Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. А. Москаленко, Л. А. Дохотару, И. Д. Чеботарь,
Д. Ф. Дигор, Диаграммная теория для вырожденной
двухорбитальной модели Хаббарда, *ТМФ*, 2011, том 168,
номер 3, 490–502

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6696>

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: 3.85.7.115

26 апреля 2023 г., 13:16:27

© 2011 г.

В. А. Москаленко^{*†}, Л. А. Дохотару[‡],
И. Д. Чеботарь^{*}, Д. Ф. Дигор^{*}

ДИАГРАММНАЯ ТЕОРИЯ ДЛЯ ВЫРОЖДЕННОЙ ДВУХОРБИТАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА

Исследуется минимальная модель, учитывающая орбитальные степени свободы, – вырожденная двухорбитальная модель Хаббарда. Принимается во внимание внутриатомное кулоновское взаимодействие двух электронов с противоположными спинами на одной орбитали, а также на разных орбиталях и межорбитальные перескоки туннелирующих электронов. Учитывается влияние взаимодействия состояний, обусловленного правилом Хунда, на фазовый переход металл–диэлектрик. Диаграммная теория, развитая для сильно коррелированных орбитально невырожденных систем, обобщается на случай орбитального вырождения. Для одночастичной ренормированной функции Грина установлено уравнение типа уравнения Дайсона, для вычисления спектральной функции системы используется простая аппроксимация, основанная на суммировании цепочечных диаграмм.

Ключевые слова: сильно коррелированные электронные системы, уравнение Дайсона, функции Грина, вырожденная модель Хаббарда.

Работа посвящена светлой памяти выдающегося русского ученого и замечательного человека, рано ушедшего от нас, профессора Сергея Владимировича Тябликова, который своими статьями и монографиями [1], [2] оставил глубокий след в науке, внес огромный вклад в теорию магнетизма, поляронную теорию, физику многочастичных систем и др.

Мы с благодарностью вспоминаем его большую помощь в подготовке кадров для Республики Молдова. Один из нас (В. А. Москаленко) испытал на себе огромное обаяние его замечательной личности. Он был эталоном благожелательности, принципиальности и требовательности в науке. Его одобрение чьей-либо работы всегда считалось высшей оценкой.

Мы навсегда сохраним в памяти его светлый образ.

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

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

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

1. ВВЕДЕНИЕ

Теория сильно коррелированных электронных систем играет центральную роль в современной физике конденсированного состояния. Сущность проблемы состоит в конкуренции между отталкивательным взаимодействием электронов внутренних d - и f -оболочек ионов и коллективизацией, возникающей благодаря гибридизации этих орбиталей с другими орбиталями в веществе.

В твердых телах орбитальное вырождение уровней может быть полностью снято, и тогда система описывается однозонной моделью Хаббарда [3]. Однако во многих веществах, например в новых сверхпроводниках, основанных на Fe, и в материалах A_nC_{60} , орбитальное вырождение не снято полностью и орбитальные эффекты имеют важное значение. Так, например, особое значение имеет влияние орбитального вырождения на переход Мотта металл–диэлектрик.

Минимальная модель, включающая орбитальные степени свободы, есть двухорбитальная вырожденная модель Хаббарда. Эта модель была исследована многими методами и ей посвящено большое количество работ (см., например, [4]–[15]).

Настоящая работа посвящена исследованию влияния внутриатомного кулоновского взаимодействия двух электронов с противоположными спинами на одной или на разных орбиталях и внутриатомного обменного взаимодействия, которое стабилизирует состояние Хунда и определяет конфигурацию уровней. Мы обсуждаем простую модель с внутри- и межорбитальными перескоками электронов и исследуем их влияние на перенормировку физических величин.

Наше исследование основано на диаграммной теории для сильно коррелированных электронных систем, разработанной нами ранее для орбитально невырожденных систем [16]–[20]. Как и в случае невырожденных систем, неприводимые функции Грина для орбитально вырожденных систем сохраняют законы сохранения для спина и частот. Записано уравнение типа уравнения Дайсона для одночастичной ренормированной функции Грина, и при помощи некоторых простых приближений получена спектральная функция системы.

Работа имеет следующую структуру. В разделе 2 описана двухорбитальная модель Хаббарда. В разделе 3 мы обсуждаем локальную модель и получаем точные решения для гамильтониана этой модели. В разделе 4 исследованы процессы делокализации и сформулировано уравнение типа уравнения Дайсона для одночастичного ренормированного пропагатора, а также обсуждается суммирование цепочечных диаграмм. Раздел 5 посвящен анализу вкладов цепочечного приближения. Выводы представлены в разделе 6.

2. ДВУХОРБИТАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ХАББАРДА

Рассмотрим двухорбитальную модель Хаббарда. Гамильтониан системы имеет вид

$$H = H_L + H', \quad (1)$$

где

$$H' = - \sum_{i,j} \sum_{l,l'} \sum_{\sigma} t_{ll'}(j-i) C_{jl'\sigma}^+ C_{il\sigma}, \quad (2)$$

$$H_L = \sum_i H_{iL}, \quad (3)$$

$$H_{iL} = U \sum_l n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \frac{J}{2} \sum_{l \neq l'} \sum_{\sigma} C_{il\sigma}^+ C_{il\bar{\sigma}}^+ C_{il'\bar{\sigma}} C_{il'\sigma} - \\ - \mu \sum_{i,l,\sigma} C_{il\sigma}^+ C_{il\sigma} + \sum_{l \neq l'} \sum_{\sigma, \sigma'} \left\{ \frac{U'}{2} n_{il\sigma} n_{il'\sigma'} + \frac{J}{2} C_{il\sigma}^+ C_{il'\sigma'}^+ C_{il\sigma} C_{il'\sigma'} \right\}, \quad (4)$$

