Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. А. Москаленко, Теория возмущений для периодической модели Андерсона,
ТМФ, 1997, том 110, номер 2, 308–322

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf970>

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: 54.162.127.20

26 апреля 2023 г., 16:33:49

В. А. Москаленко*

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА

Исследуется система, состоящая из электронов проводимости и f -локализованных электронов, описываемая периодической моделью Андерсона. Одноузельная гибридизация состояний этих двух подсистем электронов рассматривается как возмущение. Развита новая диаграммная методика, основанная на использовании многочастичных одноузельных неприводимых функций Грина для f -электронов и обычной теоремы Вика для подсистемы электронов проводимости. Установлены уравнения Дайсона для одночастичных функций Грина системы и соотношения между ними. Эти результаты являются точными и могут служить основой для самосогласованных аппроксимаций. В приближении "Хаббард I" исследуется спектр одночастичных возбуждений.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время хорошо известны системы, которые обладают сильными электронными корреляциями и обнаруживают необычные термодинамические, магнитные и транспортные свойства. Такими системами являются соединения с тяжелыми фермионами, оксиды меди, в которых наблюдается высокотемпературная сверхпроводимость, редкоземельные металлы и др.

Микроскопическое квантово-полевое исследование таких систем основывается на использовании периодической модели Андерсона (ПМА) [1].

Рассмотрим простейшую форму ПМА со спиновым вырождением уровня локализованных f -электронов, простой энергетической зоной для электронов проводимости системы (C -электроны) и одноузельной гибридизацией между электронами обеих подсистем. Гамильтониан этой модели имеет вид

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

$$H_c^0 = \sum_{\vec{k}\sigma} (\mathcal{E}(\vec{k}) - \mu) C_{\vec{k}\sigma}^+ C_{\vec{k}\sigma}, \quad H_f^0 = (E_f - \mu) \sum_{\vec{i}\sigma} n_{\vec{i}\sigma} + U \sum_{\vec{i}} n_{\vec{i}\uparrow} n_{\vec{i}\downarrow},$$

$$H_{\text{int}} = \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{i}\vec{k}\sigma} \left[C_{\vec{k}\sigma}^+ f_{\vec{i}\sigma} e^{i\vec{k}\vec{R}_i} + f_{\vec{i}\sigma}^+ C_{\vec{k}\sigma} e^{-i\vec{k}\vec{R}_i} \right], \quad n_{\vec{i}\sigma} = f_{\vec{i}\sigma}^+ f_{\vec{i}\sigma}, \quad (2)$$

где $C_{\vec{k}\sigma}^+$ ($C_{\vec{k}\sigma}$) — операторы рождения (уничтожения) электронов зоны проводимости с импульсом $\vec{k}$, энергией $\mathcal{E}(\vec{k})$ и спином σ , $f_{\vec{i}\sigma}^+$ ($f_{\vec{i}\sigma}$) — соответствующие операторы для

* Институт прикладной физики АН Молдовы

f -электронов, локализованных на i -м узле кристаллической решетки и обладающих энергией E_f . U есть одноузельное отталкивание f -электронов, V – энергия гибридизации состояний электронов двух подсистем.

Уровни зоны проводимости распределены по всей ширине W этой зоны. Энергии $\mathcal{E}(\vec{k})$ и E_f отсчитаны от химического потенциала μ . При $E_f = -\frac{U}{2}$ и $\mu = 0$ эта модель называется симметричной ПМА.

ПМА представляет собой сложную многочастичную квантовую проблему, для которой не получено точного решения даже в простейшем одномерном случае. Поэтому желательно установить определенные общие свойства и точные соотношения, присущие данной модели.

Исследованию ПМА было посвящено много работ, и развиты различные приближенные методы решения начиная с наиболее простого метода самосогласованного поля. Так, например, Ледер и Мюльшлегель [2] на основе метода Фока–Хартри исследовали возможные магнитные фазы системы при различных значениях ее параметров и указали на существование непрерывного фазового перехода между однородной и антиферромагнитной фазами. При наличии гибридизации f -уровень приобретает определенную ширину, которая существенно зависит от взаимного расположения зоны проводимости и f -уровня и от интенсивности гибридизации V . Не следует преуменьшать роль кулоновского отталкивания U , которое при отсутствии гибридизации дает две хаббардовские энергии, отстоящие друг от друга на расстояние равное U . Совместное действие взаимодействия U и гибридизации V приводит к интерференции трех уровней энергии при каждом значении импульса.

Эти процессы определяют смешанную валентность f -электронов, которая наблюдается у систем с тяжелыми фермионами. Данная проблема обсуждалась в работах Колемана [3] и Коллэвея и др. [4, 5].

Свойства основного состояния ПМА исследовались в работах Райса и Уеды [6], Бленкенбеклера и др. [7], Ямамото и Уеды [8], Ямады и Иосиды [9] и др. Сравнительное исследование многочастичной динамики примесной и периодической моделей Андерсона и свойств систем с сильными электронными корреляциями применительно к материалам с высокотемпературной сверхпроводимостью и к соединениям с тяжелыми фермионами содержится в работах Куземского и др. [10–13].

Среди работ последних лет, посвященных антиферромагнетизму ПМА, отметим [14].

В настоящей работе развита термодинамическая теория возмущений для системы с гамильтонианом (1) в предположении, что член гибридизации f - и C -электронов является возмущением двух подсистем.

Для f -электронов целесообразно исходить из локализованного представления, тогда как для C -электронов зонное представление предпочтительнее. Вместе с тем используются и дополнительные представления на основе фурье-разложения

$$C_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}\sigma} e^{-i\vec{k}\vec{R}_i}, \quad f_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}\sigma} e^{-i\vec{k}\vec{R}_i},$$

здесь $\vec{k}$ – волновой вектор, пробегающий первую зону Бриллюэна кристалла с N узлами.

Гамильтониан H_c^0 является диагональным в операторах свободных C -электронов, тогда как гамильтониан H_f^0 диагонализуеться при помощи операторов Хаббарда [15]

$$f_{i\sigma}^- = \chi_i^{0\sigma} + \sigma \chi_i^{-\sigma,2}, \quad f_{k\sigma}^+ = \chi_i^{\sigma 0} + \sigma \chi_i^{2,-\sigma},$$

где индексы $0, \sigma = \pm 1$ и 2 нумеруют четыре локализованных состояния на одном узле решетки, соответствующих отсутствию электронов, наличию одного электрона со спином σ и двух электронов. Отвечающие этим состояниям энергии равны

$$E_0 = 0, \quad E_\sigma = E_f - \mu, \quad E_2 = U + 2(E_f - \mu).$$

Диагонализированный гамильтониан имеет вид

$$H_f^0 = \sum_i \sum_{\alpha=0}^2 E_\alpha \chi_i^{\alpha\alpha}. \quad (3)$$

Статистический оператор нулевого приближения большого канонического ансамбля Гиббса системы факторизован по импульсам для подсистемы электронов проводимости и по узлам для f -электронов. Следовательно, средние статистические от произведений операторов, обозначаемые скобкой $\langle \dots \rangle_0$, для электронов проводимости вычисляются на основе обычной теоремы Вика [16, 17], тогда как для f -электронов такие средние вычисляются на основе метода [18, 19] неприводимых многочастичных одноузельных функций Грина или кумулянт Кубо.

1. ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Оператор эволюции термодинамической теории возмущения $U(\beta)$ имеет вид

$$\begin{aligned} U(\beta) &= T \exp \left(- \int_0^\beta H_{\text{int}}(\tau) d\tau \right) = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta \dots \int_0^\beta T(H_{\text{int}}(\tau_1) \dots H_{\text{int}}(\tau_n)) d\tau_1 \dots d\tau_n. \end{aligned} \quad (4)$$

Среднее статистическое от этого оператора обладает рядом особенностей, которые могут быть выяснены на простых примерах. Если учесть структуру оператора взаимодействия, то нетрудно видеть, что в среднее $\langle \dots \rangle_0$ дадут вклады только слагаемые правой части (4), которые обладают четными номерами $n = 2m$. Далее при перемножении $2m$ слагаемых H_{int} следует сохранить лишь выражения, содержащие в качестве множителей по m операторов C^+, C, f^+ и f . При этом все такие члены суммы эквивалентны, т.к. они могут быть сведены один к другому заменой индексов суммирования, τ -интегрирования и перестановкой операторов под знаком T -произведения. Число возникающих эквивалентных членов равно C_{2m}^m . Это число должно быть разделено на $(2m)!$, содержащееся в (4):

$$\frac{C_{2m}^m}{2m!} = \frac{1}{(m!)^2}.$$

На основании этих замечаний можем написать

$$\begin{aligned}
 \langle U(\beta) \rangle_0 &= 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{V^{2m}}{N^m (m!)^2} \sum_{\vec{i}_1 \vec{k}_1 \sigma_1} \cdots \sum_{\vec{i}_{2m} \vec{k}_{2m} \sigma_{2m}} \int d\tau_1 \cdots \int d\tau_{2m} \times \\
 &\times \langle T \bar{C}_{\vec{k}_1 \sigma_1}(\tau_1) \cdots \bar{C}_{\vec{k}_m \sigma_m}(\tau_m) C_{\vec{k}_{m+1} \sigma_{m+1}}(\tau_{m+1}) \cdots C_{\vec{k}_{2m} \sigma_{2m}}(\tau_{2m}) \rangle_0 \times \\
 &\times \langle T f_{\vec{i}_1 \sigma_1}(\tau_1) \cdots f_{\vec{i}_m \sigma_m}(\tau_m) \bar{f}_{\vec{i}_{m+1} \sigma_{m+1}}(\tau_{m+1}) \cdots \bar{f}_{\vec{i}_{2m} \sigma_{2m}}(\tau_{2m}) \rangle_0 \times \\
 &\times \exp \left[i(\vec{k}_1 \vec{i}_1 + \cdots + \vec{k}_m \vec{i}_m - \vec{k}_{m+1} \vec{i}_{m+1} - \cdots - \vec{k}_{2m} \vec{i}_{2m}) \right]. \quad (5)
 \end{aligned}$$

Рассмотрим множитель (5), который вычисляется при помощи обычной статистической теоремы Вика. Он равен сумме $m!$ членов, каждый из которых есть произведение m спариваний операторов. Перестановкой индексов $\vec{k}$, σ , τ и одновременной перестановкой индексов узлов $\vec{i}_m$ можно добиться того, что все члены становятся одинаковыми и, следовательно, нужно выписать лишь одно из возможных спариваний C -операторов и умножить его на $m!$. Этот факториал в числителе сокращается с одним из них в знаменателе. Для того чтобы во всех порядках теории возмущений иметь один и тот же вид спариваний операторов и при этом автоматически определять его знак, примем тот порядок образования связей, который указан ниже.

Окончательно возникает под знаком сумм и интегралов, которые тут опущены, следующее выражение:

$$\begin{aligned}
 &\frac{V^{2m}}{m! N^m} \langle T \bar{C}_{\vec{k}_1 \sigma_1}(\tau_1) C_{\vec{k}_{2m} \sigma_{2m}}(\tau_{2m}) \rangle_0 \cdots \langle T \bar{C}_{\vec{k}_m \sigma_m}(\tau_m) C_{\vec{k}_{m+1} \sigma_{m+1}}(\tau_{m+1}) \rangle_0 \times \\
 &\times \langle T f_{\vec{i}_1 \sigma_1}(\tau_1) \cdots f_{\vec{i}_m \sigma_m}(\tau_m) \bar{f}_{\vec{i}_{m+1} \sigma_{m+1}}(\tau_{m+1}) \cdots \bar{f}_{\vec{i}_{2m} \sigma_{2m}}(\tau_{2m}) \rangle_0 \times \\
 &\times \exp \left[i(\vec{k}_1 \vec{i}_1 + \cdots + \vec{k}_m \vec{i}_m - \vec{k}_{m+1} \vec{i}_{m+1} - \cdots - \vec{k}_{2m} \vec{i}_{2m}) \right]. \quad (6)
 \end{aligned}$$

Формула (6) имеет структуру, напоминающую формулы теории возмущений модели Хаббарда для f -электронов.

В самом деле, предполагая малость кинетического слагаемого, содержащего интеграл перескоков модели Хаббарда

$$H_{\text{int}} = - \sum_{\vec{i} \vec{j} \sigma} t(\vec{j} - \vec{i}) f_{\vec{j} \sigma}^+ f_{\vec{i} \sigma},$$

в m -м порядке теории возмущений для $\langle U(\beta) \rangle_0$ возникает выражение (для краткости опускаем индексы сумм и интегралов)

$$\frac{1}{m!} t(\vec{j}_i - \vec{i}_i) \cdots t(\vec{j}_m - \vec{i}_m) \langle T \bar{f}_{\vec{j}_1 \sigma_1}(\tau_1) f_{\vec{i}_1 \sigma_1}(\tau_1) \cdots \bar{f}_{\vec{j}_m \sigma_m}(\tau_m) f_{\vec{i}_m \sigma_m}(\tau_m) \rangle_0. \quad (7)$$

Чтобы получить (6) из (7), следует интеграл $t(\vec{j} - \vec{i})$ мгновенного перескока между узлами j и i заменить динамической запаздывающей во времени функцией Грина C -электронов и соответственно раздвинуть во времени операторы $\bar{f}_{\vec{j} \sigma}$ и $f_{\vec{i} \sigma}$. В остальном будет сохраняться сходство диаграмм ПМА и модели Хаббарда [18–20].

Рис. 1. Простейшие вакуумные диаграммы.

Таким образом, ПМА в том, что касается свойств f -электронов, сводится к модели Хаббарда с запаздывающим во времени перескоком этих электронов между узлами решетки, хотя с самого начала в ПМА перескоки f -электронов не рассматривались в силу слабого перекрытия их волновых функций. Само это запаздывание обусловлено мгновенной локальной гибридизацией f -электронов с электронами проводимости. Роль интеграла перескока при этом играет функция Грина электронов проводимости, умноженная на V^2 :

$$t(\vec{j}_2\sigma_2\tau_2 | \vec{i}_1\sigma_1\tau_1) = V^2 G^{c(0)}(\vec{i}_1\sigma_1\tau_1 | \vec{j}_2\sigma_2\tau_2),$$

$$G^{c(0)}(\vec{i}_1\sigma_1\tau_1 | \vec{j}_2\sigma_2\tau_2) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2} \exp[i(\vec{k}_2\vec{j}_2 - \vec{k}_1\vec{j}_1)] [-\langle TC_{\vec{k}_1\sigma_1}(\tau_1)\bar{C}_{\vec{k}_2\sigma_2}(\tau_2)\rangle_0]. \quad (8)$$

В модели Хаббарда интеграл перескока при совпадающих номерах узлов считается равным нулю, тогда как в нашем случае величина (8) при $\vec{i} = \vec{j}$ не равна нулю, что скажется на виде диаграмм.

