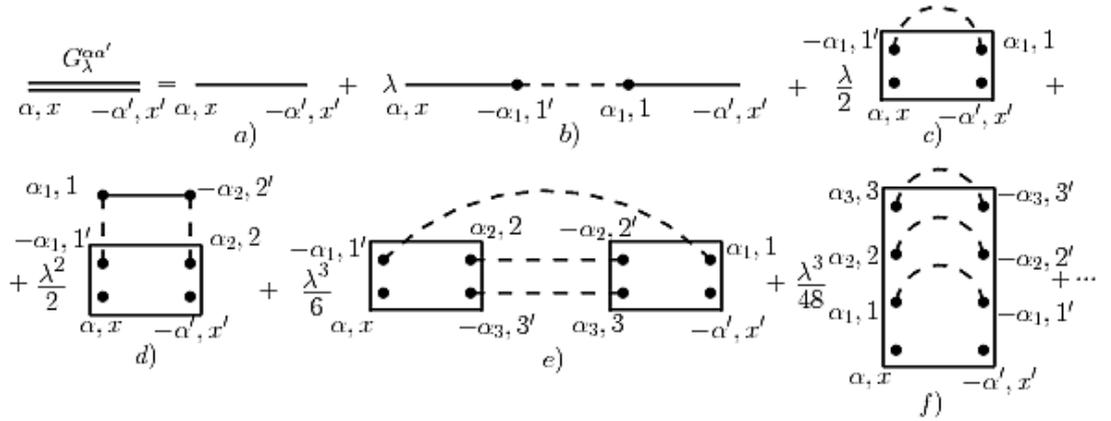


Рис. 3.5. Диаграммы теории возмущений третьего порядка для ФГ  $G_\lambda^{\alpha\alpha'}(x|x')$ .

Сплошная двойная линия соответствует перенормированной ФГ  $G_\lambda^{\alpha\alpha'}(x|x')$ .

Сплошные тонкие линии изображают одночастичную ФГ нулевого порядка, прямоугольники изображают двух – и четырехчастичные НФГ. Тонкие пунктирные линии соответствуют туннельным матричным элементам. Точки – вершины диаграмм.

Отметим, что в сверхпроводящем состоянии, в отличие от нормального, линии ФГ 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.

Теперь разберем диаграммные вклады, изображенные на Рис. 3.5. Диаграмма а) изображает ФГ первого порядка, диаграмма б) и более сложные диаграммы этого типа соответствуют вкладам обычной Теоремы Вика (цепочечные) и соответствуют приближению Хаббарда I.

Вклады диаграмм с) и d) в аналитической форме представлены ниже:

$$\begin{aligned}
 c) &: \frac{1}{2} \langle TC_x^\alpha(\tau) C_{1'}^{-\alpha_1}(\tau_1 + \alpha_1 0^+) C_1^{\alpha_1}(\tau_1) C_{x'}^{-\alpha'}(\tau') \rangle_0^{ir} \times \\
 & \times \alpha_1 t_{\alpha_1}(\mathbf{1}' - \mathbf{1}), \\
 d) &: \frac{1}{2} \langle TC_x^\alpha(\tau) C_{1'}^{-\alpha_1}(\tau_1) C_2^{\alpha_2}(\tau_2) C_{x'}^{-\alpha'}(\tau') \rangle_0^{ir} \times \\
 & \times \alpha_1 t_{\alpha_1}(\mathbf{1}' - \mathbf{1}) \alpha_2 t_{\alpha_2}(\mathbf{2}' - \mathbf{2}) \times G^{(0)\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{1}, \tau_1 | \mathbf{2}', \tau_2),
 \end{aligned}$$

где  $\langle \dots \rangle_0^{ir}$  означает НФГ. Здесь и ниже наличие двух повторяющихся индексов подразумевает суммирование (или интегрирование); индекс спина для простоты опущен. Равные индексы узлов на диаграмме с)  $\mathbf{x} = \mathbf{1}' = \mathbf{1} = \mathbf{x}'$ , а на диаграмме d)  $\mathbf{x} = \mathbf{1}' = \mathbf{2} = \mathbf{x}'$ .

Диаграммы с), d) и e) на Рис. 3.5. содержат двухчастичные НФГ, изображаемые прямоугольниками (в высших порядках теории возмущений появляются более сложные многочастичные НФГ  $G_n^{(0)ir}[1,2,\dots,n]$ ). Эти функции локальны, то есть содержат одинаковые индексы узлов, поэтому диаграмму с) на Рис. 3.5. можно отбросить, поскольку она содержит исчезающий интеграл перескока  $t(\mathbf{x}-\mathbf{x})=0$ .

Процесс перенормировки туннельной амплитуды, показанный на диаграммах b) и d) приводит к замене нулевого туннельного матричного элемента  $\alpha t_\alpha(\mathbf{x}'-\mathbf{x})$  в с) на величину  $T^{\alpha'\alpha}(x'|x)$ .

Этот процесс задается аналитическим выражением:

$$T_{\sigma\sigma}^{\alpha'\alpha}(x'|x) = T_{\sigma'\sigma}^{(0)\alpha'\alpha}(x'|x) + T_{\sigma\sigma_1}^{(0)\alpha'\alpha_1}(x'|x_1) \times G_{\sigma_1\sigma_2}^{\alpha_1\alpha_2}(x_1|x_2) T_{\sigma_2\sigma}^{(0)\alpha_2\alpha}(x_2|x), \quad (3.43)$$

где  $T_{\sigma\sigma}^{(0)\alpha'\alpha}(x'|x) = \delta_{\alpha\alpha'} \alpha t_\alpha(\mathbf{x}'-\mathbf{x}) \delta(\tau'-\tau-\alpha\theta^+) \delta_{\sigma\sigma'}$  и  $G^{\alpha_1\alpha_2}$  полная одночастичная ФГ, величина  $T^{\alpha'\alpha}$  будет изображаться на диаграммах двойной пунктирной линией.

Скелетные диаграммы для корреляционной функции  $\Lambda^{\alpha\alpha'}(x|x')$ , которая является бесконечной суммой сильно связанных частей ФГ диаграмм, изображены на Рис. 3.6.

В диаграммах Рис. 3.5 есть два типа  $\lambda$ -зависимостей. Первая неявная и обусловлена зависимостью от  $\lambda$  функции  $T_\lambda^{\alpha\alpha'}$ , а вторая – явная, обуславливается множителем  $\lambda$  стоящим перед диаграммами. Все вклады на Рис. 3.5, за исключение последнего, являются локальными, и их представление Фурье не зависит от импульса. Последняя диаграмма Рис. 3.5 имеет зависящий от импульса Фурье-образ.



Полагая, что система находится в парамагнитном состоянии, а сверхпроводимость имеет синглетный характер и используя определение (3.42) с добавленным

$$\begin{aligned}\Lambda_{\sigma\bar{\sigma}}^{1,1}(k) &= \Lambda_{\sigma}(k), \Lambda_{\sigma\bar{\sigma}}^{1,-1}(k) = Y_{\sigma\bar{\sigma}}(k), \\ \Lambda_{\sigma\bar{\sigma}}^{-1,1}(k) &= \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}(k),\end{aligned}\quad (3.52)$$

В результате получим следующие результаты

$$\begin{aligned}G_{\sigma}(k) &= \frac{\Lambda_{\sigma}(k)(1 - \epsilon(-\mathbf{k})\Lambda_{\bar{\sigma}}(-k)) - \epsilon(-\mathbf{k})Y_{\sigma\bar{\sigma}}(k)\bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}(k)}{d_{\sigma}(k)}, \\ F_{\sigma\bar{\sigma}}(k) &= \frac{Y_{\sigma\bar{\sigma}}(k)}{d_{\sigma}(k)},\end{aligned}\quad (3.53)$$

$$\begin{aligned}\bar{F}_{\sigma\bar{\sigma}}(k) &= \frac{\bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}(k)}{d_{\sigma}(k)}, \\ d_{\sigma}(k) &= (1 - \epsilon(\mathbf{k})\Lambda_{\sigma}(k))(1 - \epsilon(-\mathbf{k})\Lambda_{\bar{\sigma}}(-k)) + \epsilon(\mathbf{k})\epsilon(-\mathbf{k})Y_{\sigma\bar{\sigma}}(k)\bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}(k),\end{aligned}\quad (3.54)$$

которые совпадают с полученными в статьях [30, 32]. В матричном представлении система уравнений (3.48-3.51) имеет вид:

$$\hat{G} = \hat{\Lambda} + \hat{\Lambda}\hat{\epsilon}\hat{G},\quad (3.55)$$

где

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} G_{\sigma}(k) & F_{\sigma\bar{\sigma}}(k) \\ \bar{F}_{\sigma\bar{\sigma}}(k) & -G_{\bar{\sigma}}(-k) \end{pmatrix},\quad (3.56)$$

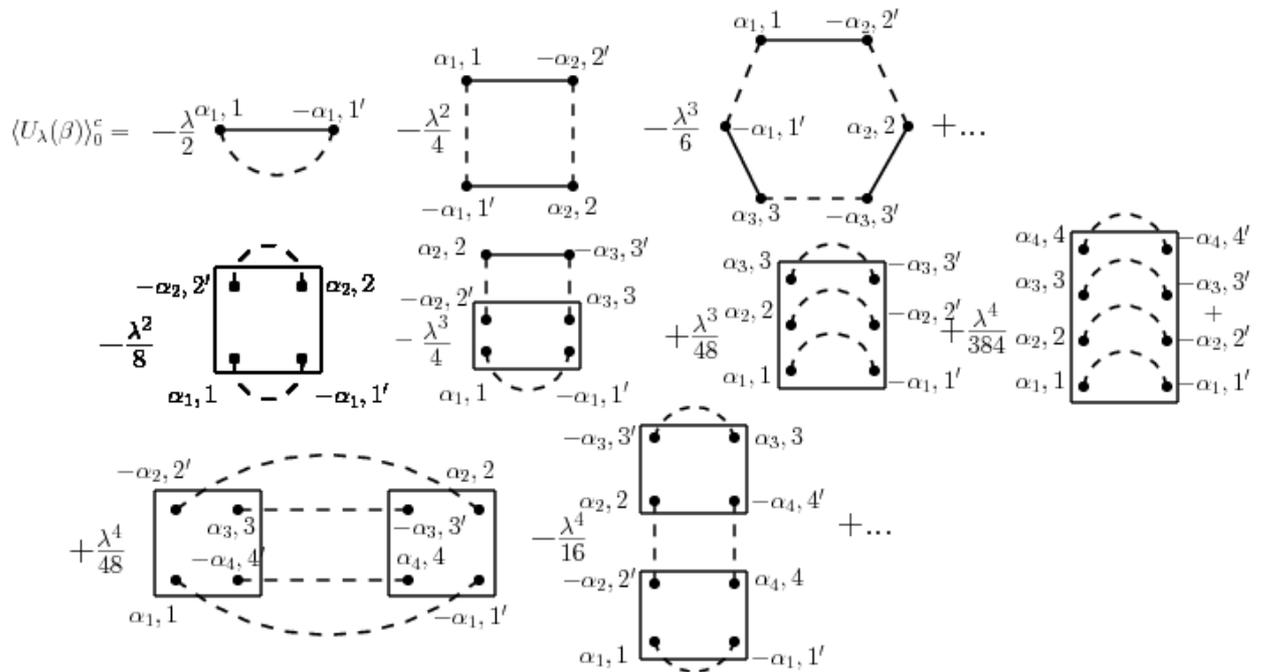
$$\hat{\Lambda} = \begin{pmatrix} \Lambda_{\sigma}(k) & Y_{\sigma\bar{\sigma}}(k) \\ \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}(k) & -\Lambda_{\bar{\sigma}}(-k) \end{pmatrix}, \hat{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon(k) & 0 \\ 0 & -\epsilon(-k) \end{pmatrix}\quad (3.57)$$

Используя выражение (3.46), получим

$$\begin{aligned}T_{\sigma}^{1,1}(k) &= \frac{\epsilon(\mathbf{k})(1 - \epsilon(-\mathbf{k})\Lambda_{\bar{\sigma}}(-k))}{d_{\sigma}(k)}, \\ T_{\sigma\bar{\sigma}}^{1,-1}(k) &= -\epsilon(\mathbf{k})\epsilon(-\mathbf{k})F_{\sigma\bar{\sigma}}(k), \\ T_{\sigma\bar{\sigma}}^{-1,1}(k) &= -\epsilon(\mathbf{k})\epsilon(-\mathbf{k})\bar{F}_{\sigma\bar{\sigma}}(k).\end{aligned}\quad (3.58)$$

### 3.2.2 Свойство стационарности термодинамического потенциала.

На Рис. 3.7. изображены диаграммы первого порядка для  $\langle U_\lambda(\beta) \rangle_0^c$ . На рисунке  $n = (\mathbf{n}, \tau_n)$ ,  $n' = (\mathbf{n}', \tau_n + \alpha_n 0^+)$ . Проанализируем эти диаграммные вклады. Первые три диаграммы на Рис. 3.6. это диаграммы цепочечного типа, они соответствуют приближению Хаббарда -I. Остальные диаграммы содержат прямоугольники, которые изображают НФГ. Некоторые из этих диаграмм равны нулю (когда пунктирные линии замыкаются на самих себя) в силу того, что  $t(0) = 0$  при равенстве индексов узлов.



**Рис. 3.7. Первые вклады теории возмущений первого порядка. Скелетные диаграммы для функционала  $U(\beta)$**

Однако это в силе только для скелетных диаграмм, а при замене этих пунктирных линий перенормированными величинами  $T_\lambda$ , их вклады уже не равны нулю и их следует учитывать. Вклады 5-ой и 8-ой диаграммы правой части Рис. 3.7. имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{4} \langle T C_1^{\alpha_1}(\tau_1) C_2'^{-\alpha_2}(\tau_2) C_3^{\alpha_3}(\tau_3) C_1'^{-\alpha_1}(\tau_1 + \alpha_1 0^+) \rangle_0^{ir} \times \\
& \quad \times \alpha_1 t_{\alpha_1}(1' - 1) \alpha_2 t_{\alpha_2}(2' - 2) \alpha_3 t_{\alpha_3}(3' - 3) \times \\
& \quad \times G^{(0)\alpha_2\alpha_3}(2, \tau_2 | 3', \tau_3); \\
& + \frac{1}{48} \langle T C_1^{\alpha_1}(\tau_1) C_2'^{-\alpha_2}(\tau_2) C_3^{\alpha_3}(\tau_3) C_4'^{-\alpha_4}(\tau_4) \rangle_0^{ir} \times \\
& \quad \times \alpha_1 t_{\alpha_1}(1' - 1) \alpha_2 t_{\alpha_2}(2' - 2) \times \\
& \quad \times \langle T C_4^{\alpha_4}(\tau_4) C_3'^{-\alpha_3}(\tau_3) C_2^{\alpha_2}(\tau_2) C_1'^{-\alpha_1}(\tau_1) \rangle_0^{ir} \times \\
& \quad \times \alpha_3 t_{\alpha_3}(3' - 3) \alpha_4 t_{\alpha_4}(4' - 4)
\end{aligned}$$

соответственно.

Сравнение диаграмм Рис. 3.5.  $G^{(n)\alpha\alpha'}$  ( $n$ -ого порядка теории возмущений для одночастичной ФГ) с вкладом Рис. 3.7.  $\langle U_\lambda^{n+1}(\beta) \rangle_0^c$  ( $(n+1)$ -ый порядок для оператора эволюции) позволяет установить следующее простое отношение: ( $n \geq 1$ )

$$\begin{aligned}
\langle U_\lambda^{(n+1)}(\beta) \rangle_0^c &= -\frac{\beta}{2} \int_0^\lambda \frac{d\lambda_1}{\lambda_1} \sum_{\Pi'} \sum_{\alpha_1 \sigma_1} \lambda_1 \alpha_1 t_{\alpha_1}(\mathbf{1}' - \mathbf{1}) \\
& \times G_{\sigma_1 \lambda_1}^{(n)\alpha_1 \alpha_1}(\mathbf{1} - \mathbf{1}' | -\alpha_1 0^+),
\end{aligned} \tag{3.59}$$

В результате получим

$$\begin{aligned}
\langle U_\lambda(\beta) \rangle_0^c &= -\frac{1}{2} \int_0^\lambda \frac{d\lambda_1}{\lambda_1} \beta \sum_{\Pi'} \sum_{\alpha_1 \sigma_1} \lambda_1 \alpha_1 t_{\alpha_1}(\mathbf{1}' - \mathbf{1}) \times \\
& G_{\sigma_1 \lambda_1}^{\alpha_1 \alpha_1}(\mathbf{1} - \mathbf{1}' | -\alpha_1 0^+) n = -\frac{1}{2} \int_0^\lambda \frac{d\lambda_1}{\lambda_1} Tr(\lambda_1 \hat{T}^0 \hat{G}_{\lambda_1}).
\end{aligned} \tag{3.60}$$

Принимая во внимание уравнения (3.45) и (3.46), получим

$$\langle U_\lambda(\beta) \rangle_0^c = -\frac{1}{2} \int_0^\lambda \frac{d\lambda_1}{\lambda_1} Tr(\lambda_1 \hat{T}_{\lambda_1} \hat{\Lambda}_{\lambda_1}). \tag{3.61}$$

Далее из (3.44) и (3.60) следует

$$\begin{aligned}
F(\lambda) &= F_0 + \frac{1}{2\beta} \int_0^\lambda \frac{d\lambda_1}{\lambda_1} Tr(\lambda_1 \hat{T}_{\lambda_1} \hat{\Lambda}_{\lambda_1}) = \\
&= F_0 + \frac{1}{2\beta} \int_0^\lambda \frac{d\lambda_1}{\lambda_1} Tr(\hat{T}_{\lambda_1} \hat{\Sigma}_{\lambda_1}),
\end{aligned} \tag{2.1}$$

$$\text{где } \hat{\Sigma}_\lambda = \lambda \hat{\Lambda}_\lambda \tag{3.63}$$

играет роль массового оператора для туннельных функций Грина  $\hat{T}_\lambda$ .

Для них существует уравнение Дайсона:

$$\hat{T} = \hat{T}^0 + \hat{T}^0 \hat{\Sigma} \hat{T}. \quad (3.64)$$

Формула (3.62) можно переписать в следующем виде:

$$\lambda \frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = \frac{1}{2\beta} \text{Tr}(\hat{T}_\lambda \hat{\Sigma}_\lambda). \quad (3.65)$$

Формулы (3.62) и (3.65) устанавливают отношение между термодинамическим потенциалом и перенормированной одночастичной ФГ  $\hat{G}_\lambda$  или туннельной функцией Грина  $\hat{T}_\lambda$ . Обе эти функции зависят параметра разложения  $\lambda$ , по которому производится интегрирование.

Теперь, как и в случае нормального состояния, чтобы обойти интегрирование по константе разложения, введем специальный функционал

$$Y(\lambda) = Y_1(\lambda) + Y'(\lambda), \quad (3.66)$$

где

$$Y_1(\lambda) = -\frac{1}{2} \text{Tr} \{ \ln(\lambda \hat{T}^0 \hat{\Lambda}_\lambda - 1) + \hat{T}_\lambda \lambda \hat{\Lambda}_\lambda \}, \quad (3.67)$$

и  $Y'(\lambda)$  функционал, построенный из скелетных диаграмм, изображенных на Рис. 3.7

$$Y'(\lambda) = \frac{1}{2} \left\{ \lambda \overbrace{\left[ \text{---} \right]}^{G^{(0)}} + \frac{\lambda^2}{4} \left[ \text{---} \right] - \frac{\lambda^3}{24} \left[ \text{---} \right] + \right. \\ \left. + \frac{\lambda^4}{192} \left[ \text{---} \right] + \frac{\lambda^4}{24} \left[ \text{---} \right] + \dots \right\}$$

The diagrammatic expansion shows several terms: a single dashed line labeled G^{(0)} with coefficient lambda/2; a square loop with four dashed lines and four solid lines, coefficient lambda^2/4; a square loop with four dashed lines and two solid lines, coefficient -lambda^3/24; a square loop with four dashed lines and four solid lines, coefficient lambda^4/192; and a diagram with two square loops connected by two dashed lines, coefficient lambda^4/24. The expansion is enclosed in large curly braces.

**Рис. 3.7.** Прямоугольники изображают НФГ. Двойные пунктирные линии изображают туннельную перенормированные ФГ  $T^{\alpha\alpha'}(x|x')$

Из рис.3.7 и Рис. 3.5 возможно получить соотношение

$$\frac{\delta Y'(\lambda)}{\delta T_\lambda^{\alpha\alpha'}(x|x')} = \frac{1}{2} \lambda \Lambda_\lambda^{\alpha\alpha'}(x'|x). \quad (3.68)$$

Основываясь на выражениях (3.45) и (3.47), учтем следующие производные функционала

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta T_\lambda^{\alpha\alpha'}} Tr(\ln(\hat{T}^0 \hat{\Lambda} \lambda - 1)) &= -Tr(\hat{T} \frac{\delta \hat{\Lambda}}{\delta T_\lambda^{\alpha\alpha'}(x|x')}), \\ \frac{\delta}{\delta T_\lambda^{\alpha\alpha'}(x|x')} Tr(\hat{T} \hat{\Lambda} \lambda) &= \lambda \Lambda_\lambda^{\alpha\alpha'}(x'|x) + Tr(\hat{T}_\lambda \frac{\delta \hat{\Lambda}_\lambda}{\delta T_\lambda^{\alpha\alpha'}(x|x')} \lambda). \end{aligned} \quad (3.69)$$

В результате, получим

$$\frac{\delta}{\delta T_\lambda^{\alpha\alpha'}(x|x)} Tr\{\ln(\lambda \hat{T}^0 \hat{\Lambda}_\lambda - 1) + \lambda \hat{T}_\lambda \hat{\Lambda}_\lambda\} = \lambda \Lambda_\lambda^{\alpha\alpha'}(x|x), \quad (3.70)$$

и

$$\frac{\delta Y_1(\lambda)}{\delta T_\lambda^{\alpha\alpha'}(x|x')} = -\frac{\lambda}{2} \Lambda_\lambda^{\alpha\alpha'}(x'|x). \quad (3.71)$$

Учитывая производную  $Y'(\lambda)$  (3.68), получим свойство стационарности функционала  $Y(\lambda)$

$$\frac{\delta Y(\lambda)}{\delta T_\lambda^{\alpha\alpha'}(x|x')} = 0 \quad (3.72)$$

С помощью определения массового оператора  $\hat{\Sigma}_\lambda$  (3.63), можем переписать функционал  $Y_1(\lambda)$  в виде

$$Y_1(\lambda) = -\frac{1}{2} Tr\{\ln(\hat{T}^0 \hat{\Sigma}_\lambda - 1) + \hat{T}_\lambda \hat{\Sigma}_\lambda\}, \quad (3.73)$$

И докажем вторую форму свойства стационарности

$$\frac{\delta Y(\lambda)}{\delta \hat{\Sigma}_\lambda} = 0 \quad (3.74)$$

Чтобы доказать это выражение, достаточно воспользоваться уравнением Дайсона (3.64) в виде

$$T^0{}^{-1} = \hat{T}_\lambda^{-1} + \hat{\Sigma}_\lambda, \quad (3.75)$$

С производными

$$\begin{aligned}
\frac{\delta(\hat{T}_\lambda^{-1})^{\beta\beta'}(y|y')}{\delta(\hat{\Sigma}_\lambda)^{\alpha\alpha'}(x|x')} &= \delta_{\alpha\beta}\delta_{\alpha'\beta'}\delta_{xy}\delta_{x'y'}, \\
\frac{\delta(\hat{T}_\lambda)^{\beta\beta'}(y|y')}{\delta(\hat{\Sigma}_\lambda)^{\alpha\alpha'}(x|x')} &= (\hat{T}_\lambda)^{\alpha'\beta'}(x'|y')(\hat{T}_\lambda)^{\beta\alpha}(y|x), \\
\frac{\delta}{\delta(\hat{\Sigma}_\lambda)^{\alpha\alpha'}(x|x')} \text{Tr}(\hat{T}_\lambda \hat{\Sigma}_\lambda) &= (\hat{T}_\lambda)^{\alpha'\alpha}(x'|x) + (\hat{T}_\lambda \hat{\Sigma}_\lambda \hat{T}_\lambda)^{\alpha'\alpha}(x'|x), \\
\frac{\delta}{\delta(\hat{\Sigma}_\lambda)^{\alpha\alpha'}(x|x')} \text{Tr}\{\ln(\hat{T}^0 \hat{\Sigma}_\lambda - 1)\} &= -(\hat{T}_\lambda)^{\alpha'\alpha}(x'|x).
\end{aligned} \tag{3.76}$$

В результате получим

$$\frac{\delta Y_1(\lambda)}{\delta(\hat{\Sigma}_\lambda)^{\alpha\alpha'}(x|x')} = -\frac{1}{2}(\hat{T}_\lambda \hat{\Sigma}_\lambda \hat{T}_\lambda)^{\alpha'\alpha}(x'|x), \tag{3.77}$$

и

$$\begin{aligned}
\frac{\delta Y'(\lambda)}{\delta(\hat{\Sigma}_\lambda)^{\alpha\alpha'}(x|x')} &= \frac{\delta Y'(\lambda)}{\delta(\hat{T}_\lambda)^{\beta\beta'}(y|y')} \frac{\delta(\hat{T}_\lambda)^{\beta\beta'}(y|y')}{\delta(\hat{\Sigma}_\lambda)^{\alpha\alpha'}(x|x')}, \\
&= \frac{1}{2}(\hat{T}_\lambda \hat{\Sigma}_\lambda \hat{T}_\lambda)^{\alpha'\alpha}(x'|x)
\end{aligned} \tag{3.78}$$

где было принято обычное соглашение о суммировании по повторяющимся индексам. В результате получаем свойство стационарности (2.74) функционала  $Y(\lambda)$  относительно изменений массового оператора  $\Sigma_\lambda$ . Этот массовый оператор для  $\lambda=1$  совпадает с корреляционной функцией модели Хаббарда.

Теперь найдем соотношение между термодинамическим потенциалом  $F(\lambda)$  и функционалом  $Y(\lambda)$ .

Рассмотрим первое значение производной  $\frac{dY(\lambda)}{d\lambda}$ . Имеются 2 вида  $\lambda$  – зависимостей функционала  $Y(\lambda)$ : неявная через  $\Sigma_\lambda$  а так же явно через множители  $\lambda^n$  перед скелетными диаграммами для функционала  $Y'(\lambda)$ .

Благодаря свойству стационарности (2.74) получим

$$\frac{dY(\lambda)}{d\lambda} = \frac{\delta Y(\lambda)}{\delta \Sigma_\lambda} \frac{d\Sigma_\lambda}{d\lambda} + \frac{\partial Y(\lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\Sigma_\lambda} = \frac{dY(\lambda)}{d\lambda} \Big|_{\Sigma_\lambda} = \frac{dY'(\lambda)}{d\lambda} \Big|_{\Sigma_\lambda}. \tag{3.79}$$

Здесь учтено, что  $Y_1(\lambda)$  часть функционала  $Y(\lambda)$  (см. уравнения (3.66) и (3.73)) не явно зависит от  $\lambda$ .

Используя определения  $Y'(\lambda)$  (см. Рис. 3.7) и  $\Lambda_\lambda$  (см. Рис. 3.5) легко установить

$$\lambda \frac{dY(\lambda)}{d\lambda} = \lambda \frac{\partial Y'(\lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\Sigma_\lambda} = \frac{1}{2\beta} \text{Tr}(\lambda \hat{T}_\lambda \hat{\Lambda}_\lambda) = \frac{1}{2\beta} \text{Tr}(\hat{T}_\lambda \hat{\Sigma}_\lambda). \quad (3.80)$$

Из выражений (2.70) и (2.80) имеем

$$\lambda \frac{dY(\lambda)}{d\lambda} = \frac{1}{2\beta} \text{Tr}(\hat{T}_\lambda \hat{\Sigma}_\lambda) = \lambda \frac{dF(\lambda)}{d\lambda}, \quad (3.81)$$

Таким образом, получим

$$F(\lambda) = Y(\lambda) + F_0, \quad (3.82)$$

Поскольку для  $\lambda = 0$  возмущение отсутствует  $Y(\lambda = 0) = 0$  и  $F(\lambda = 0) = F_0$ .

Положив  $\lambda = 1$ , получим

$$F = F_0 + Y(1), \quad (3.83)$$

Со свойством стационарности

$$\frac{\delta F}{\delta \hat{\Sigma}} = 0. \quad (3.84)$$

### 3.3 Заключение по третьей главе

В настоящей главе получает развитие диаграммная техника для МХ, предложенная Москаленко В.А. [30], для исследования термодинамических свойств модели. Целью являлось доказательство теоремы стационарности термодинамического потенциала модели, как в нормальной, так и в сверхпроводящей фазе. Для этого необходимо получить соотношение связывающее ТДП системы и одночастичную электронную функцию Грина, и определить массовый оператор, затем произвести вариацию этого соотношения по массовому оператору.

В первую очередь в гамильтониан МХ была введена вспомогательная величина – константа разложения  $\lambda$ , в конце вычисления она полагается равной единице. На основании ОТВ было выполнено диаграммное разложение одночастичной ФГ для МХ в присутствии параметра разложения  $\lambda$ . В результате применения ОТВ в сверхпроводящем состоянии помимо нормальных НФГ, так же появляются аномальные НФГ, которые содержат произвольное число ферми-операторов рождения и уничтожения. Поэтому при рассмотрении сверхпроводящего состояния введено понятие квантового зарядового числа  $\alpha$ , которое позволять учесть все эти возможности.

В обеих фазах было введено понятие туннельной ФГ, получающейся в результате процесса перенормировки интеграла перескока, являющегося локальной величиной, на динамическую, которая представляет собой ФГ. Было получено уравнение Дайсона для этой функции, и определен массовый оператор  $\Sigma$ . Оказалось, что при  $\lambda = 1$  массовый оператор туннельной ФГ равен корреляционной функции системы, которая представляет собой сумму сильно связанных диаграмм, содержащих НФГ. На основании известного соотношения между ТДП и частью из сильно связанных диаграмм термодинамического среднего оператора эволюции было установлено точное соотношение между ТДП системы и одночастичной ФГ (путем сравнения диаграммных рядов для одночастичной ФГ и оператора эволюции). Поскольку в гамильтониан была введена вспомогательная константа разложения  $\lambda$ , это соотношение содержит дополнительное интегрирование по ней. Эта необходимость интегрирования была обойдена путем построения специального функционала на основании скелетных диаграмм для ФГ и оператора эволюции, который содержат НФГ и полные туннельные ФГ. Было доказано существование свойства стационарности этого функционала (речь о стационарности по отношению к изменению корреляционной функции или массового оператора). Было показано, что при константе разложения  $\lambda = 1$  этот функционал совпадает с ТДП.