$C_{il\sigma}$ – оператор уничтожения электрона в узле решетки i с орбиталью $l = 1, 2$ и спином $\sigma = \uparrow, \downarrow$, $n_{il\sigma} = C_{il\sigma}^+ C_{il\sigma}$ и $n_{il} = \sum_{\sigma} n_{il\sigma}$. Константы связи U , U' и J обозначают внутри-, межорбитальное кулоновское взаимодействие электронов и константу связи Хунда ($J > 0$) соответственно. В дальнейшем мы используем соотношение $U = U' + 2J$, которое выполняется в некоторых орбитально вырожденных моделях. Величины $t_{ll'}(j-i)$ являются матричными элементами туннельных переходов электронов между узлами решетки. Существуют внутриорбитальные ($l = l'$) и межорбитальные ($l \neq l'$) квантовые переходы. Соответствующие кинетические энергии $\epsilon^{ll'}(\vec{k})$ равны

$$\epsilon^{ll'}(\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_i t_{ll'}(\vec{i} - \vec{j}) e^{i\vec{k}(\vec{i} - \vec{j})}, \quad (5)$$

здесь N – количество узлов решетки.

В настоящей статье мы принимаем, что соотношение (3) представляет собой гамильтониан нулевого порядка, который легко приводится к диагональному виду, а также считаем, что член, ответственный за туннелирование электронов в выражении (2), является возмущением. Основной целью работы являются детальный анализ того, как туннелирование электронов изменяет ионные квантовые переходы, и исследование роли орбитального вырождения.

Гамильтониан (3) имеет 16 квантовых состояний, соответствующая матрица может быть легко диагонализирована. Эти состояния зависят от числа частиц, значения спина и его проекции. Далее мы изучим роль кинетической энергии электронов в процессах делокализации и в перенормировке динамических величин, используя теорию возмущений по степеням туннельных матричных элементов. Эта теория является обобщением теории, предложенной в работах [16]–[20] для сильно коррелированных орбитально невырожденных систем. Основными элементами этой теории являются неприводимые локальные многочастичные функции Грина, которые в данном случае зависят не только от спина, но и от орбитальных квантовых чисел. Эти величины подчиняются закону сохранения спина, а также закону сохранения мацубаровских частот.

В результате мы сформулируем уравнение типа уравнения Дайсона для ренормированной одночастичной функции Грина в нормальном состоянии системы.

3. ЛОКАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ (АТОМНЫЙ ПРЕДЕЛ)

Рассмотрим диагонализацию гамильтониана (4). Поскольку есть четыре состояния с $l = 1$ и $l = 2$ для электронов, то имеются всего 16 квантовых состояний в локальном пространстве Гильберта в каждом узле решетки, и состояния пронумерованы от 1 до 16 в порядке возрастания числа частиц (индекс узла решетки

опущен):

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= |0\rangle, & E_1 &= 0; \\
 |2\rangle &= C_{1\uparrow}^+ |0\rangle, & E_2 &= -\mu; \\
 |3\rangle &= C_{2\uparrow}^+ |0\rangle, & E_3 &= -\mu; \\
 |4\rangle &= C_{1\downarrow}^+ |0\rangle, & E_4 &= -\mu; \\
 |5\rangle &= C_{2\downarrow}^+ |0\rangle, & E_5 &= -\mu; \\
 |6\rangle &= \frac{C_{1\uparrow}^+ C_{1\downarrow}^+ - C_{2\uparrow}^+ C_{2\downarrow}^+}{\sqrt{2}} |0\rangle, & E_6 &= U - 2\mu - J; \\
 |7\rangle &= \frac{C_{1\uparrow}^+ C_{1\downarrow}^+ + C_{2\uparrow}^+ C_{2\downarrow}^+}{\sqrt{2}} |0\rangle, & E_7 &= U - 2\mu + J; \\
 |8\rangle &= \frac{C_{1\uparrow}^+ C_{2\downarrow}^+ - C_{1\downarrow}^+ C_{2\uparrow}^+}{\sqrt{2}} |0\rangle, & E_8 &= U - 2\mu - J; \\
 |9\rangle &= C_{1\uparrow}^+ C_{2\uparrow}^+ |0\rangle, & E_9 &= U - 2\mu - 3J; \\
 |10\rangle &= \frac{C_{1\uparrow}^+ C_{2\downarrow}^+ + C_{1\downarrow}^+ C_{2\uparrow}^+}{\sqrt{2}} |0\rangle, & E_{10} &= E_9; \\
 |11\rangle &= C_{1\downarrow}^+ C_{2\downarrow}^+ |0\rangle, & E_{11} &= E_9; \\
 |12\rangle &= C_{1\uparrow}^+ C_{1\downarrow}^+ C_{2\uparrow}^+ |0\rangle, & E_{12} &= 3U - 3\mu - 5J; \\
 |13\rangle &= C_{2\uparrow}^+ C_{2\downarrow}^+ C_{1\uparrow}^+ |0\rangle, & E_{13} &= E_{12}; \\
 |14\rangle &= C_{1\uparrow}^+ C_{1\downarrow}^+ C_{2\downarrow}^+ |0\rangle, & E_{14} &= E_{12}; \\
 |15\rangle &= C_{2\uparrow}^+ C_{2\downarrow}^+ C_{1\downarrow}^+ |0\rangle, & E_{15} &= E_{12}; \\
 |16\rangle &= C_{1\uparrow}^+ C_{1\downarrow}^+ C_{2\uparrow}^+ C_{2\downarrow}^+ |0\rangle, & E_{16} &= 6U - 4\mu - 10J,
 \end{aligned} \tag{6}$$

где $|0\rangle$ – вакуумное состояние иона, которое соответствует пустому узлу решетки, и мы воспользовались соотношением $U = U' + 2J$. Состояния $|2\rangle$, $|3\rangle$, $|4\rangle$ и $|5\rangle$ являются состояниями с одной частицей, т.е. числом $N_e = 1$, спином $S = 1/2$ и $S_z = \pm 1/2$; состояния $|6\rangle$, $|7\rangle$ и $|8\rangle$ – синглетные состояния с числом $N_e = 2$ и спином $S = 0$; следующие три состояния суть триплетные состояния с $N_e = 2$, $S = 1$ и $S_z = -1, 0, +1$; четыре состояния $|12\rangle$, $|13\rangle$, $|14\rangle$ и $|15\rangle$ – состояния с $N_e = 3$, $S = 1/2$ и $S_z = \pm 1/2$, последнее состояние $|16\rangle$ соответствует случаю с $N_e = 4$ и $S = 0$.