Дальнейшие вычисления связаны с возможностью определения статистического среднего от произведения f -операторов формулы (6). Для этих средних в работах [18–20] была предложена обобщенная теорема Вика, в которой осуществляется переход к одно-узельным одночастичным и многочастичным функциям Грина.

Для иллюстрации приведем несколько примеров.

При $n = 2, m = 1$ имеем под знаком сумм и интегралов следующий вклад $\langle U(\beta) \rangle_0$:

$$\frac{-1}{1!} \langle TC_2\bar{C}_1 \rangle_0 \langle Tf_1\bar{f}_2 \rangle_0.$$

Здесь и ниже для простоты один индекс оператора подразумевает совокупность трех индексов $1 = (\vec{i}_1\sigma_1\tau_1)$. Операторы C -электронов также приведены в узельном представлении с использованием для этого суммирования по волновым векторам. Обе операторные связи дают нулевые пропагаторы C - и f -электронов. Пропагатор C -электронов определен формулой (8). Для f -электронов имеем

$$G^{f(0)}(1 | 2) = -\langle Tf_1\bar{f}_2 \rangle_0 = -\delta_{1\bar{2}}\delta_{\sigma_1\sigma_2} \langle Tf_{\sigma_1}(\tau_1)\bar{f}_{\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0. \quad (9)$$

Графически эти пропагаторы изображаются направленными штриховыми для C -электронов и сплошными для f -электронов линиями. Узлам диаграмм сопоставляется множитель V . Рассматриваемый вклад представляет собой простейшую вакуумную диаграмму, приведенную на рис. 1.

При $n = 4, m = 2$ имеем

$$\frac{(-1)^2}{2!} \langle TC_4 \bar{C}_1 \rangle_0 \langle TC_3 \bar{C}_2 \rangle_0 \langle T f_1 f_2 \bar{f}_3 \bar{f}_4 \rangle_0.$$

Статистическое среднее от произведения f -операторов раскрывается по формуле [18–20]

$$\langle T f_1 f_2 \bar{f}_3 \bar{f}_4 \rangle_0 = \langle T f_1 \bar{f}_4 \rangle_0 \langle T f_2 \bar{f}_3 \rangle_0 - \langle T f_1 \bar{f}_3 \rangle_0 \langle T f_2 \bar{f}_4 \rangle_0 + \langle 1, 2 \mid \bar{3}, \bar{4} \rangle_0^{\text{ir}}, \quad (10)$$

где двухчастичная одноузловая неприводимая функция Грина определена следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle 1, 2 \mid \bar{3}, \bar{4} \rangle_0^{\text{ir}} &\equiv G_2^{(0) \text{ir}}(1, 2 \mid \bar{3}, \bar{4}) = \delta_{1\bar{2}} \delta_{1\bar{3}} \delta_{1\bar{4}} G_2^{(0) \text{ir}}(\sigma_1, \tau_1; \sigma_2, \tau_2 \mid \sigma_3, \tau_3; \sigma_4, \tau_4), \\ G_2^{(0) \text{ir}}(\sigma_1, \tau_1; \sigma_2, \tau_2 \mid \sigma_3, \tau_3; \sigma_4, \tau_4) &= \langle T f_{\sigma_1}(\tau_1) f_{\sigma_2}(\tau_2) \bar{f}_{\sigma_3}(\tau_3) \bar{f}_{\sigma_4}(\tau_4) \rangle_0 - \\ &- \langle T f_{\sigma_1}(\tau_1) \bar{f}_{\sigma_4}(\tau_4) \rangle_0 \langle T f_{\sigma_2}(\tau_2) \bar{f}_{\sigma_3}(\tau_3) \rangle_0 + \\ &+ \langle T f_{\sigma_1}(\tau_1) \bar{f}_{\sigma_3}(\tau_3) \rangle_0 \langle T f_{\sigma_2}(\tau_2) \bar{f}_{\sigma_4}(\tau_4) \rangle_0. \end{aligned} \quad (11)$$

Соответствующие слагаемые $\langle U(\beta) \rangle^{(4)}$ приведены на рис. 1б, в, г. Первое из них равно $\frac{1}{2!} [\langle U(\beta) \rangle^{(2)}]^2$, т.е. представляет собой несвязную вакуумную диаграмму. Последние два слагаемых дают связную часть, отмеченную индексом $\langle U(\beta) \rangle_0^c$. По всем повторяющимся индексам проводится суммирование. На рис. 1г квадратом изображена двухчастичная неприводимая функция Грина или кумулянт Кубо f -электронов. Все узлы, заключенные внутри квадрата, предполагаются одинаковыми.

В высших порядках теории возмущений возникнут n -частичные ($n > 2$) неприводимые функции Грина. Их узлы одинаковы, и все они будут окружены сплошной линией.

Учет диаграмм высших порядков приведет к возникновению ряда

$$\langle U(\beta) \rangle_0 = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[\langle U(\beta) \rangle_0^c]^n}{n!} = \exp[\langle U(\beta) \rangle_0^c]. \quad (12)$$

В экспоненте (12) содержатся только связные диаграммы. Очевидно, в $\langle U(\beta) \rangle_0^c$ нулевой единичный член не содержится. Формула (12) является известной теоремой о связных диаграммах.

2. ОДНОЧАСТИЧНЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА

Полные или ренормированные функции Грина C - и f -электронов имеют вид

$$\begin{aligned} G^{cc}(\vec{\chi}\sigma\tau \mid \vec{\chi}'\sigma'\tau') &= -\frac{\langle TC_{\vec{\chi}\sigma}(\tau) \bar{C}_{\vec{\chi}'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}, \\ G^{ff}(\vec{\chi}\sigma\tau \mid \vec{\chi}'\sigma'\tau') &= -\frac{\langle T f_{\vec{\chi}\sigma}(\tau) \bar{f}_{\vec{\chi}'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}; \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} G^{cc}(\vec{k}\sigma\tau \mid \vec{k}'\sigma'\tau') &= -\frac{\langle TC_{\vec{k}\sigma}(\tau) \bar{C}_{\vec{k}'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}, \\ G^{ff}(\vec{k}\sigma\tau \mid \vec{k}'\sigma'\tau') &= -\frac{\langle T f_{\vec{k}\sigma}(\tau) \bar{f}_{\vec{k}'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}. \end{aligned} \quad (14)$$

В дальнейшем будут рассмотрены также смешанные функции C - и f -электронов

$$\begin{aligned} G^{cf}(\vec{\chi}\sigma\tau | \vec{\chi}'\sigma'\tau') &= -\frac{\langle TC_{\vec{\chi}\sigma}(\tau)\bar{f}_{\vec{\chi}'\sigma'}(\tau')U(\beta)\rangle_0}{\langle U(\beta)\rangle_0}, \\ G^{fc}(\vec{\chi}\sigma\tau | \vec{\chi}'\sigma'\tau') &= -\frac{\langle Tf_{\vec{\chi}\sigma}(\tau)\bar{C}_{\vec{\chi}'\sigma'}(\tau')U(\beta)\rangle_0}{\langle U(\beta)\rangle_0}. \end{aligned} \quad (15)$$

