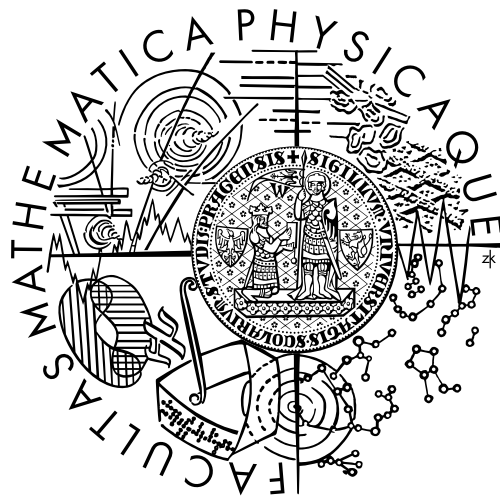


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

DIPLOMOVÁ PRÁCE



Pavel Augustinský

**Studium silných elektronových korelací v příměsových
modelech pomocí diagramatických metod**

Ústav teoretické fyziky

Vedoucí diplomové práce: Prof. RNDr. Václav Janiš, DrSc.
FZÚ AV ČR

Studijní program: Teoretická fyzika

Poděkování

Na tomto místě bych chtěl poděkovat především vedoucímu své práce Prof. Václavu Janišovi za vřelý přístup a mnoho cenných rad. Dále děkuji svým kolegům Jindřichu Kolorenčovi a Karlu Netočnému za plodné diskuse a věcné připomínky k mé práci.

Prohlašuji, že jsem svou diplomovou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce.

V Praze dne 11. srpna 2005

Pavel Augustinský

Obsah

1	Úvod	1
1.1	Kondův model	1
1.2	Andersonův model jedné příměsi	2
1.3	Hubbardův model	5
1.4	Vytyčení cílů práce	6
2	Diagramatická poruchová teorie	7
2.1	Greenovy funkce	7
2.2	Pohybová rovnice pro Greenovy funkce	10
2.3	Poruchová teorie	13
2.4	Dysonova rovnice	16
2.5	Betheho-Salpeterovy rovnice	17
2.6	Schwingerova-Dysonova rovnice	22
3	Standardní přibližné metody	25
3.1	Modelové Greenovy funkce	25
3.2	Hartreeho přiblížení	26
3.2.1	Vznik lokálního magnetického momentu	27
3.3	Jednokanálová přiblížení	28
3.3.1	Přiblížení náhodných fází (RPA)	29
3.3.2	Přiblížení matice přechodu (TMA)	31
3.3.3	Přiblížení stíněné interakce	32
3.4	Přiblížení fluktuující výměny (FLEX)	32
3.4.1	Numerické řešení	33
3.4.2	Asymptotické chování pro velká U	36
3.5	Shrnutí	38
4	Parquetové rovnice	41
4.1	Úvod	41
4.2	Aproximační schéma	44
4.3	Numerické řešení	46

OBSAH **iv**

4.4	Asymptotické chování pro velká U	49
5	Závěr	53
	Přílohy	53
A	Frekvenční sumace	54

Název práce: Studium silných elektronových korelací v příměsových modelech pomocí diagramatických metod

Autor: Pavel Augustinský

Katedra: Ústav teoretické fyziky

Vedoucí diplomové práce: Prof. RNDr. Václav Janiš, DrSc., FZU AV ČR

e-mail vedoucího: janis@fzu.cz

Abstrakt: V této práci studujeme kvantové modely interagujících elektronů a výsledky používáme na Andersonův model jedné příměsi. V první části uvádíme souhrn použitých metod. Jsou to především diagramatická poruchová teorie a z ní vycházející Dysonova rovnice, Betheho-Salpeterovy rovnice a Schwingerova-Dysonova rovnice. Dále rozebíráme několik běžně používaných přiblížení vycházejících z diagramatické poruchové teorie. Hartreeho přiblížení, přiblížení náhodných fází (RPA), přiblížení matice přechodu (TMA), přiblížení stíněné interakce a přiblížení fluktuující výměny (FLEX). Ta však z různých důvodů selhávají při popisu Andersonova modelu v režimu silné vazby. V poslední části vybudujeme metodu založenou na takzvané parketové rovnici, která dává pro Andersonův model kvalitativně správné výsledky jak v režimu slabé, tak silné vazby. Kondova energetická škála spočtená na jejím základě je v poměrně dobrém souhlasu s exaktním výsledkem a numerické řešení ukazuje vznik takzvaných satelitních pásů v hustotě stavů.

Klíčová slova: Feynmanovy diagramy, Andersonův model jedné příměsi, Parketové rovnice, Kondova škála.

Title: Study of strong electron correlations in impurity models by means of diagrammatic methods.

Author: Pavel Augustinský

Department: Institute of Theoretical Physics

Supervisor: Prof. RNDr. Václav Janiš, DrSc., FZU AV ČR

Supervisor's e-mail address: janis@fzu.cz

Abstract: In this thesis, we study quantum models of interacting electrons and we apply our results to the single impurity Anderson model. In first part, we show the summary of used methods. These are mainly the diagrammatic perturbation theory and outgoing Dyson equation, Bethe-Salpeter equations and Schwinger-Dyson equation. Next we analyze a few standard approximations based on diagrammatic perturbation theory. Hartree approximation, random phase approximation (RPA), transfer matrix approximation (TMA), shielded interaction approximation and fluctuation exchange approximation (FLEX). From various reasons, these approximations fails to describe Anderson model in strong coupling regime. In the last part, we build up method based on the so-called parquet equation, wich gives satisfactory results in both weak and strong coupling regime. Calculated Kondo energy scale is in good agreement with exact result and numerical solution shows satellite peaks in the density of states.

Keywords: Feynman diagrams, Single impurity Anderson model, Parquet equation, Kondo scale.

Kapitola 1

Úvod

1.1 Kondův model

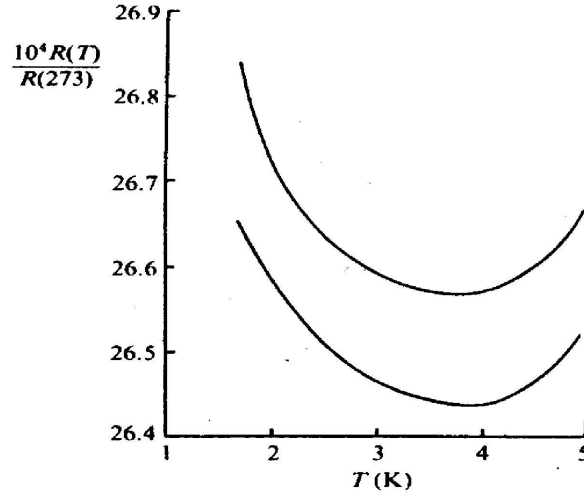
V roce 1934 objevili de Haas, de Boer a van der Berg [5], že malá koncentrace magnetických příměsí v jinak nemagnetickém kovu vede ke vzniku minima v teplotní závislosti jeho elektrického odporu, který nejde k nule s klesající teplotou, jak je tomu v běžném případě. Magnetickou příměsí rozumíme atom s nenulovým magnetickým momentem díky částečně zaplněné (typicky) d - nebo f -elektronové slupce. Příklad experimentálně stanovené teplotní závislosti odporu vidíme na obrázku 1.1.

Dlouhou dobu představoval tento jev záhadu a jeho teoretické vysvětlení podal až japonský fyzik Jun Kondo v roce 1964, tedy 30 let po jeho objevení. Ten předpokládal, že systém vodivostních elektronů a jedné magnetické příměsí je popsán hamiltoniánem, dnes nazývaným jako Kondův hamiltonián

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left[S^+ c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}',\uparrow} + S^- c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}',\downarrow} + S_z (c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}',\uparrow} - c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}',\downarrow}) \right], \quad (1.1)$$

kde $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$, $c_{\mathbf{k},\sigma}$ jsou kreační a anihilační operátory vodivostního elektronu s hybností \mathbf{k} a spinem σ , $n_{\mathbf{k},\sigma} = c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma}$ je operátor počtu částic a S_z , S^+ a S^- jsou spinové operátory lokálního spinu (předpokládáme, že čtenář je obeznámen s formalismem druhého kvantování a v případě nejasností odkazujeme na [3]). První člen popisuje kinetickou energii vodivostních elektronů s disperzní relací $\epsilon_{\mathbf{k}}$, druhý (známý jako s - d hamiltonián) pak jejich interakci s lokálním spinem. Její tvar dovoluje proces, při kterém se vodivostní elektron ve stavu \mathbf{k} , σ rozptýlí do stavu \mathbf{k}' , $-\sigma$, tedy „překlopí“ svůj spin za současného posunu spinu příměsí opačným směrem (takzvaný spin-flip scattering). Právě to jej kvalitativně odlišuje od běžného potenciálového rozptylu.

Výpočet vodivosti z Kondova hamiltoniánu (popsaný například v [7]) vede



Obrázek 1.1: Minimum elektrického odporu zlata s malou příměsí železa. Převzato z [5].

ke korekci k standardnímu vztahu pro teplotní závislost elektrického odporu, která má tvar $\delta R(T) \sim -c_{\text{imp}} \ln(T/T_K)$, kde T_K je takzvaná Kondova teplota. Tato korekce je v souladu s experimentálními výsledky v okolí minima $R(T)$, ale pro $T \rightarrow 0$ předpovídá $R \rightarrow \infty$, což již v souladu s experimentem není.

Chování Kondova modelu v limitě $T \rightarrow 0$ teoreticky vysvětlil až K. G. Wilson metodou renormalizační grupy [13].

1.2 Andersonův model jedné příměsi

Kondo postuloval zavedením hamiltoniánu (1.1) existenci „tvrdého“ lokálního spinu a ponechal stranou vysvětlení jeho vzniku. To podal P.W. Anderson v [1], kde pro popis systému příměsi a vodivostních elektronů použil model dnes známý jako Andersonův model jedné příměsi (Single Impurity Anderson Model, SIAM) popsaný hamiltoniánem

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k},\sigma} + E_d (n_{d,\uparrow} + n_{d,\downarrow}) + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left[V_{d,\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{d,\sigma} + V_{d,\mathbf{k}}^* c_{d,\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \right] + U n_{d,\uparrow} n_{d,\downarrow}. \quad (1.2)$$

Symbole $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$, $c_{\mathbf{k},\sigma}$ zde mají stejný význam jako v (1.1) a $c_{d,\sigma}^\dagger$, $c_{d,\sigma}$ jsou kreační a anihilační operátory elektronu ve stavu lokalizovaném na příměsi (index d používáme proto, že ve skutečných materiálech má tento stav typicky d nebo f symetrii). První člen odpovídá kinetické energii vodivostních elektronů s disperzní relací $\epsilon_{\mathbf{k}}$, druhý odpovídá vazbové energii d -elektronů. Třetí představuje hybridizaci, neboli amplitudu přechodu mezi \mathbf{k} a d stavy. V běžně užívaném přiblížení zanedbáváme její \mathbf{k} -závislost a maticový element $V_{d,k}$ nahrazujeme konstantou V . Poslední člen Andersonova hamiltoniánu odpovídá coulombické interakci mezi (lokalizovanými) d -elektrony.

