

UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA

INSTITUTUL DE FIZICA APLICATĂ

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

CEBOTARI IRINA

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

131.01 – FIZICA MATEMATICĂ

Rezumatul tezei de doctor în științe fizice

CHIȘINĂU, 2024

Teza a fost elaborată în laboratorul de Fonică Cuantică, Universitatea de Stat din Moldova,
Institutul de Fizică Aplicată

Conducător științific:

Moscalenco Vsevolod

dr. hab. în șt. fiz-mat, prof. univ., acad. al AȘM

Consultant științific:

Dohotaru Leonid

dr. în șt. fiz-mat, conf. univ., Universitatea Tehnica din Moldova

Referenți oficiali:

Cliucanov Alexandr

dr. hab. în șt. fiz-mat, prof. univ., Universitatea de Stat din Moldova

Tronciu Vasile

dr. hab. în șt. fiz-mat, prof. univ., Universitatea Tehnica din Moldova

Componența consiliului științific specializat (CȘS):

Clochișner Sofia

dr. hab. în șt. fiz-mat, prof. cerc., Universitatea de Stat din Moldova,
Institutul de Fizică Aplicată, *Președinte al CȘS*

Ostrovski Serghei

dr. hab. în șt. fiz-mat, conf. cerc., Universitatea de Stat din Moldova,
Institutul de Fizică Aplicată, *Secretar al CȘS*

Nica Denis

dr. hab. în șt. fiz-mat, conf. cerc., Universitatea de Stat din Moldova

Rusu Spiridon

dr. în șt. fiz-mat, conf. univ., Universitatea Tehnica din Moldova

Geru Ion

dr. hab. în șt. fiz-mat, prof. univ., mem. cor. al AȘM

Susținerea va avea loc la 20 decembrie 2024, ora 12:30, în ședința Consiliului Științific Specializat D 131.01-24-27 din cadrul Universității de Stat din Moldova, Institutului de Fizică Aplicată, str. Academiei nr. 5, bir. 230, Chișinău, MD-2028, Republica Moldova.

Teza de doctor și rezumatul pot fi consultate la biblioteca Universității de Stat din Moldova (str. A. Mateevici, 60, MD-2009, Chișinău, Republica Moldova) și pe pagina web a ANACEC (www.anacec.md). Rezumatul a fost expediat la 20 noiembrie 2024.

Secretar științific al Consiliului Științific Specializat,
Ostrovski Serghei, dr. hab., conf. cer.



Consultant științific,
Dohotaru Leonid, dr., conf. univ.



Autor
Cebotari Irina



CUPRINS

REPERELE CONCEPTUALE ALE CERCETĂRII.....	4
CONȚINUTUL TEZEI.....	7
CONCLUZII ȘI RECOMANDĂRI GENERALE.....	25
BIBLIOGRAFIE.....	28
АННОТАЦИЯ	32
ADNOTARE.....	33
ABSTRACT.....	34

REPERELE CONCEPTUALE ALE CERCETĂRII

Actualitatea și importanța temei abordate. Teoriile corpului solid, cum ar fi teoria benzilor a conductivității Wilson-Bloch sau teoria supraconductivității Bardeen-Cooper-Schiffer (BCS) descriu proprietățile unui număr limitat de materiale. Există o categorie mare de materiale, reprezentată de metalele de tranziție (pământuri rare) și compușii lor chimici, precum și fulleridele (AnC_{60} , unde A este un metal alcalin), care prezintă proprietăți fizice necharacteristice din punctul de vedere al acestor concepte sau în ele se realizează fenomene extraordinare. E vorba despre tranziția metal-izolator Mott-Hubbard, magnetoresistență gigantică cu semn negativ, supraconductivitate la temperatură înaltă (HTSC), coexistența magnetismului și supraconductivității și altele. Aceste fenomene ridică multe întrebări de natură fundamentală. De exemplu, mecanismul de formare a perechilor de electroni supraconductori în supraconductorii de temperatură înaltă nu este pe deplin înțeles.

Muli cercetători consideră că aceste fenomene sunt realizate datorită efectului corelațiilor puternice. Acest efect este asociat cu interacțiunea Coulomb puternică a electronilor între ei, precum și cuplarea puternică electron-fononică în cristale (inclusiv cele moleculare) și influența lor reciprocă [1]. Sistemele în care se manifestă efectul corelațiilor puternice a electronilor între ei, electronilor cu fononii sau ambele împreună se numesc puternic corelate.

Teoria modernă a sistemelor puternic corelate se bazează pe formalismul Hamiltonianului, formulat în limbajul cuantizării secundare. Hamiltonianele de model, care descriu comportamentul electronilor în astfel de sisteme, includ parametrul interacțiunii coulombiene a electronilor. Modelele menționate sunt următoarele: Modelul polar Shubin-Vonsovsky [2-4], modelul Bogolyubov-Tyablikov [5-6], modelul Hubbard [7-12] și modelul Anderson al impurității [13] (precum și generalizarea sa, cum este modelul periodic al lui Anderson) și altele.

Problema dezvoltării metodelor de analiză a acestor modele rămâne relevantă în continuare, deoarece metodele dezvoltate pentru studierea sistemelor cu interacțiune slabă își pierd valabilitatea pentru acestea. Pentru a analiza aceste sisteme au fost propuse diverse concepte, aproximări și metode matematice, atât analitice, cât și numerice, perturbative și neperturbative, dintre care unele sunt prezentate în [14]. Fiecare dintre aceste metode are propriile sale avantaje și dezavantaje. Una dintre metodele de analiză a modelelor sistemelor puternic corelate, care este dezvoltată și utilizată în teză, a fost propusă de V. A. Moskalenco în 1990 [15, 16] și reprezintă tehnica diagramatică bazată pe teorema lui Wick generalizată pentru sisteme cu corelații puternice. Avantajul acestei metode, în comparație cu alte metode, este că aceasta permite să se calculeze funcțiile lui Green de temperatură, iar metoda funcției Green este cunoscută ca una dintre cele mai eficiente în statistica cuantică. Tehnica presupune obținerea de aproximări în care se calculează funcțiile lui Green. De

asemenea, trebuie de remarcat că avantajul tehnicii diagramatice aplicate în teza, în comparație cu tehnicile diagramatice propuse de alți autori, este că se bazează pe algebra simplă a operatorilor Fermi și permite obținerea ecuațiilor de tip Dyson.

În [17], a fost demonstrată proprietatea de staționaritate a potențialului termodinamic (PTD) al modelului periodic Anderson. Inițial, această teoremă a fost dovedită pentru sistemele cu interacțiuni slabe în stare normală, folosind tehnica diagramatică [18]. În această teză, vom demonstra și proprietatea de staționaritate a potențialului termodinamic al modelului Hubbard, atât în faza normală, cât și în cea supraconductoare. Acest lucru este necesar, inclusiv pentru studiul ulterior al proprietăților termodinamice ale sistemelor cu cuplare puternică, care pot fi descrise de modelul Hubbard.

În multe materiale cu corelații puternice, degenerarea orbitală este eliminată complet. Cu toate acestea, în unii oxizi ai metalelor de tranziție 3d și 4d (rutinați), supraconductorii pe bază de fier (vezi, de exemplu, [19]) sau în fulleride [20], există o degenerare orbitală a nivelurilor de electroni localizați. În aceste sisteme, apare așa-numitul efect de corelație inter-orbitală, care este determinat de valoarea parametrului Hund I_H . În teză este studiat efectul datorat proceselor electronice, cum ar fi tranzițiile de fază Mott metal-izolator și supraconductivitatea în sistemele multi-orbitale.

Rolul interacțiunii puternice electron-fononice în aceste fenomene nu este, de asemenea, suficient de clar, în special pentru HTSC. Datele experimentale obținute din studierea efectului izotopului în supraconductorii de temperatură înaltă (care arată dependența temperaturii tranziției supraconductoare de masa izotopului ionului corespunzător) sunt destul de contradictorii (vezi, de exemplu, [21-23]).