Повторим в связи с функциями (13)–(15) рассуждения предыдущего раздела относительно преобразования оператора эволюции. При этом возникающие выражения типа (5) в данном случае содержат еще операторы электронов, существовавших в начале и конце процессов распространения возбуждения. В общем случае $2m$ -го порядка теории возмущений для функции Грина электронов проводимости в K -представлении получаем

$$\begin{aligned} G^{cc(2m)}(\vec{k}\sigma\tau | \vec{k}'\sigma'\tau') &= \frac{(-1)^m}{(m-1)!} \int d\tau_1 \cdots \int d\tau_{2m} \frac{V^2}{N^m} \times \\ &\times \sum_{\vec{i}_1 \vec{k}_1 \vec{\sigma}_1} \cdots \sum_{\vec{i}_{2m} \vec{k}_{2m} \vec{\sigma}_{2m}} \langle TC_{\vec{k}\sigma}(\tau)\bar{C}_{\vec{k}_1\sigma_1}(\tau_1)\rangle_0 \langle TC_{\vec{k}_{2m}\sigma_{2m}}(\tau_{2m})\bar{C}_{\vec{k}'\sigma'}(\tau')\rangle_0 \times \\ &\times \langle TC_{\vec{k}_{2m-1}\sigma_{2m-1}}(\tau_{2m-1})\bar{C}_{\vec{k}_2\sigma_2}(\tau_2)\rangle_0 \cdots \langle TC_{\vec{k}_{m+1}\sigma_{m+1}}(\tau_{m+1})\bar{C}_{\vec{k}_m\sigma_m}(\tau_m)\rangle_0 \times \\ &\times \langle Tf_{\vec{i}_1\sigma_1}(\tau_1) \cdots f_{\vec{i}_m\sigma_m}(\tau_m)\bar{f}_{\vec{i}_{m+1}\sigma_{m+1}}(\tau_{m+1}) \cdots \bar{f}_{\vec{i}_{2m}\sigma_{2m}}(\tau_{2m})\rangle_0 \times \\ &\times \exp\left[i(\vec{k}_1\vec{i}_1 + \cdots + \vec{k}_m\vec{i}_m - \cdots - \vec{k}_{m+1}\vec{i}_{m+1} - \cdots - \vec{k}_{2m}\vec{i}_{2m})\right]. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь учтено, что в присутствии операторов исходных возбуждений $C_{\vec{k}\sigma}, \bar{C}_{\vec{k}'\sigma'}$ теорема Вика для C -операторов дает $m \cdot m!$ эквивалентных членов. Возможные спаривания операторов, при которых возникает связка $\langle C_{\vec{k}\sigma}, \bar{C}_{\vec{k}'\sigma'} \rangle$, опущены в (17), как заведомо приводящие к несвязным диаграммам.

Усреднение f -операторов в (16) влечет за собой возникновение как слагаемых, характерных для обычной теоремы Вика, так и новых слагаемых, содержащих произведения всевозможных кумулянт. В каждом таком произведении число частиц во всех кумулянтах должно равняться m . Знак каждого такого произведения легко устанавливается правилом перестановки фермиевских операторов.

Для иллюстрации рассмотрим второй порядок теории возмущений

$$\begin{aligned} G^{cc(2)}(\vec{k}\sigma\tau | \vec{k}'\sigma'\tau') &= -\frac{V^2}{N} \sum_{\vec{i}_1 \vec{k}_1 \vec{\sigma}_1} \sum_{\vec{i}_2 \vec{k}_2 \vec{\sigma}_2} \iint d\tau_1 d\tau_2 \langle TC_{\vec{k}\sigma}(\tau)\bar{C}_{\vec{k}_1\sigma_1}(\tau_1)\rangle_0 \times \\ &\times \langle TC_{\vec{k}_2\sigma_2}(\tau_2)\bar{C}_{\vec{k}'\sigma'}(\tau')\rangle_0 \langle Tf_{\vec{i}_1\sigma_1}(\tau_1)\bar{f}_{\vec{i}_2\sigma_2}(\tau_2)\rangle_0 \exp[i(\vec{k}_1\vec{i}_1 - \vec{k}_2\vec{i}_2)]. \end{aligned}$$

Введем фурье-образ нулевой функции Грина f -электронов

$$\begin{aligned} G^{f(0)}(\vec{k}_1\sigma_1\tau_1 | \vec{k}_2\sigma_2\tau_2) &= \frac{-1}{N} \sum_{\vec{i}_1 \vec{i}_2} \langle Tf_{\vec{i}_1\sigma_1}(\tau_1)\bar{f}_{\vec{i}_2\sigma_2}(\tau_2)\rangle_0 \exp[i(\vec{k}_1\vec{i}_1 - \vec{k}_2\vec{i}_2)] = \\ &= \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} G_{\sigma_1}^{f(0)}(\tau_1 - \tau_2), \quad G_{\sigma_1}^{f(0)}(\tau_1 - \tau_2) = -\langle Tf_{\sigma_1}(\tau_1)\bar{f}_{\sigma_1}(\tau_2)\rangle_0. \end{aligned} \quad (17)$$

Рис. 2. Диаграммы одночастичной функции Грина электронов проводимости.

Таким образом получаем выражение

$$G^{cc(2)}(\vec{k}\sigma\tau | \vec{k}'\sigma'\tau') = V^2 \sum_{\vec{k}_1\sigma_1\vec{k}_2\sigma_2} \iint d\tau_1 d\tau_2 G^{c(0)}(\vec{k}\sigma\tau | \vec{k}_1\sigma_1\tau_1) \times \\ \times G^{f(0)}(\vec{k}_1\sigma_1\tau_1 | \vec{k}_2\sigma_2\tau_2) G^{c(0)}(\vec{k}_2\sigma_2\tau_2 | \vec{k}'\sigma'\tau'),$$

изображенное графически на рис. 2б. Диаграмма рис. 2а, очевидно, представляет свободный пропагатор.

В четвертом порядке теории имеем

$$G^{cc(4)}(\vec{k}\sigma\tau | \vec{k}'\sigma'\tau') = \frac{V^2}{N^2} \sum_{\vec{i}_1\vec{k}_1\sigma_1} \cdots \sum_{\vec{i}_4\vec{k}_4\sigma_4} \int d\tau_1 \cdots \int d\tau_4 \langle TC_{\vec{k}\sigma}(\tau) \bar{C}_{\vec{k}_1\sigma_1}(\tau_1) \rangle_0 \times \\ \times \langle TC_{\vec{k}_3\sigma_3}(\tau_3) \bar{C}_{\vec{k}_2\sigma_2}(\tau_2) \rangle_0 \langle TC_{\vec{k}_4\sigma_4}(\tau_4) \bar{C}_{\vec{k}'\sigma'}(\tau') \rangle_0 \times \\ \times \langle T f_{\vec{i}_1\sigma_1}(\tau_1) f_{\vec{i}_2\sigma_2}(\tau_2) \bar{f}_{\vec{i}_3\sigma_3}(\tau_3) \bar{f}_{\vec{i}_4\sigma_4}(\tau_4) \rangle_0 \exp[i(\vec{k}_1\vec{i}_1 + \vec{k}_2\vec{i}_2 - \vec{k}_3\vec{i}_3 - \vec{k}_4\vec{i}_4)].$$