Таким образом, было доказано свойство стационарности ТДП системы. Эта теорема является обобщением известной теоремы Латтинжера и Уорда [44], доказанной для слабо взаимодействующих систем, на случай сильно коррелированных систем, описываемых моделью Хаббарда, как в нормальном, так и сверхпроводящем состояниях.

Следует отметить, что теорема стационарности ТДП была так же доказана Москаленко В.А. и др. для периодической модели Андерсона. Сравнение результатов для этих моделей показало топологическое совпадение диаграмм. Это сравнение позволяет сделать вывод, что с термодинамической точки зрения периодическая модель Андерсона может быть приведена к МХ путем замены функций Грина подсистемы электронов проводимости ПМА на туннельные ФГ электронов перескоков МХ.

## 4 ДИАГРАММНЫЙ АНАЛИЗ МОДЕЛЕЙ ОРБИТАЛЬНО ВЫРОЖДЕННЫХ СКС

### 4.1 Двукратно вырожденная модель Хаббарда

Для начала рассмотрим минимальную модель, отвечающую сильно коррелированным системам, в которых имеется орбитальное вырождение локализованных электронов модель вырожденную двухорбитальную МХ. Такая модель подходит для описания поведения электронов, например, в некоторых сверхпроводниках на основе железа или  $A_n C_{60}$ . В таких системах особое значение имеет влияние орбитального вырождения на ПМХ металл-диэлектрик.

Наше исследование будет основываться на диаграммной теории для сильно коррелированных электронных систем, разработанной ранее для орбитально невырожденных систем [29, 30, 32], являясь ее обобщением.

Гамильтониан модели имеет вид

$$H = H_L + H', \quad (4.1)$$

где

$$\begin{aligned} H' &= -\sum_{i,j} \sum_{l,l'} \sum_{\sigma} t_{l,l'}(j-i) C_{jl'\sigma}^{\dagger} C_{il\sigma}, \\ H_L &= \sum_i H_{Li}, \\ H_{Li} &= U \sum_l n_{il\uparrow} n_{il\downarrow} + \frac{J}{2} \sum_{l \neq l'} \sum_{\sigma} C_{il\sigma}^{\dagger} C_{il\bar{\sigma}}^{\dagger} C_{il'\bar{\sigma}} C_{il'\sigma} - \\ &\quad - \mu \sum_{i,l,\sigma} C_{il\sigma}^{\dagger} C_{il\sigma} + \sum_{l \neq l'} \sum_{\sigma,\sigma'} \left\{ \frac{U'}{2} n_{il\sigma} n_{il'\sigma'} + \frac{J}{2} C_{il\sigma}^{\dagger} C_{il'\sigma}^{\dagger} C_{il\sigma'} C_{il'\sigma'} \right\}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

Здесь  $C_{j'\sigma}^{\dagger}, C_{j\sigma}$  – 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 обменного внутриатомного взаимодействия Хунда ( $J > 0$ ) соответственно. В дальнейшем воспользуемся соотношением  $U = U' + 2J$ , которое выполняется в некоторых орбитально-вырожденных моделях [13]. Величины  $t_{ll'}(j-i)$  являются матричными элементами туннельных

переходов электронов между узлами решетки. Существуют внутриорбитальные ( $l = l'$ ) и межорбитальные ( $l \neq l'$ ) перескоки электронов.

Соответствующие этим перескокам кинетические энергии  $\varepsilon''(\vec{k})$  равны

$$\varepsilon''(\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_i t_{ll'}(\vec{i} - \vec{j}) e^{i\vec{k}(\vec{i} - \vec{j})}, \quad (4.3)$$

здесь  $N$  количество узлов решетки.

Примем гамильтониан изолированного атома  $H_{Li}$  в (4.2) за гамильтониан нулевого приближения, а член ответственный за туннелирование электронов в  $H'$  будем рассматривать, как возмущение.

#### 4.1.1 Построение диаграммной теории в локальном приближении

Рассмотрим диагонализацию гамильтониана  $H_{Li}$  (4.2). Поскольку орбитальное квантовое число  $l$  принимает два значения  $l = 1, 2$ , общее число локальных квантовых состояний в пространстве Гильберта равно 16 в каждом узле решетки. Первое возможное состояние иона соответствует вакуумному  $|0\rangle$ , т. е. узлу решетки без электронов. Далее возможны состояния с одним электроном на узле  $|2\rangle, |3\rangle, |4\rangle$  и  $|5\rangle$ , т. е. с числом электронов  $N_e = 1$ , спином  $S = 1/2$  и проекцией спина  $S_z = \pm 1/2$ ; двухчастичных состояний шесть, три из которых  $|6\rangle, |7\rangle$  и  $|8\rangle$  – синглетные состояния с числом электронов  $N_e = 2$  и спином  $S = 0$  и три триплетные состояния с  $N_e = 2, S = 1$  и  $S_z = -1, 0, +1$ ; далее четыре трехэлектронные состояния  $|12\rangle, |13\rangle, |14\rangle$  и  $|15\rangle$  – с  $N_e = 3, S = 1/2$ , и  $S_z = \pm 1/2$ . Последнее состояние  $|16\rangle$  соответствует случаю  $N_e = 4$  и  $S = 0$ .

Перечислим собственные вектора и значения оператора  $H_{Li}$ , пронумеровав их от 1 до 16 в порядке возрастания числа частиц (индекс узла решетки опущен).

$$\begin{aligned}
|1\rangle &= |0\rangle, E_1 = 0, \\
|2\rangle &= C_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle, E_2 = -\mu, \\
|3\rangle &= C_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle, E_3 = -\mu, \\
|4\rangle &= C_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle, E_4 = -\mu, \\
|5\rangle &= C_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle, E_5 = -\mu, \\
|6\rangle &= \frac{C_{1\uparrow}^\dagger C_{1\downarrow}^\dagger - C_{2\uparrow}^\dagger C_{2\downarrow}^\dagger}{\sqrt{2}} |0\rangle, E_6 = U - 2\mu - J, \\
|7\rangle &= \frac{C_{1\uparrow}^\dagger C_{1\downarrow}^\dagger + C_{2\uparrow}^\dagger C_{2\downarrow}^\dagger}{\sqrt{2}} |0\rangle, E_7 = U - 2\mu + J, \\
|8\rangle &= \frac{C_{1\uparrow}^\dagger C_{2\downarrow}^\dagger - C_{1\downarrow}^\dagger C_{2\uparrow}^\dagger}{\sqrt{2}} |0\rangle, E_8 = U - 2\mu - J, \\
|9\rangle &= C_{1\uparrow}^\dagger C_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle, E_9 = U - 2\mu - 3J, \\
|10\rangle &= \frac{C_{1\uparrow}^\dagger C_{2\downarrow}^\dagger + C_{1\downarrow}^\dagger C_{2\uparrow}^\dagger}{\sqrt{2}} |0\rangle, E_{10} = E_9, \\
|11\rangle &= C_{1\downarrow}^\dagger C_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle, E_{11} = E_9, \\
|12\rangle &= C_{1\uparrow}^\dagger C_{1\downarrow}^\dagger C_{2\uparrow}^\dagger |0\rangle, E_{12} = 3U - 3\mu - 5J, \\
|13\rangle &= C_{2\uparrow}^\dagger C_{2\downarrow}^\dagger C_{1\uparrow}^\dagger |0\rangle, E_{13} = E_{12}, \\
|14\rangle &= C_{1\uparrow}^\dagger C_{1\downarrow}^\dagger C_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle, E_{14} = E_{12}, \\
|15\rangle &= C_{2\uparrow}^\dagger C_{2\downarrow}^\dagger C_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle, E_{15} = E_{12}, \\
|16\rangle &= C_{1\uparrow}^\dagger C_{1\downarrow}^\dagger C_{2\uparrow}^\dagger C_{2\downarrow}^\dagger |0\rangle, E_{16} = 6U - 4\mu - 10J
\end{aligned} \tag{4.4}$$

Собственные значения были вычислены исходя из того, что энергия одно-электронного состояния равна химическому потенциалу  $\mu$ , а так же воспользовались соотношением  $U = U' + 2J$ .

Эта система собственных функций представляет собой полную систему ортогонализированных собственных функций. Одна из этих функций должна иметь наименьшую энергию и соответствовать основному состоянию системы. В качестве такой функции может быть одна из триплетных функций с  $N_e = 2$ ,  $S_z = 1$  и  $S_z = -1, 0, +1$  и энергией  $E = U - 2\mu - 3J$ . Полное основное состояние представляет собой произведение таких двух электронных триплетов в каждом узле. В этом случае первые возбужденные состояния есть дважды вырожденные синглетные состояния  $|6\rangle$  и  $|8\rangle$  с энергией  $E = U - 2\mu - J$ , а наивысшее возбужденное состояние – синглетное состояние  $|7\rangle$  с энергией  $E_7 = U - 2\mu + J$ .

В дальнейшем будем исходить и того, что основным состоянием локальной модели является триплетное состояние со спином  $\sigma = 1$ . Это предположение является основным для всех наших дальнейших вычислений.

В условиях симметрии частица-дырка и половинном заполнении  $\langle n_1 \rangle = \langle n_2 \rangle = 1$  химический потенциал принимает значение:

$$\mu_0 = \frac{U}{2} + U' - \frac{J}{2} = \frac{3}{2}U - \frac{5}{2}J \quad (4.5)$$

Если  $\mu \rightarrow -\infty$  величина  $n_1 + n_2$  стремится к нулю и, если  $\mu \rightarrow +\infty$ , эти числа приближаются к значению 4.

Далее выразим через операторы Хаббарда для ионных квантовых переходов  $X^m = |m\rangle\langle n|$  электронные операторы рождения  $C_{l\sigma}^\dagger$ :

$$\begin{aligned} C_{l\sigma}^\dagger = & X^{2+l-\sigma,1} + \\ & + \frac{\sigma}{\sqrt{2}} \left[ (-1)^{l+1} X^{6,2+l+\sigma} + X^{7,2+l+\sigma} \right] + \\ & + \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sigma X^{8,5-l+\sigma} + (-1)^{l+1} X^{10,5-l+\sigma} \right] + \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ -X^{12+l-\sigma,8} + \sigma(-1)^{l+1} X^{12+l-\sigma,10} \right] + \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ (-1)^l X^{15-l-\sigma,6} + X^{15-l-\sigma,7} \right] + (-1)^{l+1} X^{10-\sigma,5-l-\sigma} + (-1)^{l+1} \sigma X^{12+l+\sigma,10+\sigma} + \sigma X^{16,15-l+\sigma}; \\ & \sum_{m=1}^{16} X^m = 1 \end{aligned} \quad (4.6)$$

Формула (4.6) удобна тем, что она позволяет вычислять ФГ и другие динамические величины при произвольных значениях квантовых чисел  $l=1, 2$  и  $\sigma=-1, 1$ . В общем виде эта формула должна быть дополнительно снабжена индексом узла  $i$ , который нами для простоты опущен.

Рассмотрим мацубаровскую одночастичную функцию Грина локализованных электронов:

$$G^{(0)}(l\sigma\tau | l'\sigma'\tau') = G_{l\sigma,l'\sigma'}^{(0)}(\tau - \tau') = -\langle TC_{l\sigma}(\tau) \bar{C}_{l'\sigma'}(\tau') \rangle_0 \quad (4.7)$$

$$\text{где } C_{l\sigma}(\tau) = e^{\tau H_L} C_{l\sigma} e^{-\tau H_L}, \quad \bar{C}_{l\sigma}(\tau) = e^{\tau H_L} C_{l\sigma}^+ e^{-\tau H_L}.$$

Здесь усреднение выполняется по гамильтониану нулевого приближения.

Фурье-образ мацубаровской одночастичной ФГ нулевого приближения определяется по формуле

$$G^{(0)}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} G^{(0)}(i\omega_n), \quad \omega_n = (2n+1)\pi / \beta. \quad (4.8)$$

Используя формулы (4.6-4.8) и свойства операторов Хаббарда, получим следующее выражение для Фурье-образа ФГ нулевого приближения (локальной):

$$G_{l\sigma, l'\sigma'}^{(0)}(i\omega_n) = \frac{\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{ll'}}{Z_0} \left\{ \frac{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2}}{i\omega_n + E_1 - E_2} + \frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_6}}{i\omega_n + E_2 - E_6} + \frac{1}{2} \frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_7}}{i\omega_n + E_2 - E_7} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_9}}{i\omega_n + E_2 - E_9} + \frac{e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega_n + E_6 - E_{12}} + \frac{1}{2} \frac{e^{-\beta E_7} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega_n + E_7 - E_{12}} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega_n + E_9 - E_{12}} + \frac{e^{-\beta E_{12}} + e^{-\beta E_{16}}}{i\omega_n + E_{12} - E_{16}} \right\} \quad (4.9)$$

Здесь  $Z_0$  статистическая сумма в атомном пределе:

$$Z_0 = e^{-\beta E_1} + 4e^{-\beta E_2} + 2e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_7} + 3e^{-\beta E_9} + 4e^{-\beta E_{12}} + e^{-\beta E_{16}} \quad (4.10)$$

Локальная функция Грина (4.9) диагональна по спину и орбитальным индексам и не зависит от них.

#### 4.1.2 Процессы делокализации.

Теория возмущений, развитая ранее для орбитально-невырожденной МХ [29, 30, 32] может быть использована в настоящей главе для изучения перенормировки локальной ФГ (4.9) благодаря наличию внутри- и межорбитальных перескоков туннелирующих электронов.

Определим полную мацубаровскую функцию Грина в представлении взаимодействия:

$$G(\bar{x}l\sigma\tau | \bar{x}'l'\sigma'\tau') = -\left\langle T C_{\bar{x}l\sigma}(\tau) \bar{C}_{\bar{x}'l'\sigma'}(\tau') U(\beta) \right\rangle_0^c \quad (4.11)$$

Где  $U(\beta)$  – унитарный оператор эволюции

$$U(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_n T(H'(\tau_1) \dots H'(\tau_n)) \quad (4.12)$$

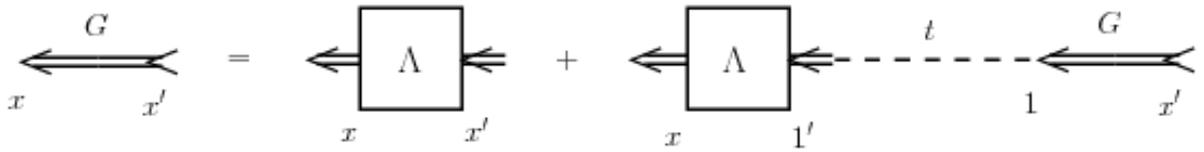
Статистические средние в выражении (4.11) вычисляются по статистической матрицы локальной части модели. Индекс «с» в формуле (4.11) означает, что должны учитываться только связанные диаграммы. Обобщенная теорема Вика и соответствующая диаграммная техника будут использованы для получения полной ФГ.

Типичная диаграмма теории возмущений второго порядка для ФГ (4.11) изображена на Рис. 4.1.

С помощью введенной ранее [29, 30] корреляционной функции

$$\Lambda(x|x') = G^0(x|x') + Z(x|x') \quad (4.13)$$

можно сформулировать уравнение типа Дайсона для перенормированной одночастичной ФГ (см. рис.4.2.).



**Рис. 4.1.** 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:

$$G(\bar{x}l\sigma\tau | \bar{x}'l'\sigma'\tau') = \Lambda(\bar{x}l\sigma\tau | \bar{x}'l'\sigma'\tau') + \sum_{l_1} \sum_{\sigma_1} \int \Lambda(\bar{x}l\sigma\tau | \bar{l}'_1\sigma_1\tau_1) \times t_{l_1}(\bar{l}' - \bar{l}) G(\bar{l}'_1\sigma_1\tau_1 | \bar{x}'l'\sigma'\tau') d\tau_1 \quad (4.14)$$

Фурье-представление по импульсу и частоте имеет вид

$$G_{\sigma\sigma'}^{ll'}(\vec{k} | i\omega_n) = \Lambda_{\sigma\sigma'}^{ll'}(\vec{k} | i\omega_n) + \sum_{l_1\sigma_1} \Lambda_{\sigma\sigma_1}^{ll_1}(\vec{k} | i\omega_n) \epsilon^{l_1 l}(\vec{k}) G_{\sigma_1\sigma'}^{l_1 l'}(\vec{k} | i\omega_n) \quad (4.15)$$

В парамагнитной фазе все спиновые зависимости диагональны и уравнение типа Дайсона имеет вид:

$$G_{\sigma}^{ll'}(\vec{k} | i\omega_n) = \Lambda_{\sigma}^{ll'}(\vec{k} | i\omega_n) + \sum_{l_1} \Lambda_{\sigma}^{ll_1}(\vec{k} | i\omega_n) \epsilon^{l_1 l}(\vec{k}) G_{\sigma}^{l_1 l'}(\vec{k} | i\omega_n) \quad (4.16)$$

Это уравнение эквивалентно системе из четырех уравнений ( $l, l' = 1, 2$ ) для функций  $G_{\sigma}^{11}$ ,  $G_{\sigma}^{12}$ ,  $G_{\sigma}^{21}$ ,  $G_{\sigma}^{22}$ . ( $k = \vec{k}, i\omega$ ) Например,

$$G_{\sigma}^{11}(k) = \Lambda_{\sigma}^{11}(k) + \Lambda_{\sigma}^{11}(k) \epsilon^{11}(\vec{k}) G_{\sigma}^{11}(k) + \Lambda_{\sigma}^{11}(k) \epsilon^{12}(\vec{k}) G_{\sigma}^{21}(k) + \Lambda_{\sigma}^{12}(k) \epsilon^{21}(\vec{k}) G_{\sigma}^{11}(k) + \Lambda_{\sigma}^{12}(k) \epsilon^{22}(\vec{k}) G_{\sigma}^{21}(k) \quad (4.17)$$

Имеются три дополнительных уравнения, которые позволяют нам получить следующие значения:

$$\begin{aligned}
G_{\sigma}^{11}(k) &= \frac{\Lambda_{\sigma}^{11}(k) - \varepsilon^{22}(\vec{k})\Delta_{\sigma}(k)}{d_{\sigma}(k)}, & G_{\sigma}^{12}(k) &= \frac{\Lambda_{\sigma}^{12}(k) + \varepsilon^{12}(\vec{k})\Delta_{\sigma}(k)}{d_{\sigma}(k)}, \\
G_{\sigma}^{21}(k) &= \frac{\Lambda_{\sigma}^{21}(k) + \varepsilon^{21}(\vec{k})\Delta_{\sigma}(k)}{d_{\sigma}(k)}, & G_{\sigma}^{22}(k) &= \frac{\Lambda_{\sigma}^{22}(k) - \varepsilon^{11}(\vec{k})\Delta_{\sigma}(k)}{d_{\sigma}(k)},
\end{aligned} \tag{4.18}$$

где

$$\begin{aligned}
\Delta_{\sigma}(k) &= \Lambda_{\sigma}^{11}(k)\Lambda_{\sigma}^{22}(k) - \Lambda_{\sigma}^{12}(k)\Lambda_{\sigma}^{21}(k), \\
d_{\sigma}(k) &= 1 - \Lambda_{\sigma}^{11}(k)\varepsilon^{11}(\vec{k}) - \Lambda_{\sigma}^{22}(k)\varepsilon^{22}(\vec{k}) - \Lambda_{\sigma}^{12}(k)\varepsilon^{21}(\vec{k}) - \Lambda_{\sigma}^{21}(k)\varepsilon^{12}(\vec{k}) + \Delta_{\sigma}(k)\bar{\varepsilon}(\vec{k}), \\
\bar{\varepsilon}(\vec{k}) &= \varepsilon^{11}(\vec{k})\varepsilon^{22}(\vec{k}) - \varepsilon^{12}(\vec{k})\varepsilon^{21}(\vec{k}),
\end{aligned} \tag{4.19}$$

В этих уравнениях внутриорбитальные переходы определяются диагональными  $\varepsilon^{11}(\vec{k}), \varepsilon^{22}(\vec{k})$  энергетическими зонами, а межорбитальные перескоки – недиагональными  $\varepsilon^{12}(\vec{k})$  и  $\varepsilon^{21}(\vec{k})$  величинами.

Эти уравнения могут быть записаны в матричной форме, если ввести определения:

$$\hat{G}_{\sigma}(k) = \begin{pmatrix} G_{\sigma}^{11}(k) & G_{\sigma}^{12}(k) \\ G_{\sigma}^{21}(k) & G_{\sigma}^{22}(k) \end{pmatrix}, \hat{\Lambda}_{\sigma}(k) = \begin{pmatrix} \Lambda_{\sigma}^{11}(k) & \Lambda_{\sigma}^{12}(k) \\ \Lambda_{\sigma}^{21}(k) & \Lambda_{\sigma}^{22}(k) \end{pmatrix}, \hat{E}_{\sigma}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\sigma}^{11}(\vec{k}) & \varepsilon_{\sigma}^{12}(\vec{k}) \\ \varepsilon_{\sigma}^{21}(\vec{k}) & \varepsilon_{\sigma}^{22}(\vec{k}) \end{pmatrix} \tag{4.20}$$

Матричное уравнение имеет вид:

$$\hat{G}_{\sigma}(k) = \hat{\Lambda}_{\sigma}(k) + \hat{\Lambda}_{\sigma}(k)\hat{E}(\vec{k})\hat{G}_{\sigma}(k) \tag{4.21}$$

После введения обратных матриц

$$\begin{aligned}
\hat{G}_{\sigma}^{-1}(k) &= \frac{1}{\Omega_{\sigma}(k)} \begin{pmatrix} G_{\sigma}^{22}(k) & -G_{\sigma}^{12}(k) \\ -G_{\sigma}^{21}(k) & G_{\sigma}^{11}(k) \end{pmatrix}, \\
\hat{\Lambda}_{\sigma}^{-1}(k) &= \frac{1}{\Delta_{\sigma}(k)} \begin{pmatrix} \Lambda_{\sigma}^{22}(k) & -\Lambda_{\sigma}^{12}(k) \\ -\Lambda_{\sigma}^{21}(k) & \Lambda_{\sigma}^{11}(k) \end{pmatrix}, \\
\Omega_{\sigma}(k) &= G_{\sigma}^{11}(k)G_{\sigma}^{22}(k) - G_{\sigma}^{12}(k)G_{\sigma}^{21}(k) = \frac{\Delta_{\sigma}(k)}{d_{\sigma}(k)},
\end{aligned} \tag{4.22}$$

уравнение типа уравнения Дайсона принимает вид:

$$\hat{\Lambda}_{\sigma}^{-1}(k) = \hat{G}_{\sigma}^{-1}(k) + \hat{E}(k). \tag{4.23}$$

Это уравнение известно для орбитально невырожденной МХ. Таким образом, нами показано, что орбитально-вырожденная теория оказывается аналогичной орбитально невырожденной теории, если в последней заменить числовые ФГ двухрядными матрицами, в которых диагональные элементы соответствуют межорбитальным

переходам, а недиагональные элементы внутриорбитальным переходам. Такова цена учета межорбитальных взаимодействий и туннелирования с точки зрения диаграммной теории.

### 4.1.3 Вычисление плотности электронных состояний в приближение цепочечных диаграмм

Теперь рассмотрим простейшие диаграммы цепочечного типа орбитально не вырожденной модели [29, 30, 31] и пренебрежем всеми диаграммами, которые содержат НФГ. Это приближение эквивалентно предположению, что корреляционная функция  $Z(x|x')$  равна нулю и  $\Lambda_{\sigma}^{ll'}(i\omega_n) = G_{\sigma}^{(0)ll'}(i\omega_n) = \delta_{ll'} G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n)$ .

Как видно из (4.9), ФГ нулевого приближения  $G_{\sigma}^{(0)}(i\omega)$  не зависит от спина  $\sigma$  и орбитальных индексов  $l$  и диагональна по ним. В этом приближении перенормированные функции (4.18) приобретают вид:

$$\begin{aligned}
 G_{\sigma}^{11}(k) &= \frac{G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n) [1 - \varepsilon^{22}(\vec{k}) G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n)]}{d_{\sigma}(k)}, \\
 G_{\sigma}^{12}(k) &= \frac{\varepsilon^{12}(\vec{k}) [G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n)]^2}{d_{\sigma}(k)}, \quad G_{\sigma}^{21}(k) = \frac{\varepsilon^{21}(\vec{k}) [G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n)]^2}{d_{\sigma}(k)}, \\
 G_{\sigma}^{22}(k) &= \frac{G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n) [1 - \varepsilon^{11}(\vec{k}) G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n)]}{d_{\sigma}(k)}, \\
 d_{\sigma}(k) &= 1 - (\varepsilon^{11}(\vec{k}) + \varepsilon^{22}(\vec{k})) G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n) + \bar{\varepsilon}(\vec{k}) [G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n)]^2 = \\
 &= \bar{\varepsilon}(\vec{k}) [G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n) - f_{+}(\vec{k})] [G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n) - f_{-}(\vec{k})]
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

где

$$f_{\pm}(\vec{k}) = \frac{\varepsilon^{11}(\vec{k}) + \varepsilon^{22}(\vec{k})}{2\bar{\varepsilon}(\vec{k})} \pm \frac{\sqrt{(\varepsilon^{11}(\vec{k}) - \varepsilon^{22}(\vec{k}))^2 + 4\varepsilon^{12}(\vec{k})\varepsilon^{21}(\vec{k})}}{2\bar{\varepsilon}(\vec{k})} \tag{4.25}$$

Ниже, для получения функции плотности электронных состояний и анализа фазового перехода Мотта-Хаббарда, исследуем одну из функций Грина (4.24), например, первую из них  $G_{\sigma}^{11}(k)$ . После некоторых преобразований получим:

$$G_{\sigma}^{11}(\vec{k} | i\omega) = \frac{-1}{\sqrt{(\varepsilon^{11}(\vec{k}) - \varepsilon^{22}(\vec{k}))^2 + 4\varepsilon^{12}(\vec{k})\varepsilon^{21}(\vec{k})}} \times$$

$$\times \left\{ \varepsilon^{22}(\vec{k})(f_+ - f_-) + \frac{f_+(f_+\varepsilon^{22}(\vec{k}) - 1)}{G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n) - f_+} - \frac{f_-(f_-\varepsilon^{22}(\vec{k}) - 1)}{G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n) - f_-} \right\} \quad (4.26)$$

Дальнейшее аналитическое преобразование этого уравнения затрудняется наличием достаточно сложной структуры ФГ  $G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n)$ , определяемой формулой (4.9). Согласно этой формуле, ФГ  $G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n)$  нулевого приближения представляет собой сумму восьми вкладов, каждый из которых со своим статистическим весом. Ниже будет использовано приближение, состоящим в замене реальной структуры (4.9) ее упрощенным вариантом, параметры которого определяются основным спин-триплетным состоянием со значениями, т. е.:

$$G_{\sigma}^{(0)}(i\omega) \cong \frac{A+B}{i\omega_n + E_{ab}} + \frac{C+D}{i\omega_n + E_{cd}}, \quad (4.27)$$

$$A = \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_2}}{Z_0}, B = \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_9}}{Z_0} = C, D = \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_{12}}}{Z_0}, \quad (4.28)$$

$$Z_0 = 4e^{-\beta E_2} + 3e^{-\beta E_9} + 4e^{-\beta E_{12}}, E_{ab} = E_2 - E_9, E_{cd} = E_9 - E_{12},$$

На основании (4.27) получим

$$\frac{1}{G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n) - f} = -\frac{1}{f} \left\{ 1 + \frac{(E_1(f) + E_{ab})(E_1(f) + E_{cd})}{(E_1(f) - E_2(f))(i\omega_n - E_1(f))} - \right.$$

$$\left. - \frac{(E_2(f) + E_{ab})(E_2(f) + E_{cd})}{(E_1(f) - E_2(f))(i\omega_n - E_2(f))} \right\} \quad (4.29)$$

где

$$E_{1,2}(f) = -\frac{1}{2} \left[ E_{ab} + E_{cd} - \frac{A+B+C+D}{f} \right]$$

$$\pm \frac{1}{2f} \sqrt{[(E_{ab} - E_{cd})f + C + D - A - B]^2 + 4F}, F = (A+B)(C+D). \quad (4.30)$$

Плотность электронных состояний  $\rho^{11}(E)$ , определяемая ФГ  $G_{\sigma}^{11}(\vec{k} | i\omega_n)$ , имеет вид:

$$\rho_{\sigma}^{11}(E) = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \text{Im} G_{\sigma}^{11}(\vec{k}, E + i\delta), \quad (4.31)$$

где  $G_{\sigma}^{11}(\vec{k} | E + i\delta)$  – аналитическое продолжение мацубаровской ФГ для дискретного числа точек  $i\omega_n$  в комплексной плоскости  $E$ .

Мнимая часть этой функции:

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\sigma}^{11}(\vec{k} | E + i\delta) &= \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon^{11}(\vec{k}) - \varepsilon^{22}(\vec{k}))^2 + 4\varepsilon^{12}(\vec{k})\varepsilon^{21}(\vec{k})}} \times \\
&\times \left\{ \frac{f_+ \varepsilon^{22}(\vec{k}) - 1}{E_1(f_+) - E_2(f_+)} \left[ (E_1(f_+) + E_{ab})(E_1(f_+) + E_{cd}) \delta(E - E_1(f_+)) - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - (E_2(f_+) + E_{ab})(E_2(f_+) + E_{cd}) \delta(E - E_2(f_+)) \right] - \right. \\
&\quad \left. - \frac{f_- \varepsilon^{22}(\vec{k}) - 1}{E_1(f_-) - E_2(f_-)} \left[ (E_1(f_-) + E_{ab})(E_1(f_-) + E_{cd}) \delta(E - E_1(f_-)) - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - (E_2(f_-) + E_{ab})(E_2(f_-) + E_{cd}) \delta(E - E_2(f_-)) \right] \right\} \quad (4.32)
\end{aligned}$$

Эта величина должна быть положительной как часть запаздывающей ФГ.

