Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

И. Г. Медведев, Новая диаграммная техника для модели Андерсона, *ТМФ*, 1996, том 109, номер 2, 279–294

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1227>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 52.205.19.152

26 апреля 2023 г., 16:32:11

И. Г. Медведев*

НОВАЯ ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА ДЛЯ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА

Сформулирована обобщенная теорема Вика для модели Андерсона, и на ее основе построена диаграммная техника для температурных функций Грина и термодинамического потенциала. При этом основное внимание уделяется области сильной связи примесного атома с металлом. В результате решения уравнений Дайсона функция Грина примесного атома выражена через массовый оператор. Получены вклад в массовый оператор и поправки к энергиям локализованных состояний во втором порядке теории возмущений.

1. ВВЕДЕНИЕ

Кулоновское отталкивание между двумя электронами в атоме магнитной примеси оказывает существенное влияние на ее поведение в металле. Для объяснения образования магнитного момента в сплавах переходных металлов Андерсоном была предложена модель [1], которая затем нашла широкое применение для описания систем с промежуточной валентностью и тяжелыми фермионами [2]. Кулоновское отталкивание между двумя электронами в адсорбированном атоме играет важную роль и в явлениях адсорбции на переходных металлах. Эффекты сильных корреляций в адсорбционных системах также могут исследоваться на основе модели Андерсона [3]. Интерес к этим эффектам постоянно возрастает в связи с развитием современных спектроскопических методов. Хотя одноэлектронная теория достигла значительных успехов в интерпретации наблюдаемых спектров, она не может объяснить многих характерных черт, обусловленных многочастичными эффектами.

Гамильтониан Андерсона имеет вид [1]

$$H = \sum_{k, \sigma} \varepsilon_k n_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \left(\varepsilon_a n_{a\sigma} + \frac{1}{2} U n_{a\sigma} n_{a-\sigma} \right) + \sum_{k, \sigma} (V_{ak} c_{a\sigma}^+ c_{k\sigma} + \text{э.с.}), \quad (1)$$

где $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$; $c_{k\sigma}^+$, $c_{a\sigma}^+$ и $c_{k\sigma}$, $c_{a\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электронов в состоянии $|k\rangle$ металла с энергией ε_k и в состоянии $|a\rangle$ атома магнитной примеси или адсорбированного атома с энергией ε_a , σ — проекция спина, U — параметр кулоновского отталкивания двух электронов в атоме примеси, V_{ak} — параметр гибридизации. Модель Андерсона была решена точно с помощью анзаца Бете в пределе бесконечной ширины B зоны электронов проводимости металла, т.е. когда $B \gg V, U, \varepsilon_a$, где

* Институт электрохимии им. А. Н. Фрумкина Российской академии наук

$V = (\sum_k |V_{ak}|^2)^{1/2}$ [4]. Полученные для этого случая результаты включают строгое описание ряда термодинамических свойств модели [4, 5]. Однако для функции Грина примесного атома в этом пределе возможны лишь приближенные вычисления [6, 7]. Для конечных значений B в работе [8] была получена точная функция Грина примесного атома в пределе полностью заполненной или пустой зоны электронов проводимости металла. С другой стороны, в случае адсорбции на переходных металлах и для магнитных примесей в узкозонных сплавах имеем условие $B \lesssim V, U$, а зона не является пустой или полностью заполненной. Для этого случая, который соответствует сильной связи примесного атома с металлом, характерно образование локализованных электронных состояний, которые в результате кулоновского взаимодействия могут иметь конечное время жизни. Чтобы построить теорию возмущений в области сильной связи, удобно определить состояние $|b\rangle$, локализованное в окрестности примеси и являющееся линейной комбинацией состояний $|k\rangle$ металла [9]

$$|b\rangle = V^{-1} \sum_k V_{ak}^* |k\rangle, \quad (2)$$

и операторы рождения и уничтожения в этом состоянии

$$c_{b\sigma}^+ = V^{-1} \sum_k V_{ak}^* c_{k\sigma}^+, \quad c_{b\sigma} = V^{-1} \sum_k V_{ak} c_{k\sigma}. \quad (3)$$

Вместо системы состояний $|k\rangle$ введем эквивалентную ей систему, включающую состояние $|b\rangle$ и ортогональные ему ортонормированные состояния $|i\rangle$, которые являются одновременно собственными состояниями возмущенного металла, т.е. металла, от которого отделено состояние $|b\rangle$ [10–12]. Тогда гамильтониан Андерсона (1) можно переписать в виде [12]

$$H = H_0 + \sum_{i,\sigma} \lambda_i n_{i\sigma} + H_{\text{int}}, \quad (4)$$

здесь H_0 – гамильтониан комплекса, включающего состояния $|a\rangle$ и $|b\rangle$,

$$H_0 = \sum_{\sigma} \left\{ \varepsilon_a n_{a\sigma} + \varepsilon_b n_{b\sigma} + \frac{1}{2} U n_{a\sigma} n_{a-\sigma} + V (c_{a\sigma}^+ c_{b\sigma} + \text{э.с.}) \right\}, \quad (5)$$

$\varepsilon_b = V^{-2} \sum_k \varepsilon_k |V_{ak}|^2$, $c_{i\sigma}^+$ и $c_{i\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения электронов в состоянии $|i\rangle$,

$$H_{\text{int}} = \sum_{i,\sigma} \left(\frac{\mu_i}{2} c_{b\sigma}^+ c_{i\sigma} + \text{э.с.} \right). \quad (6)$$

Процедура определения параметров λ_i и μ_i , подобная применявшейся Кондо в его модели [10], обсуждается Волокитиным [12]. Если положить $H_{\text{int}} = 0$, получим предел сильной связи примеси и металла, в котором комплекс из состояний $|a\rangle$ и $|b\rangle$ и возмущенный металл не взаимодействуют друг с другом и который допускает точное решение. Формально этот предел отвечает случаю, когда ширина зоны B стремится к нулю. Слагаемое H_{int} в гамильтониане (4) описывает взаимодействие сильно связанного комплекса и остального металла.

В настоящее время существует обширная литература, посвященная вычислению функции Грина примесного атома в модели Андерсона. При этом используются разложение в ряд по параметру U , метод резольвенты, метод вариационных производных, метод расщепления цепочки уравнений движения для функций Грина, техника вспомогательных бозонных полей, метод Монте-Карло (см., например, цитированную литературу в работах [7, 13]). Другим перспективным методом, который применяется в модели Хаббарда [14] и связан с большим значением кулоновского отталкивания U , является учет параметра U в нулевом приближении. В этом случае в качестве возмущения рассматривается или вклад от гибридизации в гамильтониан (1) [9, 15] (слабая связь примесного атома с металлом), или взаимодействие H_{int} (6) [12, 16, 17] (сильная связь примесного атома с металлом). С формальной точки зрения эти способы эквивалентны, т.к. гамильтонианы (1) и (4) имеют одинаковую структуру. Действительно, обозначим через H_F , где

$$H_F = H_0 + \sum_i H_i, \quad (7)$$

невозмущенную часть гамильтониана (4). Здесь $H_i = \sum_{\sigma} \lambda_i n_{i\sigma}$. Тогда в гамильтониане (1) аналогом H_i является $\sum_{\sigma} \varepsilon_k n_{k\sigma}$, аналогом H_0 — слагаемое $\sum_{\sigma} (\varepsilon_a n_{a\sigma} + \frac{1}{2} U n_{a\sigma} n_{a-\sigma})$ и возмущению H_{int} соответствует вклад от гибридизации $\sum_{k,\sigma} (V_{ak} c_{a\sigma}^+ c_{k\sigma} + \text{э.с.})$. В модели Хаббарда оператор H_{int} описывает перескоки электронов между узлами кристаллической решетки. Ниже диаграммная техника строится для гамильтониана Андерсона в форме (4), и разложение в ряд теории возмущений проводится в пределе сильной связи по возмущению H_{int} (6). Однако с учетом указанной аналогии все результаты немедленно переносятся на случай, когда в качестве возмущения рассматривается гибридизация. Отметим, что статистический оператор невозмущенной системы обладает свойством факторизации:

$$e^{-\beta H_F} = e^{-\beta H_0} \prod_i e^{-\beta H_i}. \quad (8)$$

Общей трудностью и для модели Андерсона, и для модели Хаббарда при использовании H_{int} в качестве возмущения является отсутствие канонических антикоммутирующих соотношений для операторов рождения и уничтожения в представлении взаимодействия из-за неквадратичности H_0 по $c_{a\sigma}^+$, $c_{a\sigma}$ вследствие кулоновского взаимодействия электронов. В результате обычная теорема Вика в этом случае неприменима. В работе [9], например, эта трудность обходится путем использования теории возмущений в довольно громоздкой матричной форме. Теорема Вика может быть спасена посредством введения вспомогательных бозонных полей [2], однако количественные расчеты ограничены пределом большого вырождения атомной орбитали. С другой стороны, Хаббардом [18] была построена диаграммная техника для модели [14] на основе кумулянтного разложения Кубо для статистических средних от операторов Хаббарда. Аналогичная диаграммная техника предложена в работе Барабанова, Кикоина и Максимова [15] для модели Андерсона в форме (1). Однако диаграммная техника для модели Хаббарда, построенная на основе операторов Хаббарда, имеет ряд особенностей [19]. Более простой является диаграммная техника для этой модели, предложенная в работе Владимира и Москаленко [19]. Эта техника основана на обобщенной теореме Вика (ОТВ) для модели

Хаббарда, согласно которой среднее от T -произведения электронных операторов представлено в виде суммы произведений одноузельных кумулянт [19].

В настоящей работе сформулирована аналогичная ОТВ для модели Андерсона, согласно которой статистические средние от T -произведений операторов рождения и уничтожения также представляют собой сумму произведений одноузельных кумулянт. Как и в случае модели Хаббарда, эта теорема опирается на свойство факторизации (8) невозмущенного статистического оператора и учитывает в нулевом порядке кулоновское взаимодействие между электронами. Роль “узлов” играют состояния $|i\rangle$, $i \geq 1$, возмущенного металла и “узел” “0”, соответствующий гамильтониану H_0 . Операторы рождения и уничтожения на узле “0”, кроме спинного индекса σ , обладают дополнительной “степенью свободы”, связанной с двумя возможными индексами a и b . Для гамильтониана Андерсона, записанного в форме (1), роль узла “0” играет примесный атом, а узлам с $i \geq 1$ соответствуют состояния $|k\rangle$. Так как кулоновское взаимодействие входит только в гамильтониан H_0 , то кумулянты, отвечающие узлу i и содержащие более двух фермиевских операторов, равны нулю. Другим упрощающим обстоятельством по сравнению с моделью Хаббарда является отсутствие прямого взаимодействия узлов i между собой через возмущение H_{int} , которое описывает только перескок электронов из узла “0” на узлы i . Все это приводит к более простой структуре диаграмм для температурной функции Грина примесного атома и термодинамического потенциала по сравнению с моделью Хаббарда.

В разделе 2 формулируется ОТВ для модели Андерсона и строится диаграммная техника для температурной функции Грина и термодинамического потенциала системы. В разделе 3 получены уравнения Дайсона для функций Грина, решение которых позволяет выразить температурную функцию Грина примесного атома через массовый оператор Σ . Получен вклад $\Delta\Sigma^{(2)}$ в массовый оператор во втором порядке по H_{int} . Для симметричной задачи и температуры $T = 0$ приведена формула для поправок $\Delta\varepsilon_i^{(2)}$ к энергиям локализованных состояний во втором порядке по H_{int} (6). Получено также приближенное выражение для Σ , которое является точным как во втором порядке по H_{int} , так и во втором порядке по параметру гибридизации V . Обсуждение деталей вычислений и ряд громоздких выражений вынесены в приложение.

2. ОТВ И ПОСТРОЕНИЕ ДИАГРАММНОЙ ТЕХНИКИ ДЛЯ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ФУНКЦИИ ГРИНА И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

Полные одночастичные температурные функции Грина электронов имеют вид

$$G(p\tau\sigma\xi | p'\tau'\sigma'\xi') = - \frac{\langle T c_{p\xi\sigma}(\tau) \bar{c}_{p'\xi'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}, \quad (9)$$

где $p = 0, i$; индекс ξ в случае $p = i$ опускается, а при $p = 0$ принимает значения a и b , $U(\beta)$ – температурный оператор эволюции:

$$U(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} \dots \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots d\tau_n T(H_{\text{int}}(\tau_1) \dots H_{\text{int}}(\tau_n)). \quad (10)$$

В (9) и (10) все операторы записаны в представлении взаимодействия:

$$A(\tau) = \exp(\tau H'_F) A \exp(-\tau H'_F), \quad H'_F = H_F - \mu N, \quad \langle A \rangle_0 = \text{Sp}[A \exp(\beta(\Omega_0 - H'_F))],$$

где μ – химический потенциал системы, N – оператор полного числа частиц, $\Omega_0(\mu, T)$ – термодинамический потенциал при $H_{\text{int}} = 0$. В модели Андерсона особый интерес представляет температурная функция Грина примесного атома $G_{a\sigma}(\tau, \tau') = G(0a\sigma\tau | 0a\sigma\tau')$, для которой ниже и будет строиться диаграммная техника. В отсутствие взаимодействия H_{int} функция Грина (9) пропорциональна $\delta_{pp'}$ и соответствующие нулевые одночастичные температурные функции Грина $G^{(0)}$ имеют вид

$$G^{(0)}(i\sigma\tau | j\sigma'\tau') = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}G_{i\sigma}^{(0)}(\tau - \tau'), \quad (11)$$

$$G^{(0)}(0\xi\sigma\tau | 0\xi'\sigma'\tau') = \delta_{\sigma\sigma'}G_{\xi\xi'\sigma}^{(0)}(\tau - \tau'). \quad (12)$$

Отсюда и из структуры H_{int} сразу следует, что, в отличие от модели Хаббарда, диаграммы нечетного порядка по H_{int} равны нулю. Отметим, что нулевые функции Грина $G_{\xi\xi'\sigma}^{(0)}(\tau - \tau')$ учитывают электрон-электронное взаимодействие, которое входит в гамильтониан H_0 .

Перейдем к фурье-представлению по переменной τ :

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n G(i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}, \quad \omega_n = (2n+1)\frac{\pi}{\beta}. \quad (13)$$

Выполняя в одночастичной температурной функции Грина $G_{a\sigma}(i\omega_n)$ аналитическое продолжение со счетного множества точек $\mu + i\omega_n$ на верхнюю комплексную полуплоскость, получим функцию $G_{a\sigma}(z)$, которая совпадает с аналитическим продолжением в эту полуплоскость запаздывающей функции Грина $G_{a\sigma}^R(\omega) = G_{a\sigma}(\omega + i\delta)$. Аналитическая в верхней полуплоскости функция $G_{a\sigma}^R(z)$ [20] может иметь полюсы в нижней полуплоскости и точки ветвления на вещественной оси.