Воспользуемся теперь определением (10), опустим возникающую несвязную диаграмму и сохраним две связанные диаграммы. Они приведены на рис. 2в, г. Вклад последней диаграммы равен

$$-\frac{V^4}{N^2} \sum_{\vec{k}_1\sigma_1} \cdots \sum_{\vec{k}_4\sigma_4} \int d\tau_1 \cdots \int d\tau_4 G^{c(0)}(\vec{k}\sigma\tau | \vec{k}_1\sigma_1\tau_1) G^{c(0)}(\vec{k}_4\sigma_4\tau_4 | \vec{k}'\sigma'\tau') \times \\ \times G^{(0)ir}(\vec{k}_1, \sigma_1, \tau_1; \vec{k}_2, \sigma_2, \tau_2 | \vec{k}_3, \sigma_3, \tau_3; \vec{k}_4, \sigma_4, \tau_4) G^{c(0)}(\vec{k}_3\sigma_3\tau_3 | \vec{k}_2\sigma_2\tau_2),$$

где использовано определение фурье-образа кумулянта

$$G_2^{(0)ir}(\vec{k}_1, \sigma_1, \tau_1; \vec{k}_2, \sigma_2, \tau_2 | \vec{k}_3, \sigma_3, \tau_3; \vec{k}_4, \sigma_4, \tau_4) = \\ = \frac{1}{N} \sum_{\vec{i}_1\vec{i}_2\vec{i}_3\vec{i}_4} \exp[i(\vec{k}_1\vec{i}_1 + \vec{k}_2\vec{i}_2 - \vec{k}_3\vec{i}_3 - \vec{k}_4\vec{i}_4)] \times \\ \times G_2^{(0)ir}(\vec{i}_1, \sigma_1, \tau_1; \vec{i}_2, \sigma_2, \tau_2 | \vec{i}_3, \sigma_3, \tau_3; \vec{i}_4, \sigma_4, \tau_4) = \\ = \delta_{\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3+\vec{k}_4,0} G_2^{(0)ir}(\sigma_1, \tau_1; \sigma_2, \tau_2 | \sigma_3, \tau_3; \sigma_4, \tau_4). \quad (18)$$

Рассмотрим теперь функцию (14) f -электронов. Она может быть сведена к виду

$$\begin{aligned}
 G^{ff}(\chi | \chi') = & - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{V^{2m}}{m! N^m} \int d\tau_1 \cdots \int d\tau_{2m} \times \\
 & \times \sum_{\vec{i}_1 \vec{k}_1 \sigma_1} \cdots \sum_{\vec{i}_{2m} \vec{k}_{2m} \sigma_{2m}} \langle T \bar{C}_1 C_{2m} \rangle_0 \langle T \bar{C}_2 C_{2m-1} \rangle_0 \cdots \langle T \bar{C}_m C_{m+1} \rangle_0 \times \\
 & \times \langle T f_{\chi} \bar{f}_{\chi'} f_1 \cdots f_m \bar{f}_{m+1} \cdots \bar{f}_{2m} \rangle_0 \times \\
 & \times \exp[i(\vec{k}_1 \vec{i}_1 + \cdots + \vec{k}_m \vec{i}_m - \vec{k}_{m+1} \vec{i}_{m+1} - \cdots - \vec{k}_{2m} \vec{i}_{2m})] + G^{f(0)}(\chi | \chi').
 \end{aligned} \tag{19}$$

Во втором порядке имеем ($n = 2, m = 1$)

$$\begin{aligned}
 G^{ff(2)}(\chi | \chi') = & - \frac{V^2}{N} \int d\tau_1 \int d\tau_2 \sum_{\vec{i}_1 \vec{k}_1 \sigma_1} \sum_{\vec{i}_2 \vec{k}_2 \sigma_2} \langle T \bar{C}_1 C_2 \rangle_0 \times \\
 & \times \langle T f_{\chi} \bar{f}_{\chi'} f_1 \bar{f}_2 \rangle_0 \exp[i(\vec{k}_1 \vec{i}_1 - \vec{k}_2 \vec{i}_2)].
 \end{aligned}$$

Учтем равенство (10) и опустим слагаемое, содержащее $\langle T f_{\chi} \bar{f}_{\chi'} \rangle_0$, т.к. оно приводит к несвязной диаграмме. Остальные два слагаемых (10) дают

$$\begin{aligned}
 G^{ff(2)}(\chi | \chi') = & V^2 \iint d\tau_1 d\tau_2 \sum_{\vec{i}_1 \sigma_1 \vec{i}_2 \sigma_2} G^{f(0)}(\chi | 2) G^{c(0)}(2 | 1) G^{f(0)}(1 | \chi') - \\
 & - V^2 \delta_{\chi\chi'} \iint d\tau_1 d\tau_2 \sum_{\vec{i}_1 \vec{i}_2 \sigma_1 \sigma_2} G_2^{(0)\text{ir}}(\sigma, \tau; \sigma_1, \tau_1 | \sigma_2, \tau_2; \sigma', \tau') G^{c(0)}(2 | 1).
 \end{aligned} \tag{20}$$

Соответствующие диаграммы приведены на рис. 3. При $n = 4, m = 2$ имеем

$$\begin{aligned}
 G^{ff(4)}(\chi | \chi') = & - \frac{1}{2} \int d\tau_1 \cdots \int d\tau_4 \sum_{\vec{i}_1 \vec{k}_1 \sigma_1} \cdots \sum_{\vec{i}_4 \vec{k}_4 \sigma_4} G^{c(0)}(\vec{k}_4 | \vec{k}_1) G^{c(0)}(\vec{k}_3 | \vec{k}_2) \times \\
 & \times \langle T f_{\chi} \bar{f}_{\chi'} f_1 f_2 \bar{f}_3 \bar{f}_4 \rangle_0 \exp[i(\vec{k}_1 \vec{i}_1 + \vec{k}_2 \vec{i}_2 - \vec{k}_3 \vec{i}_3 - \vec{k}_4 \vec{i}_4)].
 \end{aligned}$$

Среднее от произведения f -операторов после своего вычисления дает шесть слагаемых, каждое из которых равно произведению трех одночастичных функций Грина (виновские слагаемые). Далее следуют 9 членов, содержащих произведения одной функции Грина и одного двухчастичного кумулянта, и, наконец, имеется один член, содержащий трехчастичный кумулянт. Соответствующие связные диаграммы со своими знаками и коэффициентами приведены на рис. 3.

Перейдем теперь к смешанным функциям Грина (15). Для функции G^{cf} справедливо разложение в ряд

$$\begin{aligned}
 G^{cf}(\vec{\chi}, \sigma, \tau | \vec{\chi}', \sigma', \tau') = & - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} \cdots \int_0^{\beta} d\tau_1 \cdots d\tau_n \times \\
 & \times \langle T f_{\vec{\chi}\sigma}(\tau) \bar{C}_{\vec{\chi}'\sigma'}(\tau') H_{\text{int}}(\tau_1) \cdots H_{\text{int}}(\tau_n) \rangle_0^c.
 \end{aligned} \tag{21}$$

Рис. 3. Простейшие диаграммы функции Грина f -электронов.

Очевидно, что в сумме следует рассмотреть только члены с $n = 2m + 1$, т.к. один оператор взаимодействия H_{int} должен скомпенсировать в (21) недостающие для образования связок операторы f -и C -состояний. Остальные $2m$ операторов взаимодействия раскрываются так же, как и в случае исследования предыдущих двух функций Грина.