Далее упростим наши выкладки, полагая:

$$\varepsilon^{11}(\vec{k}) = \varepsilon^{22}(\vec{k}) \equiv \varepsilon(\vec{k}), \varepsilon^{12}(\vec{k}) = \varepsilon^{21}(\vec{k}) \equiv \varepsilon_0 \quad (4.33)$$

В результате, получим значения:

$$\begin{aligned}
f_+(\vec{k}) &= (\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon_0)^{-1}, \quad f_-(\vec{k}) = (\varepsilon(\vec{k}) + \varepsilon_0)^{-1}, \\
f_+(\vec{k})\varepsilon^{22}(\vec{k}) - 1 &= \varepsilon_0, \quad f_+(\vec{k}), \quad f_-(\vec{k})\varepsilon^{22}(\vec{k}) - 1 = -\varepsilon_0 f_-(\vec{k}) \quad (4.34)
\end{aligned}$$

Суммирование по вектору  $\vec{k}$  в этой общей энергетической зоне  $\varepsilon(\vec{k})$  заменим интегрированием по формуле

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \dots = \int \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon \dots \quad (4.35)$$

Где  $\rho_0(\varepsilon)$  – плотность электронных состояний в исходной зоне без учета кулоновского взаимодействия.

Учтем, что

$$\begin{aligned}
\delta(E - E_1(f)) &= \frac{\theta[(E + E_{ab})(E + E_{cd})]}{\left. \frac{d\Phi_1(E)}{df} \right|_{\Phi_1=0}} \times \\
&\times \delta \left[ f - \left( \frac{A+B}{E + E_{ab}} + \frac{C+D}{E + E_{cd}} \right) \right], \quad \delta(E - E_2(f)) = \frac{\theta[-(E + E_{ab})(E + E_{cd})]}{\left. \frac{d\Phi_2(E)}{df} \right|_{\Phi_2=0}} \times \\
&\times \delta \left[ f - \left( \frac{A+B}{E + E_{ab}} + \frac{C+D}{E + E_{cd}} \right) \right], \quad (4.36)
\end{aligned}$$

где

$$\Phi_{1,2}(E) = E - E_{1,2}(f), \quad \frac{d\Phi_{1,2}}{df} \Big|_{\Phi_{1,2}=0} = \frac{(E + E_{ab})^2 (E + E_{cd})^2}{(A + B)(E + E_{cd})^2 + (C + D)(E + E_{ab})^2} \quad (4.37)$$

$\theta(x)$  – ступенчатая функция, которая определяется как  $\theta(x) = 1$  при  $x > 0$  и равная нулю в противном случае.

Поэтому мы можем преобразовать правую часть уравнения (4.32). Например,

$$\begin{aligned} & (E_1(f) + E_{ab})(E_1(f) + E_{cd})\delta(E - E_1(f)) - \\ & - (E_2(f) + E_{ab})(E_2(f) + E_{cd})\delta(E - E_2(f)) = \\ & = \frac{(E + E_{ab})(E + E_{cd})}{\frac{d\Phi(E)}{df} \Big|_{\Phi=0}} \times \delta \left[ f - \left( \frac{A + B}{E + E_{ab}} + \frac{C + D}{E + E_{cd}} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.38)$$

В результате получим положительное значение

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^{11}(\vec{k} | E + i\delta) = \\ & = \frac{1}{2} \left\{ f_+^2 \delta \left[ f_+ - \left( \frac{A + B}{E + E_{ab}} + \frac{C + D}{E + E_{cd}} \right) \right] + f_-^2 \delta \left[ f_- - \left( \frac{A + B}{E + E_{ab}} + \frac{C + D}{E + E_{cd}} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.39)$$

Окончательно функция плотности электронных состояний  $\rho^{11}(E)$  имеет вид

$$\begin{aligned} \rho^{11}(E) = \int \rho_0(\epsilon) d\epsilon \times \frac{1}{2} \left\{ f_+^2 \delta \left[ f_+ - \left( \frac{A + B}{E + E_{ab}} + \frac{C + D}{E + E_{cd}} \right) \right] + \right. \\ \left. + f_-^2 \delta \left[ f_- - \left( \frac{A + B}{E + E_{ab}} + \frac{C + D}{E + E_{cd}} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.40)$$

Принимая во внимание тождества:

$$\begin{aligned} & f_+^2 \delta(f_+ - G^0(\epsilon)) = \delta(\epsilon - \epsilon_A), \\ & f_-^2 \delta(f_- - G^0(\epsilon)) = \delta(\epsilon - \epsilon_B), \\ & G^0(\epsilon) = \frac{A + B}{E + E_{ab}} + \frac{C + D}{E + E_{cd}}, \end{aligned} \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned} \epsilon_A = \epsilon_0 + \frac{(E + E_{ab})(E + E_{cd})}{(A + B)(E + E_{cd}) + (C + D)(E + E_{ab})}, \\ \text{где} \\ \epsilon_B = -\epsilon_0 + \frac{(E + E_{ab})(E + E_{cd})}{(A + B)(E + E_{cd}) + (C + D)(E + E_{ab})}. \end{aligned} \quad (4.42)$$

получим окончательный результат:

$$\rho^{11}(E) = \frac{1}{2} [\rho_0(\varepsilon_A) + \rho_0(\varepsilon_B)], \quad (4.43)$$

где параметры этого уравнения определяются формулами (4.42) и (4.28). В случае половинного заполнения зон, когда химический потенциал  $\mu$  имеет значение  $\mu_0$ , определяемое уравнением (4.5), получаем

$$\begin{aligned} E_2 = E_{12} &= -\frac{1}{2}(3U - 5J), \quad E_9 = -2U + 2J, \quad E_{ab} = -E_{cd} = E_2 - E_9 = \frac{1}{2}(U + J), \\ A = D &= B e^{-\beta\left(\frac{U+J}{2}\right)}, \quad C = B = \frac{e^{-\beta E_9}}{Z_0} \end{aligned} \quad (4.44)$$

И, следовательно,

$$(A + B)E_{cd} + (C + D)E_{ab} = 0 \quad (4.45)$$

поэтому аргумент функции  $\rho_0(\varepsilon)$  в (4.43) 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  $\varepsilon(\vec{k})$ .

Таким образом, в случае половинного заполнения зоны, в приближении цепочечных диаграмм, можно объяснить только появление диэлектрического состояния орбитально вырожденной системы.

## 4.2 Диаграммная теория двукратно вырожденной гримесной Модели Андерсона

### 4.2.1 Двукратно вырожденная примесная модель Андерсона

Теперь на основании развитой нами теории для двухорбитальной МХ и невырожденной примесной модели Андерсона [35] проведем диаграммный анализ двукратновырожденной примесной модели Андерсона. Гамильтониан этой модели состоит из двух частей: оператор описывающий систему электронов проводимости в s(p)-состояниях и систему сильно взаимодействующих между собой локализованных электронов в d(f) – состояниях и оператор, описывающий гибридизацию этих двух состояний.

$$H = H^0 + H_{int}, \quad (4.46)$$

$$H^0 = H_c^0 + H_d^L, \quad (4.47)$$

$$H_c^0 = \sum_{\vec{k}l\sigma} \varepsilon_l(\vec{k}) C_{\vec{k}l\sigma}^+ C_{\vec{k}l\sigma}, \quad (4.48)$$

$$H_d^L = \sum_{l,\sigma} \varepsilon^d d_{l\sigma}^+ d_{l\sigma} + U \sum_l n_{l\uparrow} n_{l\downarrow} + U' n_1 n_2 + I_H \sum_{\sigma\sigma'} d_{1\sigma}^+ d_{2\sigma}^+ d_{1\sigma'} d_{2\sigma'} + \\ + I'_H (d_{1\uparrow}^+ d_{1\downarrow}^+ d_{2\downarrow} d_{2\uparrow} + h.c.), \quad (4.49)$$

$$H_{int} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}l\sigma} (V_{\vec{k}l} d_{l\sigma}^+ C_{\vec{k}l\sigma} + V_{\vec{k}l}^* C_{\vec{k}l\sigma}^+ d_{l\sigma}), \quad (4.50)$$

Здесь  $H_d^L$  – локальный (узельный) гамильтониан в стандартной форме Слэтера-Канамори (см., например, [149]),  $C_{\vec{k}l\sigma}$  – 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. Электрон проводимости в l-ом орбитальном состоянии перекрывается только с локализованным электроном, находящимся 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,  $I_H$ ,  $I'_H$  – интеграл обменного взаимодействия Хунда,  $\varepsilon_l(\vec{k})$  – зонная дисперсия и  $\varepsilon^d$  – энергия примесного иона, исчисляемая от уровня химического потенциала  $\mu$ ,  $N$  – число узлов решетки.

В дальнейшем будем считать, что симметрия решетки такова, что выполняется соотношение [13, 150]:

$$U' = U - 2I_H, I'_H = I_H. \quad (4.51)$$

Построим теорию возмущений для этой модели в целях изучить влияние межорбитальных переходов в фазовых переходах металл-диэлектрик Мотта, а так же определить условие существования сверхпроводимости в этих системах.

Кулоновское взаимодействие слишком велико для того, чтобы рассматриваться, как возмущение и должно быть включено в гамильтониан нулевого приближения  $H^0$ . В качестве возмущения примем гамильтониан  $H_{int}$ , ответственный за гибридизацию.

## 4.2.2 Локальные свойства

Проанализируем систему в атомном приближении. Главное приближение модели Андерсона включает в себя описываемые гамильтонианом  $H_0$  свободные электроны

проводимости, а также сильно взаимодействующие локализованные электроны. Гамильтониан  $H_0^L$ , может быть приведен к диагональному виду с помощью операторов Хаббарда  $\chi^{mn} = |m\rangle\langle n|$ , где  $|m\rangle$  – собственный вектор оператора  $H_d^L$ .

Этот оператор имеет такой же вид, как и МХ.

Соответственно, собственные вектора иона примесного атома:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |0\rangle, |2\rangle = d_{1\uparrow}^+ |0\rangle, |3\rangle = d_{2\uparrow}^+ |0\rangle, |4\rangle = d_{1\downarrow}^+ |0\rangle \text{ и } |5\rangle = d_{2\downarrow}^+ |0\rangle. E_2 = E_3 = E_4 = E_5 = \epsilon_d \\ |6\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(d_{1\uparrow}^+ d_{1\downarrow}^+ - d_{2\uparrow}^+ d_{2\downarrow}^+) |0\rangle, |7\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(d_{1\uparrow}^+ d_{1\downarrow}^+ + d_{2\uparrow}^+ d_{2\downarrow}^+) |0\rangle, |8\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(d_{1\uparrow}^+ d_{2\downarrow}^+ - d_{1\downarrow}^+ d_{2\uparrow}^+) |0\rangle, \\ |9\rangle &= d_{1\uparrow}^+ d_{2\uparrow}^+ |0\rangle, |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(d_{1\uparrow}^+ d_{2\downarrow}^+ + d_{1\downarrow}^+ d_{2\uparrow}^+) |0\rangle, |11\rangle = d_{1\downarrow}^+ d_{2\downarrow}^+ |0\rangle. |12\rangle = d_{1\uparrow}^+ d_{1\downarrow}^+ d_{2\uparrow}^+ |0\rangle, \\ |13\rangle &= d_{2\uparrow}^+ d_{2\downarrow}^+ d_{1\uparrow}^+ |0\rangle, |14\rangle = d_{1\uparrow}^+ d_{1\downarrow}^+ d_{2\downarrow}^+ |0\rangle, |15\rangle = d_{2\uparrow}^+ d_{2\downarrow}^+ d_{1\downarrow}^+ |0\rangle, \text{ с } |16\rangle = d_{1\uparrow}^+ d_{1\downarrow}^+ d_{2\uparrow}^+ d_{2\downarrow}^+ |0\rangle \end{aligned}$$

С соответствующими собственными значениями энергии:

$$\begin{aligned} E_1 &= 0, E_{16} = 4\epsilon_d + 2U + 4U' - 2I_H. E_6 = E_8 = 2\epsilon_d + U - I_H, E_7 = 2\epsilon_d + U + I_H, \\ E_9 &= 2\epsilon_d + U - 3I_H, E_{12} = E_{13} = E_{14} = E_{15} = 3\epsilon_d + U + 2U' - I_H. E_{12} = 3\epsilon_d + 3U - 5I_H, \\ E_{16} &= 4\epsilon_d + 6U - 10I_H. \end{aligned}$$

Здесь  $\epsilon_d$  – энергия одноэлектронного состояния примесного атома.

Как и в случае МХ, триплетные состояния  $|9\rangle$ ,  $|10\rangle$  и  $|11\rangle$  имеют самые низкие значения энергий. Этим обстоятельством будет воспользовано для дальнейших упрощений выкладок.

Перечисленные выше квантовые состояния позволяют записать примесные фермионные операторы через операторы Хаббарда  $\chi^{mn}$ :

$$\begin{aligned} d_{l\sigma}^+ &= \chi^{2+l-\sigma,1} + \frac{\sigma}{\sqrt{2}}[(-1)^{l+1} \chi^{6,2+l+\sigma} + \chi^{7,2+l+\sigma}] + \frac{1}{\sqrt{2}}[\sigma \chi^{8,5-l+\sigma} + (-1)^{l+1} \chi^{10,5-l+\sigma}] + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2}}[-\chi^{12+l-\sigma,8} + \sigma(-1)^{l+1} \chi^{12+l-\sigma,10}] + \frac{1}{\sqrt{2}}[(-1)^l \chi^{15-l-\sigma,6} + \chi^{15-l-\sigma,7}] \\ &+ (-1)^{l+1} X^{10-\sigma,5-l-\sigma} + (-1)^{l+1} \sigma \chi^{12+l+\sigma,10+\sigma} + \sigma \chi^{16,15-l+\sigma}. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Формула (4.7) позволяет вычислять все локальные динамические величины.

Например, квантовое число электронов имеет вид

$$\begin{aligned} n_{l\sigma} &= \chi^{2+l-\sigma,2+l-\sigma} + \frac{1}{2}[\chi^{6,6} + (-1)^{l+1} \chi^{6,7} + (-1)^{l+1} \chi^{7,6} + X^{7,7}] + \\ &+ \frac{1}{2}[\chi^{8,8} + \sigma(-1)^{l+1} \chi^{8,10} + \sigma(-1)^{l+1} \chi^{10,8} + \chi^{10,10}] + \\ &+ \chi^{10-\sigma,10-\sigma} + \chi^{12+l-\sigma,12+l-\sigma} + \chi^{12+l+\sigma,12+l+\sigma} + \chi^{15-l-\sigma,15-l-\sigma} + \chi^{16,16}, \end{aligned} \quad (4.53)$$

и

$$n_{l\uparrow} - n_{l\downarrow} = \chi^{1+l,1+l} - \chi^{3+l,3+l} + (-1)^{l+1} [\chi^{8,10} + \chi^{10,8}] + \chi^{9,9} - \chi^{11,11} + \chi^{14-l,14-l} - \chi^{16-l,16-l}. \quad (4.54)$$

Для зависимой от  $\tau$  величины  $A(\tau) = e^{\tau H_0} A e^{-\tau H_0}$  получим выражение

$$n_{l\uparrow}(\tau) - n_{l\downarrow}(\tau) = \chi^{1+l,1+l} - \chi^{3+l,3+l} + (-1)^{l+1} [\chi^{8,10} e^{\tau(E_8 - E_{10})} + \chi^{10,8} e^{\tau(E_{10} - E_8)}] + \chi^{9,9} - \chi^{11,11} + \chi^{14-l,14-l} - \chi^{16-l,16-l} \quad (4.55)$$

Связь между величинами с различными орбитальными числами определяется следующим выражением ( $l = 1, 2$ )

$$(n_{l\uparrow}(\tau) - n_{l\downarrow}(\tau))(n_{l'\uparrow}(0) - n_{l'\downarrow}(0)) = \delta_{ll'} [\chi^{1+l,1+l} + \chi^{3+l,3+l} + \chi^{14-l,14-l} + \chi^{16-l,16-l}] + (-1)^{l+l'} [\chi^{8,8} e^{\tau(E_8 - E_{10})} + \chi^{10,10} e^{\tau(E_{10} - E_8)}] + \chi^{9,9} + \chi^{11,11}, \quad (4.56)$$

$$\sum_{ll'} (n_{l\uparrow}(\tau) - n_{l\downarrow}(\tau))(n_{l'\uparrow}(0) - n_{l'\downarrow}(0)) = \frac{4}{Z_0} (e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_{12}} + 2e^{-\beta E_9}). \quad (4.57)$$

В частном случае  $l = 1, l' = 2$  получим:

$$(n_{1\uparrow}(\tau) - n_{1\downarrow}(\tau))(n_{2\uparrow}(0) - n_{2\downarrow}(0)) = -[\chi^{8,8} e^{\tau(E_8 - E_{10})} + \chi^{10,10} e^{\tau(E_{10} - E_8)}] + \chi^{9,9} + \chi^{11,11}, \quad (4.58)$$

которое представляет собой восприимчивость d-электронов [149-150].

Так же вычислим спектральную функцию локализованных состояний. Одночастичная мацубаровская функция локализованных d-электронов в представлении взаимодействия имеет вид:

$$g^0(l\sigma\tau, l'\sigma'\tau') = g_{l\sigma, l'\sigma'}^0(\tau - \tau') = -\langle T d_{l\sigma}(\tau) \bar{d}_{l'\sigma'}(\tau') \rangle_0, \quad (4.59)$$

где  $d_{l\sigma}(\tau) = e^{\tau H_0} d_{l\sigma} e^{-\tau H_0}$ ,  $d_{l\sigma}^+(\tau) = e^{\tau H_0} d_{l\sigma}^+ e^{-\tau H_0}$ .

Фурье-образ этой ФГ:

$$g^{(0)}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} g^{(0)}(i\omega_n). \quad (4.60)$$

С помощью (4.8), получим Фурье-образ ФГ локализованных электронов нулевого приближения:

$$g_{l\sigma, l'\sigma'}^{(0)}(i\omega_n) = \frac{\delta_{ll'} \delta_{\sigma\sigma'}}{Z_0} \left\{ \frac{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2}}{i\omega_n + E_1 - E_2} + \frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_6}}{i\omega_n + E_2 - E_6} + \frac{1}{2} \frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_7}}{i\omega_n + E_2 - E_7} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_9}}{i\omega_n + E_2 - E_9} + \frac{e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega_n + E_6 - E_{12}} + \frac{1}{2} \frac{e^{-\beta E_7} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega_n + E_7 - E_{12}} + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega_n + E_9 - E_{12}} + \frac{e^{-\beta E_{12}} + e^{-\beta E_{16}}}{i\omega_n + E_{12} - E_{16}} \right\}, \quad (4.61)$$

где  $Z_0$  – статистическая сумма в атомном пределе

$$Z_0 = e^{-\beta E_1} + 4e^{-\beta E_2} + 2e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_7} + 3e^{-\beta E_9} + 4e^{-\beta E_{12}} + e^{-\beta E_{16}}. \quad (4.62)$$

Теперь вычислим спектральную функцию примесных d-электронов в локальном приближении при помощи формулы:

$$A^{(0)}(E) = -2 \operatorname{Im} g^0(E + i\delta), \quad (4.63)$$

где  $g^0(E + i\delta)$  и  $\delta = +0$  – аналитическое продолжение мацубаровской ФГ.

Используя (4.14) получим

$$\begin{aligned} A^{(0)}(E) = & \frac{2\pi}{Z_0} \{ (e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2}) \delta(E + E_1 - E_2) + (e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_6}) \delta(E + E_2 - E_6) + \\ & + \frac{1}{2} (e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_7}) \delta(E + E_2 - E_7) + \frac{3}{2} (e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_9}) \delta(E + E_2 - E_9) + \\ & + (e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_{12}}) \delta(E + E_6 - E_{12}) + \frac{1}{2} (e^{-\beta E_7} + e^{-\beta E_{12}}) \delta(E + E_7 - E_{12}) + \\ & + \frac{3}{2} (e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_{12}}) \delta(E + E_9 - E_{12}) + (e^{-\beta E_{12}} + e^{-\beta E_{16}}) \delta(E + E_{12} - E_{16}) \}, \end{aligned} \quad (4.64)$$

Эта функция имеет свойство

$$\int_{-\infty}^{\infty} A^{(0)}(E) dE = 2\pi. \quad (4.65)$$

### 4.2.3 Процесс делокализации.

Рассмотрим процесс перенормировки функций Грина нулевого приближения обусловленный внутри и межорбитальными переходами электронов.

Полные мацубаровские ФГ в представлении взаимодействия для примесных электронов и электронов проводимости соответственно имеют вид:

$$\begin{aligned} G(\vec{k}l\sigma\tau | \vec{k}'l'\sigma'\tau') &= -\langle T_{\tau} C_{\vec{k}l\sigma}(\tau) \bar{C}_{\vec{k}'l'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ g(l\sigma\tau | l'\sigma'\tau') &= -\langle T_{\tau} d_{l\sigma}(\tau) \bar{d}_{l'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Аномальные ФГ

$$\begin{aligned} F(\vec{k}l\sigma\tau | \vec{k}'l'\sigma'\tau') &= -\langle T_{\tau} C_{\vec{k}l\sigma}(\tau) C_{\vec{k}'l'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c \\ \bar{F}(\vec{k}l\sigma\tau | \vec{k}'l'\sigma'\tau') &= -\langle T_{\tau} \bar{C}_{\vec{k}l\sigma}(\tau) \bar{C}_{\vec{k}'l'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c \\ f(l\sigma\tau | l'\sigma'\tau') &= -\langle T_{\tau} d_{l\sigma}(\tau) d_{l'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c \\ \bar{f}(l\sigma\tau | l'\sigma'\tau') &= -\langle T_{\tau} \bar{d}_{l\sigma}(\tau) \bar{d}_{l'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c \end{aligned} \quad (4.67)$$

Здесь  $\tau$  и  $\tau'$  соответствуют мнимому времени с  $0 \leq \tau \leq \beta$ ,  $\beta$  – обратная температура,  $T_\tau$  оператор хронологического упорядочения.

Оператор эволюции определяется выражением

$$U(\beta) = T_\tau \exp\left(-\int_0^\beta H_{int}(\tau) d\tau\right) \quad (4.68)$$

Статистическое усреднение в (4.66) и (4.67) проводится с помощью матрицы плотности нулевого порядка примесных электронов и электронов проводимости. Индекс «с» означает связанные диаграммы.

В нулевом приближении, имеем

$$\begin{aligned} H_0^L &= \sum_{n=1}^{16} E_n \chi^n, \quad \sum_{n=1}^{16} \chi^n = 1, \\ G_{l\sigma l'\sigma'}^{(0)}(\vec{k} \vec{k}' | \tau - \tau') &= \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{ll'} \delta_{\sigma\sigma'} G_{l\sigma}^{(0)}(\vec{k} | \tau - \tau'), \\ G_{l\sigma}^{(0)}(\vec{k} | i\omega_n) &= \frac{1}{i\omega_n - \epsilon(\vec{k})}, \quad \omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}, \end{aligned} \quad (4.69)$$

$g^{(0)}(i\omega_n)$  определяется выражением (4.52)

Гибридизация между состояниями электронов зоны проводимости и примесными d-состояниями электронов примесных атомов приводит к перенормировке их ФГ. Поскольку число электронов проводимости  $N$  намного больше одного примесного состояния, эффект от последнего на зону проводимости очень мал порядка  $1/N$ .

Таким образом, перенормированная ФГ электронов проводимости равна

$$\begin{aligned} G_{l\sigma l'\sigma'}(\vec{k} \vec{k}' | i\omega_n) &= \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{ll'} \delta_{\sigma\sigma'} G_{l\sigma}^{(0)}(\vec{k} | i\omega_n) + \\ &+ \frac{V_{kl}^* V_{k'l'}}{N} G_{l\sigma}^{(0)}(\vec{k} | i\omega_n) g_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) G_{l'\sigma'}^{(0)}(\vec{k}' | i\omega_n), \end{aligned} \quad (4.70)$$

где  $g_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n)$  – полная ФГ примесных электронов.

Аналогичное уравнение имеет место для аномальной ФГ электронов в сверхпроводящем состоянии

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

Уравнение для полных функций Грина  $g$  и  $f$  примесных электронов имеют диаграммную форму, показанную на Рис. 4.2

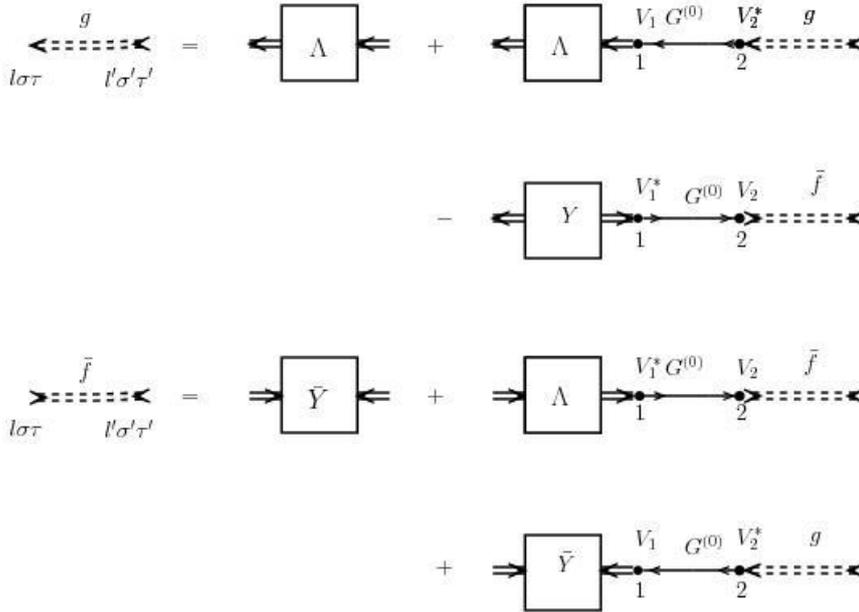
Структура, представленная на диаграмме Рис.4.2. и имеет следующий вид

$$\sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_2} \frac{V_{\vec{k}_1 l_1} V_{\vec{k}_2 l_2}}{N} G_{l_1 \sigma_1 l_2 \sigma_2}^0(\vec{k}_1 \vec{k}_2 | i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1} |V_{\vec{k}_1 l_1}|^2 G_{l_1 \sigma_1}^0(\vec{k}_1 | i\omega_n) \delta_{l_1 l_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \quad (4.71)$$

$$= \delta_{l_1 l_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} G_{l_1 \sigma_1}^{(0)}(i\omega_n)$$

где

$$G_{l\sigma}^{(0)}(i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} |V_{\vec{k}l}|^2 G_{l\sigma}^0(\vec{k} | i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}l}|^2}{i\omega_n - \varepsilon(\vec{k})} \quad (4.72)$$



**Рис. 4.2.** Уравнение типа Дайсона для примесных электронов.  $\Lambda$ ,  $Y$ ,  $\bar{Y}$ , – корреляционные функции.

Структура, представленная на диаграмме Рис.4. 2. и имеет следующий вид:

Перенормированная величина

$$G_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} V_{\vec{k}l} V_{\vec{k}'l'}^* G_{l\sigma l'\sigma'}^0(\vec{k}\vec{k}' | i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}l}|^2}{i\omega_n - \varepsilon(\vec{k})} \quad (4.73)$$

На Рис. 4.2. двойные штриховые линии со стрелками изображают перенормированные ФГ локализованных электронов  $g$  и  $\bar{f}$ , а сплошные жирные линии представляют функцию Грина электронов проводимости  $G^0$ . Функция  $V_1$  означает  $V_{\vec{k}_1 l_1}$ ,

предполагается суммирование по повторяющимся индексам.  $\Lambda$ ,  $Y$ ,  $\bar{Y}$ , – корреляционные функции, содержащие сильно связанные неприводимые диаграммы. Простейший пример таких диаграмм представлен на Рис. 4.3.