În ceea ce privește studiile teoretice ale rolului interacțiunii puternice electron-fononice în HTSC, este clar că un mecanism pur electron-fononic pentru formarea perechilor Cooper în supraconductorii la temperatură înaltă este puțin probabil, totuși, unii cercetători consideră că interacțiunea electron-fononică favorizează formarea perechilor de electroni supraconductorii, în timp ce alții cred că aceasta poate participa direct la mecanismul de formare a perechilor supraconductoare (vezi, de exemplu, [24-26]). În ceea ce privește fenomenul de tranziție de fază metal-izolator Mott, în funcție de valoarea parametrilor corespunzători (cel puțin energia de repulsie coulombiană U și constanta de interacțiune electron-fononică g), se poate realiza o imagine fizică diferită. Pentru a clarifica rolul interacțiunii puternice a electronilor între ei și cu fononii optici (care apare, de exemplu, în manganați [27] și fulleride), în teză vom lua în considerație modelul Anderson al impurității, completat de Hamiltonianul Holstein, care reprezintă sistemul de fononi și interacțiunea acestuia cu electronii localizați a atomului de impuritate, atât în faza normală, cât și în cea supraconductoare.

Cercetarea fundamentală a acestor sisteme este importantă în viitor și pentru problemele aplicative. De exemplu, înțelegerea mecanismului de tranziție metal-izolator Mott-Hubbard și controlul acestuia poate duce la crearea unor elemente de dispozitiv cu funcționalități noi, iar studierea proprietăților supraconductorilor de temperatură înaltă și înțelegerea mecanismelor acestui fenomen este promițătoare din punctul de vedere al posibilității utilizării lor ca linii electrice. Problema interacțiunii puternice electron-fononice în moleculele uriașe pe bază organică este de mare interes pentru electronica moleculară etc.

Astfel, actualitatea și importanța cercetării este dictată de necesitatea unui studiu fundamental al materialelor cu corelații puternice și al fenomenelor realizate în acestea, inclusiv pentru rezolvarea problemelor aplicative în viitor, și anume, rolul interacțiunii electron-fononice în sistemele cu interacțiune Coulomb puternică a electronilor între ei, precum și cu cuplarea puternică electron-fononică, efectul de corelație inter-orbitală în sistemele multibandă în procese electronice, studiul proprietăților termodinamice ale sistemelor puternic corelate, precum și necesitatea dezvoltării unor noi metode de cercetare.

Scopuri și obiectivele cercetării:

- 1) De a demonstra proprietatea de staționaritate a potențialului termodinamic al modelului Hubbard, atât în stare normală, cât și în stare supraconductoare;
- 2) De a generaliza tehnica diagramatică pentru sistemele orbital nedegenerate [15,16, 28-31] cu scopul de a analiza modelele sistemelor electronice puternic corelate cu degenerarea orbitală a nivelurilor electronice. De a lua în considerare atât interacțiunea Coulomb inter-orbitală, cât și cea intra-orbitală în procesele electronice ale sistemelor puternic corelate. De a investiga rolul parametrului Hund în procesul de tranziție de fază Mott în cadrul modelului Hubbard dublu degenerat și a modelului Anderson al impurității dublu degenerat. De a determina condiția de apariție a supraconductivității singlete în modelul Anderson dublu degenerat;
- 3) De a investiga rolul influenței interacțiunii puternice a electronilor între ei, precum și cu fononii, în supraconductibilitatea la temperatură înaltă în cadrul modelului Anderson-Holstein cu ajutorul tehnicii diagramatice.

Ipoteza de cercetare:

1) Folosind tehnica diagramatică de cuplare puternică, este posibilă stabilirea proprietății de staționaritate a potențialului termodinamic al modelului Hubbard în același mod în care s-a făcut pentru modelul periodic Anderson [17] și pentru sistemele cu interacțiune slabă de Luttinger și Ward [18].

2) Efectul de corelație inter-orbitală poate juca un rol semnificativ în procesele electronice ale sistemelor puternic corelate multi-orbitale, determinând starea dielectrică în modelul Hubbard și amplificând starea metalică la temperaturi scăzute în modelul Anderson al impurității. Se presupune

că supraconductivitatea poate fi realizată în modelul Anderson al impurității dublu degenerat. Folosind tehnica diagramatică, putem determina și analiza ecuațiile pentru parametrii de ordine ale stării supraconductoare și putem obține condițiile pentru determinarea temperaturii critice a tranziției supraconductoare. 3) Perechile Cooper formate din perechi de $d(f)$ -electroni într-o stare cu nori de fononi grei pot avea o contribuție semnificativă la realizarea supraconductivității în modelul Anderson-Holstein.

Sinteza metodologiei de cercetare:

Au fost utilizate metode de analiză și sinteză a referințelor în pregătirea ipotezei, introducerii și capitolului, care este dedicat analizei situației în domeniul tezei. Calculele efectuate în teză se bazează pe aparatul funcțiilor Green cuantic-statistice, teoria perturbațiilor și tehnica diagramatică de cuplare puternică propusă de V.A. Moscalenco [16].

CONȚINUTUL TEZEI

În **Capitolul 1** este examinată situația actuală în domeniul studierii tranzițiilor de fază metal-izolator Mott și HTSC în conceptul fizic a sistemelor puternic corelate. Sunt luate în considerare trăsăturile materialelor care duc la efectul unor corelații puternice în ele, precum și fenomenele studiate în lucrare: tranziția metal-izolator Mott și HTSC. Sunt prezentate rezultatele unui studiu al rolului efectului de corelație inter-orbitală în sistemele cu degenerare orbitală a nivelurilor electronice, precum și interacțiunea electron-fononică în sisteme cu interacțiuni puternice electron-fononice și Coulomb. În acest scop, a fost realizată o analiză și sinteză a unor lucrări în care au fost studiate modelele Hubbard-Holstein, Anderson-Holstein, precum și modelele Hubbard și Anderson al impurității cu degenerare multiplicată. Se urmărește dezvoltarea metodei tehnicii diagramatice a cuplării puternice [16] și se iau în calcul câteva rezultate care au fost obținute cu ajutorul acestei abordări.

În **Capitolul 2** este discutată metoda diagramatică de studiere a sistemelor puternic corelate. Prima parte este dedicată prezentării aparatului de funcții Green cuantice-statistice și tehnicii diagramatice pentru sisteme cu interacțiune slabă, iar a doua parte este dedicată elementelor de bază ale tehnicii diagramatice de cuplare puternică dezvoltată în teză.

În **Capitolul 3** este dezvoltată abordarea diagramatică a cuplării puternice, propusă de V.A. Moscalenco. Cu ajutorul acesteia a fost demonstrată proprietatea de staționaritate a potențialului termodinamic al modelului Hubbard, atât în faza normală, cât și în cea supraconductoare. În primul rând, în Hamiltonianul modelului Hubbard a fost introdusă constanta de expansiune λ (la sfârșitul calculelor se pune egală cu 1):

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

unde $C_{i\sigma}^{\dagger}$ ($C_{i\sigma}$) este operatorul de creare (anihilare) al electronilor nodului i cu proiecția de spin $z=1/2\sigma$, $\sigma=\pm 1$, μ este potențialul chimic al unui sistem de electroni, U este energia de repulsie Coulombiană a electronilor unui nod cu proiecții opuse de spin, $n_{i\sigma}$ este operatorul numărului de electroni cu spin σ pe nodul i al rețelei cristaline, $t(i-j)$ este elementul matricial al energiei saltului de electroni de la nodul i la nodul j , care este legat cu dispersia energiei cinetice a electronului $\epsilon(\vec{k})$, unde \vec{k} este impulsul electronului. Să reținem, că toate funcțiile și mărimile fizice, care conțin constanta de expansiune λ , sunt marcate cu indicele „ λ ”.

