Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. А. Москаленко, П. Ентель, Д. Ф. Дигор, Л. А. Дохотару, Р. Читро, Диаграммный подход к сильной связи в однопримесной модели Андерсона, *ТМФ*, 2008, том 155, номер 3, 474–497

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6224>

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: 54.172.240.79

26 апреля 2023 г., 13:16:41

© 2008 г.

В. А. Москаленко^{*,†}, П. Ентель[‡],
Д. Ф. Дигор^{*}, Л. А. Дохотару[§], Р. Читро[¶]

ДИАГРАММНЫЙ ПОДХОД К СИЛЬНОЙ СВЯЗИ В ОДНОПРИМЕСНОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА

Предложен диаграммный подход для однопримесной модели Андерсона, в которой сильно коррелированные примесные электроны гибридизируются со свободными (некоррелированными) электронами проводимости. На основе этого диаграммного подхода доказана теорема о связанных кластерах для вакуумных диаграмм и выведены уравнения типа уравнения Дайсона для локализованных электронов и электронов проводимости, а также соответствующие уравнения для смешанных пропагаторов. Систему уравнений можно замкнуть путем суммирования бесконечного ряда лестничных диаграмм, содержащих неприводимые функции Грина. Полученный результат позволяет рассматривать резонансы, связанные с квантовыми переходами в примесном узле.

Ключевые слова: сильные корреляции, спектральная функция, уравнение Дайсона, функции Грина, примесная модель Андерсона.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее десятилетие исследования сильно коррелированных электронных систем представляет собой одну из наиболее активно развивающихся областей физики конденсированного состояния. Значительное место среди моделей сильно коррелированных электронов занимает одноузельная или примесная модель, введенная Андерсоном [1] в 1961 году и интенсивно обсуждавшаяся в многочисленных статьях [2]–[15]. Она представляет собой модель системы свободных электронов проводимости, взаимодействующих с системой локализованных электронов, принадлежащих к d - или f -оболочке примесного атома. Примесные электроны сильно коррелированы из-за сильного кулоновского отталкивания, и происходят их обмен и гибридизация с электронами проводимости. Эта модель имеет ряд свойств, близких свойствам

^{*}Институт прикладной физики Академии наук Молдовы, Кишинев, Молдова

[†]Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Московская обл., Россия.
E-mail: moskalen@thsun1.jinr.ru

[‡]University of Duisburg-Essen, Duisburg, Germany

[§]Технический университет Молдовы, Кишинев, Молдова

[¶]Dipartimento di Fisica E. R. Caianiello, Università degli Studi di Salerno and CNISM, Baronissi, Italy

модели Кондо, но более богата физически [16]–[18]. Ее можно применять к исследованию систем с тяжелыми фермионами, где локальная примесная орбиталь есть f -орбиталь.

В течение прошедших лет было развито множество подходов к исследованию модели Андерсона [19], [20]. В исследованиях примесной модели Андерсона широко использовались методы и результаты, полученные для модели Кондо в работе [18], а также в [21], [22]. Эти работы основаны на методе уравнений движения для запаздывающих и опережающих квантовых функций Грина, предложенном Боголюбовым и Тябликовым [23] и развитом далее в работах [24]–[26].

В случае однопримесной модели Андерсона уравнение движения для (одночастичной) примесной функции Грина приводит к бесконечной иерархии уравнений движения для функций Грина высших порядков. Хорошо известная приближенная процедура состоит в усечении этой иерархии, что дает некоторые термодинамические средние, представляющие различные корреляционные функции, которые следует определять самосогласованно из получающейся замкнутой системы уравнений. Этап, на котором уравнения движения усекаются, выбирается так, чтобы учесть большую часть эффектов взаимодействия [10], [12], [27]. Метод уравнений движения применялся к системам квантовых точек в работе [28]. Пренебрегая определенными корреляционными функциями, авторы работы [28] получили замкнутое аналитическое выражение для функции Грина точек. В нескольких последующих исследованиях эта схема использовалась для описания различных эффектов корреляций Кондо в квантовых точках в рамках различных допущений (см. [29] и приведенную там литературу). Подход на основе уравнений движения широко применялся для получения приближенных выражений для проводимости [10], [27], спиновой восприимчивости [27], [30] и магнитотранспорта [31] разбавленных магнитных сплавов, а в последнее время и для описания физики квантовых точек [29].

Другую категорию подходов, применявшихся для вывода аналитических выражений для функций Грина, составляют диаграммные техники. Первая попытка развития диаграммной техники для этой задачи была реализована в работе [32], где использовались разложение по кумулянтам для средних произведений операторов квантового перехода Хаббарда и алгебра этих операторов. Впоследствии были развиты и другие диаграммные техники, считающие в качестве возмущения гибридизирующие амплитуды при сохранении одноузельных корреляций [33]–[35]. Альтернативные подходы основываются на численных методах, таких как квантовый метод Монте-Карло [36] или метод численной ренормализационной группы [37]. В частности, считается, что метод численной ренормализационной группы способен дать точные оценки функции Грина в широком диапазоне параметров, хотя и ценой итерационных диагонализаций в процессе вычислений при каждом наборе параметров и ограниченного разрешения при высокой энергии и сильном магнитном поле [19]. С введением динамической теории среднего поля интерес к примесной модели Андерсона возрос, потому что бесконечномерные решеточные модели можно проецировать на эффективные примесные модели вместе с условием самосогласованности [38], [39].

Гамильтониан модели записывается в виде

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_{\text{int}}, & H_0 &= H_0^c + H_0^f, \\ H_0^c &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) C_{\mathbf{k}\sigma}^+ C_{\mathbf{k}\sigma}, & H_0^f &= \epsilon_f \sum_{\sigma} f_{\sigma}^+ f_{\sigma} + U n_{\uparrow}^f n_{\downarrow}^f, \\ H_{\text{int}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (V_{\mathbf{k}\sigma} f_{\sigma}^+ C_{\mathbf{k}\sigma} + V_{\mathbf{k}\sigma}^* C_{\mathbf{k}\sigma}^+ f_{\sigma}), & n_{\sigma}^f &= f_{\sigma}^+ f_{\sigma}, \end{aligned} \quad (1)$$

где $C_{\mathbf{k}\sigma}(C_{\mathbf{k}\sigma}^+)$ и $f_{\sigma}(f_{\sigma}^+)$ – соответственно операторы уничтожения (рождения) электронов проводимости и примесных электронов со спином σ , $\epsilon(\mathbf{k})$ – кинетическая энергия состояния зоны проводимости $(\mathbf{k}, \sigma)$, ϵ_f – локальная энергия f -электронов, U – одноузельное кулоновское отталкивание примесных электронов, N – число узлов решетки, а H_{int} – взаимодействие гибридизации между электронами проводимости и локализованными электронами. В дальнейшем суммирование по $\mathbf{k}$ заменяется интегрированием по энергии $\epsilon(\mathbf{k})$ с плотностью состояний $\rho_0(\epsilon)$ электронов проводимости, а матричные элементы рассматриваются как функции энергии $V(\epsilon)$. Из-за гибридизирующего члена в гамильтониане электроны проводимости со спинами, направленными вверх и вниз, приходят в локальную орбиталь и уходят из нее, и процессы с переворотом спина на первый взгляд не происходят. Таким образом, важными параметрами модели Андерсона являются ширина зоны проводимости W , плотность состояний $\rho_0(\epsilon)$, локальная энергия узла ϵ_f , и одноузельное кулоновское взаимодействие U . Энергия электронов отсчитывается от химического потенциала μ системы: $\epsilon(\mathbf{k}) = \xi(\mathbf{k}) - \mu$, $\epsilon_f = \bar{\epsilon}_f - \mu$. Имеется также энергетический параметр

$$\Gamma(\epsilon) = \frac{\pi}{N} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}^2 \delta(\epsilon - \epsilon(\mathbf{k})) = \pi V^2(\epsilon) \rho_0(\epsilon), \quad (2)$$

связанный с гибридизирующим членом. Эта функция предполагается постоянной, не зависящей от энергии. Член в гамильтониане, содержащий U , возникает из одноузельного кулоновского взаимодействия между двумя примесными электронами. Для систем, представляющих физический интерес, например для систем с тяжелыми фермионами, взаимодействие U слишком велико для того, чтобы его можно было рассматривать по теории возмущений. Его надо включить в основной гамильтониан H_0 . Вследствие существования этого члена теорема Вика для локальных электронов неприменима. Поэтому мы прежде всего формулируем обобщенную теорему Вика для локальных электронов, сохраняя при этом обычную теорему Вика для электронов проводимости. Сформулированная нами обобщенная теорема Вика позволяет ввести неприводимые функции Грина или кумулянты Кубо. Такие определения уже использовались нами при обсуждении свойств однозонной модели Хаббарда [40]–[42] и в формулировке новой диаграммной техники для нее [43]–[46].

В разделе 2 мы сначала вводим температурные функции Грина для электронов проводимости и примесных электронов в представлении взаимодействия. Далее мы формулируем обобщенную теорему Вика и приводим явные примеры диаграммных вычислений для термодинамического потенциала и полных пропагаторов. Результаты анализируются в разделах 3 и 4. Некоторые аппроксимации обсуждаются в разделах 5, 6, а в разделе 7 содержится заключение.

