Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Д. Ф. Дигор, П. Ентел, М. Маринаро, В. А. Москаленко, Н. Б. Перкинс,
О возможности образования связанных пар в периодической модели Андерсона,
ТМФ, 2001, том 127, номер 2, 304–316

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf459>

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: 54.198.187.58

26 апреля 2023 г., 05:37:48

© 2001 г. Д. Ф. Дигор*, П. Ентел[†], М. Маринаро[‡],
В. А. Москаленко*, Н. Б. Перкинс[§]

О ВОЗМОЖНОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ СВЯЗАННЫХ ПАР В ПЕРИОДИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА

Исследуется обобщенная периодическая модель Андерсона, описывающая две группы сильно коррелированных (d и f) электронов с локальной гибридизацией состояний и перескоком d -электронов между узлами решетки, с точки зрения возможности появления в ней связанных электронных пар. Атомный предел этой модели допускает точное решение на основе метода канонического преобразования. Ренормированный энергетический спектр локальной модели делится на низкоэнергетическую и высокоэнергетическую части, разделенные интервалом порядка энергии кулоновского отталкивания электронов. Проецирование гамильтониана на состояния низкоэнергетической части спектра приводит к появлению членов парного взаимодействия электронов, принадлежащих d - и f -орбиталям, и к возможности их туннелирования между этими орбиталями. При этом слагаемые гамильтониана, обусловленные ионными энергиями и перескоками, оказываются сильно коррелированными и реализуются только между состояниями, которые не заполнены дважды. Полученный гамильтониан более не содержит сильных взаимодействий, которые оказываются подавленными квантовыми флуктуациями гибридизации состояний. После его линеаризации в приближении среднего поля установлен энергетический спектр квазичастиц и намечен способ самосогласования параметров порядка сверхпроводящей фазы. Для простоты все расчеты сделаны для симметричной периодической модели Андерсона, в которой энергии дважды заполненных d - и f -орбиталей предполагаются одинаковыми.

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследуемая нами периодическая модель Андерсона (ПМА) [1] состоит из двух сильно коррелированных подсистем d - и f -электронов. Предполагается локальная гибридизация орбиталей и туннелирование d -электронов между узлами кристаллической решетки. Гамильтониан этой модели дополнен членами отталкивания d - и f -электронов

*Институт прикладной физики Молдавской АН, Кишинев, Молдова. E-mail: statphys@asm.md

[†]Duisburg University, Germany. E-mail: entel@thp.uni-duisburg.de

[‡]Salerno University, Italy. E-mail: marinaro@sa.infn.it

[§]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская область, Россия. E-mail: perkins@thsun1.jinr.ru

(так называемое слагаемое Фаликова–Кимбелла) и имеет вид [2]

$$H = H^0 + H', \quad (1a)$$

$$H^0 = H_d^0 + H_f^0 + H_{\text{hyb}} + H_{\text{FK}}, \quad (16)$$

где

$$H_d^0 = \varepsilon_d \sum_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + U_d \sum_i n_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d, \quad (2a)$$

$$H_f^0 = \varepsilon_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + U_f \sum_i n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f, \quad (26)$$

$$H_{\text{hyb}} = V \sum_{i\sigma} (f_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + d_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}), \quad (2b)$$

$$H_{\text{FK}} = G \sum_i n_i^d n_i^f, \quad (2r)$$

$$H' = \sum_{ij\sigma} t(j-i) d_{j\sigma}^\dagger d_{i\sigma}. \quad (2d)$$

Здесь $d_{i\sigma}^\dagger$ ($d_{i\sigma}$) и $f_{i\sigma}^\dagger$ ($f_{i\sigma}$) – операторы рождения (уничтожения) d - и f -электронов, соответственно; $n_{i\sigma}^d = d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma}$ и $n_{i\sigma}^f = f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}$ – операторы числа частиц в узле i со спином σ ; U_d и U_f – энергии одноузельного отталкивания; $\varepsilon_d = \bar{\varepsilon}_d - \mu$, $\varepsilon_f = \bar{\varepsilon}_f - \mu$ являются ионными энергиями d - и f -орбиталей, отсчитанными от химического потенциала μ ; V – матричный элемент одноузельной гибридизации состояний, который для простоты считается постоянным. Благодаря гибридизации (2в) и перескокам (2д) обе группы локализованных электронов становятся подвижными и могут участвовать в проводимости.

Свойства локального гамильтониана (16) изучались многими авторами [3]–[8]. В работах [9]–[13] и в приведенных там ссылках можно найти обзор результатов теоретических и экспериментальных исследований сильно коррелированных электронных систем. Ниже мы следуем в основном определению, содержащимся в работе [2]. Обозначим через $\phi_n(E_\lambda)$ собственные функции и через E_λ собственные значения матрицы локального гамильтониана (16). При этом индекс $n = 1, \dots, 16$ нумерует исходные ионные квантовые состояния в одном узле с различным числом частиц и полным спином. Квантовое число λ относится к ренормированным состояниям, полученным после диагонализации гамильтониана атомного предела. Эти состояния также являются одноузельными, но в отличие от состояний, описываемых индексом n , учитывают гибридизацию. Функции $\phi_n(E_\lambda)$ определяют структуру S -матрицы, диагонализующей локальный гамильтониан, $S_{n\lambda} = \phi_n(E_\lambda)$. S -матрица определяет также закон преобразования трансфер-операторов Хаббарда [14] $X^{mn} = |m\rangle\langle n|$ исходного представления к диагональному представлению $Y^{\lambda\lambda'} = |E_\lambda\rangle\langle E_{\lambda'}|$ согласно формулам

$$X^{mn} = \sum_{\lambda\lambda'} \phi_m(E_\lambda) \phi_n^*(E_{\lambda'}) Y^{\lambda\lambda'}, \quad (3a)$$

$$Y^{\lambda\lambda'} = \sum_{mn} \phi_m^*(E_\lambda) \phi_n(E_{\lambda'}) X^{mn}. \quad (36)$$