La construirea teoriei perturbațiilor, Hamiltonianul electronilor unui atom H_0 , care include parametrul de repulsie Coulombiană U , a fost luat ca Hamiltonian cu aproximație zero, iar integrala de salt $t(i-j)$ ca perturbație.

Bazându-ne pe teorema lui Wick generalizată, a fost realizată o dezvoltare diagramatică a funcției Green uni-particule pentru Modelul Hubbard într-o serie de teorie a perturbațiilor în termeni de $t(i-j)$ în prezența parametrului de expansiune λ . Aceasta dezvoltare are forma (Fig.1)

Pe lângă funcțiile Green normale, starea supraconductoare este descrisă și de funcțiile Green anormale. După utilizarea teoremei generalizate a lui Wick, apar și funcții Green ireductibile multe-particule anormale, care poate conține orice număr de operatori de creare și anihilare. În acest sens, pentru a lua în considerație starea supraconductoare, a fost introdus conceptul de număr de sarcină cuantică α , care ne permite să luăm în calcul toate aceste posibilități:

$$C^{\alpha} = \begin{cases} C, & \alpha = 1 \\ C^{\dagger}, & \alpha = -1 \end{cases} \tag{2}$$

Funcția Green a lui Matsubara $G^{\alpha\alpha'}(x|x')$ în reprezentarea interacțiunii în termenii de număr de sarcină cuantică α este definită ca

$$G^{\alpha\alpha'}(x|x') = -\left\langle T C_{\mathbf{x}\sigma}^{\alpha}(\tau) C_{\mathbf{x}'\sigma'}^{-\alpha'}(\tau') U_{\lambda}(\beta) \right\rangle_0^c \tag{3}$$

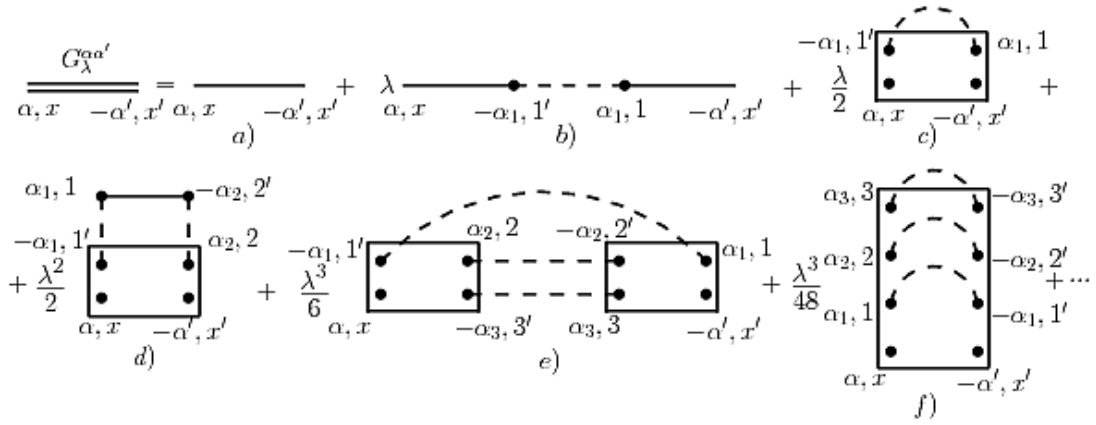


Fig. 2. Diagrame de teorie a perturbațiilor de ordinul trei pentru $G_\lambda^{aa'}(x|x')$. Linia dublă continuă corespunde funcției Green renormalizate $G_\lambda^{aa'}(x|x')$. Linile subțiri continue descriu funcția Green uni-particulă de ordin zero, dreptunghiurile descriu funcțiile Green ireductibile două- și patru- particule. Liniile punctate subțiri corespund elementelor matriciei de tunelare Punctele sunt vârfurile diagramelor.

A fost construită o dezvoltare diagramatică a funcțiilor lui Green $G_\lambda^{aa'}$ și pentru starea supraconductoare (vezi Fig. 2). Menționăm că în starea supraconductoare, spre deosebire de starea normală, liniile funcțiilor Green nu conțin săgeți care să determine procesele de creare și anihilare a electronilor, datorită faptului că indicii pot lua două valori $\alpha = \pm 1$, iar fiecare vârf al diagramei conține posibilități diferite. În ambele faze a fost introdus conceptul funcției Green de tunelare $T_\lambda(k)$, care se obține ca urmare a procesului de renormalizare al elementului matricial al energiei saltului $t(i-j)$.

A fost găsită o ecuație de tip Dyson pentru această funcție. În faza normală funcția Green de electron uni-particulă $G_\lambda(k)$ și $T_\lambda(k)$ sunt următoarele:

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

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

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

În faza supraconductoare:

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

unde

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

Aici k este impulsul electronilor, k prezent în $\Sigma(k, i\omega_n)$ corespunde frecvențelor Matsubara impare. Rolul operatorului de masă Σ_{λ} este îndeplinit de funcția de corelație Λ , care este suma diagramelor puternic cuplate, ce conțin funcții Green ireductibile, înmulțită cu constanta de expansiune

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

A fost determinat că în starea normală și când $\lambda = 1$ operatorul de masă Σ al funcției Green de tunelare este egal cu funcția de corelare Λ .

În starea supraconductoare, $\hat{\Lambda}$ este o matrice în care, pe lângă funcția de corelare normală $A_{\sigma}(k)$, există și funcții de corelare anormale $Y_{\sigma\bar{\sigma}}(k), \bar{Y}_{\sigma\sigma}(k), -\Lambda_{\sigma}(-k)$, corespunzătoare funcțiilor Green anormale.

Pe baza relației cunoscute dintre potențialul termodinamic F și partea diagramelor puternic cuplate ale dezvoltării operatorului de evoluție de medie termodinamică

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

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

a fost stabilită o relație exactă între potențialul termodinamic al sistemului și funcția Green uni-particulă (comparând seriile de diagrame pentru funcția Green uni-particulă și respectiv operatorul de evoluție $U(\beta)$). Aici Z_0 este funcția de partiie peste Hamiltonianul de aproximaie zero.

În faza normală avem:

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

În faza supraconductoare a fost obținută următoarea relație:

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

Aici ω_n este frecvența lui Matsubara, 0^+ este o mărime infinitezimală pozitivă.

Această relație conține o integrare suplimentară peste constanta de expansiune auxiliară λ . Ocolim această necesitate de integrare prin construirea unui funcțional special $Y(\lambda)$ bazat pe

diagramele scheletice pentru funcția Green și operatorul de evoluție (Fig. 3), care conține funcțiile Green ireductibile și funcțiile Green complete de tunelare.

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

unde

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

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

a)

$$Y'(\lambda) = \frac{1}{2} \left\{ \lambda \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \frac{\lambda^2}{4} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} - \frac{\lambda^3}{24} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \frac{\lambda^4}{192} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \frac{\lambda^4}{24} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \dots \right\}$$

b)

Fig. 3. Cele mai simple diagrame scheletice pentru $Y'(\lambda)$. Dreptunghiurile reprezintă funcțiile Green ireductibile. Double linii punctate reprezintă a) funcția Green renormalizată tunelul T în stare normală și b) valoarea $T^{aa'}(x, x')$ în stare supraconductivă.