2. ДИАГРАММНЫЙ ПОДХОД

Определим мацубаровские перенормированные функции Грина электронов проводимости и примесных электронов в представлении взаимодействия:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}, \sigma, \tau \mid \mathbf{k}', \sigma', \tau') &= -\langle TC_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \bar{C}_{\mathbf{k}'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ g(\sigma, \tau \mid \sigma', \tau') &= -\langle T f_{\sigma}(\tau) \bar{f}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c. \end{aligned} \quad (3)$$

Кроме того, определим аномальные функции Грина как

$$\begin{aligned} F(\mathbf{k}, \sigma, \tau \mid -\mathbf{k}, -\sigma', \tau') &= -\langle TC_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) C_{-\mathbf{k}'-\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ \bar{F}(-\mathbf{k}, -\sigma, \tau \mid \mathbf{k}', \sigma', \tau') &= -\langle T \bar{C}_{-\mathbf{k}-\sigma}(\tau) \bar{C}_{\mathbf{k}'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ f(\sigma, \tau \mid -\sigma', \tau') &= -\langle T f_{\sigma}(\tau) f_{-\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\ \bar{f}(-\sigma, \tau \mid \sigma', \tau') &= -\langle T \bar{f}_{-\sigma}(\tau) \bar{f}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \end{aligned} \quad (4)$$

если система находится в сверхпроводящем состоянии. Здесь τ и τ' обозначают мнимое время, $0 < \tau < \beta$, β – обратная температура, а T – оператор хронологического упорядочения. Оператор эволюции $U(\beta)$ имеет вид

$$\begin{aligned} U(\beta) &= T \exp \left(- \int_0^\beta H_{\text{int}}(\tau) d\tau \right) = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_n T(H_{\text{int}}(\tau_1) \dots H_{\text{int}}(\tau_n)). \end{aligned} \quad (5)$$

Статистическое усреднение выполняется в выражениях (3), (4) по матрице плотности нулевого порядка для электронов проводимости и примесных электронов, т.е.

$$\frac{e^{-\beta H_0}}{\text{Tr } e^{-\beta H_0}} = \frac{e^{-\beta H_0^c}}{\text{Tr } e^{-\beta H_0^c}} \times \frac{e^{-\beta H_0^f}}{\text{Tr } e^{-\beta H_0^f}}. \quad (6)$$

Термодинамическая теория возмущений по H_{int} требует адекватного обобщения для вычисления статистических средних T -произведений локализованных операторов f -электронов. Это требуется потому, что f -электроны не являются свободными в нулевом приближении. Гамильтониан H_0 можно диагонализировать с использованием алгебры операторов квантового перехода Хаббарда [40]–[42] $\chi^{mn} = |m\rangle\langle n|$, где $m = -1, 0, 1, 2$ нумерует четыре состояния примесного атома: $|0\rangle$ – пустое или вакуумное состояние с энергией $E_0 = 0$, $|1\rangle$ и $|-1\rangle$ (или $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$) – состояния с одной частицей с энергией $E_\sigma = \epsilon_f$ и спином $\sigma = \pm 1$, а состояние $|2\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$ содержит два f -электрона с противоположными спинами и энергией $E_2 = U + 2\epsilon_f$. Используя соотношение

$$f_\sigma = \chi^{0\sigma} + \sigma \chi^{\bar{\sigma}2}, \quad (7)$$

получаем диагонализированный вид примесного гамильтониана

$$H_0^f = \sum_{n=-1}^2 E_n \chi^{nn}, \quad \sum_{n=-1}^2 \chi^{nn} = 1. \quad (8)$$

В приближении нулевого порядка, в пренебрежении процессом гибридизации электронов проводимости и примесных электронов, соответствующие функции Грина имеют вид ($\omega \equiv \omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$)

$$G_{\sigma\sigma'}^0(\mathbf{k}, \mathbf{k}' | i\omega) = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{1}{i\omega - \epsilon(\mathbf{k})}, \quad (9)$$

$$g_{\sigma\sigma'}^0 = \delta_{\sigma\sigma'} g_{\sigma}^0(i\omega), \quad g_{\sigma}^0(i\omega) = \frac{1 - n_{\bar{\sigma}}}{\lambda_{\sigma}(i\omega)} + \frac{n_{\bar{\sigma}}}{\bar{\lambda}_{\bar{\sigma}}(i\omega)}, \quad \bar{\sigma} = -\sigma,$$

где

$$\lambda_{\sigma}(i\omega) = i\omega + E_0 - E_{\sigma}, \quad \bar{\lambda}_{\bar{\sigma}}(i\omega) = i\omega + E_{\bar{\sigma}} - E_2,$$

$$Z_0 = e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_{\sigma}} + e^{-\beta E_{\bar{\sigma}}} + e^{-\beta E_2},$$

$$n_{\bar{\sigma}} = \frac{e^{-\beta E_{\bar{\sigma}}} + e^{-\beta E_2}}{Z_0}, \quad 1 - n_{\bar{\sigma}} = \frac{e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_{\sigma}}}{Z_0}.$$

В высших порядках пертурбативного разложения в случае f -электронов используем тождество, соответствующее сформулированной нами обобщенной теореме Вика:

$$\langle T f_1 f_2 \bar{f}_3 \bar{f}_4 \rangle_0 = \langle T f_1 \bar{f}_4 \rangle_0 \langle T f_2 \bar{f}_3 \rangle_0 - \langle T f_1 \bar{f}_3 \rangle_0 \langle T f_2 \bar{f}_4 \rangle_0 + \langle T f_1 f_2 \bar{f}_3 \bar{f}_4 \rangle_0^{\text{ir}}, \quad (10)$$

или

$$g_2^0(1, 2 | 3, 4) = g^0(1 | 4) g^0(2 | 3) - g^0(1 | 3) g^0(2 | 4) + g_2^{(0)\text{ir}}(1, 2 | 3, 4), \quad (11)$$

где n обозначает (σ_n, τ_n) . Обобщение на более сложные средние типа $g_n^0(1, \dots, n | n + 1, \dots, 2n) = (-1)^n \langle T f_1 \dots f_n \bar{f}_{n+1} \dots \bar{f}_{2n} \rangle_0$ проводится непосредственно: правая часть выражения для этой величины тогда содержит $n!$ членов обычного виковского типа (цепные диаграммы) и различные произведения неприводимых функций с тем же полным числом операторов. Полные неприводимые функции появляются также в $g_n^0(1, \dots, n | n + 1, \dots, 2n)$. Например, $g_3^0(123 | 456)$ содержит вклад $3! = 6$ членов обычного виковского типа, 9 членов вида $g^0(1 | 4) g_2^{(0)\text{ir}}(23 | 56)$ и один (последний) член $g_3^{(0)\text{ir}}(123 | 456)$. Полное число слагаемых равно 16. Знаки всех этих вкладов легко определить из правил коммутации. Таким образом, определение неприводимых функций Грина или кумулянтов Кубо естественно возникает из обобщенной теоремы Вика. В отсутствие кулоновского отталкивания U все эти неприводимые функции равны нулю. При $U \neq 0$ они содержат все спиновые, зарядовые и парные флуктуации, вызванные сильными корреляциями. Эти определения являются упрощением определений для модели Хаббарда и других решеточных моделей. Вычисление простейших неприводимых функций, например $g_2^{(0)\text{ir}}(12 | 34)$, достаточно громоздко, хотя и выполняется непосредственно. Необходимо найти значения хронологических средних для $4! = 24$ различных упорядочений времен $\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4$ и затем определить фурье-представление

$$g_2^{(0)\text{ir}}[\sigma_1, \tau_1; \sigma_2, \tau_2 | \sigma_3, \tau_3; \sigma_4, \tau_4] = \frac{1}{\beta^4} \sum_{\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4} e^{-i\omega_1 \tau_1 - i\omega_2 \tau_2 + i\omega_3 \tau_3 + i\omega_4 \tau_4} \times$$

$$\times g_2^{(0)\text{ir}}[\sigma_1, i\omega_1; \sigma_2, i\omega_2 | \sigma_3, i\omega_3; \sigma_4, i\omega_4]. \quad (12)$$

Фурье-представление сохраняет частоты:

$$g_2^{(0)\text{ir}}[\sigma_1, i\omega_1; \sigma_2, i\omega_2 \mid \sigma_3, i\omega_3; \sigma_4, i\omega_4] = \beta\delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4) \times \\ \times \tilde{g}_2^{(0)\text{ir}}[\sigma_1, i\omega_1; \sigma_2, i\omega_2 \mid \sigma_3, i\omega_3; \sigma_4, i\omega_1 + i\omega_2 - i\omega_3]. \quad (13)$$

Кроме того, сохраняется спин: $\sigma_1 + \sigma_2 = \sigma_3 + \sigma_4$. Таким образом, мы получаем правила обращения с хронологическими средними термодинамической теории возмущений.

3. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ

Сначала найдем термодинамический потенциал системы

$$F = F_0 - \frac{1}{\beta} \ln \langle U(\beta) \rangle_0, \\ F_0 = -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 - \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 + e^{-\beta\epsilon(\mathbf{k})}], \quad (14)$$

где Z_0 – статсумма свободного примесного атома, а второе слагаемое – вклад электронов проводимости. Диаграммы, определяющие термодинамический потенциал, не имеют внешних линий и называются вакуумными.

Рис. 1. Простейшие связанные вакуумные диаграммы в нормальном состоянии. Диаграмма (а) имеет второй, а диаграммы (б) и (в) четвертый порядок в теории. Здесь $\bar{V}_n = V_n/\sqrt{N}$.

На рис. 1 показаны простейшие вакуумные связанные диаграммы нормального состояния. Диаграммы представляют процесс гибридизации s - и f -электронов. Пропагаторы нулевого порядка электронов проводимости и примесных электронов представлены сплошными и штриховыми линиями соответственно. Эти линии на рисунке связывают крестики, которые представляют примесные состояния. С крестиками связаны по две стрелки, одна из которых является входящей, а другая – исходящей. Они представляют операторы уничтожения и рождения соответственно. Индекс n обозначает (σ_n, τ_n) для примесных электронов и $(\mathbf{k}_n, \sigma_n, \tau_n)$ для электронов проводимости. Прямоугольники с $2n$ крестиками обозначают неприводимые функции Грина $g_n^{(0)\text{ir}}$ для f -электронов.

Рис. 2. Простейшие вакуумные аномальные диаграммы. Диаграммы (а) и (б) имеют второй, а (в), (г) и (д) – четвертый порядок в теории возмущений.

Помимо вакуумных диаграмм четвертого порядка, показанных на рис. 1б, в, имеется также одна несвязная диаграмма, составленная из двух диаграмм, подобных приведенной на рис. 1а, и содержащая дополнительный множитель $1/2!$. Эта ситуация повторяется в высших порядках теории возмущений и позволяет сформулировать теорему о связанных кластерах. Она имеет вид

$$\langle U(\beta) \rangle_0 = e^{\langle U(\beta) \rangle_0^c}, \quad (15)$$

где $\langle U(\beta) \rangle_0^c$ содержит только связанные диаграммы и равна нулю, когда гибридизация отсутствует. Если мы допускаем существование механизма образования пар электронов проводимости, то вследствие гибридизации механизм образования пар возможен также для примесных электронов. Этот механизм приводит к появлению аномальных пропагаторов обоих типов электронов.

На рис. 2 изображены некоторые простейшие связанные аномальные вакуумные диаграммы. Аномальные пропагаторы изображены (сплошными и штриховыми) линиями с двумя противоположно направленными стрелками на концах.

