

Общероссийский математический портал

В. А. Москаленко, Н. Б. Перкинс, Метод канонического преобразования для периодической модели Андерсона, *ТМФ*, 1999, том 121, номер 3, 464–478

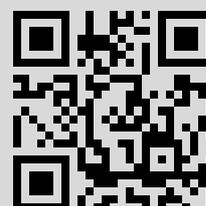
DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf823>

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: 106.51.226.7

20 августа 2022 г., 12:41:05



© 1999 г.

В. А. Москаленко\*, Н. Б. Перкинс\*

## МЕТОД КАНОНИЧЕСКОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДЛЯ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА

Исследуется вариант периодической модели Андерсона, в которой обе подсистемы, состоящие из  $d$ - и  $f$ -электронов, сильно скоррелированы. Учитываются одноузельная гибридизация квантовых состояний электронов обеих подсистем и возможность перескоков  $d$ -электронов между узлами решетки. Для построения  $S$ -матрицы канонического преобразования используется система одноузельных ортонормированных функций, принадлежащих нулевой гамильтоновой матрице шестнадцатого ранга. Точно решена задача при нулевой ширине зоны проводимости и определены термодинамические свойства системы в этом приближении. Делокализация электронов обеих подсистем и ренормировка одночастичных функций Грина исследуются на основе диаграммной техники. Определен квазичастичный энергетический спектр делокализованных электронов в приближении цепочечных диаграмм. Показано, что в симметричном случае имеются восемь энергетических подзон.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Периодическая модель Андерсона (ПМА) [1] является одной из основных моделей, содержащих сильные электронные корреляции. Она используется при исследовании свойств соединений, содержащих тяжелые фермионы, электроны с промежуточной валентностью, а также материалов с узкими энергетическими зонами. Обзор экспериментальных и теоретических результатов, полученных при исследовании этих систем, можно найти в работах [2–4]. Ниже исследуется вариант ПМА, в котором обе подсистемы  $d$ - и  $f$ -электронов сильно скоррелированы и величины их кулоновского отталкивания на узле решетки  $U_d$  и  $U_f$  являются главными параметрами теории. Гамильтониан этой модели имеет вид

$$H = H^0 + H^1, \quad (1)$$

---

\*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская область, Россия

где

$$\begin{aligned}
 H^0 &= H_d^0 + H_f^0 + H_{\text{hyb}}, \\
 H_d^0 &= \epsilon_d \sum_{i\sigma} d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} + U_d \sum_i n_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d, \\
 H_f^0 &= \epsilon_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + U_f \sum_i n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f, \\
 H_{\text{hyb}} &= V \sum_{i\sigma} (f_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} + d_{i\sigma}^+ f_{i\sigma}), \\
 H^1 &= \sum_{ij\sigma} t(j-i) d_{j\sigma}^+ d_{i\sigma},
 \end{aligned} \tag{2}$$

$d_{i\sigma}$  и  $f_{i\sigma}$  – операторы уничтожения,  $n_{i\sigma}^d = d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma}$  и  $n_{i\sigma}^f = f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma}$  – соответственно числа заполнения  $d$ - и  $f$ -электронов,  $\epsilon_d$  и  $\epsilon_f$  – локальные энергии  $d$ - и  $f$ -электронов, отсчитанные от энергии Ферми:  $\epsilon_a = \bar{\epsilon}_a - \mu$ ,  $a = (d, f)$ ;  $V$  – матричный элемент гибридизации состояний. В сформулированной модели предполагается, что  $f$ -электроны более сильно локализованы, чем  $d$ -электроны, и перекрытием их волновых функций между соседними ионами можно пренебречь. Пренебрегается также для простоты орбитальным вырождением  $d$ - и  $f$ -локальных уровней и нелокальностью матричного элемента гибридизации их состояний.

Сначала мы исследуем свойства ПМА в атомном пределе в случае, если опускается та часть гамильтониана, которая связана с перескоками. Гамильтониан (1), (2) исследовался детально в работах [5–9] в предположении, что кулоновское отталкивание  $d$ -электронов несущественно. Оно полагалось равным нулю. Предложенный нами гамильтониан, как уже отмечалось выше, учитывает отталкивание не только  $f$ -электронов, но и  $d$ -электронов. Это уточнение не приводит к существенному усложнению модели и вместе с тем дает возможность исследовать симметричную ситуацию, когда энергии дважды занятых состояний  $d$ - и  $f$ -электронов одинаковы. Возможен также и другой подход к исследованию ПМА, который основан на предположении, что в простейшем приближении имеются коллективизированные электроны более легкой  $d$ -подсистемы и локализованное состояние более тяжелой  $f$ -подсистемы. Возмущением, приводящим к делокализации электронов, при таком подходе является гибридизация состояний обеих подсистем. Именно такой подход реализован в работах [10, 11]. В работах [6, 7] справедливо подчеркивается неприменимость квантово-полевых методов теории слабой связи для вычисления  $n$ -частичных пропагаторов сильно коррелированных систем. В теории слабой связи эти величины выражаются через произведения одночастичных функций Грина (ФГ) по правилам ординарной теоремы Вика. Поэтому авторы работ [6, 7] сформулировали для локальной модели (модели без перескоков) специальную диаграммную технику и при помощи метода интегрирования по траекториям получили соответствующие аналитические выражения. В подходе работ [10, 11] в соответствии с высказанным утверждением о неприменимости к сильно коррелированным системам методов квантовой теории поля слабых взаимодействий была предложена обобщенная теорема Вика для установления структуры многочастичных ФГ нулевого приближения. Существенным новым элементом обобщенной теоремы Вика является понятие неприводимых одно-

узельных ФГ или кумулянтов Кубо, появление которых в теории целиком обязано сильным корреляциям [12–19]. Именно неприводимые ФГ и построенные на их основе новые корреляционные ФГ учитывают все существенные зарядовые и спиновые флуктуации, характерные для сильно коррелированных систем. Эти новые функции существенно меняют структуру ренормированных пропагаторов и определяют характер фазовых переходов в системе.