Эта система функций представляет собой полную систему ортогонализованных собственных функций. Одна из этих функций должна иметь наименьшую энергию и соответствовать основному состоянию системы. В качестве кандидата такой функции может быть одна из триплетных функций с $N_e = 2$, $S = 1$, $S_z = -1, 0, +1$ и энергией $E = U - 2\mu - 3J$.

Полное основное состояние представляет собой произведение таких двухэлектронных триплетов в каждом узле. В этом случае первые возбужденные состояния суть дважды вырожденные синглетные состояния $|6\rangle$ и $|8\rangle$ с энергией $E = U - 2\mu - J$, а наивысшее возбужденное состояние – синглетное состояние $|7\rangle$ с энергией $E_7 = U - 2\mu + J$.

В настоящей работе мы используем состояния, обусловленные правилом Хунда, и исходим из предположения, что основным состоянием локальной модели является

триплетное состояние со спином $\sigma = 1$. Это предположение является основным для всех наших дальнейших вычислений.

В условиях симметрии частица-дырка и при половинном заполнении $\langle n_1 \rangle = \langle n_2 \rangle = 1$ химический потенциал принимает значение

$$\mu_0 = \frac{U}{2} + U' - \frac{J}{2} = \frac{3}{2}U - \frac{5}{2}J. \quad (7)$$

Если $\mu \rightarrow -\infty$, величина $n_1 + n_2$ стремится к нулю, а при $\mu \rightarrow +\infty$ эти числа приближаются к значению 4.

Теперь введем операторы Хаббарда для ионных квантовых переходов $X^{m,n} = |n\rangle\langle m|$ и выразим через них электронные операторы рождения $C_{l\sigma}^+$:

$$\begin{aligned} C_{l\sigma}^+ = & X^{2+l-\sigma,1} + \frac{\sigma}{\sqrt{2}} [(-1)^{l+1} X^{6,2+l+\sigma} + X^{7,2+l+\sigma}] + \\ & + \frac{1}{\sqrt{2}} [\sigma X^{8,5-l+\sigma} + (-1)^{l+1} X^{10,5-l+\sigma}] + \\ & + \frac{1}{\sqrt{2}} [-X^{12+l-\sigma,8} + \sigma(-1)^{l+1} X^{12+l-\sigma,10}] + \\ & + \frac{1}{\sqrt{2}} [(-1)^l X^{15-l-\sigma,6} + X^{15-l-\sigma,7}] + (-1)^{l+1} X^{10-\sigma,5-l-\sigma} + \\ & + (-1)^{l+1} \sigma X^{12+l+\sigma,10+\sigma} + \sigma X^{16,15-l+\sigma}, \quad \sum_{m=1}^{16} X^{m,m} = 1. \end{aligned} \quad (8)$$

Формула (8) удобна тем, что она позволяет вычислять пропагаторы и другие динамические величины при произвольных значениях квантовых чисел $l = 1, 2$ и $\sigma = -1, 1$. В общем виде эта формула должна быть дополнительно снабжена индексом узла i , который нами для простоты опущен.

Определим теперь мацубаровскую одночастичную функцию Грина локализованных электронов

$$G^{(0)}(l\sigma\tau | l'\sigma'\tau') = G_{l\sigma,l'\sigma'}^{(0)}(\tau - \tau') = -\langle TC_{l\sigma}(\tau) \bar{C}_{l'\sigma'}(\tau') \rangle_0, \quad (9)$$

где $C_{l\sigma}(\tau) = e^{\tau H_L} C_{l\sigma} e^{-\tau H_L}$, $\bar{C}_{l\sigma}(\tau) = e^{\tau H_L} C_{l\sigma}^+ e^{-\tau H_L}$. Фурье-компонента мацубаровской одночастичной функции Грина определяется по формуле

$$G^{(0)}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} G^{(0)}(i\omega_n), \quad \omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}. \quad (10)$$

Используя (8) и свойства операторов Хаббарда, получим следующее уравнение для локальных функций (9):

$$\begin{aligned} G_{l\sigma,l'\sigma'}^{(0)}(i\omega_n) = & \frac{\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{ll'}}{Z_0} \left\{ \frac{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2}}{i\omega_n + E_1 - E_2} + \frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_6}}{i\omega_n + E_2 - E_6} + \frac{1}{2} \frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_7}}{i\omega_n + E_2 - E_7} + \right. \\ & + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_9}}{i\omega_n + E_2 - E_9} + \frac{e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega_n + E_6 - E_{12}} + \frac{1}{2} \frac{e^{-\beta E_7} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega_n + E_7 - E_{12}} + \\ & \left. + \frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_{12}}}{i\omega_n + E_9 - E_{12}} + \frac{e^{-\beta E_{12}} + e^{-\beta E_{16}}}{i\omega_n + E_{12} - E_{16}} \right\}, \end{aligned} \quad (11)$$

где Z_0 – статистическая сумма в атомном пределе:

$$Z_0 = e^{-\beta E_1} + 4e^{-\beta E_2} + 2e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_7} + 3e^{-\beta E_9} + 4e^{-\beta E_{12}} + e^{-\beta E_{16}}. \quad (12)$$

Локальная функция Грина (11) диагональна по спину и орбитальным индексам и не зависит от них.