Аналитическая форма уравнений изображенных на Рис. 4.2. имеет следующий вид

$$g_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) = \Lambda_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) + \Lambda_{l\sigma l_1\sigma_1}(i\omega_n) \mathcal{G}_{l_1\sigma_1}^{(0)}(i\omega_n) g_{l_1\sigma_1 l'\sigma'}(i\omega_n). \quad (4.74)$$

$$\begin{aligned} \bar{f}_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) = & \bar{Y}_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) + \Lambda_{l_1\sigma_1 l\sigma}(-i\omega_n) \mathcal{G}_{l_1\sigma_1}^{(0)}(-i\omega_n) \bar{f}_{l_1\sigma_1 l'\sigma'}(i\omega_n) \\ & + \bar{Y}_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) \mathcal{G}_{l_1\sigma_1}^{(0)}(i\omega_n) g_{l_1\sigma_1 l'\sigma'}(i\omega_n) \end{aligned} \quad (4.75)$$

Эта система уравнений позволяет нам обсудить нормальное состояние системы и синглетное состояние сверхпроводимости на парамагнитном фоне. В этом случае воспользуемся новыми обозначениями ( $\bar{\sigma} = -\sigma$ ) и определениями

$$\begin{aligned} g_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) &= \delta_{\sigma\sigma'} g_{\sigma}^{ll'}(i\omega_n), \quad \bar{f}_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) = \delta_{\sigma\bar{\sigma}} \bar{f}_{\bar{\sigma}}^{ll'}(i\omega_n), \\ \Lambda_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) &= \delta_{\sigma\sigma'} \Lambda_{\sigma}^{ll'}(i\omega_n), \quad \bar{Y}_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) = \delta_{\sigma\bar{\sigma}} \bar{Y}_{\bar{\sigma}}^{ll'}(i\omega_n), \\ g_{l\sigma}^0(i\omega_n) &= g_{\sigma}^{(0)l}(i\omega_n), \end{aligned} \quad (4.76)$$

С учетом этих определений, получим

$$g_{\sigma}^{ll'}(i\omega_n) = \Lambda_{\sigma}^{ll'}(i\omega_n) + \Lambda_{\sigma}^{ll'}(i\omega_n) \mathcal{G}_{\sigma}^{ll'}(i\omega_n) g_{\sigma}^{ll'}(i\omega_n) - Y_{\bar{\sigma}}^{ll'}(i\omega_n) \mathcal{G}_{\bar{\sigma}}^{ll'}(-i\omega_n) \bar{f}_{\bar{\sigma}}^{ll'}(i\omega_n) \quad (4.77)$$

$$\begin{aligned} \bar{f}_{\bar{\sigma}}^{ll'}(i\omega_n) = & \bar{Y}_{\bar{\sigma}}^{ll'}(i\omega_n) + \Lambda_{\bar{\sigma}}^{ll'}(-i\omega_n) \mathcal{G}_{\bar{\sigma}}^{ll'}(-i\omega_n) \bar{f}_{\bar{\sigma}}^{ll'}(i\omega_n) + \\ & + \bar{Y}_{\bar{\sigma}}^{ll'}(i\omega_n) \mathcal{G}_{l\sigma}^{ll'}(i\omega_n) g_{\sigma}^{ll'}(i\omega_n) \end{aligned} \quad (4.78)$$

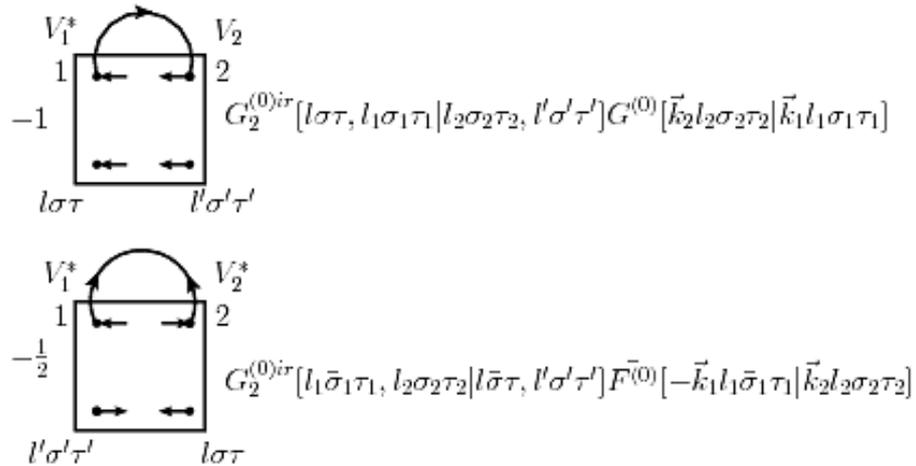


Рис. 4.3. Простейшие примеры корреляционных функций  $\Lambda$  и  $\bar{Y}$

В отсутствии орбитального вырождения эта система уравнений имеет известное решение [36].

$$g_{\sigma}(i\omega_n) = \frac{\Lambda_{\sigma}(i\omega_n) + \mathcal{G}_{\sigma}^{(0)}(-i\omega_n) [\Lambda_{\sigma}(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}(-i\omega_n) + Y_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega_n)\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega_n)]}{d_{\sigma}(i\omega_n)}$$

$$\bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega_n) = \frac{\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega_n)}{d_{\sigma}(i\omega_n)}, \quad f_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega_n) = \frac{Y_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega_n)}{d_{\sigma}(i\omega_n)} \quad (4.79)$$

$$d_{\sigma}(i\omega_n) = (1 - \Lambda_{\sigma}(i\omega_n)\mathcal{G}_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n)) (1 - \Lambda_{\bar{\sigma}}(-i\omega_n)\mathcal{G}_{\bar{\sigma}}^{(0)}(-i\omega_n)) + \mathcal{G}_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n)\mathcal{G}_{\bar{\sigma}}^{(0)}(-i\omega_n)Y_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega_n)\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega_n)$$

Решения уравнения (4.78) для нормального состояния вырожденной системы имеет вид

$$g_{\sigma}^{11}(i\omega_n) = \frac{\Lambda_{\sigma}^{11}(i\omega_n) - \mathcal{G}_{\sigma}^{2(0)}(i\omega_n) [\Lambda_{\sigma}^{11}(i\omega_n)\Lambda_{\sigma}^{22}(i\omega_n) - \Lambda_{\sigma}^{12}(i\omega_n)\Lambda_{\sigma}^{21}(i\omega_n)]}{d_{\sigma}(i\omega_n)}, \quad g_{\sigma}^{21}(i\omega_n) = \frac{\Lambda_{\sigma}^{21}(i\omega_n)}{d_{\sigma}(i\omega_n)},$$

$$d_{\sigma}(i\omega_n) = (1 - \mathcal{G}_{\sigma}^{1(0)}(i\omega_n) \times \Lambda_{\sigma}^{11}(i\omega_n)) \times (1 - \mathcal{G}_{\sigma}^{2(0)}(i\omega_n)\Lambda_{\sigma}^{22}(i\omega_n) - \mathcal{G}_{\sigma}^{1(0)}(i\omega_n)\mathcal{G}_{\sigma}^{2(0)}(i\omega_n)\Lambda_{\sigma}^{12}(i\omega_n)\Lambda_{\sigma}^{21}(i\omega_n)). \quad (4.80)$$

Остальные две функции получаютcя заменой индексов  $1 \leftrightarrow 2$ .

Эти уравнения типа Дайсона. Они определяют ФГ через корреляционную функцию  $\Lambda = g^{(0)} + Z$ . Последнее может быть выражено только в форме бесконечного диаграммного ряда, поскольку точного решения не существует. Пример эффективного суммирования диаграмм корреляционных функции  $Z$ ,  $Y$ ,  $\bar{Y}$  представлен на Рис. 4.4.

$$Z_{\sigma\sigma'}^{irr}(\tau - \tau') = -1 \quad G_2^{(0)irr}[l_{\sigma\tau}, l_{1\sigma_1\tau_1} | l_{2\sigma_2\tau_2}, l'_{\sigma'\tau'}] V_1^* G[\vec{k}_2 l_{2\sigma_2\tau_2} | \vec{k}_1 l_{1\sigma_1\tau_1}] V_2$$

$$Y_{\mu\sigma'\mu\sigma}^{l\sigma}(\tau - \tau') = -\frac{1}{2} \quad G_2^{(0)irr}[l_{\sigma\tau}, l'_{\sigma'\tau'} | l_{1\sigma_1\tau_1}, l_{2\sigma_2\tau_2}] V_1 F[\vec{k}_1 l_{1\sigma_1\tau_1} | -\vec{k}_2 l_{2\sigma_2\tau_2}] V_2$$

$$\bar{Y}_{\mu\sigma'\mu\sigma}^{l\sigma}(\tau - \tau') = -\frac{1}{2} \quad G_2^{(0)irr}[l_{1\sigma_1\tau_1}, l_{2\sigma_2\tau_2} | l_{\sigma\tau}, l'_{\sigma'\tau'}] V_1^* \bar{F}[-\vec{k}_1 l_{1\sigma_1\tau_1} | \vec{k}_2 l_{2\sigma_2\tau_2}] V_2^*$$

**Рис. 4.4.** Главное приближение для корреляционной функции. Сплошные двойные линии со стрелками изображают полную функцию Грина электронов проводимости. Прямоугольники изображают НФГ примесных электронов.

Диаграммы на Рис. 4.4 отличаются от диаграмм на Рис.4.3 наличием в них полной ФГ электронов проводимости вместо ФГ нулевого приближения на Рис.4.3. Это отличие является результатом лестничного суммирования главных диаграмм. Это приближение представляет собой обобщение приближения случайных фаз теории возмущений слабой связи.

#### 4.2.4 Вычисление простейших корреляционных функций

Простейшие корреляционные функции определяются следующим образом

$$G_2^{irr}[1, 2 | \bar{3}, \bar{4}] = g_2^{(0)}(1, 2 | \bar{3}, \bar{4}) - g_1^{(0)}(1 | \bar{4}) g_1^{(0)}(2 | \bar{3}) + g_1^{(0)}(1 | \bar{3}) g_1^{(0)}(2 | \bar{4}), \quad (4.81)$$

$$g_2^{(0)}(1, 2 | \bar{3}, \bar{4}) = \langle T d_1 d_2 \bar{d}_3 \bar{d}_4 \rangle_0, \quad g_1^{(0)}(1 | \bar{4}) = -\langle T d_1 \bar{d}_4 \rangle_0, \quad 1 = (l_1, \sigma_1, \tau_1),$$

с одно- или двухчастичными нулевыми ФГ локализованных электронов.

Благодаря присутствию членов кулоновского взаимодействия в гамильтониане нулевого порядка, правая часть уравнения (4.78) не равна нулю и содержит зарядовые, спиновые и парные флуктуации.

Двухчастичные ФГ  $g_2^{(0)}$  представляют собой сумму из 4! членов упорядоченных по времени произведений электронных операторов. Статистическое среднее этих величин можно вычислить с помощью операторов Хаббарда.

Фурье-образ двухчастичной корреляционной функции:

$$\begin{aligned} G_2^{irr} [l_1 \sigma_1 \tau_1; l_2 \sigma_2 \tau_2 | l_3 \sigma_3 \tau_3; l_4 \sigma_4 \tau_4] = \\ = \frac{1}{\beta^4} \sum_{\omega_1 \omega_2 \omega_3 \omega_4} G_2^{irr} [l_1 \sigma_1 i \omega_1; l_2 \sigma_2 i \omega_2 | l_3 \sigma_3 i \omega_3; l_4 \sigma_4 i \omega_4] \times \\ \times e^{-i \omega_1 \tau_1 - i \omega_2 \tau_2 + i \omega_3 \tau_3 + i \omega_4 \tau_4}, \end{aligned} \quad (4.82)$$

$$g_1^{(0)}(l_1, \sigma_1, \tau_1 | l_2, \sigma_2, \tau_2) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} g_1^{(0)}(l_1, \sigma_1; l_2, \sigma_2 | i \omega_1) e^{-i \omega_1 (\tau_1 - \tau_2)}, \quad (4.83)$$

$$g_1^{(0)}(l_1, \sigma_1; l_2, \sigma_2 | i \omega_1) \approx \delta_{l_1 l_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} m(i \omega_1) = \frac{\delta_{l_1 l_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2}}{2} \left( \frac{1}{i \omega_1 + E_2 - E_9} + \frac{1}{i \omega_1 + E_9 - E_{12}} \right)$$

$$\begin{aligned} G_2^{irr} [l_1 \sigma_1 i \omega_1; l_2 \sigma_2 i \omega_2 | l_3 \sigma_3 i \omega_3; l_4 \sigma_4 i \omega_4] = g_2^{(0)} [l_1 \sigma_1 i \omega_1; l_2 \sigma_2 i \omega_2 | l_3 \sigma_3 i \omega_3; l_4 \sigma_4 i \omega_4] - \\ - \beta \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4) [\beta \delta(\omega_1 - \omega_4) g_1^{(0)}(l_1 \sigma_1; l_4 \sigma_4 | i \omega_1) g_1^{(0)}(l_2 \sigma_2; l_3 \sigma_3 | i \omega_2) - \\ - \beta \delta(\omega_1 - \omega_3) g_1^{(0)}(l_1 \sigma_1; l_3 \sigma_3 | i \omega_1) g_1^{(0)}(l_2 \sigma_2; l_4 \sigma_4 | i \omega_2)]. \end{aligned} \quad (4.84)$$

При этом выполняется закон сохранения частот:

$$\begin{aligned} G_2^{irr} [l_1 \sigma_1 i \omega_1; l_2 \sigma_2 i \omega_2 | l_3 \sigma_3 i \omega_3; l_4 \sigma_4 i \omega_4] = \\ = \beta \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4) \tilde{G}_2^{irr} [l_1 \sigma_1 i \omega_1; l_2 \sigma_2 i \omega_2 | l_3 \sigma_3 i \omega_3; l_4 \sigma_4 i \omega_4]. \end{aligned} \quad (4.85)$$

Статистическое среднее хронологически упорядоченных произведений электронных операторов функции  $g_2^{(0)}$  содержит различные статистические веса вида

$$\frac{e^{-\beta E_n}}{Z_0},$$

где  $E_n$  – энергии, определенные в разделе 4.2.2. Поскольку  $E_9$  – нижайшая энергия, ее статистический вес  $e^{-\beta E_9}$  преобладает над другими, и поэтому были учтены только эти вклады. С учетом этого, воспользуемся приближенной величиной (4.83) вместо изначально точного уравнения для нулевой ФГ  $g_{l\sigma l'\sigma'}^{(0)}$ .

Статистическая сумма нулевого порядка для  $Z_0$  аппроксимируется как  $3e^{-\beta E_9}$ .

Например, вклад в  $g_2^{(0)} [l_1 \sigma_1 i \omega_1; l_2 \sigma_2 i \omega_2 | l_3 \sigma_3 i \omega_3; l_4 \sigma_4 i \omega_4]$  с временным порядком  $\beta > \tau_1 > \tau_3 > \tau_2 > \tau_4 > 0$  и с статистическим весом  $e^{-\beta E_9}$  имеет вид

$$\begin{aligned}
& -\delta_{l_1 l_3} \delta_{l_2 l_4} \left( \frac{1}{4} \delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} + \delta_{\sigma_1, -\sigma_3} \delta_{\sigma_2, -\sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} + \delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} \right) I_{1\bar{3}2\bar{4}}^{(1)} - \\
& -(\delta_{3-l_1-l_3, 0} \delta_{3-l_2-l_4, 0} + (-1)^{l_1+l_4} \delta_{l_1 l_3} \delta_{l_2 l_4}) \left( \frac{1}{4} \sigma_1 \sigma_4 \delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} + \frac{1}{2} \delta_{\sigma_1, -\sigma_3} \delta_{\sigma_2, -\sigma_4} \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \right) I_{1\bar{3}2\bar{4}}^{(2)} \quad (4.86) \\
& -(-1)^{l_1+l_4} \delta_{3-l_1-l_3, 0} \delta_{3-l_2-l_4, 0} \left( \frac{1}{4} \sigma_1 \sigma_4 \delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} + \frac{1}{2} \delta_{\sigma_1, -\sigma_3} \delta_{\sigma_2, -\sigma_4} \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \right) I_{1\bar{3}2\bar{4}}^{(3)},
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
I_{1\bar{3}2\bar{4}}^{(1)} &= \frac{e^{-\beta E_9}}{Z_0} \int_0^{\tau_1} d\tau_1 \int_0^{\tau_3} d\tau_3 \int_0^{\tau_2} d\tau_2 \int_0^{\tau_4} d\tau_4 e^{(E_9 - E_{12})(\tau_1 + \tau_2 - \tau_3 - \tau_4)} e^{i\omega_1 \tau_1 + i\omega_2 \tau_2 - i\omega_3 \tau_3 - i\omega_4 \tau_4}, \\
I_{1\bar{3}2\bar{4}}^{(2)} &= \frac{e^{-\beta E_9}}{Z_0} \int_0^{\tau_1} d\tau_1 \int_0^{\tau_3} d\tau_3 \int_0^{\tau_2} d\tau_2 \int_0^{\tau_4} d\tau_4 e^{(E_9 - E_{12})(\tau_1 - \tau_4) + (E_6 - E_{12})(\tau_2 - \tau_3)} e^{i\omega_1 \tau_1 + i\omega_2 \tau_2 - i\omega_3 \tau_3 - i\omega_4 \tau_4}, \quad (4.87) \\
I_{1\bar{3}2\bar{4}}^{(3)} &= \frac{e^{-\beta E_9}}{Z_0} \int_0^{\tau_1} d\tau_1 \int_0^{\tau_3} d\tau_3 \int_0^{\tau_2} d\tau_2 \int_0^{\tau_4} d\tau_4 e^{(E_9 - E_{12})(\tau_1 - \tau_4) + (E_7 - E_{12})(\tau_2 - \tau_3)} e^{i\omega_1 \tau_1 + i\omega_2 \tau_2 - i\omega_3 \tau_3 - i\omega_4 \tau_4}.
\end{aligned}$$

Эти 4-кратные кратные интегралы по переменной времени  $\tau$  могут быть преобразованы в контурный интеграл с использованием метода Клода Блоха [151].

С этой целью необходимо ввести экспоненциальную форму

$$e^{(\beta - \tau_1) \bar{E}_0 + (\tau_1 - \tau_3) \bar{E}_1 + (\tau_3 - \tau_2) \bar{E}_2 + (\tau_2 - \tau_4) \bar{E}_3 + (\tau_3 - 0) \bar{E}_4}, \quad (4.88)$$

которая должна сравниваться с показательной формой наших интегралов  $I_{1\bar{3}2\bar{4}}^{(n)}$ . Сравнивая с  $I_{1\bar{3}2\bar{4}}^{(1)}$  получим

$$\bar{E}_0 = -E_9, \quad \bar{E}_2 = -E_9 + i\omega_1 - i\omega_3, \quad \bar{E}_4 = -E_9 + i\Omega, \quad \bar{E}_1 = -E_{12} + i\omega_1, \quad (4.89)$$

$$\bar{E}_3 = -E_{12} + i\omega_1 + i\omega_2 - i\omega_3, \quad \Omega = \omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4$$

Итак, интеграл  $I_{1\bar{3}2\bar{4}}^{(1)}$  преобразуется в контурный:

$$I^{(1)} = \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{Z_0} \oint_{C^+} \frac{dz e^{-\beta z}}{(z + \bar{E}_0)(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_2)(z + \bar{E}_3)(z + \bar{E}_4)} \quad (4.90)$$

где контур  $C^+$  обходит реальную ось в положительном направлении. Интегралы  $I^{(2)}$  и  $I^{(3)}$  имеют ту же форму, что и (4.91), но отличаются индексами энергии. В  $I^{(2)}$  энергия  $\bar{E}_2 = -E_6 + i\omega_1 - i\omega_3$  и в  $I^{(3)}$  –  $\bar{E}_2 = -E_7 + i\omega_1 - i\omega_3$ . Остальные параметры совпадают.

Контурный интеграл (4.91) вычисляется методом вычетов. Когда параметры  $\bar{E}_n$  все разные, получаем простые результаты. Существование нескольких полюсов возможно для особых значений частот  $\omega_n$ . Например, для случая, когда  $\omega_1 - \omega_3 = 0$  и  $\Omega = 0$  имеем  $\bar{E}_0 = \bar{E}_2 = \bar{E}_4$  и полюс  $z = -\bar{E}_0$  3-х кратный полюс с вычетом:

$$\frac{1}{2} \left( \frac{e^{-\beta z}}{(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)} \right)''_{z=-\bar{E}_0} \quad (4.91)$$

Чтобы найти всевозможные кратные полюса, рассмотрим различные значения частот, используя тождество  $1 = \delta(\omega) + \psi(\omega)$ , где  $\psi(\omega) = 1 - \delta(\omega)$ . Например, рассмотрим возможность, когда  $\Omega$  может быть равно нулю и  $\omega_1 = \omega_3$ . Имеем тождество:

$$\begin{aligned} 1 &= (\delta(\Omega) + \psi(\Omega))(\delta(\omega_1 - \omega_3) + \psi(\omega_1 - \omega_3)) \\ &= \delta(\Omega)\delta(\omega_1 - \omega_3) + \delta(\Omega)\psi(\omega_1 - \omega_3) + \psi(\Omega)\delta(\omega_1 - \omega_3) + \psi(\Omega)\psi(\omega_1 - \omega_3) \end{aligned} \quad (4.92)$$

Первый член в правой части этого уравнения допускает существование тройного полюса, следующие два члена допускают двойные полюсы, а последний член допускает двойные и одиночные полюса.

Учтем вычеты, статистические веса которых  $\frac{e^{-\beta Z_0}}{Z_0}$  и опустим остальные. В этом

приближении

имеем

$$\begin{aligned} Z_0 I_{1\bar{3}2\bar{4}}^{(1)} &= \frac{1}{2} \delta(\Omega)\delta(\omega_1 - \omega_3) \left( \frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)} \right)''_{z=-\bar{E}_0} \\ &+ \delta(\Omega)\psi(\omega_1 - \omega_3) \left[ \left( \frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_2)(z + \bar{E}_3)} \right)'_{z=-\bar{E}_0} + \left( \frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_0)^2(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)} \right)'_{z=-\bar{E}_2} \right] \\ &+ \delta(\omega_1 - \omega_3)\psi(\Omega) \left[ \left( \frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)(z + \bar{E}_4)} \right)'_{z=-\bar{E}_0} + \left( \frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_0)^2(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)} \right)'_{z=-\bar{E}_4} \right] \\ &+ \psi(\omega_1 - \omega_3)\psi(\Omega)\delta(\omega_2 - \omega_4) \left[ \left( \frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_0)(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)} \right)'_{z=-\bar{E}_2} \right. \\ &\left. + \left( \frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_2)^2(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)} \right)'_{z=-\bar{E}_0} \right] \\ &+ \psi(\Omega)\psi(\omega_1 - \omega_3)\psi(\omega_2 - \omega_4) \times \\ &\times \left[ \left( \frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_2)(z + \bar{E}_3)(z + \bar{E}_4)} \right)'_{z=-\bar{E}_0} + \left( \frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_0)(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)(z + \bar{E}_4)} \right)'_{z=-\bar{E}_2} \right. \\ &\left. + \left( \frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_0)(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_2)(z + \bar{E}_3)} \right)'_{z=-\bar{E}_4} \right] \end{aligned} \quad (4.93)$$



$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} \sum_{l_1 \sigma_1} \tilde{G}_2^{irr} [l\sigma i\omega; l_1 \sigma_1, i\omega_1 | l_1 \sigma_1, i\omega_1; l' \sigma', i\omega] \mathcal{G}_{l_1 \sigma_1}^{(0)}(i\omega_1) = -\frac{1}{2} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{ll'} [p(i\omega)]^2 \mathcal{G}_{l\sigma}^{(0)}(i\omega) \quad (4.97)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{l_1 \sigma_1 l_2 \sigma_2} \tilde{G}_2^{(0)irr} [l\sigma i\omega; l_1 \sigma_1 i\omega_1 | l_2 \sigma_2 i\omega_1; l' \sigma' i\omega] \mathcal{G}_{l_2 \sigma_2}^{(0)}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_2 \sigma_2 l_1 \sigma_1}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1 \sigma_1}^{(0)}(i\omega_1) \\ &= \frac{1}{6} p(i\omega) p(i\omega_1) \left\{ \beta \delta(\omega - \omega) \delta_{ll'} \sum_{l_1} (2\delta_{\sigma', -\sigma} \mathcal{G}_{l_1 \sigma}^{(0)}(i\omega_1)) \right. \\ & \quad \times \mathcal{G}_{l_1 \sigma l_1, -\sigma}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1, -\sigma}^{(0)}(i\omega_1) + \delta_{\sigma\sigma'} \mathcal{G}_{l_1 \sigma}^{(0)}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1 \sigma l_1 \sigma}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1 \sigma}^{(0)}(i\omega_1) \\ & \quad - \delta_{\sigma\sigma'} \mathcal{G}_{l_1, -\sigma}^{(0)}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1, -\sigma l_1, -\sigma}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1, -\sigma}^{(0)}(i\omega_1) \\ & \quad - \beta \delta(\omega - \omega_1) [2\delta_{\sigma\sigma'} \mathcal{G}_{l_1, -\sigma}^{(0)}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1, -\sigma l_1, -\sigma}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1, -\sigma}^{(0)}(i\omega_1) \\ & \quad \left. + \delta_{\sigma\sigma'} \mathcal{G}_{l_1 \sigma}^{(0)}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1 \sigma l_1 \sigma}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1 \sigma}^{(0)}(i\omega_1) - \delta_{\sigma, -\sigma'} \mathcal{G}_{l_1 \sigma}^{(0)}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1 \sigma l_1 \sigma'}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1 \sigma'}^{(0)}(i\omega_1) \right\} \end{aligned} \quad (4.98)$$

Сохраним члены, содержащие символ  $\delta_{\sigma\sigma'}$  и опустим члены с перевернутым спином вида  $\delta_{\sigma', -\sigma}$ , а также взаимно уничтожающиеся члены, которые отличаются только знаком спина. Учтем, что функция  $\mathcal{G}_l^{(0)}(i\omega)$  не зависит от спинового индекса, и имеет место равенство

$$\sum_{\sigma_1} \sigma_1 \mathcal{G}_{l\sigma_1}^{(0)}(i\omega) = 0. \quad (4.99)$$

В результате этих упрощений, получим

$$\begin{aligned} & \sum_{l_1 \sigma_1 l_2 \sigma_2} G_2^{(0)irr} [l\sigma i\omega; l_1 \sigma_1 i\omega_1 | l_2 \sigma_2 i\omega_1; l' \sigma' i\omega] \mathcal{G}_{l_2 \sigma_2}^{(0)}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_2 \sigma_2 l_1 \sigma_1}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1 \sigma_1}^{(0)}(i\omega_1) = \\ &= -\frac{1}{2} \beta \delta(\omega - \omega_1) p(i\omega) p(i\omega_1) \delta_{\sigma\sigma'} \mathcal{G}_{l\sigma}^{(0)}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l\sigma l' \sigma}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l' \sigma}^{(0)}(i\omega_1), \end{aligned} \quad (4.100)$$

$$\Lambda_{l\sigma l' \sigma'}(i\omega) = \delta_{ll'} \delta_{\sigma\sigma'} [m_l(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2} \mathcal{G}_l^{(0)}(i\omega)] + \frac{p^2(i\omega)}{2} \mathcal{G}_l^{(0)}(i\omega) \mathcal{G}_{l' \sigma}^{(0)}(i\omega) \mathcal{G}_{l\sigma l' \sigma'}(i\omega), \quad (4.101)$$

Со следующими реализациями

$$\begin{aligned} \Lambda_{11}(i\omega) &= m_1(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2} \mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2} [\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)]^2 \mathcal{G}_{11}(i\omega), \\ \Lambda_{22}(i\omega) &= m_2(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2} \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2} [\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)]^2 \mathcal{G}_{22}(i\omega), \\ \Lambda_{12}(i\omega) &= \frac{p^2(i\omega)}{2} \mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega) \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega) \mathcal{G}_{12}(i\omega), \end{aligned} \quad (4.102)$$

Принимаем также во внимание уравнение типа Дайсона

$$g_{11}(i\omega) = \frac{\Lambda_{11}(i\omega) - \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)(\Lambda_{11}(i\omega)\Lambda_{22}(i\omega) - \Lambda_{12}(i\omega)\Lambda_{21}(i\omega))}{d(i\omega)}, \quad g_{12}(i\omega) = \frac{\Lambda_{12}(i\omega)}{d(i\omega)}, \quad (4.103)$$

$$d(i\omega) = (1 - \Lambda_{11}(i\omega)\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega))(1 - \Lambda_{22}(i\omega)\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)) - \mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)\Lambda_{12}(i\omega)\Lambda_{21}(i\omega).$$

Здесь представляется целесообразным выполнить обобщение функции  $m(i\omega)$ , снабдив ее орбитальным индексом 1. Функция  $g_{22}$  получается затем из уравнения (4.104) заменой индексов 1 и 2.

Были найдены два решения уравнений (4.103) и (4.104).

Первое из них

$$\begin{aligned} \Lambda_{11}(i\omega) &= m_1(i\omega), \quad g_{11}(i\omega) = -\frac{1}{\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)}, \\ \Lambda_{22}(i\omega) &= \frac{1}{\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)}, \quad g_{22}(i\omega) = -\frac{1}{\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)} \left( 1 + \frac{m_2(i\omega)\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega) - 1}{\frac{p^2(i\omega)}{2}(\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega))^2} \right), \quad (4.105) \\ \Lambda_{12}(i\omega) &= \Lambda_{21}(i\omega) = \pm \frac{ip(i\omega)}{\sqrt{2}}, \quad g_{12}(i\omega) = \pm \frac{i\sqrt{2}}{p(i\omega)\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)}, \end{aligned}$$

при условии, что

$$\frac{1}{\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)} - m_1(i\omega) = \frac{1}{\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)} - m_2(i\omega) \quad (4.106)$$

Второе решение получается из (4.105) заменой индексов 1 и 2.

Аналитическое продолжение полученных решений в верхнюю полуплоскость дает возможность определить спектральную плотность локализованных электронов

$$\rho_{ll'}(E) = -2 \operatorname{Im} g_{ll'}(E + i\delta). \quad (4.107)$$

Например, внутриорбитальный вклад имеет вид

$$\rho_{11}(E) = -\frac{2 \operatorname{Im} \mathcal{G}_1^{(0)}(E + i\delta)}{(\operatorname{Re} \mathcal{G}_1^{(0)})^2 + (\operatorname{Im} \mathcal{G}_1^{(0)})^2}, \quad (4.108)$$

$$\operatorname{Im} \mathcal{G}_1^{(0)}(E + i\delta) = -\pi \rho_0(E) |V_1|^2. \quad (4.109)$$

Величина  $\rho_{11}(E)$  отлична от нуля благодаря существованию матричного элемента гибридизации и нулевой плотности состояний  $\rho_0(E)$  (без взаимодействия). Этот внутриорбитальный вклад в примесные состояния, перемещенный на уровень Ферми за

счет гибридизации с зонными электронами, является прямым обобщением результатов известных для одноорбитальной модели.

Однако существует дополнительный вклад, обусловленный межорбитальным корреляционным эффектом, который следует из нашего решения и имеет вид

$$\rho_{12}(E) = -\text{Im } g_{12}(E + i\delta) = \frac{2(E + \Delta E_1)(\Delta E_2 - E)}{\text{Im} \mathcal{G}_1^{(0)}(0) \text{Im} \mathcal{G}_2^{(0)}(0)(\Delta E_1 + \Delta E_2)}, \quad (4.110)$$

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, для этих энергетических величин межорбитальные возбуждения дают положительный вклад в металлическое состояние.