В соответствии с видом гамильтониана H_i фурье-образ нулевой температурной функции Грина $G_{i\sigma}^{(0)}(z)$ совпадает с фурье-образом температурной функции Грина свободных электронов:

$$G_{i\sigma}^{(0)}(z) = (z - \lambda_i)^{-1}. \quad (14)$$

В формулы, отвечающие вкладу рассматриваемых ниже диаграмм, функция Грина $G_{i\sigma}^{(0)}(z)$ входит через сумму

$$\chi(z) = \sum_i \frac{|\mu_i|^2}{4} G_{i\sigma}^{(0)}(z). \quad (15)$$

Пользуясь правилом суммирования, полученным в [12], находим, что

$$\chi(z) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{\varphi(\varepsilon) d\varepsilon}{z - \varepsilon}, \quad \varphi(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta(\varepsilon)}{\Delta^2(\varepsilon) + \Lambda^2(\varepsilon)}, \quad (16)$$

здесь

$$\Delta(\varepsilon) = \sum_k |\langle b | k \rangle|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k), \quad \Lambda(z) = \frac{1}{\pi} P \int_{-1}^1 \frac{\Delta(\varepsilon) d\varepsilon}{z - \varepsilon} \quad (17)$$

— локальная плотность электронных состояний металла, спроецированная на состояние $|b\rangle$, и ее преобразование Гильберта. В формулах (16) и (17) энергия измеряется в единицах $B/2$, где B — ширина зоны. В качестве начала отсчета энергий одночастичных состояний выбран центр зоны. Для металла, имеющего макроскопически большой объем, функция $\Delta(\varepsilon)$ непрерывна и обращается в нуль у дна и у вершины зоны. Тогда формулы (16) и (17) определяют функции $\chi(z)$ и $\Lambda(z)$, аналитические в комплексной плоскости с разрезом по отрезку $[-1, 1]$. Из (16) следует, что

$$\varphi(\varepsilon) = -\operatorname{Im} \chi(\varepsilon + i\delta) = \operatorname{Im} [\pi \Lambda(\varepsilon + i\delta)]^{-1}.$$

Рассматривая интеграл в (16) как сумму интегралов по верхнему и нижнему берегам разреза и учитывая, что $\pi \Lambda(z) = 1/z + \varepsilon_b/z^2$ при $|z| \rightarrow \infty$, имеем [16]

$$\chi(z) = z - \varepsilon_b - [\pi \Lambda(z)]^{-1}. \quad (18)$$

Используя “уравнения движения” для нулевых температурных функций Грина $G_{\xi\xi'\sigma}^{(0)}(\tau - \tau')$, легко показать, что

$$G_{ab\sigma}^{(0)}(z) = G_{ba\sigma}^{(0)}(z) = V \frac{G_{aa\sigma}^{(0)}(z)}{z - \varepsilon_b}, \quad G_{bb\sigma}^{(0)}(z) = \frac{1}{z - \varepsilon_b} + V^2 \frac{G_{aa\sigma}^{(0)}(z)}{(z - \varepsilon_b)^2}. \quad (19)$$

Определим массовый оператор $\Sigma_0(z)$, отвечающий нулевой функции Грина примесного атома $G_{aa\sigma}^{(0)}(z)$, выражением

$$G_{aa\sigma}^{(0)}(z) = [z - \varepsilon_a - \Sigma_0(z) - V^2 \pi \Lambda_0(z)]^{-1}, \quad (20)$$

где функция $\Lambda_0(z) = [\pi(z - \varepsilon_b)]^{-1}$ соответствует плотности состояний $\Delta(\varepsilon) = \delta(\varepsilon - \varepsilon_b)$. Для температуры $T = 0$ и симметричной задачи ($\varepsilon_a = -U/2$) массовый оператор $\Sigma_0(z)$ дается формулой [21]

$$\Sigma_0(z) = \frac{U}{2} + M_{0c}(z), \quad M_{0c}(z) = \frac{U^2 z}{4(z^2 - 9V^2)}. \quad (21)$$

Для несимметричной задачи $\Sigma_0(z) = U n_{a0}/2 + M_{0c}(z)$. Здесь n_{a0} и $M_{0c}(z)$ — среднее число электронов на примесном атоме в нулевом приближении и неэлектростатическая часть массового оператора, которая дается формулой (П1.4) работы [17].

При вычислении полных температурных функций Грина и термодинамического потенциала системы по теории возмущений возникают многочастичные функции Грина вида

$$G_n^{(0)}(x_1 \dots x_n | x'_1 \dots x'_n) = (-1)^n \langle T c(x_1) \dots c(x_n) \bar{c}(x'_1) \dots \bar{c}(x'_n) \rangle_0, \quad (22)$$

где $x_k = p_k \xi_k \sigma_k \tau_k$, $x'_k = p'_k \xi'_k \sigma'_k \tau'_k$. ОТВ для вычисления этих функций в модели Андерсона формулируется точно так же, как и для модели Хаббарда [19]. Отсылая за подробным выводом к работе [19], отметим только, что при вычислении функции Грина (22) возникает $n!$ слагаемых обычной теоремы Вика плюс сумма слагаемых, содержащих произведения неприводимых функций Грина $G_m^{(0)\text{ir}}$ (где $2 \leq m < n$) между собой и на одночастичные функции Грина плюс слагаемое $G_m^{(0)\text{ir}}$ с $m = n$. Функция $G_m^{(0)\text{ir}}$ является одноузельным кумулянтном

$$\begin{aligned} G_m^{(0)\text{ir}}(x_1 \dots x_m \mid x'_1 \dots x'_m) = \\ = \delta_{i_1 i_2} \dots \delta_{i_1 i_m} \delta_{i'_1 i'_1} \dots \delta_{i'_1 i'_m} G_m^{(0)\text{ir}}(\xi_1 \sigma_1 \tau_1 \dots \mid \xi'_1 \sigma'_1 \tau'_1 \dots) \end{aligned} \quad (23)$$

и определяется из разложения функции Грина $G_m^{(0)}$ посредством ОТВ, т.е. $G_m^{(0)\text{ir}} = G_m^{(0)}$ минус все члены разложения $G_m^{(0)}$, кроме $G_m^{(0)\text{ir}}$. Подчеркнем, что в данном случае вычисления проводятся для операторов, относящихся к одному и тому же узлу. Из указанной структуры $G_m^{(0)\text{ir}}$ очевидно, что в модели Андерсона от нуля отличны лишь кумулянты для узла "0". Знаки слагаемых ОТВ определяются четностью перестановок фермиевских операторов, необходимых для образования из исходных произведений операторов данной структуры [19]. Как и в обычной диаграммной технике, вакуумные диаграммы сокращаются в числителе и знаменателе полных функций Грина (9), поэтому следует учитывать только связные диаграммы.

