Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. А. Москаленко, Л. А. Дохотару, Р. Читро, Диаграммная теория для периодической модели Андерсона. Свойство стационарности термодинамического потенциала, *ТМФ*, 2010, том 162, номер 3, 439–458

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6481>

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: 54.237.59.107

26 апреля 2023 г., 17:45:07

© 2010 г. В. А. Москаленко^{*†}, Л. А. Дохотару[‡], Р. Читро[§]

ДИАГРАММНАЯ ТЕОРИЯ ДЛЯ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА. СВОЙСТВО СТАЦИОНАРНОСТИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

Разработана диаграммная теория для периодической модели Андерсона в предположении, что кулоновское отталкивание локализованных f -электронов является главным параметром теории. f -Электроны сильно коррелированы, а s -электроны проводимости свободны. Определены корреляционная функция и массовый оператор для f - и s -электронов соответственно. Сформулированы уравнение Дайсона для s -электронов и уравнение типа уравнения Дайсона для f -электронов и их пропагаторов. Определены скелетные диаграммы для корреляционной функции и термодинамического функционала. Установлено свойство стационарности термодинамического потенциала относительно вариации массового оператора. Полученные результаты применимы как для нормального, так и для сверхпроводящего состояния системы.

Ключевые слова: сильно коррелированные электронные системы, уравнение Дайсона, функции Грина, периодическая модель Андерсона.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время изучение сильно коррелированных электронных систем стало одной из центральных задач физики конденсированных сред. Одна из самых важных моделей сильно коррелированных электронных систем – это периодическая модель Андерсона [1]. Эта модель используется для описания физики электронных систем со смешанной валентностью, тяжелых фермионных соединений, высокотемпературной сверхпроводимости, а также других явлений, в которых присутствует

^{*}Институт прикладной физики АН Молдовы, Кишинев, Молдова

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

[‡]Технический университет Молдовы, Кишинев, Молдова.
E-mail: l_dohotary@mail.utm.md

[§]Dipartimento di Fisica E.R. Caianiello, Università degli Studi di Salerno and CNISM, Baronissi, Italy. E-mail: citro@sa.infn.it

сильное кулоновское отталкивание локализованных электронов. Эта модель также описывает интерметаллические соединения, которые содержат магнитные моменты редкоземельных металлов или ионов актинидов, входящих в состав металлических сплавов. Эти ионы имеют частично заполненную f -оболочку и могут рассматриваться как центры рассеяния для электронов проводимости металлического сплава. Благодаря сильному кулоновскому отталкиванию электронов с противоположными спинами, находящихся в одном и том же узле решетки, электроны магнитных ионов сильно коррелированы. Происходит также гибридизация состояний между свободными электронами проводимости и локализованными, когда оба вида присутствуют в одном и том же узле. Магнитные свойства примесных ионов по-разному влияют на свойства матрицы сплава и системы в целом. Для различных наборов физических параметров, определенных локальным кулоновским взаимодействием, гибридизацией волновых функций и обменным взаимодействием, можно получить различные классы фазовых переходов системы.

В настоящее время существует огромное количество приближенных методов и подходов, посвященных периодической модели Андерсона, таких как теория возмущений, статическая и динамическая теории среднего поля, вариационные и численные аппроксимации, разложение по большому параметру N , метод вспомогательных бозонов, приближение непересекающих диаграмм, метод неравенств Боголюбова и др. Также известны несколько точных результатов, полученных, в частности, в рамках подхода анзаца Бете, методом ренормгрупп и методом неравенства Боголюбова. Далее мы не будем касаться истории развития этой модели, так как существует множество содержательных обзоров [2]– [7] и книг [8], [9] в этой области, и мы будем использовать ссылки на наши предыдущие статьи.

2. МОДЕЛЬНЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН

Рассмотрим упрощенную форму периодической модели Андерсона со спиновым вырождением уровня локализованных f -электронов, с простой энергетической зоной s -электронов проводимости, кулоновским одноузельным отталкиванием U между коррелированными f -электронами с противоположно направленными спинами и с одноузельной гибридизацией состояний этих двух подсистем электронов. Гамильтониан системы имеет вид

$$\begin{aligned} H &= H_c^0 + H_f^0 + H_{\text{int}}, & H_c^0 &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) C_{\mathbf{k}\sigma}^+ C_{\mathbf{k}\sigma}, \\ H_f^0 &= \epsilon_f \sum_{i, \sigma} n_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, & H_{\text{int}} &= V \sum_{i, \sigma} (C_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^+ C_{i\sigma}), \end{aligned} \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} \epsilon(\mathbf{k}) &= \bar{\epsilon}(\mathbf{k}) - \mu, & \epsilon_f &= \bar{\epsilon}_f - \mu, \\ n_{i\sigma} &= f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma}, & C_{i\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}R_i} C_{\mathbf{k}\sigma}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь V – амплитуда гибридизации, которая считается постоянной. Обозначим через $C_{i\sigma}^+$ и $f_{i\sigma}^+$ соответственно операторы рождения электронов проводимости и примесных электронов со спином σ и узлом решетки i , $n_{i\sigma}$ – оператор числа f -электронов, $\epsilon(\mathbf{k})$ – зонная энергия электронов проводимости с импульсом $\mathbf{k}$, распространяющихся на всю ширину зоны W , ϵ_f – энергия локализованных электронов. Обе энергии отсчитываются от химического потенциала μ системы.

Подход, предложенный в настоящей статье, обобщает диаграммную теорию для нормальной и сверхпроводящей фаз сильно коррелированных систем, предложенную в предыдущих работах [10]–[19]. Сильное одноузельное отталкивание U между f -электронами с противоположно направленными спинами считается основным членом гамильтониана.

Поскольку электроны проводимости могут принадлежать не только s -, но также и d -оболочкам, то их кулоновское отталкивание может играть немаловажную роль. В этом случае нужно воспользоваться обобщенной периодической моделью Андерсона [20]. Для простоты мы не будем рассматривать корреляции c -электронов, т.е. одну подсистему будем считать состоящей из свободных c -электронов, а вторую – состоящей из коррелированных f -электронов. Благодаря сильной локализации f -электронов они не могут перемещаться из одного узла решетки в другой, и поэтому их делокализация происходит только благодаря гибридизации f - и c -состояний с матричным элементом V . Очевидно, что при $V \neq 0$ в данной модели с двумя подсистемами сверхпроводимость возникает одновременно в обеих подсистемах.