## 2. ЛОКАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ

Рассмотрим локальную одноузельную модель с гамильтонианом

$$H^0 = \epsilon_d \sum_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U_d n_{\uparrow}^d n_{\downarrow}^d + \epsilon_f \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + U_f n_{\uparrow}^f n_{\downarrow}^f + V \sum_{\sigma} (f_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + d_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}). \quad (3)$$

На каждом ионе решетки имеются четыре квантовых состояния для  $d$ - и  $f$ -электронов. В целом существуют шестнадцать ионных квантовых состояний:

$$\begin{aligned} |\Psi_1\rangle &= |0\rangle, & |\Psi_2\rangle &= d_{\uparrow}^{\dagger} |0\rangle, & |\Psi_3\rangle &= f_{\uparrow}^{\dagger} |0\rangle, & |\Psi_4\rangle &= d_{\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, & |\Psi_5\rangle &= f_{\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \\ |\Psi_6\rangle &= d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, & |\Psi_7\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\downarrow}^{\dagger} - d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger}) |0\rangle, & |\Psi_8\rangle &= f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \\ |\Psi_9\rangle &= d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} |0\rangle, & |\Psi_{10}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\downarrow}^{\dagger} + d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger}) |0\rangle, & |\Psi_{11}\rangle &= d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \\ |\Psi_{12}\rangle &= d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} |0\rangle, & |\Psi_{13}\rangle &= d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, & |\Psi_{14}\rangle &= d_{\uparrow}^{\dagger} f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \\ |\Psi_{15}\rangle &= d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, & |\Psi_{16}\rangle &= d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $|0\rangle$  – вакуумное состояние системы, в котором нет ни  $d$ -, ни  $f$ -электронов и тем самым полное число частиц на ионе  $N$  равно нулю. Равен нулю также суммарный спин  $S$  иона. Состояния  $|\Psi_2\rangle, \dots, |\Psi_5\rangle$  имеют число электронов  $N = 1$ , полный спин  $S = 1/2$  с проекциями  $\pm 1/2$ . Квантовые состояния  $|\Psi_6\rangle, |\Psi_7\rangle, |\Psi_8\rangle$  синглетные с  $N = 2$  и  $S = 0$ . Следующие три состояния  $|\Psi_9\rangle, |\Psi_{10}\rangle, |\Psi_{11}\rangle$  являются компонентами триплета с  $N = 2$ ,  $S = 1$ ,  $S_z = -1, 0, +1$ . У четырех состояний  $|\Psi_{12}\rangle, |\Psi_{13}\rangle, |\Psi_{14}\rangle, |\Psi_{15}\rangle$  имеем  $N = 3$ ,  $S = 1/2$ ,  $S_z = \pm 1/2$ . Последнее состояние  $|\Psi_{16}\rangle$  имеет  $N = 4$ ,  $S = 0$ .

Матрица локального гамильтониана (3), построенная на квантовых состояниях (4), – квазидиагональная матрица шестнадцатого ранга, по главной диагонали которой расположены следующие десять матриц меньшего ранга: одна матрица первого ранга, две матрицы второго ранга, одна матрица третьего ранга, три матрицы первого ранга, две матрицы второго ранга и, наконец, одна матрица первого ранга. Обозначим матричные элементы этой матрицы через  $H_{mn}^0$ , где  $m, n = 1, \dots, 16$ .

Для решения проблемы диагонализации матрицы и точного решения локальной модели введем полную ортонормированную систему функций  $\Phi_n(E_{\lambda})$ , удовлетворяющую системе шестнадцати однородных уравнений:

$$\begin{pmatrix} H_{1,1}^0 & \dots & H_{1,16}^0 \\ \vdots & & \vdots \\ H_{16,1}^0 & \dots & H_{16,16}^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_1(E_{\lambda}) \\ \vdots \\ \Phi_{16}(E_{\lambda}) \end{pmatrix} = E_{\lambda} \begin{pmatrix} \Phi_1(E_{\lambda}) \\ \vdots \\ \Phi_{16}(E_{\lambda}) \end{pmatrix}, \quad (5)$$

и условиям нормировки

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda=1}^{16} \Phi_n^*(E_\lambda) \Phi_m(E_\lambda) &= \delta_{m,n}, \\ \sum_{n=1}^{16} \Phi_n^*(E_\lambda) \Phi_n(E_{\lambda'}) &= \delta_{\lambda,\lambda'}. \end{aligned} \quad (6)$$

Благодаря квазидиагональности матрицы  $H_{mn}^0$  система уравнений (5) распадается на десять независимых подсистем линейных уравнений, а именно на пять линейных уравнений с одним неизвестным, на четыре системы однородных уравнений  $2 \times 2$  и, наконец, на одну систему уравнений  $3 \times 3$ .

Из шестнадцати собственных значений энергии  $E_\lambda$ ,  $\lambda = 1, 2, \dots, 16$ , некоторые совпадают. Чтобы устранить это вырождение, к диагональным элементам матрицы  $H_{nn}^0$  добавляются малые слагаемые  $\delta n$ , снимающие указанное вырождение. После получения ортонормированных решений эти малые поправки устремляются к нулю. При этом возникают совпадения численных значений решений для разных подсистем, однако сохраняются их ортогональность и нормировка. Локальный, ренормированный благодаря гибридизации энергетический спектр и соответствующие решения имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} E_1 &= 0, & \Phi_1(E_1) &= 1, & \Phi_1(E_{\lambda \neq 1}) &= 0, \\ E_{2,3} &= \frac{1}{2} \left[ \epsilon_d + \epsilon_f \mp \sqrt{(\epsilon_d - \epsilon_f)^2 + 4V^2} \right], \\ \Phi_2(E_{2,3}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ 1 \mp \frac{\epsilon_d - \epsilon_f}{\sqrt{(\epsilon_d - \epsilon_f)^2 + 4V^2}} \right]^{1/2}, \\ \Phi_3(E_{2,3}) &= \mp \frac{\text{sign } V}{\sqrt{2}} \left[ 1 \pm \frac{\epsilon_d - \epsilon_f}{\sqrt{(\epsilon_d - \epsilon_f)^2 + 4V^2}} \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Кроме этого, надо иметь в виду, что  $\Phi_{2,3}(E_\lambda) = 0$  при  $\lambda \neq 2, 3$ . Подсистема функций с индексами 4, 5 численно совпадает с подсистемой 2, 3, однако остается ортогональной к последней:

$$\begin{aligned} E_{4,5} &= E_{2,3}, & \Phi_4(E_{4,5}) &= \Phi_2(E_{2,3}), \\ \Phi_5(E_{4,5}) &= \Phi_3(E_{2,3}), & \Phi_{4,5}(E_\lambda) &= 0, \quad \lambda \neq 4, 5. \end{aligned} \quad (8)$$

Система трех линейных уравнений для трех неизвестных имеет вид

$$\begin{pmatrix} 2\epsilon_d + U_d - E_\lambda & \sqrt{2}V & 0 \\ \sqrt{2}V & \epsilon_d + \epsilon_f - E_\lambda & \sqrt{2}V \\ 0 & \sqrt{2}V & \epsilon_d + \epsilon_f - E_\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_6(E_\lambda) \\ \Phi_7(E_\lambda) \\ \Phi_8(E_\lambda) \end{pmatrix} = 0. \quad (9)$$