Рассмотрим структуру разложения температурной функции Грина примесного атома $G_{a\sigma}(\tau, \tau')$ в ряд теории возмущений. Как уже отмечалось выше, члены нечетного порядка по H_{int} равны нулю. Во втором порядке по H_{int} после замены переменных возникает функция Грина $G_3^{(0)}(0a\sigma\tau, 0b\sigma_1\tau_1, i\sigma_2\tau_2 \mid 0a\sigma\tau', 0b\sigma_2\tau_2, j\sigma_1\tau_1)$, которая определена формулой (22). Ее разложение с помощью ОТВ дается формулой (25) работы [19]. В случае модели Андерсона большая часть членов этого разложения равна нулю. Тогда, используя формулы (11) и (12), для связной части $(G_3^{(0)})_c$ указанной функции Грина имеем равенство

$$\begin{aligned} (G_3^{(0)})_c = \delta_{\sigma\sigma_1} \delta_{\sigma\sigma_2} \delta_{ij} G_{ab\sigma}^{(0)}(\tau - \tau_2) G_{i\sigma}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) G_{ba\sigma}^{(0)}(\tau_1 - \tau') + \\ + \delta_{ij} \delta_{\sigma_1\sigma_2} G_{i\sigma_1}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) G_2^{(0)\text{ir}}(a\sigma\tau, b\sigma_1\tau_1 \mid a\sigma\tau', b\sigma_1\tau_2), \end{aligned} \quad (24)$$

где

$$\begin{aligned} G_2^{(0)\text{ir}}(a\sigma\tau, b\sigma_1\tau_1 \mid a\sigma\tau', b\sigma_1\tau_2) = \langle T c_{a\sigma}(\tau) c_{b\sigma_1}(\tau_1) \bar{c}_{a\sigma}(\tau') \bar{c}_{b\sigma_1}(\tau_2) \rangle_0 - \\ - \delta_{\sigma\sigma_1} G_{ab\sigma}^{(0)}(\tau - \tau_2) G_{ba\sigma}^{(0)}(\tau_1 - \tau') + G_{aa\sigma}^{(0)}(\tau - \tau') G_{bb\sigma_1}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2). \end{aligned} \quad (25)$$

Первое слагаемое в (24) соответствует вкладу обычной теоремы Вика. Аналогичное слагаемое возникает в четвертом порядке по H_{int} . Кроме того, в четвертом порядке отличный от нуля вклад в связные диаграммы дают слагаемые вида

$$G_{i\sigma_1}^{(0)}(\tau_2 - \tau_3) G_{bb\sigma_1}^{(0)}(\tau_3 - \tau_4) G_{j\sigma_1}^{(0)}(\tau_4 - \tau_1) G_2^{(0)\text{ir}}(a\sigma\tau, b\sigma_1\tau_1 \mid a\sigma\tau', b\sigma_1\tau_2), \quad (26)$$

$$G_{i\sigma_1}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) G_{j\sigma}^{(0)}(\tau_3 - \tau_4) G_{ba\sigma}^{(0)}(\tau_4 - \tau') G_2^{(0)\text{ir}}(a\sigma\tau, b\sigma_1\tau_1 \mid b\sigma\tau_3, b\sigma_1\tau_2), \quad (27)$$

$$G_{i\sigma_1}^{(0)}(\tau_2 - \tau_1) G_{ab\sigma}^{(0)}(\tau - \tau_4) G_{j\sigma}^{(0)}(\tau_4 - \tau_3) G_2^{(0)\text{ir}}(b\sigma\tau_3, b\sigma_1\tau_1 \mid a\sigma\tau', b\sigma_1\tau_2), \quad (28)$$

а также слагаемое, содержащее кумулянт $G_3^{(0) \text{ ir}}$:

$$G_{i\sigma_1}^{(0)}(\tau_3 - \tau_1)G_{j\sigma_2}^{(0)}(\tau_4 - \tau_2)G_3^{(0) \text{ ir}}(a\sigma\tau, b\sigma_1\tau_1, b\sigma_2\tau_2 | a\sigma\tau', b\sigma_1\tau_3, b\sigma_2\tau_4). \quad (29)$$

Выражение для $G_3^{(0) \text{ ir}}$ через функции $G_2^{(0) \text{ ir}}$ и одночастичные функции Грина дается формулой (27) работы [19].

Рис. 1

На рис. 1 приведены диаграммы для полной температурной функции Грина примесного атома $G_{a\sigma}(z)$ в первых четырех порядках теории возмущений по H_{int} , соответствующие слагаемым (25)–(29). Сплошной линией обозначены одночастичные функции Грина $G_{\xi\xi'\sigma}^{(0)}$, причем значения, принимаемые индексами ξ и ξ' , указаны у начала и конца линии. Штриховой линии соответствует функция $\chi(z)$ (18), которая описывает эффективный вклад, отвечающий распространению электронов в состояниях $|i\rangle$. Как уже отмечалось во введении, в модели Андерсона нет прямого взаимодействия узлов i между собой посредством H_{int} . На узлах i отсутствует также кулоновское отталкивание электронов. Это позволяет упростить структуру диаграмм по сравнению с диаграммной техникой в модели Хаббарда путем замены совокупности линий вида $t(1, 1')G_i^{(0)}(1' - 2)t(2, 2')$ работы [19] одной линией χ . Одноузельные кумулянты обозначены многоугольниками с указанием у вершин индексов a или b . Знак каждой диаграммы определяется знаком перестановки фермиевских операторов, а коэффициент – числом эквивалентных диаграмм, деленным на $n!$. По независимым спинам и частотам, соответствующим внутренним линиям, производится суммирование.

Если в качестве возмущения использовать вклад в гамильтониан, отвечающий гибридизации состояний $|a\rangle$ и $|k\rangle$, то в этом случае в диаграммах рис. 1 надо просто заменить индекс b индексом a и функцию $\chi(z)$ функцией $\lambda(z) = \pi V^2 \Lambda(z)$.

Изменение термодинамического потенциала системы при введении примеси $\Delta\Omega$ равно $\Delta\Omega_0 + \Delta\Omega_{\text{int}}$, где $\Delta\Omega_0$ – изменение термодинамического потенциала без учета H_{int} и

$$\Delta\Omega_{\text{int}} = -\frac{1}{\beta} \langle U(\beta) \rangle_0^c. \quad (30)$$

Рис. 2

$\Delta\Omega_{\text{int}}$ равно сумме вакуумных связанных диаграмм, которые строятся аналогично диаграммам для функций Грина. Эти диаграммы в первых четырех порядках теории возмущений приведены на рис. 2. Там же приведена диаграмма 6-го порядка, соответствующая обычной теореме Вика. По независимым частотам и спиновым индексам производится суммирование. Так как оператор H_{int} не содержит операторов рождения и уничтожения в состоянии $|a\rangle$, то на диаграммах рис. 2 концы сплошных линий отвечают только состоянию $|b\rangle$, поэтому индекс b опускаем. Диаграммы, соответствующие обычной теореме Вика, рассматривались в работе [16] и были названы кольцевыми. Так как H_{int} состоит из двух эрмитово сопряженных операторов, то перед каждой диаграммой стоит коэффициент 2. После всех возможных замен переменных перед данной кольцевой диаграммой возникает также множитель $1/n$, где $n = 2k$, из-за отличия от нуля только вкладов четного порядка по H_{int} . Таким образом, коэффициент перед каждой кольцевой диаграммой равен $1/k$, и для вклада кольцевых диаграмм $(\Delta\Omega_{\text{int}})_k$ в $\Delta\Omega_{\text{int}}$, который образует ряд для логарифмической функции, имеем полученный нами ранее результат [16]

$$(\Delta\Omega_{\text{int}})_k = -\frac{2}{\beta} \sum_n \ln[1 - \chi(i\omega_n)G_{bb}^{(0)}(i\omega_n)], \quad (31)$$

где $\text{Im} \ln$ берется от $-\pi$ до π . Аналогичный результат был получен в работе [22] для модели Хаббарда.