В настоящей работе мы развиваем термодинамическую теорию возмущений для системы в сверхпроводящем состоянии с гамильтонианом (1), полагая, что член, ответственный за гибридизацию c - и f -электронов, является возмущением. В зонном представлении гамильтониан свободных c -электронов диагонален, тогда как гамильтониан H_f^0 диагонализуется при помощи трансфер-операторов Хаббарда [21]. Поэтому в нулевом порядке теории возмущений статистический оператор большого канонического ансамбля системы факторизован в импульсном представлении для c -электронов и в локальном представлении для f -электронов:

$$e^{-\beta(H_c^0 + H_f^0)} = \prod_{\mathbf{k}, \sigma} e^{-\beta H_{c\sigma}^0(\mathbf{k})} \prod_i e^{-\beta H_f^0(i)}, \quad (3)$$

$$H_{c\sigma}^0(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k}) C_{\mathbf{k}\sigma}^+ C_{\mathbf{k}\sigma}, \quad H_f^0(i) = \epsilon_f \sum_{\sigma} n_{i\sigma} + U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}.$$

Воспользуемся разложением в ряд для оператора эволюции:

$$U(\beta) = T \exp \left(- \int_0^\beta H_{\text{int}}(\tau) d\tau \right). \quad (4)$$

В представлении взаимодействия для операторов электрона ($a = c, f$)

$$a(x) = e^{\tau H^0} a(\mathbf{x}) e^{-\tau H^0}, \quad \bar{a}(x) = e^{\tau H^0} a^+(\mathbf{x}) e^{-\tau H^0}, \quad (5)$$

где под x подразумевается $(\mathbf{x}, \sigma, \tau)$.

Обозначим через $\langle TAB \dots \rangle_0$ термодинамическое усреднение по нулевой матрице плотности (3) хронологического произведения электронных операторов $(AB \dots)$. Такие средние вычислены независимо для c - и f -операторов при помощи обычной теоремы Вика квантовой теории поля для c -электронов и обобщенной теоремы Вика для f -электронов, предложенной нами в статьях [10]–[13] для сильно коррелированных электронных систем.

В сверхпроводящем состоянии, в отличие от нормального, возможны нетривиальные статистические средние произведения операторов с полным четным числом операторов, но с разными числами электронных операторов рождения и уничтожения. Они приводят к квазисредним Боголюбова [22] или к полученным Горьковым аномальным функциям Грина [23]. Чтобы объединить вычисления статистических средних для нормальной и сверхпроводящей фаз, целесообразно ввести дополнительное квантовое число α , названное нами зарядовым квантовым числом [15], принимающее значения ± 1 , которое может быть добавлено к электронным операторам согласно правилу ($a = c, f$)

$$a^\alpha(\mathbf{x}) = \begin{cases} a(\mathbf{x}), & \alpha = 1, \\ a^+(\mathbf{x}), & \alpha = -1. \end{cases} \quad (6)$$

В этом представлении оператор взаимодействия H_{int} приобретает вид

$$H_{\text{int}} = V \sum_{i, \sigma, \alpha} \alpha f_{i\sigma}^{-\alpha} C_{i\sigma}^\alpha. \quad (7)$$

Ясно, что введение нового квантового зарядового числа приводит к дополнительному суммированию по его значениям во всех диаграммных линиях и к дополнительному множителю α в вершинах диаграмм.

После введения нового квантового числа оказывается равноправным появление операторов рождения или уничтожения электрона.

Приведем основные результаты диаграммной теории, полученные нами в работе [15], которые потребуются в дальнейшем для доказательства теоремы стационарности. Для слабо коррелированных многоэлектронных систем в нормальном состоянии подобная теорема была доказана Латтинджером и Уордом [24].

3. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Воспользуемся определением мадубаровских одночастичных функций Грина для c - и f -электронов

$$\begin{aligned} G_{\alpha\alpha'}^c(x | x') &= -\langle T c^\alpha(x) c^{-\alpha'}(x') U(\beta) \rangle_0^c, \\ G_{\alpha\alpha'}^f(x | x') &= -\langle T f^\alpha(x) f^{-\alpha'}(x') U(\beta) \rangle_0^c, \end{aligned} \quad (8)$$

где индекс “с” для $\langle \dots \rangle_0^c$ означает связность диаграмм, учитываемых в правой части определения (8).

Выполним следующее условие:

$$G_{\alpha\alpha'}^a(x | x') = -G_{-\alpha', -\alpha}^a(x' | x), \quad a = (c, f). \quad (9)$$

Между этим новым определением и традиционным [23] справедливы соотношения

$$\begin{aligned} G_{1,1}^a(x | x') &= G^a(x | x'), \\ G_{1,-1}^a(x | x') &= F^a(x | x'), \\ G_{-1,1}^a(x | x') &= \bar{F}^a(x | x'), \\ G_{-1,-1}^a(x | x') &= -G^a(x' | x). \end{aligned} \quad (10)$$

В присутствии сильных корреляций f -электронов обобщенная теорема Вика содержит дополнительные члены, а именно неприводимые одноузельные многочастичные функции Грина или кумулянты Кубо в виде ($x = \mathbf{x}, \sigma, \tau$)

$$\begin{aligned} G_n^{(0)\text{ir}}[\alpha_1, x_1; \dots; \alpha_{2n}, x_{2n}] &= \langle T f_{x_1}^{\alpha_1} \dots f_{x_{2n}}^{\alpha_{2n}} \rangle_0^{\text{ir}} = \\ &= \delta_{\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2} \dots \delta_{\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_{2n}} \langle T f_{\sigma_1}^{\alpha_1}(\tau_1) \dots f_{\sigma_{2n}}^{\alpha_{2n}}(\tau_{2n}) \rangle_0^{\text{ir}}, \end{aligned} \quad (11)$$

где в простейшем двухчастичном случае имеем следующее определение неприводимой функции:

$$\begin{aligned} \langle T f_{\sigma_1}^{\alpha_1}(\tau_1) f_{\sigma_2}^{\alpha_2}(\tau_2) f_{\sigma_3}^{\alpha_3}(\tau_3) f_{\sigma_4}^{\alpha_4}(\tau_4) \rangle_0^{\text{ir}} &= \langle T f_{\sigma_1}^{\alpha_1}(\tau_1) f_{\sigma_2}^{\alpha_2}(\tau_2) f_{\sigma_3}^{\alpha_3}(\tau_3) f_{\sigma_4}^{\alpha_4}(\tau_4) \rangle_0 - \\ &- [\langle T f_{\sigma_1}^{\alpha_1}(\tau_1) f_{\sigma_2}^{\alpha_2}(\tau_2) \rangle_0 \langle T f_{\sigma_3}^{\alpha_3}(\tau_3) f_{\sigma_4}^{\alpha_4}(\tau_4) \rangle_0 + \\ &+ \langle T f_{\sigma_1}^{\alpha_1}(\tau_1) f_{\sigma_4}^{\alpha_4}(\tau_4) \rangle_0 \langle T f_{\sigma_2}^{\alpha_2}(\tau_2) f_{\sigma_3}^{\alpha_3}(\tau_3) \rangle_0 - \\ &- \langle T f_{\sigma_1}^{\alpha_1}(\tau_1) f_{\sigma_3}^{\alpha_3}(\tau_3) \rangle_0 \langle T f_{\sigma_2}^{\alpha_2}(\tau_2) f_{\sigma_4}^{\alpha_4}(\tau_4) \rangle_0]. \end{aligned} \quad (12)$$