#### 4.2.6 Сверхпроводящее состояние. Условия для определения критической температуры

Обсудим обобщение этой теории на случай сверхпроводимости. Поскольку орбитальное квантовое число  $l$  в исследуемой модели принимает два значения  $l = 1, 2$ , можно переписать уравнение (4.32-4.33) в виде

$$\begin{aligned} g_\sigma^{11}(i\omega_n) &= \Lambda_\sigma^{11}(i\omega_n) + \Lambda_\sigma^{11}(i\omega_n) \mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega_n) g_\sigma^{11}(i\omega_n) + \Lambda_\sigma^{12}(i\omega_n) \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega_n) g_\sigma^{21}(i\omega_n) - \\ &\quad - Y_{\sigma\bar{\sigma}}^{11}(i\omega_n) \mathcal{G}_1^{(0)}(-i\omega_n) \bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{11}(i\omega_n) - Y_{\sigma\bar{\sigma}}^{12}(i\omega_n) \mathcal{G}_2^{(0)}(-i\omega_n) \bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{21}(i\omega_n), \\ g_\sigma^{21}(i\omega_n) &= \Lambda_\sigma^{21}(i\omega_n) + \Lambda_\sigma^{21}(i\omega_n) \mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega_n) g_\sigma^{11}(i\omega_n) + \\ &\quad + \Lambda_\sigma^{22}(i\omega_n) \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega_n) g_\sigma^{21}(i\omega_n) - Y_{\sigma\bar{\sigma}}^{21}(i\omega_n) \mathcal{G}_1^{(0)}(-i\omega_n) \bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{11}(i\omega_n) - \\ &\quad - Y_{\sigma\bar{\sigma}}^{22}(i\omega_n) \mathcal{G}_2^{(0)}(-i\omega_n) \bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{21}(i\omega_n), \\ \bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{11}(i\omega_n) &= \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{11}(i\omega_n) + \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{11}(i\omega_n) \mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega_n) g_\sigma^{11}(i\omega_n) + \Lambda_{\bar{\sigma}}^{11}(-i\omega_n) \mathcal{G}_1^{(0)}(-i\omega_n) \bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{11}(i\omega_n) + \\ &\quad + \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{12}(i\omega_n) \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega_n) g_\sigma^{21}(i\omega_n) + \Lambda_{\bar{\sigma}}^{21}(-i\omega_n) \mathcal{G}_2^{(0)}(-i\omega_n) \bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{21}(i\omega_n), \\ \bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{21}(i\omega_n) &= \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{21}(i\omega_n) + Y_{\sigma\bar{\sigma}}^{21}(i\omega_n) g_\sigma^{11}(i\omega_n) + \Lambda_{\bar{\sigma}}^{12}(-i\omega_n) \mathcal{G}_1^{(0)}(-i\omega_n) \bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{11}(i\omega_n) + \\ &\quad + \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{22}(i\omega_n) \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega_n) g_\sigma^{21}(i\omega_n) + \Lambda_{\bar{\sigma}}^{22}(-i\omega_n) \mathcal{G}_2^{(0)}(-i\omega_n) \bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{21}(i\omega_n). \end{aligned} \quad (4.111)$$

Здесь  $\Lambda_\sigma^{ll'}(i\omega_n)$ ,  $Y_{\sigma\bar{\sigma}}^{ll'}(i\omega_n)$  и  $\bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{ll'}(i\omega_n)$  корреляционные функции соответствующие сверхпроводящему состоянию, а  $g_\sigma^{ll'}(i\omega_n)$  и  $\bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{ll'}(i\omega_n)$  полные нормальные и аномальные одночастичные ФГ.

Можно сформулировать другую систему уравнений для величин  $g_\sigma^{12}$ ,  $g_\sigma^{22}$ ,  $\bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{12}$ , и  $\bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{22}$ .

Введем определение

$$Q_\sigma^l(i\omega_n) = 1 - \Lambda_\sigma^{ll}(i\omega_n)G_\sigma^{l(0)}(i\omega_n) \quad (4.112)$$

и определим детерминант четвертого порядка  $D_4(i\omega_n)$

$$D_4(i\omega_n) = \begin{vmatrix} Q_\sigma^1(i\omega_n), & -\Lambda_\sigma^{12}(i\omega_n)G_2^{(0)}(i\omega_n) & Y_{\sigma\bar{\sigma}}^{11}(i\omega_n)G_1^{(0)}(-i\omega_n) & Y_{\sigma\bar{\sigma}}^{12}(i\omega_n)G_2^{(0)}(-i\omega_n) \\ -\Lambda_\sigma^{21}(i\omega_n)G_1^{(0)}(i\omega_n) & Q_\sigma^2(i\omega_n) & Y_{\sigma\bar{\sigma}}^{21}(i\omega_n)G_1^{(0)}(-i\omega_n) & Y_{\sigma\bar{\sigma}}^{22}(i\omega_n)G_2^{(0)}(-i\omega_n) \\ -\bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{11}(i\omega_n)G_1^{(0)}(i\omega_n) & -\bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{12}(i\omega_n)G_2^{(0)}(i\omega_n) & Q_{\bar{\sigma}}^1(-i\omega_n) & -\Lambda_{\bar{\sigma}}^{21}(-i\omega_n)G_2^{(0)}(-i\omega_n) \\ -\bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{21}(i\omega_n)G_1^{(0)}(i\omega_n) & -\bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{22}(i\omega_n)G_2^{(0)}(i\omega_n) & -\Lambda_{\bar{\sigma}}^{12}(-i\omega_n)G_1^{(0)}(-i\omega_n) & Q_{\bar{\sigma}}^2(-i\omega_n) \end{vmatrix} \quad (4.113)$$

Эти уравнения являются уравнениями типа Дайсона и устанавливают связи между ФГ  $G$ ,  $f$  и  $\bar{f}$  и корреляционными функциями  $\Lambda$ ,  $Y$  и  $\bar{Y}$ . Аномальные корреляционные функции  $Y$  и  $\bar{Y}$  обладают свойствами параметров порядка сверхпроводящего состояния.

Система уравнения (4.111) позволяет получить для  $T = T_c$  следующие линейные зависимости

$$\begin{aligned} \Delta_4(i\omega_n)\bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{11}(i\omega_n) &= \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{11}Q_\sigma^2(i\omega_n)Q_{\bar{\sigma}}^2(-i\omega_n) + \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{12}(i\omega_n)Q_{\bar{\sigma}}^2(-i\omega_n)\Lambda_\sigma^{21}(i\omega_n)G_2^{(0)}(i\omega_n) + \\ &+ \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{21}(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{21}(-i\omega_n)G_2^{(0)}(-i\omega_n)Q_\sigma^2(i\omega_n) \\ &+ \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{22}(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{21}(-i\omega_n)\Lambda_\sigma^{21}(i\omega_n)G_2^{(0)}(i\omega_n)G_2^{(0)}(-i\omega_n), \\ \Delta_4(i\omega_n)\bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{21}(i\omega_n) &= Q_\sigma^2(i\omega_n)\bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{11}(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{12}(-i\omega_n)G_1^{(0)}(-i\omega_n) + Q_\sigma^2(i\omega_n)\bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{21}(i\omega_n)Q_{\bar{\sigma}}^1(-i\omega_n) + \\ &+ \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{12}(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{12}(-i\omega_n)\Lambda_\sigma^{21}(i\omega_n)G_2^{(0)}(i\omega_n)G_1^{(0)}(-i\omega_n) \\ &+ \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{22}(i\omega_n)Q_{\bar{\sigma}}^1(-i\omega_n)\Lambda_\sigma^{21}(i\omega_n)G_2^{(0)}(i\omega_n), \\ \Delta_4(i\omega_n)\bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{22}(i\omega_n) &= \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{22}Q_\sigma^1(i\omega_n)Q_{\bar{\sigma}}^1(-i\omega_n) + \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{21}(i\omega_n)Q_{\bar{\sigma}}^1(-i\omega_n)\Lambda_\sigma^{12}(i\omega_n)G_1^{(0)}(i\omega_n) + \\ &+ \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{12}(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{12}(-i\omega_n)G_1^{(0)}(-i\omega_n)Q_\sigma^1(i\omega_n) \\ &+ \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{22}(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{12}(-i\omega_n)\Lambda_\sigma^{12}(i\omega_n)G_1^{(0)}(i\omega_n)G_1^{(0)}(-i\omega_n), \\ \Delta_4(i\omega_n)\bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}^{12}(i\omega_n) &= Q_\sigma^1(i\omega_n)\bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{22}(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{21}(-i\omega_n)G_2^{(0)}(-i\omega_n) + Q_\sigma^1(i\omega_n)\bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{12}(i\omega_n)Q_{\bar{\sigma}}^2(-i\omega_n) + \\ &+ \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{21}(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{21}(-i\omega_n)\Lambda_\sigma^{12}(i\omega_n)G_1^{(0)}(i\omega_n)G_2^{(0)}(-i\omega_n) \\ &+ \bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}^{11}(i\omega_n)Q_{\bar{\sigma}}^2(-i\omega_n)\Lambda_\sigma^{12}(i\omega_n)G_1^{(0)}(i\omega_n), \end{aligned} \quad (4.114)$$

где  $\Delta_4(i\omega_n)$  равен  $D_4(i\omega_n)$  с равными нулю параметрами порядка  $Y$  и  $\bar{Y}$ :

$$\begin{aligned} \Delta_4(i\omega_n) &= (Q_\sigma^1(i\omega_n)Q_\sigma^2(i\omega_n) - \Lambda_\sigma^{12}(i\omega_n)\Lambda_\sigma^{21}(i\omega_n)G_1^{(0)}(i\omega_n)G_2^{(0)}(i\omega_n)) \times \\ &\times (Q_{\bar{\sigma}}^1(-i\omega_n)Q_{\bar{\sigma}}^2(-i\omega_n) - \Lambda_{\bar{\sigma}}^{12}(-i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{21}(-i\omega_n)G_1^{(0)}(-i\omega_n)G_2^{(0)}(-i\omega_n)). \end{aligned} \quad (4.115)$$

Система уравнений (4.114) не является замкнутой, поскольку до сих пор не получены зависимости корреляционных функций  $\Lambda$ ,  $Y$  и  $\bar{Y}$  от электронных ФГ.

Такая зависимость может быть результатом бесконечного суммирования диаграмм и, конечно, следствием некоторых приближений. Наши основные приближения изображены на Рис. 4.5

Уточним приближение (см. Рис. 4.6), определяющее корреляционную функцию  $\bar{Y}$  в результате суммирования класса лестничных диаграмм.

$$\bar{Y}_{l\sigma l'\sigma'}(\tau - \tau') = -\frac{1}{2}$$

**Рис. 4.6. Лестничное приближение для корреляционной функции  $\bar{Y}$ . Двойная пунктирная линия – полная аномальная функция Грина примесных электронов. Сплошные тонкие линии являются электронными функциями Грина проводимости. Прямоугольник изображает простейшую неприводимую функцию Грина.**

Приближение приводит к следующим аналитическим результатам

$$\bar{Y}_{\sigma\sigma'}^{ll'}(i\omega) \approx -\frac{1}{2\beta} \sum_{\omega_1} \sum_{l_1\sigma_1 l_2\sigma_2} (\tilde{G}_2^{(0)irr}[l_1, \sigma_1, -i\omega_1; l_2, \sigma_2, i\omega_1 | l, \sigma, -i\omega; l', \sigma', i\omega] \times \times G_{l_1\sigma_1}^{(0)}(-i\omega_1) \bar{f}_{\sigma_1\sigma_2}^{l_1 l_2}(i\omega_1) G_{l_2\sigma_2}^{(0)}(i\omega_1)), \quad (4.116)$$

где

$$G_2^{irr}[l_1, \sigma_1, i\omega_1; l_2, \sigma_2, i\omega_2 | l_3, \sigma_3, i\omega_3; l_4, \sigma_4, i\omega_4] = \beta\delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4) \times \times \tilde{G}_2^{(0)irr}[l_1, \sigma_1, i\omega_1; l_2, \sigma_2, i\omega_2 | l_3, \sigma_3, i\omega_3; l_4, \sigma_4, i\omega_4], \quad (4.117)$$

$$\tilde{G}_2^{(0)irr}[l_1, \sigma_1, i\omega_1; l_2, \sigma_2, i\omega_2 | l_3, \sigma_3, i\omega_3; l_4, \sigma_4, i\omega_4] = \frac{1}{6} p(i\omega_1) p(i\omega_2) \times (\beta\delta(\omega_1 - \omega_4) \delta_{l_1 l_4} \delta_{l_2 l_3} [2\delta_{\sigma_1, -\sigma_4} \delta_{\sigma_2, -\sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} + \delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} - \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} \delta_{\sigma_3, -\sigma_1}] - -\beta\delta(\omega_1 - \omega_3) \delta_{l_1 l_3} \delta_{l_2 l_4} [2\delta_{\sigma_1, -\sigma_3} \delta_{\sigma_2, -\sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} + \delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} \delta_{\sigma_1 \sigma_4} - \delta_{\sigma_1 \sigma_3} \delta_{\sigma_2 \sigma_4} \delta_{\sigma_4, -\sigma_1}]).$$

Используя свойство антисимметрии, которое является следствием принципа Паули

$$\bar{f}_{\sigma\sigma'}''(i\omega_n) = -\bar{f}_{\sigma'\sigma}''(-i\omega_n), \quad (4.118)$$

Можно преобразовать вышеприведенное уравнение и получить более простое:

$$\begin{aligned} \bar{Y}_{\sigma\sigma'}''(i\omega_n) = \frac{1}{6} [\delta_{\sigma\sigma'} q_{l\sigma'}(i\omega_n) q_{l\sigma}(-i\omega_n) \bar{f}_{\sigma\sigma}''(i\omega_n) - \\ - \delta_{\sigma'\bar{\sigma}} q_{l\sigma}(-i\omega_n) q_{l\bar{\sigma}}(i\omega_n) \bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}''(i\omega_n) + 2\delta_{\sigma'\bar{\sigma}} q_{l\sigma}(i\omega_n) q_{l\bar{\sigma}}(-i\omega_n) \bar{f}_{\bar{\sigma}\sigma}''(i\omega_n)], \end{aligned} \quad (4.119)$$

где

$$q_{l\sigma} = p(i\omega_n) G_{l\sigma}^{(0)}(i\omega_n). \quad (4.120)$$

Как видно, существуют две различные возможности корреляционной функции  $\bar{Y}$ :

одна диагональная по спиновым индексам

$$\bar{Y}_{\sigma\sigma}''(i\omega_n) = \frac{1}{6} q_{l\sigma}(-i\omega_n) q_{l\sigma}(i\omega_n) \bar{f}_{\sigma\sigma}''(i\omega_n), \quad (4.121)$$

а вторая не диагональная по спиновым индексам

$$\bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}''(i\omega_n) = \frac{1}{6} q_{l\sigma}(-i\omega_n) q_{l\bar{\sigma}}(i\omega_n) (2\bar{f}_{\bar{\sigma}\sigma}''(i\omega_n) - \bar{f}_{\sigma\bar{\sigma}}''(i\omega_n)). \quad (4.122)$$

Диагональное решение относится к триплетной сверхпроводимости, а не диагональное – к синглетному случаю.

Предположим, что в последнем случае изменение порядка спиновых индексов сопровождается изменением знака функции.

Таким образом, получим

$$\bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}''(i\omega_n) = \frac{1}{2} q_{l\sigma}(-i\omega_n) q_{l\bar{\sigma}}(i\omega_n) \bar{f}_{\bar{\sigma}\sigma}''(i\omega_n). \quad (4.123)$$

Обе возможности могут быть объединены следующим образом:

$$\bar{Y}''(i\omega_n) = \lambda q_{l\sigma}(-i\omega_n) q_{l\bar{\sigma}}(i\omega_n) \bar{f}''(i\omega_n), \quad (4.124)$$

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

#### 4.7. Критическая температура

Теперь вернемся к системе линейных уравнений (4.114) и заменим ФГ их значениями  $\bar{f}_{\bar{\sigma}\sigma}''$ , полученными из уравнения (4.124). В результате этой подстановки получим следующую систему линейных уравнений для компонент параметра порядка  $\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}''$

$$\begin{aligned}
 & \left[ Q_{\sigma}^2(i\omega_n)Q_{\bar{\sigma}}^2(-i\omega_n) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_1(-i\omega_n)q_1(i\omega_n)} \right] \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{11}(i\omega_n) + \\
 & + \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega_n)(Q_{\sigma}^2(-i\omega_n)\Lambda_{\sigma}^{21}(i\omega_n)\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{12}(i\omega_n) \\
 & + \mathcal{G}_2^{(0)}(-i\omega_n)Q_{\sigma}^2(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{21}(-i\omega_n)\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{21}(i\omega_n) \\
 & + \mathcal{G}_2^{(0)}(-i\omega_n)\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega_n)\Lambda_{\sigma}^{21}(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{21}(-i\omega_n)\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{22}(i\omega_n) = 0, \\
 & \mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega_n)(Q_{\bar{\sigma}}^2(-i\omega_n)\Lambda_{\sigma}^{12}(i\omega_n)\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{11}(i\omega_n) + \\
 & + \left[ Q_{\sigma}^1(i\omega_n)Q_{\bar{\sigma}}^2(-i\omega_n) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_1(-i\omega_n)q_2(i\omega_n)} \right] \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{12}(i\omega_n) \\
 & + \mathcal{G}_2^{(0)}(-i\omega_n)\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega_n)\Lambda_{\sigma}^{12}(i\omega_n)\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{21}(i\omega_n) + \\
 & + \mathcal{G}_2^{(0)}(-i\omega_n)Q_{\sigma}^1(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{21}(-i\omega_n)\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{22}(i\omega_n) = 0,
 \end{aligned} \tag{4.125}$$

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{G}_1^{(0)}(-i\omega_n)Q_{\sigma}^2(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{21}(-i\omega_n)\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{11}(i\omega_n) + \\
 & + \mathcal{G}_1^{(0)}(-i\omega_n)\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega_n)\Lambda_{\sigma}^{21}(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{12}(-i\omega_n)\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{12}(i\omega_n) \\
 & + \left[ Q_{\sigma}^2(i\omega_n)Q_{\bar{\sigma}}^1(-i\omega_n) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_2(-i\omega_n)q_1(i\omega_n)} \right] \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{21}(i\omega_n) + \\
 & + \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega_n)Q_{\bar{\sigma}}^1(-i\omega_n)\Lambda_{\sigma}^{21}(i\omega_n)\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{22}(i\omega_n) = 0, \\
 & \mathcal{G}_1^{(0)}(-i\omega_n)\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega_n)\Lambda_{\sigma}^{12}(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{12}(-i\omega_n)\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{11}(i\omega_n) + \\
 & + \mathcal{G}_1^{(0)}(-i\omega_n)Q_{\sigma}^1(i\omega_n)\Lambda_{\bar{\sigma}}^{12}(-i\omega_n)\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{12}(i\omega_n) + \\
 & + \mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega_n)Q_{\bar{\sigma}}^1(-i\omega_n)\Lambda_{\sigma}^{12}(i\omega_n)\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{21}(i\omega_n) + \\
 & + \left[ Q_{\sigma}^1(i\omega_n)Q_{\bar{\sigma}}^1(-i\omega_n) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_2(-i\omega_n)q_2(i\omega_n)} \right] \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}^{22}(i\omega_n) = 0,
 \end{aligned} \tag{4.126}$$

где  $\Delta_4$  равен (4.115)

Детерминант этой линейной системы уравнений  $D_s$  должен быть равен нулю

$$\begin{vmatrix}
\mathcal{Q}_\sigma^2(k)\mathcal{Q}_\sigma^2(-k) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_1(-k)q_1(k)} & \mathcal{G}_2^{(0)}(k)\mathcal{Q}_\sigma^2(-k)\Lambda_\sigma^{21}(k) & \mathcal{G}_2^{(0)}(-k)\mathcal{Q}_\sigma^2(k)\Lambda_\sigma^{21}(-k) & \mathcal{G}_2^{(0)}(-k)\mathcal{G}_2^{(0)}(k)\Lambda_\sigma^{21}(k)\Lambda_\sigma^{21}(-k) \\
\mathcal{G}_1^{(0)}(k)\mathcal{Q}_\sigma^2(-k)\Lambda_\sigma^{12}(k) & \mathcal{Q}_\sigma^1(k)\mathcal{Q}_\sigma^2(-k) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_1(-k)q_2(k)} & \mathcal{G}_2^{(0)}(-k)\mathcal{G}_1^{(0)}(k)\Lambda_\sigma^{12}(k)\Lambda_\sigma^{21}(-k) & \mathcal{G}_2^{(0)}(-k)\mathcal{Q}_\sigma^1(k)\Lambda_\sigma^{21}(-k) \\
\mathcal{G}_1^{(0)}(-k)\mathcal{Q}_\sigma^2(k)\Lambda_\sigma^{21}(-k) & \mathcal{G}_1^{(0)}(-k)\mathcal{G}_2^{(0)}(k)\Lambda_\sigma^{21}(k)\Lambda_\sigma^{12}(-k) & \mathcal{Q}_\sigma^2(k)\mathcal{Q}_\sigma^1(-k) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_2(-k)q_1(k)} & \mathcal{Q}_\sigma^2(k)\mathcal{Q}_\sigma^1(-k) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_2(-k)q_1(k)} \\
\mathcal{G}_1^{(0)}(-k)\mathcal{G}_1^{(0)}(k)\Lambda_\sigma^{12}(k)\Lambda_\sigma^{12}(-k) & \mathcal{G}_1^{(0)}(-k)\mathcal{Q}_\sigma^1(k)\Lambda_\sigma^{12}(-k) & \mathcal{G}_1^{(0)}(k)\mathcal{Q}_\sigma^1(-k)\Lambda_\sigma^{12}(k) & \mathcal{Q}_\sigma^1(k)\mathcal{Q}_\sigma^1(-k) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_2(-k)q_2(k)}
\end{vmatrix} = 0, \quad (4.127)$$

где  $k = i\omega_n$ .

Это условие определяют свободные параметры теории и, определяют 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  $T_c$  положим  $\lambda$  в (4.127) 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  $\mathcal{Q}_\sigma^l(i\omega_n) = 0$ :

В этом частном случае уравнение (4.127) упрощается

$$D_s = (\Delta_4^{(0)})^2 \left[ \frac{\Delta_4^{(0)}}{\lambda^2 q_1(-i\omega_n)q_1(i\omega_n)q_2(-i\omega_n)q_2(i\omega_n)} - 1 \right]^2, \quad (4.128)$$

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

$$\Delta_4^{(0)} = \mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega_n)\mathcal{G}_1^{(0)}(-i\omega_n)\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega_n)\mathcal{G}_2^{(0)}(-i\omega_n)\Lambda_\sigma^{12}(i\omega_n)\Lambda_\sigma^{12}(-i\omega_n)\Lambda_\sigma^{21}(i\omega_n)\Lambda_\sigma^{21}(-i\omega_n). \quad (4.129)$$

Принимая во внимание решение (4.105)

$$\Lambda_\sigma^{12}(i\omega_n)\Lambda_\sigma^{21}(i\omega_n) = -\frac{p^2(i\omega_n)}{2}, \quad (4.130)$$

И определение  $q_\sigma^l$  получим

$$D_s = (\Delta_4^{(0)})^2 \left( \frac{1}{(2\lambda)^2} - 1 \right)^2 = 0 \quad (4.131)$$

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

### 4.3 Заключение по четвертой главе

В настоящей главе была поставлена цель исследовать влияние орбитального вырождения и параметра Хунда на электронные процессы в СКС. Для этого диаграммная теория сильной связи [15,30] была обобщена для двукратно вырожденной МХ в нормальной фазе и ПМА в нормальной и сверхпроводящей фазах. Нормальная фаза моделей подходит для исследования перехода металл-диэлектрик Мотта.

В первую очередь была построена теория возмущения для МХ. За гамильтониан нулевого приближения был принят гамильтониан, отвечающий энергии локализованных  $d$ -электронов, а за возмущение – кинетической энергии (интеграл перескока). Были определены собственные функции и собственные значения гамильтониана нулевого приближения (электронов одного атома) и была установлена их зависимость от внутри – и межорбитальных кулоновских взаимодействий и параметра Хунда. При этом, основным состоянием электронов одного атома является триплетное двухэлектронное состояние, обладающее самым низким значением энергией. Это позволило нам получить выражение для одночастичной электронной функции Грина нулевого приближения. Было сформулировано уравнение типа Дайсона для МХ с двукратным вырождением и найдена корреляционная функция, которая учитывает существование неприводимых функций Грина. В простейшем приближении эта функция содержит диаграммы только цепочечного типа (соответствующих обычной теореме Вика). Отметим, что в этом приближении сильное взаимодействие в системе учтено, поскольку функции Грина нулевого приближения усреднялись по части гамильтониана модели, отвечающему как свободным частицам, так взаимодействию между ними (электронов в одинаковом орбитальном состоянии, так и в разных). В этом приближении с учетом только статистического веса основного состояния и в случае половинного заполнения электронных энергетических зон была вычислена спектральная плотность электронных состояний. На основании анализа этой функции, было получено, что рассматриваемый случай соответствует только диэлектрическому состоянию. Аналогичный результат известен для невырожденной МХ в первом приближении Хаббарда, когда плотность электронных состояний равна нулевой функции плотности состояний и имеет вид  $\rho_0((E^2 - \mu^2)/E)$  [152]. С диаграммной точки зрения, орбитально вырожденная теория

оказывается аналогичной орбитально невырожденной теории, если в последней заменить числовые ФГ двухрядными матрицами, в которых диагональные элементы соответствуют межорбитальным переходам, а недиагональные элементы внутриорбитальным переходам.

Была построена теория возмущений для исследования двукратной вырожденной модели Андерсона.

Была поставлена цель рассмотреть нормальную фазу модели, позволяющую изучать переход металл-диэлектрик и влияние на этот процесс параметра Хунда, а так же сверхпроводящую фазу модели и определить условие, соответствующее появлению сверхпроводимости в модели.

Здесь, как и при рассмотрении МХ с двукратным вырождением, была разработана теория возмущений в атомном пределе. За возмущение была принята часть гамильтониана ответственная за гибридизацию s-d – состояний, а остальная часть гамильтониана была принята за гамильтониан нулевого приближения. Были определены собственные вектора и значения гамильтониана нулевого приближения, отвечающего энергии электронов одного атома, и выявлена их зависимость от энергии взаимодействия электронов одного и разных орбитальных состояний и параметра Хунда. Была вычислена одночастичная электронная ФГ атомного приближения и соответствующая спектральная функция.

Было дано определение мацубаровским электронным ФГ в нормальном и аномальном ФГ – в сверхпроводящем состоянии и получены уравнения типа Дайсона для этих функций в обеих фазах, обсуждаются их решения.

Поскольку основными элементами диаграммного метода, развиваемого в работе, являются НФГ, так же был проведен расчет простейшей двухчастичной неприводимой ФГ и получена ее зависимость от спиновых и орбитальных квантовых чисел. Эта величина, которая может быть вычислена только в пределе низких температур, аппроксимируется с учетом вклада статистического веса  $e^{-\beta E_0}$  от основного состояния электронов атома (триплетное двуэлектронное  $E_0$ ). Вычислив эту величину и суммируя некоторый класс диаграмм, была получена корреляционная функция  $\Lambda_{l\sigma'l\sigma'}$ . В итоге, были найдены два решения для перенормированных функций Грина d-электронов и определен спектральный вес. Было показано, что при низких температурах, благодаря орбитальным переходам, состояние системы может быть только металлическим. Просуммировав бесконечный класс диаграмм, мы получили приближенное выражение для корреляционных функций и, в частности, для сверхпроводящих параметров порядка. Были проанализированы линейные уравнения для параметров порядка и сформулировано выражение позволяющее

определять условие реализации синглетной сверхпроводимости и критическую температуру.

## 5 ДИАГРАММНЫЙ АНАЛИЗ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА-ХОЛСТЕЙНА

### 5.1 Гамильтониан модели Андерсона-Холстейна

Гамильтониан примесной модели Андерсона, дополненной взаимодействием Холстейна, имеет вид

$$\begin{aligned}
 H &= H_{el} + H_{ph} + H_{hyb} + H_{el-ph}, \\
 H_{el} &= \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon(\vec{k}) C_{\vec{k}\sigma}^+ C_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_f^0 f_{\sigma}^+ f_{\sigma} + U_0 n_{\uparrow} n_{\downarrow}, \\
 H_{ph} &= \hbar\omega_0 (a^+ a + \frac{1}{2}), \quad q = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+), \quad p = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^+ - a), \\
 H_{hyb} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}\sigma} (V_{\vec{k}} f_{\sigma}^+ C_{\vec{k}\sigma} + V_{\vec{k}}^* C_{\vec{k}\sigma}^+ f_{\sigma}), \\
 H_{el-ph} &= \bar{g}qn, \quad n = \sum_{\sigma} n_{\sigma}, \quad n_{\sigma} = f_{\sigma}^+ f_{\sigma}
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

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 исчисляются 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.

Исключим линейный по  $q$  член гамильтониана, выполнив преобразование Ланг-Фирсова [52]:

$$\begin{aligned}
 H &= e^S H e^{-S}, \quad S = -ignp, \quad g = \frac{\bar{g}}{\hbar\omega_0}, \quad \tilde{a} = e^S a e^{-S} = a - \frac{ng}{\sqrt{2}}, \quad \tilde{a}^+ = e^S a^+ e^{-S} = a^+ - \frac{ng}{\sqrt{2}}, \\
 \tilde{q} &= e^S q e^{-S} = q - ng, \quad n = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}, \quad \tilde{a}^+ \tilde{a} = a^+ a - ngq + \frac{g^2}{2}(n_{\uparrow} + n_{\downarrow} + 2n_{\uparrow}n_{\downarrow}),
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

В результате этого преобразования операторы локализованных электронов преобразуются следующим образом:

$$\tilde{f}_\sigma = e^S f_\sigma e^{-S} = e^{igp} f_\sigma, \quad \tilde{f}_\sigma^+ = f_\sigma^+ e^{-igp},$$

$$H_{hyb} = e^S H_{hyb} e^{-S} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}\sigma} (V_{\vec{k}} f_\sigma^+ e^{-igp} C_{\vec{k}\sigma}^- + V_{\vec{k}}^* C_{\vec{k}\sigma}^+ f_\sigma e^{igp}).$$

А операторы электронов проводимости остаются неизменными:

$$\tilde{C}_{k\sigma} = e^S C_{k\sigma} e^{-S} = C_{k\sigma};$$

$$\tilde{C}_{k\sigma}^+ = e^S C_{k\sigma}^+ e^{-S} = C_{k\sigma}^+$$

С учетом этих обозначений получим:

$$H = H^0 + H_{int},$$

$$H^0 = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon(\vec{k}) C_{\vec{k}\sigma}^+ C_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_f n_{\sigma} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} + \hbar\omega_0 (a^+ a + \frac{1}{2}), \quad (5.3)$$

$$H_{int} = \sum_{\sigma} (\tilde{f}_\sigma^+ b_{\sigma} + b_{\sigma}^+ \tilde{f}_{\sigma}),$$

где

$$\varepsilon_f = \varepsilon_f^0 - \mu, \quad \mu = \mu_0 + \alpha \hbar\omega_0, \quad U = U_0 - 2\alpha \hbar\omega_0, \quad \alpha = \frac{g^2}{2}, \quad (5.4)$$

$$b_{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}\sigma} V_{\vec{k}}, \quad b_{\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} V_{\vec{k}}^* C_{\vec{k}\sigma}^+.$$

Оператор  $b_{\sigma} (b_{\sigma}^+)$  – оператор электрона проводимости и  $\tilde{f}_{\sigma} (\tilde{f}_{\sigma}^+)$  – оператор окруженного фоновыми облаками примесного электрона. Электрон, окруженный фоновым облаком, представляет собой полярон. Таким образом, задача была сведена к рассмотрению задачи малого полярона (полярона малого радиуса).