Эту систему легко решить в симметричном случае, когда энергия двойного заполнения  $d$ -уровня на ионе совпадает с соответствующей величиной для  $f$ -электронов, т.е. имеет место равенство

$$\Delta \equiv 2\epsilon + U_d - (2\epsilon_f + U_f) = 0. \quad (10)$$

Оно может легко выполняться, т.к.  $f$ -электроны, обладая более глубоким локальным уровнем  $\epsilon_f \leq \epsilon_d$ , имеют и более сильное кулоновское отталкивание  $U_f \geq U_d$ . В этом специальном случае получаем

$$E_{6,8} = \epsilon_d + \epsilon_f + \frac{U}{2} \mp \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + (4V)^2}, \quad E_7 = \epsilon_d + \epsilon_f + U \quad (11)$$

со следующими значениями функций  $\Phi_n(E_\lambda)$ :

$$\begin{aligned} \Phi_6(E_7) = -\Phi_8(E_7) &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & \Phi_6(E_{6,8}) = \Phi_8(E_{6,8}) &= \frac{1}{2} \left[ 1 \mp \frac{U}{\sqrt{U^2 + (4V)^2}} \right]^{1/2}, \\ \Phi_7(E_7) &= 0, & \Phi_7(E_{6,8}) &= \mp \frac{\text{sign } V}{\sqrt{2}} \left[ 1 \pm \frac{U}{\sqrt{U^2 + (4V)^2}} \right]^{1/2}, \end{aligned} \quad (12)$$

где  $U = (U_d + U_f)/2$ .

Следующие три триплетных решения имеют одинаковые значения энергии:

$$E_9 = E_{10} = E_{11} = \epsilon_d + \epsilon_f, \quad (13)$$

и ортонормированные решения

$$\Phi_n(E_\lambda) = \delta_{n,\lambda}, \quad n = 9, 10, 11. \quad (14)$$

Здесь был использован, как и ранее, прием со снятием вырождения на промежуточном этапе вычислений. Аналогичные вычисления, выполненные для подсистемы уравнений, содержащей индексы  $n = 12, 13$ , приводят к следующим решениям для энергии:

$$E_{12,13} = \frac{1}{2} \left[ 3(\epsilon_d + \epsilon_f) + 2U \mp \sqrt{\left(\frac{\Delta_1}{2}\right)^2 + (2V)^2} \right], \quad (15)$$

где  $\Delta_1 = 2(\epsilon_f - \epsilon_d) + 2\Delta$ , и для собственных функций:

$$\begin{aligned} \Phi_{12}(E_{12,13}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ 1 \mp \frac{\Delta_1}{\sqrt{\Delta_1^2 + (4V)^2}} \right]^{1/2}, \\ \Phi_{13}(E_{12,13}) &= \pm \frac{\text{sign } V}{\sqrt{2}} \left[ 1 \pm \frac{\epsilon_d - \epsilon_f}{\sqrt{(\epsilon_d - \epsilon_f)^2 + 4V^2}} \right]^{1/2}, \\ \Phi_{12,13}(E_\lambda) &= 0, \quad \lambda \neq 12, 13. \end{aligned} \quad (16)$$

Для подсистемы функций с индексами  $n = 14, 15$  получаем следующие результаты:

$$\begin{aligned} E_{14,15} &= E_{12,13}, & \Phi_{14}(E_{14,15}) &= \Phi_{12}(E_{12,13}), \\ \Phi_{15}(E_{14,15}) &= \Phi_{13}(E_{12,13}), & \Phi_{14,15}(E_\lambda) &= 0, \quad \lambda \neq 14, 15. \end{aligned} \quad (17)$$

Последнее линейное уравнение для функции  $\Phi_{16}(E_\lambda)$  имеет решение

$$E_{16} = 2(\epsilon_d + \epsilon_f) + 2U, \quad \Phi_{16}(E_\lambda) = \delta_{\lambda,16}. \quad (18)$$

Эти вычисления завершают определение локальных ионных энергий, ренормированных гибридизацией, и соответствующих ортонормированных функций  $\Phi_n(E_\lambda)$ . Полученные нами значения для энергии  $E_\lambda$  являются непосредственным обобщением на случай  $U_d \neq 0$  выражений, установленных в работах [2, 6]. Значение этой полной системы функций позволяет определить  $S$ -матрицу, которая диагонализует локальный гамильтониан

$$\tilde{H}^0 = S^{-1} H^0 S = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & E_2 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & E_{16} \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Нетрудно видеть, что матричными элементами  $S$ -матрицы являются введенные нами функции  $\Phi_n(E_\lambda)$ :

$$S = \begin{pmatrix} \Phi_1(E_1) & \dots & \Phi_1(E_{16}) \\ \Phi_2(E_1) & \dots & \Phi_2(E_{16}) \\ \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \dots & \cdot \\ \Phi_{16}(E_1) & \dots & \Phi_{16}(E_{16}) \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Знание  $S$ -матрицы позволяет написать закон преобразования волновых функций при переходе от  $n$ - к  $\lambda$ -представлению

$$|\Psi_n\rangle = \sum_\lambda \Phi_n(E_\lambda) |E_\lambda\rangle, \quad \langle \Psi_n| = \sum_\lambda \langle E_\lambda | \Phi_n^*(E_\lambda), \quad (21)$$

$$|E_\lambda\rangle = \sum_n \Phi_n^*(E_\lambda) |\Psi_n\rangle, \quad \langle E_\lambda| = \sum_n \langle \Psi_n | \Phi_n(E_\lambda), \quad (22)$$