Для $n \geq 3$ неприводимая функция Грина содержит в правой части, кроме произведений одночастичных пропагаторов, их произведения с неприводимыми функциями меньшего числа частиц. Присутствует также произведение неприводимых функций $G_{n_1}^{(0)\text{ir}}$ и $G_{n_2}^{(0)\text{ir}}$ при условии $n_1 + n_2 = n$ и т.д. [10]–[13].

В результате применения этой теоремы мы получили для ренормированного пропагатора электронов проводимости вклады, изображенные на рис. 1. Вклады диаграмм (б) и (д) на рис. 1 соответственно равны

$$\begin{aligned} &V^2 \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_{1,2} \alpha_1 \alpha_2 G_{\alpha_1 \alpha_1}^{c(0)}(x | 1) G_{\alpha_1 \alpha_2}^{f(0)}(1 | 2) G_{\alpha_2 \alpha'}^{c(0)}(2 | x'), \\ &\frac{V^4}{2} \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_4} \sum_{1, \dots, 4} \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 G_{\alpha_1 \alpha_1}^{c(0)}(x | 1) G_{\alpha_2 \alpha_3}^{c(0)}(2 | 3) G_{\alpha_4 \alpha'}^{c(0)}(4 | x') \langle T f_1^{\alpha_1} f_2^{-\alpha_2} f_3^{\alpha_3} f_4^{-\alpha_4} \rangle_0^{\text{ir}}. \end{aligned}$$

Они демонстрируют зависимость диаграмм от зарядового квантового числа α .

Вклады теории возмущений для пропагатора локализованных f -электронов изображены на рис. 2. Вклады диаграмм (б) и (в) на рис. 2 соответственно равны

$$\begin{aligned} &V^2 \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_{1,2} \alpha_1 \alpha_2 G_{\alpha_1 \alpha_1}^{f(0)}(x | 1) G_{\alpha_1 \alpha_2}^{c(0)}(1 | 2) G_{\alpha_2 \alpha'}^{f(0)}(2 | x'), \\ &\frac{V^2}{2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_{1,2} \alpha_1 \alpha_2 G_{\alpha_1 \alpha_2}^{c(0)}(1 | 2) \langle T f_x^{\alpha} f_1^{-\alpha_1} f_2^{\alpha_2} f_{x'}^{-\alpha'} \rangle_0^{\text{ir}}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_{\alpha\alpha'}^c(x | x') = & \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{\alpha x} + V^2 \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{\alpha x} \begin{array}{c} \bullet \\ 1 \end{array} \text{---}\text{---}\text{---} \begin{array}{c} \bullet \\ 2 \end{array} \text{---}\text{---}\text{---} \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{-\alpha' x'} + \\
& + V^4 \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{\alpha x} \begin{array}{c} \bullet \\ 1 \end{array} \text{---}\text{---}\text{---} \begin{array}{c} \bullet \\ 2 \end{array} \text{---}\text{---}\text{---} \begin{array}{c} \bullet \\ 3 \end{array} \text{---}\text{---}\text{---} \begin{array}{c} \bullet \\ 4 \end{array} \text{---}\text{---}\text{---} \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{-\alpha' x'} + \\
& + V^6 \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{\alpha x} \begin{array}{c} \bullet \\ 1 \end{array} \text{---}\text{---}\text{---} \begin{array}{c} \bullet \\ 2 \end{array} \text{---}\text{---}\text{---} \begin{array}{c} \bullet \\ 3 \end{array} \text{---}\text{---}\text{---} \begin{array}{c} \bullet \\ 4 \end{array} \text{---}\text{---}\text{---} \begin{array}{c} \bullet \\ 5 \end{array} \text{---}\text{---}\text{---} \begin{array}{c} \bullet \\ 6 \end{array} \text{---}\text{---}\text{---} \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{-\alpha' x'} + \\
& + \frac{V^4}{2} \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{\alpha x} \begin{array}{c} \bullet \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 3 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 4 \end{array} \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{-\alpha' x'} + \frac{V^6}{2} \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{\alpha x} \begin{array}{c} \bullet \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 3 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 4 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 5 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 6 \end{array} \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{-\alpha' x'} + \\
& + \frac{V^6}{2} \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{\alpha x} \begin{array}{c} \bullet \\ 1 \end{array} \text{---}\text{---}\text{---} \begin{array}{c} \bullet \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 3 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 4 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 5 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 6 \end{array} \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{-\alpha' x'} + \\
& + \frac{V^6}{2} \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{\alpha x} \begin{array}{c} \bullet \\ 1 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 3 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 4 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 5 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 6 \end{array} \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{-\alpha' x'} - \\
& - \frac{V^6}{8} \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{\alpha x} \begin{array}{c} \bullet \\ 1 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 3 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 4 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 5 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ 6 \end{array} \frac{\text{---}\text{---}\text{---}}{-\alpha' x'} + \dots
\end{aligned}$$

Рис. 1. Первые шесть порядков теории возмущений для пропагатора электронов проводимости. Сплошные и штриховые линии изображают нулевые пропагаторы для s - и f -электронов соответственно. Прямоугольники изображают неприводимые функции Грина. Точки диаграмм являются вершинами с α - и V -вкладами.