V limitě $U \rightarrow \infty$ můžeme Andersonův hamiltonián zobrazit na hamiltonián Kondův takzvanou Schriefferovou-Wolffovou transformací popsanou například v [7]. Zde uvedme pouze vztah pro výslednou vazbovou konstantu $J_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ vystupující v (1.1)

$$J_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = V_{kd}^* V_{k'd} \left(\frac{1}{E_d + U - \epsilon_{\mathbf{k}'}} + \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - E_d} \right). \quad (1.3)$$

Tento výsledek můžeme intuitivně interpretovat tak, že proces překlopení spinu vodivostního elektronu může probíhat dvěma různými způsoby. První z nich $|\mathbf{k}' \downarrow\rangle + |d \uparrow\rangle \rightarrow |d \uparrow \downarrow\rangle \rightarrow |\mathbf{k} \uparrow\rangle + |d \downarrow\rangle$ prochází mezistavem s energií $E_d + U - \epsilon_{\mathbf{k}'}$ a druhý $|\mathbf{k}' \downarrow\rangle + |d \uparrow\rangle \rightarrow |\mathbf{k}' \downarrow\rangle + |\mathbf{k} \uparrow\rangle \rightarrow |\mathbf{k} \uparrow\rangle + |d \downarrow\rangle$ prochází mezistavem s energií $\epsilon_{\mathbf{k}} - E_d$.

Andersonův model vykazuje několik kvalitativně odlišných typů chování v závislosti na hodnotách parametrů vystupujících v (1.2).

Je-li hodnota U malá, vykazuje tento model chování typické pro Fermioho kapalinu. V limitě $U \rightarrow \infty$ sice chování Fermiovy kapaliny přetrvává, ale pouze na rychle se zužující energetické škále.

V případě, že $E_d = -U/2$ mluvíme o symetrickém Andersonově modelu (energetické hladiny jednou a dvakrát obsazené příměsi jsou rozmístěny symetricky okolo Fermiho meze). Dále se budeme zabývat pouze tímto případem.

V takzvané atomové limitě, kde $V = 0$, je hamiltonián (1.2) součtem dvou komutujících částí. Vlastnosti základního stavu pak závisí na hodnotách E_d a U . V tomto případě se může příměs nacházet v singletních stavech $|0\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$ s energií 0 a $2E_d + U$ nebo v dubletních stavech $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ s energií E_d . Základní stav je tedy v atomové limitě dubletní (má magnetický moment) pokud $E_d < 0$ a $U > -E_d$, jako například ve zmíněném symetrickém případě.

Pokud je však hybridizace nenulová (i když libovolně malá), situace se kvalitativně změní a těsně pod dubletním stavem odpovídajícím atomové limitě vznikne základní stav singletní. To můžeme ukázat variační metodou.

Zvolme testovací ket

$$|\psi_0\rangle = \left[\alpha_0 + \sum_{k < k_F, \sigma} \alpha_{\mathbf{k}} c_{d, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} \right] |0\rangle, \quad (1.4)$$

kde $|0\rangle = \prod_{k < k_F, \sigma} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger |\text{vac}\rangle$ je zaplněné Fermiho moře.

Horní odhad energie základního získáme minimalizací funkcionálu

$$E[|\psi_0\rangle] = \frac{\langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle}. \quad (1.5)$$

Dosazením Andersonova hamiltoniánu (1.2) dostáváme po zanedbání \mathbf{k} -závislosti hybridizace a odečtení energie Fermiho moře

$$E[|\psi_0\rangle] = \frac{2 \sum_{k < k_F} [\alpha_{\mathbf{k}}^2 (E_d - \epsilon_{\mathbf{k}}) + 2 \alpha_0 \alpha_{\mathbf{k}} V]}{\alpha_0^2 + 2 \sum_{k < k_F} \alpha_{\mathbf{k}}^2}. \quad (1.6)$$

Minimum tohoto výrazu nalezneme řešením rovnic

$$\frac{dE}{d\alpha_0} = 0, \quad \frac{dE}{d\alpha_{\mathbf{k}}} = 0. \quad (1.7)$$

Provedením derivací dostáváme po přímočarých úpravách

$$\alpha_0 E = 2 \sum_{k < k_F} \alpha_{\mathbf{k}} V, \quad (1.8)$$

$$\alpha_{\mathbf{k}} E = (E_d - \epsilon_{\mathbf{k}}) \alpha_{\mathbf{k}} + \alpha_0 V. \quad (1.9)$$

Dosazením rovnice (1.9) do pravé strany (1.8) dostáváme implicitní vztah pro E

$$E = 2 \sum_{k < k_F} \frac{V^2}{E - E_d + \epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (1.10)$$

Zavedme Kondovu energii $\Delta_K = E - E_d$ udávající rozdíl mezi energií stavu $|\psi_0\rangle$ a energií základního stavu v atomové limitě.

Sumaci přes hybnosti nahradíme integrací přes energii s hustotou stavů vodivostních elektronů $\rho_c(\epsilon)$ jako

$$E_d + \Delta_K = 2 \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \rho_c(\epsilon) \frac{-V^2}{\epsilon - \Delta_K}. \quad (1.11)$$

Předpokládáme (a později ukážeme), že Δ_K je malé. Dominantní příspěvek k integrálu (1.11) má tedy okolí bodu $\epsilon = 0$, kde integrand diverguje s $\Delta_K \rightarrow 0$. V dobrém přiblížení proto můžeme hustotu stavů nahradit konstantou rovnou

její hodnotě na Fermiho mezi. Díky malosti Δ_K jej také můžeme zanedbat oproti E_d na levé straně (1.11) a po provedení integrace dostáváme

$$E_d = -2\rho_c(0)V^2 \ln \left(\frac{\epsilon_F}{|\Delta_K|} \right). \quad (1.12)$$

Tato rovnice má dvě řešení $\pm\Delta_K$. Protože hledáme *minimum* funkcionálu (1.5), je

$$\Delta_K = -\epsilon_F \exp \left(\frac{E_d}{2\rho_c(0)V^2} \right). \quad (1.13)$$

V případě symetrického Andersonova modelu, kde $E_d = -U/2$ tento vztah přechází na

$$\Delta_K = -\epsilon_F \exp \left(-\frac{U}{4\rho_c(0)V^2} \right). \quad (1.14)$$

Vidíme, že v limitě vysokého U je použitý předpoklad malosti Kondovy energie oprávněný.

Dá se ukázat, že existence tohoto základního stavu vede ke vzniku rezonančního píku v hustotě stavů na Fermiho mezi. Mluvíme o takzvaném Kondově píku. Váha tohoto píku je úměrná Kondově energii Δ_K .

Dodejme ještě, že díky exponenciální závislosti Δ_K na parametrech modelu se velikost této škály ve skutečných materiálech pohybuje v rozmezí mnoha řádů.

Již na tomto místě vidíme, že chceme-li zreprodukovat Kondovu energetickou škálu pomocí poruchové teorie založené na rozvoji v mocnících síly interakce U (diagramatické poruchové teorii), nemůžeme uspět po přímocharém sečtení několika příspěvků konečného řádu (musíme dostat výsledek typu $\exp(-U)$), ale je nezbytné sečíst nekonečně mnoho členů všech řádů v U .

1.3 Hubbardův model

Na studium jednopříměsového modelu lze převést také takzvaný Hubbardův model [8] definovaný hamiltoniánem

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (1.15)$$

Hubbardův hamiltonián popisuje elektrony na mřížových bodech i . Elektrony mohou přeskakovat mezi nejbližšími sousedy a získat tak kinetickou energii úměrnou parametru t (mluvíme o takzvaném hoppingu). Pokud se na jednom

mřížovém bodě setkají dva elektrony (ty musí mít podle Pauliho principu opačné spiny), odpuzují se Coulombickou interakcí U .

V takzvaném přiblížení DMFT (Dynamical Mean-Field Theory) zanedbávajícím prostorové, nikoliv však časové fluktuační se Hubbardův model redukuje na jediný mřížový bod „ponořený“ do neinteragující lázně. Dostáváme tak efektivní jednopříměsový model. Více o DMFT je možné nalézt v [4]

V souladu s intuitivní představou se přiblížení DMFT stane přesným v limitě nekonečného počtu nejbližších mřížových sousedů (v nekonečné dimenzi).

Hubbardův model je fundamentálním modelem interagujících elektronů a jeho řešení představuje velmi složitý problém.

1.4 Vytyčení cílů práce

Jak jsme již zmínili, chování Andersonova jednopříměsového modelu silně závisí na hodnotě síly interakce U .

Naším cílem je vybudování poruchové teorie popisující alespoň kvalitativně správně chování tohoto modelu jak v režimu slabé, tak silné vazby U .

Metoda, kterou zvolíme k řešení tohoto problému bude diagramatická poruchová teorie.

Kapitola 2

Diagramatická poruchová teorie

V této kapitole popíšeme metody, které později použijeme při výpočtech vlastností modelových systémů uvedených v předchozí kapitole. Naše metody budou založeny na diagramatické poruchové teorii.

Pro zjednodušení zápisu položíme v celém dalším textu

$$\hbar = 1. \quad (2.1)$$

2.1 Greenovy funkce

Diagramatická teorie je sada pravidel pro konstrukci poruchové řady *Greenových funkcí*.

Greenovy funkce jsou maticovými elementy S -matice a představují amplitudu pravděpodobnosti pro přechod systému mezi různými (obecně mnohočásticovými) stavy. Výhodou formalismu Greenových funkcí je to, že z jejich znalosti můžeme získat informace o studovaném systému, jako například spektrum hamiltoniánu (hustotu stavů) bez explicitní znalosti mnohočásticové vlnové funkce (její výpočet je neřešitelně složitý a zbytečný).

