Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. А. Москаленко, Л. А. Дохотару, Д. Ф. Дигор,
И. Д. Чеботарь, Диаграммная теория двукратно вы-
рожденной примесной модели Андерсона, *ТМФ*, 2014,
том 178, номер 1, 131–146

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8501>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru под-
разумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.209.52.79

26 апреля 2023 г., 17:22:36

© 2014 г.

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

ДИАГРАММНАЯ ТЕОРИЯ ДВУКРАТНО ВЫРОЖДЕННОЙ ПРИМЕСНОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА

Разработана диаграммная техника для исследования двукратно вырожденной модели Андерсона в нормальном состоянии с учетом сильных электронных корреляций d -электронов примесного иона. Обсуждаются свойства модели примесных d -электронов Слэтера–Канамори. После нахождения собственных векторов и значений энергии всех 16 локализованных состояний определен одночастичный локальный пропагатор. Построена теория возмущений в окрестности атомного предела примесного иона и получено уравнение типа уравнения Дайсона, устанавливающее связь между пропагатором примесного электрона и нормальной корреляционной функцией. В результате суммирования бесконечного ряда лестничных диаграмм получена аппроксимация для корреляционной функции.

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

DOI: 10.4213/tmf8501

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение сильно коррелированных электронных систем играет центральную роль в современной теории конденсированного состояния. Сущность задачи заключается в конкуренции между стремлением к локализации, обусловленной кулоновским отталкиванием d -электронов, и тенденцией к коллективизации, возникающей в результате гибридизации электронных орбиталей.

^{*}Институт прикладной физики, АН Молдовы, Кишинев, Молдова.
E-mail: statphys@asm.md

[†]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

Орбитальное вырождение можно полностью исключить в твердых телах, но во многих из них, например в новых сверхпроводниках, основанных на материалах Fe и AnC_{60} , орбитальное вырождение не исключено, а орбитальные эффекты являются значимыми.

Благодаря сильным электронным корреляциям во многих материалах с открытыми d - или f -оболочками реализуется переход металл–диэлектрик типа Мотта–Хаббарда.

С развитием динамической теории среднего поля (ДТСП) [1] в последние десятилетия был достигнут значительный прогресс в понимании физики перехода металл–диэлектрик Мотта–Хаббарда. В упомянутой статье изучение данного перехода реализуется в рамках ДТСП при $T = 0$ с использованием метода численной ренормгруппы Вильсона.

Роль хундовского взаимодействия I_H была изучена в рамках модели магнитных примесей и квантовых точек [2]. Это привело к различным предсказаниям относительно поведения в этих системах температуры Кондо как функции от I_H . Этот вопрос исследуется путем применения к некоторым различным моделям комбинированного метода численной ренормгруппы и перенормированной теории возмущений.

В работах [3], [4] была исследована фазовая диаграмма примесной модели Андерсона (ПМА) с использованием метода численной ренормгруппы Вильсона. Было показано, что физическое поведение ПМА в окрестности нетривиальной неподвижной точки напоминает поведение двухпримесной модели Кондо. Эта неподвижная точка находится в непосредственной близости к переходу металл–диэлектрик при изменении параметра правила Хунда.

Хорошо известно, что орбитальное вырождение играет существенную роль в переходе металл–диэлектрик. В настоящей работе мы изучаем роль хундовской связи в орбитально вырожденной модели, используя диаграммный подход и учитывая внутриатомное кулоновское взаимодействие двух электронов с противоположными спинами на одной и той же или на различных орбиталях наряду с внутриатомным обменом.

Исследование основывается на ранее развитой нами диаграммной теории для сильно коррелированных электронных систем для невырожденной [5]–[13] и вырожденной [14] моделей.

Наше приближение содержит только локальные собственно-энергетические члены. Известно, что такое приближение вполне оправданно для большого координационного числа. Нелокальные члены [15], соответствующие более высоким приближениям по обратному координационному числу, здесь опускаются.

Работа имеет следующую структуру. В разделе 1 мы описываем двукратно вырожденную ПМА. Локальные свойства модели обсуждаются в разделе 2. Теория возмущений на основе атомного предела примесного иона сформулирована в разделе 3, где мы также рассматриваем процессы делокализации и перенормировки динамических величин. В разделе 4 вычисляется простейшая неприводимая функция Грина. В разделе 5 обсуждаются основные уравнения, а раздел 6 содержит заключение.

Гамильтониан двукратно вырожденной ПМА включает в себя две компоненты: с одной стороны, электроны проводимости и сильно коррелированные локализован-

ные электроны, с другой – член, описывающий их гибридизацию [16]–[19]:

$$H = H^0 + H_{\text{int}}, \quad (1)$$

$$H^0 = H_c^0 + H_d^L, \quad (2)$$

$$H_c^0 = \sum_{\vec{k}l\sigma} \epsilon_l(\vec{k}) C_{\vec{k}l\sigma}^+ C_{\vec{k}l\sigma}, \quad (3)$$

$$H_d^L = \sum_{l,\sigma} \epsilon^d d_{l\sigma}^+ d_{l\sigma} + U \sum_l n_{l\uparrow} n_{l\downarrow} + U' n_1 n_2 + I_H \sum_{\sigma\sigma'} d_{1\sigma}^+ d_{2\sigma}^+ d_{1\sigma'} d_{2\sigma'} + \\ + I_H' (d_{1\uparrow}^+ d_{1\downarrow}^+ d_{2\downarrow} d_{2\uparrow} + \text{э.с.}), \quad (4)$$

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}l\sigma} (V_{\vec{k}l} d_{l\sigma}^+ C_{\vec{k}l\sigma} + V_{\vec{k}l}^* C_{\vec{k}l\sigma}^+ d_{l\sigma}), \quad (5)$$

где H_d^L – локальный гамильтониан в стандартной форме Слэтера–Канамори [17]–[19], $C_{\vec{k}l\sigma}$ – оператор уничтожения электрона проводимости с импульсом $\vec{k}$, орбитальным числом $l = 1, 2$ и спином $\sigma = \pm 1$ ($\uparrow, \downarrow$), $d_{l\sigma}$ – оператор локализованного d -электрона. Электрон проводимости в l -м орбитальном состоянии перекрывается только с локализованным электроном, находящимся в таком же орбитальном состоянии, $n_{l\sigma} = d_{l\sigma}^+ d_{l\sigma}$, $n_l = \sum_{\sigma} n_{l\sigma}$, $V_{\vec{k}l}$ – матричный элемент гибридизации, U – кулоновское отталкивание между d -электронами одного и того же орбитального состояния, а U' – кулоновское отталкивание между электронами различных орбитальных состояний, I_H – константа хундовского взаимодействия и членов парных перескоков, $\epsilon_l(\vec{k})$ – зонная дисперсия, ϵ^d – энергия примесного иона, исчисляемая от уровня химического потенциала μ , N – число узлов решетки.

В дальнейшем будем считать, что симметрия решетки такова, что выполняется соотношение [20]

$$U' = U - 2I_H, \quad I_H' = I_H. \quad (6)$$

Кулоновское взаимодействие слишком велико, для того чтобы рассматривать его как возмущение, и должно быть включено в нулевой гамильтониан H^0 . Член гибридизации (5) рассматривается как возмущение системы. В дальнейшем основные идеи, предложенные для невырожденных сильно коррелированных систем, обобщаются на случай орбитального вырождения. Такое обобщение было рассмотрено, например, для двукратно вырожденной модели Хаббарда [14]. Как известно, новыми элементами этой теории возмущений сильно коррелированных систем являются неприводимые функции Грина, содержащие все зарядовые, спиновые и парные квантовые флуктуации.

2. ЛОКАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА

Главное приближение ПМА включает в себя описываемые гамильтонианом H_0 свободные электроны проводимости, а также сильно взаимодействующие локализованные электроны. Локальная часть гамильтониана H_0^L может быть приведена к диагональному виду с помощью операторов Хаббарда $\chi^{mn} = |m\rangle\langle n|$, где $|m\rangle$ – собственный вектор оператора H_d^L [5].

Поскольку орбитальное квантовое число l принимает два значения $l = 1, 2$, общее число локальных квантовых состояний равно 16.

Собственные векторы оператора H_d^I имеют следующий вид. Первое квантовое состояние $|1\rangle$ – вакуумное состояние $|0\rangle$ с энергией $E_1 = 0$, четыре одночастичных состояния со спином $S = 1/2$ и $S_z = \pm 1/2$:

$$|2\rangle = d_{1\uparrow}^+|0\rangle, \quad |3\rangle = d_{2\uparrow}^+|0\rangle, \quad |4\rangle = d_{1\downarrow}^+|0\rangle, \quad |5\rangle = d_{2\downarrow}^+|0\rangle.$$

Энергии этих состояний равны $E_2 = E_3 = E_4 = E_5 = \epsilon_d$.

Двухчастичных состояний имеется шесть, три из них – синглетные состояния со спином $S = 0$, а другие три – триплетные состояния $S = 1$ и $S_z = -1, 0, 1$:

$$\begin{aligned} |6\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(d_{1\uparrow}^+d_{1\downarrow}^+ - d_{2\uparrow}^+d_{2\downarrow}^+)|0\rangle, & |7\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(d_{1\uparrow}^+d_{1\downarrow}^+ + d_{2\uparrow}^+d_{2\downarrow}^+)|0\rangle, \\ |8\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(d_{1\uparrow}^+d_{2\downarrow}^+ - d_{1\downarrow}^+d_{2\uparrow}^+)|0\rangle, & |9\rangle &= d_{1\uparrow}^+d_{2\uparrow}^+|0\rangle, \\ |10\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(d_{1\uparrow}^+d_{2\downarrow}^+ + d_{1\downarrow}^+d_{2\uparrow}^+)|0\rangle, & |11\rangle &= d_{1\downarrow}^+d_{2\downarrow}^+|0\rangle. \end{aligned}$$

Собственные значения этих квантовых состояний следующие:

$$\begin{aligned} E_6 &= 2\epsilon_d + U - I'_H, & E_7 &= 2\epsilon_d + U + I'_H, & E_8 &= 2\epsilon_d + U' + I_H, \\ E_9 &= E_{10} = E_{11} = 2\epsilon_d + U' - I_H. \end{aligned}$$

Следующие четыре состояния – состояния из трех частиц:

$$\begin{aligned} |12\rangle &= d_{1\uparrow}^+d_{1\downarrow}^+d_{2\uparrow}^+|0\rangle, & |13\rangle &= d_{2\uparrow}^+d_{2\downarrow}^+d_{1\uparrow}^+|0\rangle, \\ |14\rangle &= d_{1\uparrow}^+d_{1\downarrow}^+d_{2\downarrow}^+|0\rangle, & |15\rangle &= d_{2\uparrow}^+d_{2\downarrow}^+d_{1\downarrow}^+|0\rangle, \end{aligned}$$

со значениями энергий $E_{12} = E_{13} = E_{14} = E_{15} = 3\epsilon_d + U + 2U' - I_H$.

Последнее локальное состояние – это синглет:

$$|16\rangle = d_{1\uparrow}^+d_{1\downarrow}^+d_{2\uparrow}^+d_{2\downarrow}^+|0\rangle$$

со значением энергии $E_{16} = 4\epsilon_d + 2U + 4U' - 2I_H$.

В случае выполнения равенств (6) получаем более простые формы:

$$\begin{aligned} E_6 &= E_8 = 2\epsilon_d + U - I_H, & E_7 &= 2\epsilon_d + U + I_H, & E_9 &= 2\epsilon_d + U - 3I_H, \\ E_{12} &= 3\epsilon_d + 3U - 5I_H, & E_{16} &= 4\epsilon_d + 6U - 10I_H. \end{aligned}$$

Триплетные состояния $|9\rangle$, $|10\rangle$ и $|11\rangle$ имеют самые низкие значения энергии.

Перечисленные выше квантовые состояния позволяют написать операторы Хаббарда χ^{mn} и получить соотношение для примесных фермионных операторов [14]:

$$\begin{aligned} d_{l\sigma}^+ &= \chi^{2+l-\sigma,1} + \frac{\sigma}{\sqrt{2}}[(-1)^{l+1}\chi^{6,2+l+\sigma} + \chi^{7,2+l+\sigma}] + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2}}[\sigma\chi^{8,5-l+\sigma} + (-1)^{l+1}\chi^{10,5-l+\sigma}] + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2}}[-\chi^{12+l-\sigma,8} + \sigma(-1)^{l+1}\chi^{12+l-\sigma,10}] + \end{aligned}$$

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

Уравнение (7) позволяет вычислять все локальные динамические величины. Например, квантовое число электронов имеет вид

$$\begin{aligned}
 n_{l\sigma} = & \chi^{2+l-\sigma,2+l-\sigma} + \frac{1}{2} [\chi^{6,6} + (-1)^{l+1} \chi^{6,7} + (-1)^{l+1} \chi^{7,6} + X^{7,7}] + \\
 & + \frac{1}{2} [\chi^{8,8} + \sigma(-1)^{l+1} \chi^{8,10} + \sigma(-1)^{l+1} \chi^{10,8} + \chi^{10,10}] + \chi^{10-\sigma,10-\sigma} + \\
 & + \chi^{12+l-\sigma,12+l-\sigma} + \chi^{12+l+\sigma,12+l+\sigma} + \chi^{15-l-\sigma,15-l-\sigma} + \chi^{16,16} \quad (8)
 \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned}
 n_{l\uparrow} - n_{l\downarrow} = & \chi^{1+l,1+l} - \chi^{3+l,3+l} + (-1)^{l+1} [\chi^{8,10} + \chi^{10,8}] + \\
 & + \chi^{9,9} - \chi^{11,11} + \chi^{14-l,14-l} - \chi^{16-l,16-l}. \quad (9)
 \end{aligned}$$

Для зависящей от τ величины $A(\tau) = e^{\tau H_0} A e^{-\tau H_0}$ имеем уравнение

$$\begin{aligned}
 n_{l\uparrow}(\tau) - n_{l\downarrow}(\tau) = & \chi^{1+l,1+l} - \chi^{3+l,3+l} + (-1)^{l+1} [\chi^{8,10} e^{\tau(E_8-E_{10})} + \\
 & + \chi^{10,8} e^{\tau(E_{10}-E_8)}] + \chi^{9,9} - \chi^{11,11} + \chi^{14-l,14-l} - \chi^{16-l,16-l}. \quad (10)
 \end{aligned}$$