Класс диаграмм, имеющих в качестве скелетной диаграмму рис. 2 с одним кумулянт $G_2^{(0)\text{ir}}$, также можно просуммировать, используя метод работы [22]. Сама диаграмма рис. 2, содержащая $G_2^{(0)\text{ir}}$, представляет собой поправку низшего порядка $(\Delta\Omega_{\text{int}})_{\text{HK}}^{(4)}$ к $(\Delta\Omega_{\text{int}})_k$. Как показано в приложении, для симметричной задачи имеем $(\Delta\Omega_{\text{int}})_{\text{HK}}^{(4)}/(\Delta\Omega_{\text{int}})_k^{(4)}$ порядка $(U/4V)^2$, и при $U \lesssim 2V$ приближение кольцевых диаграмм достаточно хорошо аппроксимирует изменение термодинамического потенциала $\Delta\Omega_{\text{int}}$.

3. УРАВНЕНИЯ ДАЙСОНА ДЛЯ ФУНКЦИИ ГРИНА ПРИМЕСНОГО АТОМА И МАССОВЫЙ ОПЕРАТОР

Диаграммы рис. 1, соответствующие обычной теореме Вика, легко суммируются. В результате температурная функция Грина $\tilde{G}_{a\sigma}(z)$ в приближении, в котором пренебрегается вкладом диаграмм, содержащих кумулянты $G_n^{(0)\text{ir}}$, равна

$$\tilde{G}_{a\sigma}(z) = G_{aa\sigma}^{(0)}(z) + \frac{G_{ab\sigma}^{(0)}(z)\chi(z)G_{ba\sigma}^{(0)}(z)}{1 - \chi(z)G_{bb\sigma}^{(0)}(z)}. \quad (32)$$

Используя формулы (18)–(20), находим, что

$$\tilde{G}_{a\sigma}(z) = [z - \varepsilon_a - \Sigma_0(z) - \pi V^2 \Lambda(z)]^{-1}. \quad (33)$$

Определим массовый оператор $\Sigma(z)$ выражением $\Sigma(z) = \Sigma_0(z) + \Delta\Sigma(z)$. Вклад $\Delta\Sigma(z)$ обусловлен взаимодействием H_{int} и выражается через многочастичные одноузельные кумулянты.

Действительно, рассмотрим для определенности кумулянт $G_2^{(0)\text{ir}}(\xi\sigma\tau, \xi_1\sigma_1\tau_1 | \xi'\sigma'\tau', \xi_2\sigma_2\tau_2)$. Вследствие однородности системы во времени функция $G_2^{(0)\text{ir}}$ зависит от разности времен. Именно, пусть $G_2^{(0)\text{ir}}$ зависит от разностей $\tau - \tau'$, $\tau_1 - \tau'$ и $\tau_2 - \tau'$. Определим фурье-образ функции $G_2^{(0)\text{ir}}$ формулой

$$G_2^{(0)\text{ir}}(\xi\sigma\tau, \xi_1\sigma_1\tau_1 | \xi'\sigma'\tau', \xi_2\sigma_2\tau_2) = \frac{1}{\beta^3} \sum_{n, n_1, n_2} G_{2;\xi\xi'\sigma;\xi_1\xi_2\sigma_1}^{(0)\text{ir}}(i\omega, i\omega_1, i\omega_2) \times \\ \times \exp\{-i\omega_n(\tau - \tau') - i\omega_{n_1}(\tau_1 - \tau') + i\omega_{n_2}(\tau_2 - \tau')\}, \quad (34)$$

где знак $+$ при $i\omega_{n_2}(\tau_2 - \tau')$ отвечает случаю, когда от аргумента τ_2 зависит оператор рождения электрона в представлении взаимодействия. Пусть, например, $\xi_1 = b$. Тогда, дифференцируя $G_2^{(0)\text{ir}}$ по τ_1 , из уравнений движения находим соотношение, аналогичное формуле (19) для $G_{ba\sigma}^{(0)}$:

$$G_{2;\xi\xi'\sigma;b\xi_2\sigma_1}^{(0)\text{ir}}(i\omega, i\omega_1, i\omega_2) = V G_{2;\xi\xi'\sigma;a\xi_2\sigma_1}^{(0)\text{ir}}(i\omega, i\omega_1, i\omega_2) / (i\omega_1 - \varepsilon_b). \quad (35)$$

Такие же соотношения справедливы и для других индексов, совпадающих с b . Определим теперь вершинную функцию

$$\Gamma_{2;\sigma\sigma_1}(i\omega, i\omega_1, i\omega_2) = G_{2;a a \sigma; a a \sigma_1}^{(0)\text{ir}}(i\omega, i\omega_1, i\omega_2) \times \\ \times [G_{a a \sigma}^{(0)}(i\omega) G_{a a \sigma_1}^{(0)}(i\omega_1) G_{a a \sigma}^{(0)}(i\omega + i\omega_1 - i\omega_2) G_{a a \sigma_1}^{(0)}(i\omega_2)]^{-1}. \quad (36)$$

Тогда из формул (35) и (19) следует, что для любых индексов ξ , ξ' , ξ_1 и ξ_2 справедливо равенство

$$G_{2;\xi\xi'\sigma;\xi_1\xi_2\sigma_1}^{(0)\text{ir}}(i\omega, i\omega_1, i\omega_2) = G_{\xi a \sigma}^{(0)}(i\omega) G_{\xi_1 a \sigma}^{(0)}(i\omega_1) \times \\ \times G_{\xi' a \sigma}^{(0)}(i\omega + i\omega_1 - i\omega_2) G_{\xi_2 a \sigma_1}^{(0)}(i\omega_2) \Gamma_{2;\sigma\sigma_1}(i\omega, i\omega_1, i\omega_2). \quad (37)$$

Выполняя в формуле (37) обратное преобразование Фурье, имеем

$$G_2^{(0)\text{ir}}(\xi\sigma\tau; \xi_1\sigma_1\tau_1 | \xi'\sigma'\tau', \xi_2\sigma_2\tau_2) = \int_0^\beta d\beta_1 \dots \int_0^\beta d\beta_4 G_{\xi a \sigma}^{(0)}(\tau - \beta_1) \times \\ \times G_{\xi_1 a \sigma_1}^{(0)}(\tau_1 - \beta_2) G_{\xi' a \sigma}^{(0)}(\beta_3 - \tau') G_{\xi_2 a \sigma_1}^{(0)}(\beta_4 - \tau_2) \Gamma_2(\sigma\beta_1, \sigma_1\beta_2 | \sigma\beta_3, \sigma_1\beta_4). \quad (38)$$

Рис. 3

С помощью соотношений типа (36) можно также определить вершинные функции Γ_n при $n > 2$. Если теперь диаграммы рис. 1, содержащие кумулянты $G_n^{(0)\text{ir}}$, выразить через вершинные функции Γ_n и суммировать топологически эквивалентные члены, то получим диаграммы, представленные на рис. 3. На этом рисунке заштрихованные n -угольники изображают вершинные функции Γ_n .