4. ПРОЦЕССЫ ДЕЛОКАЛИЗАЦИИ

Теория возмущений, развитая ранее для орбитально невырожденной модели Хаббарда [16]–[20], может быть использована в настоящей работе для изучения перенормировки локальной функции Грина благодаря наличию внутриорбитальных и межорбитальных перескоков туннелирующих электронов. Полная мацубаровская функция Грина в представлении взаимодействия определяется следующим образом:

$$G(\vec{x}l\sigma\tau | \vec{x}'l'\sigma'\tau') = -\langle TC_{\vec{x}l\sigma}(\tau)\bar{C}_{\vec{x}'l'\sigma'}(\tau')U(\beta)\rangle_0^c. \quad (13)$$

Оператор эволюции

$$U(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_n T(H'(\tau_1) \dots H'(\tau_n)) \quad (14)$$

имеет такую же форму, как и в случае невырожденной однозонной модели Хаббарда с туннельным слагаемым (2), принятым нами за возмущение.

Статистические средние в выражении (13) будут вычислены с помощью статистической матрицы локальной модели. Индекс c в формуле (13) означает, что должны учитываться только связанные диаграммы.

Обобщенная теорема Вика и соответствующая диаграммная техника [16]–[20] будут использованы для получения полной функции Грина. Типичная диаграмма теории возмущений второго порядка для пропагатора (13) изображена на рис. 1.

Статистические средние хронологических произведений взаимодействий сводятся к n -частичным локальным мацубаровским функциям Грина $G_n^{(0)}(1, \dots, n | 1', \dots, n')$, которые в отсутствие корреляций факторизуются и могут быть представлены в виде суммы произведений n независимых одночастичных функций Грина (обычная теорема Вика).

При наличии корреляций в дополнение к предыдущим появляются новые члены. Эти члены содержат одну или более одноузельных многочастичных неприводимых функций Грина (кумулянты Кубо). Все индексы узлов решетки отдельных неприводимых функций одинаковы: они являются локальными функциями.

Детали появления неприводимых функций Грина (НФГ) вместе с нулевыми пропагаторами определяются обобщенной теоремой Вика. Эти НФГ, будучи локализованными, имеют, однако, различные времена, спины и орбитальные числа. Диаграммы пропагатора без НФГ суть диаграммы цепочечного типа и определяют первое приближение Хаббарда.

Диаграммные представления таких новых элементов, как НФГ, изображены на рис. 1. Эти новые элементы могут быть собраны вместе в функцию, названную нами корреляционной функцией $Z(x' - x)$. Функция Z представляет собой сумму всех сильно связанных неприводимых диаграмм, каждая из которых имеет две внешние

Рис. 1. Диаграмма второго порядка теории возмущений для одночастичного пропагатора. Сплошная линия соответствует нулевому пропагатору электрона, прямоугольник соответствует неприводимой двухчастичной функции Грина $G_2^{(0)ir}(x1|2'x')$. Штриховые линии обозначают туннельные матричные элементы.

Рис. 2. Схематическое изображение уравнения типа уравнения Дайсона. Двойные линии со стрелками соответствуют ренормированным одночастичным функциям Грина, прямоугольники изображают корреляционные функции $\Lambda(x|x')$, а штриховая линия обозначает матричные элементы тунелирования.

вершины x и x' , где x обозначает далее $(\vec{x}, l, \sigma, \tau)$. В общем случае корреляционная функция $Z(x - x')$ не диагональна относительно индексов узлов.

Функция $Z(x|x')$ содержит все зарядовые, спиновые и орбитальные флуктуации. Более удобным является введение функции

$$\Lambda(x|x') = G^0(x|x') + Z(x|x'),$$

с помощью которой можно сформулировать уравнение типа уравнения Дайсона для ренормированной одночастичной функции Грина (см. рис. 2). В аналитической форме это уравнение имеет вид

$$G(\vec{x}l\sigma\tau|\vec{x}'l'\sigma'\tau') = \Lambda(\vec{x}l\sigma\tau|\vec{x}'l'\sigma'\tau') + \sum_{l'_1, l_1} \sum_{\sigma_1} \int \Lambda(\vec{x}l\sigma\tau|\vec{l}'l'_1\sigma_1\tau_1) \times \\ \times t_{l'_1 l_1}(\vec{l}' - \vec{l}) G(\vec{l}l_1\sigma_1\tau_1|\vec{x}'l'\sigma'\tau') d\tau_1. \quad (15)$$

Фурье-представление по импульсу и частоте имеет вид

$$G_{\sigma\sigma'}^{ll'}(\vec{k}|i\omega_n) = \Lambda_{\sigma\sigma'}^{ll'}(\vec{k}|i\omega_n) + \sum_{l'_1, l_1, \sigma_1} \Lambda_{\sigma\sigma_1}^{ll'_1}(\vec{k}|i\omega_n) \epsilon^{l'_1 l_1}(\vec{k}) G_{\sigma_1\sigma'}^{l_1 l'}(\vec{k}|i\omega_n). \quad (16)$$

В парамагнитной фазе все спиновые зависимости диагональны и уравнение типа уравнения Дайсона имеет вид

$$G_{\sigma}^{ll'}(\vec{k}|i\omega_n) = \Lambda_{\sigma}^{ll'}(\vec{k}|i\omega_n) + \sum_{l'_1, l_1} \Lambda_{\sigma}^{ll'_1}(\vec{k}|i\omega_n) \epsilon^{l'_1 l_1}(\vec{k}) G_{\sigma}^{l_1 l'}(\vec{k}|i\omega_n). \quad (17)$$