A fost demonstrată existența proprietății de staționaritate a acestui funcțional (vorbim de staționaritate în raport cu variația funcției de corelare).

$$\frac{\delta Y(\lambda)}{\delta \Sigma_\lambda(k)} = 0, \quad (13)$$

De asemenea, a fost arătat că pentru $\lambda = 1$, acest funcțional coincide cu potențialul termodinamic

$$F(1) = Y(1) + F_0$$

În Capitolul 4, a fost studiată influența parametrului Hund asupra proceselor electronice în sisteme puternic corelate multi-orbitale. Pentru a face acest lucru, teoria diagramatică dezvoltată pentru modelul Hubbard și modelul Anderson al impurității orbital nedegenerat a fost generalizată pentru sistemele cu degenerare orbitală dublă.

Hamiltonianul modelului Hubbard dublu degenerat are forma:

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

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

Aici $C_{j\sigma}^\dagger, C_{j\sigma}$ sunt operatorii de creare și anihilare a unui electron pe nodul rețelei i cu număr cuantic orbital ($l=1$ sau 2) și spin $\sigma = \uparrow$ sau \downarrow , $n_{il\sigma} = C_{il\sigma}^\dagger C_{il\sigma}$ și $n_{il} = \sum_{\sigma} n_{il\sigma}$. Denumirile U , U' și J înseamnă magnitudinea interacțiunii Coulomb intra- și inter-orbitale a electronilor și constanta Hund ($J > 0$), respectiv. În cele ce urmează, este folosită relația $U = U' + 2J$ care este valabilă în unele modele orbital degenerate [13]. Cantitățile $t_{l,l'}(j-i)$ sunt elemente de matrice ale tranzițiilor de tunelare de electroni între nodurile rețelei. Se iau în calcul tranzițiile de electroni intra-orbitale ($l = l'$) și inter-orbitale ($l \neq l'$).

Funcția Green completă a lui Matsubara în reprezentarea interacțiunii are forma:

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

Aici τ și τ' corespund timpului imaginar cu $0 \leq \tau \leq \beta$, β este temperatura inversă, T_τ este operatorul ordonării cronologice.

Operatorul de evoluție este

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

În primul rând, au fost determinate funcțiile proprii și valorile proprii ale părții Hamiltonianului corespunzătoare energiei de interacțiune a electronilor localizați și a fost stabilită dependența lor de interacțiunile Coulomb intra- și inter-orbitale și de constanta de cuplare Hund. Teoria perturbațiilor a fost dezvoltată în limita atomică. Apoi, a fost formulată o ecuație de tip Dyson pentru modelul Hubbard și a fost definită funcția de corelare Λ , care ține cont de existența funcțiilor Green multi-particule ireductibile.

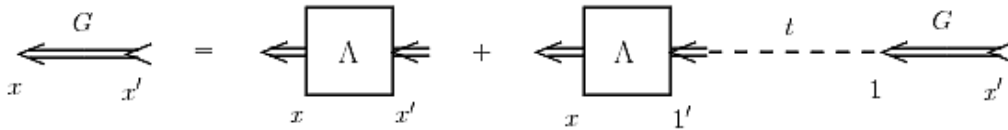


Fig. 4. Reprezentarea diagramatică a unei ecuații de tip Dyson. Liniile duble cu săgeți corespund funcției Green renormalizate uni-particulă, casetele descriu funcțiile de corelare, iar liniile întrerupte indică elementele matricei de tunelare $\Lambda(x, x')$.

În formă analitică, această ecuație arată astfel:

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

Sub formă de matrice:

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

unde

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

Aici, elementele diagonale corespund proceselor intra-orbitale, iar nediagonale celor inter-orbitale. Comparând cu rezultatele cunoscute pentru un sistem orbital nedegenerat, a fost arătat că, din punct de vedere diagramatic, o teorie orbital degenerată se dovedește a fi similară cu o teorie orbital nedegenerată dacă în aceasta din urmă înlocuim funcțiile numerice Green cu matrice cu două

linii și coloane în care elemente diagonale corespund tranzițiilor inter-orbitale, iar elementele nedigonale corespund tranzițiilor intra-orbitale.

În cea mai simplă aproximare Hubbard-I, care ia în considerare numai diagrame de tip lanț (care nu conțin funcții Green ireductibile și care corespund teoremei lui Wick obișnuite), a fost calculată densitatea stărilor electronice:

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

Ea este determinată de densitatea zero a stărilor electronice $\rho_0(\varepsilon)$ adică densitatea stărilor electronice în banda inițială, fără a lua în considerare interacțiunea Coulomb.

Argumentele funcției ε_A și ε_B din (19) au fost calculate și determinate de parametrii modelului. Argumentul funcției $\rho_0(E)$ din (19) este egal cu $-\infty$, care se află în afara intervalului $\left(-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right)$ în care funcția este diferită de zero. Aici W este lățimea benzii de energie. În consecință, în această aproximare, cazul special al umplerii la jumătate a benzilor de energie electronică ale sistemului corespunde doar stării dielectrice.

Argumentele ε_A și ε_B funcției $\rho^{11}(E)$ (19) au fost calculate și determinate de parametrii modelului. Argumentul funcției $\rho^{11}(E)$ din (19) este egal cu 0 , care se află în afara intervalului în care funcția este diferită de zero. Aici este lățimea benzii de energie. În consecință, în această aproximare, cazul special al umplerii la jumătate a benzilor de energie electronică ale sistemului corespunde doar stării dielectrice. Este arătată că în această aproximare, cazul special de umplere pe jumătate a benzilor de energie electronică ale sistemului corespunde doar stării dielectrice.

De asemenea, a fost construită teoria perturbațiilor bazată pe tehnica diagramatică de cuplare puternică pentru a studia modelul Anderson degenerat dublu, care include următoarele relații:

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

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

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

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

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

Aici H_d^l este Hamiltonianul local (unui nod), $C_{\vec{k}l\sigma}$ este operatorul de anihilare al unui electron de conducție cu impuls \vec{k} , număr orbital $l = 1, 2$ și spin $\sigma = \pm 1 (\uparrow, \downarrow)$ și $d_{l\sigma}$ este operatorul de anihilare al unui d-electron localizat. Funcția de undă a unui electron de conducție în starea 1 orbitală se suprapune numai cu funcția de undă a unui electron localizat situat în aceeași stare orbitală, $V_{\vec{k}l}$ este element matricial de hibridizare $n_{l\sigma} = d_{l\sigma}^\dagger d_{l\sigma}$, $n_l = \sum_{\sigma} n_{l\sigma}$, U este repulsia coulombiană între d-electroni din aceeași stare orbitală și U' - între electroni din diferite stări orbitale, $I_H, I_{H'}$ sunt constante Hund, $\varepsilon_l(\vec{k})$ este dispersia benzii și ε^d este energia electronului de impuritate, calculată de la nivelul potențialului chimic, μ , N este numărul de noduri a rețelei cristaline.

Ca și în cazul precedent, se presupune că este verificată relația:

$$U' = U - 2I_H, I_{H'} = I_H.$$

Funcțiile Green ale electronilor de conducție și ale electronilor localizați sunt definite, respectiv

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

Funcțiile Green anormale ale electronilor de conducție $F(\vec{k}l\sigma\tau | \vec{k}'l'\sigma'\tau')$, $\bar{F}(\vec{k}l\sigma\tau | \vec{k}'l'\sigma'\tau')$ și ale electronilor localizați $f(l\sigma\tau | l'\sigma'\tau')$, $\bar{f}(l\sigma\tau | l'\sigma'\tau')$ sunt definite după cum urmează:

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

Media statistică din (25) și (26) este efectuată folosind matricea de densitate de ordin zero a electronilor de impurități și a electronilor de conducție. Indicele „c” indică diagramele cuplate. Pentru acest model, au fost determinate și funcțiile proprii și valorile proprii E_n (n ia valori de la 1 la 16) ale părții Hamiltonianului corespunzătoare energiei d-electronilor localizați, precum a fost stabilită și dependența lor de interacțiunile Coulomb intra- și inter-orbitale U , U' și de constanta Hund I_H . A fost dezvoltată teoria perturbațiilor în limita atomică și au fost determinate funcțiile Green a lui Matsubara în stările normală și supraconductoare. A fost obținută, prin aproximarea locală, densitatea spectrală a stărilor electronice

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

Pentru funcția Green a electronilor de conducție și a electronilor atomilor de impurități (Fig. 5.), au fost obținută respectiv ecuația Dyson și ecuația de tip Dyson.