Existuje celá řada Greenových funkcí a jejich výčet je možné nalézt například v [11]. My budeme používat pouze následující typy:

- *Jednočásticová retardovaná Greenova funkce:*

Jednočásticová retardovaná Greenova funkce je definovaná jako

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{R}}(\lambda, t, \lambda', t') &= -i \langle [c_{\lambda}(t), c_{\lambda'}^{\dagger}(t')]_{\zeta} \rangle \theta(t - t') \\ &\equiv -i \operatorname{Tr} \left\{ \rho [c_{\lambda}(t), c_{\lambda'}^{\dagger}(t')]_{\zeta} \right\} \theta(t - t'), \end{aligned} \quad (2.2)$$

kde λ je proměnná označující vlastní hodnoty nějaké úplné množiny pozorovatelných (například $\lambda = (\mathbf{k}, \sigma)$) a $c_{\lambda}, c_{\lambda}^{\dagger}$ jsou anihilační a kreační

operátory částice v tomto stavu v Heisenbergově reprezentaci. Jejich časový vývoj je dán jako

$$c_\lambda(t) = \exp(iHt)c_\lambda \exp(-iHt), \quad (2.3)$$

$$c_\lambda^\dagger(t) = \exp(iHt)c_\lambda^\dagger \exp(-iHt). \quad (2.4)$$

Matice hustoty má v grandkanonickém souboru tvar $\rho = Z^{-1} \exp[-\beta(H - \mu N)]$, kde $Z = \text{Tr} \exp(-\beta(H - \mu N))$ je partiční suma. Chemický potenciál μ dále „absorbujeme“ do hamiltoniánu a namísto $H - \mu N$ budeme psát pouze H . Symbolem $[\dots]_\zeta$ rozumíme komutátor nebo antikomutátor

$$[c_\lambda, c_{\lambda'}^\dagger]_\zeta \equiv c_\lambda c_{\lambda'}^\dagger + \zeta c_{\lambda'}^\dagger c_\lambda, \quad (2.5)$$

kde hodnota ζ závisí na charakteru operátorů c, c^\dagger . Pro operátory fermionové je $\zeta = 1$, pro bosonové $\zeta = -1$. Je-li hamiltonián nezávislý na čase (jinými případy se nebudeme zabývat), je retardovaná Greenova funkce závislá pouze na rozdílové proměnné $G_R(\lambda, t, \lambda', t') = G_R(\lambda, t - t', \lambda', 0)$.

Dále budeme používat časovou Fourierovu transformaci retardované Greenovy funkce. Tu není možné definovat běžným způsobem (pro reálné frekvence), protože příslušný integrál obecně nemá smysl. Z definice $G_R(t)$ je však zřejmé, že pro $t < 0$ je $G_R(t) = 0$. Díky tomu je podle reziduové věty $G_R(\omega)$ holomorfní v polorovině $\text{Im} \omega > 0$ komplexních frekvencí, a tím pádem existuje alespoň její limita k reálné ose shora (index R dále nebudeme u Fourierovy transformace $G_R(t)$ uvádět). Tím dospějeme k funkci, jejíž inverzní Fourierovou transformací získáme zpět $G_R(t)$. Definujeme tedy

$$G(\omega_+) = \int_{-\infty}^{\infty} dt G_R(t) \exp(i\omega_+ t), \quad (2.6)$$

kde indexem $+$ značíme infinitezimálně malou kladnou imaginární část $\omega_+ \equiv \omega + i\epsilon$.

- *Jednočásticová teplotní Greenova funkce:*

Jednočásticová teplotní, nebo též Matsubarova Greenova funkce je definovaná jako

$$\begin{aligned} G(\lambda, \tau, \lambda', \tau') &= - \langle T \{ c_\lambda(\tau) c_{\lambda'}^\dagger(\tau') \} \rangle \\ &\equiv - \langle c_\lambda(\tau) c_{\lambda'}^\dagger(\tau') \rangle \theta(\tau - \tau') \\ &\quad + \zeta \langle c_{\lambda'}^\dagger(\tau') c_\lambda(\tau) \rangle \theta(\tau' - \tau), \end{aligned} \quad (2.7)$$

kde

$$c_\lambda(\tau) = \exp(H\tau) c_\lambda \exp(-H\tau), \quad (2.8)$$

$$c_\lambda^\dagger(\tau) = \exp(H\tau) c_\lambda^\dagger \exp(-H\tau), \quad (2.9)$$

jsou anihilační a kreační operátory v Heisenbergově reprezentaci v *imaginárním* čase $t = -i\tau$. Upozorňujeme na to, že tyto operátory nejsou navzájem hermitovskky sdružené, ale platí $[c_\lambda(\tau)]^\dagger = c_\lambda^\dagger(-\tau)$. Středování $\langle \dots \rangle$ zde má stejný význam jako v (2.2). Symbolem T rozumíme operátor uspořádání podle imaginárního času (jeho význam je definován druhým a třetím řádkem (2.7)). Za stejných podmínek jako funkce retardovaná je i funkce teplotní závislá pouze na rozdílové proměnné $G(\lambda, \tau, \lambda'\tau') = G(\lambda, \tau - \tau', \lambda', 0)$.

Z cykličnosti stopy a komutačních relací c, c^\dagger plyne pro $0 < \tau \leq \beta$

$$G(\tau - \beta) = -\zeta G(\tau). \quad (2.10)$$

Tato vlastnost nám dovoluje rozvinout $G(\tau)$ z intervalu $\tau \in (-\beta, \beta)$ do Fourierovy řady, jejíž koeficienty jsou

$$G(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau G(\tau) \exp(i\omega_n\tau), \quad (2.11)$$

kde

$$\text{pro fermiony : } \omega_n = (2n + 1)\pi/\beta \quad (2.12)$$

$$\text{pro bosony : } \omega_n = 2n\pi/\beta. \quad (2.13)$$

Díky symetrii (2.10) jsou zbylé koeficienty nulové. Inverzní transformace je dána vztahem

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n G(i\omega_n) \exp(-i\omega_n\tau) \quad (2.14)$$

Dále budeme symbolem ω_n vždy značit fermionové frekvence a pro frekvence bosonové vyhradíme symbol ν_n .

Fourierovu transformaci teplotní Greenovy funkce značíme stejným symbolem, jako Fourierovu transformaci funkce retardované, protože jsou obě vyčíslení téže funkce komplexní proměnné, rezolventy hamiltoniánu, v různých bodech komplexní roviny (jak naznačují jejich argumenty). To je patrné z Kähllénovy-Lehmanovy reprezentace, popsané

například v [11]. Tohoto faktu dále využijeme k tomu, že namísto Greenovy funkce retardované budeme počítat funkce teplotní, které nemají přímý fyzikální význam, ale jejich výpočet je jednodušší, a „fyzikální“ Greenovy funkce retardované pak získáme jejich analytickým prodloužením.

- *Dvoučásticová teplotní Greenova funkce*

Tato Greenova funkce je definovaná jako

$$G_2(\lambda_1, \tau_1, \lambda_2, \tau_2, \lambda_3, \tau_3, \lambda_4, \tau_4) = \langle T \{ c_{\lambda_1}(\tau_1) c_{\lambda_2}(\tau_2) c_{\lambda_3}^\dagger(\tau_3) c_{\lambda_4}^\dagger(\tau_4) \} \rangle. \quad (2.15)$$

Operátor T-uspořádání zde má stejný význam jako v definici funkce jednočásticové. Uspořádává kreační a anihilační operátory podle jejich časových argumentů a výsledný výraz násobí faktorem -1 za každé prohození dvou fermionových operátorů.

Stejně jako v předchozích dvou případech je hodnota této funkce nezávislá na volbě počátku času a proto netriviálně závisí pouze na třech svých proměnných. Z toho vyplývá, že na třech proměnných (frekvencích) závisí také její fourierova transformace kterou definujeme takto

$$G(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) = \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 G_2(\tau_1, \tau_2 + \tau_3, \tau_3, 0) \times \exp(i\omega_n \tau_1 + i\omega_{n'} \tau_2 + i\nu_m \tau_3). \quad (2.16)$$

Inverzní transformace má tvar

$$G_2(\tau_1, \tau_3 + \tau_2, \tau_2, 0) = \frac{1}{\beta^3} \sum_{n, n', m} G(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) \times \exp(-i\omega_n \tau_1 - i\omega_{n'} \tau_2 - i\nu_m \tau_3). \quad (2.17)$$

2.2 Pohybová rovnice pro Greenovy funkce

Pohybová rovnice Greenovy funkce je důsledkem mikroskopické dynamiky studovaného systému a vedle diagramatické poruchové teorie představuje užitečný nástroj pro výpočet Greenovy funkce, který dále využijeme hned dvěma způsoby.

Pro jednoduchost uvažujme systém popsáný Andersonovým hamiltoniánem (v obecném případě by se postup odvození ani jeho výsledek nijak

kvalitativně nelišil) a připomeňme jeho tvar

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}, \sigma} + E_d (n_{d, \uparrow} + n_{d, \downarrow}) + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left[V_{d, \mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{d, \sigma} + V_{d, \mathbf{k}}^* c_{d, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} \right] + U n_{d, \uparrow} n_{d, \downarrow}. \quad (1.2)$$

Naším cílem je výpočet derivace lokální jednočásticové teplotní Greenovy funkce podle imaginárního času τ . Tato funkce je definována jako

$$\begin{aligned} G_\sigma(\tau) &= -\langle T \{ c_\sigma(\tau) c_\sigma^\dagger(0) \} \rangle \\ &= -\langle c_\sigma(\tau) c_\sigma^\dagger(0) \rangle \theta(\tau) + \zeta \langle c_\sigma^\dagger(0) c_\sigma(\tau) \rangle \theta(-\tau). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Její derivací dostáváme

$$\frac{d}{d\tau} G_\sigma(\tau) = -\langle [c_\sigma(\tau), c_\sigma^\dagger(0)]_\zeta \rangle \delta(\tau) - \langle T \left\{ \frac{dc_\sigma(\tau)}{d\tau} c_\sigma^\dagger(0) \right\} \rangle. \quad (2.19)$$

Časová závislost $G_\sigma(\tau)$ se tedy odvíjí od časové závislosti v ní vystupujících anihilačních a kreačních operátorů. Ty splňují komutační relace

$$[c_\alpha, c_{\alpha'}^\dagger]_\zeta = \delta_{\alpha\alpha'}, \quad [c_\alpha, c_{\alpha'}]_\zeta = [c_\alpha^\dagger, c_{\alpha'}^\dagger]_\zeta = 0, \quad (2.20)$$

kde α může nabývat hodnot \mathbf{k} , \uparrow nebo \downarrow .

Díky delta-funkci v prvním členu na pravé straně (2.19) můžeme ve výrazu $\langle [c_\sigma(\tau), c_\sigma^\dagger(0)]_\zeta \rangle$ položit $\tau = 0$ a ten je díky (2.20) roven 1.

K výpočtu druhého členu využijeme Heisenbergovu pohybovou rovnici

$$-\frac{dc_\sigma(\tau)}{d\tau} = [c_\sigma(\tau), H]. \quad (2.21)$$

Potřebujeme tedy spočítat komutátor hamiltoniánu s operátorem $c_\sigma(\tau)$.

Relace (2.20) platí pouze pro operátory ve stejných časech. Hamiltonián však komutuje sám se sebou, takže je na čase nezávislý a proto v něm můžeme provést záměnu $c \rightarrow c(\tau)$, $c^\dagger \rightarrow c^\dagger(\tau)$. Přímocharým výpočtem tak dostáváme

$$\begin{aligned} -\frac{dc_{d\sigma}(\tau)}{d\tau} &= E_d c_{d\sigma}(\tau) + \sum_{\mathbf{k}} V_{d\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) \\ &\quad + U c_{d\sigma}^\dagger(\tau) c_{d-\sigma}^\dagger(\tau) c_{d-\sigma}(\tau). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Po dosazením tohoto vztahu do (2.19) se ve výsledku objeví nová Greenova funkce $G_{\mathbf{k}\sigma}(\tau)$, v jejíž definici vystupují anihilační operátor částice v \mathbf{k} -stavu a kreační operátor částice v d -stavu. Tu však můžeme snadno odintegrovat.