где  $|E_\lambda\rangle$  и  $\langle E_\lambda|$  – волновые функции квантовых состояний диагонализированной матрицы  $\tilde{H}^0$ . На основании формулы (22) и установленных выше свойств функций  $\Phi_n(E_\lambda)$  получаем следующие определения ренормированных гибридизацией ионных волновых функций:

$$\begin{aligned} |E_1\rangle &= |0\rangle, & |E_2\rangle &= \Phi_2(E_2) |\Psi_2\rangle + \Phi_3(E_2) |\Psi_3\rangle, & |E_3\rangle &= \Phi_2(E_3) |\Psi_2\rangle + \Phi_3(E_3) |\Psi_3\rangle, \\ |E_4\rangle &= \Phi_4(E_4) |\Psi_4\rangle + \Phi_5(E_4) |\Psi_5\rangle, & |E_5\rangle &= \Phi_4(E_5) |\Psi_4\rangle + \Phi_5(E_5) |\Psi_5\rangle, \\ |E_a\rangle &= \Phi_6(E_a) |\Psi_6\rangle + \Phi_7(E_a) |\Psi_7\rangle + \Phi_8(E_a) |\Psi_8\rangle, & a &= 6, 7, 8, \\ |E_b\rangle &= |\Psi_b\rangle, & b &= 9, 10, 11, \\ |E_{12}\rangle &= \Phi_{12}(E_{12}) |\Psi_{12}\rangle + \Phi_{13}(E_{12}) |\Psi_{13}\rangle, & |E_{13}\rangle &= \Phi_{12}(E_{13}) |\Psi_{12}\rangle + \Phi_{13}(E_{13}) |\Psi_{13}\rangle, \\ |E_{14}\rangle &= \Phi_{14}(E_{14}) |\Psi_{14}\rangle + \Phi_{15}(E_{14}) |\Psi_{15}\rangle, & |E_{15}\rangle &= \Phi_{14}(E_{15}) |\Psi_{14}\rangle + \Phi_{15}(E_{15}) |\Psi_{15}\rangle, \\ |E_{16}\rangle &= |\Psi_{16}\rangle. \end{aligned} \quad (23)$$

Эти функции были приведены в работах [2, 6] для более простой модели. Одна из приведенных функций, обладающая наименьшей энергией, является ренормированным гибриридизацией основным состоянием иона. Такой функцией в нашем симметричном случае является синглетное состояние  $|E_6\rangle$  с  $N = 2$  и  $S = 0$ . Знание ренормированного гибриридизацией, а не перескоками, энергетического спектра иона позволяет найти статистическую сумму  $Z_0$  в атомном приближении, а также термодинамический потенциал  $F_0$ , приходящийся на один узел кристаллической решетки:

$$\begin{aligned} Z_0 &= \sum_{\lambda=1}^{16} e^{-\beta E_\lambda} = 1 + 2e^{-\beta E_2} + 2e^{-\beta E_3} + \\ &+ \sum_{a=6,7,8} e^{-\beta E_a} + 3e^{-\beta E_9} + 2e^{-\beta E_{12}} + 2e^{-\beta E_{13}} + e^{-\beta E_{16}}, \quad (24) \\ F_0 &= -k_B T \ln Z_0, \end{aligned}$$

где  $\beta = (k_B T)^{-1}$ . Если учесть равенство  $\partial E_\lambda / \partial \mu = -N$ , то на основе соотношений (24) нетрудно установить, что

$$n^d + n^f = \langle n_\uparrow^d + n_\downarrow^d n_\uparrow^f + n_\downarrow^f \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_0}{\partial \mu}. \quad (25)$$

Это последнее уравнение можно переписать в виде

$$n^d + n^f - 2 = \frac{2}{Z_0} \left[ (e^{-\beta E_{16}} - 1) + (e^{-\beta E_{12}} - e^{-\beta E_2}) + (e^{-\beta E_{13}} - e^{-\beta E_3}) \right]. \quad (26)$$

В случае, если условие симметрии (10) выполняется, возможны некоторые упрощения, а именно

$$E_{12,13} = E_{2,3} + \frac{1}{2} E_{16}. \quad (27)$$

Вследствие этого можно написать, что

$$n^d + n^f - 2 = \frac{2}{Z_0} \left( e^{-\frac{\beta E_{16}}{2}} - 1 \right) \left( 1 + e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_3} + e^{-\frac{\beta E_{16}}{2}} \right). \quad (28)$$

Отсюда следует, что среднее число частиц на узле в атомном пределе равно двум, если  $E_{16} = 0$ , т.е. химический потенциал фиксируется условием

$$2\mu = \bar{\epsilon}_d + \bar{\epsilon}_f + U. \quad (29)$$

Это условие соответствует половинному заполнению зоны. При  $\mu \rightarrow -\infty$  величина  $n^d + n^f$  приближается к нулю, а при  $\mu \rightarrow +\infty$  — к четырем.

### 3. ФУНКЦИИ ГРИНА ЛОКАЛЬНОЙ МОДЕЛИ

Для диагонализации гамильтонианов, содержащих сильные корреляции, следует использовать операторы Хаббарда [20]

$$X^{mn} = |\Psi_m\rangle\langle\Psi_n|. \quad (30)$$

Связь между этими величинами и операторами уничтожения  $d$ - и  $f$ -электронов в случае ПМА имеет вид

$$d_\sigma = X^{1,3-\sigma} + \sigma X^{3+\sigma,6} + \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma X^{4+\sigma,7} + X^{4+\sigma,10}) + \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma X^{10,13-\sigma} - X^{7,13-\sigma}) + \\ + \sigma X^{10+\sigma,13+\sigma} + X^{4-\sigma,10-\sigma} + X^{8,14-\sigma} + \sigma X^{14+\sigma,16} \quad (31)$$

и

$$f_\sigma = X^{1,4-\sigma} + \sigma X^{4+\sigma,8} + \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma X^{3+\sigma,7} - X^{3+\sigma,10}) - X^{3-\sigma,10-\sigma} + \\ + X^{6,13-\sigma} - \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma X^{7,14-\sigma} + \sigma X^{10,14-\sigma}) + \\ + \sigma(-X^{10+\sigma,14+\sigma} + X^{13+\sigma,16}). \quad (32)$$

Если на ионе имеется только одна подсистема, например сильно коррелированных  $d$ -электронов, в правой части уравнения (31) сохраняются лишь два слагаемых. Это замечание объясняет происхождение сложной структуры одночастичных ФГ, которые будут приведены ниже. Вместо операторов Хаббарда  $X^{mn}$ , построенных на исходных волновых функциях  $|\Psi_n\rangle$ , целесообразнее ввести операторы

$$Y^{\lambda\lambda'} = |E_\lambda\rangle\langle E_{\lambda'}|, \quad (33)$$

построенные на собственных функциях диагонализированного гамильтониана. Закон преобразования операторов Хаббарда между двумя представлениями локального гамильтониана определяется законами преобразования (21) и (22). На этой основе получаем

$$X^{mn} = \sum_{\lambda\lambda'} \Phi_m(E_\lambda) \Phi_n^*(E_{\lambda'}) Y^{\lambda\lambda'}, \\ Y^{\lambda\lambda'} = \sum_{mn} \Phi_m^*(E_\lambda) \Phi_n(E_{\lambda'}) X^{mn}. \quad (34)$$