Среди диаграмм для одночастичного f -пропагатора имеются сильносвязные и слабосвязные. Слабосвязные диаграммы могут быть разделены на две части путем разрезания одной линии пропагатора. Сумма всех сильносвязных диаграмм для f -электронов представляет собой корреляционную функцию, которую обозначим как $\Lambda_{\alpha\alpha'}(x | x')$. Величина $\Lambda_{\alpha\alpha'}(x | x')$ определяется уравнением

$$\Lambda_{\alpha\alpha'}(x | x') = G_{\alpha\alpha'}^{f(0)}(x | x') + Z_{\alpha\alpha'}(x | x'), \quad (13)$$

где функция $Z_{\alpha\alpha'}(x | x')$ содержит вклады сильносвязных диаграмм, основанных на неприводимых многочастичных функциях Грина.

$$\begin{aligned}
 G_{\alpha\alpha'}^f(x | x') = & \frac{\text{---}}{\alpha x} + V^2 \frac{\text{---}}{\alpha x} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \bullet \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \bullet \end{array} \frac{\text{---}}{-\alpha' x'} + \\
 & + \frac{V^2}{2} \begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \bullet \\ \text{---} \bullet \text{---} \bullet \end{array} \frac{\text{---}}{-\alpha' x'} + V^4 \frac{\text{---}}{\alpha x} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \bullet \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \bullet \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \bullet \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \bullet \end{array} \frac{\text{---}}{-\alpha' x'} + \\
 & + \frac{V^4}{2} \begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \bullet \\ \text{---} \bullet \text{---} \bullet \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \bullet \end{array} \frac{\text{---}}{-\alpha' x'} + \frac{V^4}{2} \frac{\text{---}}{\alpha x} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \bullet \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \bullet \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \bullet \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \bullet \end{array} \frac{\text{---}}{-\alpha' x'} - \\
 & - \frac{V^4}{8} \begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \bullet \\ \text{---} \bullet \text{---} \bullet \end{array} \frac{\text{---}}{-\alpha' x'} + \dots
 \end{aligned}$$

(а) (б) (в) (г) (д) (е) (ж)

Рис. 2. Вклады первых четырех порядков теории возмущений для пропагатора f -электронов.

Сильносвязная часть s -электронного пропагатора без внешних линий определяется нами как массовый оператор для некоррелированных электронов. Эта величина обозначается как $\Sigma_{\alpha\alpha'}(x | x')$.

Существует простое соотношение между этими двумя функциями:

$$\Sigma_{\alpha\alpha'}(x | x') = V^2 \alpha \alpha' \Lambda_{\alpha\alpha'}(x | x'). \quad (14)$$

Анализ диаграмм пропагаторов позволяет нам сформулировать следующее уравнение Дайсона для некоррелированного электронного пропагатора:

$$G_{\alpha\alpha'}^c(x | x') = G_{\alpha\alpha'}^{c(0)}(x | x') + \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_{1, 2} G_{\alpha\alpha_1}^{c(0)}(x | 1) \Sigma_{\alpha_1\alpha_2}(1 | 2) G_{\alpha_2\alpha'}^c(2 | x'). \quad (15)$$

В то же время мы можем сформулировать уравнение типа уравнения Дайсона для коррелированного электронного пропагатора G^f :

$$\begin{aligned}
 G_{\alpha\alpha'}^f(x | x') = & \Lambda_{\alpha\alpha'}(x | x') + \\
 & + V^2 \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_{1, 2} \alpha_1 \alpha_2 \Lambda_{\alpha\alpha_1}(x | 1) G_{\alpha_1\alpha_2}^{c(0)}(1 | 2) G_{\alpha_2\alpha'}^f(2 | x'). \quad (16)
 \end{aligned}$$

В уравнениях (15) и (16), как и в предыдущих уравнениях, которые содержат повторяющиеся индексы (1, 2), предполагается суммирование по индексам узлов (1, 2), спиновым индексам (σ_1, σ_2) и интегрирование по временным переменным в интервале $(0, \beta)$.

$$\begin{aligned}
 \Lambda(x | x') = & \quad \cdots \cdots \cdots G^{f(0)} \cdots \cdots \cdots + V^2 \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline \leftarrow & \leftarrow \\ \hline \bullet & \bullet \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \overleftarrow{G^c} \\ \overleftarrow{G^c} \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{G^c} \\ \xrightarrow{G^c} \end{array} \\
 & \quad \quad \quad x \quad \quad \quad x' \quad \quad \quad x \quad \quad \quad x' \quad \quad \quad - \\
 & - \frac{V^4}{2} \begin{array}{|c|c|} \hline 3 & 4 \\ \hline \leftarrow & \leftarrow \\ \hline \bullet & \bullet \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \overleftarrow{G^c} \\ \overleftarrow{G^c} \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{G^c} \\ \xrightarrow{G^c} \end{array} \begin{array}{c} \overleftarrow{G^c} \\ \overleftarrow{G^c} \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{G^c} \\ \xrightarrow{G^c} \end{array} \\
 & \quad \quad \quad x \quad \quad \quad x' \quad \quad \quad - \frac{V^6}{6} \begin{array}{|c|c|} \hline 5 & 6 \\ \hline \leftarrow & \leftarrow \\ \hline \bullet & \bullet \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \overleftarrow{G^c} \\ \overleftarrow{G^c} \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{G^c} \\ \xrightarrow{G^c} \end{array} \begin{array}{c} \overleftarrow{G^c} \\ \overleftarrow{G^c} \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{G^c} \\ \xrightarrow{G^c} \end{array} \\
 & \quad \quad \quad x \quad \quad \quad x' \quad \quad \quad - \\
 & - \frac{V^6}{2} \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline \leftarrow & \leftarrow \\ \hline \bullet & \bullet \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \overleftarrow{G^c} \\ \overleftarrow{G^c} \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{G^c} \\ \xrightarrow{G^c} \end{array} \begin{array}{c} \overleftarrow{G^c} \\ \overleftarrow{G^c} \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{G^c} \\ \xrightarrow{G^c} \end{array} \begin{array}{c} \overleftarrow{G^c} \\ \overleftarrow{G^c} \end{array} \begin{array}{c} \xrightarrow{G^c} \\ \xrightarrow{G^c} \end{array} \\
 & \quad \quad \quad x \quad \quad \quad 5 \quad \quad \quad 6 \quad \quad \quad x' \quad \quad \quad + \dots
 \end{aligned}$$

Рис. 4. Корреляционная функция $\Lambda(x | x')$ для нормального состояния. Все линии соответствуют нормальным пропагаторам. Они обладают направлением распространения и в вершинах диаграмм появляются стрелочки.

Диаграммы (б), (в) и (г) на рис. 3 являются локальными, и их фурье-представления не зависят от импульса. Существуют также другие диаграммы этого типа с неприводимыми функциями $G_5^{(0)\text{ir}}$, $G_6^{(0)\text{ir}}$ и т.д. Коэффициенты перед этими диаграммами определены числом $1/(2^n n!)$, где $2n$ – порядок теории возмущений диаграммы. Диаграмма (д) на рис. 3 не является локальной, и ее фурье-представление зависит от импульса. Динамической теории среднего поля соответствует только первая группа локальных диаграмм рис. 3.