Это уравнение эквивалентно системе из четырех уравнений ($l, l' = 1, 2$) для функций $G_\sigma^{11}, G_\sigma^{12}, G_\sigma^{21}, G_\sigma^{22}$. Например,

$$G_\sigma^{11}(k) = \Lambda_\sigma^{11}(k) + \Lambda_\sigma^{11}(k)\epsilon^{11}(\vec{k})G_\sigma^{11}(k) + \Lambda_\sigma^{11}(k)\epsilon^{12}(\vec{k})G_\sigma^{21}(k) + \\ + \Lambda_\sigma^{12}(k)\epsilon^{21}(\vec{k})G_\sigma^{11}(k) + \Lambda_\sigma^{12}(k)\epsilon^{22}(\vec{k})G_\sigma^{21}(k), \quad k = \vec{k}, i\omega. \quad (18)$$

Имеются три дополнительных уравнения, которые позволяют нам получить следующие значения:

$$G_\sigma^{11}(k) = \frac{\Lambda_\sigma^{11}(k) - \epsilon^{22}(\vec{k})\Delta_\sigma(k)}{d_\sigma(k)}, \quad G_\sigma^{12}(k) = \frac{\Lambda_\sigma^{12}(k) + \epsilon^{12}(\vec{k})\Delta_\sigma(k)}{d_\sigma(k)}, \\ G_\sigma^{21}(k) = \frac{\Lambda_\sigma^{21}(k) + \epsilon^{21}(\vec{k})\Delta_\sigma(k)}{d_\sigma(k)}, \quad G_\sigma^{22}(k) = \frac{\Lambda_\sigma^{22}(k) - \epsilon^{11}(\vec{k})\Delta_\sigma(k)}{d_\sigma(k)}, \quad (19)$$

где

$$\Delta_\sigma(k) = \Lambda_\sigma^{11}(k)\Lambda_\sigma^{22}(k) - \Lambda_\sigma^{12}(k)\Lambda_\sigma^{21}(k), \\ d_\sigma(k) = 1 - \Lambda_\sigma^{11}(k)\epsilon^{11}(\vec{k}) - \Lambda_\sigma^{22}(k)\epsilon^{22}(\vec{k}) - \Lambda_\sigma^{12}(k)\epsilon^{21}(\vec{k}) - \\ - \Lambda_\sigma^{21}(k)\epsilon^{12}(\vec{k}) + \Delta_\sigma(k)\bar{\epsilon}(\vec{k}), \quad (20) \\ \bar{\epsilon}(\vec{k}) = \epsilon^{11}(\vec{k})\epsilon^{22}(\vec{k}) - \epsilon^{12}(\vec{k})\epsilon^{21}(\vec{k}).$$

В этих уравнениях внутриорбитальные переходы определяются диагональными $\epsilon^{11}(\vec{k})$ и $\epsilon^{22}(\vec{k})$ энергетическими зонами, а межорбитальные перескоки – недиагональными $\epsilon^{12}(\vec{k})$ и $\epsilon^{21}(\vec{k})$ величинами.

Эти уравнения могут быть записаны в матричной форме, если ввести следующие определения:

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

Матричное уравнение имеет вид

$$\hat{G}_\sigma(k) = \hat{\Lambda}_\sigma(k) + \hat{\Lambda}_\sigma(k)\hat{E}(\vec{k})\hat{G}_\sigma(k). \quad (22)$$

Если ввести обратные матрицы

$$\hat{G}_\sigma^{-1}(k) = \frac{1}{\Omega_\sigma(k)} \begin{pmatrix} G_\sigma^{22}(k) & -G_\sigma^{12}(k) \\ -G_\sigma^{21}(k) & G_\sigma^{11}(k) \end{pmatrix}, \\ \hat{\Lambda}_\sigma^{-1}(k) = \frac{1}{\Delta_\sigma(k)} \begin{pmatrix} \Lambda_\sigma^{22}(k) & -\Lambda_\sigma^{12}(k) \\ -\Lambda_\sigma^{21}(k) & \Lambda_\sigma^{11}(k) \end{pmatrix}, \quad (23) \\ \Omega_\sigma(k) = G_\sigma^{11}(k)G_\sigma^{22}(k) - G_\sigma^{12}(k)G_\sigma^{21}(k) = \frac{\Delta_\sigma}{d_\sigma(k)},$$

то уравнение типа уравнения Дайсона принимает вид

$$\hat{\Lambda}_\sigma^{-1}(k) = \hat{G}_\sigma^{-1}(k) + \hat{E}(k). \quad (24)$$

Это уравнение известно для орбитально невырожденной однозонной модели Хаббарда. Таким образом, нами показано, что орбитально вырожденная теория оказывается аналогичной орбитально невырожденной теории, если в последней заметить числовые функции Грина двухрядными матрицами, в которых диагональные элементы соответствуют внутриорбитальным переходам, а недиагональные элементы – межорбитальным переходам. Такова цена учета внутриорбитальных взаимодействий и туннелирований.

5. ПРИБЛИЖЕНИЕ ЦЕПОЧЕЧНЫХ ДИАГРАММ

Теперь рассмотрим простейшие цепочечные диаграммы орбитально вырожденной модели и пренебрежем всеми диаграммами с НФГ. Это приближение эквивалентно предположению, что корреляционная функция $Z(x|x')$ равна нулю и $\Lambda_\sigma^{ll'}(i\omega_n) = G_\sigma^{(0)ll'}(i\omega_n) = \delta_{ll'} G_\sigma^{(0)}(i\omega_n)$.