Из соотношений (31), (32) и (34) и свойств системы функции  $\Phi_n(E_\lambda)$  возникают следующие определения операторов уничтожения  $d$ - и  $f$ -электронов через операторы Хаббарда  $Y^{\lambda\lambda'}$ :

$$d_\uparrow = \sum_{\lambda=2,3} \Phi_2(E_\lambda) Y^{1,\lambda} + \sum_{\lambda=2,3} \Phi_3(E_\lambda) Y^{\lambda,9} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\lambda=4,5} \Phi_5(E_\lambda) Y^{5,10} +$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{a=6,7,8} \sum_{\lambda=4,5} \left[ \Phi_5(E_\lambda) \frac{\Phi_7(E_a)}{\sqrt{2}} + \Phi_4(E_\lambda) \Phi_6(E_a) \right] Y^{\lambda,a} + \\
& + \sum_{a=6,7,8} \sum_{\lambda=12,13} \left[ -\frac{\Phi_7(E_a)}{\sqrt{2}} \Phi_{12}(E_\lambda) + \Phi_8(E_a) \Phi_{13}(E_\lambda) \right] Y^{a,\lambda} + \\
& + \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\lambda=12,13} \Phi_{12}(E_\lambda) Y^{10,\lambda} + \sum_{\lambda=14,15} (\Phi_{14}(E_\lambda) Y^{11,\lambda} + \Phi_{15}(E_\lambda) Y^{\lambda,16}), \quad (35) \\
f_\uparrow = & \sum_{\lambda=2,3} (\Phi_3(E_\lambda) Y^{1,\lambda} - \Phi_2(E_\lambda) Y^{\lambda,9}) - \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\lambda=4,5} \Phi_4(E_\lambda) Y^{\lambda,10} + \\
& + \sum_{a=6,7,8} \sum_{\lambda=4,5} \left[ \Phi_4(E_\lambda) \frac{\Phi_7(E_a)}{\sqrt{2}} + \Phi_5(E_\lambda) \Phi_8(E_a) \right] Y^{\lambda,a} + \\
& + \sum_{a=6,7,8} \sum_{\lambda=12,13} \left[ -\frac{\Phi_7(E_a)}{\sqrt{2}} \Phi_{13}(E_\lambda) + \Phi_6(E_a) \Phi_{12}(E_\lambda) \right] Y^{a,\lambda} - \\
& - \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\lambda=12,13} \Phi_{13}(E_\lambda) Y^{10,\lambda} + \sum_{\lambda=14,15} (-\Phi_{15}(E_\lambda) Y^{11,\lambda} + \Phi_{14}(E_\lambda) Y^{\lambda,16}). \quad (36)
\end{aligned}$$

Из этих формул нетрудно в локальном приближении найти среднее число  $d$ - и  $f$ -электронов на решеточном узле:

$$\begin{aligned}
\langle d_\uparrow^+ d_\uparrow \rangle_0 = & \frac{1}{Z_0} \left[ \sum_{\lambda=2,3} \Phi_2^2(E_\lambda) e^{-\beta E_\lambda} + \sum_{a=6,7,8} \left( \Phi_6^2(E_a) + \frac{\Phi_7^2(E_a)}{2} \right) e^{-\beta E_a} + \right. \\
& \left. + \frac{3}{2} e^{-\beta E_9} + \sum_{\lambda=12,13} (1 + \Phi_{12}^2(E_\lambda)) e^{-\beta E_\lambda} + e^{-\beta E_{16}} \right], \quad (37)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle f_\uparrow^+ f_\uparrow \rangle_0 = & \frac{1}{Z_0} \left[ \sum_{\lambda=2,3} \Phi_3^2(E_\lambda) e^{-\beta E_\lambda} + \sum_{a=6,7,8} \left( \frac{\Phi_7^2(E_a)}{2} + \Phi_8^2(E_a) \right) e^{-\beta E_a} + \right. \\
& \left. + \frac{3}{2} e^{-\beta E_9} + \sum_{\lambda=12,13} (1 + \Phi_{13}^2(E_\lambda)) e^{-\beta E_\lambda} + e^{-\beta E_{16}} \right]. \quad (38)
\end{aligned}$$

Сумма этих двух выражений дает среднее число электронов с данным направлением спина. Эта величина, как и следует ожидать, в два раза меньше, чем значение (25), в силу эквивалентности обоих направлений спина. Благодаря тому что гибридизация перемешивает  $d$ - и  $f$ -электронные состояния, средняя величина вида

$$\begin{aligned}
\langle f_\uparrow^+ d_\uparrow \rangle_0 = & \frac{1}{Z_0} \left[ \sum_{\lambda=2,3} \Phi_2(E_\lambda) \Phi_3(E_\lambda) e^{-\beta E_\lambda} - \sum_{\lambda=14,15} \Phi_{14}(E_\lambda) \Phi_{15}(E_\lambda) e^{-\beta E_\lambda} + \right. \\
& \left. + \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{a=6,7,8} \Phi_7(E_a) (\Phi_6(E_a) + \Phi_8(E_a)) e^{-\beta E_a} \right] \quad (39)
\end{aligned}$$

отлична от нуля при  $V \neq 0$ .

Рассмотрим определение мацубаровских одночастичных ФГ электронов обеих подсистем

$$\begin{aligned} G_{\sigma}^{d(0)}(\tau - \tau') &= -\langle T d_{\sigma}(\tau) \bar{d}_{\sigma}(\tau') \rangle_0, \\ G_{\sigma}^{f(0)}(\tau - \tau') &= -\langle T f_{\sigma}(\tau) \bar{f}_{\sigma}(\tau') \rangle_0, \\ G_{\sigma}^{df(0)}(\tau - \tau') &= -\langle T d_{\sigma}(\tau) \bar{f}_{\sigma}(\tau') \rangle_0 \end{aligned} \quad (40)$$

и вычислим их фурье-компоненты, определенные равенством

$$G_{\sigma}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} G_{\sigma}(i\omega_n),$$