Эти формулы определяют также преобразование операторов рождения и уничтожения d - и f -электронов. Так, например, оператор $d_{\uparrow}$, до преобразования имевший вид

$$d_{\uparrow} = X^{1,2} + X^{4,6} + \frac{1}{\sqrt{2}}(X^{5,7} + X^{5,10}) + \frac{1}{\sqrt{2}}(X^{10,12} - X^{7,12}) + \\ + X^{11,14} + X^{3,9} + X^{8,13} + X^{15,16}, \quad (4)$$

после преобразования переходит в

$$S^{-1}d_{\uparrow}S = \sum_{\lambda=2,3} \phi_2(E_{\lambda})Y^{1,\lambda} + \sum_{\lambda=2,3} \phi_3(E_{\lambda})Y^{\lambda,9} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\lambda=4,5} \phi_5(E_{\lambda})Y^{\lambda,10} + \\ + \sum_{a=6,7,8} \sum_{\lambda=4,5} \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_5(E_{\lambda})\phi_7(E_a) + \phi_4(E_{\lambda})\phi_6(E_a) \right] Y^{\lambda,a} + \\ + \sum_{a=6,7,8} \sum_{\lambda=12,13} \left[-\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_7(E_a)\phi_{12}(E_{\lambda}) + \phi_8(E_a)\phi_{13}(E_{\lambda}) \right] Y^{a,\lambda} + \\ + \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\lambda=12,13} \phi_{12}(E_{\lambda})Y^{10,\lambda} + \sum_{\lambda=14,15} (\phi_{14}(E_{\lambda})Y^{11,\lambda} + \phi_{15}(E_{\lambda})Y^{\lambda,16}). \quad (5)$$

С помощью (5) и аналогичных формул для других операторов рождения и уничтожения легко определить среднее число d - и f -электронов в локальном приближении, их одночастичные функции Грина и плотности электронных состояний.

2. НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ГАМИЛЬТОНИАН

Рассмотрим проекцию гамильтониана ПМА на подпространство низкоэнергетических состояний. Это позволит получить эффективный гамильтониан, который содержит конкурирующие магнитные и сверхпроводящие флуктуации. Используем каноническое преобразование полного гамильтониана

$$\tilde{H} = S^{-1}HS = H_r^0 + H_r', \quad (6)$$

где

$$H_r^0 = \sum_{i\lambda} E_{\lambda} Y_i^{\lambda\lambda}, \quad (7a)$$

$$H_r' = \sum_{ij\sigma} t(i-j)S^{-1}d_{i\sigma}^{\dagger}d_{j\sigma}S. \quad (7b)$$

Новые операторы $S^{-1}d_{\sigma}S$ ($S^{-1}d_{\sigma}^{\dagger}S$) определены равенствами вида (5) (более подробно см. [2]). Как и в [2], мы для простоты рассматриваем симметричную ПМА, которая соответствует случаю, когда ионные энергии дважды занятых d - и f -состояний равны друг другу, т.е.

$$2\varepsilon_d + U_d = 2\varepsilon_f + U_f. \quad (8)$$

Это ограничение не имеет решающего значения, однако оно упрощает проблему и позволяет найти решения для собственных функций $\phi_n(E_\lambda)$ и соответствующих собственных значений локального гамильтониана. Для самого низкого синглетного состояния ($\lambda = 6$) гибридизированной ($d-f$)-пары электронов имеем

$$E_6 = \varepsilon_d + \varepsilon_f + \frac{1}{2}(U + G) - \frac{1}{2}\sqrt{(U - G)^2 + (4V)^2}, \quad (9a)$$

$$\phi_6(E_6) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{U - G}{\sqrt{(U - G)^2 + (4V)^2}} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (9б)$$

$$\phi_7(E_6) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \operatorname{sign} V \left[1 + \frac{U - G}{\sqrt{(U - G)^2 + (4V)^2}} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (9в)$$

где U – среднее значение двух энергий отталкивающего взаимодействия U_d и U_f . При умеренной гибридизации $V \simeq 0.5$ эВ, большом $U \simeq 5$ эВ и $G \simeq 1$ эВ энергия синглетного основного состояния $|E_6\rangle$,

$$E_6 \simeq \varepsilon_d + \varepsilon_f + G - \frac{4V^2}{U - G} \quad (10)$$

содержит выигрыш энергии порядка энергии кондо-связи

$$\frac{4V^2}{U - G} \simeq \frac{2V^2}{\varepsilon_d - \varepsilon_f}, \quad (11)$$

которая может оказать существенное влияние на процесс образования электронных пар в ПМА. Эта идея не нова, ранее она обсуждалась Хиршем [15]. Имеется и другая особенность данной модели, связанная с возможностью туннелирования электронных пар между различными орбиталями. Идея о существенной роли туннелирования электронных пар как целого впервые была сформулирована в связи с теорией сверхпроводимости систем с перекрывающимися энергетическими зонами [16], [17] и относилась к переходам пар между разными зонами. Как будет показано ниже, низкоэнергетическая часть гамильтониана содержит парные взаимодействия, которые после учета перескоков d -электронов могут инициировать движение связанных электронных пар по кристаллической решетке.

Для доказательства этого утверждения воспользуемся проекционным методом [13]. Мы делим энергетический спектр локализованной системы на две части, разделенные интервалом порядка энергии отталкивания U . Собственные значения энергии E_λ с квантовыми числами $\lambda = 1, 2, \dots, 6, 9, 10, 11$ (см. [2]) принадлежат к низкоэнергетической части спектра, тогда как те, что имеют значения $\lambda = 7, 8, 12, \dots, 16$, – к высокоэнергетической части. Проекционный оператор имеет вид

$$P = \Pi_i P_i, \quad P_i = \sum_{\lambda \in \alpha} Y_i^{\lambda\lambda}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, 6, 9, 10, 11. \quad (12)$$

Ортогональный ему оператор –

$$Q = 1 - P. \quad (13)$$

Благодаря условию полноты

$$\sum_{\lambda=1}^{16} Y_i^{\lambda\lambda} = 1 \quad (14)$$

ортогональный оператор содержит суммирование лишь по высокоэнергетическим состояниям.