Связь между величинами с различными орбитальными числами определяется уравнениями ($l = 1, 2$)

$$\begin{aligned}
 (n_{l\uparrow}(\tau) - n_{l\downarrow}(\tau))(n_{l'\uparrow}(0) - n_{l'\downarrow}(0)) = & \delta_{l,l'} [\chi^{1+l,1+l} + \chi^{3+l,3+l} + \chi^{14-l,14-l} + \\
 & + \chi^{16-l,16-l}] + (-1)^{l+l'} [\chi^{8,8} e^{\tau(E_8-E_{10})} + \chi^{10,10} e^{\tau(E_{10}-E_8)}] + \chi^{9,9} + \chi^{11,11}, \quad (11)
 \end{aligned}$$

$$\sum_{l,l'} (n_{l\uparrow}(\tau) - n_{l\downarrow}(\tau))(n_{l'\uparrow}(0) - n_{l'\downarrow}(0)) = \frac{4}{Z_0} (e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_{12}} + 2e^{-\beta E_9}). \quad (12)$$

В специальном случае $l = 1, l' = 2$ имеем соотношение

$$\begin{aligned}
 (n_{1\uparrow}(\tau) - n_{1\downarrow}(\tau))(n_{2\uparrow}(0) - n_{2\downarrow}(0)) = \\
 = -[\chi^{8,8} e^{\tau(E_8-E_{10})} + \chi^{10,10} e^{\tau(E_{10}-E_8)}] + \chi^{9,9} + \chi^{11,11}, \quad (13)
 \end{aligned}$$

которое представляет собой восприимчивость d -электронов [17]–[19].

Определим теперь одночастичную мадубаровскую функцию локализованных d -электронов:

$$g^0(l\sigma\tau, l'\sigma'\tau') = g_{l\sigma, l'\sigma'}^0(\tau - \tau') = -\langle T d_{l\sigma}(\tau) \bar{d}_{l'\sigma'}(\tau') \rangle_0, \quad (14)$$

где $d_{l\sigma}(\tau) = e^{\tau H_0} d_{l\sigma} e^{-\tau H_0}$, $\bar{d}_{l\sigma}(\tau) = e^{\tau H_0} d_{l\sigma}^+ e^{-\tau H_0}$.

Фурье-компоненты этой функции Грина имеют вид

$$g^{(0)}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} g^{(0)}(i\omega_n). \quad (15)$$

Воспользовавшись формулой (8) и свойствами операторов Хаббарда, получим уравнение для локализованной функции:

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

где Z_0 – статистическая сумма в атомном пределе

$$Z_0 = e^{-\beta E_1} + 4e^{-\beta E_2} + 2e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_7} + 3e^{-\beta E_9} + 4e^{-\beta E_{12}} + e^{-\beta E_{16}}. \quad (17)$$

Спектральная функция примесных d -электронов в локальном приближении равна

$$A^{(0)}(E) = -2 \operatorname{Im} g^0(E + i\delta), \quad (18)$$

где $g^0(E + i\delta)$ и $\delta = +0$ – аналитическое продолжение мацубаровской запаздывающей функции Грина.

Используя (14), получим

$$A^{(0)}(E) = \frac{2\pi}{Z_0} \left\{ (e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2})\delta(E + E_1 - E_2) + (e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_6})\delta(E + E_2 - E_6) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2}(e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_7})\delta(E + E_2 - E_7) + \frac{3}{2}(e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_9})\delta(E + E_2 - E_9) + \right. \\ \left. + (e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_{12}})\delta(E + E_6 - E_{12}) + \frac{1}{2}(e^{-\beta E_7} + e^{-\beta E_{12}})\delta(E + E_7 - E_{12}) + \right. \\ \left. + \frac{3}{2}(e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_{12}})\delta(E + E_9 - E_{12}) + (e^{-\beta E_{12}} + e^{-\beta E_{16}})\delta(E + E_{12} - E_{16}) \right\} \quad (19)$$

со свойством

$$\int_{-\infty}^{\infty} A^{(0)}(E) dE = 2\pi. \quad (20)$$

3. ПРОЦЕСС ДЕЛОКАЛИЗАЦИИ

Воспользуемся теорией возмущений, развитой ранее для сильно коррелированных электронных систем в невырожденной [5]–[13] и вырожденной [14] формах. Рассмотрим процесс перенормировки функции Грина, обусловленный внутриорбитальными и межорбитальными переворотами туннельных электронов.

Полная мацубаровская функция Грина в представлении взаимодействия для примесных электронов и электронов проводимости имеет вид

$$G(\vec{k}l\sigma\tau|\vec{k}'l'\sigma'\tau') = -\langle TC_{\vec{k}l\sigma}(\tau)\bar{C}_{\vec{k}'l'\sigma'}(\tau')U(\beta)\rangle_0^c, \\ g(l\sigma\tau|l'\sigma'\tau') = -\langle Td_{l\sigma}(\tau)\bar{d}_{l'\sigma'}(\tau')U(\beta)\rangle_0^c, \quad (21)$$

где τ и τ' соответствуют мнимому времени с $0 \leq \tau \leq \beta$, β – обратная температура, T – оператор хронологического упорядочения. Оператор эволюции имеет вид

$$U(\beta) = T \exp\left(-\int_0^\beta H_{\text{int}}(\tau) d\tau\right). \quad (22)$$

Рис. 1. Уравнение типа Дайсона для функции Грина примесных электронов.

Статистическое усреднение в (21) проводится с помощью матрицы плотности нулевого порядка примесных электронов и электронов проводимости. Индекс “с” означает связанные диаграммы.

В нулевом приближении имеем

$$\begin{aligned}
 H_0^L &= \sum_{n=1}^{16} E_n \chi^{nn}, \quad \sum_{n=1}^{16} \chi^{nn} = 1, \\
 G_{l,\sigma,l',\sigma'}^{(0)}(\vec{k}\vec{k}'|\tau - \tau') &= \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{l,l'} \delta_{\sigma,\sigma'} G_{l,\sigma}^{(0)}(\vec{k}|\tau - \tau'), \\
 G_{l,\sigma}^{(0)}(\vec{k}|i\omega_n) &= \frac{1}{i\omega_n - \epsilon(\vec{k})}, \quad \omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta},
 \end{aligned} \tag{23}$$

где $g^{(0)}(i\omega_n)$ определяется формулой (16).

Гибридизация между электронами проводимости и примесными d -электронами приводит к перенормировке их пропагаторов. Поскольку число электронов проводимости N много больше единицы (один примесный атом), эффект от примесного атома на зону проводимости имеет порядок $1/N$.

Перенормированный пропагатор электронов проводимости равен

$$\begin{aligned}
 G_{l,\sigma,l',\sigma'}(\vec{k}\vec{k}'|i\omega_n) &= \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{l,l'} \delta_{\sigma,\sigma'} G_{l,\sigma}^{(0)}(\vec{k}|i\omega_n) + \\
 &+ \frac{V_{\vec{k}l}^* V_{\vec{k}'l'}}{N} G_{l,\sigma}^{(0)}(\vec{k}|i\omega_n) g_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) G_{l',\sigma'}^{(0)}(\vec{k}'|i\omega_n),
 \end{aligned} \tag{24}$$

где $g_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n)$ – полный пропагатор примесных электронов.

Согласно (24) примесные электроны изменяют свойства электронов проводимости пропорционально $1/N$, где N – число атомов решетки.

Уравнение для полной функции примесных электронов g имеет диаграммное представление, изображенное на рис. 1, где двойные штриховые линии со стрелками изображают перенормированный пропагатор локализованных электронов g , а сплошные жирные линии представляют функцию электронов проводимости G^0 . Функция V_1 означает $V_{\vec{k}_1 l_1}$, предполагается суммирование по повторяющимся индексам, Λ – корреляционная функция, содержащая сильно связанные неприводимые диаграммы.