Переход от диаграммных вкладов для сверхпроводящей фазы к нормальной осуществляется приравниванием к нулю суммы всех α -индексов каждой динамической величины. Например, такой переход диаграммы (б) на рис. 3 обусловлен равенствами $\alpha_1 - \alpha_2 = 0$ и $\alpha - \alpha_1 + \alpha_2 - \alpha' = 0$ с решениями $\alpha_1 = \alpha_2$ и $\alpha = \alpha'$. Суммирование по α_1 дает нам два одинаковых вклада, коэффициент перед диаграммой возрастает в два раза и становится равным единице вместо первоначального значения $1/2$.

В нормальном состоянии корреляционная функция $\Lambda(x | x')$ имеет вид, представленный на рис. 4. Новые коэффициенты перед диаграммами учитывают существование различных возможностей перехода из сверхпроводящего состояния в нормальное.

После обсуждения свойств пропагаторов мы исследуем свойства среднего значения оператора эволюции.

4. ВАКУУМНЫЕ ДИАГРАММЫ

Используя теорию возмущений, мы получили для связной части среднего значения оператора эволюции вклады, изображенные на рис. 5. Вклады первой, третьей и четвертой диаграмм рис. 5 следующие:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{V^2}{2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_{1,2} \alpha_1 \alpha_2 G_{\alpha_1 \alpha_2}^{c(0)}(1 | 2) G_{\alpha_2 \alpha_1}^{f(0)}(2 | 1), \\
 & \frac{V^4}{8} \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_4} \sum_{1, \dots, 4} \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 G_{\alpha_1 \alpha_2}^{c(0)}(1 | 2) G_{\alpha_3 \alpha_4}^{c(0)}(3 | 4) \langle T f_1^{-\alpha_1} f_2^{\alpha_2} f_3^{-\alpha_3} f_4^{\alpha_4} \rangle_0^{\text{ir}}, \\
 & -\frac{V^6}{48} \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_6} \sum_{1, \dots, 6} \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \alpha_5 \alpha_6 G_{\alpha_1 \alpha_2}^{c(0)}(1 | 2) G_{\alpha_3 \alpha_4}^{c(0)}(3 | 4) \times \\
 & \times G_{\alpha_5 \alpha_6}^{c(0)}(5 | 6) \langle T f_1^{-\alpha_1} f_2^{\alpha_2} f_3^{-\alpha_3} f_4^{\alpha_4} f_5^{-\alpha_5} f_6^{\alpha_6} \rangle_0^{\text{ir}}.
 \end{aligned}$$

При переходе в нормальное состояние диаграммы, приведенные на рис. 5, изменяются. Направление линий пропагаторов и стрелок в вершинах появляются вместе с новыми коэффициентами перед диаграммами. Эти изменения отражены на рис. 6, где представлены некоторые диаграммы из рис. 5. Вакуумные диаграммы в сверхпроводящем и нормальном состояниях содержат множитель $1/n$, где n – порядок теории возмущений, в котором данные диаграммы появляются. Этот множитель затрудняет исследование их вкладов. Для того чтобы избавиться от этого коэффициента, необходимо ввести дополнительное интегрирование по константе взаимодействия V . Результат такого интегрирования изображен на рис. 7. На основе разложения в ряд ренормированных пропагаторов s -электронов проводимости (см. рис. 1), локализованных f -электронов (см. рис. 2) и определения корреляционной функции $\Lambda_{\alpha\alpha'}(x | x')$ мы можем доказать, что вклад интеграла на рис. 7 в каждом порядке теории возмущений может представлять собой произведение некоторого вклада от G^c и некоторого вклада от Λ . Если вклады от G^c являются вкладами n_1 -го порядка теории возмущений, а вклады от Λ – n_2 -го порядка, то порядок $\langle U(\beta) \rangle_0^c$ должен быть $n = n_1 + n_2 + 2$. Существуют различные возможности выполнения этого условия, все они должны быть учтены.

Например, имеются три возможности составить из G^c и Λ диаграмму шестого порядка, изображенную на рис. 7. Эти возможности приведены на рис. 8. Примеры вакуумных диаграмм восьмого порядка теории возмущений представлены на рис. 9.

Только учет всех трех возможностей дает правильный коэффициент диаграммы $-1/8 - 1/4 - 1/8 = -1/2$. Других вариантов не существует. Эти примеры показывают, что интеграл от среднего значения оператора эволюции может быть представлен

Рис. 5. Вакуумные диаграммы первых восьми порядков теории возмущений в сверхпроводящем состоянии.

как произведение $\lambda^2 G^c \Lambda$ в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 \langle U(\beta) \rangle_0^c &= - \int_0^V \frac{d\lambda}{\lambda} \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{x, x'} \alpha \alpha' \lambda^2 G_{\alpha \alpha'}^c(x|x'|\lambda) \Lambda_{\alpha \alpha'}(x'|x|\lambda) = \\
 &= - \int_0^V \frac{d\lambda}{\lambda} \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{x, x'} G_{\alpha \alpha'}^c(x|x'|\lambda) \Sigma_{\alpha' \alpha}(x'|x|\lambda) = \\
 &= - \int_0^V \frac{d\lambda}{\lambda} \text{Tr}(\hat{G}^c(\lambda) \hat{\Sigma}^c(\lambda)), \tag{17}
 \end{aligned}$$

Рис. 6. Некоторые из вакуумных диаграмм в нормальном состоянии системы.

где операторы $\widehat{G}^c(\lambda)$ и $\widehat{\Sigma}^c(\lambda)$ имеют матричные элементы $G_{\alpha\alpha'}^c(x|x'|\lambda)$ и $\Sigma_{\alpha\alpha'}^c(x|x'|\lambda)$ соответственно. Добавление переменной λ подчеркивает, что эти величины зависят от вспомогательной постоянной интегрирования λ .

Следовательно, термодинамический потенциал F нашей системы равен

$$F = F_0 + \frac{1}{\beta} \int_0^V \frac{d\lambda}{\lambda} \text{Tr}[\widehat{G}^c(\lambda)\widehat{\Sigma}^c(\lambda)]. \quad (18)$$

Это выражение для ренормированного термодинамического потенциала сильно коррелированных систем содержит дополнительное интегрирование по константе взаимодействия λ и из-за этого выглядит громоздким. Соотношение (18) обобщает результат Латтинжера и Уорда [24], доказанный для слабо коррелированных многочастичных электронных систем в нормальном состоянии.