Analogicky jako (2.22) dostaneme

$$-\frac{dc_{\mathbf{k}\sigma}(\tau)}{d\tau} = \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) + V_{d\mathbf{k}} c_{d\sigma}(\tau). \quad (2.23)$$

Přítomnost interakčního členu v (2.22) nijak neovlivní následující postup, a proto na chvíli položíme $U = 0$. Přejdem do Fourierova obrazu, kde podle definice (2.14) přechází časová derivace na násobení Matsubarovou frekvencí jako $\frac{d}{d\tau} \rightarrow -i\omega_n$, dostáváme

$$i\omega_n G_\sigma(i\omega_n) = 1 + E_d G_\sigma(i\omega_n) + \sum_{\mathbf{k}} V_{dk}^* G_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) \quad (2.24)$$

$$i\omega_n G_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) = \epsilon_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) + V_{dk} G_\sigma(i\omega_n). \quad (2.25)$$

Jednička v druhém řádku chybí proto, že operátory $c_{\mathbf{k}\sigma}, c_{d\sigma}^\dagger$ anikomutují. Dosazení (2.25) do sumy na pravé straně (2.24) vede k

$$i\omega_n G_\sigma(i\omega_n) = 1 + \left[E_d + \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{dk}|^2}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}}} \right] G_\sigma(i\omega_n). \quad (2.26)$$

Dále zanedbáme \mathbf{k} -závislost hybridizace volbou $V_{dk} = V$ a sumu přes hybridizace nahradíme integrací přes energii s hustotou stavů vodivostních elektronů, kterou aproximujeme konstantou rovnou její hodnotě na Fermiho mezi $\rho_c(\epsilon) \approx \rho_c(0)$. Tím suma v posledním vzorci přechází na výraz

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{dk}|^2}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}}} \approx \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{V^2 \rho_c(0)}{i\omega_n - \epsilon} = -i\pi V^2 \rho_c(0) \text{sign}(\omega_n). \quad (2.27)$$

Pro zjednodušení značení zavedme parametr

$$\Delta = \pi V^2 \rho_c(0). \quad (2.28)$$

Po jednoduché úpravě pak dostáváme pro neporušenou Greenovu funkci

$$G_0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - E_d + i\Delta \text{sign}(\omega_n)}. \quad (2.29)$$

Tato Greenova funkce bude výchozím bodem pro poruchovou teorii vybudovanou v následující kapitole. Po analytickém prodloužení na reálnou osu, které provedeme záměnou $i\omega_n \rightarrow \omega_+$, dostáváme neporušenou retardovanou Greenovu funkci

$$G_0(\omega_+) = \frac{1}{\omega_+ - E_d + i\Delta} \quad (2.30)$$

a neporušenou hustotu stavů, která je v tomto případě lorentzovská

$$\rho_0(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_0(\omega_+) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{(\omega - E_d)^2 + \Delta^2}. \quad (2.31)$$

Zbývá ještě započíst vliv interakce. Dosazením druhého řádku vztahu (2.22) do (2.19) dostaneme člen

$$U \left[\langle c_{\downarrow}^{\dagger}(\tau) c_{\downarrow}(\tau) c_{\uparrow}(\tau) c_{\uparrow}^{\dagger}(0) \rangle \theta(\tau) - \zeta \langle c_{\uparrow}^{\dagger}(0) c_{\downarrow}^{\dagger}(\tau) c_{\downarrow}(\tau) c_{\uparrow}(\tau) \rangle \theta(-\tau) \right], \quad (2.32)$$

ve kterém poznáváme U -násobek dvoučásticové teplotní Greenovy funkce

$$G_{\uparrow\downarrow}(\tau - \epsilon, \tau, \tau + \epsilon, 0). \quad (2.33)$$

ϵ je infinitezimálně malá kladná veličina zaručující správné pořadí jednotlivých operátorů po T-uspořádání.

Nyní stačí přičíst její Fourierovu transformaci (definovanou vztahem (2.16)) na pravou stranu (2.26), a dostáváme pohybovou rovnici jednočásticové teplotní Greenovy funkce

$$\left[i\omega_n - E_d + i\Delta \operatorname{sign}(\omega_n) \right] G_{\uparrow}(i\omega_n) = 1 + \frac{U}{\beta^2} \sum_{m,n''} G_{\uparrow\downarrow}(i\omega_n + i\nu_m, i\omega_n, i\omega_n - i\omega_{n''}). \quad (2.34)$$

2.3 Poruchová teorie

Předpokládáme, že čtenář je se základy diagramatické poruchové teorie stručně obeznámen, a proto neuvádíme všechny podrobnosti odvození Feynmanových pravidel. Zájemce o detailní odůvodnění všech provedených kroků odakzujeme například na [12], [11].

Pro jednoduchost se omezíme pouze na případ Andersonova hamiltoniánu (1.2). Pro $U = 0$, tedy v případě, kdy částice neinteragují, známe „neporušenou“ jednočásticovou Greenovu funkci (2.29), kterou značíme G_0 . Naším cílem je vyjádření Greenovy funkce interagujícího systému

$$G_{\uparrow}(\tau) = -\langle T \{ c_{\uparrow}(\tau) c_{\uparrow}^{\dagger}(0) \} \rangle \quad (2.35)$$

pomocí G_0 a interakce U .

V první řadě přejdeme od Heisenbergovy k Diracově reprezentaci, kde je časová závislost operátorů dána neporušenou částí hamiltoniánu (pracujeme v imaginárním čase $t = -i\tau$)

$$\hat{A}(\tau) = \exp(H_0\tau) A \exp(-H_0\tau), \quad (2.36)$$

kde A je operátor ve Schrödingerově reprezentaci. Dále budeme operátory v Diracově reprezentaci značit stříškou. Časová závislost stavového vektoru je v této reprezentaci dána evolučním operátorem $\hat{U}(\tau)$, pro který platí

$$\hat{U}(\tau) = \exp(H_0\tau) \exp(-H\tau) = T \exp \left\{ - \int_0^{\tau} d\tau' \hat{V}(\tau') \right\}. \quad (2.37)$$

S využitím toho, že pod symbolem časového uspořádání se operátory chovají jako komutující nebo antikomutující veličiny v závislosti na tom, zda je jejich charakter fermionový nebo bosonový, můžeme funkci $G_{\uparrow}(\tau)$ přepsat do tvaru

$$G_{\uparrow}(\tau) = -\frac{\langle \mathbb{T}\{\widehat{U}(\beta)\widehat{c}_{\uparrow}(\tau)\widehat{c}_{\uparrow}^{\dagger}(0)\}\rangle_0}{\langle \mathbb{T}\{\widehat{U}(\beta)\}\rangle_0}, \quad (2.38)$$

kde středováním $\langle \dots \rangle_0$ rozumíme stopu s maticí hustoty *neinteragujícího* systému, tedy $\langle A \rangle_0 \equiv Z_0^{-1} \text{Tr}[\exp(-\beta H_0)A]$. Jediný člen, který v tomto výrazu závisí na porušené části hamiltoniánu $\widehat{V}(\tau)$ je evoluční operátor $\widehat{U}(\beta)$. Greenovu funkci $G(\tau)$ tedy můžeme snadno rozvinout do mocninné řady v síle interakce tak, že v čitateli i jmenovateli (2.38) rozvineme evoluční operátor $\widehat{U}(\beta)$ do Taylorovy řady čímž dostáváme

$$\begin{aligned} \langle \mathbb{T}\{\widehat{U}(\beta)\widehat{c}_{\uparrow}(\tau)\widehat{c}_{\uparrow}^{\dagger}(0)\}\rangle_0 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} \dots \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots d\tau_n \\ &\times \langle \mathbb{T}\{\widehat{V}(\tau_1) \dots \widehat{V}(\tau_n)\widehat{c}_{\uparrow}(\tau)\widehat{c}_{\uparrow}^{\dagger}(0)\}\rangle. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Interakční člen má tvar $\widehat{V}(\tau) = U\widehat{c}_{\uparrow}^{\dagger}(\tau)\widehat{c}_{\downarrow}^{\dagger}(\tau)\widehat{c}_{\downarrow}(\tau)\widehat{c}_{\uparrow}(\tau)$, takže výraz na druhém řádku posledního vzorce je ve skutečnosti neporušená $(2n+1)$ -částicová teplotní Greenova funkce (její časové argumenty musí být infinitezimálně posunuty tak, aby bylo zaručeno správné pořadí operátorů). Integrace v (2.39) probíhá pouze přes některé proměnné této Greenovy funkce. Pokud zaměníme parametr U výrazem $U\delta(\tau_n - \tau_{n'})\delta_{\sigma_n, -\sigma_{n'}}$, můžeme rozšířit integraci a sumaci na všechny její proměnné, s výjimkou „vnějších“ proměnných daných argumenty operátorů $\widehat{c}_{\uparrow}(\tau)$ a $\widehat{c}_{\uparrow}^{\dagger}(0)$.

Analogicky jako (2.39) rozvineme i výraz ve jmenovateli na pravé straně (2.38).

Z Wickova teoremu vyplývá, že neporušenou n -částicovou Greenovu funkci můžeme zapsat jako lineární kombinaci součinů funkcí jednočásticových jako

$$G_{0,n}(1, \dots, n, 1', \dots, n') = \sum_{\pi} (-\zeta)^{\text{sign}(\pi)} G_0(1; \pi(1')) \dots G_0(n; \pi(n')), \quad (2.40)$$

kde sumace probíhá přes všechny permutace n -prvkové množiny π . Pro argumenty Greenových funkcí jsme použili zkrácené značení $n \equiv (\sigma_n, \tau_n)$. Připomeňme ještě, že $\zeta = +1$ pro fermiony a $\zeta = -1$ pro bosony.

Díky tomu, že jednočásticové Greenovy funkce v (2.40) jsou závislé pouze na rozdílu svých časových proměnných, mají integrály v (2.39) charakter konvolucí. Proto dosáhneme výrazného zjednodušení přechodem do Fourierova

obrazu. Fourierovu transformaci jsme definovali vztahy (2.11), (2.14). Interakční člen můžeme zapsat pomocí jeho Fourierových koeficientů jako

$$U\delta(\tau - \tau')\delta_{\sigma, -\sigma'} = U\delta_{\sigma, -\sigma'} \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp [i\nu_n(\tau_1 - \tau_2)]. \quad (2.41)$$

Rovnice (2.40), (2.39) a její analog pro rozvoj jmenovatele (2.38) představují hledané vyjádření Greenovy funkce G pomocí G_0 a interakce U . K praktickému použití je můžeme dále výrazně zjednodušit zavedením *Feynmanových diagramů*. Ty představují grafické znázornění členů poruchového rozvoje G a přinášejí neocenitelné zjednodušení jinak zoufale nepřehledné změti Wickových kontrakcí.