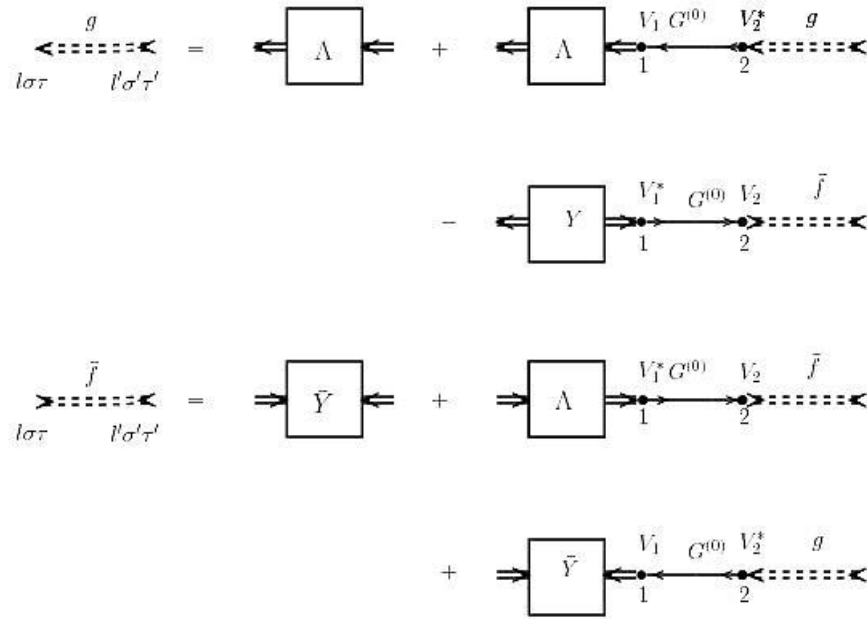


Fig. 5. Ecuații de tip Dyson pentru electronii de impurități. Λ , Y , \bar{Y} sunt funcții de corelare.

Funcția Green renormalizată corespunzătoare electronilor de conducție este egală cu:

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

unde $g_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n)$ este reprezentarea Fourier a funcției Green complete pentru electronii impurităților, ω_n este frecvența lui Matsubara, δ este funcția delta.

O relație similară este valabilă pentru funcția anomală a electronilor în starea supraconductoare:

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

În Fig. 5. liniile duble punctate cu săgeți reprezintă funcțiile Green renormalizate ale electronilor localizați f și \bar{f} , iar liniile groase și solide reprezintă funcția Green a electronilor de conducție G^0 . Funcția V_1 înseamnă $V_{\vec{k}_1 l_1}$. Se presupune sumarea după indici repetați. Λ , Y , \bar{Y} , sunt funcții de corelare care conțin diagrame ireductibile puternic cuplate. Cel mai simplu exemplu de astfel de diagrame este prezentat în Fig. 6.

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

$$Y_{l'\sigma'\tau'}^{l\sigma}(\tau - \tau') = -\frac{1}{2} \quad G_2^{(0)irr} [l\sigma\tau, l'\sigma'\tau' | l_1\sigma_1\tau_1, l_2\sigma_2\tau_2] V_1 F[\vec{k}_1 l_1\sigma_1\tau_1 | -\vec{k}_2 l_2\sigma_2\tau_2] V_2$$

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

Fig. 6. Aproximația principală pentru funcțiile de corelare Z , Y , \bar{Y} . Liniile duble solide cu săgeți reprezintă funcția completă a electronilor de conducție a lui Green. Dreptunghiurile reprezintă funcțiile ireductibile ale lui Green ale electronilor impurităților.

Forma analitică (în reprezentarea Fourier) a ecuațiilor prezentate în Fig. 5. are următoarea formă:

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

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

iar funcția Green de aproximație zero pentru electronii atomilor impurităților are forma

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

Acest sistem de ecuații ne permite să discutăm despre starea normală a sistemului și starea supraconductivă singletă pe un fundal paramagnetic ($\bar{\sigma} = -\sigma$).

Funcția Green completă a electronilor de conducție, reprezentată în Fig. 6 este rezultatul unei însumări de tip „ladder” a diagramelor principale. Această aproximare este o generalizare a aproximării de fază aleatorie a teoriei perturbațiilor de cuplare slabă. A fost calculată cea mai simplă funcție Green ireductibilă bi-particulă $\Lambda = g^0 + Z$ (indicii orbitali și de spin au fost omiși pentru simplitate). Această este o valoare, care poate fi calculată doar în limita temperaturilor scăzute, și care este de asemenea aproximativă, ținând cont de contribuția ponderii statistice $e^{-\beta E_9}$. Se presupune că starea fundamentală a sistemului studiat este o stare tripletă cu două particule E_9 . După ce am calculat această valoare și am sumat o anumită clasă de diagrame (Fig. 6), a fost obținută funcția de corelare $\Lambda_{l\sigma'l'\sigma'}$.

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

Cu următoarele realizări:

$$\begin{aligned} \Lambda_{11}(i\omega) &= m_1(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2} \mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2} [\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)]^2 \mathcal{G}_{11}(i\omega), \\ \Lambda_{22}(i\omega) &= m_2(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2} \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2} [\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)]^2 \mathcal{G}_{22}(i\omega), \\ \Lambda_{12}(i\omega) &= \frac{p^2(i\omega)}{2} \mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega) \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega) \mathcal{G}_{12}(i\omega), \\ p(i\omega) &= \left(\frac{1}{i\omega + E_2 - E_9} - \frac{1}{i\omega + E_9 - E_{12}} \right), \\ m_l(i\omega) &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{i\omega + E_2 - E_9} + \frac{1}{i\omega + E_9 - E_{12}} \right) \end{aligned} \quad (33)$$

Ca rezultat, au fost găsite două soluții pentru funcțiile Green renormalizate ale d-electronilor (localizați).

Prima dintre ele:

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

cu condiția ca

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

A doua soluție se obține din (35) prin înlocuirea indicilor 1 și 2.

Pentru a analiza tranziția metal-izolator Mott, a fost determinată densitatea stărilor electronice: De exemplu, contribuția intra-orbitală are forma

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

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

Valoarea $\rho_{11}(E)$ este diferită de zero datorită existenței unui element de matriceal de hibridizare și a unei densități zero de stări $\rho_0(E)$ (densitate de stări fără interacțiuni). Cu toate acestea, există o contribuție suplimentară datorată efectului de corelație inter-orbitală, care rezultă din soluția obținută (35) și are forma:

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

Unde $\Delta E_1 = E_2 - E_0 > 0$, $\Delta E_2 = E_{12} - E_0 > 0$. Această valoare este pozitivă pentru $-\Delta E_1 < E < \Delta E_2$. Astfel, s-a demonstrat că la temperaturi scăzute, datorită tranzițiilor orbitale, starea sistemului poate fi doar metalică.

A fost obținută o expresie aproximativă pentru funcțiile de corelare și, în special, pentru parametrii de ordine supraconductor \bar{Y}'' (deoarece funcțiile de corelare în starea supraconductivă pot juca rolul unui parametru de ordine supraconductoare)

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

unde

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

$\lambda = -\frac{1}{2}$ pentru supraconductivitatea singletă și $\lambda = \frac{1}{6}$ pentru tripletă.