Наше обобщение было получено для случая сильных корреляций специального типа, которые содержат одну некоррелированную и одну сильно коррелированную подсистемы, и мы допускаем также существование сверхпроводимости в каждой из них.

$$\begin{aligned}
 \langle U(\beta) \rangle_0^c = & \int_0^V \frac{d\lambda}{\lambda} \left\{ -\lambda^2 \text{ (loop with 2 vertices)} - \lambda^4 \text{ (square with 4 vertices)} + \frac{\lambda^4}{2} \text{ (square with 2 loops)} - \right. \\
 & - \frac{\lambda^6}{8} \text{ (square with 2 loops and 2 internal lines)} - \lambda^6 \text{ (hexagon with 6 vertices)} + \frac{3\lambda^6}{2} \text{ (rectangle with 2 loops)} - \\
 & - \lambda^8 \text{ (octagon with 8 vertices)} + \frac{\lambda^8}{6} \text{ (rectangle with 2 loops and 2 internal lines)} + \\
 & + \lambda^8 \text{ (rectangle with 2 loops and 2 internal lines)} + 2\lambda^8 \text{ (rectangle with 2 loops and 2 internal lines)} - \lambda^8 \text{ (rectangle with 2 loops and 2 internal lines)} + \\
 & + \frac{\lambda^8}{2} \text{ (rectangle with 2 loops and 2 internal lines)} - \frac{\lambda^8}{48} \text{ (rectangle with 2 loops and 2 internal lines)} + \dots \left. \right\}
 \end{aligned}$$

Рис. 7. Вакуумные диаграммы системы в сверхпроводящем состоянии после интегрирования по константе взаимодействия.

Латтинжер и Уорд доказали возможность представления этого разложения в более удобной форме, без введения дополнительного интегрирования. Для этого они использовали специальный функционал, составленный из скелетных диаграмм, линиями которых являются ренормированные электронные функции Грина. Мы должны использовать скелетные диаграммы сильно коррелированных систем, которые существенно отличаются от случая, рассмотренного Латтинжером и Уордом [24], и преобразовать уравнение (18) в более подходящую форму.

Вакуумная диаграмма	G^c	Λ
$\frac{3\lambda^6}{2}$	$\frac{\lambda^4}{2}$

λ^2	$\frac{\lambda^2}{2}$
	$\frac{\lambda^4}{2}$

Рис. 8. Три возможности получения вакуумной диаграммы шестого порядка теории возмущений. Правильный коэффициент получен суммированием всех возможных вариантов.

Вакуумная диаграмма	G^c	Λ
$-\frac{\lambda^8}{2}$		$-\frac{\lambda^6}{2}$
	λ^2	$-\frac{\lambda^4}{8}$
	$-\frac{\lambda^6}{8}$

Рис. 9. Три возможности получения вакуумной диаграммы восьмого порядка теории возмущений.

 Рис. 10. Скелетные диаграммы для функционала Y' .

Введем для сильно коррелированной системы следующий функционал:

$$Y = -\frac{1}{2\beta} \text{Tr} \{ \ln(\widehat{G}^{c(0)} \widehat{\Sigma} - 1) + \widehat{G}^c \widehat{\Sigma} \} + Y', \quad (19)$$

который является обобщением функционала Латтинжера–Уорда [24] только для случая сильно коррелированных систем. Здесь операция Tr использует суммирование по α , σ , $\mathbf{i}$ и интегрирование по τ . Величина Y' содержит все особенности сильно коррелированных систем и представляет собой сумму замкнутых связных скелетных диаграмм, составленных из неприводимых функций Грина коррелированных электронов и полных функций Грина некоррелированных электронов.

На рис. 10 изображены некоторые простейшие скелетные диаграммы для функционала Y' . Эти диаграммы зависят от константы взаимодействия V не только через множители перед каждой диаграммой, но также через зависимость от полной функции Грина $G^c(V)$. Вклады диаграмм (а), (б) и (в) на рис. 10 следующие:

$$\begin{aligned} & \frac{V^2}{2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_{1, 2} \alpha_1 \alpha_2 G_{\alpha_1 \alpha_2}^{f(0)}(1, 2 | V) G_{\alpha_2 \alpha_1}^c(2, 1 | V), \\ & -\frac{V^4}{8} \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_4} \sum_{1, \dots, 4} \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 G_{\alpha_1 \alpha_2}^c(1, 2 | V) G_{\alpha_3 \alpha_4}^c(3, 4 | V) \langle T f_1^{-\alpha_1} f_2^{\alpha_2} f_3^{-\alpha_3} f_4^{\alpha_4} \rangle_0^{\text{ir}}, \\ & \frac{V^6}{48} \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_6} \sum_{1, \dots, 6} \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \alpha_5 \alpha_6 G_{\alpha_1 \alpha_2}^c(1, 2 | V) G_{\alpha_3 \alpha_4}^c(3, 4 | V) \times \\ & \times G_{\alpha_5 \alpha_6}^c(5, 6 | V) \langle T f_1^{-\alpha_1} f_2^{\alpha_2} f_3^{-\alpha_3} f_4^{\alpha_4} f_5^{-\alpha_5} f_6^{\alpha_6} \rangle_0^{\text{ir}}. \end{aligned}$$

На основании рис. 3 и рис. 10 можно получить следующее уравнение:

$$\frac{\delta \beta Y'}{\delta G_{\alpha_1 \alpha_2}^c(1, 2)} = \frac{\alpha_1 \alpha_2}{2} V^2 \Lambda_{\alpha_2 \alpha_1}(2, 1) = \frac{1}{2} \Sigma_{\alpha_2 \alpha_1}(2, 1). \quad (20)$$

Если мы учтем только явную зависимость функционала Y' от константы взаимодействия V , без учета зависимости полных функций Грина $G^c(V)$ от V , мы получим другое свойство:

$$V\beta \frac{dY'}{dV} \Big|_{G^c} = \sum_{\alpha_1, \alpha_2} \sum_{1,2} G_{\alpha_1 \alpha_2}^c(2, 1 | V) \Sigma_{\alpha_1 \alpha_2}(1, 2 | V) = \text{Tr}[\widehat{\Sigma} \widehat{G}^c]. \quad (21)$$

Поскольку необходимо найти производные функционала по массовому оператору Σ , мы будем использовать уравнение Дайсона (15), переписанное в виде

$$G^{c(0)-1}(x, x') = G^{c-1}(x, x') + \Sigma(x, x'), \quad x = (\alpha, \mathbf{x}, \sigma, \tau). \quad (22)$$

Получаем

$$\frac{\delta G^c(x, x')}{\delta \Sigma(y, y')} = G^c(x, y) G^c(y', x') \quad (23)$$

и

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta \Sigma(y, y')} \text{Tr} \ln(1 - \widehat{G}^{c(0)} \widehat{\Sigma}) &= -G^c(y', y), \\ \frac{\delta}{\delta \Sigma(y, y')} \text{Tr}(\widehat{G}^c \widehat{\Sigma}) &= G^c(y', y) + (\widehat{G}^c \widehat{\Sigma} \widehat{G}^c)_{y'y}. \end{aligned} \quad (24)$$