Všechny členy poruchového rozvoje mají tvar konvoluce několika neporušených jednočásticových propagátorů vynásobených nějakou mocninou síly interakce U . Graficky tyto členy znázorňujeme tak, že neporušenému propagátoru přiřadíme symbol orientované linie, interakci symbol neorientované zvlněné linie a tyto členy pospojujeme podle toho, jaké konvoluce provádíme.

Pomocí jednoduché kombinatorické úvahy je možné ukázat, že diagramatické příspěvky pocházející z rozvoje jmenovatele (2.38) přesně kompenzují nesouvislé diagramy z rozvoje čitatele. Dále můžeme ztotožnit diagramy lišící se pouze označením vnitřních vrcholů a tím vykompenzujeme faktor $n!$ z rozvoje exponenciály v (2.39). Po těchto zjednodušeních dostáváme sadu pravidel pro konstrukci členů poruchové řady Greenovy funkce. Všechny příspěvky n -tého řádu poruchového rozvoje $G_\sigma(i\omega_n)$ získáme tak, že nakreslíme všechny topologicky neekvivalentní souvislé diagramy podle těchto pravidel:

- Každý diagram obsahuje $2n$ vnitřních a dva vnější vrcholy.
- Vnitřní vrcholy jsou po dvojicích spojeny n interakčními liniemi.
- Do každého z vnitřních vrcholů vchází právě jedna částicová linie.
- Z každého vnitřního vrcholu vychází právě jedna částicová linie.
- Jedna částicová linie směřuje do jednoho z vnějších vrcholů.
- Jedna částicová linie směřuje z druhého z vnějších vrcholů.

Každému diagramu pak přiřadíme hodnotu tak, že:

- Jednotlivým elementům diagramu přiřadíme výrazy podle obrázku 2.1 tak, aby se zachovával součet frekvencí ve všech vnitřních vrcholech.
- Provedeme sumaci součinu těchto výrazů přes všechny vnitřní Matsubarovy frekvence.

- Hodnotu diagramu vynásobíme faktorem β^{-1} za každou takovou sumaci.
- Hodnotu diagramu vynásobíme faktorem -1 za každou uzavřenou elektronovou „smyčku“.

Nakonec sečteme příspěvky od všech diagramů.

$$\begin{aligned}
 \begin{array}{c} \longrightarrow \\ i\omega_n, \sigma \end{array} &= G_{0,\sigma}(i\omega_n) \\
 \begin{array}{c} \longrightarrow \\ i\omega_n, \sigma \end{array} &= G_\sigma(i\omega_n) \\
 \begin{array}{c} \text{~~~~~} \\ i\nu_n \end{array} &= -U\delta_{\sigma,\sigma'} \\
 \begin{array}{c} \sigma \\ \circlearrowleft \end{array} &= n_{0,\sigma}
 \end{aligned}$$

Obrázek 2.1: Feynmanova pravidla

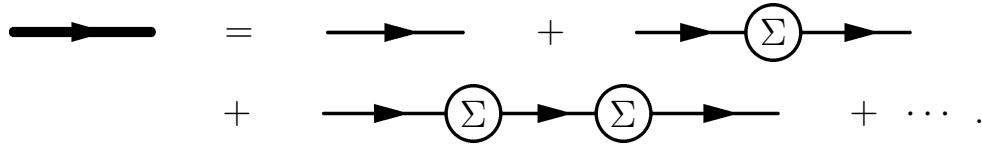
Zcela analogická pravidla pro vyjádření členů poruchové řady pomocí Feynmanových diagramů můžeme odvodit také pro dvoučásticové Greenovy funkce $G_{\uparrow\downarrow}$. Jedinou odlišností bude v tomto případě to, že příslušné diagramy budou mít čtyři vnější vrcholy.

2.4 Dysonova rovnice

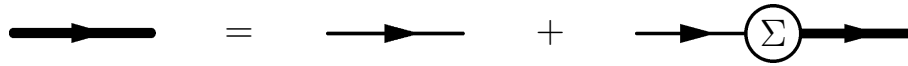
Přímočaré sčítání poruchové řady jednočásticové Greenovy funkce „diagram po diagramu“ je velmi neefektivní. Pro praktické výpočty je však možné tuto řadu částečně „vysčítat“ následujícím postupem:

Všechny diagramy sestrojené podle pravidel z předcházejícího paragrafu můžeme rozdělit do dvou kategorií

- Jednočásticově *reducibilní* diagramy jsou takové, které je možné rozdělit „přetnutím“ jedné částicové linie, spojující dva vnitřní vrcholy, na dva *nesouvislé* poddiagramy.
- Jednočásticově *ireducibilní* (zkráceně 1PI, 1 particle irreducible) diagramy jsou všechny ostatní, tedy takové, které není možné rozdělit na dva nesouvislé poddiagramy přetnutím jedné částicové linie.



Obrázek 2.2: Řada pro Greenovu funkci



Obrázek 2.3: Dysonova rovnice

Součet všech 1PI diagramů nazýváme *selfenergie* (vlastní energetická část) a značíme ho $\Sigma(i\omega_n)$. Všechny členy poruchového rozvoje získáme „spojením“ všech kombinací 1PI diagramů částicovými liniemi tak, jak je naznačeno na obrázku 2.2 V algebraickém tvaru představuje tento výraz *geometrickou řadu*

$$G(i\omega_n) = G_0(i\omega_n) + G_0(i\omega_n)\Sigma(i\omega_n)G_0(i\omega_n) + G_0(i\omega_n)\Sigma(i\omega_n)G_0(i\omega_n)\Sigma(i\omega_n)G_0(i\omega_n) + \dots, \quad (2.42)$$

kterou můžeme sečíst jako

$$G(i\omega_n) = G_0(i\omega_n) + G_0(i\omega_n)\Sigma(i\omega_n)G(i\omega_n). \quad (2.43)$$

Tento vztah nazýváme *Dysonova rovnice*. Pomocí Feynmanových diagramů je znázorněna na obrázku 2.3. Po úpravě vyjádříme plnou Greenovu funkci jako

$$G(i\omega_n) = [G_0(i\omega_n)^{-1} - \Sigma(i\omega_n)]^{-1}. \quad (2.44)$$

Namísto sčítání všech souvislých Feynmanových diagramů tedy stačí sčítat pouze 1PI diagramy, kterých je podstatně méně. Greenovu funkci pak spočteme pomocí Dysonovy rovnice. Započtením každého příspěvku do selfenergie obsahuje naše aproximace nekonečnou řadu diagramů pro Greenovu funkci typu 2.2.

2.5 Betheho-Salpeterovy rovnice

Dále budeme pracovat také s dvoučásticovými Greenovými funkcemi. Poruchovou řadu pro dvoučásticovou funkci můžeme částečně vysčítat pomocí takzvaných *Betheho-Salpeterových* rovnic podobně, jako jsme částečně vysčítali poruchovou řadu jednočásticové funkce pomocí Dysonovy rovnice. V tomto případě je však situace složitější.

Nejprve zavedme dvoučásticovou *vrcholovou funkci* Γ . Od všech diagramatických příspěvků do poruchové řady dvoučásticové Greenovy funkce můžeme oddělit „nekorelované příspěvky“ podle rovnice 2.45. Tím také zavádíme konvenci pro označení jednotlivých proměnných.

$$G_{\uparrow\downarrow}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) = \begin{array}{c} \xrightarrow{i\omega_n, \uparrow} \\ \xleftarrow{i\omega_{n'}, \downarrow} \end{array} + \begin{array}{c} \xrightarrow{i\omega_n + i\nu_m, \uparrow} \\ \xrightarrow{i\omega_{n'} + i\nu_m, \uparrow} \\ \xleftarrow{i\omega_n, \downarrow} \\ \xleftarrow{i\omega_{n'}, \downarrow} \end{array} \Gamma \quad (2.45a)$$

$$\begin{aligned} G_{\uparrow\downarrow}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) &= G_{\uparrow}(i\omega_n + i\nu_m) G_{\downarrow}(i\omega_n) \delta_{n,n'} \\ &+ G_{\uparrow}(i\omega_n + i\nu_m) G_{\uparrow}(i\omega_{n'} + i\nu_m) G_{\downarrow}(i\omega_n) G_{\downarrow}(i\omega_{n'}) \\ &\times \Gamma_{\uparrow\downarrow}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m). \end{aligned} \quad (2.45b)$$

S vrcholovou funkcí $\Gamma_{\uparrow\uparrow}$ nebudeme pracovat, protože ta narozdíl od $\Gamma_{\uparrow\downarrow}$ nevystupuje v níže uvedené Schwingerově-Dysonově rovnici.

Dále budeme namísto plně dvoučásticové funkce počítat pouze vrcholovou funkci $\Gamma_{\uparrow\downarrow}$, protože ta představuje interakci indukovanou netriviální částí $G_{\uparrow\downarrow}$.

Při odvození Dysonovy rovnice jsme vycházeli z toho, že všechny jednočásticové diagramy získáme „pospojováním“ všech kombinací 1PI diagramů elektronovými liniemi. Přitom jsme měli vždy jen *jednu* možnost, jak dva 1PI diagramy spojit elektronovou linií, a tedy jen jednu možnost, jak definovat jednočásticovou ireducibilitu. V případě dvoučásticových diagramů chceme analogicky získat všechny diagramy jako součet v nějakém smyslu dvoučásticově ireducibilních (2PI) diagramů pospojovaných *dvěma* částicovými liniemi všemi možnými způsoby.

Neekvivalentních možností, jak definovat dvoučásticovou ireducibilitu je však více. Dvoučásticový Feynmanův diagram, který lze rozdělit na dva poddiagramy „přestřihnutím“ dvou propagátorů, se totiž může „rozpadnout“ různými způsoby. Jak jsme již uvedli, do úvahy bereme pouze diagramy, které přispívají do vrcholové funkce Γ . Každý takový diagram se může po přestřihnutí dvou propagátorů rozpadnout na nejvýše dva poddiagramy a oba tyto poddiagramy musí obsahovat dva z vnějších vrcholů (poměrně jednoduchou úvahou zjistíme, že se nemůže rozpadnout na tři a více poddiagramů a že toto přestřihnutí nemůže oddělit poddiagram obsahující pouze jeden vrchol). Z toho plyne, že neekvivalentní definice dvoučásticové ireducibility jsou *tři*, protože existují tři možnosti jak spárovat čtyři (různé) vnější proměnné.

Tyto definice vedou na tři neekvivalentní Betheho-Salpeterovy rovnice, o kterých mluvíme jako o různých rozptylových *kanálech*. Jsou to:

- *Elektron-děrový kanál:*

V tomto kanále je za reducibilní (mluvíme o elektron-děrově reducibilitě) považován takový diagram, který se po přetnutí dvou propagátorů rozpadne na dvě komponenty a komponenta, která obsahuje vcházející propagátor se spinem \uparrow (v naší konvenci levý horní vrchol), obsahuje také vycházející propagátor se spinem \downarrow (v naší konvenci levý dolní vrchol). Tuto komponentu nazvěme 1, druhou 2.