Вместо единственного уравнения Шредингера для всего гильбертова пространства $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ после проецирования возникают два уравнения Шредингера для двух подпространств. Для интересующего нас низкоэнергетического подпространства с волновой функцией $|\psi_P\rangle = P|\psi\rangle$ имеем следующее уравнение:

$$(\tilde{H}_{PP} - E)|\psi_P\rangle = 0, \quad (15)$$

где

$$\tilde{H}_{PP} = H_{PP}^0 + H'_{PP} - H'_{PQ}(H_{QQ}^0 + H'_{QQ} - E)^{-1}H'_{QP} \quad (16)$$

и

$$H_{PP}^0 = PH_r^0P = \sum_i \sum_{\lambda \in \alpha} E_\lambda Y_i^{\lambda\lambda}, \quad (17a)$$

$$H'_{PP} = PH_r'P. \quad (17b)$$

Последнее слагаемое в (16) описывает вклад от виртуальных квантовых переходов через исключенные высокоэнергетические уровни и имеет порядок величины t^2/U , где t — интеграл перескока между соседними узлами. Так как для энергетических параметров теории предполагается выполнение условий

$$t \ll V \ll U, \quad \frac{t^2}{U} \ll \frac{V^2}{U - G}, \quad (18)$$

то последний член в (16) можно опустить и сохранить в качестве эффективного низкоэнергетического гамильтониана ПМА выражение

$$\tilde{H}_{PP} = H_{PP}^0 + H'_{PP}. \quad (19)$$

В качестве примера применения проекционной техники рассмотрим оператор

$$\begin{aligned} \tilde{d}_\uparrow \equiv PS^{-1}d_\uparrow SP = & \sum_{\lambda=2,3} \phi_2(E_\lambda)Y^{1,\lambda} + \sum_{\lambda=2,3} \phi_3(E_\lambda)Y^{\lambda,9} + \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_5(E_\lambda)Y^{\lambda,10} + \\ & + \sum_{\lambda=4,5} \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_5(E_\lambda)\phi_7(E_6) + \phi_4(E_\lambda)\phi_6(E_6) \right] Y^{\lambda,6}, \end{aligned} \quad (20)$$

который существенно отличается от первоначальной формы (5). Исходное ионное представление гамильтониана через операторы рождения и уничтожения электронов оказывается более пригодным для анализа и интерпретации структуры возникшего проекционного гамильтониана. Поэтому над операторами (19) в дальнейшем выполняется обратное преобразование

$$\tilde{H} = S\tilde{H}_{PP}S^{-1} = \tilde{H}_{PP}^0 + \tilde{H}'_{PP}. \quad (21)$$

Приведем примеры такого преобразования:

$$\begin{aligned}
 m_\sigma &= d_\sigma^\dagger d_\sigma, \quad n_\sigma = f_\sigma^\dagger f_\sigma, \\
 \tilde{d}_\sigma &= d_\sigma(1 - m_{\bar{\sigma}})(1 - n_\sigma n_{\bar{\sigma}}) + \frac{1}{4} \left[1 - \frac{U - G}{\sqrt{(U - G)^2 + (4V)^2}} \right] \times \\
 &\quad \times [d_\sigma(1 - n_\sigma)(m_{\bar{\sigma}} - n_{\bar{\sigma}}) + d_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma(1 - m_\sigma) - f_{\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{\sigma}} f_\sigma(1 - m_\sigma)] - \\
 &\quad - \frac{V}{\sqrt{(U - G)^2 + (4V)^2}} \times \\
 &\quad \times [f_{\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{\sigma}} d_\sigma(1 - n_\sigma) + d_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} d_\sigma(1 - n_\sigma) + f_\sigma(1 - m_\sigma)(m_{\bar{\sigma}} - n_{\bar{\sigma}})^2], \quad (22a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{f}_\sigma &= f_\sigma(1 - n_{\bar{\sigma}})(1 - m_\sigma m_{\bar{\sigma}}) + \\
 &\quad + \frac{1}{4} \left[1 - \frac{U - G}{\sqrt{(U - G)^2 + (4V)^2}} \right] \times \\
 &\quad \times [f_\sigma(1 - m_\sigma)(n_{\bar{\sigma}} - m_{\bar{\sigma}}) + f_{\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{\sigma}} d_\sigma(1 - n_\sigma) - d_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} d_\sigma(1 - n_\sigma)] - \\
 &\quad - \frac{V}{\sqrt{(U - G)^2 + (4V)^2}} \times \\
 &\quad \times [d_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma(1 - m_\sigma) + f_{\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{\sigma}} f_\sigma(1 - m_\sigma) + d_\sigma(1 - n_\sigma)(n_{\bar{\sigma}} - m_{\bar{\sigma}})^2]. \quad (22b)
 \end{aligned}$$

В формулах (22a), (22b) для простоты опущены индексы узлов решетки. Полученные выражения показывают ограничения заполнения состояний, при которых уничтожение электрона данной орбитали с данным спином на данном узле возможно при условии, что нет электрона с противоположным спином данной орбитали. Эти ограничения хорошо известны для $(t-J)$ -модели, которая может быть получена проекционной техникой из модели Хаббарда [13]. Наличие двух видов электронов в ПАМ делает ограничения заполнения более сложными и заменяет линейные формы операторов на нелинейные структуры (формулы (22a), (22b)). На основании этих формул для первого слагаемого в правой части (21) получаем