Воспользуемся аппаратом мацубаровских функций Грина, построив теорию возмущений для этой модели. Поскольку оба взаимодействия (как кулоновское, так и электрон-фононное) полагаются сильными, оператор  $H_0 = H_{el} + H_{ph}$  примем за гамильтониан нулевого приближения, а оператор  $H_{int}$  – за возмущение системы. Оператор  $H_0$  содержит как электронные, так и фоновые операторы. Благодаря присутствию сильного кулоновского взаимодействия  $U_0$  и сильной электрон-фононной связи  $\bar{g}$  (гамильтониан нулевого приближения описывает не только свободные частицы). Статистическое усреднение выполняется по матрице плотности электронов проводимости, локализованных поляронов и фононов:

$$\rho = \exp(-\beta H_0) = \prod_i \exp(-\beta H_{ie}^0) \exp(-\beta H_{ip}^0) \exp(-\beta H_{iph}^0)$$

Фононная часть и часть отвечающая электронам проводимости легко диагонализируется с использованием фононных и электронных операторов, а часть соответствующая системе поляронов и пропорциональная перенормированной величине энергии кулоновского отталкивания  $\tilde{U}$  диагонализируется с помощью операторов Хаббарда.

Статистические средние произведения операторов подсистем модели могут быть разделены на три группы. Первая группа представляет собой среднее произведения операторов электронов проводимости  $b_\sigma, b_\sigma^+$ , которое разбивается на сумму произведения средних с использованием обычной теоремы Вика. Вторая группа представлена операторами локализованных электронов  $f_\sigma, f_\sigma^+$ , которые сильно взаимодействуют друг с другом, и это среднее нуждается в использовании обобщенной теоремы Вика. Третья группа операторов сформирована из операторов фононных облаков, для средних от произведения которых необходимо сформулировать правила разбиения сумму произведений.

Для простоты положим, что система находится в парамагнитном состоянии ( $\bar{\sigma} = -\sigma$ )

## 5.2. Средние для операторов фононных облаков в режиме сильно связанных поляронов

Приведем определения мацубаровских ФГ электронов проводимости  $G$ , электронов примесных атомов  $g_e$  и поляронов  $g_p$  в представлении взаимодействия соответственно:

$$\begin{aligned} G(\sigma\tau | \sigma'\tau') &= -\langle T_\tau b_\sigma(\tau) \bar{b}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ g_e(\sigma\tau | \sigma'\tau') &= -\langle T_\tau f_\sigma(\tau) \bar{f}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ g_p(\sigma\tau | \sigma'\tau') &= -\langle T_\tau \tilde{f}_\sigma(\tau) \bar{f}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ g_p &= -T_\tau f(\tau) f(\tau')_c^0 \Phi(\tau | \tau') \end{aligned} \quad (5.5)$$

где  $\tau, \tau'$  соответствует мнимому времени в интервале  $0 < \tau < \beta$ ,  $\beta$  – обратная температура системы. Здесь  $T_\tau$  – оператор хронологического упорядочения. Статистическое усреднение  $\langle \dots \rangle_0^c$  выполняется с помощью матрицы плотности большого канонического

ансамбля нулевого порядка  $\frac{e^{-\beta H^0}}{\text{Tr}e^{-\beta H^0}}$  и индекс «с» означает связанные диаграммы.

Оператор эволюции  $U(\beta)$  определяется как обычно:

$$U(\beta) = T_\tau \exp\left(-\int_0^\beta H_{int}(\tau)\tau\right). \quad (5.6)$$

$\Phi(\tau|\tau')$  в (5.5) ФГ фононных облаков:

$$\Phi(\tau|\tau') = -T_\tau \exp\left(igp(\tau) - igp(\tau')\right) U(\beta)_0^c$$

$\exp(-igp(\tau))$  – оператор уничтожения облака фононов,  $\exp(igp(\tau))$  – рождения.

Если система находится в сверхпроводящем состоянии, кроме нормальных ФГ (5.6), приведем определения аномальных ФГ электронов проводимости  $F(\sigma\tau|-\sigma\tau')$ ,  $\bar{F}(-\sigma\tau|\sigma\tau')$ , электронов примесных атомов  $f_e(\sigma\tau|-\sigma\tau')$ ,  $\bar{f}_e(-\sigma\tau|\sigma\tau')$  и поляронов  $f_p(\sigma\tau|-\sigma\tau')$ ,  $\bar{f}_p(-\sigma\tau|\sigma\tau')$  соответственно:

$$\begin{aligned} F(\sigma\tau|-\sigma\tau') &= -\langle T_\tau b_\sigma(\tau) b_{-\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ \bar{F}(-\sigma\tau|\sigma\tau') &= -\langle T_\tau \bar{b}_{-\sigma}(\tau) \bar{b}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ f_e(\sigma\tau|-\sigma\tau') &= -\langle T_\tau f_\sigma(\tau) f_{-\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ \bar{f}_e(-\sigma\tau|\sigma\tau') &= -\langle T_\tau \bar{f}_{-\sigma}(\tau) \bar{f}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ f_p(\sigma\tau|-\sigma\tau') &= -\langle T_\tau \tilde{f}_\sigma(\tau) \tilde{f}_{-\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ \bar{f}_p(-\sigma\tau|\sigma\tau') &= -\langle T_\tau \tilde{\bar{f}}_{-\sigma}(\tau) \tilde{\bar{f}}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \end{aligned} \quad (5.7)$$

Теперь выпишем все возможные ФГ фононных облаков (нормального и сверхпроводящего состояния):

$$\begin{aligned} \Phi(\tau_1 - \tau_2) &= \langle T_\tau \exp[ig(p(\tau_1) - p(\tau_2))] U(\beta) \rangle_0^c, \\ \varphi(\tau_1 - \tau_2) &= \langle T_\tau \exp[ig(p(\tau_1) + p(\tau_2))] U(\beta) \rangle_0^c, \\ \bar{\varphi}(\tau_1 - \tau_2) &= \langle T_\tau \exp[-ig(p(\tau_1) + p(\tau_2))] U(\beta) \rangle_0^c, \\ \Phi(\tau_1\tau_2 | \tau_3\tau_4) &= \langle T_\tau \exp[ig(p(\tau_1) + p(\tau_2) - p(\tau_3) - p(\tau_4))] U(\beta) \rangle_0^c. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Первые ФГ это одночастичная ФГ фононных облаков (двухвременная), последняя двухчастичная (четырёхвременная).  $\varphi(\tau_1 - \tau_2)$  и  $\bar{\varphi}(\tau_1 - \tau_2)$  соответствуют аномальным поляроном функциям Грина  $f_p(\sigma\tau|-\sigma\tau')$ ,  $\bar{f}_p(-\sigma\tau|\sigma\tau')$ , они полагаются малыми в нормальном состоянии и велики в сверхпроводящем.

Рассмотрим ФГ фононных облаков нулевого приближения  $\Phi_0$  Теорема Вика слабой связи для вычисления средних произведения операторов «свободных» фононов [55] формулируется следующим образом:

$$\Phi_0(\tau_1 - \tau_2) = \exp\left(-\frac{g^2}{2} \langle T[p(\tau_1) - p(\tau_2)]^2 \rangle_0\right) = \exp[-\sigma(\beta) + \sigma(\tau_1 - \tau_2)], \quad (5.9)$$

$$\begin{aligned} \Phi_0(\tau_1 \tau_2 | \tau_3 \tau_4) &= \exp\left(-\frac{g^2}{2} \langle T[p(\tau_1) + p(\tau_2) - p(\tau_3) - p(\tau_4)]^2 \rangle_0\right) = \\ &= \exp(\sigma(|\tau_1 - \tau_3|) + \sigma(|\tau_1 - \tau_4|) + \sigma(|\tau_2 - \tau_3|) + \\ &+ \sigma(|\tau_2 - \tau_4|) - \sigma(|\tau_1 - \tau_2|) - \sigma(|\tau_3 - \tau_4|) - 2\sigma(\beta)), \end{aligned} \quad (5.10)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \sigma(|\tau_1 - \tau_2|) &= g^2 \langle T(p(\tau_1)p(\tau_2)) \rangle_0 = \frac{\alpha \cosh[\hbar\omega_0(\frac{\beta}{2} - |\tau_1 - \tau_2|)]}{\sinh \frac{\beta\hbar\omega_0}{2}}, \\ \sigma(\beta) &= \sigma(0) = \alpha \coth \frac{\beta\hbar\omega_0}{2}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Для дальнейшего исследования рассмотрим Фурье-образ ФГ «свободных» фононных облаков, т.е.:

$$\Phi(\tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega} e^{-i\Omega(\tau - \tau')} \Phi(i\Omega), \quad \Omega = \frac{2n\pi}{\beta}. \quad (5.12)$$

В рассматриваемом нами пределе сильной связи  $\alpha \gg 1$  с помощью приближения Лапласа, Фурье-образ КФ «свободных» фононных облаков (5.9) был вычислен в работе [53, 55] и имеет вид:

$$\Phi_0(i\Omega) = \frac{2\omega_c}{\Omega^2 + \omega_c^2}, \quad \omega_c = \alpha\omega_0. \quad (5.13)$$

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). Исследуем возможность излучения и поглощения этой коллективной моды поляронами и возможное влияние этого на сверхпроводящую фазу модели.

Для двух других ФГ (значительных в сверхпроводящем состоянии) имеем:

$$\begin{aligned} \varphi_0(\tau, \tau') &= \langle T e^{ig(p(\tau_1) + p(\tau_2))} \rangle_0 = \\ &= \exp\left(-\frac{g^2}{2} \langle T[p(\tau_1) + p(\tau_2)]^2 \rangle_0\right) = \exp[-(\sigma(\beta) + \sigma(\tau - \tau'))]; \\ \varphi_0(\tau, \tau') &\sim e^{-\alpha}. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Преобразование Фурье для двухчастичной ФГ имеет вид

$$\Phi(\tau_1, \tau_2 | \tau_3, \tau_4) = \frac{1}{\beta^4} \sum_{\Omega_1, \dots, \Omega_4} \Phi(i\Omega_1, i\Omega_2 | i\Omega_3, i\Omega_4) \times \exp(-i\Omega_1\tau_1 + i\Omega_2\tau_2 - i\Omega_3\tau_3 + i\Omega_4\tau_4) \quad (5.15)$$

Используя приближение Лапласа для предела сильной связи [53, 55] и (5.15) получим Фурье-представление для 4-х временной ФГ нулевого приближения фононных облаков

$$\begin{aligned} \Phi_0(i\Omega_1, i\Omega_2 | i\Omega_3, i\Omega_4) &= \int_0^\beta \dots \int_0^\beta d\tau_1 \dots d\tau_4 \Phi_0(\tau_1, \tau_2 | \tau_3, \tau_4) \times \exp(-i\Omega_1\tau_1 + i\Omega_2\tau_2 - i\Omega_3\tau_3 + i\Omega_4\tau_4) \\ \Phi_0(i\Omega_1, i\Omega_2 | i\Omega_3, i\Omega_4) &\cong (\delta_{\Omega_1, \Omega_3} \delta_{\Omega_2, \Omega_4} + \delta_{\Omega_1, \Omega_4} \delta_{\Omega_2, \Omega_3}) \Phi_0(i\Omega_1) \Phi_0(i\Omega_2) \end{aligned}$$

Что аналогично следующему соотношению:

$$\Phi_0(\tau_1 \tau_2 | \tau_3 \tau_4) \cong \Phi_0(\tau_1 | \tau_3) \Phi_0(\tau_2 | \tau_4) + \Phi_0(\tau_1 | \tau_4) \Phi_0(\tau_2 | \tau_3) \quad (5.16)$$

Это означает, что в дальнейшем можно оставить только свободные коллективные колебания фононных облаков (6.13), окружающие поляроны и использовать метод приближения Хартри-Фока (6.14) и (6.15) для двухчастичной ФГ. Обобщение (6.16) на многовременные аргументы рассматривается как теорема Вика для ФГ фононных облаков в режиме сильно связанных поляронов.

### 5.3. Динамика поляронных облаков

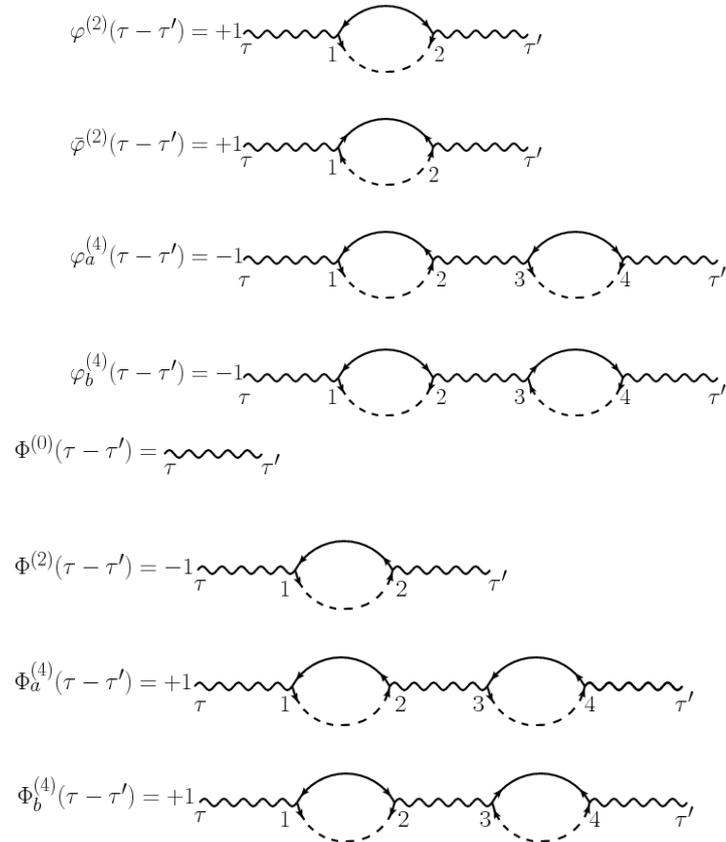
Исследуем процесс перенормировки ФГ фононных облаков, обусловленный гибридизацией электронных орбиталей локализованных электронов с электронами проводимости. Во втором и четвертом порядках теории возмущений получим вклады, изображенные на Рис. 5.1

Аналитические формы вклада от некоторых из этих диаграмм

$$\begin{aligned} \Phi^{(2)}(\tau - \tau') &= \iint d\tau_1 d\tau_2 \Phi^{(0)}(\tau - \tau_1) \Pi_2(\tau_1 - \tau_2) \Phi^{(0)}(\tau_2 - \tau'), \\ \varphi^{(2)}(\tau - \tau') &= \iint d\tau_1 d\tau_2 \Phi^{(0)}(\tau - \tau_1) \Pi_2^s(\tau_1 - \tau_2) \Phi^{(0)}(\tau' - \tau_2), \\ \Phi_a^{(4)}(\tau - \tau') &= \iiint d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 d\tau_4 \Phi^{(0)}(\tau - \tau_1) \Pi_2(\tau_1 - \tau_2) \Phi^{(0)}(\tau_2 - \tau_3) \times \\ &\times \Pi_2(\tau_3 - \tau_4) \Phi^{(0)}(\tau_4 - \tau'), \end{aligned} \quad (5.17)$$

где

$$\begin{aligned} \Pi_2(1-2) &= -\langle T b_1 \bar{b}_2 \rangle_0 \langle T f_2 \bar{f}_1 \rangle_0, \\ \Pi_2^s(1-2) &= \langle T b_1 b_2 \rangle_0 \langle T \bar{f}_2 \bar{f}_1 \rangle_0, \\ \bar{\Pi}_2^s(1-2) &= \langle T \bar{b}_1 \bar{b}_2 \rangle_0 \langle T f_2 f_1 \rangle_0. \end{aligned} \quad (5.18)$$



**Рис. 5.1. Процесс перенормировки ФГ фононных облаков. Вклады второго и четвертого порядков теории возмущений. Тонкая сплошная линия соответствует ФГ электрона проводимости, а пунктирная – ФГ примесного электрона. Петли, составленные из линий электронов проводимости и примесных атомов, представляют собой простейшие поляризационные операторы. Направление стрелок отделяют операторы рождения от операторов уничтожения.**

В нормальном состоянии системы все аномальные ФГ равны нулю, мы полагаем равными так же нулю в нормальном состоянии ФГ  $\varphi$  и  $\bar{\varphi}$ . Диаграммы для ФГ  $\Phi(\tau - \tau')$  могут быть суммированы в виде уравнения Дайсона

$$\Phi(\tau - \tau') = \Phi^{(0)}(\tau - \tau') + \int \int d\tau_1 d\tau_2 \Phi^{(0)}(\tau - \tau_1) \Pi(\tau_1 - \tau_2) \Phi(\tau_2 - \tau'), \quad (5.19)$$

где  $\Pi(\tau)$  – полный поляризационный ФГ.

В представлении Фурье имеем:

$$\begin{aligned}\Phi(i\Omega) &= \Phi^{(0)}(i\Omega) + \Phi^{(0)}(i\Omega)\Pi(i\Omega)\Phi(i\Omega), \\ \Phi(i\Omega) &= \frac{\Phi^{(0)}(i\Omega)}{1 - \Phi^{(0)}(i\Omega)\Pi(i\Omega)} = \frac{1}{(\Phi^{(0)}(i\Omega))^{-1} - \Pi(i\Omega)}.\end{aligned}\quad (5.20)$$

Используя выражение (5.13), получаем

$$\Phi(i\Omega) = \frac{\omega_c}{\Omega^2 + \omega_c^2 + 2\omega_c\Pi(i\Omega)} \quad (5.21)$$

Это выражение определяет перенормировку коллективной фононной частоты  $\omega_c$ . Новая частота определяется из выражения:

$$E^2 + \omega_c^2 + 2\omega_c\Pi(E) = 0 \quad (5.22)$$

Используя выражение (5.13), получим

$$\Phi(i\Omega) = \frac{2\omega_c}{\Omega^2 + \omega_c^2 - 2\omega_c\Pi(i\Omega)}. \quad (5.23)$$

Полюс этого уравнения, то есть определяет перенормировку коллективной фононной частоты  $\omega_c$ .

Новая частота определяется из уравнения

$$E^2 - \omega_c^2 + 2\omega_c\Pi(E) = 0. \quad (5.24)$$

Простейшие ФГ нулевого приближения электронов проводимости и локализованных примесных атомов и в условиях парамагнетизма ( $\bar{\sigma} = -\sigma$ ) имеют вид

$$\begin{aligned}G_\sigma^0(i\omega) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{i\omega - \epsilon(\vec{k})}, \quad g_\sigma^0(i\omega) = \frac{1 - n_{-\sigma}}{\lambda_\sigma(i\omega)} + \frac{n_{-\sigma}}{\bar{\lambda}_\sigma(i\omega)}, \\ \lambda_\sigma(i\omega) &= i\omega + E_0 - E_\sigma, \quad E_0 = 0, \quad E_\sigma = \epsilon_f, \quad E_2 = U + 2\epsilon_f, \\ \bar{\lambda}_\sigma(i\omega) &= i\omega + E_{-\sigma} - E_2, \quad Z_0 = e^{-\beta E_0} + 2e^{-\beta E_{\bar{\sigma}}} + e^{-\beta E_2}, \\ n_{\bar{\sigma}} &= \frac{e^{-\beta E_{\bar{\sigma}}} + e^{-\beta E_2}}{Z_0}, \quad 1 - n_{\bar{\sigma}} = \frac{e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_\sigma}}{Z_0}.\end{aligned}\quad (5.25)$$

Простейшая поляризационная ФГ  $\Pi_2(i\Omega)$  нормального состояния определяется этими функциями:

$$\Pi_2(i\Omega) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega} G_\sigma^0(i\omega) g_\sigma^0(i\omega - i\Omega). \quad (5.26)$$

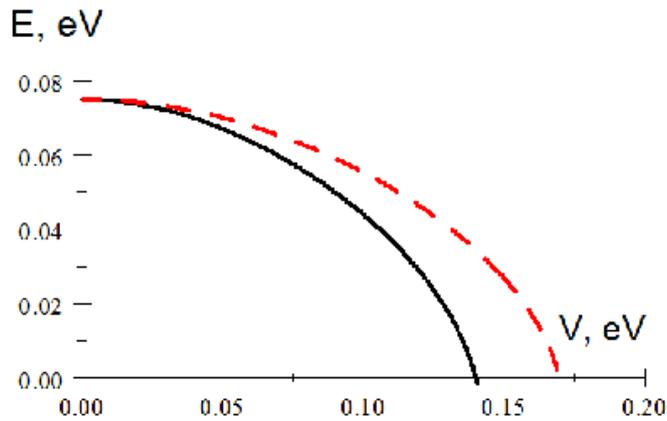
Подставим (5.24) в (5.25) и просуммируем по мацубаровским частотам, в результате чего получим

$$\begin{aligned} \Pi_2(i\Omega) = & \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\sigma} |V_{\vec{k}}|^2 \left\{ \frac{1-n_{\vec{\sigma}}}{i\Omega - \epsilon(\vec{k}) + \epsilon_f} \left[ \frac{1}{e^{\beta\epsilon(\vec{k})} + 1} - \frac{1}{e^{\beta\epsilon_f} + 1} \right] + \right. \\ & \left. + \frac{n_{\vec{\sigma}}}{i\Omega - \epsilon(\vec{k}) + U + \epsilon_f} \left[ \frac{1}{e^{\beta\epsilon(\vec{k})} + 1} - \frac{1}{e^{\beta(U+\epsilon_f)} + 1} \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.27)$$

Для выполнения суммирования по вектору  $\vec{k}$  перейдем к интегрированию по энергиям

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} (\dots) \rightarrow \int (\dots) \rho(E) dE \quad (5.28)$$

где  $\rho(E)$  – нулевая плотность электронных состояний.



**Рис.5.2.** 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). Другие параметры приняты следующими:  $\omega_c=0.075$  эВ,  $U=5.85$  эВ,  $\epsilon_f=-0.095$  эВ.

С помощью уравнения (5.21) для случая температуры  $T = 0$  при нулевой плотности электронных состояний  $\rho(E)$

$$\rho(E) = \frac{1}{2W} \begin{cases} 1, E < |W| \\ 0, E > |W| \end{cases} \quad (5.29)$$

где  $W$  – ширина зоны. Была исследована зависимость энергии коллективной моды  $E$  относительно параметра гибридизации  $V$ .

Результаты численных расчетов представлены на Рис. 5.2. Согласно этим результатам, перенормированная энергия коллективной моды  $E$  фононных облаков уменьшается с увеличением величины  $V$  и становится равной нулю при критическом значении

$$V_c = \sqrt{\frac{\hbar\omega_c W}{\ln|(W - \varepsilon_f)(W + U + \varepsilon_f) / (\varepsilon_f(U + \varepsilon_f))|}} \quad (5.30)$$

#### 5.4. Поляронные функции Грина.

Будем подразумевать под  $\Lambda$ , как и в предыдущих главах, нормальную корреляционную функцию, а под  $Y$  и  $\bar{Y}$  – аномальные ФГ соответственно. Уравнения типа Дайсона для поляронных ФГ примесных электронов имеют вид (см. Рис. 5.3 и Рис. 5.4)

$$\begin{aligned} \leftarrow \text{dashed} \leftarrow &= \leftarrow \Lambda \leftarrow + \leftarrow \Lambda \leftarrow \xrightarrow{G^0} \leftarrow \text{dashed} \leftarrow - \leftarrow \Lambda \leftarrow \xrightarrow{F^0} \bar{f}_p \leftarrow \\ &- \leftarrow Y \leftarrow \xrightarrow{G^0} \bar{f}_p \leftarrow - \leftarrow Y \leftarrow \xrightarrow{\bar{F}^0} \leftarrow \text{dashed} \leftarrow ; \\ \bar{f}_p \leftarrow \text{dashed} \leftarrow &= \Rightarrow \bar{Y} \leftarrow + \Rightarrow \bar{Y} \leftarrow \xrightarrow{G^0} \leftarrow \text{dashed} \leftarrow - \Rightarrow \bar{Y} \leftarrow \xrightarrow{F^0} \bar{f}_p \leftarrow \\ &+ \Rightarrow \Lambda \leftarrow \xrightarrow{G^0} \bar{f}_p \leftarrow + \Rightarrow \Lambda \leftarrow \xrightarrow{\bar{F}^0} \leftarrow \text{dashed} \leftarrow . \end{aligned}$$

Рис. 5.3. Уравнения типа Дайсона для полных функций Грина примесных электронов.

$$\begin{aligned} \leftarrow \text{dashed} \leftarrow &= \leftarrow Y \leftarrow + \leftarrow Y \leftarrow \xrightarrow{G^0} \leftarrow \text{dashed} \leftarrow + \leftarrow \Lambda \leftarrow \xrightarrow{G^0} \leftarrow \text{dashed} \leftarrow \\ &+ \leftarrow \Lambda \leftarrow \xrightarrow{F^0} \leftarrow \text{dashed} \leftarrow - \leftarrow Y \leftarrow \xrightarrow{\bar{F}^0} \leftarrow \text{dashed} \leftarrow ; \\ \leftarrow \text{dashed} \leftarrow &= \Rightarrow \Lambda \leftarrow + \Rightarrow \Lambda \leftarrow \xrightarrow{G^0} \leftarrow \text{dashed} \leftarrow - \Rightarrow \Lambda \leftarrow \xrightarrow{\bar{F}^0} \leftarrow \text{dashed} \leftarrow \\ &- \Rightarrow \bar{Y} \leftarrow \xrightarrow{G^0} \leftarrow \text{dashed} \leftarrow - \Rightarrow \bar{Y} \leftarrow \xrightarrow{F^0} \leftarrow \text{dashed} \leftarrow . \end{aligned}$$

Рис. 5.4 Диаграммные уравнения для двух других функций Грина примесных электронов.

Эти уравнения записаны в общем случае существования аномальных нулевых ФГ электронов проводимости. В случае нормальной фазы модели члены этих уравнений, относящиеся к аномальным ФГ  $F^0$  и  $\bar{F}^0$ , должны быть опущены.

Запишем первые два уравнения в аналитической форме:

$$\begin{aligned}
g_{p\sigma\sigma'}(i\omega) &= \Lambda_{\sigma\sigma'}(i\omega) + \Lambda_{\sigma\sigma_1}(i\omega)G_{\sigma_1}^0(i\omega)g_{p\sigma_1\sigma'}(i\omega) - \Lambda_{\sigma\sigma_1}(i\omega)F_{\sigma_1,-\sigma_1}^0(i\omega)\bar{f}_{p\bar{\sigma}_1\sigma'}(i\omega) - \\
&\quad - Y_{\sigma\sigma_1}(i\omega)G_{\sigma_1}^0(-i\omega)\bar{f}_{p\bar{\sigma}_1\sigma'}(i\omega) - Y_{\sigma\sigma_1}(i\omega)\bar{F}_{\sigma_1\sigma_1}^0(i\omega)g_{p\sigma_1\sigma'}(i\omega), \\
\bar{f}_{p\bar{\sigma}\sigma'}(i\omega) &= \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma'}(i\omega) + \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma_1}(i\omega)G_{\sigma_1}^0(i\omega)g_{p\sigma_1\sigma'}(i\omega) - \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma_1}(i\omega)F_{\sigma_1,-\sigma_1}^0(i\omega)\bar{f}_{p-\sigma_1,\sigma'}(i\omega) + \\
&\quad + \Lambda_{\bar{\sigma}_1\bar{\sigma}}(-i\omega)G_{\sigma_1}^0(-i\omega)\bar{f}_{p\bar{\sigma}_1\sigma'}(i\omega) + \Lambda_{\bar{\sigma}_1\bar{\sigma}}(-i\omega)\bar{F}_{\bar{\sigma}_1\sigma_1}^0(i\omega)g_{p\sigma_1\sigma'}(i\omega)
\end{aligned} \tag{5.31}$$

Решение этих уравнений имеет вид:

$$\begin{aligned}
g_{p\sigma}(i\omega) &= \frac{1}{d_{p\sigma}(i\omega)} \left[ \Lambda_{p\sigma}(i\omega) - G_{\bar{\sigma}}^0(-i\omega)(\Lambda_{p\sigma}(i\omega)\Lambda_{p\bar{\sigma}}(-i\omega) + Y_{p\sigma\bar{\sigma}}(i\omega)\bar{Y}_{p\bar{\sigma}\sigma}(i\omega)) \right], \\
\bar{f}_{p\bar{\sigma}\sigma}(i\omega) &= \frac{1}{d_{p\sigma}(i\omega)} \left[ \bar{Y}_{p\bar{\sigma}\sigma}(i\omega) + \bar{F}_{\bar{\sigma}\sigma}^0(i\omega)(\Lambda_{p\sigma}(i\omega)\Lambda_{p\bar{\sigma}}(-i\omega) + Y_{p\sigma\bar{\sigma}}(i\omega)\bar{Y}_{p\bar{\sigma}\sigma}(i\omega)) \right], \\
d_{p\sigma}(i\omega) &= 1 - \Lambda_{p\sigma}(i\omega)G_{\sigma}^0(i\omega) - \Lambda_{p\bar{\sigma}}(-i\omega)G_{\bar{\sigma}}^0(-i\omega) + \bar{Y}_{p\bar{\sigma}\sigma}(i\omega)F_{\sigma\bar{\sigma}}^0(i\omega) \\
&\quad + Y_{p\sigma\bar{\sigma}}(i\omega)\bar{F}_{\bar{\sigma}\sigma}^0(i\omega) + \left[ G_{\sigma}^0(i\omega)G_{\bar{\sigma}}^0(-i\omega) + F_{\sigma\bar{\sigma}}^0(i\omega)\bar{F}_{\bar{\sigma}\sigma}^0(i\omega) \right] \times \\
&\quad \times \left[ \Lambda_{p\sigma}(i\omega)\Lambda_{p\bar{\sigma}}(-i\omega) + Y_{p\sigma\bar{\sigma}}(i\omega)\bar{Y}_{p\bar{\sigma}\sigma}(i\omega) \right]
\end{aligned} \tag{5.32}$$

Также можно сформулировать систему уравнений для перенормированных ФГ электронов проводимости  $G, F$  и  $\bar{F}$ . Диаграммное представление этих уравнений изображено на Рис.5.6.

Можно сформулировать и другие два уравнения, содержащие аномальную ФГ  $F$ . Все эти уравнения определяются одним нормальным  $\sum$  и аномальными  $\Xi$  и  $\bar{\Xi}$  массовыми операторами.