где

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}.$$

Используя определение (40) и соотношения (35), (36), получаем

$$\begin{aligned} G_{\uparrow}^{d(0)}(i\omega) &= \frac{1}{Z_0} \left\{ \sum_{\lambda=2,3} \Phi_2^2(E_{\lambda}) \frac{(e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_{\lambda}})}{i\omega + E_1 - E_{\lambda}} + \right. \\ &+ \frac{3}{2} \sum_{\lambda=2,3} \frac{\Phi_2^2(E_{\lambda})(e^{-\beta E_{\lambda}} + e^{-\beta E_9})}{i\omega + E_{\lambda} - E_9} + \\ &+ \sum_{a=6,7,8} \sum_{\lambda=2,3} \left[ \Phi_3(E_{\lambda}) \frac{\Phi_7(E_a)}{\sqrt{2}} + \Phi_2(E_{\lambda}) \Phi_6(E_a) \right]^2 \frac{(e^{-\beta E_{\lambda}} + e^{-\beta E_a})}{i\omega + E_{\lambda} - E_a} + \\ &+ \frac{3}{2} \sum_{\lambda=12,13} \frac{\Phi_{12}^2(E_{\lambda})(e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_{\lambda}})}{i\omega + E_9 - E_{\lambda}} + \sum_{\lambda=12,13} \frac{\Phi_{13}^2(E_{\lambda})(e^{-\beta E_{\lambda}} + e^{-\beta E_{16}})}{i\omega + E_{\lambda} - E_{16}} + \\ &\left. + \sum_{a=6,7,8} \sum_{\lambda=12,13} \left[ -\frac{\Phi_7(E_a)}{\sqrt{2}} \Phi_{12}(E_{\lambda}) + \Phi_8(E_a) \Phi_{13}(E_{\lambda}) \right]^2 \frac{(e^{-\beta E_{\lambda}} + e^{-\beta E_a})}{i\omega + E_a - E_{\lambda}} \right\}. \quad (41) \end{aligned}$$

Для  $f$ -электронов находим

$$\begin{aligned} G_{\uparrow}^{f(0)}(i\omega) &= \frac{1}{Z_0} \left\{ \sum_{\lambda=2,3} \Phi_3^2(E_{\lambda}) \frac{(e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_{\lambda}})}{i\omega + E_1 - E_{\lambda}} + \right. \\ &+ \frac{3}{2} \sum_{\lambda=2,3} \frac{\Phi_2^2(E_{\lambda})(e^{-\beta E_{\lambda}} + e^{-\beta E_9})}{i\omega + E_{\lambda} - E_9} + \\ &+ \sum_{a=6,7,8} \sum_{\lambda=2,3} \left[ \Phi_2(E_{\lambda}) \frac{\Phi_7(E_a)}{\sqrt{2}} + \Phi_3(E_{\lambda}) \Phi_8(E_a) \right]^2 \frac{(e^{-\beta E_{\lambda}} + e^{-\beta E_a})}{i\omega + E_{\lambda} - E_a} + \\ &+ \frac{3}{2} \sum_{\lambda=12,13} \frac{\Phi_{13}^2(E_{\lambda})(e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_{\lambda}})}{i\omega + E_9 - E_{\lambda}} + \sum_{\lambda=12,13} \frac{\Phi_{12}^2(E_{\lambda})(e^{-\beta E_{\lambda}} + e^{-\beta E_{16}})}{i\omega + E_{\lambda} - E_{16}} + \end{aligned}$$

$$+ \sum_{a=6,7,8} \sum_{\lambda=12,13} \left[ -\frac{\Phi_7(E_a)}{\sqrt{2}} \Phi_{13}(E_\lambda) + \Phi_6(E_a) \Phi_{12}(E_\lambda) \right]^2 \frac{(e^{-\beta E_\lambda} + e^{-\beta E_a})}{i\omega + E_a - E_\lambda} \Bigg\}. \quad (42)$$

Нетрудно установить также вид смешанной локальной гриновской функции:

$$\begin{aligned} G_{\uparrow}^{df(0)}(i\omega) = & \frac{1}{Z_0} \left\{ \sum_{\lambda=2,3} \Phi_2(E_\lambda) \Phi_3(E_\lambda) \left( \frac{(e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_\lambda})}{i\omega + E_1 - E_\lambda} - \frac{3}{2} \frac{(e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_\lambda})}{i\omega + E_\lambda - E_9} \right) + \right. \\ & + \sum_{\lambda=12,13} \Phi_{12}(E_\lambda) \Phi_{13}(E_\lambda) \left( -\frac{3}{2} \frac{e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_\lambda}}{i\omega + E_9 - E_\lambda} + \frac{e^{-\beta E_\lambda} + e^{-\beta E_{16}}}{i\omega + E_\lambda - E_{16}} \right) + \\ & + \sum_{a=6,7,8} \sum_{\lambda=2,3} \left[ \Phi_3(E_\lambda) \frac{\Phi_7(E_a)}{\sqrt{2}} + \Phi_2(E_\lambda) \Phi_6(E_a) \right] \times \\ & \times \left[ \Phi_2(E_\lambda) \frac{\Phi_7(E_a)}{\sqrt{2}} + \Phi_3(E_\lambda) \Phi_8(E_a) \right] \frac{(e^{-\beta E_\lambda} + e^{-\beta E_a})}{i\omega + E_\lambda - E_a} + \\ & + \sum_{a=6,7,8} \sum_{\lambda=12,13} \left[ -\frac{\Phi_7(E_a)}{\sqrt{2}} \Phi_{13}(E_\lambda) + \Phi_6(E_a) \Phi_{12}(E_\lambda) \right] \times \\ & \times \left[ -\frac{\Phi_7(E_a)}{\sqrt{2}} \Phi_{12}(E_\lambda) + \Phi_8(E_a) \Phi_{13}(E_\lambda) \right] \frac{(e^{-\beta E_\lambda} + e^{-\beta E_a})}{i\omega + E_a - E_\lambda} \Bigg\}. \quad (43) \end{aligned}$$

В случае, если реализуется условие симметрии (10), можно получить следующие простые соотношения:

$$\Phi_{12}(E_{12,13}) = \Phi_2(E_{3,2}), \quad \Phi_{13}(E_{12,13}) = \Phi_3(E_{3,2}). \quad (44)$$

Если, помимо условия (10), выполняется также равенство  $E_{16} = 0$  и химический потенциал фиксирован условием (29), то легко проверить следующие свойства симметрии  $(a, b) = (d, f)$ :

$$G_{\sigma}^{ab(0)}(-i\omega_n, -V) = -G_{\sigma}^{ab(0)}(i\omega_n, V). \quad (45)$$

При этом диагональные по зонным  $(d, f)$ -индексам величины четны по отношению к замене знака  $V$ , тогда как недиагональные по этим индексам  $\Phi\Gamma$  нечетны. Четность этих функций по отношению к знакам частоты обратная в противоположность четности по отношению к знаку гибридизации.

#### 4. ПРОЦЕСС ДЕЛОКАЛИЗАЦИИ

Теперь рассмотрим процесс перенормировки  $\Phi\Gamma$ , обусловленный перескоками  $d$ -электронов между узлами решетки.