Au fost formulate și analizate ecuațiile liniare pentru parametrii de ordine (obținute din ecuațiile de tip Dyson, rescrise pentru starea supraconductivă) și a fost găsită o condiție pentru realizarea supraconductivității singlete și determinarea temperaturii critice:

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

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

Această condiție este determinată de parametrii liberi ai teoriei și determină temperatura critică T_c .

În cazul nostru, temperatura critică T_c este reprezentată de dependența de frecvența Matsubara

$$\omega_n = (2n+1)\pi k_B T_c.$$

Pentru a determina temperatura critică, punem în (39) λ egală cu $-\frac{1}{2}$, valoare corespunzătoare stării singlete și ecuației de conservare. Un alt argument în favoarea alegerii

$\lambda = -\frac{1}{2}$ este aproximarea bazată pe egalitatea cu zero a funcțiilor $Q_\sigma^l(i\omega_n) = 0$.

În acest caz particular

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

unde $\Delta_4^{(0)}$ este Δ_4 cu condiția $Q_\sigma^l(i\omega_n) = 0$:

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

Ținând cont de soluția (33)

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

și definiția q_{σ}^l obținem

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

Se vede că această condiție, pentru ca acest determinant să fie zero, corespunde cazului de egalitate $\lambda = \pm 1/2$, ceea ce corespunde supraconductivității singlete.

În al cincilea capitol, a fost dezvoltată o abordare diagramatică pentru modelul Anderson-Holstein în ipoteza unei interacțiuni Coulomb puternice a electronilor de impurități, precum și a unei interacțiuni puternice electron-fofonice a acestor electroni cu fononii optici.

Hamiltonianul modelului Anderson-Holstein are forma:

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

unde q și p sunt coordonatele locale și impulsul fononilor optici, ω_0 este frecvența lor și $a(a^+), C_{\vec{k}\sigma} (C_{\vec{k}\sigma}^+)$ sunt operatorii de anihilare (creare) al fononilor, electronilor de conducție și, electronilor de impurități, respectiv, $\varepsilon(\vec{k})$ este energia cinetică a electronilor de conducție, ε_f^0 este energia locală a electronilor de impurități (ambele valori energetice sunt calculate de la nivelul potențialului chimic al sistemului μ_0 : $\varepsilon(\vec{k}) = \xi(\vec{k}) - \mu_0$, $\varepsilon_f^0 = \bar{\varepsilon}_f^0 - \mu_0$, U_0 este repulsia Coulombiană pe un singur nod a electronilor impurităților cu spini opuși, $V_{\vec{k}}$ este elementul matriceal de hibridizare, N este numărul de noduri ale rețelei, \bar{g} este constantă de interacțiune electron-fofonică.

Deoarece ambele dintre aceste interacțiuni sunt considerate a fi puternice, ele au fost incluse în Hamiltonianul cu aproximație zero, în timp ce operatorul Hamiltonianului corespunzător hibridizării d-stărilor ale electronilor localizați cu stările s(p)- a electronilor de conducție a fost

considerat o perturbare. Pentru a exclude termenul liniar în coordonatele fononului, a fost folosită transformarea Lang-Firsov [32].

În acest caz interacțiunea puternică electron-fononică determină formarea de polaroni cu nori de fononi „grei” care înconjoară atomul de impuritate. În acest caz, apare un nou grup de produse medii, format din operatorii norului fonon $\Phi_0(\tau_1\tau_2|\tau_3\tau_4)$. Pentru acest grup a fost propusă o teoremă Wick generalizată, obținută folosind aproximarea Laplace în limita de cuplare puternică.

$$\Phi_0(\tau_1\tau_2|\tau_3\tau_4) \cong \Phi_0(\tau_1|\tau_3)\Phi_0(\tau_2|\tau_4) + \Phi_0(\tau_1|\tau_4)\Phi_0(\tau_2|\tau_3) \quad (45)$$

Generalizarea (45) la argumente multi-time este considerată teorema lui Wick pentru funcțiile Green a norilor de fononi în regimul polaronilor puternic cuplați.

În limita de cuplare puternică $\alpha \gg 1$ pe care o luăm în considerație, folosind aproximarea Laplace, transformata Fourier a funcțiilor Green a aproximării zero a norilor de fononi $\Phi_0(i\Omega)$ a fost calculată în [33, 34] și are forma:

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

Această expresie este un propagator armonic al modului colectiv al fononilor aparținând unui nor polaron cu o frecvență colectivă ω_c (conceptul de oscilații colective libere ale norilor de fononi care înconjoară polaronii).

Folosind tehnica diagramatică, a fost investigată dinamica norilor de fononi ai polaronilor, stabilind procesul de renormalizare a frecvenței lor colective.

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

Polul acestei ecuații determină renormalizarea frecvenței fononului colectiv. Noua frecvență este determinată din ecuație

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

Cea mai simplă funcție de polarizare $\Pi_2(i\Omega)$ în condiții de paramagnetism și în stare normală, este determinată de cele mai simple funcțiile Green de aproximare zero ale electronilor de conducție $G_\sigma^0(i\omega)$ și electronilor de impurități localizați $g_\sigma^0(i\omega - i\Omega)$

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

Aceste funcții au fost calculate în cea mai simplă aproximare și, inând cont de ele, relație (49) are forma:

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

Folosind ecuația (48) pentru cazul $T = 0$ la densitatea zero a stărilor electronice $\rho(E)$:

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

În aceasta teza a fost investigată dependența energiei de mod colectiv E în raport cu parametrul de hibridizare V (Fig. 7). Aici W este lățimea benzei. A fost constatat că modul colectiv al norilor de fononi în cazul lui $T=0$ scade pe măsură ce hibridizarea crește.

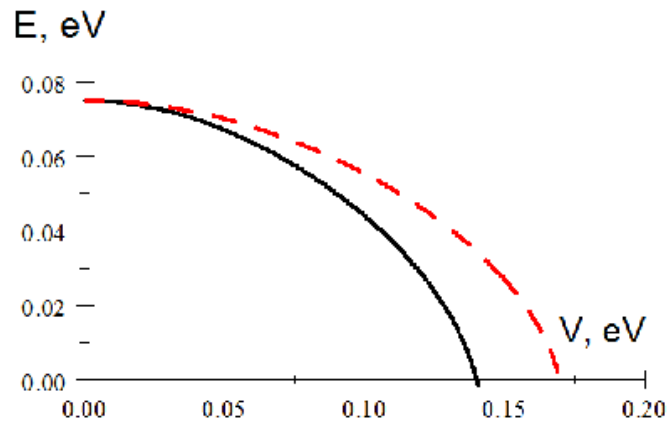


Fig. 7. Energia modului colectiv E în funcție de parametrul de hibridizare V pentru diferite lățimi de bandă: $W=0,5 \text{ eV}$ (linie continuă) și $W=1 \text{ eV}$ (linie întreruptă). La calcularea altor parametri, au fost luate următoarele valori: $\omega c=0,075 \text{ eV}$, $U = 5,85 \text{ eV}$, $\epsilon_f = -0,095 \text{ eV}$.

A fost formulat un sistem de ecuații de tip Dyson care definesc relația dintre funcțiile Green totale ale electronilor de impurități și funcțiile lor de corelare, precum și un sistem de ecuații Dyson pentru funcțiile Green complete ale electronilor de conducție și operatorii lor de masă. S-au obținut diagramele pentru funcțiile de corelare ce corespund primului ordin al teoriei perturbațiilor, atât în stare normală, cât și în cea supraconductoare. S-a dovedit că funcțiile de corelare ale ecuațiilor de tip Dyson ale electronilor localizați coincid cu operatorii de masă ale ecuațiilor Dyson pentru funcțiile Green ale electronilor de conducție.