Как видно из (11), нулевой пропагатор $G_\sigma^{(0)}(i\omega)$ не зависит от спина σ и орбитальных индексов l и диагонален по ним. В этом приближении ренормированные функции (19) приобретают вид

$$\begin{aligned} G_\sigma^{11}(k) &= \frac{G_\sigma^{(0)}(i\omega_n)[1 - \epsilon^{22}(\vec{k})G_\sigma^{(0)}(i\omega_n)]}{d_\sigma(k)}, \\ G_\sigma^{12}(k) &= \frac{\epsilon^{12}(\vec{k})[G_\sigma^{(0)}(i\omega_n)]^2}{d_\sigma(k)}, \quad G_\sigma^{21}(k) = \frac{\epsilon^{21}(\vec{k})[G_\sigma^{(0)}(i\omega_n)]^2}{d_\sigma(k)}, \\ G_\sigma^{22}(k) &= \frac{G_\sigma^{(0)}(i\omega_n)[1 - \epsilon^{11}(\vec{k})G_\sigma^{(0)}(i\omega_n)]}{d_\sigma(k)}, \\ d_\sigma(k) &= 1 - (\epsilon^{11}(\vec{k}) + \epsilon^{22}(\vec{k}))G_\sigma^{(0)}(i\omega_n) + \bar{\epsilon}(\vec{k})[G_\sigma^{(0)}(i\omega_n)]^2 = \\ &= \bar{\epsilon}(\vec{k})[G_\sigma^{(0)}(i\omega_n) - f_+(\vec{k})][G_\sigma^{(0)}(i\omega_n) - f_-(\vec{k})], \end{aligned} \quad (25)$$

где

$$f_\pm(\vec{k}) = \frac{\epsilon^{11}(\vec{k}) + \epsilon^{22}(\vec{k})}{2\bar{\epsilon}(\vec{k})} \pm \frac{\sqrt{(\epsilon^{11}(\vec{k}) - \epsilon^{22}(\vec{k}))^2 + 4\epsilon^{12}(\vec{k})\epsilon^{21}(\vec{k})}}{2\bar{\epsilon}(\vec{k})}. \quad (26)$$

Ниже для получения спектральной функции и анализа фазового перехода Мотта–Хаббарда мы будем исследовать одну из функций Грина (25), например первую из них $G_\sigma^{11}(k)$. После некоторых преобразований имеем

$$\begin{aligned} G_\sigma^{11}(\vec{k}|i\omega) &= \frac{-1}{\sqrt{(\epsilon^{11}(\vec{k}) - \epsilon^{22}(\vec{k}))^2 + 4\epsilon^{12}(\vec{k})\epsilon^{21}(\vec{k})}} \times \\ &\times \left\{ \epsilon^{22}(\vec{k})(f_+ - f_-) + \frac{f_+(f_+ \epsilon^{22}(\vec{k}) - 1)}{G_\sigma^{(0)}(i\omega_n) - f_+} - \frac{f_-(f_- \epsilon^{22}(\vec{k}) - 1)}{G_\sigma^{(0)}(i\omega_n) - f_-} \right\}. \end{aligned} \quad (27)$$

Дальнейшее аналитическое преобразование этого уравнения затрудняется наличием достаточно сложной структуры функции Грина $G_\sigma^{(0)}(i\omega_n)$, определяемой формулой (11). Согласно этой формуле нулевая функция Грина $G_\sigma^{(0)}(i\omega_n)$ представляет собой сумму восьми вкладов, каждый со своим статистическим весом. Ниже мы воспользуемся приближением, состоящим в замене реальной структуры (11) ее упрощенным вариантом

$$G_\sigma^{(0)}(i\omega) \cong \frac{A+B}{i\omega_n + E_{ab}} + \frac{C+D}{i\omega_n + E_{cd}}, \quad (28)$$

параметры которого определяются основным спин-триплетным состоянием со значениями

$$\begin{aligned} A &= \frac{e^{-\beta E_2}}{Z_0}, & B &= \frac{e^{-\beta E_9}}{Z_0} = C, & D &= \frac{e^{-\beta E_{12}}}{Z_0}, \\ Z_0 &= 4e^{-\beta E_2} + 3e^{-\beta E_9} + 4e^{-\beta E_{12}}, & E_{ab} &= E_2 - E_9, & E_{cd} &= E_9 - E_{12}. \end{aligned} \quad (29)$$

На основании (28) получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{G_\sigma^{(0)}(i\omega_n) - f} &= -\frac{1}{f} \left\{ 1 + \frac{(E_1(f) + E_{ab})(E_1(f) + E_{cd})}{(E_1(f) - E_2(f))(i\omega_n - E_1(f))} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{(E_2(f) + E_{ab})(E_2(f) + E_{cd})}{(E_1(f) - E_2(f))(i\omega_n - E_2(f))} \right\}, \end{aligned} \quad (30)$$

где

$$\begin{aligned} E_{1,2}(f) &= -\frac{1}{2} \left[E_{ab} + E_{cd} - \frac{A+B+C+D}{f} \right] \pm \\ &\quad \pm \frac{1}{2f} \sqrt{[(E_{ab} - E_{cd})f + C + D - A - B]^2 + 4F}, \\ F &= (A+B)(C+D). \end{aligned} \quad (31)$$

Спектральная плотность состояний $\rho^{11}(E)$, определяемая функцией Грина $G_\sigma^{11}(\vec{k}|i\omega_n)$, имеет вид

$$\rho_\sigma^{11}(E) = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \text{Im } G_\sigma^{11}(\vec{k}, E + i\delta), \quad (32)$$

где $G_\sigma^{11}(\vec{k}|E + i\delta)$ – аналитическое продолжение мацубаровской функции Грина для дискретного числа точек $i\omega_n$ в комплексной плоскости E . Мнимая часть этой функции имеет вид