Диаграммы рис. 1 и 3 для $G_{a\sigma}$ и аналогичные диаграммы для функции $G_{ba\sigma}$ приводят к следующим уравнениям Дайсона:

$$G_{a\sigma} = G_{aa\sigma}^{(0)} + G_{ab\sigma}^{(0)}\chi G_{ba\sigma} + G_{aa\sigma}^{(0)}\Delta\Sigma G_{a\sigma}, \quad (39)$$

$$G_{ba\sigma} = G_{ba\sigma}^{(0)} + G_{bb\sigma}^{(0)}\chi G_{ba\sigma} + G_{ba\sigma}^{(0)}\Delta\Sigma G_{a\sigma}. \quad (40)$$

Из этих уравнений и формул (18)–(20) получаем выражения для полных функций Грина $G_{a\sigma}(z)$ и $G_{ba\sigma}(z)$:

$$G_{a\sigma}(z) = [z - \varepsilon_a - \Sigma_0(z) - \Delta\Sigma(z) - \pi V^2 \Lambda(z)]^{-1}, \quad (41)$$

$$G_{ba\sigma}(z) = \pi V \Lambda(z) G_{a\sigma}(z). \quad (42)$$

Вид диаграмм, дающих вклад в $\Delta\Sigma$, очевиден из рис. 3. В частности, из формулы (37) находим, что вклад $\Delta\Sigma^{(2)}$ в $\Delta\Sigma$ во втором порядке по H_{int} равен

$$\begin{aligned} \Delta\Sigma_{\sigma}^{(2)}(i\omega_n) &= \frac{1}{\beta} \sum_{\sigma'} \sum_{n'} \Gamma_{2;\sigma\sigma'}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\omega_{n'}) G_{ab\sigma_1}^{(0)}(i\omega_{n'}) \chi(i\omega_{n'}) G_{ba\sigma_1}^{(0)}(i\omega_{n'}) = \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{\sigma'} \sum_{n'} G_{2;\xi\xi\sigma;\sigma'}^{(0)\text{ir}}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\omega_{n'}) \chi(i\omega_{n'}) [G_{a\xi\sigma}^{(0)}(i\omega_n)]^{-2}. \end{aligned} \quad (43)$$

Результат вычисления $\Delta \Sigma^{(2)}(z)$ по формуле (43) для симметричной задачи ($\varepsilon_a = -U/2$, $\Delta(\varepsilon) = \Delta(-\varepsilon)$ и $\mu = 0$) при температуре $T = 0$ приведен в приложении (формула (П.1)).

Используя формулу (П.1), найдем поправки к полюсам функции Грина $G_{a\sigma}(z)$, обусловленные добавкой $\Delta \Sigma^{(2)}(z)$ к массовому оператору. Вследствие симметрии задачи достаточно ограничиться областью $\text{Re } z < 0$. В этой области функция Грина $\tilde{G}_{a\sigma}(z)$ при $V \gtrsim 1$ имеет два полюса ε_1 и ε_2 , где $\varepsilon_2 < \varepsilon_1 < -1$. Для симметричной задачи функцию Грина $G_{aa\sigma}^{(0)}(z)$ (20) можно также записать в виде [23]

$$G_{aa\sigma}^{(0)}(z) = z(z^2 - 9V^2)/[(z^2 - d_1^2)(z^2 - d_2^2)], \quad (44)$$

где $d_1 = -r + s$, $d_2 = -r - s$, $r = (x^2 + 4V^2)^{1/2}$, $s = (x^2 + V^2)^{1/2}$, $x = U/4$. Вследствие взаимодействия H_{int} уровни ε_i являются сдвинутыми уровнями d_i . Во втором порядке по H_{int} имеем $\varepsilon_i = d_i + \chi(d_i)\varkappa_i$, $\varkappa_1 = (rs + x^2 + V^2)/(4rs)$, $\varkappa_2$ получается из $\varkappa_1$ заменой $s \rightarrow -s$. Так как $\chi(d_i) < 0$ и $\varkappa_i > 0$, то уровни ε_i сдвинуты вниз по отношению к d_i . Поправки $\Delta \varepsilon_i^{(2)}$ к ε_i , обусловленные $\Delta \Sigma^{(2)}(z)$, во втором порядке по H_{int} равны $\Delta \Sigma^{(2)}(d_i)/c(d_i)$, где $c(z) = dG_{aa\sigma}^{(0)-1}(z)/dz$. Тогда из (П.1) и (44) находим

$$\Delta \varepsilon_1^{(2)} = \frac{V^2(2s - r)}{2\pi rs} \int_{-1}^0 \frac{[3\varepsilon^2 - 6(r + s)\varepsilon + 2x^2 + 11V^2 + 10rs]\varphi(\varepsilon) d\varepsilon}{(\varepsilon - i\delta - s + x)(\varepsilon - i\delta - s - x)(\varepsilon + d_1)(\varepsilon + d_2)}. \quad (45)$$

Поправка $\Delta \varepsilon_2^{(2)}$ получается из формулы (45) заменой $s \rightarrow -s$. Из формулы (45) следует, что $\Delta \varepsilon_1^{(2)} > 0$. При $\mu = 0$ знаменатели в (45) всегда меньше нуля и $\text{Im } \Delta \varepsilon_1^{(2)} = 0$. При $\mu > 0$ соответствующая формула для $\Delta \varepsilon_1^{(2)}$ включает интеграл по $d\varepsilon$ в пределах от -1 до μ от функции, содержащей в знаменателе сомножитель $(\varepsilon - i\delta - s + x)$. В этом случае вполне реальна ситуация, когда $\mu > s - x > 0$ и у уровня ε_1 появляется ширина. Отметим, что вблизи точки $z = d_2 \approx -3V$ теория возмущений по H_{int} работает плохо из-за наличия в знаменателе функции $\Delta \Sigma^{(2)}(z)$ (П.1) дополнительного множителя $(z^2 - 9V^2)$ по сравнению с $M_{0c}(z)$ (21) и поправка $\Delta \varepsilon_2^{(2)}$ может быть большой. Приближенное суммирование последовательности диаграмм более высокого порядка позволяет избавиться от этого множителя. Однако полюс в окрестности точки ε_2 не представляет практического интереса, т.к. вычет в нем очень мал.

Теперь обратимся к форме (1) гамильтониана Андерсона и рассмотрим при $T = 0$ область слабой связи, когда параметр V мал. Запишем в этой области полную функцию Грина примесного атома в виде, аналогичном (41):

$$G_{a\sigma}(z) = [z - \varepsilon_a - \Sigma_{0\text{weak}}(z) - \Delta \Sigma_{\text{weak}}(z) - \Gamma(z)]^{-1}, \quad (46)$$

где $\Gamma(z) = \Sigma_k |V_{ak}|^2/(z - \varepsilon_k)$. Ограничимся областью сильных корреляций, которая соответствует значениям $\varepsilon_a < \mu$, $\varepsilon_a + U > \mu$. Используя известное выражение для функции Грина $G_{aa\text{weak}}^{(0)}(z)$ при $V = 0$, для массового оператора $\Sigma_{0\text{weak}}$ в нулевом приближении имеем

$$\Sigma_{0\text{weak}}(z) = U/2 + U^2/[4(z - \varepsilon_a - U/2)]. \quad (47)$$

Из сравнения формулы (46) и формулы (3.10) работы [9] находим, что во втором порядке по V^2 для симметричной задачи

$$\Delta \Sigma_{\text{weak}}^{(2)}(z) = U^2[\Gamma(z) + 4m_{\text{weak}}(z)]/(4z^2), \quad (48)$$

где $m_{\text{weak}}(z) = [\Gamma(z) + \Delta]/2$ – функция, полученная в работе [9]. Здесь

$$\Delta = \sum_k |V_{ak}|^2 [f(\varepsilon_k)/(\varepsilon_k - \varepsilon_a - U) + (1 - f(\varepsilon_k))/(\varepsilon_k - \varepsilon_a)], \quad (49)$$

$f(\varepsilon_k)$ – фермиевская функция распределения. Пользуясь нашей диаграммной техникой и вычисляя кумулянт $G_2^{(0)\text{ir}}$ для узла “0”, который в данном случае совпадает с примесным атомом, из формулы типа (43) сразу получаем выражение (48).