CONCLUZII ȘI RECOMANDĂRI GENERALE

Toate obiectivele tezei au fost realizate. În teza a fost dezvoltată abordarea diagramatică a cuplării puternice propusă de V.A. Moscalenco în an. 1991 [15, 16] pentru a studia proprietățile termodinamice ale sistemelor descrise de modelul Hubbard, efectul de corelație inter-orbitală, precum și efectul combinat al interacțiunilor puternice Coulomb și electron-fononice asupra proceselor electronice în aceste sisteme.

Studiile au fost realizate pe baza modelului Hubbard, modelelor Hubbard și Anderson al impurității dublu degenerate și modelului Anderson-Holstein, care ia în considerație, pe lângă interacțiunea puternică a electronilor între ei, dar și, interacțiunea electron-fononică. În acest ultim caz, se presupune că ambele interacțiuni sunt puternice.

Tehnica diagramatică dezvoltată în teza se bazează pe teorema lui Wick generalizată pentru sisteme puternic corelate. Problema imposibilității utilizării teoremei lui Wick obișnuite din cauza nebilnearității Hamiltonienilor de aproximație zero se rezolvă luând în considerare structurile multiparticule - funcțiile Green ireductibile. Aceste funcții ireductibile reflectă atât fluctuațiile de spin, de sarcină, cât și fluctuațiile de perechi ale sistemului. Teorema lui Wick generalizată a fost utilizată pentru sisteme de electroni localizați în stările $d(f)$ - în toate modelele, în timp ce pentru subsistemul de electroni în stările $s(p)$ - în modelul Anderson al impurității dublu degenerat și fononi optici „liberi” în modelul Anderson-Holstein, a fost folosită teorema lui Wick obișnuită. Teorema lui Wick a fost formulată și pentru propagatorii norilor de fononi în regim de interacțiune electron-fononică puternică.

În primul rând, în teza se dezvoltă tehnica diagramatică pentru modelul Hubbard, iar cu ajutorul acesteia este dovedită proprietatea de staționaritate a potențialului termodinamic al modelului. A fost introdus conceptul de funcție Green de tunelare și a fost obținută o ecuație de tip Dyson pentru aceasta. A fost găsit un operator de masă, care, atunci când constanta de expansiune a dezvoltării teoriei perturbațiilor λ este egală cu 1 (pe care am introdus-o în Hamiltonian), coincide cu funcția de corelare. În continuare, am stabilit relația exactă dintre funcția Green uni-particulă și potențialul termodinamic al sistemului (datorită faptului că acesta din urmă este exprimat prin media diagramelor puternic cuplate pentru operatorul de evoluție). Această relație conține integrare suplimentară peste constanta de expansiune λ . Pentru a omite această integrare, a fost introdus un funcțional special compus din diagrame scheletice ale operatorului de evoluție și a fost făcută o variație a acestui funcțional în funcție de operatorul de masă pe care l-am găsit și am constatat că este egală cu zero. Apoi punând $\lambda = 1$, comparând acest funcțional cu diagramele pentru potențialul termodinamic și, identificând coincidența acestora, am stabilit proprietatea de staționaritate a potențialului termodinamic al modelului Hubbard. O teoremă similară a fost

demonstrată pentru starea supraconductoare. În acest caz, s-a presupus existența perechilor supraconductoare de electroni și cvasi-medii Bogoliubov non-zero. Funcțiile Green ireductibile în faza supraconductoare pot conține orice număr par de operatori de creare și anihilare a fermionilor, în timp ce în faza normală numărul ambelor tipuri este același. În acest sens, am folosit conceptul de număr de sarcină cuantică, care ia în considerare automat toate posibilitățile, luând în considerație interferența particulelor și a golurilor în stare supraconductoare. Comparând rezultatele obținute cu cele pentru modelul Anderson periodic [17], am ajuns la concluzia că, din punct de vedere termodinamic, modelul Anderson periodic se transformă în modelul Hubbard dacă înlocuim funcțiile lui Green ale electronilor de conducție în modelul Anderson periodic cu funcțiile Green de tunelare ale modelului Hubbard.

În al doilea rând, teoria diagramatică de cuplare puternică a fost generalizată pentru sistemele cu degenerare orbitală. Și anume, pentru analiza modelului Anderson al impurității și Hubbard dublu degenerat, a fost construită o teorie a perturbațiilor în limita atomică pentru ambele modele. Pentru modelul Anderson, funcția spectrală este de asemenea definită în această limită. În ambele modele, au fost obținute ecuații de tip Dyson pentru funcțiile Green uni-particule ale electronilor localizați și care puternic interacționează. A fost arătat că teoria diagramatică a modelului Hubbard orbital degenerat se dovedește a fi similară cu modelul orbital nedegenerat dacă în acesta din urmă înlocuim funcțiile numerice Green cu matrice de ordinul doi în care elementele diagonale corespund tranzițiilor inter-orbitale și elementele nediagonale corespund tranzițiilor intra-orbitale. În cea mai simplă aproximare a diagramelor în lanț pentru modelul Hubbard, a fost calculată densitatea stărilor electronice, care este determinată de densitatea zero a stărilor. Am arătat că în această aproximare, cazul special al umplerii la jumătate a benzilor de energie electronică ale sistemului corespunde doar stării dielectrice a sistemului. Un rezultat similar în această aproximare este cunoscut pentru modelul Hubbard nedegenerat, când densitatea stărilor electronice este egală cu funcția zero a densității stărilor și are forma $\rho_0 (E^2 - \mu^2)/E$ [35].

În cadrul modelului Anderson dublu degenerat, sumând o clasă infinită de diagrame de un anumit tip, am obținut o expresie aproximativă pentru funcțiile de corelare (în special, pentru parametrii de ordine supraconductoare) și am determinat densitatea stărilor electronice. Am arătat că la temperaturi scăzute, starea sistemului poate fi doar metalică, iar efectul de corelație inter-orbitală are o contribuție pozitivă la această stare metalică. Am obținut și analizat ecuațiile liniare pentru parametrii de ordine a stării supraconductoare și am formulat o condiție pentru implementarea supraconductivității singletice și determinarea temperaturii critice în sistem.

În al treilea rând, a fost dezvoltată o abordare diagramatică pentru modelul Anderson-Holstein al impurității în presupunerea unei interacțiuni Coulomb puternice a electronilor de impurități și a unei interacțiuni puternice electron-fononice a acestor electroni cu fononii optici. În

acest caz, toate interacțiunile din sistem au fost incluse în Hamiltonianul de aproximație zero, iar extinderea într-o serie de teorie a perturbațiilor a fost realizată după parametrul de hibridizare. S-a aplicat transformarea canonică Lang-Firsov, care a redus problema studiată la luarea în considerare a polaronilor în mișcare (electroni înconjurați de nori de fononi grei). Studiind dinamica norilor de fononi, a fost arătat că pe măsură ce parametrul de hibridizare crește, energia modului colectiv de vibrații ale fononului scade. De asemenea, am obținut ecuații de tip Dyson pentru funcțiile polaronice Green în cazul general (inclusiv funcțiile anormale Green) și a fost obținută o coincidență a operatorilor lor de masă cu operatorii de masă pentru sistemul electronilor de conducție.

Contribuția personală a autorului la rezultatele prezentate în teză: autorul a studiat și analizat literatura de specialitate pe tema tezei, a stăpânit tehnica diagramatică pentru sisteme puternic corelate, a efectuat și a analizat toate calculele, a analizat și sintetizat rezultatele și a contribuit la redactarea și pregătirea desenelor și manuscriselor publicațiilor legate de rezultatele prezentate în această teză.

Recomandări:

Este, de asemenea, interesant să se ia în considerație funcțiile ireductibile Green atunci când se analizează tranziția metal-izolator Mott în cadrul modelului Hubbard dublu degenerat, precum și calculul caracteristicilor termodinamice ale modelului, cum ar fi, de exemplu, capacitatea termică specifică.