Propagátor, který do uvažovaného diagramu vstupuje „levým horním rohem“, prochází tímto diagramem a nutně z něj musí vystupovat „pravým horním rohem“ a analogicky pro druhé dva „roh“ (to platí pouze pro $\Gamma_{\uparrow\downarrow}$, nikoliv pro $\Gamma_{\uparrow\uparrow}$). Zmíněné přetnutí proto můžeme provést pouze tak, že jeden z přetnutých propagátorů má spin \uparrow a směřuje od 1 k 2 a druhý má spin \downarrow a směřuje od 2 k 1.

Jednoduchý příklad elektron-děrově reducibilního diagramu je na obrázku 2.4 pod písmenem a). Diagramy označené jako b) a c) jsou elektron-děrově ireducibilní.

Součet všech elektron-děrově ireducibilních diagramů nazýváme elektron-děrově ireducibilní vrcholová funkce a značíme ji symbolem $\Lambda^{\text{eh}}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m)$. (Electron-Hole).

Všechny diagramatické příspěvky do poruchové řady vrcholové funkce Γ získáme jako součet všech eh-ireducibilních a eh-reducibilních diagramů.

Od každého eh-reducibilního diagramu můžeme zprava „odstříhovat“ jeho poddiagramy tak dlouho, dokud není zbylá (levá) část eh-ireducibilní.

Takový diagram tedy můžeme získat spojením eh-ireducibilního diagramu s nějakým diagramatickým příspěvkem k vrcholové funkci dvěma propagátory, které mohou obecně obsahovat „selfenergetické vsuvky“ tak, jak je to znázorněno rovnicí (2.46) (o tomto typu propojení dvou diagramů budeme mluvit jako o elektron-děrové konvoluci).

Všechny eh-reducibilní diagramy tedy získáme pospojováním všech eh-ireducibilních diagramů se všemi příspěvky k vrcholové funkci dvěma plnými propagátory (plný jednočásticový propagátor tak vstupuje do Betheho-Salpeterových rovnic jako vnější parametr).

Z uvedených faktů plyne, že vrcholová funkce musí splňovat následující

Betheho-Salpeterovu rovnici

$$(2.46a)$$

$$\begin{aligned} \Gamma(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) &= \Lambda^{\text{eh}}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) \\ &+ \frac{1}{\beta} \sum_{n''} \Lambda^{\text{eh}}(i\omega_n, i\omega_{n''}, i\nu_m) G(i\omega_{n''} + i\nu_m) G(i\omega_{n''}) \\ &\times \Gamma(i\omega_{n''}, i\omega_{n'}, i\nu_m). \end{aligned} \quad (2.46b)$$

Upozorňujeme na to, že vnější linie v tomto diagramu *nejsou* jeho skutečnou součástí, ale pouze označují vnější proměnné. Proto jsme jim také v algebraickém vyjádření nepřiradili žádný člen. Tento typ značení budeme používat pro dvoučásticové diagramy i dále.

Abychom správně určili znaménko druhého členu v (2.46), musíme si uvědomit, že jsme elektron-děrovou konvolucí funkcí Λ^{eh} a Γ ve výsledném diagramu nevygenerovali uzvřenou elektronovou smyčku, jak by se mohlo zdát z grafické formy zápisu této rovnice, protože oba propojující propagátory nesou opačné spiny.

Dodejme ještě, že narozdíl od Dysonovy rovnice jsme tuto rovnici nezdiagonalizovali Fourierovou transformací. Betheho-Salpeterova rovnice tedy nepředstavuje rovnici algebraickou, ale integrální, a v obecném případě ji proto není možné explicitně vyřešit.

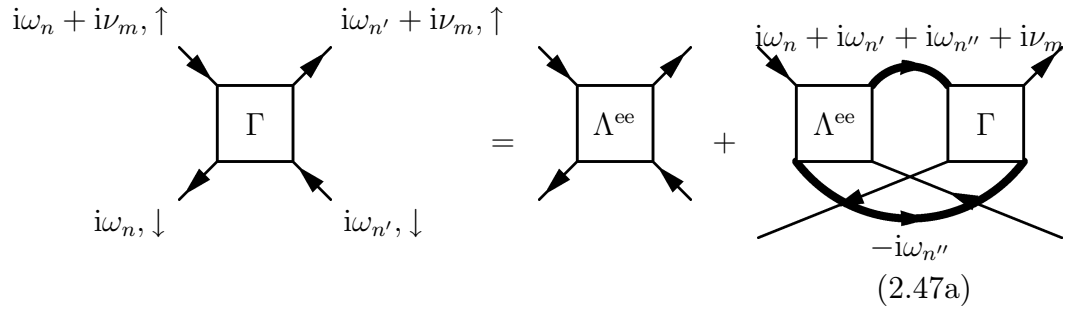
- *Elektron-elektronový kanál*

Elektron-elektronově reducibilní diagram je takový, který se po přetnutí dvou propagátorů rozpadne na dvě komponenty souvislosti a ta, která obsahuje vcházející propagátor se spinem \uparrow (označme ji 1), obsahuje také vcházející propagátor se spinem \downarrow (v naší konvenci levý horní a pravý dolní roh). Takové přetnutí můžeme provést pouze tak, že jeden z přetnutých propagátorů má spin \uparrow , druhý má spin \downarrow a oba směřují od 1 k 2.

Příklad elektron-elektronově reducibilního diagramu je uveden na obrázku 2.4 pod písmenem b). Diagramy označené jako a) a c) jsou elektron-elektronově ireducibilní.

Součet všech elektron-elektronově ireducibilních diagramů značíme $\Lambda^{ee}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m)$.

Na tomto místě bychom mohli zopakovat diskusi uvedenou v předchozím bodu a zjistili bychom, že Betheho-Salpeterova rovnice má v elektron-elektronovém kanále tvar



$$(2.47a)$$

$$\begin{aligned} \Gamma(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) &= \Lambda^{ee}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) \\ &+ \frac{1}{\beta} \sum_{n''} \Lambda^{ee}(-i\omega_{n''}, i\omega_{n'}, i\omega_n + i\omega_{n''} + i\nu_m) \\ &\times G(i\omega_n + i\omega_{n'} + i\omega_{n''} + i\nu_m) G(-i\omega_{n''}) \\ &\times \Gamma(i\omega_n, -i\omega_{n''}, -i\omega_n + i\omega_{n'} + i\omega_{n''} + i\nu_m). \end{aligned} \quad (2.47b)$$

Opět si musíme uvědomit, že elektron-elektronová konvoluce nevygeneruje ve výsledném diagramu uzavřenou elektronovou smyčku díky odlišnosti spinových proměnných obou propagátorů.

- *Vertikální kanál*

Tento kanál někdy bývá označován také jako interakční.

Za reducibilní je v tomto kanálu považován takový diagram, který se po přetnutí dvou propagátorů rozpadne na dvě komponenty souvislosti a ta, která obsahuje vcházející propagátor se spinem \uparrow (označme ji 1), obsahuje také vycházející propagátor se spinem \uparrow (v naší konvenci levý a pravý horní roh). Toto přetnutí můžeme realizovat pouze tak, že jeden z přetnutých propagátorů směřuje od 1 k 2, druhý směřuje od 2 k 1 a oba nesou stejný spin σ . Na hodnotě σ přitom nezáleží. Díky tomu je struktura Betheho-Salpeterovy rovnice v tomto kanále složitější než v předchozích dvou kanálech.

Příklad vertikálně reducibilního diagramu je uveden na obrázku 2.4 pod písmenem c). Diagramy označené jako a) a b) jsou vertikálně ireducibilní.

Součet všech vertikálně ireducibilních diagramů značíme $\Lambda^U(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m)$.

Jako v předchozím případě jsou všechny diagramatické příspěvky do poruchové řady vrcholové funkce Γ součtem všech U -ireducibilních a U -reducibilních diagramů.

Obecný U -reducibilní diagram však můžeme získat dvěma různými způsoby v závislosti na tom, jaká je hodnota spinu σ rozetnutých propagačtorů. Po rozetnutí má jedna z výsledných komponent všechny čtyři spinové proměnné stejné. Do Betheho-Salpeterovy rovnice v tomto kanále tedy vstupuje také vrcholová funkce $\Gamma_{\uparrow\uparrow}$ a U -ireducibilní funkce $\Lambda_{\uparrow\uparrow}^U$ a to následujícím způsobem

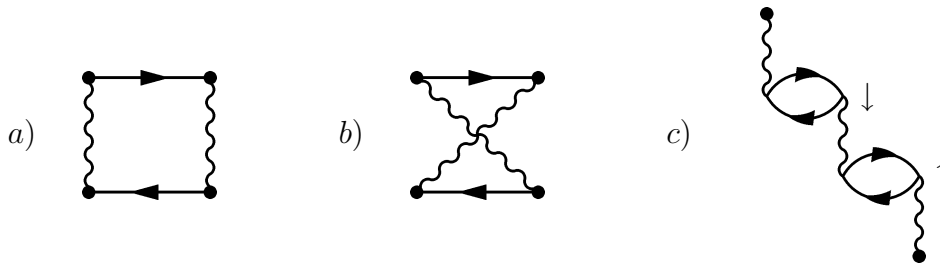
(2.48a)

$$\begin{aligned}
\Gamma_{\uparrow\downarrow}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) &= \Lambda_{\uparrow\downarrow}^U(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) \\
&\quad - \frac{1}{\beta} \sum_{n'', \sigma''} \Lambda_{\uparrow\sigma''}^U(i\omega_{n''}, -i\omega_n + i\omega_{n'} + i\omega_{n''}, i\omega_n - i\omega_{n''} + i\nu_m) \\
&\quad \times G_{\sigma''}(i\omega_{n''}) G_{\sigma''}(-i\omega_n + i\omega_{n'} + i\omega_{n''}) \\
&\quad \times \Gamma_{\sigma'', \downarrow}(i\omega_n, i\omega_{n'}, -i\omega_n + i\omega_{n''}). \tag{2.48b}
\end{aligned}$$

2.6 Schwingerova-Dysonova rovnice

Nezávisle na tom, že jsou plné jedno- a dvoučásticové Greenovy funkce součtem své poruchové řady, splňují také další vztahy, které je navzájem svazují. Je přirozené požadovat splnění takovýchto vztahů i pro námi aproximované Greenovy funkce.

Jak jsme již dříve viděli, jedním z takových vztahů je pohybová rovnice Greenovy funkce (2.34), protože v ní vystupují jak G , tak G_2 . Tu jsme odvodili s použitím rovnice Schrödingerovy (přesněji Heisenbergovy) bez použití techniky Feynmanových diagramů. Její úpravou získáme takzvanou



Obrázek 2.4: Příklady diagramů reducibilních v jednotlivých kanálech Betheho-Salpeterových rovnic. Po řadě eh-reducibilní diagram, ee-reducibilní diagram, U -reducibilní diagram.