$$\begin{aligned}
 \tilde{H}_{PP}^0 &= \sum_{\lambda=1, \dots, 5, 6, 9, 10, 11} E_\lambda Y^{\lambda\lambda} = \\
 &= \varepsilon_d \sum_{\sigma} m_\sigma(1 - m_{\bar{\sigma}})(1 - n_\sigma)(1 - n_{\bar{\sigma}}) + \varepsilon_f \sum_{\sigma} n_\sigma(1 - n_{\bar{\sigma}})(1 - m_\sigma)(1 - m_{\bar{\sigma}}) + \\
 &\quad + V \sum_{\sigma} (f_\sigma^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger f_\sigma) \left[(1 - m_{\bar{\sigma}})(1 - n_{\bar{\sigma}}) - \frac{E_6(m_{\bar{\sigma}} - n_{\bar{\sigma}})^2}{\sqrt{(U - G)^2 + (4V)^2}} \right] + \\
 &\quad + \frac{1}{2} E_6 \sum_{\sigma} m_\sigma(1 - n_{\bar{\sigma}}) n_{\bar{\sigma}}(1 - n_\sigma) + \frac{1}{2} [E_6 - E_9 - 2E_6 \phi_6^2(E_6)] \sum_{\sigma} d_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{\sigma}} f_\sigma + \\
 &\quad + E_6 \phi_6^2(E_6) (m_\uparrow - n_\uparrow)(m_\downarrow - n_\downarrow) + \frac{1}{2} E_6 \phi_6^2(E_6) \sum_{\sigma} (d_\sigma^\dagger d_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma + f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}}^\dagger d_{\bar{\sigma}} d_\sigma) + \\
 &\quad + \frac{1}{2} E_9 \sum_{\sigma} [2m_\sigma n_\sigma(1 - m_{\bar{\sigma}})(1 - n_{\bar{\sigma}}) + m_\sigma n_{\bar{\sigma}}(1 - m_{\bar{\sigma}})(1 - n_\sigma)]. \quad (23)
 \end{aligned}$$

Второе слагаемое, обусловленное перескоками, принимает вид

$$\tilde{H}'_{PP} = \sum_{ij\sigma} t(i-j) \tilde{d}_{i\sigma}^\dagger \tilde{d}_{j\sigma}. \quad (24)$$

Так как оператор (24) пропорционален параметру t , то возможно опустить в нем те вклады, которые имеют порядок малости $tV/(U-G)$. В результате имеем более простое выражение

$$\tilde{H}'_{PP} = \sum_{ij\sigma} t(i-j) d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} (1 - m_{i\bar{\sigma}})(1 - m_{j\bar{\sigma}})(1 - n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}})(1 - n_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}}). \quad (25)$$

Следует обратить внимание на особенности низкоэнергетического гамильтониана (формулы (23), (25)). Одна из них состоит в том, что в этих формулах фигурируют многочастичные операторы, возникшие вследствие понижения энергии из-за исключения двойного заполнения узельных орбиталей. Так, например, первые два слагаемых (23) являются вкладами свободных ионных орбиталей с указанным ограничением на заполнение состояний. Третий член является вкладом, обусловленным гибридизацией состояний при наличии указанных ограничений. Флуктуации, обусловленные гибридизацией состояний, приводят к возникновению парных взаимодействий электронов с противоположными спинами, принадлежащих как к одной и той же, так и к различным орбиталям. Как видно из правой части (23), парные взаимодействия, пропорциональные $E_6 \phi^2(E_6)$, отвечают притяжению в том случае, когда синглетное состояние $|E_6\rangle$ имеет отрицательную энергию E_6 , что соответствует эффекту Кондо. Весовой множитель $\phi^2(E_6)$ определяет вероятность образования такой электронной пары на d - и f -орбиталях. Из определения (9б) видно, что эта вероятность тем меньше, чем больше кулоновское отталкивание U одноорбитальных электронов. Наличие межорбитального отталкивания G способствует образованию этих пар в той мере, в которой оно уменьшает величину U . Подобная положительная роль межорбитального отталкивания отмечена в работе [18].

Другой важной особенностью полученного гамильтониана является наличие туннелирования синглетных состояний пар как целого между различными орбиталями. Выше была отмечена аналогия между этим туннелированием и межзонными переходами. Таким образом, полученный эффективный гамильтониан обнаруживает уже в локальном (нулевом) приближении парные взаимодействия, способствующие образованию синглетных электронных пар.

Делокализация электронов, определяемая вкладом перескоков (25), задается сильно нелинейным оператором. Эта нелинейность целиком обязана ограничениям занятости и может сама служить источником парных флуктуаций сверхпроводящего вида. Так как обе части эффективного гамильтониана (23) и (25) содержат только слабые локальные взаимодействия и слабый коррелированный перескок электронов, мы полагаем возможным в качестве первого шага использовать для дальнейшего исследования полученного гамильтониана метод среднего поля.

3. МЕТОД СРЕДНЕГО ПОЛЯ

Запишем эффективный низкоэнергетический гамильтониан, определенный слагаемым (23) (после его суммирования по узлам решетки) и вкладом (25), в виде

$$\begin{aligned}
 \tilde{H} = & \varepsilon_d \sum_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} (1 - m_{i\bar{\sigma}})(1 - n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}}) + \varepsilon_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} (1 - n_{i\bar{\sigma}})(1 - m_{i\sigma} m_{i\bar{\sigma}}) + \\
 & + V \sum_{i\sigma} (f_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + d_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}) \left[(1 - m_{i\bar{\sigma}})(1 - n_{i\bar{\sigma}}) - \frac{E_6(m_{i\bar{\sigma}} - n_{i\bar{\sigma}})^2}{\sqrt{(U-G)^2 + (4V)^2}} \right] - \\
 & - (2\alpha_1 V + \alpha_2 E_9) \sum_{i\sigma} [d_{i\sigma}^\dagger f_{i\bar{\sigma}} d_{i\bar{\sigma}} f_{i\sigma} + m_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} (1 - m_{i\bar{\sigma}})(1 - n_{i\sigma})] + \\
 & + E_6 \alpha_2 \sum_{i\sigma} [d_{i\sigma}^\dagger d_{i\bar{\sigma}}^\dagger f_{i\bar{\sigma}}^\dagger f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^\dagger f_{i\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\bar{\sigma}}^\dagger d_{i\sigma} + \\
 & + \frac{1}{2} m_{i\sigma} m_{i\bar{\sigma}} (1 - n_{i\sigma})(1 - n_{i\bar{\sigma}}) + \frac{1}{2} n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}} (1 - m_{i\sigma})(1 - m_{i\bar{\sigma}})] + \\
 & + G \sum_i (m_{i\uparrow} - m_{i\downarrow})^2 (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2 + \\
 & + \sum_{ij\sigma} t(i-j) d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} (1 - m_{i\bar{\sigma}})(1 - m_{j\bar{\sigma}})(1 - n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}})(1 - n_{j\sigma} n_{j\bar{\sigma}}). \quad (26)
 \end{aligned}$$