Se poate presupune că perechile Cooper formate din d-electroni într-o stare fără nori de fononi înconjurați au o contribuție mai semnificativă la supraconductibilitatea modelului Anderson al impurității decât cele formate din electroni într-o stare cu nori de fononi grei. Această ipoteză poate fi confirmată printr-un studiu suplimentar al modelului Anderson-Holstein al impurității.

BIBLIOGRAFIE

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

- [15] МОСКАЛЕНКО, В.А., Обобщенная теорема Вика для электронных систем с сильными корреляциями. Вопросы квантовой теории конденсированных сред: [сб. ст.]. Кишинев: Штиинца. 1990, pp. 122-134. ISBN 5-376-00774-X.
- [16] ВЛАДИМИР, М.И., МОСКАЛЕНКО, В.А. Диаграммная техника для модели Хаббарда. In: ТМФ, vol. 82, nr. 3, pp. 428–437, 2305-3135, 0564-6162 ; VLADIMIR, M.I., MOSKALENKO, V.A. Diagram technique for the Hubbard model. In: Theoret. and Math. Phys. 1990, vol. 82, nr. 3, pp. 301–308. ISSN 0040-5779, 1573-9333
- [17] МОСКАЛЕНКО, В.А., ДОХОТАРУ, Л.А., Читро, Р. Диаграммная теория для периодической модели Андерсона. Свойство стационарности термодинамического потенциала. In: ТМФ. 2010, vol. 162, nr. 3, pp. 439–458. ISSN 0564-6162, 2305-3135; MOSKALENKO, V.A., DOHOTARU, L.A., CITRO, R. Diagram theory for the periodic Anderson model: Stationarity of the thermodynamic potential. Theoret. and Math. Phys. 2010, vol. 162, nr. 3, pp. 366–382. ISSN 0040-5779, 1573-9333.
- [18] LUTTINGER, J.M., WARD, J.C. Ground-State Energy of a Many-Fermion System. II. In: Phys. Rev. 1960, vol. 118, nr. 5, pp. 1417-1427. ISSN 0031-899X, 1536-6065
- [19] RICHARD, P., SATO, T., NAKAYAMA, K., SOUMA, S. et. al. Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy of the Fe-Based Ba_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂ High Temperature Superconductor: Evidence for an Orbital Selective Electron-Mode Coupling. In: Phys. Rev. Lett. 2009, vol. 102, nr. 4, pp. 047003 {4}. ISSN 0031-9007; 1079-7114.
- [20] GUNNARSSON, O. Superconductivity in fullerenes In: Rev. Modern Phys. 1997, 69, nr. 2, pp. 575–606. ISSN 1539-0756
- [21] GWEON, Gh., SASAGAWA, T., ZHOU, S. et al. An unusual isotope effect in a high-transition-temperature superconductor. In: Nature. 2004, vol. 430, pp. 187–190. ISSN 1476-4687, 0028-0836
- [22] FRANCK, J. Pm. Physical Properties of High Temperature Superconductors IV. Singapore: World Scientific. 1994, pp. 189–293. ISBN 9814525146, 9789814525145
- [23] WEN-MIN, H., HSIU-HAU, L. Anomalous isotope effect in iron-based superconductors. In: Nature Sci Rep. 2019, vol. 9, nr. 1, pp. 5547. ISSN 2045-2322
- [24] АЛЕКСАНДРОВ, А.С., КРЕБС А.Б., Поляроны в высокотемпературных сверхпроводниках. In: УФН. 1992, vol. 162, nr. 5, pp. 1–85; ISSN 0042-1294, 1996-6652 ALEXANDROV, A. S, KREBS A. B. Polarons in high-temperature superconductors. In: Sov. Phys. Usp. 1992, vol. 35, nr. 5, pp. 345–383. ISSN 1063-7869, 1468-478
- [25] ALEXANDROV, A.S. Superconducting Polarons and Bipolarons. In: Polarons in Advanced Materials. Springer Series in Materials Science. 2007, vol. 103, pp. 257–310. ISBN 978-1-4020-6347-3; 978-1-4020-6348-0.

- [26] MOSKALENKO, V.A., ENTEL P., MARINARO, M., DIGOR, D.F. Strong interaction of correlated electrons with phonons: exchange of phonon clouds by polarons. In: Zh. Eksp. Teor. Fiz. 2003, vol. 124, nr. 3, pp. 700-713.; In: JETP, vol. 97, nr. 3, pp. 632-644. ISSN 0044-4510.
- [27] ARMITAGE, N.P., FOURNIER, P., and GREENE, R.L. Progress and perspectives on electron-doped cuprates. In: Rev. Mod. Phys. 2010, vol. 82, nr. 3, pp. 2421-2487. ISSN 0034-6861 , 1539-0756
- [28] ВАКАРУ, С.И., ВЛАДИМИР, М.И. МОСКАЛЕНКО, В.А. Диаграммная техника для Модели Хаббарда II. Переход металл–диэлектрик. In: ТМФ. 1990, vol. 85, nr. 2, pp. 248–257; ISSN 0564-6162, 2305-3135; VAKARU, S.I., VLADIMIR, M.I., MOSKALENKO, V.A. Diagram technique for the Hubbard model. II. Metal-insulator transition. In: Theoret. and Math. Phys. 1990, vol. 85, nr. 2, pp. 1185–1192. ISSN 0040-5779, 1573-9333.
- [29] БОГОЛЮБОВ, Н.Н., МОСКАЛЕНКО, В.А. К вопросу о существовании сверхпроводимости в модели Хаббарда. ТМФ. In: 1991, vol. 86, nr. 1, pp. 16–30; ISSN 0564-6162, 2305-3135; BOGOLYUBOV, N.N., MOSKALENKO, V.A. On the existence of superconductivity in the Hubbard model. In: Theoret. and Math. Phys. 1991, vol. 86, nr. 1, pp. 10–19. ISSN 0040-5779, 1573-9333.
- [30] БОГОЛЮБОВ, Н.Н., МОСКАЛЕНКО, В.А. Сверхпроводимость в модели Хаббарда с отклонением от половинного заполнения. In: ТМФ. 1992, vol. 92, nr. 2, pp. 182–190 ISSN 0564-6162, 2305-3135; Bogolyubov, N.N., Moskalenko, V.A. Superconductivity in the Hubbard model with deviation from half filling. In: Theoret. and Math. Phys. 1992, vol. 92, nr. 2, pp. 820–825. ISSN 0040-5779, 1573-9333
- [31] MOSKALENKO, V.A., ENTEL, P., DOHOTARU, L.A., DIGOR, D.F., CITRO, R. Diagrammatic theory for Anderson impurity model Dubna. 2008, 36 p. (Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research).
- [32] ЛАНГ, И.Г., ФИРСОВ, Ю.А. Кинетическая теория полупроводников с малой подвижностью. In: ЖЭТФ. 1962, vol. 43, nr. 11, pp. 1843–1860; LANG, I.G., FIRSOV, Y.A. Kinetic Theory of Semiconductors with Low Mobility. In: Zh. Eksper. Teor. Fiz. 1962, vol. 43, pp. 1843. ISSN 0044-4510.
- [33] MOSKALENKO, V.A. Electron-phonon interaction of strong correlated systems. In: 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.
- [34] 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

- [35] ИЗЮМОВ, Ю.А., СКРЯБИН, Ю.Н., Статистическая механика магнитоупорядоченных систем, Москва: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987, р. 264

АННОТАЦИЯ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ADNOTARE

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ABSTRACT

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

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

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

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

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

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

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

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

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

CEBOTARI IRINA

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

131.01 – FIZICA MATEMATICĂ

Rezumatul tezei de doctor în științe fizice

Aprobat spre tipar: 8.11.2024

Formatul hârtiei 60x84 1/16

Hârtie ofset. Tipar ofset.

Tiraj 25 ex.

Coli de tipar: 2.1

Comanda nr. 144/24

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