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\pi} \text{Im } G_\sigma^{11}(\vec{k}|E + i\delta) &= \frac{1}{\sqrt{(\epsilon^{11}(\vec{k}) - \epsilon^{22}(\vec{k}))^2 + 4\epsilon^{12}(\vec{k})\epsilon^{21}(\vec{k})}} \times \\ &\quad \times \left\{ \frac{f_+ \epsilon^{22}(\vec{k}) - 1}{E_1(f_+) - E_2(f_+)} [(E_1(f_+) + E_{ab})(E_1(f_+) + E_{cd})\delta(E - E_1(f_+)) - \right. \\ &\quad \left. - (E_2(f_+) + E_{ab})(E_2(f_+) + E_{cd})\delta(E - E_2(f_+))] - \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{f_- \epsilon^{22}(\vec{k}) - 1}{E_1(f_-) - E_2(f_-)} \left[(E_1(f_-) + E_{ab})(E_1(f_-) + E_{cd})\delta(E - E_1(f_-)) - \right. \\
& \left. - (E_2(f_-) + E_{ab})(E_2(f_-) + E_{cd})\delta(E - E_2(f_-)) \right] \Big\}. \quad (33)
\end{aligned}$$

Эта величина должна быть положительной как часть запаздывающей функции Грина. Далее упростим наши выкладки, полагая

$$\epsilon^{11}(\vec{k}) = \epsilon^{22}(\vec{k}) \equiv \epsilon(\vec{k}), \quad \epsilon^{12}(\vec{k}) = \epsilon^{21}(\vec{k}) \equiv \epsilon_0, \quad (34)$$

и, как следствие, получим значения

$$\begin{aligned}
f_+(\vec{k}) &= (\epsilon(\vec{k}) - \epsilon_0)^{-1}, & f_-(\vec{k}) &= (\epsilon(\vec{k}) + \epsilon_0)^{-1}, \\
f_+(\vec{k})\epsilon^{22}(\vec{k}) - 1 &= \epsilon_0 f_+(\vec{k}), & f_-(\vec{k})\epsilon^{22}(\vec{k}) - 1 &= -\epsilon_0 f_-(\vec{k}).
\end{aligned} \quad (35)$$

Суммирование по вектору $\vec{k}$ в этой общей энергетической зоне $\epsilon(\vec{k})$ заменим интегрированием:

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \dots = \int \rho_0(\epsilon) d\epsilon \dots \quad (36)$$

Теперь учтем, что

$$\begin{aligned}
\delta(E - E_1(f)) &= \frac{\theta[(E + E_{ab})(E + E_{cd})]}{(d\Phi_1(E)/df)|_{\Phi_1=0}} \delta \left[f - \left(\frac{A + B}{E + E_{ab}} + \frac{C + D}{E + E_{cd}} \right) \right], \\
\delta(E - E_2(f)) &= \frac{\theta[-(E + E_{ab})(E + E_{cd})]}{(d\Phi_2(E)/df)|_{\Phi_2=0}} \delta \left[f - \left(\frac{A + B}{E + E_{ab}} + \frac{C + D}{E + E_{cd}} \right) \right],
\end{aligned} \quad (37)$$

где

$$\begin{aligned}
\Phi_{1,2}(E) &= E - E_{1,2}(f), \\
\frac{d\Phi_{1,2}}{df} \Big|_{\Phi_{1,2}=0} &= \frac{(E + E_{ab})^2(E + E_{cd})^2}{(A + B)(E + E_{cd})^2 + (C + D)(E + E_{ab})^2},
\end{aligned} \quad (38)$$

$\theta(x)$ – ступенчатая функция, которая определяется как $\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x \leq 0. \end{cases}$

Поэтому мы можем преобразовать правую часть соотношения (33). Например,

$$\begin{aligned}
& (E_1(f) + E_{ab})(E_1(f) + E_{cd})\delta(E - E_1(f)) - \\
& - (E_2(f) + E_{ab})(E_2(f) + E_{cd})\delta(E - E_2(f)) = \\
& = \frac{(E + E_{ab})(E + E_{cd})}{(d\Phi(E)/df)|_{\Phi=0}} \delta \left[f - \left(\frac{A + B}{E + E_{ab}} + \frac{C + D}{E + E_{cd}} \right) \right].
\end{aligned} \quad (39)$$

В результате мы получим положительное значение

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{\pi} \text{Im} G^{11}(\vec{k}|E + i\delta) = \frac{1}{2} \left\{ f_+^2 \delta \left[f_+ - \left(\frac{A + B}{E + E_{ab}} + \frac{C + D}{E + E_{cd}} \right) \right] + \right. \\
& \left. + f_-^2 \delta \left[f_- - \left(\frac{A + B}{E + E_{ab}} + \frac{C + D}{E + E_{cd}} \right) \right] \right\}.
\end{aligned} \quad (40)$$

Окончательно спектральная функция $\rho^{11}(E)$ имеет вид

$$\rho^{11}(E) = \int \rho_0(\epsilon) d\epsilon \frac{1}{2} \left\{ f_+^2 \delta \left[f_+ - \left(\frac{A+B}{E+E_{ab}} + \frac{C+D}{E+E_{cd}} \right) \right] + f_-^2 \delta \left[f_- - \left(\frac{A+B}{E+E_{ab}} + \frac{C+D}{E+E_{cd}} \right) \right] \right\}. \quad (41)$$

Принимая во внимание тождества

$$f_+^2 \delta(f_+ - G^0(E)) = \delta(\epsilon - \epsilon_A), \quad f_-^2 \delta(f_- - G^0(E)) = \delta(\epsilon - \epsilon_B), \quad (42)$$

$$G^0(E) = \frac{A+B}{E+E_{ab}} + \frac{C+D}{E+E_{cd}},$$

где

$$\epsilon_A = \epsilon_0 + \frac{(E+E_{ab})(E+E_{cd})}{(A+B)(E+E_{cd}) + (C+D)(E+E_{ab})}, \quad (43)$$

$$\epsilon_B = -\epsilon_0 + \frac{(E+E_{ab})(E+E_{cd})}{(A+B)(E+E_{cd}) + (C+D)(E+E_{ab})},$$

получим окончательный результат:

$$\rho^{11}(E) = \frac{1}{2} [\rho_0(\epsilon_A) + \rho_0(\epsilon_B)], \quad (44)$$

где параметры уравнения определены формулами (43) и (29).