Следовательно, раскрывая в (21) $(2m + 1)$ операторов взаимодействия, получим C_{2m+1}^{m+1} слагаемых, удовлетворяющих данному условию. Перестановкой индексов операторов можно добиться их идентичности и, следовательно, написать

$$\begin{aligned}
 G^{fc}(\vec{\chi}, \sigma, \tau \mid \vec{\chi}', \sigma', \tau') &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{V^{2m+1}}{N^{m+1} m! (m+1)!} \int d\tau_1 \cdots \int d\tau_{2m+1} \times \\
 &\times \sum_{\vec{i}_1 \vec{k}_1 \sigma_1} \cdots \sum_{\vec{i}_{2m+1} \vec{k}_{2m+1} \sigma_{2m+1}} \sum_{\vec{k}'} \langle T f_{\vec{\chi}\sigma}(\tau) \bar{C}_{\vec{k}'\sigma'}(\tau') \bar{f}_{\vec{i}_{2m+1} \sigma_{2m+1}}(\tau_{2m+1}) \times \\
 &\times C_{\vec{k}_{2m+1} \sigma_{2m+1}}(\tau_{2m+1}) \bar{C}_{\vec{k}_1 \sigma_1}(\tau_1) f_{\vec{i}_1 \sigma_1}(\tau_1) \cdots \bar{C}_{\vec{k}_m \sigma_m}(\tau_m) f_{\vec{i}_m \sigma_m}(\tau_m) \times \\
 &\times \bar{f}_{\vec{i}_{m+1} \sigma_{m+1}}(\tau_{m+1}) C_{\vec{k}_{m+1} \sigma_{m+1}}(\tau_{m+1}) \cdots \bar{f}_{\vec{i}_{2m} \sigma_{2m}}(\tau_{2m}) C_{\vec{k}_{2m} \sigma_{2m}}(\tau_{2m}) \rangle_0 \times \\
 &\times \exp[i(\vec{k}_1 \vec{i}_1 + \cdots + \vec{k}_m \vec{i}_m - \vec{k}_{m+1} \vec{i}_{m+1} - \cdots - \vec{k}_{2m+1} \vec{i}_{2m+1})] \exp(i\vec{k}' \vec{\chi}'). \quad (22)
 \end{aligned}$$

Учтем $(m+1)!$ виковских спариваний C -операторов и тогда получим

$$\begin{aligned}
 G^{fc}(\vec{\chi}, \sigma, \tau \mid \vec{\chi}', \sigma', \tau') = & \\
 = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{V^{2m+1}}{N^{m+1}m!} \sum_{\vec{i}_1 \vec{k}_1 \sigma_1} \cdots \sum_{\vec{i}_{2m+1} \vec{k}_{2m+1} \sigma_{2m+1}} \sum_{\vec{k}'} \int d\tau_1 \cdots \int d\tau_{2m+1} \times & \\
 \times \exp(\vec{k}' \vec{\chi}') \langle TC_{\vec{k}_{m+1} \sigma_{m+1}}(\tau_{m+1}) \bar{C}_{\vec{k}' \sigma'}(\tau') \rangle_0 \times & \\
 \times \langle TC_{\vec{k}_{m+2} \sigma_{m+2}}(\tau_{m+2}) \bar{C}_{\vec{k}_m \sigma_m}(\tau_m) \rangle_0 \cdots \langle TC_{\vec{k}_{2m+1} \sigma_{2m+1}}(\tau_{2m+1}) \bar{C}_{\vec{k}_1 \sigma_1}(\tau_1) \rangle_0 \times & \\
 \times \langle Tf_{\vec{\chi}\sigma}(\tau) f_{\vec{i}_1 \sigma_1}(\tau_1) \cdots f_{\vec{i}_m \sigma_m}(\tau_m) \bar{f}_{\vec{i}_{m+1} \sigma_{m+1}}(\tau_{m+1}) \cdots \bar{f}_{\vec{i}_{2m+1} \sigma_{2m+1}}(\tau_{2m+1}) \rangle_0 \times & \\
 \times \exp[i(\vec{k}_1 \vec{i}_1 + \cdots + \vec{k}_m \vec{i}_m - \vec{k}_{m+1} \vec{i}_{m+1} - \cdots - \vec{k}_{2m+1} \vec{i}_{2m+1})]. & (23)
 \end{aligned}$$

При $m=1$ величина $\langle f_{\chi} f_1 \bar{f}_2 \bar{f}_3 \rangle_0$ согласно (10) дает три члена, два из которых являются виковскими и один член — двухчастичным кумулянт. Одно из виковских слагаемых приводит к несвязной диаграмме. Оставшиеся две связанные диаграммы изображены со своими коэффициентами на рис. 4б, в. При $m=2$ величина $\langle Tf_{\chi} f_1 f_2 \bar{f}_3 \bar{f}_4 \bar{f}_5 \rangle_0$ дает шесть виковских слагаемых вида $\langle Tf_{\chi} f_5 \rangle_0 \langle Tf_1 \bar{f}_4 \rangle_0 \langle Tf_2 \bar{f}_3 \rangle_0$, из которых только два приводят к связным диаграммам. Эти вклады эквивалентны, и на рис. 4г приведена соответствующая диаграмма.

Далее имеются 9 членов вида $\langle Tf_{\chi} f_5 \rangle_0 \langle Tf_1 f_2 \bar{f}_3 \bar{f}_4 \rangle_0^{\text{ir}}$, представляющих собой произведение одночастичной функции Грина на двухчастичную неприводимую функцию Грина. Из них три члена приводят к несвязным диаграммам, а остальные шесть — к трем разным диаграммам, изображенным на рис. 4д, е, ж. Наконец имеется один трехчастичный кумулянт, который дает диаграмму рис. 4з. Те же рассуждения можно применить в связи со второй смешанной функцией Грина G^{cf} . В диаграммах для этой функции левой точке графика соответствует оператор уничтожения электрона приводимости, тогда как правая конечная точка принадлежит оператору рождения f -оператора.

Перейдем к анализу полученных диаграмм и установлению уравнения Дайсона.

Начнем с функции Грина для зонных электронов G^{cc} . Ее диаграммы в (k, τ) -представлении приведены на рис. 2. На основании существования слабосвязных диаграмм, которые могут быть разделены на две части разрывом одной $G^{c(0)}$ -линии, нетрудно установить уравнение Дайсона

$$G_{\sigma}^{cc}(\vec{k} \mid i\omega_n) = G_{\sigma}^{c(0)}(\vec{k} \mid i\omega_n) + G_{\sigma}^{c(0)}(\vec{k} \mid i\omega_n) \Sigma_{\sigma}(\vec{k} \mid i\omega_n) G_{\sigma}^{cc}(\vec{k} \mid i\omega_n), \quad (24)$$

где массовый оператор имеет вид

$$\Sigma_{\sigma}(\vec{k} \mid i\omega_n) = V^2 [G_{\sigma}^{f(0)}(i\omega_n) + Z_{\sigma}(\vec{k} \mid i\omega_n)] \equiv V^2 \Lambda_{\sigma}(\vec{k} \mid i\omega_n).$$

Здесь функция Z суммирует вклады многочастичных одноузельных кумулянт, но не содержит слабосвязных частей. В простейшем случае функция Z приведена на рис. 3б. Введение функции Λ_{σ} целесообразно для дальнейшего. Наличие этой функции отражает существование сильных корреляций в системе. При отсутствии одноузельного отталкивания электронов все многочастичные кумулянты тождественно равны нулю. Функция Z , введенная в работах [18, 19], содержит спиновые и зарядовые корреляции электронов, характерные для моделей Хаббарда и Андерсона.