4. ПЕРЕНОРМИРОВАННЫЕ ПРОПАГАТОРЫ

В данном разделе мы применяем диаграммный анализ перенормированных пропагаторов (3) и (4). Простейшие вклады в такой ряд представлены на рис. 3–6. Все

такие диаграммы содержат две внешние точки с присоединенными к ним стрелками, определяемыми аргументами функций Грина и их видом. Во внутренних точках диаграмм подразумевается суммирование по σ_n , $\mathbf{k}_n$ и интегрирование по τ_n .

$$\begin{aligned}
 NG^{(2)}(\mathbf{k}, \sigma, \tau | \mathbf{k}', \sigma', \tau') = & \quad \xleftarrow{\mathbf{k}, \sigma, \tau} \xrightarrow{G^0} \xleftarrow{V_1^*} \xleftarrow{1} \xleftarrow{g^0} \xleftarrow{V_2} \xleftarrow{G^0} \xleftarrow{\mathbf{k}', \sigma', \tau'} \\
 - & \quad \xleftarrow{\mathbf{k}, \sigma, \tau} \xrightarrow{G^0} \xleftarrow{V_1^*} \xleftarrow{1} \xleftarrow{f^0} \xrightarrow{V_2^*} \xrightarrow{\bar{F}^0} \xleftarrow{\mathbf{k}', \sigma', \tau'} - \xleftarrow{\mathbf{k}, \sigma, \tau} \xrightarrow{F^0} \xleftarrow{V_1} \xleftarrow{1} \xleftarrow{g^0} \xleftarrow{V_2^*} \xleftarrow{\bar{F}^0} \xleftarrow{\mathbf{k}', \sigma', \tau'} \\
 - & \quad \xleftarrow{\mathbf{k}, \sigma, \tau} \xrightarrow{F^0} \xleftarrow{V_1} \xleftarrow{1} \xleftarrow{\bar{f}^0} \xleftarrow{V_2} \xleftarrow{G^0} \xleftarrow{\mathbf{k}', \sigma', \tau'}
 \end{aligned}$$

Рис. 3. Вклад второго порядка теории возмущений для нормального пропагатора электронов проводимости.

$$\begin{aligned}
 NF^{(2)}(\mathbf{k}, \sigma, \tau | -\mathbf{k}', -\sigma', \tau') = & \quad \xleftarrow{\mathbf{k}, \sigma, \tau} \xrightarrow{G^0} \xleftarrow{V_1^*} \xleftarrow{1} \xleftarrow{g^0} \xleftarrow{V_2} \xrightarrow{F^0} \xleftarrow{-\mathbf{k}', -\sigma', \tau'} \\
 + & \quad \xleftarrow{\mathbf{k}, \sigma, \tau} \xrightarrow{G^0} \xleftarrow{V_1^*} \xleftarrow{1} \xleftarrow{f^0} \xrightarrow{V_2^*} \xrightarrow{G^0} \xleftarrow{-\mathbf{k}', -\sigma', \tau'} + \xleftarrow{\mathbf{k}, \sigma, \tau} \xrightarrow{F^0} \xleftarrow{V_1} \xleftarrow{1} \xleftarrow{g^0} \xleftarrow{V_2^*} \xrightarrow{G^0} \xleftarrow{-\mathbf{k}', -\sigma', \tau'} \\
 - & \quad \xleftarrow{\mathbf{k}, \sigma, \tau} \xrightarrow{F^0} \xleftarrow{V_1} \xleftarrow{1} \xleftarrow{\bar{f}^0} \xleftarrow{V_2} \xrightarrow{F^0} \xleftarrow{-\mathbf{k}', -\sigma', \tau'}
 \end{aligned}$$

Рис. 4. Вклад второго порядка теории возмущений для аномального пропагатора электронов проводимости.

В том же приближении второго порядка теории возмущений диаграммы для пропагаторов примесных электронов содержат новые диаграммные элементы – двухчастичные неприводимые функции Грина. Эти функции также могут быть нормальными или аномальными. Процесс их перенормировки здесь не рассматривается, мы ограничимся лишь перенормировкой пропагаторов.

На рис. 5 показаны диаграммы для нормального пропагатора примесных электронов. Две последние неприводимые функции Грина на рис. 5 являются аномальными, потому что содержат неравные числа f -операторов уничтожения и рождения. В результате суммирования бесконечного ряда диаграмм получают перенормированные нормальные и аномальные пропагаторы. При этом необходимо положить источник электронных пар равным нулю и одновременно обратить в нуль затраченные пропагаторы f^0 и $\bar{f}^0$ вместе с аномальными неприводимыми функциями Грина. Соответствующие вклады в аномальную функцию примесных электронов $f_{\sigma\sigma'}(\tau - \tau')$ показаны на рис. 6.

Рис. 5. Вклад возмущений второго порядка для нормального пропагатора примесных электронов.

Чтобы получить окончательные уравнения для перенормированных функций, удобнее использовать представление Фурье

$$G(\mathbf{k}, \sigma, \tau | \mathbf{k}', \sigma', \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega} G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}' | i\omega) e^{-i\omega(\tau - \tau')},$$

$$F(\mathbf{k}, \sigma, \tau | -\mathbf{k}', -\sigma', \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega} F_{\sigma\bar{\sigma}'}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}' | i\omega) e^{-i\omega(\tau - \tau')}.$$

Точные уравнения для пропагаторов электронов проводимости имеют вид

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}' | i\omega) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} G_{\sigma}^0(\mathbf{k} | i\omega) + \frac{V_{\mathbf{k}}^* V_{\mathbf{k}'}}{N} (G_{\sigma}^0(\mathbf{k} | i\omega) g_{\sigma\sigma'}(i\omega) G_{\sigma'}^0(\mathbf{k}' | i\omega) -$$

$$- G_{\sigma}^0(\mathbf{k} | i\omega) f_{\sigma\bar{\sigma}'}(i\omega) \bar{F}_{\bar{\sigma}'\sigma'}^0(-\mathbf{k}' | i\omega) - F_{\sigma\bar{\sigma}}^0(\mathbf{k} | i\omega) g_{\bar{\sigma}'\bar{\sigma}}(-i\omega) \bar{F}_{\bar{\sigma}'\sigma'}^0(-\mathbf{k} | i\omega) -$$

$$- F_{\sigma\bar{\sigma}}^0(\mathbf{k} | i\omega) \bar{f}_{\bar{\sigma}\sigma'}(i\omega) G_{\sigma'}^0(\mathbf{k}' | i\omega)), \quad (16)$$

$$F_{\sigma\bar{\sigma}'}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}' | i\omega) = F_{\sigma\bar{\sigma}}^0(\mathbf{k} | i\omega) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{V_{\mathbf{k}}^* V_{\mathbf{k}'}}{N} (G_{\sigma}^0(\mathbf{k} | i\omega) g_{\sigma\sigma'}(i\omega) F_{\sigma'\bar{\sigma}'}^0(\mathbf{k}' | i\omega) +$$

$$+ G_{\sigma}^0(\mathbf{k} | i\omega) f_{\sigma\bar{\sigma}'}(i\omega) G_{\bar{\sigma}'}^0(-\mathbf{k}' | -i\omega) + F_{\sigma\bar{\sigma}}^0(\mathbf{k} | i\omega) g_{\bar{\sigma}'\bar{\sigma}}(-i\omega) G_{\bar{\sigma}'}^0(-\mathbf{k}' | -i\omega) -$$

$$- F_{\sigma\bar{\sigma}}^0(\mathbf{k} | i\omega) \bar{f}_{\bar{\sigma}\sigma'}(i\omega) F_{\sigma'\bar{\sigma}'}^0(\mathbf{k}' | i\omega)).$$

Эти перенормированные пропагаторы выражаются через полные пропагаторы g , f и $\bar{f}$ примесных электронов. Поскольку подсистема f -электронов является сильно коррелированной, для получения соответствующих уравнений для полных пропагаторов примесных электронов мы сначала введем корреляционные функции $Z_{\sigma\sigma'}$, $Y_{\sigma\bar{\sigma}'}$ и $\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma'}$, представленные сильносвязными диаграммами с неприводимыми функциями Грина [43]–[47]. Процесс перенормировки пропагаторов f -электронов показан на рис. 7, 8, где двойные штриховые линии обозначают полные функции f -электронов, а прямоугольники представляют корреляционные функции $Z_{\sigma\sigma'}$, $Y_{\sigma\sigma'}$ и $\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma'}$.

$$\begin{aligned}
 N f_{\sigma, \bar{\sigma}'}^{(2)}(\tau - \tau') = & \begin{array}{c} \xleftarrow{\sigma, \tau} \xleftarrow{g^0} \xleftarrow{V_1} \xleftarrow{F^0} \xrightarrow{V_2} \xleftarrow{-\sigma', \tau'} \\ 1 \qquad 2 \end{array} \\
 + & \begin{array}{c} \xleftarrow{\sigma, \tau} \xleftarrow{g^0} \xleftarrow{V_1} \xrightarrow{G^0} \xleftarrow{V_2^*} \xleftarrow{f^0} \xrightarrow{-\sigma', \tau'} + \xleftarrow{\sigma, \tau} \xleftarrow{f^0} \xrightarrow{V_1^*} \xrightarrow{G^0} \xleftarrow{V_2} \xleftarrow{g^0} \xrightarrow{-\sigma', \tau'} \\ 1 \qquad 2 \qquad 1 \qquad 2 \end{array} \\
 - & \begin{array}{c} \xleftarrow{\sigma, \tau} \xleftarrow{f^0} \xrightarrow{V_1^*} \xrightarrow{\bar{F}^0} \xleftarrow{V_2^*} \xleftarrow{f^0} \xrightarrow{-\sigma', \tau'} \\ 1 \qquad 2 \end{array} \\
 - V_1^* V_2 & \begin{array}{|c|} \hline \begin{array}{c} \xleftarrow{\sigma', \tau'} \xrightarrow{\sigma \tau} \\ \xleftarrow{\sigma \tau} \xrightarrow{\sigma', \tau'} \end{array} \\ \hline \end{array} \\
 - \frac{1}{2} V_1^* V_2^* & \begin{array}{|c|} \hline \begin{array}{c} \xleftarrow{\sigma \tau} \xrightarrow{-\sigma', \tau'} \\ \xleftarrow{-\sigma', \tau'} \xrightarrow{\sigma \tau} \end{array} \\ \hline \end{array} \\
 - \frac{1}{2} V_1 V_2 & \begin{array}{|c|} \hline \begin{array}{c} \xleftarrow{-\sigma', \tau'} \xrightarrow{\sigma \tau} \\ \xleftarrow{\sigma \tau} \xrightarrow{-\sigma', \tau'} \end{array} \\ \hline \end{array} \\
 g_2^{(0)\text{ir}}(\sigma, \tau; -\sigma', \tau'; \sigma_1, \tau_1 \mid \sigma_2, \tau_2) & g_2^{(0)\text{ir}}(\sigma, \tau; \sigma_1, \tau_1; \sigma_2, \tau_2; -\sigma', \tau') \mid g_2^{(0)\text{ir}}(\sigma, \tau; -\sigma', \tau' \mid \sigma_1, \tau_1; \sigma_2, \tau_2)
 \end{aligned}$$

Рис. 6. Аномальная функция Грина примесных электронов во втором порядке теории возмущений.