Возвращаясь к пределу сильной связи, отметим, что из рис. 3 следует возможность суммирования класса диаграмм для $\Delta\Sigma$, имеющих в качестве скелетной диаграммы с одним кумулянт $G_2^{(0)\text{ir}}$. В результате получаем следующее приближенное выражение для $\Delta\Sigma$:

$$\Delta\Sigma(i\omega_n) \approx \frac{1}{\beta} \sum_{\sigma_1} \sum_{n'} \Gamma_{2;\sigma\sigma_1}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\omega_{n'}) G_{ab\sigma_1}^{(0)}(i\omega_{n'}) \chi(i\omega_{n'}) G_{ba\sigma_1}(i\omega_{n'}). \quad (50)$$

Подставляя в (50) формулу (42) для G_{ba} , можно выразить массовый оператор $\Delta\Sigma$ через точную функцию Грина $G_{a\sigma_1}(i\omega_{n'})$. Чтобы обойти проблему самосогласованного вычисления $\Delta\Sigma$ из уравнения (50), заменим функцию $G_{a\sigma_1}$ функцией $\tilde{G}_{a\sigma_1}$ (33). Выражая произведение $\pi\chi(z)\Lambda(z) = (z - \varepsilon_b)[\pi\Lambda(z) - 1/(z - \varepsilon_b)]$ через разность $\tilde{G}_{a\sigma}(z) - G_{aa\sigma}^{(0)}(z)$ и используя формулы (19) и (43), находим

$$\Delta\Sigma(i\omega_n) \approx \frac{1}{\beta} \sum_{\sigma'} \sum_{n'} \frac{G_{2;bb\sigma';bb\sigma'}^{(0)\text{ir}}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\omega_{n'}) [\tilde{G}_{a\sigma'}(i\omega_{n'}) - G_{aa\sigma'}^{(0)}(i\omega_{n'})]}{[G_{ab\sigma}^{(0)}(i\omega_n)]^2 [G_{ba\sigma_1}^{(0)}(i\omega_{n'})]^2}. \quad (51)$$

Приближение (51) интересно тем, что дает не только точное выражение для $\Delta\Sigma$ во втором порядке по H_{int} (6), но также (в сумме с $\Sigma_0(i\omega_n)$) точное выражение во втором порядке по V . Действительно, диаграммы, содержащие кумулянты $G_m^{(0)\text{ir}}$ с $m > 2$ или более одного кумулянта $G_2^{(0)\text{ir}}$, включают в себя дополнительные сомножители $(G_{ab}^{(0)})^2 \sim V^2$.

Наиболее простую форму выражение (51) приобретает в пределе $T \rightarrow 0$. В этом случае суммирование по n' переходит в интегрирование по прямой $\text{Re } z' = \mu$ в комплексной плоскости с разрезом по отрезку $[-1, 1]$. Функцию $G_2^{(0)\text{ir}}$ можно представить в виде суммы слагаемых, каждое из которых имеет полюсы или в области $\text{Re } z' > \mu$, или в области $\text{Re } z' < \mu$. Замыкая контур интегрирования в первом случае в левой полуплоскости, а во втором – в правой, можно представить массовый оператор $\Delta\Sigma(z)$ в виде суммы интегралов от некоторых функций, умноженных на плотность состояний на примесном атоме $\tilde{\rho}_a(\varepsilon) = -\text{Im } \tilde{G}_{a\sigma}(\varepsilon + i\delta)/\pi$. При этом полюсы нулевой функции Грина $G_{aa}^{(0)}(z')$ в числителе формулы (51) не дают вклада из-за сомножителя $[G_{ba}^{(0)}(z')]^2$ в знаменателе, например для симметричной задачи

$$\Delta\Sigma(z) = -\frac{24x^2z}{\pi(z^2 - 9V^2)^2} \int_{-\infty}^0 \frac{R(z, \varepsilon)(\varepsilon - d_1)^2(\varepsilon - d_2)^2 \tilde{\rho}_a(\varepsilon) d\varepsilon}{\{[z^2 + x^2 - (\varepsilon - r)^2]^2 - 4x^2z^2\}(\varepsilon^2 - 9V^2)^2}, \quad (52)$$

где функция $R(z, \varepsilon)$ определена в приложении. При $V \rightarrow 0$ имеем

$$\tilde{\rho}_a(\varepsilon) \rightarrow \pi V^2 \varepsilon^2 \Delta(\varepsilon) / (\varepsilon^2 - 4x^2)^2, \quad R(z, \varepsilon) \rightarrow (\varepsilon + z - 2x)(\varepsilon - z - 2x)(\varepsilon - 2x)^2 (3\varepsilon^2 - 2z^2),$$

$d_1 \rightarrow 0$, $d_2 \rightarrow -2x$. В результате получаем

$$\Delta \Sigma(z) \rightarrow -\frac{36x^2 V^2}{z^3} + \frac{24x^2 V^2}{z} \int_{-1}^0 \frac{\Delta(\varepsilon) d\varepsilon}{(z^2 - \varepsilon^2)}. \quad (53)$$

Первое слагаемое в (53) сокращается с вкладом первого порядка по V^2 в $M_{0c}(z)$ (21). Второе слагаемое в (53), как легко убедиться, равно массовому оператору $\Delta \Sigma_{\text{weak}}^{(2)}(z)$ (48).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Найдем по формуле (43) поправку $\Delta \Sigma^{(2)}(z)$ к массовому оператору во втором порядке по H_{int} при $T = 0$. Для этого проще исходить не из кумулянта $G_{2;aa\sigma;bb\sigma'}^{(0)\text{ir}}$, а из более симметричной функции $G_{2;bb\sigma;bb\sigma'}^{(0)\text{ir}}(z, z', z')$. Опуская довольно громоздкое выражение для этой функции, сразу приведем окончательный результат в случае симметричной задачи $\varepsilon_a = -U/2$, $\mu = 0$, $\varphi(\varepsilon) = \varphi(-\varepsilon)$:

$$\begin{aligned} \Delta \Sigma^{(2)}(z) = \\ = -\frac{24x^2 V^2 z}{\pi(z^2 - 9V^2)^2} \int_{-1}^0 \frac{R(z, \varepsilon) \varphi(\varepsilon) d\varepsilon}{\{[z^2 + x^2 - (\varepsilon - r)^2]^2 - 4x^2 z^2\}(\varepsilon + d_1)^2(\varepsilon + d_2)^2}, \end{aligned} \quad (\text{П.1})$$

где $x = U/4$, $r = (x^2 + 4V^2)^{1/2}$, $d_1 = -r + (x^2 + V^2)^{1/2}$, $d_2 = -r - (x^2 + V^2)^{1/2}$,

$$\begin{aligned} R(z, \varepsilon) = 3\varepsilon^6 - 24r\varepsilon^5 - [5z^2 - 36(2x^2 + 9V^2)]\varepsilon^4 + 4r[7z^2 - 3(8x^2 + 49V^2)]\varepsilon^3 + \\ + [2z^4 - 2(30x^2 + 121V^2)z^2 + 3(16x^4 + 256x^2V^2 + 803V^4)]\varepsilon^2 - \\ - 4[2(x^2 + 3V^2)z^4 - (16x^4 + 121x^2V^2 + 240V^4)z^2 + \\ + 3V^2(20x^4 + 191x^2V^2 + 438V^4)]\varepsilon/r + 2(4x^2 + 9V^2)z^4 - \\ - (32x^4 + 200x^2V^2 + 369V^4)z^2 + 108V^4(3x^2 + 11V^2). \end{aligned} \quad (\text{П.2})$$

Формула (П.1) дает в явном виде аналитическое продолжение функции $\Delta \Sigma^{(2)}(i\omega_n)$ в верхнюю комплексную полуплоскость $\text{Im } z > 0$. Нами получено также выражение для $\Delta \Sigma^{(2)}(z)$ при $T = 0$ и произвольных ε_a , μ . Пользуясь этим выражением, можно найти, например, вклад второго порядка $\Delta n_a^{(2)}$ по H_{int} в среднее число электронов на примесном атоме. Далее, если подставить функцию Грина примесного атома $G_{a\sigma}(z)$ с $\Delta \Sigma = \Delta \Sigma^{(2)}$ (П.1) в известную формулу работы [24] для энергии связи примеси с металлом, то во втором порядке по H_{int} получим выражение, совпадающее с вкладом кольцевой диаграммы второго порядка (см. рис. 2) при $T = 0$.