Рис. 4. Диаграммы смешанной функции Грина.

Перейдем теперь к диаграммам рис. 3 для функции Грина f -электронов. Среди этих диаграмм имеются слабосвязные, которые могут быть разделены на две части разрывом одной линии C -электронов. Это позволяет написать уравнение Дайсона после перехода к $(\vec{k}, i\omega_n)$ -представлению

$$G_{\sigma}^{ff}(\vec{k} | i\omega_n) = \Lambda_{\sigma}(\vec{k} | i\omega_n) [1 + V^2 G_{\sigma}^{c(0)}(\vec{k} | i\omega_n) G_{\sigma}^{ff}(\vec{k} | i\omega_n)]. \quad (25)$$

Функция Z не содержит слабосвязных частей, как это уже отмечалось выше. На основании рис. 4 не представляет труда установить для смешанной G^{fc} -функции Грина следующее равенство:

$$G^{fc}(\vec{k} | i\omega_n) = G^{ff}(\vec{k} | i\omega_n) V G^{c(0)}(\vec{k} | i\omega_n), \quad (26)$$

и убедиться в равенстве фурье-образов

$$G^{fc}(\vec{k} | i\omega_n) = G^{cf}(\vec{k} | i\omega_n). \quad (27)$$

Введя величину Λ_σ , получаем окончательно

$$\begin{aligned} G_\sigma^{cc}(\vec{k} | i\omega_n) &= [G_\sigma^{c(0)-1}(\vec{k} | i\omega_n) - V^2 \Lambda_\sigma(\vec{k} | i\omega_n)]^{-1}, \\ G_\sigma^{ff}(\vec{k} | i\omega_n) &= [\Lambda_\sigma(\vec{k} | i\omega_n)^{-1} - V^2 G_\sigma^{c(0)}(\vec{k} | i\omega_n)]^{-1}, \\ G_\sigma^{cc}(\vec{k} | i\omega_n) &= G_\sigma^{c(0)}(\vec{k} | i\omega_n) + (V G_\sigma^{c(0)}(\vec{k} | i\omega_n))^2 G_\sigma^{ff}(\vec{k} | i\omega_n), \\ G_\sigma^{fc}(\vec{k} | i\omega_n) &= G_\sigma^{cf}(\vec{k} | i\omega_n) = V G_\sigma^{c(0)}(\vec{k} | i\omega_n) G_\sigma^{ff}(\vec{k} | i\omega_n). \end{aligned} \quad (28)$$

Таким образом, достаточно знать одну функцию G_σ^{ff} , чтобы определить остальные три. Спектр одночастичных элементарных возбуждений определяется из условия

$$G_\sigma^{c(0)-1}(k | E) - V^2 \Lambda_\sigma(k | E) = 0. \quad (29)$$

Этот спектр является интерференционным, т.к. ветви спектра локализованных и проводящих электронов перемешиваются и перенормируются как благодаря гибридизации, так и благодаря f -электронным корреляциям.

Химический потенциал системы μ , как известно, определяется из условия сохранения числа электронов N_e :

$$\sum_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} [G_\sigma^{ff}(\vec{k} | i\omega_n) + G_\sigma^{cc}(\vec{k} | i\omega_n)] e^{i\omega_n 0^+} = N_e. \quad (30)$$

3. ПРИБЛИЖЕНИЕ ЦЕПОЧЕЧНЫХ ДИАГРАММ

Рассмотрим те диаграммы, которые не содержат многочастичных кумулянт, т.е. опустим все слагаемые, включающие функцию Z . Это приближение эквивалентно аппроксимации “Хаббард I” для данной модели.

Спектр элементарных возбуждений находится из уравнения

$$G^{c(0)-1}(k | E) - V^2 G_\sigma^{f(0)}(E) = 0; \quad (31)$$

$$\begin{aligned} G_\sigma^{c(0)}(\vec{k} | i\omega_n) &= (i\omega_n - \mathcal{E}(\vec{k}) + \mu)^{-1}, \\ G_\sigma^{f(0)}(\vec{k} | i\omega_n) &= \frac{1 - \bar{n}_\sigma}{i\omega_n - \mathcal{E}_1} + \frac{\bar{n}_{-\sigma}}{i\omega_n - \mathcal{E}_2}, \\ \mathcal{E}_1 &= E_f - \mu, \quad \mathcal{E}_2 = U + E_f - \mu, \quad \mathcal{E}_0 = \mathcal{E}(k) - \mu, \\ \bar{n}_\sigma &= \langle f_\sigma^+ f_\sigma \rangle_0 = \frac{e^{-\beta E_\sigma} + e^{-\beta E_2}}{Z_0}, \\ Z_0 &= e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_\sigma} + e^{-\beta E_{-\sigma}} + e^{-\beta E_2}. \end{aligned} \quad (32)$$

Подставляя (32) в (31), получим уравнение третьей степени

$$(E - \mathcal{E}_0)(E - \mathcal{E}_1)(E - \mathcal{E}_2) - V^2 [E - \mathcal{E}_2 + \bar{n}_{-\sigma}(\mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_1)] = 0, \quad (33)$$

определяющее три ветви спектра одночастичных возбуждений. Одна ветвь отвечает электронам проводимости с энергией равной $\mathcal{E}_0$ в отсутствие гибридизации, а другие

две $-f$ -электронам и соответствуют нижней и верхней зонам Хаббарда. При большом значении отталкивания электронов ($U \rightarrow \infty$) решения уравнения (33) имеют вид

$$\begin{aligned} E_{1,2}(k) &= \frac{1}{2} [\mathcal{E}_0 + \mathcal{E}_1 \pm \sqrt{(\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_1)^2 + 4V^2(1 - \bar{n})}] - \\ &\quad - \frac{V^2 \bar{n}}{2\mathcal{E}_2} \left[1 \pm \frac{\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_1}{\sqrt{(\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_1)^2 + 4V^2(1 - \bar{n})}} \right] + O\left(\frac{1}{U^2}\right), \\ E_3(k) &= \mathcal{E}_2 + \frac{V^2 \bar{n}}{\mathcal{E}_2} + O\left(\frac{1}{U^2}\right). \end{aligned} \quad (34)$$

Значения $E_{1,2}$ при $U = \infty$ были приведены в работе [6]. Сумма трех решений $E_1 + E_2 + E_3$ должна равняться сумме исходных энергий $\mathcal{E}_0 + \mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2$. Вышеприведенное решение это подтверждает.