На рис. 8 показано уравнение для аномального пропагатора $\bar{f}$ примесных электронов. В этих уравнениях затравочные пропагаторы электронов проводимости $G_\sigma^0(\mathbf{k} \mid i\omega)$, $F_{\sigma\bar{\sigma}}^0(\mathbf{k} \mid i\omega)$ и $\bar{F}_{\sigma\bar{\sigma}}^0(-\mathbf{k} \mid i\omega)$ играют роль массовых операторов для пропагаторов f -электронов. Легко видеть, что эти функции участвуют в указанных уравнениях, усредненных по бриллюэновской ячейке с матричными элементами гибридизации. Определим новые величины:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}_2}^* V_{\mathbf{k}_1} G^0(\mathbf{k}_1, \sigma_1, \tau_1 \mid \mathbf{k}_2, \sigma_2, \tau_2) &= \\
 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1} |V_{\mathbf{k}_1}|^2 G_{\sigma_1 \sigma_2}^0(\mathbf{k} \mid \tau_1 - \tau_2) \equiv \delta_{\sigma_1 \sigma_2} G_{\sigma_1}^0(\tau_1 - \tau_2), \\
 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}_1}^* V_{\mathbf{k}_2} \bar{F}^0(\mathbf{k}_1, \bar{\sigma}_1, \tau_1 \mid \mathbf{k}_2, \sigma_2, \tau_2) &= \\
 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1} |V_{\mathbf{k}_1}|^2 \bar{F}_{\bar{\sigma}_1 \sigma_2}^0(-\mathbf{k}_1 \mid \tau_1 - \tau_2) \equiv \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \bar{F}_{\bar{\sigma}_1 \sigma_1}^0(\tau_1 - \tau_2), \\
 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}_1} V_{\mathbf{k}_2} F^0(\mathbf{k}_1, \sigma_1, \tau_1 \mid \mathbf{k}_2, \bar{\sigma}_2, \tau_2) &= \\
 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1} |V_{\mathbf{k}_1}|^2 F_{\sigma_1 \bar{\sigma}_2}^0(\mathbf{k}_1 \mid \tau_1 - \tau_2) \equiv \delta_{\sigma_1 \sigma_2} F_{\sigma_1 \bar{\sigma}_1}^0(\tau_1 - \tau_2).
 \end{aligned} \tag{17}$$

Эти определения позволяют упростить структуру уравнений для пропагаторов f -электронов. Используя эти усредненные затравочные пропагаторы G_σ^0 , $F_{\sigma\bar{\sigma}}^0$, $\bar{F}_{\sigma\bar{\sigma}}^0$

$$\begin{aligned}
& \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma\tau \end{array} \stackrel{g}{=} \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma'\tau' \end{array} = \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma\tau \end{array} \boxed{\Lambda} \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma'\tau' \end{array} + \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma\tau \end{array} \boxed{\Lambda} \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma\tau \end{array} \xrightarrow{\bar{V}_1} \xrightarrow{G^0} \xrightarrow{\bar{V}_2^*} \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma'\tau' \end{array} \stackrel{g}{=} \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma'\tau' \end{array} \\
- & \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma\tau \end{array} \boxed{\Lambda} \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma\tau \end{array} \xrightarrow{\bar{V}_1} \xrightarrow{F^0} \xrightarrow{\bar{V}_2} \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma'\tau' \end{array} \stackrel{\bar{f}}{=} \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma'\tau' \end{array} - \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma\tau \end{array} \boxed{Y} \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma\tau \end{array} \xrightarrow{\bar{V}_1^*} \xrightarrow{G^0} \xrightarrow{\bar{V}_2} \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma'\tau' \end{array} \stackrel{\bar{f}}{=} \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma'\tau' \end{array} \\
- & \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma\tau \end{array} \boxed{Y} \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma\tau \end{array} \xrightarrow{\bar{V}_1} \xrightarrow{\bar{F}^0} \xrightarrow{\bar{V}_2^*} \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma'\tau' \end{array} \stackrel{g}{=} \begin{array}{c} \xleftarrow{\quad} \\ \sigma'\tau' \end{array}
\end{aligned}$$

Рис. 7. Уравнение типа Дайсона для нормального пропагатора примесных электронов. Двойные штриховые линии изображают полные пропагаторы электронов. Стрелки на них различают нормальные и аномальные пропагаторы. Квадраты со стрелками обозначают коррелированные функции. По двойным повторяющимся индексам 1 и 2 предполагается суммирование по σ_n и $\mathbf{k}_n$ и интегрирование по τ_n .

и фурье-представление для τ -переменных, получаем

$$\begin{aligned}
g_\sigma(i\omega) &= \frac{\Lambda_\sigma(i\omega) - G_\sigma^0(-i\omega) [\Lambda_\sigma(i\omega) \Lambda_{\bar{\sigma}}(-i\omega) + Y_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega) \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega)]}{d_\sigma(i\omega)}, \\
\bar{f}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega) &= \frac{\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega) + \bar{F}_{\bar{\sigma}\sigma}^0(i\omega) [\Lambda_\sigma(i\omega) \Lambda_{\bar{\sigma}}(-i\omega) + Y_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega) \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega)]}{d_\sigma(i\omega)}, \\
f_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega) &= \frac{Y_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega) + F_{\sigma\bar{\sigma}}^0(i\omega) [\Lambda_\sigma(i\omega) \Lambda_{\bar{\sigma}}(-i\omega) + Y_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega) \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega)]}{d_\sigma(i\omega)}, \\
d_\sigma(i\omega) &= (1 - \Lambda_\sigma(i\omega) G_\sigma^0(i\omega)) (1 - \Lambda_{\bar{\sigma}}(-i\omega) G_{\bar{\sigma}}^0(-i\omega)) + \\
&\quad + \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega) F_{\sigma\bar{\sigma}}^0(i\omega) + Y_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega) \bar{F}_{\bar{\sigma}\sigma}^0(i\omega) + \\
&\quad + \bar{F}_{\bar{\sigma}\sigma}^0(i\omega) F_{\sigma\bar{\sigma}}^0(i\omega) [Y_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega) \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega) + \Lambda_\sigma(i\omega) \Lambda_{\bar{\sigma}}(-i\omega)] + \\
&\quad + G_\sigma^0(-i\omega) G_{\bar{\sigma}}^0(i\omega) Y_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega) \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega).
\end{aligned} \tag{18}$$

До сих пор мы предполагали существование спаривающего потенциала для электронов проводимости с параметром порядка Δ и с затравочными пропагаторами

$$\begin{aligned}
F_{\sigma\bar{\sigma}}^0(\mathbf{k} | i\omega) &= \bar{F}_{\bar{\sigma}\sigma}^0(-\mathbf{k} | i\omega) = \frac{\Delta}{(i\omega)^2 - E^2(\mathbf{k})}, \\
G_\sigma^0(\mathbf{k} | i\omega) &= \frac{i\omega + \epsilon(\mathbf{k})}{(i\omega)^2 - E^2(\mathbf{k})}, \quad E(\mathbf{k}) = \sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + \Delta^2}.
\end{aligned} \tag{19}$$

Теперь рассмотрим случай, когда спаривающий потенциал отсутствует и сверхпроводящее состояние появляется одновременно в обеих подсистемах как следствие нарушенной симметрии и фазового перехода. В этом более простом случае перенор-

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow_{\bar{\sigma}\tau} \bar{f} = \Leftarrow_{\sigma'\tau'} &= \Rightarrow_{\bar{\sigma}\tau} \boxed{\bar{Y}} \Leftarrow_{\sigma'\tau'} + \Rightarrow_{\bar{\sigma}\tau} \boxed{\Lambda} \Rightarrow_{\bar{V}_1}^{\bar{V}_1^*} \xrightarrow{G^0} \Leftarrow_{\bar{V}_2}^{\bar{V}_2^*} \Rightarrow_{\bar{f}} = \Leftarrow_{\sigma'\tau'} \\
 + \Rightarrow_{\bar{\sigma}\tau} \boxed{\Lambda} \Rightarrow_{\bar{V}_1}^{\bar{V}_1^*} \xrightarrow{F^0} \Leftarrow_{\bar{V}_2}^{\bar{V}_2^*} &= \overset{g}{=} \Leftarrow_{\sigma'\tau'} + \Rightarrow_{\bar{\sigma}\tau} \boxed{\bar{Y}} \Leftarrow_{\bar{V}_1}^{\bar{V}_1^*} \xrightarrow{G^0} \Leftarrow_{\bar{V}_2}^{\bar{V}_2^*} = \overset{g}{=} \Leftarrow_{\sigma'\tau'} \\
 - \Rightarrow_{\bar{\sigma}\tau} \boxed{\bar{Y}} \Leftarrow_{\bar{V}_1}^{\bar{V}_1^*} \xrightarrow{F^0} \bar{V}_2 &= \bar{f} = \Leftarrow_{\sigma'\tau'}
 \end{aligned}$$

Рис. 8. Уравнение типа Дайсона для одной из аномальных функций Грина f -электронов.