Schwingerovu-Dysonovu rovnici, která nám dále umožní započtení velmi široké třídy Feynmanových diagramů do selfenergie.

Pohybovou rovnicí(2.34) můžeme přepsat do diagramatické podoby následujícím způsobem (detailní odvození je uvedeno například v [14])

$$[\text{---}]^{-1} \text{---} = I + \text{---} \text{---} G_2 \text{---} \quad (2.49)$$

Symbol označený jako G_2 zde představuje plnou dvoučásticovou Greenovu funkci, jejíž horní dva vrcholy jsou spojeny do jednoho (má dvě stejné vnější proměnné). Symbol I představuje diagramatické vyjádření jednotky. Do levé strany dosadíme vyjádření úplného propagátoru pomocí Dysonovy rovnice (2.3). Na pravé straně pak vyjádříme dvoučásticovou funkci pomocí vrcholové funkce (2.45).

$$I + \text{---} \text{---} \Sigma \text{---} = I + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \Gamma \text{---} \text{---} \quad (2.50)$$

Obě strany rovnice vydělíme plným propagátorem a dostáváme vztah mezi selfenergií a vrcholovou funkcí, Schwingerovu-Dysonovu rovnici

$$\text{---} \text{---} \Sigma \text{---} = \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \Gamma \text{---} \text{---} \quad (2.51a)$$

V algebraickém tvaru ji můžeme vyjádřit jako

$$\begin{aligned} \Sigma(i\omega_n) = U\langle n \rangle + \frac{U}{\beta^2} \sum_{n'',m} G(i\omega_n + i\nu_m) G(i\omega_{n''} + i\nu_m) G(i\omega_{n''}) \\ \times \Gamma(i\omega_n + i\nu_m, i\omega_n, i\omega_{n''} - i\omega_n). \end{aligned} \quad (2.51b)$$

Upozorňujeme na to, že tato rovnice byla odvozena pro spinově závislou „hubbardovskou“ interakci, která z rovnice (2.51) vylučuje Fockův výměnný člen. Ten je v ní v obecném případě přítomný.

Kromě Schwingerovy-Dysonovy rovnice existuje ještě další důležité omezení svazující jedno- a dvoučásticové Greenovy funkce. Jsou to takzvané Wardovy identity, které představují podmínku termodynamické konzistence teorie. Více o Wardových identitách je možné nalézt například v práci Bayma a Kadanoffa [2].

Uveďme pouze to, že nalezení aproximace, která současně splňuje jak Schwingerovu-Dysonovu rovnici, tak Wardovy identity, je velmi netriviální. Proto dále nebudeme o splnění Wardových identit usilovat.

Kapitola 3

Standardní přibližné metody

V této kapitole použijeme výsledky obecné diagramatické teorie na modely popsané v úvodu a shrneme vlastnosti několika známých aproximací.

3.1 Modelové Greenovy funkce

V první řadě musíme explicitně znát neporušené Greenovy funkce, které jsou vstupním bodem do diagramatických rozvoji.

Zajímáme se především o Andersonův Hamiltonián (1.2). Za jeho neporušenou část považujeme všechny jeho členy kvadratické v anihilačních a kreačních operátorech

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k},\sigma} + E_d(n_{d,\uparrow} + n_{d,\downarrow}) + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left[V_{d,\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{d,\sigma} + V_{d,\mathbf{k}}^* c_{d,\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \right]. \quad (3.1)$$

Za poruchu pak považujeme lokální Coulombickou interakci

$$V = U n_{d,\uparrow} n_{d,\downarrow}. \quad (3.2)$$

Tvar neporušené Greenovy funkce jsme již odvodili v sekci 2.2. Připomeňme výsledek pro teplotní Greenovu funkci

$$G_0(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - E_d + i\Delta \operatorname{sign}(\omega_n)} \quad (3.3)$$

a retardovanou Greenovu funkci

$$G_0(\omega_+) = \frac{1}{\omega_+ - E_d + i\Delta}. \quad (3.4)$$

Parametr Δ budeme dále brát za jednotku energie.

Jak jsme zmínili v úvodu, na jednopříměsový model můžeme zobrazit také Hubbardův model na nekonečněrozměrné mřížce. Greenovy funkce Andersonova a Hubbardova modelu se pak liší pouze hustotou stavů, která závisí na typu mřížky. Lokální Greenovu funkci Hubbardova modelu můžeme reprezentovat pomocí integrálu s hustotou stavů jako

$$G(z) = \int d\epsilon \frac{\rho(\epsilon)}{z + \mu - \epsilon}. \quad (3.5)$$

Na Betheho mřížce (Cayelyho strom) je hustota stavů ρ semieliptická

$$\rho(\epsilon) = \frac{2}{\pi W} \sqrt{\left(1 - \frac{\epsilon^2}{W^2}\right)}, \quad (3.6)$$

kde W je pološířka pásu a hraje analogickou úlohu jako parametr Δ v Andersonově modelu.

Parametry Δ případně W budeme dále brát za jednotku energie.

3.2 Hartreeho přiblížení

Nejjednodušší aproximací, kterou budeme uvažovat, je Hartreeho přiblížení středního pole. Jeho podstata spočívá v zanedbání *korelací* mezi jednotlivými částicemi. V rámci této aproximace jsou pak interakce jednotlivých částic započteny pouze prostřednictvím *selfkonzistentního* středního pole, které jednotlivé částice „cítí“.

Informace o vzájemných korelacích částic je obsažena ve vrcholové funkci Γ definované vztahem (2.45). Zmíněné zanedbání korelací proto provedeme právě volbou $\Gamma = 0$. Dosazením tohoto přiblížení do Schwingerovy-Dysonovy rovnice dostáváme pro selfenergii vztah

$$\textcircled{\Sigma} = \textcircled{\bigcirc} \quad (3.7a)$$

$$\Sigma_{\sigma}(i\omega_n) = U \langle n_{-\sigma} \rangle. \quad (3.7b)$$

Hartreeho aproximace je natolik jednoduchá, že ji můžeme formulovat i bez použití diagramatické teorie „v řeči“ vlnových funkcí tak, že hledáme mnohočásticovou vlnovou funkci ve tvaru součinu funkcí jednočásticových. Příslušné jednočásticové vlnové funkce nalezneme variační metodou. Z této

formulace je patrné, že Hartreeho přiblížení spočívá v hledání minima energie systému na velmi malém podprostoru Hilbertova prostoru.

Více o Hartreeho-Fockově aproximaci je uvedeno například v [12], [11], [3].

Z algebraického vyjádření (3.7) vidíme, že v tomto přiblížení je selfenergie reálná konstanta nezávislá na frekvenci a představuje tedy pouze korekci k chemickému potenciálu neinteragujícího systému. Hustota stavů proto nemůže být započtením Hartreeho příspěvku k selfenergii modifikována jinak, než posunutím vůči Fermiho mezi. Proto je tato aproximace zcela nedostačující pro popis přechodu do režimu silné vazby. Zde očekáváme vznik Kondova píku a rozštěpení hustoty stavů na tzv. satelitní pásy. Přítomnost těchto pásů vyplývá z toho, že se zvyšujícím se U se blížíme k atomové limitě, kde má hustota stavů tvar dvou delta-píků v $\pm U/2$.

Dále budeme pojmem selfenergie označovat pouze její korekci k Hartreeho členu a za neporušenou Greenovu funkci budeme považovat její Hartreeho aproximaci.

Přes uvedené nedostatky můžeme na jejím základě *kvalitativně* vysvětlit vznik lokálního magnetického momentu na příměsi. Následující analýzu provedl poprvé Anderson v [1]. Zde je také možné nalézt všechny detaily.

3.2.1 Vznik lokálního magnetického momentu

Ke vzniku lokálního magnetického momentu dojde v případě, že se liší střední obsazení nečistoty elektrony s opačnými spiny. Při nulové teplotě spočteme toto obsazení integrací hustoty stavů po Fermiho mez. Po započtení Hartreeho selfenergie do (2.31) dostáváme

$$\langle n_\sigma \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 \frac{\Delta}{(\omega - E_d + U\langle n_{-\sigma} \rangle)^2 + \Delta^2} d\omega. \quad (3.8)$$

Po provedení integrace

$$\langle n_\sigma \rangle = \frac{1}{\pi} \operatorname{arccotg} \left(\frac{E - U\langle n_{-\sigma} \rangle}{\Delta} \right). \quad (3.9)$$

Tato soustava ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) představuje selfkonzistentní podmínku pro existenci lokálního momentu. Z jejího řešení plyne, že pro dostatečně vysoké U odpovídá minimu energie *magnetický* stav s $\langle n_\uparrow \rangle \neq \langle n_\downarrow \rangle$. Například v polovičním zaplnění, kde $\langle n_\uparrow \rangle + \langle n_\downarrow \rangle = 1$, můžeme zavést parametr $n = \langle n_\uparrow \rangle - 1/2$ udávající odchylku od nemagnetického případu. Pro symetrický Andersonův model, kde $E_d = -U/2$, pak z (3.9) dostáváme

$$n = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \operatorname{arccotg} \left(\frac{Un}{\Delta} \right). \quad (3.10)$$

Z toho, že arccotg je omezená funkce, $\text{arccotg}(0) = \pi/2$ a $\text{arccotg}'(0) = -1$ vidíme, že nenulové řešení existuje pro $U > U_c = \pi\Delta$. Podrobný výpočet pak ukazuje, že toto řešení odpovídá nižší energii než $n = 0$, a nemagnetický stav se tak pro $U > U_c$ stává nestabilním. To by znamenalo přítomnost fázového přechodu a narušení symetrie mezi stavy \uparrow a \downarrow . Takový výsledek je však v rozporu s variačním řešením Andersonova modelu, které jsme popsali v úvodu. Tím jsme ukázali, že základní stav leží pod Hartreeho řešením a symetrii mezi \uparrow a \downarrow stavy nenarušuje.

Přestože není výsledek Hartreeho přiblížení úplně správně, na jeho základě můžeme usuzovat alespoň to, že v režimu, kdy toto přiblížení předpovídá vznik magnetického stavu, budou časové fluktuaace obsazení nečistoty jednotlivými spiny malé. To můžeme chápat jako vznik magnetického momentu.

3.3 Jednakanálová přiblížení

V předcházející sekci jsme se přesvědčili o tom, že Hartreeho aproximace je příliš chudá na to, aby správně popsala přechod do režimu silné vazby. To ukazuje na potřebu započtení *širší* třídy diagramatických příspěvků do selfenergie.

Několik jednoduchých metod přesahujících Hartreeho aproximaci je shrnuto v [9]. Ty však vedou k stejnému typu nestability jako Hartreeho řešení a nebudeme se jimi blíže zabývat. Uvedme pouze to, že jejich společným rysem je jednočásticová selfkonzistence a započtení *konečně* mnoha diagramatických příspěvků do selfenergie. To nás motivuje k nalezení aproximace zahrnující *nekonečně* mnoho těchto příspěvků.