Член в фигурных скобках в знаменателе формулы (П.1) равен $(z + \varepsilon - x - r)(z - \varepsilon + x + r)(z + \varepsilon + x - r)(z - \varepsilon - x + r)$, поэтому функция $\Delta \Sigma^{(2)}(\omega + i\delta)$ имеет четыре области значений ω , в которых $\text{Im } \Delta \Sigma^{(2)}(\omega + i\delta) \neq 0$.

Используя формулу (П.1), можно вычислить вклад кольцевой диаграммы 4-го порядка по H_{int} в энергию взаимодействия примеси с металлом $\Delta E_{\text{НК}}^{(4)}$, которая для металла с макроскопическим объемом равна пределу $(\Delta \Omega_{\text{int}})_{\text{НК}}^{(4)}$ при $T \rightarrow 0$:

$$\Delta E_{\text{НК}}^{(4)} = -\frac{i}{2\pi} \int_l \chi(z) (G_{ba}^{(0)}(z))^2 \Delta \Sigma^{(2)}(z) dz, \quad (\text{П.3})$$

где интегрирование производится по прямой $l : \text{Re } z = \mu$ в комплексной плоскости с разрезом по отрезку $[-1, 1]$ на вещественной оси. Тогда для симметричной задачи

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{НК}}^{(4)} = & -\frac{3x^2 V^2}{2\pi^2 r^3} \times \\ & \times \int_{-1}^0 d\omega \int_{-1}^0 d\varepsilon \frac{f(t, y) \varphi(\omega) \varphi(\varepsilon)}{[(\varepsilon + d_1)(\varepsilon + d_2)(\omega + d_1)(\omega + d_2)]^2 [(\omega + \varepsilon - r)^2 - x^2]}, \end{aligned} \quad (\text{П.4})$$

где $t = \varepsilon - r$, $y = \omega - r$ и

$$\begin{aligned} f(t, y) = & t^2 y^2 (t^2 + y^2) + 2t^3 y^3 - 2rty(t^3 + y^3) - 4rt^2 y^2 (t + y) + \\ & + (x^2 + 7V^2)(t^4 + y^4) + 2(x^2 + 7V^2)ty(t^2 + y^2) + 2(x^2 + 9V^2)t^2 y^2 + \\ & + 4(x^2 - V^2)rty(t + y) - (3x^2 + 19V^2)(x^2 + V^2)(t^2 + y^2) - \\ & - 2(3x^2 + 15V^2)(x^2 + V^2)ty + 2(x^2 + 5V^2)(x^2 + V^2)r(t + y) + \\ & + 4(x^2 + V^2)^2 V^2. \end{aligned} \quad (\text{П.5})$$

Вклад $\Delta E_k^{(4)}$ кольцевой диаграммы 4-го порядка в энергию связи примесного атома с металлом вычисляется достаточно просто. Тогда для металла с полуэллиптической плотностью состояний в первом порядке по U^2 имеем

$$\Delta E_{\text{НК}}^{(4)} / \Delta E_k^{(4)} = \xi(V) (U/4V)^2, \quad (\text{П.6})$$

где функция $\xi(V)$ возрастает от значения $\xi(V) \approx 1/2$ при $V = 0,5$ до $\xi(V) \approx 1$ при $V \gtrsim 1$.

Список литературы

- [1] *P.W. Anderson.* Phys. Rev. 1961. V. 124. P. 41.
- [2] *P. Fulde, J. Keller, G. Zwicknagl.* Sol. St. Phys. 1988. V. 41. P. 1.
- [3] *Т. Эйнгштейн, Дж. Герц, Дж. Шриффер.* Теория хемосорбции. Ред. Дж. Смит. М.: Мир, 1983. С. 256.

- [4] *A.M. Tsvetlik, P.B. Weigmann.* Adv. Phys. 1983. V. 32. P. 453.
- [5] *A. Okiji, N. Kawakami.* Springer Series in Solid State Science. V. 62. Berlin: Springer, 1985. P. 46.
- [6] *H.L. Niel.* Phys. Rev. Lett. 1991. V. 66. P. 818.
- [7] *J.A. White.* Phys. Rev. 1992. V. B45. P. 1100.
- [8] *I.G. Medvedev.* Sol. St. Comm. 1995. V. 96. P. 779.
- [9] *W. Brenig, K. Schönhammer.* Z. Phys. 1974. B. 267. S. 201.
- [10] *J. Kondo.* Progr. Theor. Phys. 1966. V. 36. P. 429.
- [11] *T.L. Einstein.* Phys. Rev. 1975. V. B11. P. 577.
- [12] *А.И. Волокитин.* Физика тв. тела. 1978. Т. 20. С. 1206.
- [13] *J. Holm, R. Kree, K. Schönhammer.* Phys. Rev. 1993. V. B48. P. 5077.
- [14] *J. Hubbard.* Proc. Roy. Soc. 1963. V. A276. P. 238.
- [15] *А.Ф. Барабанов, К.А. Кикоин, Л.А. Максимов.* ТМФ. 1974. Т. 20. С. 364.
- [16] *И.Г. Медведев.* Хим. физика. 1985. Т. 4. С. 103.
- [17] *И.Г. Медведев.* Хим. физика. 1988. Т. 7. С. 1507.
- [18] *J. Hubbard.* Proc. Roy. Soc. 1967. V. A296. P. 82.
- [19] *М.И. Владимир, В.А. Москаленко.* ТМФ. 1990. Т. 82. С. 428.
- [20] *Н.Н. Боголюбов, С.В. Тябликов.* ДАН СССР. 1959. Т. 126. С. 53.
- [21] *M. Baldo, R. Pucci, F. Flores, G. Piccitto, A. Martin-Rodero.* Phys. Rev. 1983. V. B28. P. 6640.
- [22] *С.И. Вакару, М.И. Владимир, В.А. Москаленко.* ТМФ. 1990. Т. 85. С. 248.
- [23] *О.М. Браун.* Физика тв. тела. 1980. Т. 22. С. 1638.
- [24] *B. Kjollerström, D.J. Scalapino, J.R. Schrieffer.* Phys. Rev. 1966. V. 148. P. 665.

Поступила в редакцию 23.I.1996 г.

I. G. Medvedev

NEW DIAGRAM TECHNIQUE FOR THE ANDERSON MODEL

The generalized Wick theorem for the Anderson model is formulated and, basing on this theorem, the diagram technique for the temperature Green function and the thermodynamic potential is constructed. The main attention is paid to the region of the strong coupling of an impurity atom with metal. As a result of solving the Dyson equations, the impurity Green function is expressed in terms of the mass operator. The contribution to the mass operator and the corrections to the energies of the localized states are obtained in the second order of the perturbation theory.