мированные пропагаторы электронов проводимости имеют вид

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}' | i\omega) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} G_{\sigma}^0(\mathbf{k} | i\omega) + \frac{V_{\mathbf{k}}^* V_{\mathbf{k}'}}{N} G_{\sigma}^0(\mathbf{k} | i\omega) g_{\sigma\sigma'}(i\omega) G_{\sigma'}^0(\mathbf{k}' | i\omega), \quad (20)$$

$$F_{\sigma\bar{\sigma}'}(\mathbf{k}, -\mathbf{k} | i\omega) = \frac{V_{\mathbf{k}}^* V_{\mathbf{k}'}}{N} G_{\sigma}^0(\mathbf{k} | i\omega) f_{\sigma\bar{\sigma}'}(i\omega) G_{\bar{\sigma}'}^0(-\mathbf{k} | -i\omega), \quad (21)$$

$$G_{\sigma}^0(\mathbf{k} | i\omega) = (i\omega - \epsilon(\mathbf{k}))^{-1}. \quad (22)$$

Перенормированные пропагаторы примесных электронов в этом случае имеют вид

$$\begin{aligned}
 g_{\sigma}(i\omega) &= \frac{\Lambda_{\sigma}(i\omega) - G_{\sigma}^0(-i\omega) [\Lambda_{\sigma}(i\omega) \Lambda_{\bar{\sigma}}(-i\omega) + Y_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega) \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega)]}{d_{\sigma}(i\omega)}, \\
 \bar{f}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega) &= \frac{\bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega)}{d_{\sigma}(i\omega)}, \quad f_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega) = \frac{Y_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega)}{d_{\sigma}(i\omega)}, \\
 d_{\sigma}(i\omega) &= (1 - \Lambda_{\sigma}(i\omega) G_{\sigma}^0(i\omega)) (1 - \Lambda_{\bar{\sigma}}(-i\omega) G_{\bar{\sigma}}^0(-i\omega)) + \\
 &\quad + G_{\bar{\sigma}}(-i\omega) G_{\sigma}^0(i\omega) Y_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega) \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega).
 \end{aligned} \quad (23)$$

Равенство (20) было установлено много лет назад в работе Андерсона [1] с использованием уравнений движения операторов электронов проводимости. В этом уравнении пропагатор $g_{\sigma}(i\omega)$ играет роль t -матрицы для рассеяния без переворота спина. Полагая $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ в выражении

$$G_{\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{k} | i\omega) = \frac{1}{i\omega - \epsilon(\mathbf{k})} + \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2 g_{\sigma}(i\omega)}{N(i\omega - \epsilon(\mathbf{k}))^2} \quad (24)$$

и рассматривая спектральное представление Лемана, можно заключить, что разрыв функции $g_{\sigma}(E)$ при переходе через вещественную ось является чисто мнимым [8]:

$$g_{\sigma}(E + i\delta) = [g_{\sigma}(E - i\delta)]^*. \quad (25)$$

Рис. 9. Схематическое представление основных приближений для коррелированных функций. Двойные сплошные линии со стрелками изображают перенормированные одночастичные функции Грина электронов проводимости, прямоугольники – неприводимые функции Грина примесных электронов.

До сих пор функции Грина $g_\sigma(i\omega)$ были известны в приближенном виде как результат специального механизма расщепления для уравнений движения квантовых функций Грина. В такой аппроксимации с расщеплением, как известно, некоторые комбинации операторов удаляются из средних значений произведений операторов и заменяются своими средними значениями. При этом остаются усеченные функции Грина низших порядков. Эту аппроксимацию предложили Боголюбов, Тябликов, Зубарев и Церковников [23]–[26] и использовали также другие авторы [2]–[14], [18]. Гибридизация электронов проводимости и примесных электронов приводит к появлению смешанных функций Грина

$$\begin{aligned}
 G_m(\mathbf{k}, \sigma, \tau | \sigma', \tau') &= -\langle TC_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \bar{f}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\
 F_m(\mathbf{k}, \sigma, \tau | \bar{\sigma}', \tau') &= -\langle TC_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) f_{\bar{\sigma}'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\
 \bar{F}_m(-\mathbf{k}, \bar{\sigma}, \tau | \sigma', \tau') &= -\langle T\bar{C}_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}}(\tau) \bar{f}_{\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c,
 \end{aligned} \tag{26}$$

 Рис. 10. Примеры простейших лестничных диаграмм для g -функции.

а также

$$\begin{aligned}
 G^m(\sigma, \tau \mid \mathbf{k}, \sigma', \tau') &= -\langle T f_\sigma(\tau) \bar{C}_{\mathbf{k}\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\
 F^m(\sigma, \tau \mid -\mathbf{k}, \bar{\sigma}', \tau') &= -\langle T f_\sigma(\tau) C_{-\mathbf{k}\bar{\sigma}'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c, \\
 \bar{F}^m(\bar{\sigma}, \tau \mid \mathbf{k}, \sigma', \tau') &= -\langle T \bar{f}_{\bar{\sigma}}(\tau) \bar{C}_{\mathbf{k}\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^c.
 \end{aligned} \tag{27}$$

Пусть $G_{m\sigma\sigma'}(\mathbf{k} \mid i\omega)$, $F_{m\sigma\bar{\sigma}'}(\mathbf{k} \mid i\omega)$ и $F_{m\bar{\sigma}\sigma'}(\mathbf{k} \mid i\omega)$ – фурье-представления функций Грина первой группы, а $G_{\sigma\sigma'}^m(\mathbf{k} \mid i\omega)$, $F_{\sigma\bar{\sigma}'}^m(-\mathbf{k} \mid i\omega)$ и $\bar{F}_{\bar{\sigma}\sigma'}^m(\mathbf{k} \mid i\omega)$ – второй группы. В присутствии сверхпроводящего спаривания электронов проводимости получаем следующий результат:

$$\begin{aligned}
 G_{m\sigma\sigma'}(\mathbf{k} \mid i\omega) &= \frac{V_{\mathbf{k}}^*}{\sqrt{N}} [G_\sigma^0(\mathbf{k} \mid i\omega) g_{\sigma\sigma'}(i\omega) - F_{\sigma\bar{\sigma}}^0(\mathbf{k} \mid i\omega) \bar{f}_{\bar{\sigma}\sigma'}(i\omega)], \\
 F_{m\sigma\bar{\sigma}'}(\mathbf{k} \mid i\omega) &= \frac{V_{\mathbf{k}}^*}{\sqrt{N}} [G_\sigma^0(\mathbf{k} \mid i\omega) f_{\sigma\sigma'}(i\omega) + F_{\sigma\bar{\sigma}}^0(\mathbf{k} \mid i\omega) g_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}(-i\omega)], \\
 \bar{F}_{m\bar{\sigma}\sigma'}(-\mathbf{k} \mid i\omega) &= \frac{V_{\mathbf{k}}^*}{\sqrt{N}} [G_{\bar{\sigma}}^0(-\mathbf{k} \mid -i\omega) \bar{f}_{\bar{\sigma}\sigma'}(i\omega) + \bar{F}_{\bar{\sigma}\sigma}^0(-\mathbf{k} \mid i\omega) g_{\sigma\sigma'}(i\omega)].
 \end{aligned} \tag{28}$$

Для второй группы смешанных пропагаторов имеем

$$\begin{aligned}
 G_{\sigma\sigma'}^m(\mathbf{k} \mid i\omega) &= \frac{V_{\mathbf{k}}}{\sqrt{N}} [g_{\sigma\sigma'}(i\omega) G_{\sigma'}^0(\mathbf{k} \mid i\omega) - f_{\sigma\bar{\sigma}'}(i\omega) \bar{F}_{\bar{\sigma}'\sigma'}^0(-\mathbf{k} \mid i\omega)], \\
 F_{\sigma\bar{\sigma}'}^m(-\mathbf{k} \mid i\omega) &= \frac{V_{\mathbf{k}}}{\sqrt{N}} [g_{\sigma\sigma'}(i\omega) F_{\sigma'}^0(\mathbf{k} \mid i\omega) + f_{\sigma\bar{\sigma}'}(i\omega) G_{\bar{\sigma}'}^0(-\mathbf{k} \mid i\omega)], \\
 \bar{F}_{\bar{\sigma}\sigma'}^m(\mathbf{k} \mid i\omega) &= \frac{V_{\mathbf{k}}}{\sqrt{N}} [\bar{f}_{\bar{\sigma}\sigma'}(i\omega) G_{\sigma'}^0(\mathbf{k} \mid i\omega) + g_{\bar{\sigma}\sigma'}(-i\omega) \bar{F}_{\bar{\sigma}'\sigma'}^0(-\mathbf{k} \mid i\omega)].
 \end{aligned} \tag{29}$$

Теперь умножим систему пропагаторов (27) на $V_{\mathbf{k}}^*/\sqrt{N}$. После суммирования по $\mathbf{k}$, используя определения (17) и считая, что система находится в парамагнитной фазе,

получаем

$$\begin{aligned}
 G_{\sigma}^m(i\omega) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}^* G_{\sigma}^m(\mathbf{k} | i\omega) = g_{\sigma}(i\omega) G_{\sigma}^0(i\omega) - f_{\sigma\bar{\sigma}'}(i\omega) \bar{F}_{\bar{\sigma}\sigma}^0(i\omega), \\
 F_{\sigma\bar{\sigma}}^m(i\omega) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} F_{\sigma\bar{\sigma}}^m(-\mathbf{k} | i\omega) = g_{\sigma}(i\omega) F_{\sigma\bar{\sigma}}^0(i\omega) + f_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega) G_{\bar{\sigma}}^0(-i\omega), \\
 \bar{F}_{\bar{\sigma}\sigma}^m(i\omega) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \bar{F}_{\bar{\sigma}\sigma}^m(\mathbf{k} | i\omega) = g_{\bar{\sigma}}(-i\omega) \bar{F}_{\bar{\sigma}\sigma}^0(i\omega) + \bar{f}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega) G_{\sigma}^0(i\omega).
 \end{aligned} \tag{30}$$

Когда сверхпроводящее состояние установилось и в f -подсистеме, и в s -подсистеме одновременно и затравочные аномальные функции Грина электронов проводимости равны нулю, приведенные выше уравнения упрощаются:

$$\begin{aligned}
 G_{\sigma}^m(i\omega) &= g_{\sigma}(i\omega) G_{\sigma}^0(i\omega), \\
 F_{\sigma\bar{\sigma}}^m(i\omega) &= f_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega) G_{\bar{\sigma}}^0(-i\omega), \\
 \bar{F}_{\bar{\sigma}\sigma}^m(i\omega) &= \bar{f}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega) G_{\sigma}^0(i\omega).
 \end{aligned} \tag{31}$$

Для второй группы смешанных функций при тех же условиях получаем

$$\begin{aligned}
 G_{m\sigma}(i\omega) &= G_{\sigma}^0(i\omega) g_{\sigma}(i\omega), \\
 F_{m\sigma\bar{\sigma}}(i\omega) &= G_{\sigma}^0(i\omega) f_{\sigma\bar{\sigma}}(i\omega), \\
 \bar{F}_{m\bar{\sigma}\sigma}(i\omega) &= G_{\bar{\sigma}}^0(-i\omega) \bar{f}_{\bar{\sigma}\sigma}(i\omega).
 \end{aligned} \tag{32}$$

В дальнейшем мы ограничимся случаем парамагнитной системы в нормальном состоянии. Уравнения для соответствующих функций Грина электронов проводимости и примесных электронов принимают вид

$$\begin{aligned}
 G_{\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{k}' | i\omega) &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} G_{\sigma}^0(\mathbf{k} | i\omega) + \frac{V_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}'}^*}{N} G_{\sigma}^0(\mathbf{k} | i\omega) g_{\sigma}(i\omega) G_{\sigma}^0(\mathbf{k}' | i\omega), \\
 g_{\sigma}(i\omega) &= \frac{\Lambda_{\sigma}(i\omega)}{1 - \Lambda_{\sigma}(i\omega) G_{\sigma}^0(i\omega)}, \quad \Lambda_{\sigma}(i\omega) = g_{\sigma}^0(i\omega) + Z_{\sigma}(i\omega),
 \end{aligned} \tag{33}$$

где

$$G_{\sigma}^0(i\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} |V_{\mathbf{k}}|^2 G_{\sigma}^0(\mathbf{k} | i\omega) = \int d\epsilon \frac{V^2(\epsilon) \rho_0(\epsilon)}{i\omega - \epsilon},$$

$\rho_0(\epsilon)$ – плотность состояний свободной зоны проводимости, а матричный элемент гибридизации $V_{\mathbf{k}}$ предполагается зависящим от энергии. Уравнения (33) являются точными, хотя для корреляционной функции $Z_{\sigma}(i\omega)$ не существует точных уравнений дайсоновского типа и имеются только приближенные выражения (см. рис. 9, 10). В данном исследовании мы опускаем диаграммы, подобные показанным на рис. 10б. Основная аппроксимация получена путем суммирования лестничных диаграмм, что достаточно для получения главных вкладов от спиновых и зарядовых флуктуаций.