Полные матцубаровские  $\Phi\Gamma$  в представлении взаимодействия имеют вид

$$\begin{aligned} G_{\sigma\sigma'}^d(x - x') &= -\langle T d_{\mathbf{x}\sigma}(\tau) \bar{d}_{\mathbf{x}'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^{\zeta}, \\ G_{\sigma\sigma'}^d(x - x') &= -\langle T f_{\mathbf{x}\sigma}(\tau) \bar{f}_{\mathbf{x}'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0^{\zeta}, \end{aligned} \quad (46)$$

$$G_{\sigma\sigma'}^d f(x - x') = -\langle T d_{\mathbf{x}\sigma}(\tau) \bar{f}_{\mathbf{x}'\sigma'}(\tau') U(\beta) \rangle_0,$$

где  $x = (\mathbf{x}, \sigma)$ . Оператор эволюции в нашей модели есть

$$U(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_n T H'(\tau_1) \dots H'(\tau_n). \quad (47)$$

Он совпадает по форме с аналогичным оператором для однозонной модели Хаббарда  $d$ -электронов. Под  $\langle \dots \rangle_0$  подразумевается среднее статистическое по ансамблю состояний оператора  $H^0$  с ограничением, что только связанные диаграммы принимаются во внимание. Для исследования процесса перенормировки следует воспользоваться обобщенной теоремой Вика [12, 19] и правилами построения диаграмм каждого порядка теории возмущений. Отметим, что первое уравнение (46) совпадает по форме с аналогичным уравнением однозонной модели Хаббарда  $d$ -электронов. Отличие, состоящее в том, что операторы  $H^0$  совершенно разные для ПМА и для модели Хаббарда, не влияет на структуру уравнения Дайсона для полного пропагатора  $d$ -электронов. Поэтому следует воспользоваться результатами, полученными в работах [12, 13] для модели Хаббарда  $d$ -зоны. Это позволяет нам написать следующее уравнение Дайсона:

$$G_{\sigma\sigma'}^d(x - x') = \Lambda_{\sigma\sigma'}^d(x - x') + \sum_{\sigma_1} \sum_{\vec{x}_1, \vec{x}_2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \Lambda_{\sigma_1\sigma'}^d(x - x_1) t(x_1 - x_2) G_{\sigma_1\sigma'}^d(x_2 - x'), \quad (48)$$

где

$$t(x_1 - x_2) = t(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \delta(\tau_1 - \tau_2)$$

и

$$\Lambda_{\sigma\sigma'}^d(x - x') = G_{\sigma\sigma'}^{d(0)}(x - x') + Z_{\sigma\sigma'}^d(x - x'). \quad (49)$$

Функция  $Z_{\sigma\sigma'}^d$  в правой части формулы (49) представляет собой сумму сильно связанных неприводимых диаграмм [12, 13], содержащую все зарядовые и спиновые корреляции, характерные для сильно коррелированных систем. Вид диаграмм для этой функции приведен в работах [12, 13].

Вопрос о структуре диаграмм для  $f$ -электронов, а также для смешанного пропагатора ( $d, f$ )-электронов требует специального исследования и в данной работе не затрагивается.

Если в уравнении Дайсона (48) сохранить лишь цепочечные диаграммы и тем самым пренебречь всеми неприводимыми вкладами, т.е. положить функцию  $Z^d$  равной нулю, то возникнет аппроксимация, эквивалентная так называемой Хаббард-I-аппроксимации. ФГ в этом приближении снабжены индексом "I".

Для фурье-компоненты  $d$ -пропагатора в этом приближении получаем

$$G_{\sigma}^{dI}(\vec{k}, i\omega) = G_{\sigma}^{d(0)}(i\omega) [1 - \epsilon(\vec{k}) G_{\sigma}^{d(0)}(i\omega)]^{-1}. \quad (50)$$

Это простейшее приближение приводит к концепции квазичастиц с хорошо определенным энергетическим спектром. Поскольку при этом принят во внимание процесс делокализации, энергетический спектр является зонным и число возникающих подзон зависит от числа различных квантовых переходов, содержащихся в локальном пропагаторе. Нули знаменателя функции (50), продолженной аналитически с дискретной совокупности точек  $\omega_n$  на всю комплексную энергетическую  $E$ -плоскость, определяют ширину и расположение энергетических подзон:

$$1 - \epsilon(\vec{k})G_{\sigma}^{d(0)}(E) = 0, \quad (51)$$

где  $\epsilon(\vec{k})$  – энергия затравочной  $d$ -зоны.

Спектр подзон (51) является коллективным. Можно показать, что если бы мы исходили из пропагатора  $f$ -электронов или из смешанного пропагатора, то получили бы то же самое уравнение (51) для спектра подзон. Если бы в (51) в качестве нулевого пропагатора использовалось не выражение (41), а то выражение, которое имеется для однозонной модели Хаббарда, то мы получили бы нижнюю и верхнюю подзоны Хаббарда.

В нашем случае число подзон будет определяться числом различных энергетических знаменателей формулы (41). В симметричном случае в правой части (41) имеются следующие восемь различных энергетических разностей:

$$\begin{aligned} E_1 - E_2 &= E_3 - E_9 = E_7 - E_{12} = -E_f, \\ E_1 - E_3 &= E_2 - E_9 = E_7 - E_{13} = -E_d, \\ E_2 - E_6 &= E_8 - E_{13} = -E_d + \alpha^2 U, \\ E_3 - E_6 &= E_8 - E_{12} = -E_f + \alpha^2 U, \\ E_2 - E_7 &= E_9 - E_{13} = E_{12} - E_{16} = -E_d - U, \\ E_3 - E_7 &= E_9 - E_{12} = E_{13} - E_{16} = -E_f - U, \\ E_2 - E_8 &= E_6 - E_{13} = -E_d - U - \alpha^2 U, \\ E_3 - E_8 &= E_6 - E_{12} = -E_f - U - \alpha^2 U, \end{aligned} \quad (52)$$

где

$$\begin{aligned} E_d &= \epsilon_d + \frac{\Phi^2}{1 - 2\Phi^2}(\epsilon_d - \epsilon_f), \quad E_f = \epsilon_f + \frac{\Phi^2}{1 - 2\Phi^2}(\epsilon_d - \epsilon_f), \\ \Phi^2 &= \frac{1}{2} \left[ 1 - \left( 1 + \left( \frac{2V}{\epsilon_d - \epsilon_f} \right)^2 \right)^{-1/2} \right], \quad \alpha^2 = \frac{\Psi^2}{1 - 2\Psi^2}, \\ \Psi^2 &= \frac{1}{2} \left[ 1 - \left( 1 + \left( \frac{4V}{U} \right)^2 \right)^{-1/2} \right]. \end{aligned} \quad (53)$$