Это выражение следует привести к квадратичному виду с целью получения гамильтониана H_{MF} свободных квазичастиц. Одновременно необходимо указать способ вычисления соответствующих средних и квазисредних величин. Так как нас интересует возможность реализации сверхпроводящего состояния, то в преобразованном к квадратичному виду гамильтониане необходимо сохранить операторы синглетных d - d , f - f и d - f электронных пар. При этом появятся величины

$$\bar{m}_\sigma = \langle d_\sigma^\dagger d_\sigma \rangle, \quad \bar{n}_\sigma = \langle f_\sigma^\dagger f_\sigma \rangle, \quad \bar{p}_\sigma = \langle d_\sigma^\dagger f_\sigma \rangle, \quad (27)$$

равные средним числам электронов на узле, и квазисредние Боголюбова [19] вида

$$\gamma_\sigma^d = \langle d_\sigma^\dagger d_\sigma \rangle, \quad \gamma_\sigma^f = \langle f_\sigma^\dagger f_\sigma \rangle, \quad \gamma_\sigma^m = \langle d_\sigma^\dagger f_\sigma \rangle = \langle f_\sigma^\dagger d_\sigma \rangle. \quad (28)$$

Перечисленные средние значения (27), (28) определены самосогласованно на основе равенства

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}(A e^{-\beta H_{MF}})}{\text{Tr} e^{-\beta H_{MF}}}. \quad (29)$$

Квадратичный гамильтониан имеет вид

$$\begin{aligned}
 H_{MF} = & E_0 + \\
 & + \sum_{\mathbf{k}\sigma} [E_d(\mathbf{k}, \sigma) d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma} + E_f(\mathbf{k}, \sigma) f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} + E_m(\mathbf{k}, \sigma) d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma} + E_m^*(\mathbf{k}, \sigma) f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma}] + \\
 & + \sum_{\mathbf{k}} [\Delta_d(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger d_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_d^*(\mathbf{k}) d_{-\mathbf{k}\downarrow} d_{\mathbf{k}\uparrow} + \Delta_f(\mathbf{k}) f_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_f^*(\mathbf{k}) f_{-\mathbf{k}\downarrow} f_{\mathbf{k}\uparrow}] + \\
 & + \sum_{\mathbf{k}} [\Delta_m(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \bar{\Delta}_m(\mathbf{k}) f_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger d_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_m^*(\mathbf{k}) f_{-\mathbf{k}\downarrow} d_{\mathbf{k}\uparrow} + \bar{\Delta}_m^*(\mathbf{k}) d_{-\mathbf{k}\downarrow} f_{\mathbf{k}\uparrow}]. \quad (30)
 \end{aligned}$$

Здесь нами использовано квазидискретное импульсное представление для электронных операторов и интеграла перескока,

$$d_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}\sigma} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}, \quad (31a)$$

$$f_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}\sigma} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}, \quad (31b)$$

$$t(i-j) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}, \quad (31c)$$

где $\varepsilon(\mathbf{k})$ – энергия свободных электронов. Коэффициенты квадратичной формы (30) состоят из двух слагаемых. Первое слагаемое отвечает локальному гамильтониану и не зависит от энергии зонных электронов. Второе слагаемое определяется перескоками электронов и пропорционально энергии зонных электронов. Отметим, что все средние, содержащие операторы, принадлежащие разным узлам, пропорциональны этой зонной энергии, так как в отсутствие перескоков они равнялись бы нулю. Так как энергия перескоков считается малой величиной, то в дальнейшем в сумме слагаемых, содержащих одноузельные и межузельные средние, последними для простоты будем пренебрегать. После этих упрощений коэффициенты квадратичной формы (30) принимают вид

$$E_d(\mathbf{k}, \sigma) = \varepsilon_{d\sigma} + \varepsilon(\mathbf{k}) [\langle (1 - m_{\bar{\sigma}})(1 - n_{\sigma} n_{\bar{\sigma}}) \rangle]^2 - \varepsilon(\mathbf{k}) \langle d_{\sigma}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} (1 - n_{\sigma} n_{\bar{\sigma}}) \rangle \langle d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} (1 - n_{\sigma} n_{\bar{\sigma}}) \rangle, \quad (32)$$

$$E_f(\mathbf{k}, \sigma) = \varepsilon_{f\sigma} + \varepsilon(\mathbf{k}) \langle f_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} (1 - m_{\bar{\sigma}}) n_{\bar{\sigma}} \rangle \langle d_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} (1 - m_{\bar{\sigma}}) n_{\bar{\sigma}} \rangle - \varepsilon(\mathbf{k}) \langle f_{\sigma}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} (1 - m_{\sigma} n_{\bar{\sigma}}) \rangle \langle d_{\bar{\sigma}} f_{\sigma} (1 - m_{\sigma} n_{\bar{\sigma}}) \rangle, \quad (33)$$

$$E_m(\mathbf{k}, \sigma) = \varepsilon_{m\sigma} + \varepsilon(\mathbf{k}) \langle f_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} (1 - m_{\bar{\sigma}}) n_{\bar{\sigma}} \rangle \langle (1 - m_{\bar{\sigma}})(1 - n_{\sigma} n_{\bar{\sigma}}) \rangle - \varepsilon(\mathbf{k}) \langle f_{\sigma}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} (1 - m_{\sigma} n_{\bar{\sigma}}) \rangle \langle d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} (1 - m_{\sigma} n_{\bar{\sigma}}) \rangle, \quad (34)$$

$$\Delta_d(\mathbf{k}, \sigma) = \delta_{d\sigma} - \varepsilon(\mathbf{k}) \langle d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} (1 - n_{\sigma} n_{\bar{\sigma}}) \rangle \langle (1 - m_{\bar{\sigma}})(1 - n_{\sigma} n_{\bar{\sigma}}) \rangle, \quad (35)$$

$$\Delta_f(\mathbf{k}, \sigma) = \delta_{f\sigma} - \varepsilon(\mathbf{k}) \langle f_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} (1 - m_{\bar{\sigma}}) n_{\sigma} \rangle \langle d_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} (1 - m_{\bar{\sigma}}) n_{\bar{\sigma}} \rangle, \quad (36)$$

$$\Delta_m(\mathbf{k}, \sigma) = \delta_{m\sigma} - \varepsilon(\mathbf{k}) \langle d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} (1 - n_{\sigma} n_{\bar{\sigma}}) \rangle \langle d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} f_{\bar{\sigma}} (1 - m_{\sigma} n_{\bar{\sigma}}) \rangle - \varepsilon(\mathbf{k}) \langle f_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} (1 - m_{\bar{\sigma}}) n_{\sigma} \rangle \langle (1 - m_{\bar{\sigma}})(1 - n_{\sigma} n_{\bar{\sigma}}) \rangle, \quad (37)$$