В использованной аппроксимации рассматриваются только простейшие неприводимые функции Грина $g_2^{(0)\text{ir}}$, которые интегрируются много раз. Таким образом, получаем

$$Z_{\sigma\sigma'}(\tau - \tau') = - \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \sigma_1, \sigma_2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 g_2^{(0)\text{ir}}[\sigma, \tau; \sigma_1, \tau_1 | \sigma_2, \tau_2; \sigma', \tau'] \times \\ \times \frac{1}{N} V_{\mathbf{k}_1}^* V_{\mathbf{k}_2} G_{\sigma_2\sigma_1}(\mathbf{k}_2, \tau_2 | \mathbf{k}_1, \tau_1), \quad (34)$$

или в представлении Фурье

$$Z_{\sigma\sigma'}(i\omega) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \tilde{g}_2^{(0)\text{ir}}[\sigma, i\omega; \sigma_1, i\omega_1 | \sigma_2, i\omega_1; \sigma', i\omega] \times \\ \times \frac{1}{N} V_{\mathbf{k}_1}^* V_{\mathbf{k}_2} G_{\sigma_2\sigma_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | i\omega_1). \quad (35)$$

Мы здесь учли закон сохранения частот

$$g_2^{(0)\text{ir}}[\sigma, i\omega; \sigma_1, i\omega_1 | \sigma_1, i\omega_1; \sigma', i\omega'] = \beta \delta(\omega - \omega') \tilde{g}_2^{(0)\text{ir}}[\sigma, i\omega; \sigma_1, i\omega_1 | \sigma_2, i\omega_1; \sigma', i\omega]. \quad (36)$$

В парамагнитной фазе имеем более простое уравнение ($\sigma' = \sigma$)

$$Z_\sigma(i\omega) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} \sum_{\sigma_1} \tilde{g}_2^{(0)\text{ir}}[\sigma, i\omega; \sigma_1, i\omega_1 | \sigma_1, i\omega_1; \sigma, i\omega] G_{\sigma_1}(i\omega_1), \quad (37)$$

где

$$G_\sigma(i\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} V_{\mathbf{k}_1}^* V_{\mathbf{k}_2} G_\sigma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | i\omega). \quad (38)$$

Используя (9) и (33), можно представить функцию (38) в виде

$$G_\sigma(i\omega) = G_\sigma^0(i\omega) + [G_\sigma^0(i\omega)]^2 g_\sigma(i\omega) = \frac{G_\sigma^0(i\omega)}{1 - \Lambda_\sigma(i\omega) G_\sigma^0(i\omega)}. \quad (39)$$

С учетом определения (33) корреляционной функции $\Lambda_\sigma(i\omega)$ нормального состояния и аппроксимации (37) для функции $Z_\sigma(i\omega)$ получаем окончательное интегральное уравнение для Λ_σ , которое надо решить самосогласованно:

$$\Lambda_\sigma(i\omega) = g_\sigma^{(0)}(i\omega) - \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} \sum_{\sigma_1} \tilde{g}_2^{(0)\text{ir}}[\sigma, i\omega; \sigma_1, i\omega_1 | \sigma_1, i\omega_1; \sigma, i\omega] \frac{G_{\sigma_1}^0(i\omega_1)}{1 - \Lambda_{\sigma_1}(i\omega_1) G_{\sigma_1}^0(i\omega_1)}. \quad (40)$$

В следующем разделе мы рассмотрим простейший случай симметричной примесной модели Андерсона с условием $2\epsilon_f + U = 0$.

5. СИММЕТРИЧНАЯ МОДЕЛЬ

В простейшем случае симметричной примесной модели Андерсона, где $\epsilon_f = -U/2 < 0$ и $\epsilon_f + U = U/2 > 0$, имеем более простые уравнения

$$g_\sigma^0(i\omega) = \frac{i\omega}{(i\omega)^2 - (U/2)^2},$$

$$Z_0 = 2(1 + e^{-\beta\epsilon_f}) = 2(1 + e^{\beta U/2}), \quad (41)$$

$$n_\sigma = \frac{1}{2}.$$

При этом выполнено свойство нечетности примесной функции Грина нулевого порядка $g_\sigma^0(-i\omega) = -g_\sigma^0(i\omega)$.

Дополнительно будем предполагать четность матричного элемента $V(\epsilon)$ и затривочной плотности состояний $\rho_0(\epsilon)$. В таком случае функция $G_\sigma^0(i\omega)$ также нечетна, $G_\sigma^0(-i\omega) = -G_\sigma^0(i\omega)$. Благодаря этим свойствам нечетности можно искать нечетное решение

$$\Lambda_\sigma(-i\omega) = -\Lambda_\sigma(i\omega) \quad (42)$$

уравнения (40). Аналитическое продолжение этих функций имеет свойства нечетности их вещественных частей и четности мнимых частей:

$$\begin{aligned} g_\sigma^0(E + i\delta) &= -g_\sigma^0(-E - i\delta), \\ G_\sigma^0(E + i\delta) &= -G_\sigma^0(-E - i\delta), \\ \Lambda_\sigma^0(E + i\delta) &= -\Lambda_\sigma^0(-E - i\delta), \end{aligned} \quad (43)$$

где

$$G_\sigma^0(E + i\delta) = I(E) - i\Gamma(E), \quad (44)$$

$$I(E) = P \int \frac{|V(\epsilon)|^2 \rho_0(\epsilon) d\epsilon}{E - \epsilon}, \quad \Gamma(E) = \pi |V(E)|^2 \rho_0(E),$$

$I(E)$ – главное значение интеграла. Функция $I(E)$ нечетна. Функция $\Gamma(E)$ есть ширина зоны виртуального уровня и является четной функцией энергии. Симметричная примесная модель Андерсона имеет преимущество более простого вида неприводимых двухчастичных функций Грина в различных спиновых и частотных каналах. В этом специальном случае имеем [43], [44]

$$\tilde{g}_2^{(0)\text{ir}}[\sigma, i\omega; \sigma, i\omega_1 | \sigma, i\omega_1; \sigma, i\omega] = \frac{\beta(U/2)^2(1 - \delta\omega\omega_1)}{[(i\omega)^2 - (U/2)^2][(i\omega_1)^2 - (U/2)^2]}, \quad (45)$$

$$\begin{aligned} \tilde{g}_2^{(0)\text{ir}}[\sigma, i\omega; \bar{\sigma}, i\omega_1 | \bar{\sigma}, i\omega_1; \sigma, i\omega] &= \frac{U}{2} \left\{ \frac{\beta U}{2} \frac{1 - e^{\beta U/2}}{(1 + e^{\beta U/2})[\omega^2 + (U/2)^2][\omega_1^2 + (U/2)^2]} - \right. \\ &- \frac{\beta U \delta(\omega - \omega_1) e^{\beta U/2}}{(1 + e^{\beta U/2})[\omega^2 + (U/2)^2][\omega_1^2 + (U/2)^2]} + \\ &+ \frac{\beta U \delta(\omega + \omega_1)}{(1 + e^{\beta U/2})[\omega^2 + (U/2)^2][\omega_1^2 + (U/2)^2]} - \frac{2}{[\omega^2 + (U/2)^2][\omega_1^2 + (U/2)^2]} + \\ &\left. + 4\left(\frac{U}{2}\right)^2 \left[\frac{1}{[\omega^2 + (U/2)^2][\omega_1^2 + (U/2)^2]^2} + \frac{1}{[\omega^2 + (U/2)^2]^2[\omega_1^2 + (U/2)^2]} \right] \right\}. \quad (46) \end{aligned}$$

Возвращаясь к уравнению (40), заметим, что благодаря свойству нечетности (42) функции $\Lambda_\sigma(i\omega)$ лишь содержащие δ -символы Кронекера члены в (45) и (46) дают ненулевой вклад. Результат суммирования для $\Lambda_\sigma(i\omega)$ имеет вид

$$\Lambda_\sigma(i\omega) = \frac{i\omega}{(i\omega)^2 - (U/2)^2} + \frac{3(U/2)^2}{[(i\omega)^2 - (U/2)^2]^2} \frac{G_\sigma^0(i\omega)}{1 - \Lambda_\sigma(i\omega)G_\sigma^0(i\omega)}. \quad (47)$$

Заметим, что канал рассеяния с противоположными спинами (46) дает вклад в (47) вдвое больший, чем канал параллельных спинов (45), и оба они приводят к множителю 3 в правой части (47). Имеются два решения уравнения (47), и мы выберем то, которое имеет правильное асимптотическое поведение $\lambda_\sigma(i\omega) \rightarrow 1/i\omega$ при $|\omega| \rightarrow \infty$. Это решение есть

$$\Lambda_\sigma(i\omega) = \frac{1}{2G_\sigma^0(i\omega)[(i\omega)^2 - (U/2)^2]} \left\{ \left[(i\omega)^2 - \left(\frac{U}{2} \right)^2 + i\omega G_\sigma^0(i\omega) \right] - \left[(i\omega)^2 - \left(\frac{U}{2} \right)^2 - i\omega G_\sigma^0(i\omega) \right] \sqrt{1 - 12Q(i\omega)} \right\}, \quad (48)$$

где

$$Q(i\omega) = \left(\frac{(U/2)G_\sigma^0(i\omega)}{(i\omega)^2 - (U/2)^2 - i\omega G_\sigma^0(i\omega)} \right)^2. \quad (49)$$

Мы выбрали ветвь квадратного корня, которая дает единицу, когда $Q(i\omega)$ стремится к нулю. На основе уравнений (33) получаем перенормированный пропагатор примесных электронов

$$g(i\omega) = \frac{2[g^0(i\omega)(G^0(i\omega))^{-1} + 3Q(i\omega)[g^0(i\omega) - (G^0(i\omega))^{-1}]^2]}{[(G^0(i\omega))^{-1} - g^0(i\omega)][1 + \sqrt{1 - 12Q(i\omega)} + 6Q(i\omega)(g^0(i\omega)G^0(i\omega) - 1)]}. \quad (50)$$

В последних уравнениях спиновый индекс σ опущен, потому что он не важен. Подчеркнем, что уравнение (50) было получено с учетом спиновых и зарядовых флуктуаций, содержащихся в корреляционной функции $Z_\sigma(i\omega)$.