Структура среднего участка последней диаграммы, представленной на рис. 1, задается следующим уравнением:

$$\begin{aligned}
 \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_2} \frac{V_{\vec{k}_1 l_1}^* V_{\vec{k}_2 l_2}}{N} G_{l_1, \sigma_1, l_2, \sigma_2}^0(\vec{k}_1 \vec{k}_2 | i\omega_n) &= \\
 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1} |V_{\vec{k}_1 l_1}|^2 G_{l_1, \sigma_1}^{(0)}(\vec{k}_1 | i\omega_n) \delta_{l_1, l_2} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} &= \delta_{l_1, l_2} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \mathcal{G}_{l_1, \sigma_1}^{(0)}(i\omega_n),
 \end{aligned} \tag{25}$$

Рис. 2. Простейший пример корреляционной функции Λ .

где

$$\mathcal{G}_{l,\sigma}^{(0)}(i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} |V_{\vec{k}l}|^2 G_{l,\sigma}^{(0)}(\vec{k}|i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}l}|^2}{i\omega_n - \epsilon(\vec{k})}. \quad (26)$$

Перенормированная величина имеет вид

$$\mathcal{G}_{l,\sigma,l',\sigma'}(i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}l} V_{\vec{k}'l'}^* G_{l,\sigma,l',\sigma'}(\vec{k}\vec{k}'|i\omega). \quad (27)$$

Простейший пример таких диаграмм представлен на рис. 2. Аналитическая форма уравнения, изображенного на рис. 1, имеет следующий вид:

$$g_{l,\sigma,l',\sigma'}(i\omega_n) = \Lambda_{l,\sigma,l',\sigma'}(i\omega_n) + \Lambda_{l,\sigma,l_1,\sigma_1}(i\omega_n) \mathcal{G}_{l_1,\sigma_1}^{(0)}(i\omega_n) g_{l_1,\sigma_1,l',\sigma'}(i\omega_n). \quad (28)$$

Это уравнение позволяет нам обсудить нормальное состояние системы на парамагнитном фоне. В этом случае мы пользуемся новыми обозначениями ($\bar{\sigma} = -\sigma$):

$$\begin{aligned} g_{l,\sigma,l',\sigma'}(i\omega_n) &= \delta_{\sigma,\sigma'} g_{\sigma}^{ll'}(i\omega_n), \\ \Lambda_{l,\sigma,l',\sigma'}(i\omega_n) &= \delta_{\sigma,\sigma'} \Lambda_{\sigma}^{ll'}(i\omega_n), \\ g_{l,\sigma}^{(0)}(i\omega_n) &= g_{\sigma}^{(0)l}(i\omega_n). \end{aligned} \quad (29)$$

С этими определениями получим

$$g_{\sigma}^{ll'}(i\omega_n) = \Lambda_{\sigma}^{ll'}(i\omega_n) + \Lambda_{\sigma}^{ll_1}(i\omega_n) \mathcal{G}_{\sigma}^{l_1(0)}(i\omega_n) g_{\sigma}^{l_1l'}(i\omega_n). \quad (30)$$

В отсутствие орбитального вырождения эта система уравнений имеет известное решение [13]:

$$\begin{aligned} g_{\sigma}(i\omega_n) &= \frac{\Lambda_{\sigma}(i\omega_n) - \mathcal{G}_{\bar{\sigma}}^{(0)}(-i\omega_n) \Lambda_{\sigma}(i\omega_n) \Lambda_{\bar{\sigma}}(-i\omega_n)}{d_{\sigma}(i\omega_n)}, \\ d_{\sigma}(i\omega_n) &= (1 - \Lambda_{\sigma}(i\omega_n) \mathcal{G}_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n))(1 - \Lambda_{\bar{\sigma}}(-i\omega_n) \mathcal{G}_{\bar{\sigma}}^{(0)}(-i\omega_n)). \end{aligned} \quad (31)$$

Решение уравнения (30) для нормального состояния вырожденной системы имеет вид

$$\begin{aligned} g_{\sigma}^{11}(i\omega_n) &= \frac{\Lambda_{\sigma}^{11}(i\omega_n) - \mathcal{G}_{\sigma}^{2(0)}(i\omega_n) [\Lambda_{\sigma}^{11}(i\omega_n) \Lambda_{\sigma}^{22}(i\omega_n) - \Lambda_{\sigma}^{12}(i\omega_n) \Lambda_{\sigma}^{21}(i\omega_n)]}{d_{\sigma}(i\omega_n)}, \\ g_{\sigma}^{21}(i\omega_n) &= \frac{\Lambda_{\sigma}^{21}(i\omega_n)}{d_{\sigma}(i\omega_n)}, \\ d_{\sigma}(i\omega_n) &= (1 - \mathcal{G}_{\sigma}^{1(0)}(i\omega_n) \Lambda_{\sigma}^{11}(i\omega_n))(1 - \mathcal{G}_{\sigma}^{2(0)}(i\omega_n) \Lambda_{\sigma}^{22}(i\omega_n)) - \\ &\quad - \mathcal{G}_{\sigma}^{1(0)}(i\omega_n) \mathcal{G}_{\sigma}^{2(0)}(i\omega_n) \Lambda_{\sigma}^{12}(i\omega_n) \Lambda_{\sigma}^{21}(i\omega_n). \end{aligned} \quad (32)$$

Остальные две функции получаются заменой индексов $1 \leftrightarrow 2$.

Рис. 3. Главное приближение для корреляционной функции. Сплошные двойные линии со стрелками изображают полную функцию Грина электронов проводимости, прямоугольники – неприводимые функции Грина примесных электронов.

Это уравнения типа уравнений Дайсона. Они определяют функции Грина через корреляционную функцию $\Lambda = g^{(0)} + Z$. Последнее соотношение может быть выражено только в форме бесконечного диаграммного ряда, поскольку точного решения не существует.

Пример эффективного суммирования диаграмм корреляционной функции Z представлен на рис. 3. Диаграмма на рис. 3 отличается от диаграммы на рис. 2 присутствием в ней полной функции Грина электронов проводимости вместо нулевой функции Грина на рис. 2. Это отличие является результатом лестничного суммирования главных диаграмм.

Это приближение представляет собой обобщение приближения случайных фаз теории возмущений слабой связи.

4. КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ

Главное приближение основывается на вычислении простейшей корреляционной функции нормального состояния с целью установления ее зависимости от спина и орбитальных квантовых чисел.

Простейшая корреляционная функция определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} G_2^{\text{irr}}[1, 2|\bar{3}, \bar{4}] &= g_2^{(0)}(1, 2|\bar{3}, \bar{4}) - g_1^{(0)}(1|\bar{4})g_1^{(0)}(2|\bar{3}) + g_1^{(0)}(1|\bar{3})g_1^{(0)}(2|\bar{4}), \\ g_2^{(0)}(1, 2|\bar{3}, \bar{4}) &= \langle T d_1 d_2 \bar{d}_3 \bar{d}_4 \rangle_0, \quad g_1^{(0)}(1|\bar{4}) = -\langle T d_1 \bar{d}_4 \rangle_0, \quad 1 = (l_1, \sigma_1, \tau_1), \end{aligned} \quad (33)$$

с одночастичными или двухчастичными нулевыми функциями Грина локализованных электронов.