где одноузельные слагаемые (индекс узла опущен)

$$\begin{aligned} \varepsilon_{d\sigma} &\equiv \varepsilon_d \langle (1 - 2m_{\bar{\sigma}})(1 - n_{\sigma} n_{\bar{\sigma}}) \rangle - \varepsilon_f \langle m_{\bar{\sigma}}(n_{\sigma} - n_{\bar{\sigma}})^2 \rangle - \\ &- V \left[\langle (d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} f_{\bar{\sigma}} + f_{\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}})(1 - n_{\sigma}) \rangle + \frac{E_6 \langle (d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} f_{\bar{\sigma}} + f_{\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}})(1 - 2n_{\sigma}) \rangle}{\sqrt{(U - G)^2 + (4V)^2}} \right] + \\ &+ E_6 \phi_6^2(E_6) \langle m_{\bar{\sigma}} - n_{\bar{\sigma}} \rangle + \frac{1}{2} (E_6 - E_9) \langle n_{\bar{\sigma}}(1 - m_{\bar{\sigma}})(1 - n_{\sigma}) - m_{\bar{\sigma}} n_{\sigma}(1 - n_{\bar{\sigma}}) \rangle, \end{aligned} \quad (38)$$

а $\varepsilon_{f\sigma}$ получается из $\varepsilon_{d\sigma}$ взаимной заменой величин d и f ,

$$\begin{aligned}\varepsilon_{m\sigma} = & \varepsilon_d \langle f_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} n_{\bar{\sigma}} (1 - 2m_{\bar{\sigma}}) \rangle + \varepsilon_f \langle f_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} m_{\bar{\sigma}} (1 - 2n_{\bar{\sigma}}) \rangle - \\ & - V \langle f_{\sigma}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} f_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} + f_{\sigma}^{\dagger} f_{\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} \rangle \left[1 + \frac{2E_6}{\sqrt{(U-G)^2 + (4V)^2}} \right] + \\ & + \frac{1}{2} (E_6 - E_9) \langle f_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} (m_{\bar{\sigma}} - n_{\bar{\sigma}})^2 \rangle + E_6 \phi_6^2(E_6) \langle d_{\bar{\sigma}}^{\dagger} f_{\bar{\sigma}} \rangle + \\ & + \left[\frac{1}{2} (E_6 - E_9) - E_6 \phi_6^2(E_6) \right] \langle f_{\bar{\sigma}}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}} \rangle.\end{aligned}\quad (39)$$

Локальный вклад в сверхпроводящий параметр порядка d -электронов имеет вид

$$\begin{aligned}\delta_{d\sigma} = & -\varepsilon_d \langle d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} (1 - n_{\sigma} n_{\bar{\sigma}}) \rangle - \varepsilon_f \langle d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} n_{\sigma} (1 - n_{\bar{\sigma}}) \rangle - G \langle d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} (n_{\sigma} - n_{\bar{\sigma}})^2 \rangle - \\ & - V \left[\langle d_{\bar{\sigma}} f_{\sigma} (1 - n_{\sigma}) \rangle + \frac{E_6 \langle d_{\bar{\sigma}} f_{\sigma} (1 - 2n_{\bar{\sigma}}) \rangle}{\sqrt{(U-G)^2 + (4V)^2}} \right] - \\ & - \frac{1}{2} (E_6 - E_9) \langle d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} n_{\bar{\sigma}} (1 - n_{\sigma}) \rangle + \frac{1}{2} E_6 \phi_6^2(E_6) \langle d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} + f_{\bar{\sigma}} f_{\sigma} \rangle.\end{aligned}\quad (40)$$

Соответствующее выражение для $\delta_{f\sigma}$ получается из вышеприведенного заменой величин d и f . Локальный вклад смешанного параметра порядка определяется выражением

$$\begin{aligned}\delta_{m\sigma} = & -\varepsilon_d \langle f_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} n_{\sigma} (1 - 2m_{\bar{\sigma}}) \rangle - \varepsilon_f \langle f_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} m_{\bar{\sigma}} (1 - 2n_{\sigma}) \rangle + E_6 \phi_6^2(E_6) \langle f_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} - d_{\bar{\sigma}} f_{\sigma} \rangle - \\ & - V \left[\langle f_{\bar{\sigma}} f_{\sigma} (1 - m_{\bar{\sigma}}) + d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} (1 - n_{\sigma}) \rangle + \frac{E_6 \langle d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} (1 - 2n_{\sigma}) + f_{\bar{\sigma}} f_{\sigma} (1 - 2m_{\bar{\sigma}}) \rangle}{\sqrt{(U-G)^2 + (4V)^2}} \right] + \\ & + \frac{1}{2} (E_6 - E_9) \langle f_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} [(1 - m_{\bar{\sigma}})(1 - n_{\sigma}) + m_{\bar{\sigma}} n_{\sigma}] + d_{\bar{\sigma}} f_{\sigma} \rangle.\end{aligned}\quad (41)$$

Мы полагаем, что явление синглетной сверхпроводимости может реализоваться на основании парамагнитной фазы, что позволяет считать средние числа частиц и одночастичные энергии не зависящими от спинов, т.е.

$$E_{\alpha}(\mathbf{k}, \sigma) = E_{\alpha}(\mathbf{k}, \uparrow) = E_{\alpha}(-\mathbf{k}, \downarrow), \quad \alpha = d, f, m. \quad (42)$$