Спектральная функция примесных электронов равна

$$A_f(E) = -2 \operatorname{Im} g(E + i\delta), \quad (51)$$

где $g(E + i\delta)$ при $\delta = +0$ – аналитическое продолжение мацубаровской функции до запаздывающей функции Грина. В отсутствие корреляционной функции $Z_\sigma(i\omega)$ уравнение (50) заменяется более простым:

$$g_\sigma^I(i\omega) = \frac{g_\sigma^0(i\omega)}{1 - g_\sigma^0(i\omega)G_\sigma^0(i\omega)} = \frac{1}{[g_\sigma^0(i\omega)]^{-1} - G_\sigma^0(i\omega)}, \quad (52)$$

которое можно назвать аппроксимацией Хаббард-I. Это уравнение содержит функцию Грина нулевого порядка $g^0(i\omega)$, определенную согласно (41) и усредненную гибридизацией функции $G_\sigma^0(i\omega)$ электронов проводимости (44).

Аналитическое продолжение равенства (52) дает

$$g_\sigma^I(E + i\delta) = \frac{1}{E - (U/2)^2 E^{-1} - I(E) + i\Gamma(E)}. \quad (53)$$

В приближении нулевого порядка спектральная функция $A_f^0(E)$ есть

$$A_f^0(E) = -2 \operatorname{Im} g^0(E + i\delta) = 2\pi\delta(E - (U/2)^2 E^{-1}) = \pi \left(\delta \left(E - \frac{U}{2} \right) + \delta \left(E + \frac{U}{2} \right) \right), \quad (54)$$

а $A_f^I(E)$ получается в аппроксимации Хаббард-I в виде

$$A_f^I(E) = -2 \operatorname{Im} g^I(E + i\delta) = \frac{2\Gamma(E)}{(E - (U/2)^2 E^{-1} - I(E))^2 + \Gamma^2(E)}, \quad (55)$$

где нечетная функция $I(E)$ и четная функция $\Gamma(E)$ определены в (44). В приближении нулевого порядка два резонанса в равенстве (54), расположенные при энергиях $E = \pm U/2$, не имеют ширины. После учета взаимодействия в рамках аппроксимации Хаббард-I появляется новая спектральная функция (55). Она имеет два резонанса со сдвинутыми значениями энергии $E = \pm E_0$, определяемыми присутствием функции $I(E)$:

$$E_0 - \frac{(U/2)^2}{E_0} - I(E_0) = 0. \quad (56)$$

Эти резонансы уширяются за счет присутствия функции $\Gamma(E)$, которая является шириной виртуального уровня. Эта функция $\Gamma(E)$ определяет высоту и ширину обоих резонансов. Вблизи новых значений энергии резонансов $\pm E_0$ можно аппроксимировать выражение (55) более простым лоренцианом вида

$$A_f^I(E) = \frac{2\Gamma}{\psi^2(E \mp E_0)^2 + \Gamma^2}, \quad (57)$$

где

$$\psi = 1 + \left(\frac{U}{2E_0} \right)^2 - I'(E_0), \quad (58)$$

а E_0 определяется в (56).

Обе аппроксимации (54) и (55) дают нулевое значение спектральных функций на поверхности Ферми, где $E = 0$. Правильность всех результатов следует проверить исходя из правила сумм

$$\int_{-\infty}^{\infty} A_f(E) dE = 2\pi. \quad (59)$$

Выражение (54) удовлетворяет этому условию. Если для простоты опустить функцию $I(E)$ в (55), можно также проверить, что это условие выполнено для соотношения (55), но не для его аппроксимаций (57), потому что параметр $\psi \neq 2$. Некоторые примеры выбора плотности состояний приведены в приложении.

В следующем разделе мы используем равенства (49) и (50) для получения более полной спектральной функции примесных электронов и для проверки существования резонанса при нулевой энергии.

6. ПЕРЕНОРМИРОВАННАЯ СПЕКТРАЛЬНАЯ ФУНКЦИЯ

Аналитическое продолжение соотношений (49) и (50), необходимых для вычисления спектральной функции, имеет вид

$$g(E + i\delta) = [(G^0(E + i\delta))^{-1} - g^0(E + i\delta)]^{-1} \times \frac{2[g^0(E + i\delta)(G^0(E + i\delta))^{-1} + 3Q(E + i\delta)(g^0(E + i\delta) - (G^0(E + i\delta))^{-1})^2]}{1 + \sqrt{1 - 12Q(E + i\delta)} + 6Q(E + i\delta)(g^0(E + i\delta)G^0(E + i\delta) - 1)}, \quad (60)$$

$$Q(E + i\delta) = \left(\frac{UG^0(E + i\delta)/2}{E^2 - (U/2)^2 - EG^0(E + i\delta)} \right)^2. \quad (61)$$

Прежде всего проанализируем поведение перенормированной функции Грина на поверхности Ферми при $E = 0$. Вблизи значения энергии $E = 0$ можно аппроксимировать величину $Q(E + i\delta)$ выражением

$$Q(E + i\delta)|_{E=0} = -\left(\frac{2\Gamma(0)}{U} \right)^2, \quad (62)$$

а в предположении малости параметра $2\Gamma/U$ можно аппроксимировать выражение (60) более простым:

$$g(E + i\delta) \simeq \frac{6Q(E + i\delta)}{G^0(E + i\delta)[1 + \sqrt{1 - 12Q(E + i\delta)} - 6Q(E + i\delta)]}. \quad (63)$$

Для малых значений энергии имеем

$$\begin{aligned} g(E + i\delta) \simeq & \frac{6(2\Gamma/U)^2}{\Gamma^2(E) + E^2 I'(0)^2} \frac{1}{1 + \sqrt{1 + 12(2\Gamma/U)^2} + 6(2\Gamma/U)^2} \times \\ & \times \left[-EI'(0) + i \left(\Gamma(E) + \frac{I'(0)^2 E^2}{\Gamma(0)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (64)$$

Спектральная функция примесных электронов в области малых значений энергии E ненулевая и имеет вид

$$A_f(E) \simeq \frac{12(2\Gamma/U)^2/\Gamma(0)}{1 + 6(2\Gamma/U)^2 + \sqrt{1 + 12(2\Gamma/U)^2}}. \quad (65)$$

Величина $I'(0)$ явно вычислена в приложении. Она равна $4\rho(0)V^2(0)/W$ или $\pi V^2(0)\rho(0)/D$ для двух различных моделей плотности состояний. Результат (65) существенно отличается от нулевого значения, полученного в случае более простых аппроксимаций для $A_f(E)$, таких как $A_f^0(E)$ и $A_f^I(E)$. Таким образом, мы установили существование двух резонансов при энергиях $E = \pm E_0$, определенных в (56), и с отличным от нуля спектральным весом при $E = 0$. Можно явно найти поправки к спектральной функции $A_f(E)$ в двух резонансах $E = \pm E_0$. Для этого сначала найдем величину Q : при $E = E_0$

$$Q(E + i\delta) = -(I(E_0) - i\Gamma(E_0))^2 \left(\frac{U}{2E_0\Gamma(E_0)} \right)^2,$$

где мы предполагаем, что значение E_0 лежит внутри границ ширины зоны. После некоторых вычислений, предполагая, что величины $I(E_0)/\Gamma(E_0)$ и $UI(E_0)/2E_0\Gamma(E_0)$ много больше единицы, получаем

$$A_f(E_0) = \frac{1}{\sqrt{3}(1 + 3(U/2E_0)^2)} \frac{4E_0}{UI(E_0)}. \quad (66)$$

Эта величина существенно отличается от значения $A_f^I(E_0) = 2/\Gamma(E_0)$, будучи много меньше его. Таким образом, процесс перенормировки пропагатора примесных электронов приводит к появлению отличного от нуля спектрального веса при $E = 0$ и к частичному подавлению двух резонансов при $E = \pm E_0$.

Полную спектральную функцию можно вычислить с помощью формул (60) и (61). На рис. 11 представлены результаты численного исследования полной спектральной функции при различных значениях параметров теории. Для сравнения на рисунке представлены также результаты, полученные в аппроксимации Хаббард-I. Как видно из рис. 11, имеются два резких резонансных пика вблизи энергий $E = \pm E_0$ и гладкое поведение вблизи $E = 0$. Расстояние между пиками определяется параметром U , высота и ширина пиков определяются параметром Γ .