Благодаря присутствию членов кулоновского взаимодействия в гамильтониане нулевого порядка правая часть уравнения (33) не равна нулю и содержит зарядовые, спиновые и парные флуктуации.

Двухчастичные функции Грина $g_2^{(0)}$ представляют собой сумму из $4!$ членов упорядоченных по времени произведений электронных операторов. Статистическое среднее этих величин вычисляется с использованием представления операторов Хаббарда.

Нам необходимо представление Фурье этих функций:

$$\begin{aligned} G_2^{\text{irr}}[l_1 \sigma_1 \tau_1; l_2 \sigma_2 \tau_2 | l_3 \sigma_3 \tau_3; l_4 \sigma_4 \tau_4] &= \frac{1}{\beta^4} \times \\ &\times \sum_{\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4} G_2^{\text{irr}}[l_1 \sigma_1 i\omega_1; l_2 \sigma_2 i\omega_2 | l_3 \sigma_3 i\omega_3; l_4 \sigma_4 i\omega_4] e^{-i\omega_1 \tau_1 - i\omega_2 \tau_2 + i\omega_3 \tau_3 + i\omega_4 \tau_4}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
g_1^{(0)}(l_1\sigma_1\tau_1|l_2\sigma_2\tau_2) &= \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} g_1^{(0)}(l_1\sigma_1; l_2\sigma_2|i\omega_1) e^{-i\omega_1(\tau_1-\tau_2)}, \\
g_1^{(0)}(l_1\sigma_1; l_2\sigma_2|i\omega_1) &\approx \delta_{l_1 l_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} m(i\omega_1) = \\
&= \frac{\delta_{l_1 l_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2}}{2} \left(\frac{1}{i\omega_1 + E_2 - E_9} + \frac{1}{i\omega_1 + E_9 - E_{12}} \right),
\end{aligned} \tag{34}$$

$$\begin{aligned}
G_2^{\text{irr}}[l_1\sigma_1 i\omega_1; l_2\sigma_2 i\omega_2 | l_3\sigma_3 i\omega_3; l_4\sigma_4 i\omega_4] &= g_2^{(0)}[l_1\sigma_1 i\omega_1; l_2\sigma_2 i\omega_2 | l_3\sigma_3 i\omega_3; l_4\sigma_4 i\omega_4] - \\
&- \beta\delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4) [\beta\delta(\omega_1 - \omega_4) g_1^{(0)}(l_1\sigma_1; l_4\sigma_4|i\omega_1) g_1^{(0)}(l_2\sigma_2; l_3\sigma_3|i\omega_2) - \\
&- \beta\delta(\omega_1 - \omega_3) g_1^{(0)}(l_1\sigma_1; l_3\sigma_3|i\omega_1) g_1^{(0)}(l_2\sigma_2; l_4\sigma_4|i\omega_2)].
\end{aligned} \tag{35}$$

Имеет место закон сохранения частот

$$\begin{aligned}
G_2^{\text{irr}}[l_1\sigma_1 i\omega_1; l_2\sigma_2 i\omega_2 | l_3\sigma_3 i\omega_3; l_4\sigma_4 i\omega_4] &= \\
&= \beta\delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4) \tilde{G}_2^{\text{irr}}[l_1\sigma_1 i\omega_1; l_2\sigma_2 i\omega_2 | l_3\sigma_3 i\omega_3; l_4\sigma_4 i\omega_4].
\end{aligned} \tag{36}$$

Статистическое среднее хронологически упорядоченных произведений электронных операторов функции $g_2^{(0)}$ содержит различные статистические веса вида $e^{-\beta E_n}/Z_0$, где E_n – энергии, определенные в разделе 2. Поскольку E_9 – самая низкая энергия, ее статистический вес $e^{-\beta E_9}$ преобладает над другими, и поэтому учитываются только эти члены.

Принимая во внимание эти аргументы, используем приближенную величину (34) вместо первоначально точного уравнения (16) для нулевой функции Грина $g_{l,\sigma,l',\sigma'}^{(0)}$. Статистическая сумма нулевого порядка (17) для Z_0 аппроксимируется как $3e^{-\beta E_9}$.

Например, вклад в $g_2^{(0)}[l_1\sigma_1 i\omega_1; l_2\sigma_2 i\omega_2 | l_3\sigma_3 i\omega_3; l_4\sigma_4 i\omega_4]$ с временным порядком $\beta > \tau_1 > \tau_3 > \tau_2 > \tau_4 > 0$ и с статистическим весом $e^{-\beta E_9}$ имеет вид

$$\begin{aligned}
&- \delta_{l_1, l_3} \delta_{l_2, l_4} \left(\frac{1}{4} \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} + \delta_{\sigma_1, -\sigma_3} \delta_{\sigma_2, -\sigma_4} \delta_{\sigma_2, \sigma_3} + \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} \delta_{\sigma_1, \sigma_4} \delta_{\sigma_2, \sigma_3} \right) I_{1324}^{(1)} - \\
&- (\delta_{3-l_1-l_3, 0} \delta_{3-l_2-l_4, 0} + (-1)^{l_1+l_4} \delta_{l_1, l_3} \delta_{l_2, l_4}) \times \\
&\times \left(\frac{1}{4} \sigma_1 \sigma_4 \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} + \frac{1}{2} \delta_{\sigma_1, -\sigma_3} \delta_{\sigma_2, -\sigma_4} \delta_{\sigma_1, \sigma_4} \right) I_{1324}^{(2)} - (-1)^{l_1+l_4} \delta_{3-l_1-l_3, 0} \delta_{3-l_2-l_4, 0} \times \\
&\times \left(\frac{1}{4} \sigma_1 \sigma_4 \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} + \frac{1}{2} \delta_{\sigma_1, -\sigma_3} \delta_{\sigma_2, -\sigma_4} \delta_{\sigma_1, \sigma_4} \right) I_{1324}^{(3)},
\end{aligned} \tag{37}$$

где

$$\begin{aligned}
I_{1324}^{(1)} &= \frac{e^{-\beta E_9}}{Z_0} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_3 \int_0^{\tau_3} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_4 e^{(E_9 - E_{12})(\tau_1 + \tau_2 - \tau_3 - \tau_4)} \times \\
&\times e^{i\omega_1 \tau_1 + i\omega_2 \tau_2 - i\omega_3 \tau_3 - i\omega_4 \tau_4}, \\
I_{1324}^{(2)} &= \frac{e^{-\beta E_9}}{Z_0} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_3 \int_0^{\tau_3} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_4 e^{(E_9 - E_{12})(\tau_1 - \tau_4) + (E_6 - E_{12})(\tau_2 - \tau_3)} \times \\
&\times e^{i\omega_1 \tau_1 + i\omega_2 \tau_2 - i\omega_3 \tau_3 - i\omega_4 \tau_4},
\end{aligned} \tag{38}$$

$$I_{1324}^{(3)} = \frac{e^{-\beta E_9}}{Z_0} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_3 \int_0^{\tau_3} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_4 e^{(E_9 - E_{12})(\tau_1 - \tau_4) + (E_7 - E_{12})(\tau_2 - \tau_3)} \times \\ \times e^{i\omega_1 \tau_1 + i\omega_2 \tau_2 - i\omega_3 \tau_3 - i\omega_4 \tau_4}.$$

Вычисление этих интегралов приведено в приложении.

Вклад (60) (см. приложение) совместно с вкладом уравнения (35) и произведениями одночастичных функции Грина определяют главную часть корреляционной функции. Эта часть обозначается как $G_2^{(0)\text{irr}}$.