В данном приближении функции Грина могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} G_{\sigma}^{ff}(\vec{k} | i\omega_n) &= \frac{A_{\sigma}^f(\vec{k})}{i\omega_n - E_{1\sigma}} + \frac{B_{\sigma}^f(\vec{k})}{i\omega_n - E_{2\sigma}} + \frac{C_{\sigma}^f(\vec{k})}{i\omega_n - E_{3\sigma}}, \\ G_{\sigma}^{cc}(\vec{k} | i\omega_n) &= \frac{A_{\sigma}^c(\vec{k})}{i\omega_n - E_{1\sigma}} + \frac{B_{\sigma}^c(\vec{k})}{i\omega_n - E_{2\sigma}} + \frac{C_{\sigma}^c(\vec{k})}{i\omega_n - E_{3\sigma}}, \end{aligned}$$

где коэффициенты разложения для f -электронов равны

$$\begin{aligned} A_{\sigma}^f &= \frac{(E_{1\sigma} - \mathcal{E}_1)(E_{1\sigma} - \mathcal{E}_2)}{(E_{3\sigma} - E_{1\sigma})(E_{2\sigma} - E_{1\sigma})}, \\ B_{\sigma}^f &= \frac{(E_{2\sigma} - \mathcal{E}_1)(E_{2\sigma} - \mathcal{E}_2)}{(E_{3\sigma} - E_{2\sigma})(E_{1\sigma} - E_{2\sigma})}, \\ C_{\sigma}^f &= \frac{(E_{3\sigma} - \mathcal{E}_1)(E_{2\sigma} - \mathcal{E}_2)}{(E_{3\sigma} - E_{1\sigma})(E_{3\sigma} - E_{2\sigma})}. \end{aligned} \quad (35)$$

Для C -электронов имеем

$$\begin{aligned} A_{\sigma}^c &= \frac{(E_{1\sigma} - \mathcal{E}_0)[E_{1\sigma} - \mathcal{E}_2 - \bar{n}(\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2)]}{(E_{3\sigma} - E_{1\sigma})(E_{2\sigma} - E_{1\sigma})}, \\ B_{\sigma}^c &= \frac{(E_{2\sigma} - \mathcal{E}_0)[E_{2\sigma} - \mathcal{E}_2 - \bar{n}(\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2)]}{(E_{3\sigma} - E_{2\sigma})(E_{1\sigma} - E_{2\sigma})}, \\ C_{\sigma}^c &= \frac{(E_{3\sigma} - \mathcal{E}_0)[E_{3\sigma} - \mathcal{E}_2 - \bar{n}(\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2)]}{(E_{3\sigma} - E_{2\sigma})(E_{3\sigma} - E_{1\sigma})}. \end{aligned} \quad (36)$$

Вследствие того что асимптотика этих функций при $|\omega_n| \rightarrow \infty$ есть $(i\omega_n)^{-1}$, вышеприведенные коэффициенты должны удовлетворять условию

$$A_{\sigma}^{\alpha} + B_{\sigma}^{\alpha} + C_{\sigma}^{\alpha} = 1, \quad \alpha = c, f.$$

Среднее число электронов сорта α со спином σ на узле решетки равно

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{A_{\sigma}^{\alpha}}{e^{\beta E_{1\sigma}} + 1} + \frac{B_{\sigma}^{\alpha}}{e^{\beta E_{2\sigma}} + 1} + \frac{C_{\sigma}^{\alpha}}{e^{\beta E_{3\sigma}} + 1} \right].$$

В пределе большого значения $U \rightarrow \infty$ коэффициенты (35) существенно упрощаются:

$$A_{\sigma}^f \approx \mathcal{U}^2(\vec{k}), \quad B_{\sigma}^f \approx \mathcal{V}^2(\vec{k}), \quad C_{\sigma}^f \approx 0,$$

где

$$\mathcal{U}^2(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\mathcal{E}_0(\vec{k}) - \mathcal{E}_1}{\sqrt{(\mathcal{E}_0(\vec{k}) - \mathcal{E}_1)^2 + 4V^2(1 - \bar{n})}} \right], \quad \mathcal{U}^2(\vec{k}) + \mathcal{V}^2(\vec{k}) = 1.$$

Коэффициенты (36) в этом пределе равны

$$A_{\sigma}^c \approx (1 - \bar{n})\mathcal{V}^2(\vec{k}), \quad B_{\sigma}^c \approx (1 - \bar{n})\mathcal{U}^2(\vec{k}), \quad C_{\sigma}^c \approx \bar{n}.$$

При температуре T равной нулю эти коэффициенты определяют число электронов данного вида на узле решетки.

Список литературы

- [1] *P. W. Anderson.* Phys. Rev. 1961. V. 124. P. 41.
- [2] *H. J. Lader, B. Mulschlegel.* Z. Phys. B. 1978. V. 29. P. 341.
- [3] *P. Coleman.* Phys. Rev. B. 1984. V. 29. № 6. P. 3035.
- [4] *J. Callaway, D. P. Chen, D. G. Kanhere, P. K. Misra.* Phys. Rev. B. 1988. V. 38. № 4. P. 2583.
- [5] *J. Callaway, L. Tan, H. Zheng.* Phys. Rev. B. 1994. V. 50. № 3. P. 1369.
- [6] *T. M. Rice, K. Ueda.* Phys. Rev. Lett. 1985. V. 55. № 9. P. 995.
- [7] *R. Blankenbecler, J. R. Fulco, W. Gill, D. I. Scalapino.* Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. № 4. P. 411.
- [8] *K. Yamamoto, K. Ueda.* J. Phys. Soc. Japan. 1990. V. 59. № 9. P. 3284.
- [9] *K. Iamada, K. Yosida.* Electron correlation and magnetism in narrow-band systems. Ed. T. Moriya. Berlin: Springer, 1981. P. 710.
- [10] *A. Kuzemsky.* Preprint ICTP IC/93/336.
- [11] *A. L. Kuzemsky, J. C. Parlebas, H. Beck.* Physica. 1993. V. A198. P. 606; *А. Л. Куземский.* Краткие сообщения ОИЯИ 3/60/1993.
- [12] *B. H. Brandow.* Phys. Rev. 1986. V. B33. P. 215.
- [13] *B. Möller, P. Wölfle.* Phys. Rev. B. 1993. V. 48. P. 10320.
- [14] *E. Halvorsen, Q. Czyscholl.* J. Phys.: Condens. Matter. 1996. V. 8. P. 1775.
- [15] *J. Hubbard.* Proc. Roy. Soc. A. 1963. V. 276. P. 233.
- [16] *В. Л. Бонч-Бруевич, С. В. Тябликов.* Метод функций Грина в статистической механике. М.: ГИФМЛ, 1961.
- [17] *А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский.* Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: ГИФМЛ, 1962.
- [18] *М. И. Владимир, В. А. Москаленко.* ТМФ. 1990. Т. 82. № 3. С. 428.
- [19] *С. И. Вакару, М. И. Владимир, В. А. Москаленко.* ТМФ. 1990. Т. 85. № 2. С. 248.
- [20] *Н. Н. Боголюбов, В. А. Москаленко.* ДАН СССР. 1991. Т. 136. Вып. 5. С. 1107.

Поступила в редакцию 23.VII.1996 г.

V. A. Moskalenko

PERTURBATION THEORY FOR NONPERIODIC ANDERSON MODEL

The periodic Anderson model consisting of electrons of conductivity and f -localized electrons is studied. One-knot hybridization of these two subsystems of electrons is treated as a perturbation. A new diagrammatic method based on multiparticle one-knot irreducible Green's functions for f -electrons and on the usual Wick theorem for the subsystems of electrons of conductivity is developed. The Dyson equations for one-particle Green's functions and relations between them are found. The results are exact and can be used for selfconsistent approximations. In the Hubbard I approximation the spectrum of one-particle excitations is studied.