Сформулируем свойство совпадения этих функций с корреляционными функциями локализованных электронов

$$\begin{aligned}
\sum(\sigma\tau | \sigma'\tau') &= \Lambda(\sigma\tau | \sigma'\tau'), \Xi(\sigma\tau | \sigma'\tau') = Y(\sigma\tau | \sigma'\tau'), \\
\bar{\Xi}(\sigma\tau | \sigma'\tau') &= \bar{Y}(\sigma\tau | \sigma'\tau').
\end{aligned} \tag{5.33}$$

Таким образом, корреляционные функции уравнения типа Дайсона локализованных электронов  $\Lambda, Y$  и  $\bar{Y}$  совпадает с массовыми операторами уравнений Дайсона электронов проводимости.

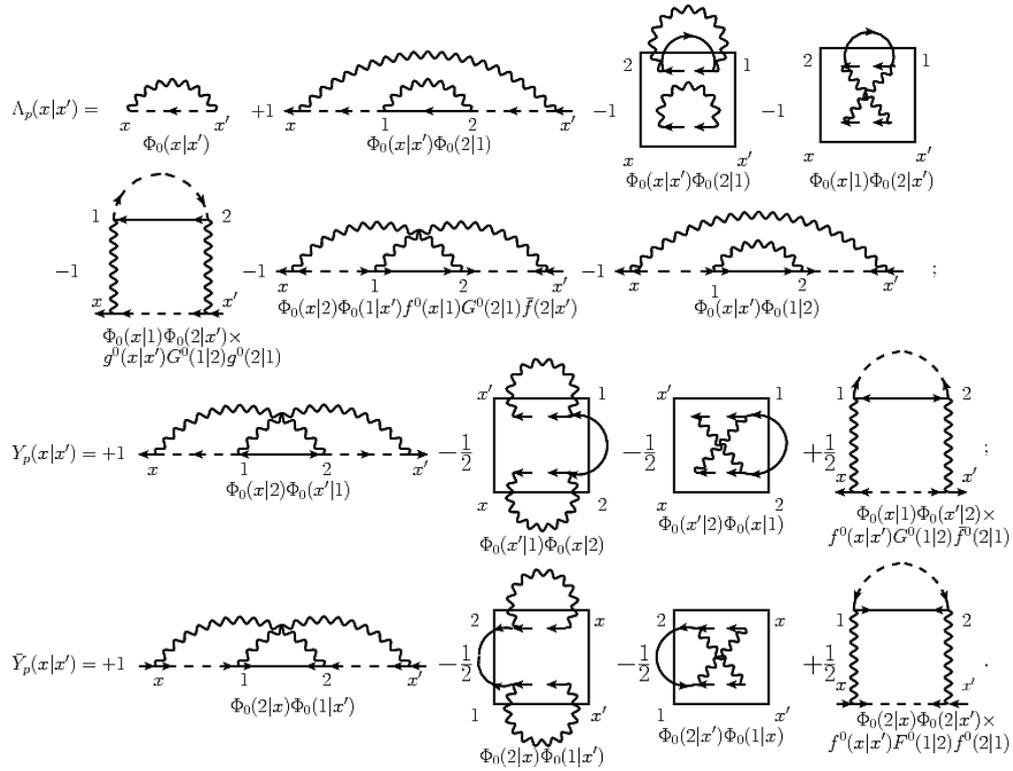


Рис. 5. 5. Примеры корреляционных функций первого порядка теории возмущений. Прямоугольники изображают  $G^{2(irr)}$ .

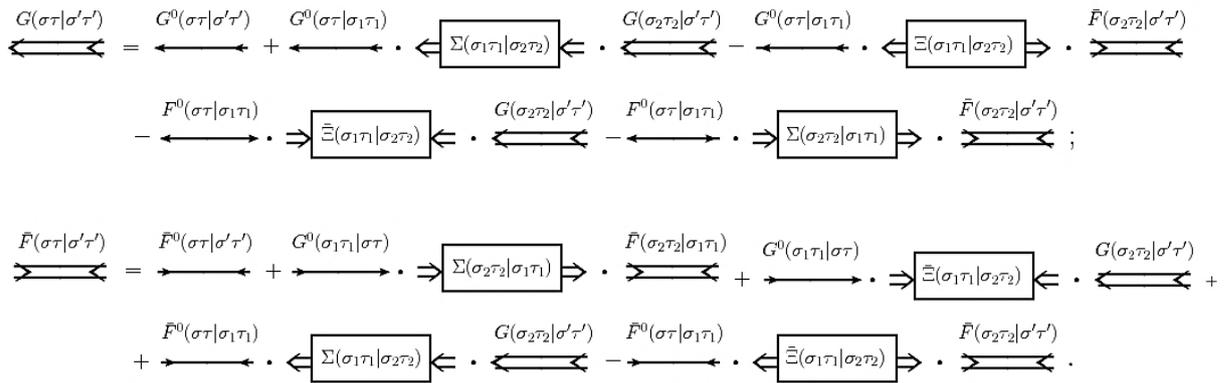


Рис. 5.6. Перенормированные ФГ электронов проводимости.

Тонкая сплошная линия изображает нулевые функции. Двойные тонкие линии изображают перенормированные функции и  $\Sigma$ ,  $\Xi$  и  $\Xi$  – массовые операторы электронов проводимости.

## 5.5. Заключение по пятой главе

В главе получает развитие диаграммный подход сильной связи Москаленко для примесной модели Андерсона-Холстейна. Модель подходит для описания материалов, которые содержат примеси переходных (редкоземельных металлов) с сильным взаимодействием электронов с колебаниями решетки (оптическими фононами). В модели рассматриваются две системы электронов в твердом теле: система электронов проводимости в  $s(p)$ -состояниях и система электронов примесных атомов в  $d(f)$ -состояниях. Модель так же включает систему фононов, взаимодействующих с электронами. При этом кулоновское взаимодействие электронов примесных атомов и взаимодействие электронов с оптическими фононами полагаются сильными, так же происходит  $s(p)$ - $d(f)$ -гибридизация электронных состояний. В главе была поставлена задача на основании теории возмущений выяснить роль одновременно сильного электрон-фононного и кулоновского взаимодействия электронов в явлении высокотемпературной сверхпроводимости в рамках модели Андерсона-Холстейна. Параллельно с этим развить диаграммную технику сильной связи Москаленко применительно к этой модели.

При построении теории возмущений в гамильтониан нулевого приближения помимо части гамильтониана свободных частиц были включены члены, ответственные за оба взаимодействия в модели, а член, ответственный за  $s(p)$ - $d(f)$ -гибридизацию состояний был принят за возмущение. К гамильтониану модели Андерсона-Холстейна было применено каноническое преобразование Ланг-Фирсова. В результате этого преобразования линейный по фононной координате член был исключен, появляются операторы поляронов, образованных из операторов электронов примесных атомов и операторов фононных облаков, так же изменяются параметры модели, а операторы электронов проводимости сохраняются. Для всех частиц и квазичастиц, в том числе поляронов и фононных облаков в модели были даны определения функций Грина, как нормальных, так и аномальных, введенных нами в целях рассмотрения сверхпроводящей фазы модели. Для новой группы из средних образованных из произведений операторов фононных облаков в приближении сильной связи, соответствующему рассматриваемому случаю, была сформулирована обобщенная теорема Вика.

В результате применения теоремы Вика для системы электронов проводимости и фононных облаков и ОТВ для системы примесных электронов и поляронов было построено диаграммное представление функций Грина (как нормальных, так и аномальных) электронов проводимости, поляронов и фононных облаков. Последнее

разложение позволяет исследовать динамику «тяжелых» фононных облаков (отвечающих сильному электрон-фононному взаимодействию) в зависимости от матричного элемента гибридизации s-p состояний. В случае  $T=0$  при возрастании этого параметра коллективная мода фононных облаков затухает.

Мы сформулировали систему уравнений типа Дайсона, определяющую соотношения между полными ФГ примесных электронов и их корреляционными функциями, а также систему уравнений Дайсона для полных ФГ электронов проводимости и их массовых операторов. Было доказано совпадение корреляционной функции и массовых операторов.

## ОБЩИЕ ВЫВОДЫ И РЕКОМЕНДАЦИИ

Все цели диссертации были выполнены. В работе получает развитие диаграммный подход сильной связи [29, 30] для исследования термодинамических свойств сильно коррелированных систем, межорбитального корреляционного эффекта, а также совместного эффекта сильного кулоновского и электрон-фононного взаимодействия на электронные процессы.

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

Диаграммная техника, развиваемая в работе, основывается на теореме Вика для статистических средних хронологически упорядоченного произведения электронных операторов обобщенной на сильно коррелированные системы. Невозможность использования обычной теоремы Вика из-за не билинейности гамильтонианов нулевого приближения, включающих в себя энергию взаимодействия, решается благодаря учету многочастичных структур – неприводимых ФГ или кумулянтов Куба. В этих неприводимых функциях Грина отражены, как спиновые, зарядовые, так и парные флуктуации системы. Обобщенная теорема Вика была использована для систем сильно коррелированных электронов в  $d(f)$ -состояниях во всех моделях, для подсистемы же  $s(p)$ -электронов (электронов проводимости) в двукратно вырожденной примесной модели Андерсона и оптических фононов в модели Андерсона-Холстейна была использована обычная теорема Вика. Для пропагаторов фононных облаков в режиме сильного электрон-фононного взаимодействия так же была сформулирована обобщенная теорема Вика

**Во-первых**, в работе получает развитие 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. Был найден массовый оператор, который при константе разложения в ряд теории возмущений  $\lambda$  равной 1 совпадает с корреляционной функцией. Было 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, был

введен специальный функционал, составленный из скелетных диаграмм оператора эволюции, и произведена вариацию этого функционала по найденному нами массовому оператору. Было найдено, что она равна нулю. Затем положив  $\lambda=1$  и сравнив этот функционал с диаграммами для термодинамического потенциала и, выявив их совпадение, было установлено свойство стационарности термодинамического потенциала модели Хаббарда. Аналогичная теорема была доказана и в сверхпроводящем состоянии. В этом случае предполагается существование сверхпроводящих пар электронов и ненулевых квазисредних Боголюбова. Неприводимые функции Грина в фазе сверхпроводимости могут содержать любое четное число операторов рождения и уничтожения фермионов, тогда как в нормальном – число обоих типов одинаково. В связи с этим было введено понятие квантового зарядового числа, которое автоматически учитывает все возможности рассматривать интерференции частиц и дырок в сверхпроводящем состоянии. Сравнивая полученные результаты с аналогичными для периодической модели Андерсона [30], можно заключить, 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 так же определена спектральная функция. Даны определения электронным функциям Грина и аномальным функциям Грина (для описания сверхпроводящего состояния). В обеих моделях для одночастичных локализованных сильно взаимодействующих электронов были получены уравнения типа Дайсона. Было показано, 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 (среднего поля или первом приближении Хаббарда) для модели Хаббарда была вычислена плотность электронных состояний на уровне Ферми, которая определяется нулевой плотностью состояний. Было показано, 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  $\rho_0((E^2 - \mu^2)/E)$  [152]

В рамках примесной модели Андерсона, просуммировав бесконечный класс диаграмм определенного типа (приближение соответствующее приближению случайных фаз теории слабой связи), было получено приближенное выражение для корреляционных функций в частности, для сверхпроводящих параметров порядка. В результате были найдены два решения для перенормированных локализованных функций Грина d-электронов и определена плотность электронных состояний. 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 проанализированы линейные уравнения для сверхпроводящих параметров порядка и сформулировано условие для реализации синглетной сверхпроводимости и определения критической температуры в системе.

**В третьих,** мы развили 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 преобразованием Ланг-Фирсова, которое свело нашу задачу к рассмотрению движущихся поляронов (электронов окруженных тяжелыми фононными облаками). Исследуя динамику фононных облаков, мы показали, что с ростом параметра гибридизации энергия коллективной моды фононных колебаний падает. Мы также получили уравнения типа Дайсона для поляронных функций Грина в общем случае (включая аномальные функции Грина), и получили совпадение их массовых операторов с массовыми операторами для системы электронов проводимости

**Рекомендации:**

Представляет так же интерес учесть НФГ при анализе ПМХ в рамках двукратно вырожденной МХ, а так же вычисление изменения удельной теплоемкости МХ  $dC/dT$ .

Мы можем предположить, что куперовские пары, образованные локализованными электронами, находящимися в состоянии отсутствия окружения фононных облаков дают более значимый вклад в сверхпроводимость, нежели электроны, образованные парами электронов, находящимися в состоянии с тяжелыми фононными облаками. Это

предположение может подтвердиться при дальнейшем исследовании динамики фононных облаков в рамках модели Андерсона-Холстейна.

#### **Границы полученных результатов:**

В третьей главе было использовано приближение цепочечных диаграмм (учет только членов из ОТВ, которые соответствуют обычной теореме Вика) или приближение Хаббарда-I, соответствующее приближению среднего поля, которого обычного достаточно для рассмотрения нормальной фазы модели. Соответственно, наши вычисления не являются точными.

В четвертой Главе для ФГ электронов примесных атомов мы получили уравнения типа Дайсона. Они определяют ФГ через корреляционную функцию (массовый оператор). Последнее может быть выражено только в форме бесконечного диаграммного ряда, поскольку точного решения не существует. Мы произвели лестничное суммирование диаграмм для корреляционных функций. Это приближение представляет собой обобщение приближения случайных фаз теории возмущений слабой связи. Наше приближение содержит только локальные собственно-энергетические члены. Известно, что такое приближение вполне оправданно для большого координационного числа. Нелокальные члены, соответствующие более высоким приближениям по обратному координационному числу, здесь опускаются. Так же при вычислении корреляционной функций для упрощения расчетов мы учли только вклады статистических весов с нижней энергией (обусловленные собственными значениями энергии гамильтониана нулевого приближения), чей статистический вес преобладает над другими. В нашем случае это триплетное состояние электронов одного узла.

В пятой главе ФГ фононных облаков нулевого порядка были получены с помощью приближения Лапласа в пределе сильной связи  $\alpha \gg 1$ . В этом же приближении была получена теорема Вика для фононных облаков в режиме сильно связанных поляронов.

**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.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] KOLLER, W., MEYER, D., ONO, Y., HEWSON, A. C. First- and second-order phase transitions in the Holstein-Hubbard model. In: *Europhys. Lett.* 2004, vol. 66, nr. 4, pp. 559–564, ISSN 02955075.
- [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] 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
- [15] GUNNARSSON, O. Superconductivity in fullerenes In: *Rev. Modern Phys.* 1997, 69, nr. 2, pp. 575–606. ISSN 1539-0756.
- [16] GEORGES, A., de' MEDICI, L. and MRAVLJE, J., Strong Correlations from Hund's Coupling. *Annual Review of Condensed Matter Physic.* 2013, vol. 4, nr. 1, pp. 137-178. ISSN 1947-5454; 1947-5462.
- [17] RICHARD, P., SATO, T., NAKAYAMA, K., SOUMA, S. et. al. Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy of the Fe-Based  $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$  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.
- [18] FRANCK, J. Pm. *Physical Properties of High Temperature Superconductors IV.* Singapore: World Scientific. 1994, pp. 189–293. ISBN 9814525146, 9789814525145
- [19] 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
- [20] LIU, R., H., WU, T., WU, G., CHEN, H., et al. et al. A large iron isotope effect in  $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  and  $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ . In: *Nature*. 2009, vol 459, pp. 64–67. ISSN 1476-4687, 0028-0836
- [21] SHIRAGE, P.M., KIHOU, K., MIYAQZAWA, K., LEE, CH.-H., et al. Inverse Iron Isotope Effect on the Transition Temperature of the  $(\text{Ba},\text{K})\text{Fe}_2\text{As}_2$  Superconductor. In: *Phys. Rev. Lett.* 2009, vol. 103, nr 25, pp. 257003 {4}. ISSN 0031-9007; 1079-7114
- [22] KHASANOV, R., BENDELE, M., BUSSMANN-HOLDER, A. and KELLER, H. Intrinsic and structural isotope effects in iron-based superconductors. In: *Phys. Rev. B.* 2010, vol. 82, nr. 21, pp. 21250 {4}; ISSN 2469-9950, 2469-9969.
- [23] 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
- [24] 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.
- [25] 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.
- [26] HOLSTEIN, T. Studies of polaron motion: Part I. The molecular-crystal model. 4: Ann. Of Phys. 1969, vol. 8, nr. 3, pp. 325-342. ISSN 0003-4916.
- [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] Theoretical Methods for Strongly correlated electrons. Editors: SEINEFCHAL, D., TREMBLAY, A-M., BOURBONNAIS, C. Canada: CRM series in Mathematical Physics. 2004, 380 p. ISBN 13: 978-0387008950 ; ISBN 10: 0387008950.
- [29] 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.
- [30] 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
- [31] WICK, G. C. The Evaluation of the Collision Matrix. In: Phys. Rev. 1950., vol. 80, nr. 2, pp. 268 – 272. ISSN 0031-899X .
- [32] 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.
- [33] 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.
- [34] 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
- [35] 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).
- [36] МОСКАЛЕНКО, В.А., ПЕРКИНС, Н.Б., Метод канонического преобразования для периодической модели Андерсона. In: ТМФ. 1999, vol. 121, nr. 3, 464–478. ISSN 0564-6162, 2305-3135; MOSKALENKO, V.A., PERKINS, N.B. The canonical transformation method in the periodic Anderson model. In: Theoret. and Math. Phys. 1999, vol. 121, nr. 3, pp. 1654–1665. ISSN 0040-5779, 1573-9333.
- [37] MOSKALENKO, V.A., ENTEL P., MARINARO, M., PERKINS, N.B., HOLTFOR, T.C. Hopping perturbation treatment of the periodic Anderson model around the atomic limit In: Phys. Rev. B. 2001, vol. 63, nr. 24, pp. 245119. ISSN 2469-9950; 2469-9969.
- [38] MOSKALENKO, V.A. Electron-phonon interaction of strong correlated systems. In: TMF. 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.
- [39] MOSKALENKO, V.A. Electron-phonon interaction of strongly correlated systems. II. Strong coupling limit. In: TMF. 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
- [40] MOSKALENKO, V.A., ENTEL, P., DIGOR, D.F. Strong interaction of correlated electrons with phonons: A diagrammatic approach. In: Phys. Rev. B. 1999, vol. 59, nr. 1, pp. 619-635 . ISSN 2469-9950; 2469-9969
- [41] 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. J. Exp. Theor. Phys. 2003, vol. 97, nr. 632–644. ISSN 0044-4510
- [42] MOSKALENKO ,V.A., ENTEL, P., DIGOR, D.F. Strong interaction of correlated electrons with acoustical phonons using the extended Hubbard-Holstein model. In: Phys. Rev. B. 2006, vol. 74, nr. 7, pp. 075109. ISSN 2469-9950; 2469-9969
- [43] 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.
- [44] 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.
- [45] 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.
- [46] ВОНСОВСКИЙ, С.В., ИЗЮМОВ, Ю.А., КУРМАЕВ Э.З. Сверхпроводимость переходных металлов их сплавов и соединений. Москва: Наука. 1977, 384 с.
- [47] OSHNAMA, A., SAITO, S., HAMADA, N., IYAMOTO, Y. Electronic structures of C<sub>60</sub> fullerenes and related materials. In: *J. Phys. Chem. Solids.* 1992, vol. 53, nr. 11., pp. 1457-147, ISSN 0022-3697.
- [48] DE BOER, J.H.; VERWEY, E.J. Semi-conductors with partially and with completely filled 3d-lattice bands. In: *Proc. Phys. Soc.* 1937, vol. 49, nr. 59., pp. 59-71. ISSN 00804630.
- [49] MOTT, N.F. The Basis of the Electron Theory of Metals, with Special Reference to the Transition Metals, *Proc. Phys. Soc. A.* 1949, vol. 62, pp. 416-422, . ISSN 1364-5021, 1471-2946.
- [50] MCWHAN, D.B., REMEIKА, J.P. Metal-Insulator Transition in (V<sub>1-x</sub>Cr<sub>x</sub>)<sub>2</sub>O<sub>3</sub> *Phys. Rev. B.* 1970, vol. 2., nr. 9, pp. 3734-3750. ISSN 2469-9950; 2469-9969.
- [51] БУГАЕВ, А.А., Фазовый переход металл-полупроводник и его применение. Ленинград: Наука. 1978, 183 с
- [52] MOTT, N. F., PEIERLS, R. Discussion of the paper by de Boer and Verwey. *Proc. Phys. Soc. A.* 1937 vol. 49 , nr. 4, p. 72. ISSN 1364-5021, 1471-2946.
- [53] MOTT, N. F. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. In: *Proc. Phys. Soc. A.* 1949, vol. 62, nr. 7, p. 416—422. ISSN 1364-5021, 1471-2946.
- [54] MOTT, N.F. On the transition to metallic conduction in semiconductors. *Canad. J. Phys.* 1956, vol. 34, nr. 12A, pp. 1356-1368. ISSN 0008-4204 ; 1208-6045
- [55] MOTT, N.F. The transition to the metallic state. In: *Philosophical Magazine.* 1961, vol. 6, nr. 62, pp. 287-309. ISSN 1478-6435.
- [56] MOTT, Н.Ф. Переходы металл-изолятор. пер. с англ. под редакцией С. В. ВОНСОВСКОГО. Москва:, Наука. 1979, с. 342 .

- [57] IMADA, M., FUJIMORI, A., TOKURA, Y. Metal-insulator transitions. In: Rev. Modern Phys. 1998, vol. 70, nr.4, pp. 1039–1263. ISSN 1539-0756.
- [58] STEGLICH, F., AARTS J., Bredl C.D., LIEKE W., MESCHEDE D., Franz W. and Schafer J. In: Phys. Rev. Lett. 1979, vol. 43, nr. 25, pp.1892-1896. ISSN 0031-9007; 1079-7114.
- [59] STEWART, G.R., Heavy-fermion systems. 1984. In: Rev. Mod. Phys vol. 56, nr. 4, pp. 755-757. ISSN 0034-6861, 1539-0756.
- [60] BEDNORZ, J. G.; MÜLLER, K. A. Possible high T<sub>c</sub> superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. In: Zeitschrift für Physik B. 1986 ,vol. 64, nr. 2, pp. 189–193. ISSN :1431-584X
- [61] Wu, M. K., ASBURN, J. R., TORNG, C. J., P. HOR, H., MENG R. L., GAO L., Z. J. Huang, Y. Q. Wang, and C. W. Chu, Superconductivity at 93 K in a new mixed-phase Y-Ba-Cu-O compound system at ambient pressure. In: Phys. Rev. Lett. 1987. vol. 58, nr. 9, pp. 908-910. ISSN 0031-9007; 1079-7114.
- [62] PUTILIN, S.N., ANTIPOV, E.V., CHMAISSEM, O., Marezio, M. Superconductivity at 94 K in HgBa<sub>2</sub>Cu<sub>0.4+δ</sub> In: Nature. 1993, vol. 362, pp.226-228. ISSN 1476-4687, 0028-0836
- [63] АБАКУМОВ, А. М., АНТИПОВ, Е. В., КОББА, Л. М., КОПНИН, Е. М., ПУТИЛИН, С.Н. Шпанченко Р. В. Сложные оксиды со структурами когерентного срастания. In: Успехи химии. 1995, vol.64, nr. 8., p.769-780. ISSN: 0042-1308 , ISSN: 1817-5651; Russian Chemical Reviews. 1995, vol. 64, nr. 8 , pp. 769–780. ISSN 0036-021X , 1468-4837
- [64] SOMAYAZULU, M., AHART, M., MISHRA A. K. et. al. Superconductivity of LaH<sub>10</sub> and LaH<sub>16</sub> polyhydrides Evidence for Superconductivity above 260 K in Lanthanum Superhydride at Megabar Pressures. In: Phys. Rev. Lett. 2019, vol. 122, nr. 2, pp. 027001 {6}. ISSN 0031-9007; 1079-7114
- [65] TANIGAKI, K., EBBESEN, T., SAITO, S. et al., Superconductivity at 33 K in Cs<sub>x</sub>Rb<sub>y</sub>C<sub>60</sub>. In: Nature. 1991, vol. 352, pp. 222-223. ISSN: 1476-4687; 0028-0836
- [66] PALSTRA, T.M., ZHOU, O., IWASA, Y., SULEWSKI, P.E., FLEMING, R.M., and ZEGARSKI, B.R., Superconductivity at 40K in cesium doped C<sub>60</sub>. Solid State Commun 1995,vol. 93, nr. 4, pp. 327-330. ISSN 0038-1098
- [67] The First Non-Cuprate Na<sub>0.05</sub>WO<sub>3</sub> Surface-Doped Tungsten-Bronze. High-temperature Superconductor High– T<sub>c</sub> Update. 13(9), May,1999.
- [68] REICH, S., LEITUS, G., TSSABA, Y. et al. Localized High-T<sub>c</sub> Superconductivity on the Surface of Na-Doped WO<sub>3</sub>. In: Journal of Superconductivity. 2000, vol. 13, pp. 855–861. ISSN 0896-1107; 1572-9605.

- [69] AKIMITSU J., Symposium on Transition Metal Oxides Sendai, January 10. 2001;
- [70] TAKAHASHI, T., SATO, T., SOUMA, S., MURANAKA, T., AKIMITSU, J. PHigh-Resolution Photoemission Study of MgB<sub>2</sub>. In: Phys. Rev. Lett. 2001, 86, p. 4915. ISSN 0031-9007; 1079-7114.
- [71] KAMIHARA, Y., Takumi, W., HIRANO, M. and HOSONO H. Iron-Based Layered Superconductor La[O<sub>1-x</sub>F<sub>x</sub>]FeAs (x = 0.05–0.12) with T<sub>c</sub> = 26 K. In: Journal of the American Chemical Society. 2008. vol. 130, nr. 11., pp. 329-3297. ISSN: 0002-7863; 1520–5126.
- [72] MEIER, W.R., DING, Q., KREYSSIG, A. et al. Hedgehog spin-vortex crystal stabilized in a hole-doped iron-based superconductor. In: NPJ Quant Mater. 2018, vol 3, nr.5 . ISSN 2397-4648
- [73] LI D., LEE K., WANG B. Y., OSADA M., CROSSLEY S., LEE H. R. et al, Superconductivity in an infinite-layer nickelate, Nature 2019, vol. 572, p. 624–627 ISSN 1476-4687; 0028-0836
- [74] OSADA M., WANG B. Y., GOODGE B. H., LEE K. et al. A superconducting praseodymium nickelate with infinite layer structure, Nano Lett 2020, vol. 20, 5735-5751, ISSN:15306992, 15306984
- [75] COOPER, L., Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas. Phys. Rev. 1956, vol. 104, nr. 3, pp. 1189 -1190., ISSN 0031-899X, 1536-6065
- [76] BARDEN, J. COOPER, L.N., SCHRIEFFER, L.R. Microscopic Theory of Superconductivity. In: Phys. Rev. 1957, Vol. 106, nr. 1, 162–164 ; ISSN 0031-899X, 1536-6065.
- [77] BARDEN, J. COOPER, L.N., SCHRIEFFER, L.R. Theory of Superconductivity Phys. Rev. 1957, 108, nr. 5, 1175-1204; ISSN 0031-899X, 1536-6065.
- [78] БОГОЛЮБОВ, Н.Н., О новом методе в теории сверхпроводимости. I. In: ЖЭТФ. 1958, vol. 34, pp. 58-65. ISSN 0044-4510; BOGOLIUBOV, N.N., A new method in the theory of superconductivity. I. In: Soviet Physics JETP. 1958, vol. 34, pp. 41–46. ISSN 0038-5646.
- [79] GOR'KOV, L. P. On the energy spectrum of superconductors. In: Soviet physics JETP. 1958. Vol. 34 (7), nr. 3, pp. 505-508. ISSN 0038-5646.; ГОРЬКОВ Л. П. ОБ энергетическом спектре сверхпроводников, ЖЭТФ 1958 ISSN 0044-4510, vol. 34, nr. 3, p. 735-739;. GORKOV L.P, On the energy spectrum of superconductors, Sov. Phys. JETP 1958, vol. 7, nr. 3, pp. 505-508 . ISSN 0038-5646
- [80] MAXWELL E. Isotope Effect in the Superconductivity of Mercury. In: Phys. Rev. 1950, vol. 78, nr. 4, pp. 477-477, ISSN 0031-899X, 1536-6065

- [81] БОГОЛЮБОВ, Н.Н. Избранные труды по статистической физике (1909-1992). Москва : Изд-во МГУ. 1979, p. 343. ISBN 5-1351354-A : 0.00.
- [82] БОГОЛЮБОВ, Н.Н., ТОЛМАЧЕВ В. В., ШИРКОВ Д. В. Новый метод в теории сверхпроводимости. Москва: Изд. АН СССР. 1958, 128 с.
- [83] MOSKALENKO, V.A. Сверхпроводимость металлов с учетом перекрытия энергетических полос. In: Fiz. Met. Metalloved. 1959, vol. 8, nr. 4, pp. 503; Phys. Met. and Metallog. 1959, vol. 8, nr. 25, p. 503
- [84] SUHL, H., MATTHIAS B.T., Walker L.R. A Reverse Approach to Superconductivity In: Phys. Rev. Lett. 1959, vol. 3, nr., pp. 552. ISSN 0031-9007; 1079-7114
- [85] PALISTRANT, M.E., URSU, V.A. Thermodynamic and Magnetic Properties of Superconductors with Anisotropic Energy Spectrum, MgB<sub>2</sub>. In: J. Supercond. Nov. Mag. 2008, vol. 21, nr. 3, pp. 171-176. 2008 ISSN 1557-1947, 1557-1939
- [86] ПАЛИСТРАНТ М.Е., ЧЕБОТАРЬ И.Д., УРСУ В.А., Верхнее критическое поле H<sub>c2</sub> в анизотропных сверхпроводниках с переменной плотностью носителей заряда, применение теории к допированному MgB<sub>2</sub>. In: ЖЭТФ. 2009, vol. 136, nr. 2(8), pp. 272-281. ISSN 0044-4510; PALISTRANT, M.E., CHEBOTAR, I.D., URSU, V.A. Upper critical field H<sub>c2</sub> in anisotropic superconductors with varying charge carrier density: application of the theory to doped MgB<sub>2</sub>. In: JETP. 2009, vol. 109, nr. 2. pp. 227-236. ISSN 0038-5646
- [87] SKORNYAKOV, S. L., EFREMOV, A. V, SKORIKOV, N. A., KOROTIN M. A. et. al. Classification of the electronic correlation strength in the iron pnictides: The case of the parent compound BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub>. In: Phys. Rev. B. 2009, vol. 80, nr. 9, pp. 092501{4}. ISSN 2469-9950; 2469-9969.
- [88] SCALAPINO, D. J. Superconductivity and spin fluctuations. In: Journal of Low Temperature Physics. 1999, vol. 117, pp. 179-188. ISSN 15737357, 00222291
- [89] HIRSCH, J. E. Attractive Interaction and Pairing in Fermion Systems with Strong On-Site Repulsion In: Phys. Rev. Lett. 1985. vol. 54, nr. 12, pp. 1317-1320. ISSN 0031-9007; 1079-7114
- [90] SCALAPINO, D. J., OH, E. L. and HIRSCH, J. E. d-wave pairing near a spin-density-wave instability. In: Phys. Rev. B. 1986., vol. 34, nr. 11, pp. 8190-8192. ISSN 0031-899X, 1536-6065.
- [91] ANDERSON, P. The Resonating Valence Bond State in La<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub> and Superconductivity. In: Science. 1987, vol. 235(4793), pp. 1196{8}. ISSN 0036-8075.