После ряда преобразований и суммирования различных вкладов получим главное приближение для корреляционной функции:

$$G_2^{(0)\text{irr}}[l_1\sigma_1 i\omega_1; l_2\sigma_2 i\omega_2 | l_3\sigma_3 i\omega_3; l_4\sigma_4 i\omega_4] = \frac{\beta}{6} \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4) p(i\omega_1) p(i\omega_2) \times \\ \times [\beta \delta(\omega_1 - \omega_4) \delta_{l_1, l_4} \delta_{l_2, l_3} (2\delta_{\sigma_1, -\sigma_4} \delta_{\sigma_2, -\sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} + \\ + \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_1, \sigma_4} \delta_{\sigma_2, \sigma_3} - \delta_{\sigma_1, \sigma_4} \delta_{\sigma_2, \sigma_3} \delta_{\sigma_3, -\sigma_1}) - \\ - \beta \delta(\omega_1 - \omega_3) \delta_{l_1, l_3} \delta_{l_2, l_4} (2\delta_{\sigma_1, -\sigma_3} \delta_{\sigma_2, -\sigma_4} \delta_{\sigma_2, \sigma_3} + \\ + \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} \delta_{\sigma_1, \sigma_4} - \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} \delta_{\sigma_4, -\sigma_1})], \quad (39)$$

где

$$p(i\omega) = \frac{1}{i\omega + E_2 - E_9} - \frac{1}{i\omega + E_9 - E_{12}}. \quad (40)$$

5. АНАЛИЗ ОСНОВНЫХ УРАВНЕНИЙ

В данном разделе приведем пример эффективного суммирования диаграмм, определяющих корреляционную функцию Λ (см. рис. 4).

Рис. 4. Основное уравнение для функции $\Lambda(x|x')$. Здесь x означает $(l, \sigma, i\omega)$. Одинарная штриховая линия изображает нулевую локальную одночастичную функцию Грина, а двойная штриховая – перенормированную. Сплошная линия изображает пропагатор электронов проводимости.

Обсудим сначала приближение для нулевой корреляционной функции $G_2^{(0)\text{irr}}$. Из соотношения (39) получим

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_1} \sum_{l_1, \sigma_1} \tilde{G}_2^{(0)\text{irr}}[l\sigma i\omega; l_1\sigma_1 i\omega_1 | l_1\sigma_1 i\omega_1; l'\sigma' i\omega] \mathcal{G}_{l_1, \sigma_1}^{(0)}(i\omega_1) = \\ = -\frac{1}{2} \delta_{\sigma, \sigma'} \delta_{l, l'} [p(i\omega)]^2 \mathcal{G}_{l, \sigma}^{(0)}(i\omega), \quad (41)$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{l_1, \sigma_1, l_2, \sigma_2} \tilde{G}_2^{(0)\text{irr}}[l\sigma i\omega; l_1\sigma_1 i\omega_1 | l_2\sigma_2 i\omega_1; l'\sigma' i\omega] \mathcal{G}_{l_2, \sigma_2}^{(0)}(i\omega_1) g_{l_2, \sigma_2, l_1, \sigma_1}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1, \sigma_1}^{(0)}(i\omega_1) = \\
& = \frac{1}{6} p(i\omega) p(i\omega_1) \left\{ \beta \delta(\omega - \omega) \delta_{l, l'} \sum_{l_1} [2\delta_{\sigma', -\sigma} g_{l_1, \sigma}^{(0)}(i\omega_1) \times \right. \\
& \quad \times g_{l_1, \sigma, l_1, -\sigma}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1, -\sigma}^{(0)}(i\omega_1) + \delta_{\sigma, \sigma'} \mathcal{G}_{l_1, \sigma}^{(0)}(i\omega_1) g_{l_1, \sigma, l_1, \sigma}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1, \sigma}^{(0)}(i\omega_1) - \\
& \quad - \delta_{\sigma, \sigma'} \mathcal{G}_{l_1, -\sigma}^{(0)}(i\omega_1) g_{l_1, -\sigma, l_1, -\sigma}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1, -\sigma}^{(0)}(i\omega_1)] - \\
& \quad - \beta \delta(\omega - \omega_1) [2\delta_{\sigma, \sigma'} \mathcal{G}_{l, -\sigma}^{(0)}(i\omega_1) g_{l, -\sigma, l', -\sigma}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l', -\sigma}^{(0)}(i\omega_1) + \\
& \quad + \delta_{\sigma, \sigma'} \mathcal{G}_{l, \sigma}^{(0)}(i\omega_1) g_{l, \sigma, l', \sigma}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l', \sigma}^{(0)}(i\omega_1) - \\
& \quad \left. - \delta_{\sigma, -\sigma'} \mathcal{G}_{l, \sigma}^{(0)}(i\omega_1) g_{l, \sigma, l', \sigma'}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l', \sigma'}^{(0)}(i\omega_1)] \right\}. \quad (42)
\end{aligned}$$

Оставим члены, сохраняющие спин, т. е. содержащие символ $\delta_{\sigma, \sigma'}$, и опустим члены с перевернутым спином вида $\delta_{\sigma', -\sigma}$, а также взаимно уничтожающиеся члены, которые различаются только знаком спина. Учтем, что функция $\mathcal{G}_l^{(0)}(i\omega)$ не зависит от спинного индекса и имеет место равенство

$$\sum_{\sigma_1} \sigma_1 \mathcal{G}_{l, \sigma_1}^{(0)}(i\omega) = 0. \quad (43)$$

В результате таких упрощений мы получим

$$\begin{aligned}
& \sum_{l_1, \sigma_1, l_2, \sigma_2} \tilde{G}_2^{(0)\text{irr}}[l\sigma i\omega; l_1\sigma_1 i\omega_1 | l_2\sigma_2 i\omega_2; l'\sigma' i\omega] \mathcal{G}_{l_2, \sigma_2}^{(0)}(i\omega_1) g_{l_2, \sigma_2, l_1, \sigma_1}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l_1, \sigma_1}^{(0)}(i\omega_1) = \\
& = -\frac{1}{2} \beta \delta(\omega - \omega_1) p(i\omega) p(i\omega_1) \delta_{\sigma, \sigma'} \mathcal{G}_{l, \sigma}^{(0)}(i\omega_1) g_{l, \sigma, l', \sigma}(i\omega_1) \mathcal{G}_{l', \sigma}^{(0)}(i\omega_1), \quad (44)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Lambda_{l, \sigma, l', \sigma'}(i\omega) &= \delta_{l, l'} \delta_{\sigma, \sigma'} \left[m_l(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2} \mathcal{G}_l^{(0)}(i\omega) \right] + \\
&+ \frac{p^2(i\omega)}{2} \mathcal{G}_l^{(0)}(i\omega) \mathcal{G}_{l'}^{(0)}(i\omega) g_{l, \sigma, l', \sigma'}(i\omega) \quad (45)
\end{aligned}$$

со следующими решениями:

$$\begin{aligned}
\Lambda_{11}(i\omega) &= m_1(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2} \mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2} [\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)]^2 g_{11}(i\omega), \\
\Lambda_{22}(i\omega) &= m_2(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2} \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2} [\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)]^2 g_{22}(i\omega), \\
\Lambda_{12}(i\omega) &= \frac{p^2(i\omega)}{2} \mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega) \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega) g_{12}(i\omega). \quad (46)
\end{aligned}$$

Мы принимаем также во внимание уравнение типа Дайсона

$$\begin{aligned}
g_{11}(i\omega) &= \frac{\Lambda_{11}(i\omega) - \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega) [\Lambda_{11}(i\omega) \Lambda_{22}(i\omega) - \Lambda_{12}(i\omega) \Lambda_{21}(i\omega)]}{d(i\omega)}, \\
g_{12}(i\omega) &= \frac{\Lambda_{12}(i\omega)}{d(i\omega)}, \\
d(i\omega) &= [1 - \Lambda_{11}(i\omega) \mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)] [1 - \Lambda_{22}(i\omega) \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)] - \\
&- \mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega) \mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega) \Lambda_{12}(i\omega) \Lambda_{21}(i\omega). \quad (47)
\end{aligned}$$

Здесь представляется целесообразным выполнить обобщение функции $m(i\omega)$, снабдив ее орбитальным индексом l .