Три параметра порядка $\Delta_d(\mathbf{k})$, $\Delta_f(\mathbf{k})$ и $\Delta_m(\mathbf{k})$ определены равенствами

$$\begin{aligned}\Delta_{\alpha}(\mathbf{k}) &= \Delta_{\alpha}(\mathbf{k}, \uparrow) - \Delta_{\alpha}(-\mathbf{k}, \downarrow), \quad \alpha = d, f, \\ \Delta_m(\mathbf{k}) &= \Delta_m(\mathbf{k}, \uparrow) = \bar{\Delta}_m(-\mathbf{k}, \downarrow).\end{aligned}\quad (43)$$

После сделанных упрощений легко диагонализировать квадратичный гамильтониан (30). Для этого введем гамильтонову матрицу

$$\hat{H}_{\text{MF}}^0 = \begin{pmatrix} E_d(\mathbf{k}) & E_m(\mathbf{k}) & \Delta_d(\mathbf{k}) & \Delta_m(\mathbf{k}) \\ E_m(\mathbf{k}) & E_f(\mathbf{k}) & \Delta_m(\mathbf{k}) & \Delta_f(\mathbf{k}) \\ \Delta_d^*(\mathbf{k}) & \Delta_m^*(\mathbf{k}) & -E_d(-\mathbf{k}) & -E_m(-\mathbf{k}) \\ \Delta_m^*(\mathbf{k}) & \Delta_m^*(\mathbf{k}) & -E_m(-\mathbf{k}) & -E_f(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (44)$$

и биспиноры

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} d_{\mathbf{k}\uparrow} \\ f_{\mathbf{k}\uparrow} \\ d_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ f_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{k}) = (d_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger f_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger d_{-\mathbf{k}\downarrow} f_{-\mathbf{k}\downarrow}), \quad (45)$$

которые позволяют переписать гамильтониан среднего поля (30) в виде

$$H_{\text{MF}} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{H}_{\text{MF}}^0 \hat{\psi}(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}} (E_d(\mathbf{k}) + E_f(\mathbf{k})). \quad (46)$$

Для диагонализации матрицы (44) используем ортонормированную систему собственных функций $\chi_n(E_\lambda)$ ($n = 1, \dots, 4$, $\lambda = 1, \dots, 4$) и собственных значений E_λ , удовлетворяющих уравнению

$$\hat{H}_{\text{MF}}^0 \begin{pmatrix} \chi_1(E_\lambda) \\ \chi_2(E_\lambda) \\ \chi_3(E_\lambda) \\ \chi_4(E_\lambda) \end{pmatrix} = E_\lambda \begin{pmatrix} \chi_1(E_\lambda) \\ \chi_2(E_\lambda) \\ \chi_3(E_\lambda) \\ \chi_4(E_\lambda) \end{pmatrix} \quad (47)$$

и условиям ортонормировки

$$\sum_m \chi_m^*(E_\lambda) \chi_m(E_{\lambda'}) = \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (48a)$$

$$\sum_\lambda \chi_m^*(E_\lambda) \chi_n(E_\lambda) = \delta_{mn}. \quad (48b)$$

Соответствующие преобразования Боголюбова, которые диагонализуют $\hat{H}_{\text{MF}}^0$, имеют вид

$$\begin{aligned} d_{\mathbf{k}\uparrow} &= \sum_\lambda \chi_1(E_\lambda) \alpha_\lambda(\mathbf{k}), \\ f_{\mathbf{k}\uparrow} &= \sum_\lambda \chi_2(E_\lambda) \alpha_\lambda(\mathbf{k}), \\ d_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger &= \sum_\lambda \chi_3(E_\lambda) \alpha_\lambda(\mathbf{k}), \\ f_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger &= \sum_\lambda \chi_4(E_\lambda) \alpha_\lambda(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (49)$$

где “новые” операторы α_λ ($\lambda = 1, \dots, 4$) определены равенством

$$\alpha_\lambda(\mathbf{k}) = \chi_1^*(E_\lambda) d_{\mathbf{k}\uparrow} + \chi_2^*(E_\lambda) f_{\mathbf{k}\uparrow} + \chi_3^*(E_\lambda) d_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \chi_4^*(E_\lambda) f_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger. \quad (50)$$

Благодаря условиям (48) перестановочные свойства операторов α_λ сохраняются фермиевскими. Собственные значения энергии $E_\lambda^{\text{с}}$ определяются из условия равенства нулю детерминанта $\|H_{nm}^0 - E^{\text{с}} \delta_{nm}\|$, что приводит к решениям

$$\begin{aligned} E_\pm^{\text{с}} = \frac{1}{2} \Big\{ & E_d^2 + E_f^2 + 2E_m^2 + |\Delta_d|^2 + |\Delta_f|^2 + 2|\Delta_m|^2 \pm \\ & \pm [(E_d^2 + |\Delta_d|^2 - E_f^2 - |\Delta_f|^2)^2 + 4|E_m(E_d + E_f) + \Delta_m^* \Delta_f + \Delta_m \Delta_f^*|^2 + \\ & + 4|(E_d - E_f)\Delta_m^* + E_m(\Delta_f^* - \Delta_d^*)|^2]^{\frac{1}{2}} \Big\}. \end{aligned} \quad (51)$$

Четыре собственных значения гамильтоновой матрицы (44) суть

$$\begin{aligned} E_1^s(\mathbf{k}) &= -\sqrt{(E_+^s)^2}, & E_2^s(\mathbf{k}) &= -\sqrt{(E_-^s)^2}, \\ E_3^s(\mathbf{k}) &= +\sqrt{(E_-^s)^2}, & E_4^s(\mathbf{k}) &= +\sqrt{(E_+^s)^2}. \end{aligned} \quad (52)$$