Обозначим

$$D^2 = \frac{1}{2} \left[ \Phi^2 + \Psi^2 - 2\Phi^2\Psi^2 - \frac{4V^2(1 - 2\Phi^2)(1 - 2\Psi^2)}{U(\epsilon_d - \epsilon_f)} \right].$$

В этом случае функция (41) принимает вид

$$G_{\uparrow}^{d(0)}(E) = \frac{(1 - \Phi^2)A_1}{E - E_d} + \frac{(1 - 2D^2)A_2}{E - E_d + \alpha^2 U} + \frac{(1 - \Phi^2)A_3}{E - E_f - U} +$$

$$+ \frac{(1 - 2D^2)A_4}{E - E_f - U - \alpha^2 U} + \frac{\Phi^2 A_5}{E - E_f} + \frac{D^2 A_6}{E - E_f + \alpha^2 U} +$$

$$+ \frac{D^2 A_7}{E - E_d - U - \alpha^2 U} + \frac{\Phi^2 A_8}{E - E_d - U}. \quad (54)$$

Коэффициенты  $A_n$  имеют следующие значения:

$$Z_0 A_1 = e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_3} + \frac{3}{2}(e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_9}) + \frac{1}{2}(e^{-\beta E_7} + e^{-\beta E_{13}}),$$

$$Z_0 A_2 = e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_8} + e^{-\beta E_{13}},$$

$$Z_0 A_3 = \frac{1}{2}(e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_7}) + \frac{3}{2}(e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_{12}}) + e^{-\beta E_{13}} + e^{-\beta E_{16}},$$

$$Z_0 A_4 = \frac{1}{2}(e^{-\beta E_3} + e^{-\beta E_8}) + \frac{1}{2}(e^{-\beta E_6} + e^{-\beta E_{12}}), \quad (55)$$

$$Z_0 A_5 = e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2} + \frac{3}{2}(e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_3}) + \frac{1}{2}(e^{-\beta E_7} + e^{-\beta E_{12}}),$$

$$A_6 = 2A_4, \quad A_7 = A_2,$$

$$Z_0 A_8 = e^{-\beta E_{12}} + e^{-\beta E_{16}} + \frac{3}{2}(e^{-\beta E_9} + e^{-\beta E_{13}}) + \frac{1}{2}(e^{-\beta E_2} + e^{-\beta E_{16}}).$$

Поэтому решение уравнения (51) на основе функции (54) приводит к восьми различным энергетическим подзонам. Детальное исследование этого спектра будет приведено отдельно.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Нами предложена новая форма канонического преобразования, которая диагонализует гамильтониан локального приближения гибридизированных сильно коррелированных  $d$ - и  $f$ -электронов.  $S$ -матрица этого преобразования строится при помощи полной ортонормированной системы функций  $\Phi_n(E_\lambda)$  для матрицы локального гамильтониана. Функции  $\Phi_n(E_\lambda)$  являются матричными элементами  $S$ -матрицы шестнадцатого ранга. Знание  $S$ -матрицы позволило выразить операторы уничтожения и рождения  $d$ - и  $f$ -электронов через операторы Хаббарда. Тем самым решается вопрос о вычислении среднего числа частиц и одночастичных локальных пропагаторов и определении в дальнейшем неприводимых ФГ. Таким образом, метод канонического преобразования точно решает все вопросы локальной модели, соответствующей нулевой ширине энергетических подзон. На примере пропагатора  $d$ -электронов показано, каким образом происходит перенормировка ФГ и возникает точное уравнение Дайсона. Приближение Хаббард-I для ПМА в симметричном случае приводит к возникновению восьми энергетических подзон, которые определяют спектр элементарных возмущений. Этот хорошо определенный спектр является в действительности результатом сделанной грубой аппроксимации. Учет зарядовых и спиновых флуктуаций разрушает эту простую физическую картину.

**Благодарности.** Авторы пользуются случаем поблагодарить профессора Н. М. Плакиду и членов руководимого им семинара за полезное обсуждение. Работа поддержана грантом “Гейзенберг–Ландау”.

#### Список литературы

- [1] *P. W. Anderson.* Phys. Rev. 1961. V. 124. P. 41.
- [2] *G. Czycholl.* Phys. Rep. 1986. V. 143. P. 277.
- [3] *P. Schlottmann.* Phys. Rep. 1989. V. 181. P. 1.
- [4] *С. Г. Овчинников.* УФН. 1997. Т. 167. С. 1043.
- [5] *B. R. Alascio, R. Allub, A. Aligia.* J. Phys. C: Solid Stat. Phys. 1980. V. 13. P. 2869.
- [6] *F. Mancini, M. Marinaro, Y. Nakano.* Physica B. 1989. V. 159. P. 330.
- [7] *F. Mancini, M. Marinaro, Y. Nakano, C. Noce, A. Romano.* Nuovo Cimento D. 1989. V. 11. P. 1709.
- [8] *C. Noce, A. Romano.* J. Phys: Condens. Matter. 1989. V. 1. P. 8347.
- [9] *C. Noce, A. Romano.* Physica B. 1990. V. 160. P. 304.
- [10] *В. А. Москаленко.* ТМФ. 1997. Т. 110. С. 308.
- [11] *В. А. Москаленко.* ТМФ. 1998. Т. 116. С. 456.
- [12] *М. И. Владимир, В. А. Москаленко.* ТМФ. 1990. Т. 82. С. 428.
- [13] *С. И. Вакару, М. И. Владимир, В. А. Москаленко.* ТМФ. 1990. Т. 85. С. 248.
- [14] *Н. Н. Боголюбов, В. А. Москаленко.* Краткие сообщения ОИЯИ. 1990. № 5. С. 1.
- [15] *Н. Н. Боголюбов, В. А. Москаленко.* ТМФ. 1991. Т. 86. С. 16.
- [16] *Н. Н. Боголюбов, В. А. Москаленко.* ДАН СССР. 1991. Т. 316. С. 1107.
- [17] *Н. Н. Боголюбов, В. А. Москаленко.* ТМФ. 1992. Т. 92. С. 182.
- [18] *С. П. Кожокару, В. А. Москаленко.* ТМФ. 1993. Т. 97. С. 270.
- [19] *V. A. Moskalenko, S. P. Cojocaru, M. I. Vladimir.* A diagram technique for strongly interacting fermion systems. One- and two-band Hubbard models. Preprint ICTP, IC/94/182, Trieste, Italy, 1994.
- [20] *J. Hubbard.* Proc. Roy. Soc. A. 1963. V. 276. P. 233.

Поступила в редакцию 19.V.1999 г.