Функция g_{22} получается затем из (47) заменой индексов $1 \leftrightarrow 2$.

Мы нашли два решения уравнений (46) и (47). Первое из них имеет вид

$$\begin{aligned} \Lambda_{11}(i\omega) &= m_1(i\omega), & g_{11}(i\omega) &= -\frac{1}{\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)}, \\ \Lambda_{22}(i\omega) &= \frac{1}{\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)}, & g_{22}(i\omega) &= -\frac{1}{\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)} \left(1 + \frac{m_2(i\omega)\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega) - 1}{(p^2(i\omega)/2)(\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega))^2} \right), \\ \Lambda_{12}(i\omega) &= \Lambda_{21}(i\omega) = \pm \frac{ip(i\omega)}{\sqrt{2}}, & g_{12}(i\omega) &= \pm \frac{i\sqrt{2}}{p(i\omega)\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)}, \end{aligned} \quad (48)$$

при условии, что

$$\frac{1}{\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)} - m_1(i\omega) = \frac{1}{\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)} - m_2(i\omega). \quad (49)$$

Второе решение получается из (48) заменой индексов $1 \leftrightarrow 2$.

Аналитическое продолжение полученных решений в верхнюю полуплоскость дает возможность определить спектральную функцию локализованных электронов

$$\rho_{ll'}(E) = -2 \operatorname{Im} g_{ll'}(E + i\delta). \quad (50)$$

Например, внутриорбитальный вклад имеет вид

$$\rho_{11}(E) = -\frac{2 \operatorname{Im} \mathcal{G}_1^{(0)}(E + i\delta)}{(\operatorname{Re} \mathcal{G}_1^{(0)})^2 + (\operatorname{Im} \mathcal{G}_1^{(0)})^2}, \quad (51)$$

где

$$\operatorname{Im} \mathcal{G}_1^{(0)}(E + i\delta) = -\pi \rho_0(E) |V_1|^2. \quad (52)$$

Величина $\rho_{11}(E)$ отлична от нуля благодаря существованию матричного элемента гибридизации и нулевой плотности состояний $\rho_0(E)$. Этот внутриорбитальный вклад в примесные состояния, перемещенный на уровень Ферми за счет гибридизации с зонными электронами, является прямым обобщением результатов, известных для одноорбитальной модели.

Однако существует дополнительный вклад, обусловленный межорбитальным корреляционным эффектом, который следует из нашего решения и имеет вид

$$\rho_{12}(E) = -\operatorname{Im} g_{12}(E + i\delta) = \frac{2(E + \Delta E_1)(\Delta E_2 - E)}{\operatorname{Im} \mathcal{G}_1^{(0)}(0) \operatorname{Im} \mathcal{G}_2^{(0)}(0)(\Delta E_1 + \Delta E_2)}, \quad (53)$$

где

$$\Delta E_1 = E_2 - E_9 > 0, \quad \Delta E_2 = E_{12} - E_9 > 0.$$

Эта величина положительна для $-\Delta E_1 < E < \Delta E_2$.

Таким образом, для этих энергетических величин межорбитальные возбуждения дают положительный вклад в металлическое состояние.

6. ВЫВОДЫ

Мы развили диаграммный подход теории возмущений сильной связи для исследования двукратно вырожденной ПМА.

В первую очередь были определены собственные функции и собственные значения части гамильтониана, отвечающей локализованным d -электронам. Были получены их зависимости от внутриорбитального и межорбитального кулоновского взаимодействий и константы правила Хунда. Была развита теория возмущений в окрестности атомного предела и определены мацубаровские функции Грина в нормальном состоянии.

Было получено уравнение типа Дайсона для этих функций и подробно обсуждены его аналитические решения.

Поскольку основными элементами нашей диаграммной техники являются неприводимые функции Грина, мы вычислили простейшую двухчастичную неприводимую функцию Грина и определили ее зависимость от спина и орбитальных квантовых чисел. Эта величина, найденная нами только в пределе низких температур, аппроксимируется с учетом вкладов статистических весов $e^{-\beta E_9}$ в предположении, что основное состояние нашей системы является двухчастичным триплетным состоянием E_9 .

Зная эту величину и суммируя особый класс диаграмм, мы получили корреляционную функцию $\Lambda_{l,\sigma,l',\sigma'}$.

Мы нашли два решения для ренормированной функции Грина d -электронов и определили их спектральный вес.

Мы доказали, что орбитальное вырождение дает дополнительный вклад в “металлизацию” примесных состояний, т. е. усиливает “перекачивание” спектрального веса на уровень Ферми.

Упомянутые выше результаты были получены аналитически. Подробные численные вычисления спектральных интенсивностей и различных неустойчивостей к спиновой и орбитальной поляризации будут обсуждены в другой работе.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Вычисление контурного интеграла

Четырехкратный интеграл $I_{1324}^{(n)}$ (39), $n = \overline{1, 3}$, по временной переменной τ может быть преобразован в контурный с помощью метода Блоха [21]. С этой целью необходимо ввести экспоненциальную форму

$$e^{(\beta-\tau_1)\overline{E}_0+(\tau_1-\tau_3)\overline{E}_1+(\tau_3-\tau_2)\overline{E}_2+(\tau_2-\tau_4)\overline{E}_3+(\tau_4-0)\overline{E}_4}, \quad (54)$$

которая должна быть сравнима с экспоненциальной формой наших интегралов $I_{1324}^{(n)}$. Сравнение с $I_{1324}^{(1)}$ приводит к равенствам

$$\begin{aligned} \overline{E}_0 &= -E_9, & \overline{E}_2 &= -E_9 + i\omega_1 - i\omega_3, & \overline{E}_4 &= -E_9 + i\Omega, & \overline{E}_1 &= -E_{12} + i\omega_1, \\ \overline{E}_3 &= -E_{12} + i\omega_1 + i\omega_2 - i\omega_3, & \Omega &= \omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4. \end{aligned} \quad (55)$$

Наш интеграл $I_{1324}^{(1)}$ преобразуется в контурный интеграл

$$I^{(1)} = \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{Z_0} \oint_{C^+} \frac{dz e^{-\beta z}}{(z + \overline{E}_0)(z + \overline{E}_1)(z + \overline{E}_2)(z + \overline{E}_3)(z + \overline{E}_4)}, \quad (56)$$

где контур C^+ окружает действительную ось в положительном направлении. Интегралы $I^{(2)}$ и $I^{(3)}$ имеют такую же форму (56), но отличаются определением энергии $\bar{E}_2$. Для $I^{(2)}$ энергия равна $\bar{E}_2 = -E_6 + i\omega_1 - i\omega_3$, а для $I^{(3)}$ — $\bar{E}_2 = -E_7 + i\omega_1 - i\omega_3$. Другие параметры совпадают.