Суммируя эти уравнения, получим

$$\frac{\delta}{\delta \Sigma(y, y')} \left(-\frac{1}{2\beta} \right) \text{Tr} \{ \ln(\widehat{G}^{c(0)} \widehat{\Sigma} - 1) + \widehat{G}^c \widehat{\Sigma} \} = -\frac{1}{2\beta} (\widehat{G}^c \widehat{\Sigma} \widehat{G}^c)_{y'y}. \quad (25)$$

На основе определения функционала Y' (рис. 10) и уравнения (20) имеем

$$\frac{\delta Y'}{\delta \Sigma(y, y')} = \sum_{x, x'} \frac{\delta Y'}{\delta G^c(x, x')} \frac{\delta G^c(x, x')}{\delta \Sigma(y, y')} = \frac{1}{2\beta} (\widehat{G}^c \widehat{\Sigma} \widehat{G}^c)_{y'y}. \quad (26)$$

В результате мы получаем свойство стационарности функционала Y :

$$\frac{\delta Y}{\delta \Sigma(y, y')} = 0. \quad (27)$$

Обсудим дифференцирование функционала Y по константе взаимодействия V . Мы должны учесть стационарность Y относительно $\widehat{\Sigma}$ и $\widehat{G}^c$ и уравнение (21). Получаем

$$V \frac{dY}{dV} = V \frac{\partial Y}{\partial V} \Big|_{\Sigma} + V \frac{\delta Y}{\delta \Sigma} \frac{\partial \Sigma}{\partial V} = V \frac{\partial Y'}{\partial V} \Big|_{\Sigma} = \frac{\text{Tr}(\widehat{\Sigma} \widehat{G}^c)}{\beta}. \quad (28)$$

Из (18) следует

$$V \frac{dF}{dV} = \frac{\text{Tr}(\widehat{G}^c \widehat{\Sigma})}{\beta}, \quad (29)$$

и в результате имеем уравнение

$$V \frac{dF}{dV} = V \frac{dY}{dV} \quad (30)$$

с решением

$$F = Y + \text{const}, \quad (31)$$

где константа есть F_0 . Следовательно,

$$F = F_0 + Y \quad (32)$$

со свойством стационарности

$$\frac{\delta F}{\delta \Sigma(x, x')} = 0 \quad (33)$$

как в сверхпроводящем, так и в нормальном состоянии.

5. ТЕПЛОЕМКОСТЬ

В качестве иллюстрации применения наших результатов рассмотрим задачу нахождения теплоемкости сильно коррелированной системы в нормальном состоянии при низких температурах.

Теплоемкость при постоянном объеме V равна

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V, \quad (34)$$

где энтропия определяется по формуле

$$S = -T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{\mu, V}, \quad (35)$$

μ – химический потенциал при температуре T . При низкой температуре мы можем разложить функции $F(\mu, V, T)$ и μ по четным степеням температуры [25]:

$$\begin{aligned} F &= F(\mu_0, V, 0) - \frac{1}{2} \gamma(\mu_0, V) T^2 + \dots, \\ \mu(T) &= \mu_0 + \mu' T^2 + \dots, \end{aligned}$$

где μ_0 – значение химического потенциала для коррелированной системы при $T = 0$. В результате имеем

$$C_V = \gamma(\mu_0, V) T + \dots, \quad (36)$$

т.е. линейную зависимость теплоемкости от температуры при малых ее значениях. Поэтому, для того чтобы оценить коэффициент $\gamma(\mu_0, V)$, необходимо получить разложение F по степеням T , используя выражения (31), (19) и рис. 10 для функционала Y' , полученного нами в предыдущем разделе.

Мы знаем, что выражения (19) для функционала Y и (31) для термодинамического потенциала стационарны относительно изменения собственной энергии $\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_0)$. Следовательно, поскольку мы ищем первую поправку к F , мы можем пренебречь явной температурной зависимостью массового оператора $\Sigma(\mathbf{k} | i\omega)$ и функцией Грина $G^c(\mathbf{k} | i\omega)$ и заменить их значениями $\Sigma(\mathbf{k} | i\omega_0)|_{T=0}$ и $G^c(\mathbf{k} | i\omega_0)|_{T=0}$, вычисленными для температуры $T = 0$. Таким образом, первая поправка к значению F (31) при

$T = 0$ обусловлена разностью между суммами по ω_n , содержащимися в выражении (31), и тем, что мы получили бы, если бы заменили их на интегралы согласно равенству

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega. \quad (37)$$

Рассмотрим функционал Y' на рис. 10. Так как каждая линия скелетной диаграммы функционала Y' содержит сумму по ω_n , полная температурная поправка первого порядка к Y' получается из температурных поправок, обусловленных разностью, возникающей между суммированием по ω_n и интегралом (37), заданным при $T = 0$. Эта поправка берется для каждой линии скелетной диаграммы, с последующим суммированием всех этих отдельных вкладов.

Таким путем мы получили вклад от одной линии скелетной диаграммы, умноженный на число линий скелетных диаграмм. Это число изменяет коэффициент перед скелетной диаграммой Y' , и новые коэффициенты соответствуют новому вкладу в Y' , равному собственной энергии. Эта величина имеет форму второго члена в правой части (19) для функционала Y , имеющего противоположный знак. При объединении обеих частей функционала Y эти величины взаимно уничтожаются.

Наконец, мы получаем для поправки первого порядка к F уравнение

$$\begin{aligned} F &= F_0 - \frac{1}{2\beta} \sum_{\sigma, \mathbf{k}} \sum_{\omega_n} \ln [G^{c(0)}(i\omega_n) \Sigma(\mathbf{k}|i\omega_n)|_{T=0} - 1] e^{i\omega_n 0^+} = \\ &= F_0 + \frac{1}{2\beta} \sum_{\sigma, \mathbf{k}} \sum_{\omega_n} \ln [i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}}] e^{i\omega_n 0^+} - \\ &\quad - \frac{1}{2\beta} \sum_{\sigma, \mathbf{k}} \sum_{\omega_n} \ln [\Sigma(\mathbf{k}|i\omega_n)|_{T=0} - (G^{c(0)}(i\omega_n))^{-1}] e^{i\omega_n 0^+}. \end{aligned} \quad (38)$$

Воспользуемся уравнением Пуассона для сумм по ω_n и запишем их в виде интеграла:

$$F = F_0 - \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \mathbf{k}} \int_C \frac{dz}{e^{\beta z} + 1} \ln [G^{c(0)}(z) \Sigma(\mathbf{k}|z)|_{T=0} - 1], \quad (39)$$

где C – контур, обход которого происходит против часовой стрелки и который охватывает полюсы функции $(e^{\beta z} + 1)^{-1}$, находящиеся в точках $z = i\omega_n = (2n + 1)\pi i/\beta$. Член, пропорциональный T^2 , получается из последнего выражения с помощью обычной техники Зоммерфельда.