Рис. 11. Спектральная функция $A_f(E) \times W$ при различных значениях параметров теории как функция энергии E/W в аппроксимации Хаббард-I (кривая 1) и в лестничной аппроксимации (кривые 2, 3). При вычислении кривых 1 и 2 использовались значения $U = 1$ эВ, $W = 2$ эВ, $\Gamma = 0.1$ эВ, а при вычислении кривой 3 – $U = 1.5$ эВ, $W = 2$ эВ, $\Gamma = 0.15$ эВ.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе рассмотрена симметричная примесная модель Андерсона. С учетом сильных электронных корреляций примесных электронов разработана соответствующая диаграммная техника, основанная на кумулянтном разложении. Установлена теорема о связанных кластерах, она получена с использованием обобщенной теоремы Вика, а затем получены выражения для перенормированных нормальных и аномальных пропагаторов обеих подсистем электронов. Полный нормальный пропагатор выражается через корреляционную функцию $Z_\sigma(i\omega)$. Специальная аппроксимация для корреляционной функции $Z_\sigma(i\omega)$, которая содержит зарядовые и спиновые флуктуации, позволяет замкнуть систему уравнений и найти решение для

перенормированной функции $g_\sigma(i\omega)$. Эта мацубаровская функция Грина аналитически продолжается для получения запаздывающей функции Грина. Получена спектральная функция примесных электронов и проанализирована ее структура. Найдены два резонанса при $E = \pm E_0$, соответствующие энергиям квантовых переходов одноузельной примеси, а также гладкое поведение при энергии $E = 0$. Подробности перенормировки спектральной функции зависят от свойств вещественной $I(E)$ и мнимой $\Gamma(E)$ частей функции $G_\sigma^0(i\omega)$ – функции Грина электронов зоны проводимости, усредненной по гибридизирующему взаимодействию. В частности, мы показали, что при выходе за рамки аппроксимации Хаббард-I часть спектрального веса переносится из резонансов $E = \pm E_0$ в значение энергии $E = 0$. Это особое свойство является новым результатом нашего исследования, и хотя наша аппроксимация пока не приводит к появлению резонанса при нулевой энергии, она может оказаться существенной для понимания некоторых физических свойств реалистичных систем, например спиновой восприимчивости и магнитотранспорта разбавленных магнитных сплавов или квантовых точек.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Простые примеры плотности состояний

Приведем некоторые простые примеры выбора плотности состояний и соответствующих функций $I(E)$ и $\Gamma(E)$. Для простоты будем полагать, что зависимость матричного элемента гибридизации $V(\epsilon)$ от энергии гладкая и ею можно пренебречь. Один пример плотности состояний был предложен в работе [3], в которой использовались уравнения

$$\begin{aligned}\rho_0(\epsilon) &= \rho_0(0) \left(1 - \left(\frac{\epsilon}{W} \right)^2 \right), \quad |\epsilon| < W, \\ I(\epsilon) &= \rho_0(0) V^2(0) \left[\frac{2\epsilon}{W} + \left(\frac{\epsilon^2}{W^2} - 1 \right) \ln \left| \frac{\epsilon - W}{\epsilon + W} \right| \right], \\ \Gamma(\epsilon) &= \pi V^2(\epsilon) \rho_0(\epsilon),\end{aligned}\tag{П.1}$$

где $2W$ – ширина зоны проводимости. Для малых значений энергии имеем $I(\epsilon) = I'(0)\epsilon$, причем

$$I'(0) = \frac{4\rho_0(0)V^2(0)}{W},\tag{П.2}$$

а при $E \rightarrow \pm\infty$ функция $I(E)$ стремится к нулю как $1/E$. В случае (П.1) равенство (56) принимает вид ($x_0 = E_0/W$)

$$x_0 - \frac{a^2}{x_0} - b\varphi(x_0) = 0,\tag{П.3}$$

где

$$\varphi(x) = 2x + (x^2 - 1) \ln \left| \frac{x-1}{x+1} \right|, \quad a = \frac{U}{2W}, \quad b = \frac{\rho(0)V^2}{W}.$$

Заметим, что функции $\rho_0(\epsilon)$ и $\Gamma(\epsilon)$ существуют только внутри краев зоны электронов проводимости $|E| < W$, тогда как функция $I(\epsilon)$ и решение уравнения (П.2) могут

существовать и при $|E| > W$. Поэтому требуется найти решение уравнения (П.2) при $x < 1$ и рассмотреть условия согласованности значений его параметров a и b с этим требованием.

Другим простым примером является плотность состояний, имеющая лоренцев вид [16]

$$\rho_0(\epsilon) = \frac{2D}{E^2 + D^2}, \quad (\text{П.4})$$

с химическим потенциалом, расположенным при $\epsilon = 0$. Этот выбор имеет то преимущество, что не вводятся края зоны. Параметр D представляет собой эффективную ширину зоны:

$$I(E) = \frac{2\pi V^2(0)E}{E^2 + D^2}, \quad \Gamma(E) = \pi \rho_0(0) V^2(0) = \frac{2\pi V^2(0)}{D}. \quad (\text{П.5})$$

В этом случае вместо (П.3) имеем другие значения параметров a и b и другой вид функции $\varphi(x)$:

$$x - \frac{a^2}{x} - \frac{bx}{1+x^2} = 0, \quad a = \frac{U}{2D}, \quad b = \frac{2\pi V^2(0)}{D^2}. \quad (\text{П.6})$$

Уравнение (П.6) имеет два решения $\pm x_0$, где

$$x_0 = \sqrt{\frac{\sqrt{(1-a^2+b)^2 + 4a^2} + a^2 + b - 1}{2}}. \quad (\text{П.7})$$

Значение параметра $I'(0)$ есть $2\pi V^2(0)/D^2 = \pi V^2(0)\rho_0(0)/D$.

Благодарности. Данная работа поддержана Программой “Гейзенберг–Ландау”. Мы признательны за обсуждения Н. М. Плакиде. В. А. Москаленко благодарит университеты Duisburg-Essen и Salerno за финансовую поддержку и гостеприимство.

Список литературы

- [1] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **124**:1 (1961), 41–53.
- [2] P. A. Wolff, *Phys. Rev.*, **124**:4 (1961), 1030–1035.
- [3] A. M. Clogston, *Phys. Rev.*, **125**:2 (1962), 439–443.
- [4] A. M. Clogston, B. T. Matthias, M. Peter et al., *Phys. Rev.*, **125**:2 (1962), 541–552.
- [5] A. M. Clogston, *Phys. Rev.*, **136**:5A (1964), A1417–A1427.
- [6] A. P. Klein, A. J. Heeger, *Phys. Rev.*, **144**:2 (1966), 458–468.
- [7] Duk-Joo Kim, *Phys. Rev.*, **146**:2 (1966), 455–463.
- [8] D. R. Hamann, *Phys. Rev.*, **158**:3 (1967), 570–580.
- [9] P. E. Bloomfield, D. R. Hamann, *Phys. Rev.*, **164**:2 (1967), 856–865.
- [10] A. Theumann, *Phys. Rev.*, **178**:3 (1969), 978–984.
- [11] K. Ueda, *J. Phys. Soc. Japan*, **47**:3 (1979), 811–816.
- [12] C. Lacroix, *J. Phys. F: Metal. Phys.*, **11**:11 (1981), 2389–2397; *J. Appl. Phys.*, **53**:3 (1982), 2131–2133.
- [13] J. W. Wilkins, “Densities of States in Valence Fluctuators”, *Valence Instabilities*, Proc. Int. Conf. (Zurich, Switzerland, April 13–16, 1982), eds. P. Wachter, H. Boppart, North-Holland, Amsterdam, 1982, 1.

- [14] C. Lacroix, *Valence Instabilities*, Proc. Int. Conf. (Zurich, Switzerland, April 13–16, 1982), eds. P. Wachter, H. Boppart, North-Holland, Amsterdam, 1982, 61.
- [15] R. M. Fye, J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B*, **38**:1 (1988), 433–441.
- [16] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, 3 ed., Kluwer Academic, New York, 2000.
- [17] J. R. Schrieffer, P. A. Wolff, *Phys. Rev.*, **149**:2 (1966), 491–492.
- [18] Y. Nagaoka, *Phys. Rev.*, **138**:4A (1965), A1112–A1120.
- [19] C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge University Press, Cambridge, 1993.
- [20] N. E. Bickers, *Rev. Modern Phys.*, **59**:4 (1987), 845–939.
- [21] D. S. Falk, M. Fowler, *Phys. Rev.*, **158** (1967), 567–570.
- [22] M. Fowler, *Phys. Rev.*, **160**:3 (1967), 463–467.
- [23] Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов, *ДАН СССР*, **126** (1959), 53–56.
- [24] Д. Н. Зубарев, *УФН*, **71**:2 (1960), 71–116.
- [25] В. Л. Бонч-Бруевич, С. В. Тябликов, *Метод функций Грина в статистической механике*, Физматлит, М., 1961.
- [26] Д. Н. Зубарев, Ю. А. Церковников, *Тр. МИАН*, **175**, 1986, 134–177.
- [27] J. A. Appelbaum, D. R. Penn, *Phys. Rev.*, **188**:2 (1969), 874–887; *Phys. Rev. B*, **3** (1971), 942–953.
- [28] Y. Meir, N. S. Wingreen, P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.*, **66**:23 (1991), 3048–3051.
- [29] V. Kashcheyevs, A. Aharony, O. Entin-Wohlman, *Phys. Rev. B*, **73**:12 (2006), 125338.
- [30] H. Mamada, F. Takano, *Progr. Theoret. Phys.*, **43**:6 (1970), 1458–1479.
- [31] G. S. Po, *Phys. Rev. B*, **11**:11 (1975), 4606–4613; 4614–4622.
- [32] А. Ф. Барабанов, К. А. Кикоин, Л. А. Максимов, *ТМФ*, **20**:3 (1974), 364–380.
- [33] H. Schoeller, G. Schön, *Phys. Rev. B*, **50**:24 (1994), 18436–18452.
- [34] J. König, J. Schmid, H. Schoeller, *Phys. Rev. B*, **54**:23 (1996), 16820–16837.
- [35] N. Sivan, N. G. Wingreen, *Phys. Rev. B*, **54**:16 (1996), 11622–11629.
- [36] J. E. Hirsch, R. M. Fye, *Phys. Rev. Lett.*, **56**:23 (1986), 2521–2524; R. N. Silver, J. E. Gubernatis, D. S. Sivia, M. Jarrell, *Phys. Rev. Lett.*, **65**:4 (1990), 496–499.
- [37] K. G. Wilson, *Rev. Modern Phys.*, **47**:4 (1975), 773–840; T. A. Costi, A. C. Hewson, V. Zlatić, *J. Phys.: Condens. Matter*, **6**:13 (1994), 2519–2558; W. Hofstetter, *Phys. Rev. Lett.*, **85**:7 (2000), 1508–1511.
- [38] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg, *Rev. Modern Phys.*, **68**:1 (1996), 13–125.
- [39] G. Kotliar, D. Vollhardt, *Phys. Today*, **57**:3 (2004), 53–59.
- [40] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. Ser. A*, **276**:1365 (1963), 238–257.
- [41] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. Ser. A*, **281**:1386 (1964), 401–419.
- [42] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. Ser. A*, **285**:1403 (1965), 542–560.
- [43] М. И. Владимир, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **82**:3 (1990), 428–437.
- [44] С. И. Вакару, М. И. Владимир, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **85**:2 (1990), 248–257.
- [45] Н. Н. Боголюбов, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **86**:1 (1991), 16–30.
- [46] Н. Н. Боголюбов, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **92**:2 (1992), 182–190.
- [47] V. A. Moskalenko, P. Entel, D. F. Digor, *Phys. Rev. B*, **59**:1 (1999), 619–635.

Поступила в редакцию 20.06.2007