- [92] BASTIDE, C. Repulsion-induced superconductivity in a multiband Hubbard model. In: Phys. Rev. B. 1991, vol. 41, 807-810; Erratum Phys. 1990 Rev. B ,vol. 43, pp.1210. ISSN 2469-9950; 2469-9969.
- [93] BASTIDE, C. , LACROIX. The Anderson lattice in the weak-hopping limit: superconductivity induced by dynamic interactions.In: J. Phys. C: Solid State Phys. 1988, vol. 21, pp. 3557-3576. ISSN: 0022-3719
- [94] ДИГОР, Д.Ф., ЕНТЕЛ, П., МАРИНАРО, М., МОСКАЛЕНКО, В.А., ПЕРКИНС, Н.Б. О возможности образования связанных пар в периодической модели Андерсона. In: ТМФ. 2001, vol. 127, nr. 2, pp. 304–316 ISSN 0564-6162, 2305-3135; DIGOR, D.F., ENTEL, P., MARINARO, M. et al. The Possibility of Forming Coupled Pairs in the Periodic Anderson Model. In: Theoret. and Math. Phys. 2001, vol. 127, nr. 2, pp. 664–675. . ISSN 0040-5779, 1573-9333
- [95] MINGPU, Q.,CHIA-MIN, CH., HAO, SH., ETTORE, V. et al, Absence of Superconductivity in the Pure Two-Dimensional Hubbard Model. In: Phys Rev X. 2020, vol. 10, nr. 3, p. 031016. ISSN: 2160-3308.
- [96] DONG, X., DEL, RE L. , TOSCHI, A. , GULL, E. Mechanism of Superconductivity in the Hubbard Model at Intermediate Interaction Strength. In: Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2022. ISSN 0027-8424,1091-6490
- [97] VOLLHARDT, D., BYCZUK, K., KOLLAR, M., Dynamical Mean-Field Theory. In: Strongly Correlated Systems. Springer Series in Solid-State Sciences, vol 171, Berlin, Heidelberg: Springer, 2012, pp. 203-236. ISBN: 978-3-642-21830-9,978-3-642-21831-6
- [98] KOTLIAR, G., SAVRASOV, S. V., HAULE, K., OUDOVENKO, V. S., PARCOLETTO, O., MARIANETTI, C. A. Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory. In: Rev. Mod. Phys. 2006, vol. 78, nr. 3, p. 865-951. ISSN 0034-6861; 1539-0756
- [99] GEORGES, A., KOTLIAR, G, KRAUTH, W., ROZENBERG M. J. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. In: Rev. Mod. Phys. 1996, 8, vol. 8, nr. 13, pp. 13– 125. ISSN 0034-6861, 1539-0756
- [100] KOTLIAR, G., VOLLHARDT, D. Strongly correlated materials: insights from dynamical mean-field theory In: Phys. Today. 2004, vol. 57, nr. pp. 53-59; ISSN 0031-922
- [101] KUBO, R. Generalized Cumulant Expansion Method. In: J. Phys. Soc. Jpn. 1962, vol. 17, nr. 7, pp. 1100-1120. ISSN 1347-4073, 0031-9015.

- [102] VAKS, V.G, LARKIN, A.I., Pikin, S.A. Thermodynamics of an Ideal Ferromagnetic Substance. In: ЖЭТФ. 1968, vol. 53, nr. 1, p. 281-299. ISSN 0044-4510.; JETP, vol. 26, nr. 1, pp. 188-199. ISSN 0038-5646
- [103] ИЗЮМОВ Ю. А., КАССАН-ОГЛЫ Ф. Л., СКРЯБИН Ю. М., Полевые методы в теории ферромагнетизма, Москва: Наука. 1974, 223 с.
- [104] СЛОБОДЯН, П. М., СТАСЮК, И. В., Диаграммная техника для операторов Хаббарда, ТМФ. 1974, vol. 19, nr 3. pp. 423-429. ISSN 0040-5779, 1573-9333; SLOBODYAN, P.M., STASYUK, I.V. Diagram technique for Hubbard operators. In: Theoret. and Math. Phys. 1974, vol.19, nr. 3, pp.616–620. ISSN: 0040-5779 , 1573-9333
- [105] ЗАЙЦЕВ, Р. О. Диаграммная техника для модели Хаббарда. In: ЖЭТФ. 1975, vol. 68, nr.1., pp. 207-215; 1976, vol. 70, nr. 3., pp. 1100-1111. ISSN 0044-4510; ZAITSEV, R.O., Generalized diagram technique and spin waves in an anisotropic ferromagnet, In: JETP, vol. 41, nr. 1, p. 100-103. ISSN 0038-5646
- [106] ИЗЮМОВ, Ю.А., КАЦНЕЛЬСОН, М.И., СКРЯБИН Ю.Н., Магнетизм коллективизированных электронов. Москва: Физико-математическая литература. 1994, 368 с. ISBN 5-02-014623-4
- [107] БАРАБАНОВ, А.Ф., КИКОИН, К.А., МАКСИМОВ, Л.А., Диаграммная техника для обобщенной модели Хаббарда, ТМФ. 1975, vol. 25, nr. 1, p. 87–96. ISSN: 0564-6162, 2305-3135; BARABANOV, A.F., KIKOIN, K.A., MAKSIMOV, L.A. Graphical technique for the generalized Hubbard model. In: Theoret. and Math. Phys. 1975, vol. 25, nr. 1, 997–1003. ISSN: 0040-5779 , 1573-9333
- [108] БАРАБАНОВ, А.Ф., КИКОИН, К.А., МАКСИМОВ, Л.А. Диаграммная техника для моделей Андерсона. In: ТМФ. 1974, vol. 20, nr. 3, p. 364–380 ISSN: 0564-6162, 2305-3135; BARABANOV, A.F., KIKOIN, K.A., MAKSIMOV, L.A. Diagram technique for the Anderson model. In: Theor Math Phys. 1974, vol. 20, nr. pp. 881–892. ISSN: 0040-5779 , 1573-9333
- [109] METZNER W. Linked-cluster expansion around the atomic limit of the Hubbard model. In: Phys. Rev. B 1991, vol. 43, nr. 10, pp. 8549-8563. ISSN 2469-9950, 2469-9969
- [110] PAIRAULT, S., SÉNÉCHAL, D. and TREMBLAY, Y. Strong-coupling perturbation theory of the Hubbard model. In: Eur. Phys. J. B. 2000, vol. 16, pp. 85-105. ISSN: 1434-6028, 1434-6036.
- [111] BOIES, D., BOURBONNAIS, C., TREMBLAY A., One-Particle and Two-Particle Instability of Coupled Luttinger Liquids, Phys. Rev. Lett. 1995, vol. 74, nr. 7, p. 968-971.

- ISSNs 0031-9007; 1079-711; BOURBONNAIS C., Ph.D. thesis, Université de Sherbrooke, 1985;
- [112] SARKER, S. K., A new functional integral formalism for strongly correlated Fermi systems. In: J. Phys. C. 1988, vol. 21, nr. 18, p. L667; ISSN 1932-7447, 1932-7455
- [113] SHARMAN, A. One-loop approximation for the Hubbard model. In: Phys. Rev. B. 2006 vol. 73, nr.15, pp. 155105 {8}. ISSN 2469-9950; 2469-9969.
- [114] LARKIN, A.I. Passage of Particles through a Plasma. ЖЭТФ. 1960, vol. 37, nr. 1, pp. 264-300; JETP. 1960, vol. 10, nr. 1, pp. 186-192. ISSN 0044-4510.
- [115] BARNES, S. E. New Method for the Anderson Model. In: J. Phys. F. Met. 1976., vol. 6., nr. 7, pp. 1375-1380. ISSN: 0305-4608
- [116] BARNES, S. E., New method for the Anderson model. II. The  $U=0$  limit. In: J. Phys. F. Met. 1977., vol. 7., nr. 12, pp. 2631-2637. ISSN: 0305-4608
- [117] COLEMAN, P. New approach to the mixed-valence proble. In: Phys. Rev. B. 1984, vol. 29, nr. 6, pp. 3035-3044. ISSN 2469-9950 ; 2469-9969.
- [118] МОСКАЛЕНКО В. А., Теория возмущений для периодической модели Андерсона, ТМФ. 1997, vol.110, nr. 2, p. 308-322. ISSN 0564-6162, 2305-3135; MOSKALENKO, V. A., Perturbation theory for the periodic Anderson model, Theoretical and Mathematical Physics. 1997, vol.110, pp. 243-255.
- [119] МОСКАЛЕНКО, В. А. Теория возмущений для периодической модели Андерсона. II. Сверхпроводящее состояние. In: ТМФ. 1998, vol. 116, nr. 3, pp. 456-473; ISSN 0564-6162, 2305-3135; MOSKALENKO V. A. , Perturbation theory for the periodic Anderson model: II. Superconducting state. In: Theoret. and Math. Phys. 1998, vol. 116, nr. 3, pp. 1094-110. ISSN: 0040-5779 , 1573-9333
- [120] МЕДВЕДЕВ, И.Г. Новая диаграммная техника для модели Андерсона. In: ТМФ. 1996, vol. 109, nr. 2, pp. 279-294 ISSN 0564-6162, 2305-3135; MEDVEDEV, I. G., New diagram technique for the Anderson model. In: Theoret. and Math. Phys. 1996, vol. 109, nr. 2 , pp. 1460–1472. ISSN 0040-5779 , 1573-9333
- [121] MOSKALENKO V.A., ENTEL P., DIGOR D. F., DOHOTARU L.A. Competing spin waves and superconducting fluctuations in strongly correlated electron systems. In: Phase Transitions. 2005, vol. 78, nr. 1-3, pp. 277-284, ISSN 0141-1594.
- [122] PRUSCHKE, Th., BULLA, R. Hund's coupling and the metal-insulator transition in the two-band Hubbard model, arXiv: cond-mat/0411186.

- [123] DIDUKH, L., SKORENKYY, Yu., DOVHOPYATY, Yu, HANKEVYCH, V. Metal-insulator transition in a doubly orbitally degenerate model with correlated hopping. In: Phys. Rev. B, vol. 61, nr. 12, pp. 7893-7908. ISSN 2469-9950, 2469-9969
- [124] KOGA, A., IMAI, Y., KAWAKAMI, N. Stability of a metallic state in the two-orbital Hubbard model. In: Phys. Rev. B, 2002, vol. 66, nr. 16, pp. 165107{7}. ISSN 2469-9950; 2469-9969 .
- [125] KOGA, A., OHASHI, T., IMAI, Y., SUGA, S.-I, KAWAKAMI, N., Effects of Degenerate Orbitals on the Hubbard Model. In: J. Phys. Soc. Jpn. 2003, vol. 72, nr. 5, pp. 1306-1307 . ISSN 1347-4073, 0031-9015
- [126] INABA, K., KOGA, A., Metal-insulator transition in the two-orbital Hubbard model at fractional band fillings: self-energy functional approach. In: J. Phys. Soc. Jpn. 2007, vol. 76, nr. 9, p. 094712. ISSN 1347-4073, 0031-9015
- [127] KOGA A., KAWAKAMI N., RICE T.M., SIGRIST M., Mott transitions in the multi-orbital systems. In: Physica B: Condensed Matter. 2005, vol. 359, nr., pp. 1366-1368. ISSN 09214526
- [128] RONG, Y., QIMIAO, Si. Mott transition in multiorbital models for iron pnictides. In: Phys. Rev. B. 2011, vol. 84, nr. 24, pp. 235115 –{23}. ISSN 2469-9950; 2469-9969.
- [129] RYEE, S., MYUNG, J. H., and CHO, I S. Hund Physics Landscape of Two-Orbital Systems, Phys. Rev. Lett. 2021, vol. 126, nr. 20, p. 206401. ISSN 0031-9007;1079-7114
- [130] LEE, T.-H., CHUBUKOV, A., MIAO, H., KOTLIAR, G., Pairing Mechanism in Hunds Metal Superconductors and the Universality of the Superconducting Gap to Critical Temperature. In: Phys. Rev. Lett. . 2018, vol. 121, nr. 18, p. 187003{7}. ISSN 0031-9007; 1079-7114
- [131] NISHIKAWA Y., HEWSON A. C., Study of Hund's rule coupling in models of magnetic impurities and quantum dots. In: Phys. Rev. B, Condensed matter, vol. 86, nr. 24, pp. 245131-{1}– 245131-{6}. ISSN 2469-9950 ; 2469-9969.
- [132] KUBO, K., HIRASHIMA, D. S., Effects of the Hund's rule coupling in an orbitally degenerate Anderson Model. In: J. Phys. Soc. Jpn. 1999, vol. 68, pp. 2317-2325. ISSN 1347-4073, 0031-9015.
- [133] FABRIZIO M., HO A. F., DE LEO L., SANTORO G. E., Nontrivial Fixed Point in a Twofold Orbitally Degenerate Anderson Impurity Model. In: Phys. Rev. Lett. 2003, vol. 91, nr. 24, pp. 246402{ 4}. ISSN 0031-9007; 1079-7114.

- [134] LEO, L. De, FABRIZIO, M., Spectral properties of a two-orbital Anderson impurity model across a non-Fermi-liquid fixed point. In: Phys. Rev. B. 2004, vol. 69, nr. 24, pp. 245114, 18. ISSN 2469-9950; 2469-9969.
- [135] KALRA, M.L., UPADHYAYA, U.N., Role of the electron-phonon interaction in the insulator-metal transition. In: Nuov Cim B, 1977, vol. 41, 151–175. ISSN 0369-3554.
- [136] TEZUKA, M., ARITA, R., AOKI, H. Phase diagram for the one-dimensional Hubbard-Holstein model: A density-matrix renormalization group study. In: Phys. Rev. B. 2007, vol. 76, nr. 15, pp. 155114 {11}. ISSN 2469-9950; 2469-9969.
- [137] KARAKUZU, S., LUCA, F., TOCCHIO, Sorella, S., and Becca, F. Superconductivity, charge-density waves, antiferromagnetism, and phase separation in the Hubbard-Holstein model. In: Phys. Rev. B. 2017, vol. 96, nr. 20, pp. 205145 {10}. ISSN 2469-9950; 2469-9969
- [138] YUNKYU, B. Effects of phonon interaction on pairing in high- $T_c$  superconductors. In: Phys. Rev. B. 2008, vol. 78, nr. 7, pp. 075116. ISSN 2469-9950; 2469-9969.
- [139] ZIMANYI, G. T., KIVELSON, S. A., and LUTHER, A. Superconductivity from Predominantly Repulsive Interactions in Quasi One-Dimensional Systems. In: Phys. Rev. Lett. . 1988, vol. 60, nr. 20, pp. 2089-2092. ISSN 0031-9007; 1079-7114.
- [140] HUANG, W.-M., SHIH, H.-Y., WANG, F., LIN, H.-H. Anomalous isotope effect in phonon-dressed iron-based superconductor. Sci. Rep. 2019, vol. 9, pp. 5547. ISSN 2045-2322.
- [141] RAMAKUMAR, R., DAS, A.N., Polaron cross-overs and d-wave superconductivity in Hubbard-Holstein model. In: Eur. Phys. J. B. 2004, vol. 41, pp. 197–200. ISSN: 1434-6028.
- [142] CHEBROLU, N. R., CHATTERJEE, A. Spectral density method to Anderson-Holstein model AIP Conf. Proc. 2015, vol.1665, p. 090042
- [143] ЗУБАРЕВ, Д.Н. Двухвременные ФГ в статистической физике. In: УФН. 1960, vol. 71, nr. 1, pp. 71–116 ISSN 0042-1294, 1996-6652; . ZUBAREV, D N. Double-time Green functions in statistical physics. In: Sov. Phys. Usp. 1960, vol. 3, nr. 3, pp. 320–345. ISSN: 1063-7869. ISSN 1063-7869, 1468-4780
- [144] MATSUBARA, T. A. New Approach to Quantum-Statistical Mechanics. In: Prog. Theor. Phys. 1955, vol. 14, nr. 4, pp. 351-378. ISSN: 0033-068X; 1347-4081.
- [145] АБРИКОСОВ, А.А., ГОРЬКОВ, Л.П., ДЗЯЛОШИНСКИЙ, И.Е., Методы квантовой теории поля в статистической физике, Москва : Физматгиз. 1962, 443 с.
- [146] MAHAN, G.D. Many-particle physics, New York; London: Plenum press. 1993, 1032 p, ISBN 0-306-43423.

- [147] DYSON, F. J. The S Matrix in Quantum Electrodynamics. In: Phys. Rev., vol. 75, nr 11, pp. 1736-1755. ISSN: 0031-899X; 1536-6065.
- [148] MOSKALENKO, V.A. , KON, L.Z., Diagram technique for the Hubbard model. Ladder diagram summation In: Condensed Matter Physics. 1998, vol. 1, nr 1(13), pp. 23–39, ISSN 1607324X.
- [149] KOGA, A., SHIBA, H., Stability of Non-Fermi Liquid in Kondo Effect due to  $(5=f) 2$  Configuration. In: J. Phys. Soc. Japan. 1997, vol. 66, pp. 1485–1494. ISSN: 0031-9015; 1347-4073.
- [150] OLES, A. M. Correlation effects in ferromagnetism of transition metals, Phys. Rev. B. 1983, vol. 28, nr. 1, pp. 327–339. ISSN 2469-9950, 2469-9969.
- [151] BLOCH, C., Diagram Expansions in Quantum Statistical Mechanics: Studies in statistical mechanics, vol. 3, North-Holland Pub. Co., Interscience Publishers, distributors., 1965, p. 388.
- [152] ИЗЮМОВ, Ю.А., СКРЯБИН, Ю.Н., Статистическая механика магнитоупорядоченных систем, Москва: Наука. 1987, p. 264

## ДЕКЛАРАЦИЯ ОБ ОТВЕТСТВЕННОСТИ

Нижеподписавшийся, заявляю под личную ответственность, что материалы, представленные в докторской диссертации, являются результатом личных научных исследований и разработок. Осознаю, что в противном случае, буду нести ответственность в соответствии с действующим законодательством.

Чеботарь Ирина \_\_\_\_\_

20.11.2024

## CURICULUM VITAE

### ПЕРСОНАЛЬНАЯ ИНФОРМАЦИЯ



Имя **Ирина Чеботарь**  
Рабочий адрес **Кишинев, ул. Академией, 5**  
Рабочий телефон **022 738084**  
Э-почта **chebotar.irina@gmail.com,**  
**irina.cebotari@usm.ifa.md**  
Дата Рождения **10 июля 1985**

### ОПЫТ РАБОТЫ

- 2023-н.в.** Научный сотрудник лаборатории «Квантовой фотоники», Институт Прикладной Физики, Государственный университет Молдовы, MD-2028, ул. Академией, 5
- 2018-2022** Научный сотрудник лаборатории «Теоретической физики им. Всеволода Москаленко» Институт Прикладной Физики Академии Наук Молдовы, MD-2028, ул. Академией, 5
- 2008-2018** Научный сотрудник лаборатории «Квантовой статистики и атомного ядра» Институт Прикладной Физики Академии Наук Молдовы, MD-2028, ул. Академией, 5
- 2006-2008** Ведущий инженер лаборатории «Квантовой статистики и атомного ядра»

### ОБРАЗОВАНИЕ

- 2008-2011** Аспирантура, Университет Академии Наук Молдовы, специальность 131.01 – Математическая физика
- 2008** Магистратура, физический Факультет, Государственный университет Молдовы; специальность – теоретическая физика.  
Степень магистра
- 2002-2007** Физический факультет, Государственный университет Молдовы  
Специальность: Физика. Специализация: Теоретическая Физика

### ТЕХНИЧЕСКИЕ НАВЫКИ И КОМПЕТЕНЦИЯ

Навыки работы Microsoft Office, LaTeX,  
Mathematica, JaxoDraw

**ВЛАДЕНИЕ ЯЗЫКАМИ** Русский язык (родной), румынский (B1),  
английский язык (B1)

**НАУЧНЫЕ ИНТЕРЕСЫ** Физика сильно коррелированных систем,  
высокотемпературная сверхпроводимость,  
многозонная сверхпроводимость

## СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ:

1. PALISTRANT, M., SEBOTARI, I. URSU, V.A. The microscopic theory of the upper critical field  $H_{c2}$  in two-band systems in the magnetic field directed parallel and perpendicular to the plane (ab). Application to  $MgB_2$ . In: Moldavian Journal of the Physical Sciences. 2008, nr. 3(7), pp. 292-311. ISSN 1810-648X.
2. ПАЛИСТРАНТ, М.Е., ЧЕБОТАРЬ, И. Д., УРСУ В. А. Верхнее критическое поле  $H_{c2}$  в анизотропных сверхпроводниках с переменной плотностью носителей заряда. Применение теории к допированному  $MgB_2$ . In: ЖЭТФ. 2009, vol. 36, nr. 2(8), p. 272-281. Palistrant, M. E., Chebotar, I. D., Ursu, V. A. Upper critical field  $H_{c2}$  in anisotropic superconductors with varying charge carrier density: Application of the theory to doped  $MgB_2$ . In: ЖЭТФ. 2009, vol. 109, nr. 2, pp. 227 – 236
3. MOSKALENKO, V. A., DOHOTARU, L.A., SEBOTARI, I.D. Diagram analysis of the Hubbard model: stationarity property of the thermodynamic potential. In: ЖЭТФ. 2010, vol. 138, nr. 1, pp. 107-115;
4. МОСКАЛЕНКО, В. А., ДОХОТАРУ, Л. А., ЧЕБОТАРЬ, И. Д., ДИГОР, Д. Ф., “Диagramмная теория для вырожденной двухорбитальной модели Хаббарда”. In: ТМФ. 2011, vol. 168, nr. 3, pp. 490–502; Theoret. and Math. Phys. 2011, vol. 168, nr. 3, pp. 1278–1289.
5. MOSKALENKO, V.A, DOHOTARU, L.A., DIGOR, D.F, SEBOTARI, I. D. Stationary property of the thermodynamic potential of the Hubbard model in strong coupling diagrammatic approach for superconducting state. In: Low Temperature Physics. 2012, vol. 138, nr. 10, pp. 1167-1174
6. MOSKALENKO V. A., DOHOTARU L. ADIGOR., D. F., CHEBOTAR', I. D. Diagram theory for the twofold-degenerate Anderson impurity model. In: TMF. 2014, vol. 178, nr. 1, 131–146; Theoret. and Math. Phys. 2014, vol. 178, nr. 1, pp. 115–129
7. MOSCALENCO, V.A., DOHOTARU, L.A.; DIGOR, D.F., SEBOTARI, I.D., Superconducting state in the twofold degenerate Anderson impurity model. In: Proceedings. 2nd International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering with related German-Moldovan Workshop on Novel Nanomaterials for Electronic, Photonic and Biomedical Applications, April 18-20. 2013, Chisinau, Moldova, p. 169—172. ISBN: 978-9975-62-343-8.
8. MOSKALENKO, V. A., DOHOTARU, L. A., DIGOR, D. F., SEBOTARI, I. D., Dynamics of phonon clouds of correlated polarons. In: Theoretical and Mathematical Physics. 2014, vol. 179, nr. 2, pp. 588–595;
9. MOSKALENKO V.A., DOHOTARU L.A., DIGOR D.F., SEBOTARI, I.D. Strong coupling diagrammatic approach to the Anderson-Holstein Hamiltonian. In: Proceedings of the Romanian Academy, series A, vol. 15, nr. 2. 2014, pp. 139–145.
10. MOSKALENKO, V.A.; DOHOTARU, L.A.; DIGOR, D.F.; SEBOTARI, I.D. Investigation of the Generalized Anderson Impurity Model. In: IFMBE Proceedings. vol. 55. Springer Science + Business Media, Singapore. 2016. pp. 2009-2012
11. PALISTRANT, M. E., SEBOTARI, I. D. On some achievements of Moldovan physics and priorities in the formation of modern directions of the condensed matter theory. In: Moldavian Journal of the Physical Sciences. 2018, nr. 1-2(17), pp. 12-19.
12. PALISTRANT, M.E., SEBOTARI, I.D., PALISTRANT, S. A., The Influence of the external magnetic field on the electronic density of states of quasi-1d system in the mixed phase of superconductivity and spin density wave. In: IFMBE Proceedings, 18-21 septembrie 2019, Chişinău. Switzerland: Springer Nature Switzerland AG. 2020, Ediția a 4-a, pp. 181-185.
13. ПАЛИСТРАНТ, Н.А., БИВОЛ, В.В., УРСУ, В.А., ЧЕБОТАРЬ, И.Д., ПАЛИСТРАНТ, С.А Между рассветом и закатом: жизнь, наполненная глубоким смыслом. 2020, vol. 56,

nr. 6, pp. 86-92.

14. ЧЕБОТАРЬ, И. Д. Исследование систем сильно коррелированных электронов, взаимодействующих между собой и с фононами. Диаграммный подход. In: ЭОМ. 2023, vol. 59, nr. 5, p. 72-89

#### **В МАТЕРИАЛАХ КОНФЕРЕНЦИЙ:**

1. CANTER, V. A., CEBOTARI, I., Interacțiunea de imagiere în nanostructuri duble de configurație sferică și cilindrică. In: Abstracts of the Conferința fizicienilor din Moldova, Chișinău. 2007, p. 189
2. PALISTRANT, M.E., CEBOTARI, I.D., URSU, V.A., Theory of critical field  $H_{c2}$  and its applications to pure and doped  $MgB_2$ . In: Abstracts of 4th International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics and symposium “electrical methods of materials treatment”. Chișinău. 2008, p. 220
3. MOSKALENKO, V. A., DOHOTARU, L. A., CEBOTARI, I. D. A strong coupling diagrammatic theory for Hubbard Model in normal and superconducting state. In: Abstracts of Conferința fizicienilor din Moldova, Chișinău. 2009, p. 81.
4. ПАЛИСТРАНТ, М.Е., УРСУ В.А., ЧЕБОТАРЬ, И.Д. Анизотропия верхнего критического поля  $H_{c2}$  в двухзонных сверхпроводниках с данной структурой типа  $MgB_2$ . In: Abstracts of Conferința fizicienilor din Moldova., Chișinău. 2009, p. 81.
5. MOSKALENKO V. A., DOHOTARU L. A., CEBOTARI I. D. Diagrammatic study of strongly correlated electrons with orbital degree of freedom. In: Abstracts of 5th International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics and symposium “electrical methods of materials treatment”. Chișinău. 2010, p. 50
6. MOSKALENKO, V.A.; DOHOTARU, L.A.; DIGOR, D.F.; CEBOTARI, I.D. Diagrammatic theory for twofold degenerate Anderson impurity model. In: Abstracts of the 6<sup>th</sup> International Conference on Material Science and Condensed Matter Physics MSCMP-2012, September 11-14. 2012 Chisinau, Moldova, p. 40. ISBN: 978-9975-66-290-7.
7. MOSCALENCO, V.A.; DOHOTARU, L.A.; DIGOR, D.F.; CEBOTARI, I.D. Dynamics of the phonon clouds for Anderson-Holstein model. In: Abstracts of the 6<sup>th</sup> International Conference on Material Science and Condensed Matter Physics MSCMP-2014, Chisinau. 2014, p. 56
8. CEBOTARI I. D. Phonon clouds dynamics of correlated polarons. In: Abstracts of the 6<sup>th</sup> International Conference on Material Science and Condensed Matter Physics MSCMP-2014, Chisinau. 2014, p. 80
9. MOSCALENCO, V. A., DOHOTARU, L. A., DIGOR, D. F. CEBOTARI I. D. Diagrammatic approach for the Anderson-Holstein model. In: Abstracts of 5<sup>th</sup> Conferința fizicienilor din Moldova., Chișinău. 2014, p. 26
10. CEBOTARI, I. D., Properties of phonon clouds of correlated polarons. Abstracts of 5<sup>th</sup> Conferința fizicienilor din Moldova., Chișinău. 2014, p. 27
11. MOSKALENKO, V.A.; DOHOTARU, L.A.; DIGOR, D.F.; CEBOTARI, I.D. Investigation of the Generalized Anderson Impurity Model 3rd International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering. In: Abstracts of ICNBME-2015, September 23-26. 2015, Chisinau, Republic of Moldova, p. 209—212.
12. MOSCALENCO, V.A., DOHOTARU, L.A.; DIGOR, D.F., CEBOTARI, I.D. Two particle irreducible Green’s function of strongly correlated electron systems. In: Abstracts of the 8<sup>th</sup> International Conference on Material Science and Condensed Matter Physics MSCMP-2016, Chișinău. 2016, p. 57
13. MOSCALENCO, V.A., DOHOTARU, L.A.; DIGOR, D.F., CEBOTARI, I.D. Two

- impurities model of strongly correlated electron systems. In: Abstracts of the <sup>8th</sup> International Conference on Material Science and Condensed Matter Physics MSCMP-2016, Chişinău. 2016, p. 73
14. PALISTRANT, M.E., CEBOTARI, I.D., PALISTRANT, S. A., The Influence of the external magnetic field on the electronic density of states of quasi-1d system in the mixed phase of superconductivity and spin density wave. In: Abstracts of ICNBME-2019. 2019, Chisinau, Republic of Moldova, p.
  15. CEBOTARI, I.D., Systems with strong Coulomb and electron-phonon interaction : methods of investigation and results. In: Abstracts of the <sup>10th</sup> International Conference on Material Science and Condensed Matter Physics MSCMP-2024, Chişinău. 2016, p. 62