6. ВЫВОДЫ

Мы развили диаграммную теорию для периодической модели Андерсона на основе новой концепции, предложенной нами для сильно коррелированных систем.

Мы ввели понятие корреляционной функции $\Lambda_{\alpha\alpha'}(x | x')$ для f -электронов (см. рис. 3), которая представляет собой бесконечную сумму сильносвязных неприводимых функций Грина и содержит очень важные спиновые, зарядовые и парные

флуктуации коррелированных f -электронов. Эта корреляционная функция определяет массовый оператор $\Sigma_{\alpha\alpha'}(x | x')$ (14) некоррелированных электронов проводимости. Обе эти величины позволяют нам сформулировать уравнение Дайсона (15) для s -электронов и уравнение типа уравнения Дайсона (16) для f -электронов. Эти результаты получены в общем виде и справедливы как для нормального, так и для сверхпроводящего состояния.

Мы получили скелетные диаграммы для функции Λ и продемонстрировали их зависимость от неприводимых многочастичных функций Грина $G_n^{(0)\text{ir}}(1, \dots, 2n)$ для всех значений n , а также от полных s -электронных пропагаторов. Благодаря присутствию бесконечного числа неприводимых функций Грина невозможно сформулировать уравнение типа уравнения Дайсона для величин Λ и Σ .

Результаты применимы как к нормальному, так и к сверхпроводящему состоянию. Объединение исследования для обеих фаз стало возможным благодаря введению понятия квантового зарядового числа α и записи гамильтониана взаимодействия в новом виде.

Из рис. 3 ясно, что простейший вклад, который учитывает корреляцию f -электронов, сводится к первым двум членам на этом рисунке (диаграммы (а) и (б)). Все диаграммы на рис. 3, кроме последней, а также другие, подобные им и не включенные в рис. 3, являются локальными с представлением Фурье, не зависящим от импульса. Эти члены соответствуют по своей структуре динамической теории среднего поля. Последняя диаграмма на рис. 3 и другие более сложные диаграммы с большим числом неприводимых функций Грина зависят от импульса и учитывают пространственные флуктуации. Локальные вклады учитывают только временные флуктуации.

Мы показали переход наших диаграмм от сверхпроводящей фазы к нормальной фазе, используя дополнительные условия, предъявляемые квантовому зарядовому числу, от которого зависят динамические величины.

Было осуществлено специальное исследование вакуумных диаграмм после введения вспомогательной константы взаимодействия и интегрирования по ней этих диаграммных вкладов. Мы доказали, что этот интеграл эквивалентен произведению двух матриц $\Sigma_{\alpha\alpha'}$ и $G_{\alpha\alpha'}^c$. Затем мы ввели специальный функционал в форме скелетных диаграмм и доказали его тождественность с термодинамическим потенциалом. Доказано, что термодинамический потенциал имеет свойство стационарности относительно изменения массового оператора или полной функции Грина G^c электронов проводимости.

Благодарности. Авторы выражают благодарность профессору Н. М. Плакиде за обсуждение работы и ценные замечания.

Список литературы

- [1] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **124**:1 (1961), 41–53.
- [2] H. Keiter, G. Morandi, *Phys. Rep.*, **109**:5 (1984), 277–308.
- [3] G. Czycholl, *Phys. Rep.*, **143**:5 (1986), 277–345.
- [4] D. M. Newns, N. Read, *Adv. Phys.*, **36**:6 (1987), 799–849.

- [5] H. Shiba, P. Fazekas, *Progr. Theoret. Phys. Suppl.*, **101** (1990), 403–418.
- [6] Canio Noce, *Phys. Rep.*, **431**:4 (2006), 173–230.
- [7] P. Fulde, J. Keller, G. Zwicknagl, *Solid State Physics: Advances in Research and Applications*, Vol. 41, eds. H. Ehrenreich, D. Turnbull, Academic Press, New York, 1988.
- [8] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge Stud. Magnetism, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1997.
- [9] P. Fulde, *Electron Correlations in Molecules and Solids*, Springer Series in Solid-State Sciences, **100**, Springer, Berlin, 1991.
- [10] М. И. Владимир, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **82**:3 (1990), 428–437.
- [11] С. И. Вакару, М. И. Владимир, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **85**:2 (1990), 248–257.
- [12] Н. Н. Боголюбов, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **86**:1 (1991), 16–30.
- [13] Н. Н. Боголюбов, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **92**:2 (1992), 182–190.
- [14] В. А. Москаленко, *ТМФ*, **110**:2 (1997), 308–322.
- [15] В. А. Москаленко, *ТМФ*, **116**:3 (1998), 456–473.
- [16] В. А. Москаленко, П. Ентель, Д. Ф. Дигор, Л. А. Дохотару, Р. Читро, *ТМФ*, **155**:3 (2008), 474–497.
- [17] V. A. Moskalenko, P. Entel, L. A. Dohotaru, D. F. Digor, R. Citro, *Diagrammatic theory for Anderson impurity model*, Preprint JINR, Dubna, E17-2008-56.
- [18] В. А. Москаленко, П. Ентель, Л. А. Дохотару, Р. Читро, *ТМФ*, **159**:1 (2009), 162–173.
- [19] V. A. Moskalenko, P. Entel, D. F. Digor, *Phys. Rev. B*, **59**:1 (1999), 619–635.
- [20] V. A. Moskalenko, P. Entel, M. Marinaro, N. B. Perkins, C. Holtfort, *Phys. Rev. B*, **63**:24 (2001), 245119.
- [21] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. Ser. A*, **276**:1365 (1963), 238–257; **281**:1386 (1964), 401–419; **285**:1403 (1965), 542–560.
- [22] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Добросвет, М., 1998.
- [23] Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков, *Введение в теорию квантовых полей*, Николай Николаевич Боголюбов. Собрание научных трудов в 12 томах, Т. 10, Наука, М., 2008.
- [24] J. M. Luttinger, J. C. Ward, *Phys. Rev. B*, **118**:5 (1960), 1417–1427.
- [25] J. M. Luttinger, *Phys. Rev. B*, **119**:4 (1960), 1153–1163.

Поступила в редакцию 21.05.2009,
после доработки 15.07.2009