Контурный интеграл (56) вычисляется методом вычетов. Простые результаты получаются в случае различных $\bar{E}_n$. Существование множественных полюсов возможно для специальных значений частот ω_n .

Например, в случае, когда $\omega_1 - \omega_3 = 0$ и $\Omega = 0$, имеем $\bar{E}_0 = \bar{E}_2 = \bar{E}_4$ и полюс $z = -\bar{E}_0$ третьего порядка с вычетом

$$\frac{1}{2} \left(\frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)} \right)'' \Big|_{z = -\bar{E}_0}. \quad (57)$$

Для нахождения всех возможных множественных полюсов рассмотрим различные значения частот, воспользовавшись тождеством $1 = \delta(\omega) + \psi(\omega)$, где $\psi(\omega) = 1 - \delta(\omega)$. Например, рассмотрим случай, когда Ω может быть равна нулю и $\omega_1 = \omega_3$. Имеем тождество

$$\begin{aligned} 1 &= [\delta(\Omega) + \psi(\Omega)][\delta(\omega_1 - \omega_3) + \psi(\omega_1 - \omega_3)] = \\ &= \delta(\Omega)\delta(\omega_1 - \omega_3) + \delta(\Omega)\psi(\omega_1 - \omega_3) + \psi(\Omega)\delta(\omega_1 - \omega_3) + \psi(\Omega)\psi(\omega_1 - \omega_3). \end{aligned} \quad (58)$$

Первый член в правой части этого уравнения допускает существование полюса третьего порядка, следующие два члена — второго порядка, а последний — второго и первого порядков. Будем учитывать только те полюсы, статистические веса которых равны $e^{-\beta E_9}/Z_0$, а остальными пренебрежем. В этом приближении имеем

$$\begin{aligned} Z_0 I_{1324}^{(1)} &= \frac{1}{2} \delta(\Omega)\delta(\omega_1 - \omega_3) \left(\frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)} \right)'' \Big|_{z = -\bar{E}_0} + \\ &+ \delta(\Omega)\psi(\omega_1 - \omega_3) \left[\left(\frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_2)(z + \bar{E}_3)} \right)' \Big|_{z = -\bar{E}_0} + \right. \\ &+ \left. \left(\frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_0)^2(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)} \right) \Big|_{z = -\bar{E}_2} \right] + \\ &+ \delta(\omega_1 - \omega_3)\psi(\Omega) \left[\left(\frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)(z + \bar{E}_4)} \right)' \Big|_{z = -\bar{E}_0} + \right. \\ &+ \left. \left(\frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_0)^2(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)} \right) \Big|_{z = -\bar{E}_4} \right] + \\ &+ \psi(\Omega)\psi(\omega_1 - \omega_3)\delta(\omega_2 - \omega_4) \left[\left(\frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_0)(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)} \right)' \Big|_{z = -\bar{E}_2} + \right. \\ &+ \left. \left(\frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_2)^2(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)} \right) \Big|_{z = -\bar{E}_0} \right] + \\ &+ \psi(\Omega)\psi(\omega_1 - \omega_3)\psi(\omega_2 - \omega_4) \left[\left(\frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_2)(z + \bar{E}_3)(z + \bar{E}_4)} \right) \Big|_{z = -\bar{E}_0} + \right. \end{aligned}$$

$$+ \left(\frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_0)(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_3)(z + \bar{E}_4)} \right) \Big|_{z=-\bar{E}_2} + \\ + \left(\frac{e^{-\beta Z}}{(z + \bar{E}_0)(z + \bar{E}_1)(z + \bar{E}_2)(z + \bar{E}_3)} \right) \Big|_{z=-\bar{E}_4} \Big]. \quad (59)$$

Вклад от других полюсов незначителен. Следующее наше приближение состоит в сохранении, в случае низких температур, главной части второй производной (57) в виде

$$\Delta I = \frac{\beta^2 e^{-\beta E_9}}{2Z_0(\bar{E}_1 - \bar{E}_0)(\bar{E}_3 - \bar{E}_0)}. \quad (60)$$

Благодарности. В. А. Москаленко и Л. А. Дохотару выражают свою искреннюю благодарность профессору Н. Плакиде и доктору физ.-мат. наук С. Кожокару за обсуждение работы и ценные замечания.

Список литературы

- [1] Th. Pruschke, R. Bulla, *Hund's coupling and the metal-insulator transition in the two-band Hubbard model*, [arXiv:cond-mat/0411186](#).
- [2] Y. Nishikawa, A. C. Hewson, *Study of Hund's rule coupling in models of magnetic impurities and quantum dots*, [arXiv:1211.0363](#).
- [3] M. Fabrizio, A. F. Ho, L. De Leo, G. E. Santoro, *Phys. Rev. Lett.*, **91**:24 (2003), 246402, 4 pp.
- [4] L. De Leo, M. Fabrizio, *Phys. Rev. B*, **69**:24 (2004), 245114, 18 pp.
- [5] М. И. Владимир, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **82**:3 (1990), 428–437.
- [6] С. И. Вакару, М. И. Владимир, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **85**:2 (1990), 248–257.
- [7] Н. Н. Боголюбов, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **86**:1 (1991), 16–30; *Докл. АН СССР*, **316**:5 (1991), 1107–1111; *Краткие сообщения ОИЯИ*, **44**:5 (1990).
- [8] Н. Н. Боголюбов, В. А. Москаленко, *ТМФ*, **92**:2 (1992), 182–190.
- [9] V. A. Moskalenko, P. Entel, D. F. Digor, *Phys. Rev. B*, **59**:1 (1999), 619–635.
- [10] В. А. Москаленко, Л. А. Дохотару, И. Д. Чеботарь, *ЖЭТФ*, **138**:1(7) (2010), 107–114.
- [11] В. А. Москаленко, П. Ентель, Л. А. Дохотару, Р. Читро, *Диаграммный метод для примесной модели Андерсона*, Препринт E17-2008-56, ОИЯИ, Дубна, 2008.
- [12] В. А. Москаленко, П. Ентель, Л. А. Дохотару, Р. Читро, *ТМФ*, **159**:1 (2009), 162–173.
- [13] В. А. Москаленко, П. Ентель, Д. Ф. Дигор, Л. А. Дохотару, Р. Читро, *ТМФ*, **155**:3 (2008), 474–497.
- [14] В. А. Москаленко, Л. А. Дохотару, И. Д. Чеботарь, Д. Ф. Дигор, *ТМФ*, **168**:3 (2011), 490–502.
- [15] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.*, **68**:1 (1996), 13–125.
- [16] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **124**:1 (1961), 41–53.
- [17] K. Kubo, D. S. Hirashima, *J. Phys. Soc. Japan*, **68** (1999), 2317–2325.
- [18] A. Koga, H. Shiba, *J. Phys. Soc. Japan*, **66** (1997), 1485–1494.
- [19] A. Koga, Y. Imai, N. Kawakami, *Phys. Rev. B*, **66**:16 (2002), 165107, 6 pp.
- [20] A. M. Oles, *Phys. Rev. B*, **28**:1 (1983), 327–339.
- [21] C. Bloch, *Diagram Expansions in Quantum Statistical Mechanics*, Studies in Statistical Mechanics, **3**, North Holland, Amsterdam, 1965.