Нетрудно убедиться, что оба значения (51) положительны. Тем самым два собственных значения (52) отрицательны и два положительны. Спектр энергий квазичастиц оказывается хорошо определенным. Он зависит как от трех одночастичных энергий нормальной фазы системы, так и от трех параметров порядка сверхпроводящей фазы. Полученные результаты следует дополнить условиями самосогласования параметров порядка сверхпроводящей фазы, а также определением химического потенциала системы. Эти условия фактически сводятся к трем нелинейным уравнениям для средних одноузельных чисел частиц $\bar{m}$, $\bar{n}$ и $\bar{p}$ и одного дополнительного условия для химического потенциала, а также к трем нелинейным уравнениям для локальных параметров порядка γ_d , γ_f и γ_m . В критической точке $T = T_c$ три последних уравнения линеаризуются, и на их основе возможно определение T_c . Эта программа дальнейших исследований может ответить на вопрос, достаточны ли перечисленные выше эффекты для возникновения сверхпроводимости в рассматриваемой ПМА.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В работе получен эффективный гамильтониан сильно коррелированных d - и f -электронов. Он содержит низкоэнергетические спиновые флуктуации, приводящие к коррелированному перескоку электронов между узлами решетки и к локальным парным взаимодействиям электронов с противоположными спинами, принадлежащими как к одинаковым, так и к разным орбиталям. Вместо ионных энергий d - и f -электронов и кинетической энергии d -электронов, содержащихся в исходном гамильтониане ПМА, возникают сильно коррелированные величины, содержащие ограничения двойной занятости узлов решетки. Наличие двух электронных орбиталей приводит к двойному ограничению и к возникновению более сложных, чем в $(t-J)$ -модели, нелинейных вкладов гамильтониана.

Как следует из полученных результатов, имеется несколько факторов, способствующих образованию связанных электронных пар. Во-первых, отметим существование синглетного состояния с отрицательной энергией E_6 . Это состояние содержит выигрыш энергии благодаря эффекту Кондо, приводящему к притяжению электронных пар. Во-вторых, существуют коррелированные переходы, которые порождают флуктуирующие пары электронов с противоположными спинами, принадлежащие к обеим орбиталям. Третьим фактором является туннелирование электронных пар между различными орбиталями. Это явление в результате виртуальных переходов способно привести к дополнительному притяжению пар, подобно тому как это имеет место в теории многозонных сверхпроводников. Четвертым фактором является наличие кулоновского отталкивания одноузельных электронов, принадлежащих к разным орбиталям. Это отталкивание увеличивает вероятность образования электронных пар одной и той же орбитали

в той мере, в какой межорбитальное отталкивание G уменьшает значение кулоновского отталкивания одноорбитальных электронов U . Линеаризация полученного эффективного гамильтониана на основе приближения среднего поля привела к концепции хорошо определенных квазичастиц.

Дальнейшее исследование полученных основных уравнений может ответить на вопрос, есть ли на самом деле сверхпроводимость в ПМА.

Благодарности. Мы (Д.Ф.Д. и В.А.М.) благодарим Высший совет по науке и технологическому развитию Правительства Республики Молдова за финансовую поддержку при выполнении данной работы. Один из авторов (В.А.М) благодарен университетам Салерно и Дуйсбурга за гостеприимство и финансовую поддержку. Мы (В.А.М и Н.Б.П) благодарны профессору Н. М. Плакиде и участникам его семинара за полезное обсуждение. Двое из нас (П.Е. и В.А.М.) благодарят комитет проекта Гейзенберг–Ландау за предоставленный грант и ЛТФ ОИЯИ за гостеприимство.

Список литературы

- [1] *P. W. Anderson.* Phys. Rev. 1961. V. 124. P. 41.
- [2] *V. A. Moskalenko, P. Entel, M. Marinaro, N. B. Perkins, C. Holtfort.* Hopping perturbation treatment of the Periodic Anderson Model around the atomic limit. Phys. Rev. B (in press); *B. A. Москаленко, Н. Б. Перкинс.* ТМФ. 1999. Т. 121. № 3. С. 464.
- [3] *M. W. Long.* Z. Phys. B. 1988. V. 69. P. 409, 427; 1988. V. 71. P. 23.
- [4] *F. Mancini, M. Marinaro, Y. Nakano.* Physica B. 1989. V. 159. P. 330.
- [5] *F. Mancini, M. Marinaro, Y. Nakano, C. Noce, A. Romano.* Nuovo Cimento D. 1989. V. 11. P. 1709.
- [6] *C. Noce, A. Romano.* J. Phys.: Condens. Matter. 1989. V. 1. P. 8347.
- [7] *C. Noce, A. Romano.* Physica B. 1990. V. 160. P. 304.
- [8] *B. R. Alascio, R. Allub, A. Aligia.* J. Phys. C. 1980. V. 13. P. 2869.
- [9] *G. Czycholl.* Phys. Rep. 1986. V. 143. P. 277.
- [10] *P. Schlottmann.* Phys. Rep. 1989. V. 181. P. 1.
- [11] *С. Г. Овчинников.* УФН. 1997. Т. 167. С. 1043.
- [12] *A. C. Hewson.* The Kondo Problem to Heavy Fermions. Cambridge Studies in Magnetism. Eds. D. Edwards, D. Melville. Cambridge: Cambridge University Press, 1993.
- [13] *P. Fulde.* Electron Correlation in Molecules and Solids. Solid State Sciences. V. 100. Third Edition. Berlin: Springer, 1995.
- [14] *J. Hubbard.* Proc. Roy. Soc. A. 1963. V. 27b. P. 233; *М. И. Владимир, В. А. Москаленко.* ТМФ. 1990. Т. 82. С. 428.
- [15] *J. E. Hirsch.* Phys. Rev. Lett. 1985. V. 54. P. 1317.
- [16] *В. А. Москаленко.* ФММ. 1959. Т. 8. С. 503.
- [17] *H. Suhl, B. T. Matthias, L. R. Walker.* Phys. Rev. Lett. 1959. V. 3. P. 552.
- [18] *L. M. Falicov, J. C. Kimball.* Phys. Rev. Lett. 1969. V. 22. P. 997.
- [19] *Н. Н. Боголюбов.* ЖЭТФ. 1958. Т. 34. № 1. С. 58; Избранные труды. Киев: Наукова думка, 1972.

Поступила в редакцию 21.XI.2000 г.,
после доработки 15.I.2001 г.