В случае половинного заполнения, когда химический потенциал μ имеет значение μ_0 , определяемое в (7), получаем

$$E_2 = E_{12} = -\frac{1}{2}(3U - 5J), \quad E_9 = -2U + 2J, \quad (45)$$

$$E_{ab} = -E_{cd} = E_2 - E_9 = \frac{1}{2}(U + J),$$

$$A = D = B e^{-\beta(U/2 + J/2)}, \quad C = B = \frac{e^{-\beta E_9}}{Z_0},$$

и, следовательно, имеем

$$(A+B)E_{cd} + (C+D)E_{ab} = 0, \quad (46)$$

поэтому аргумент функции $\rho_0(\epsilon)$ из (44) равен $-\infty$, что находится вне интервала $(-W/2, W/2)$, в котором функция отлична от нуля. Здесь W – ширина энергетической зоны $\epsilon(\vec{k})$.

Таким образом, в случае половинного заполнения приближением цепочечных диаграмм для пропагатора можно объяснить только появление диэлектрического состояния вырожденной системы. Более плодотворное обсуждение перехода Мотта–Хаббарда может быть получено с учетом неприводимых диаграмм пропагатора.

6. ВЫВОДЫ

В настоящей работе нами сформулирована диаграммная теория для двухорбитально вырожденной модели Хаббарда путем введения обобщенной теоремы Вика для статистических средних хронологического произведения электронных операторов. Определена корреляционная функция, которая учитывает существование НФГ

(кумулянтов Кубо), и сформулировано уравнение типа уравнения Дайсона для орбитально вырожденной системы. Рассмотрено простейшее приближение цепочечных диаграмм для пропагатора и получена спектральная функция. Доказано, что в этом приближении частный случай половинного заполнения электронных энергетических зон системы соответствует только диэлектрическому состоянию. Мы хотели бы отметить, что аналогичный результат известен для невырожденной модели Хаббарда в первом приближении Хаббарда, когда спектральная функция равна нулевой функции плотности состояний и имеет вид $\rho_0((E^2 - \mu^2)/E)$ [21].

Благодарности. Авторы выражают благодарность С. Кожокару и Н. М. Плакиде за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] В. Л. Бонч-Бруевич, С. В. Тябликов, *Метод функций Грина в статистической механике*, Физматлит, М., 1961.
- [2] С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, М., 1975.
- [3] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **276**:1365 (1963), 238–257; **281**:1386 (1964), 401–419; **285**:1403 (1965), 542–560.
- [4] К. И. Кугель Д. И. Хомский, *УФН*, **136**:4 (1982), 621–664.
- [5] A. M. Oleś, *Phys. Rev. B*, **28**:1 (1983), 327–339.
- [6] A. M. Oleś, M. Cuoco, N. B. Perkins, “Magnetic and orbital ordering in cuprates and manganites”, *Lectures on the Physics of Highly Correlated Electron Systems IV: Fourth Training Course in the Physics of Correlated Electron Systems and High-Tc Superconductors* (Salerno, Italy, 11–22 October 1999), AIP Conference Proceedings, **527**, ed. F. Mancini, AIP, Melville, New York, 2000, 226–380.
- [7] K. Kubo, D. S. Hirashima, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **68**:7 (1999), 2317–2325.
- [8] G. Jackeli, N. B. Perkins, N. M. Plakida, *Phys. Rev. B*, **62**:1 (2000), 372–378, arXiv: cond-mat/9910391.
- [9] L. Didukh, Yu. Dovhopaty, V. Hankevych, *Phys. Rev. B*, **61**:12 (2000), 7893–7908, arXiv: cond-mat/9907037.
- [10] A. Koga, Y. Imai, N. Kawakami, *Phys. Rev. B*, **66**:16 (2002), 165107, 6 pp., arXiv: cond-mat/0206064.
- [11] K. Inaba, A. Koga, S. Suga, N. Kawakami, *Phys. Rev. B*, **72**:8 (2005), 085112, 7 pp., arXiv: cond-mat/0506150.
- [12] S. Cojocaru, R. Citro, M. Marinaro, *J. Phys. Cond. Matter*, **17**:7 (2005), 1113–1126.
- [13] Yun Song, Liang-Jian Zou, *Phys. Rev. B*, **72**:8 (2005), 085114, 7 pp.
- [14] K. Inaba, A. Koga, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **76** (2007), 094712, arXiv: 0706.3948.
- [15] K. Kubo, *Phys. Rev. B*, **75**:22 (2007), 224509, 8 pp., arXiv: cond-mat/0702624.
- [16] М. И. Владимир, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **82**:3 (1990), 428–437.
- [17] С. И. Вакару, М. И. Владимир, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **85**:2 (1990), 248–257.
- [18] Н. Н. Боголюбов, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **86**:1 (1991), 16–30.
- [19] Н. Н. Боголюбов, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **92**:2 (1992), 181–190.
- [20] V. A. Moskalenko, P. Entel, D. F. Digor, *Phys. Rev. B*, **59**:1 (1999), 619–635.
- [21] Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрыбин, *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем*, Наука, М., 1987.