Systematickou metodou vedoucí k započtení nekonečné řady Feynmanových diagramů do selfenergie je použití Betheho-Salpeterových rovnic společně se Schwingerovou-Dysonovou rovnicí. Vhodnou aproximací nějaké z dvoučásticově ireducibilních funkcí vygenerujeme nekonečně mnoho příspěvků k vrcholové funkci $\Gamma_{\uparrow\downarrow}$ a ty „proměníme“ na 1PI diagramy pomocí Schwingerovy-Dysonovy rovnice.

Kromě systematickosti je výhodou tohoto postupu také to, že pracujeme s dvoučásticovými Greenovými funkcemi, které získáme jako „vedlejší produkt“. Dvoučásticová funkce je svázána se susceptibilitou (koeficientem lineární odezvy na vnější magnetické pole). Dá se ukázat, že přítomnost singularity v této funkci vede k divergenci susceptibility. Taková divergence by pak znamenala nestabilitu paramagnetické fáze vůči libovolně slabému vnějšímu poli a přechod k magnetickému řešení. Známe-li dvoučásticovou funkci, máme tento typ nestability pod kontrolou a nemusíme pokaždé provádět

obecně složitou analýzu jako v Hartreeho aproximaci.

V Schwingerově-Dysonově a Betheho-Salpeterových rovnicích vystupují plné propagátory, takže uvedenou cestou dospějeme k jednočásticově selfkonzistentní teorii. V prvním kroku však můžeme od požadavku jednočásticové selfkonzistence odhlédnout a nahradit všechny plné propagátory neporušenými.

Nejjednodušší možností jak aproximovat dvoučásticově ireducibilních funkci je nahradit tuto funkci holou interakcí (a to ve všech kanálech). Jednotlivé kanály Betheho-Salpeterových rovnic nám pak generují různé řady diagramů popsané v následujících třech sekcích.

3.3.1 Přiblížení náhodných fází (RPA)

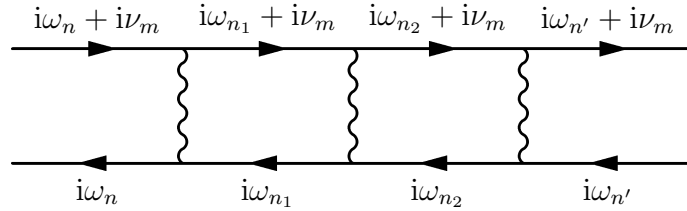
V prvé řadě upozorňujeme na názvoslovnou nejednotnost. Za aproximaci RPA (Random Phase Approximation) bývá označována také aproximace, kterou zde uvádíme pod názvem přiblížení stíněné interakce.

O této aproximaci mluvíme v případě, že elektron-děrově ireducibilní funkci nahradíme holou interakcí

$$\Lambda^{\text{eh}} = -U. \quad (3.11)$$

Ostatní kanály nebereme do úvahy.

Ze struktury Betheho-Salpeterových rovnic vidíme, že vrcholová funkce je v tomto přiblížení dána součtem „žebříků“ naznačených na obrázku 3.1.



Obrázek 3.1: Příspěvek třetího řádu k RPA.

$$\begin{aligned} \Gamma(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) = & -U + U \frac{1}{\beta} \sum_{n_1} G_0(i\omega_{n_1} + i\nu_m) G_0(i\omega_{n_1}) U \\ & - U \frac{1}{\beta} \sum_{n_1} G_0(i\omega_{n_1} + i\nu_m) G_0(i\omega_{n_1}) U \frac{1}{\beta} \sum_{n_2} G_0(i\omega_{n_2} + i\nu_m) G_0(i\omega_{n_2}) U + \dots \end{aligned} \quad (3.12)$$

Vidíme, že v tomto přiblížení je vrcholová funkce netriviálně závislá pouze na jedné ze svých proměnných $\Gamma(i\omega_n, i\omega_n, i\nu_m) = \Gamma(i\nu_m)$ a řada (3.12) je *geometrická*. Zavedme funkci

$$X_0(i\nu_m) \equiv \frac{1}{\beta} \sum_n G_0(i\omega_n + i\nu_m) G_0(i\omega_n). \quad (3.13)$$

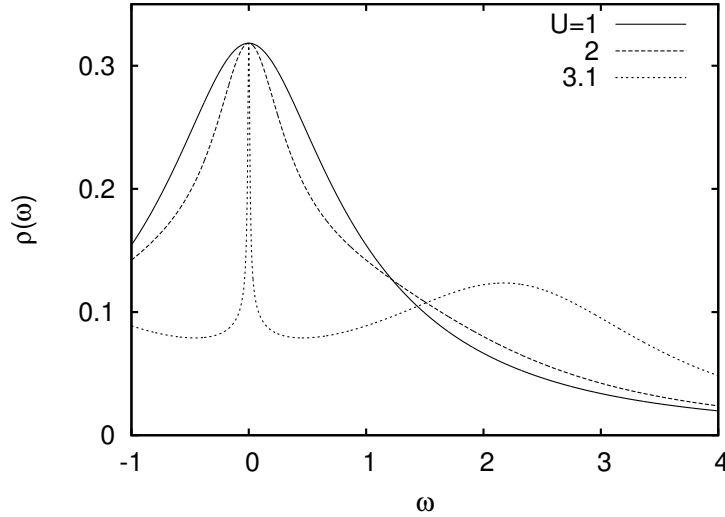
Součtem řady (3.12) je potom (tento výsledek můžeme dostat také přímo z (2.46))

$$\Gamma(i\nu_m) = \frac{-U}{1 + UX_0(i\nu_m)}. \quad (3.14)$$

Hodnota $G_0(i\omega_n)$ je ryze imaginární pro všechny Matsubarovy frekvence. Hodnota $X_0(0) = 1/\beta \sum_{n=-\infty}^{\infty} G_0(i\omega_n)^2$ je tedy záporná, reálná a nezávislá na hodnotě U . Díky tomu se ve dvoučásticové funkci objeví *pól*, dosáhne-li síla interakce kritické hodnoty $U_c = -1/X(0)$. Při nulové teplotě je

$$X_0(0) = 2 \frac{1}{2\pi i} \int_0^{\infty} d\omega \frac{-1}{(\omega + \Delta)^2} = -\frac{1}{\pi\Delta}, \quad (3.15)$$

tedy $U_c = \pi\Delta$. Přiblížení RPA proto vede ke stejné nestabilitě jako Hartreeho přiblížení (ve stejné hodnotě U_c) a není ho možné použít pro popis přechodu do režimu $U \rightarrow \infty$.

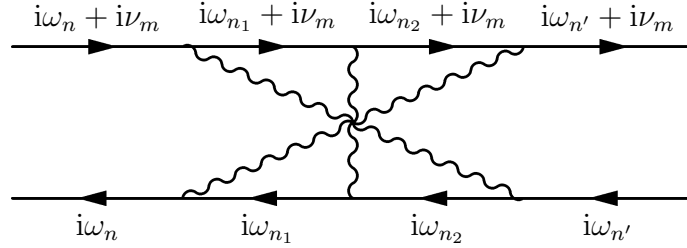


Obrázek 3.2: Hustota stavů spočtené v RPA. Energie je měřena v jednotkách pološířky pásu Δ .

Dosadíme-li výslednou vrcholovou funkci do Schwingerovy-Dysonovy rovnice a provedeme analytické prodloužení popsané níže v sekci FLEX, získáme hustotu stavů vykreslenou na obrázku 3.2. Vidíme, že v blízkosti kritického bodu $U = \pi\Delta$ se začínají tvořit satelitní pásy a centrální kvazičásticový pík se rychle zužuje.

3.3.2 Přiblížení matice přechodu (TMA)

K aproximaci známé jako TMA (Transfer Matrix Approximation) dospějeme analogicky jako k RPA, pouze namísto elektron-děrového kanálu Betheho-Salpeterových rovnic vezmeme do úvahy kanál elektron-elektronový a opět nahradíme $\Lambda^{ee} = -U$. V tomto případě je vrcholová funkce součtem „zkřížených žebříků“ naznačených na obrázku 3.3. Stejně jako v RPA i zde je vr-



Obrázek 3.3: Příspěvek třetího řádu k TMA.

cholová funkce netriviálně závislá pouze na jedné proměnné $\Gamma(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) = \Gamma(i\omega_n + i\omega_{n'} + i\nu_m)$. Díky tomu se Betheho-Salpeterova rovnice (2.47) redukuje na rovnici algebraickou. Jejím řešením dostáváme (názornější postup je sčítání geometrické řady žebříků 3.3)

$$\Gamma(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) = \frac{-U}{1 + U\tilde{X}_0(i\omega_n + i\omega_{n'} + i\nu_m)}, \quad (3.16)$$

kde výrazem \tilde{X}_0 tentokrát rozumíme

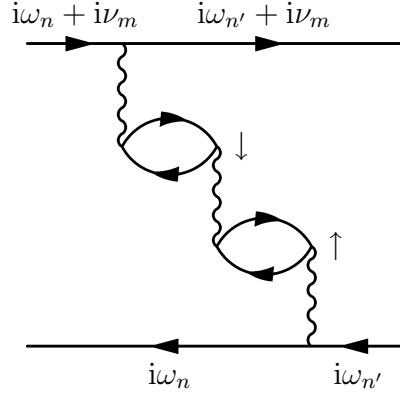
$$\tilde{X}_0(i\nu_m) = \frac{1}{\beta} \sum_n G_0(i\nu_m - i\omega_n)G_0(i\omega_n). \quad (3.17)$$

Snadno nahlédneme, že $\tilde{X}_0(0) = -X_0(0)$. Narozdíl od RPA je tedy výraz (3.16) konečný pro všechna U .

Jak vidíme na obrázku 3.2 a později ukážeme, divergence ve vrcholové funkci způsobuje vymizení kvazičásticového píku.

3.3.3 Přiblížení stíněné interakce

Třetí možností je využití interakčního kanálu Betheho-Salpeterových rovnic. Jako v předchozích případech nahradíme U -ireducibilní funkci holou interakcí a do vrcholové funkce tak započteme tzv. „bubble chain“ diagramy znázorněné na obrázku (3.4).



Obrázek 3.4: Příspěvek třetího řádu k aproximaci stíněné interakce.

Tím dostáváme vrcholovou funkci závislou pouze na proměnné $\Gamma(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) = \Gamma(i\omega_n - i\omega_{n'})$. Propagátory s opačnými spiny musí být díky spinové závislosti interakce propojeny přes lichý počet „bublin“. Pro vrcholovou funkci v tomto přiblížení tedy platí

$$\Gamma(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) = \frac{-U}{1 - [UX_0(i\omega_n - i\omega_{n'})]^2}, \quad (3.18)$$

kde X_0 je definováno stejně jako v RPA vztahem (3.13). Z toho vidíme, že stejně jako v RPA se i v této aproximaci objeví ve vrcholové funkci pól, dosáhne-li síla interakce hodnoty $U_c = \pi\Delta$.

3.4 Přiblížení fluktuující výměny (FLEX)

Přiblížení známé jako FLEX (z anglického FLuctuation EXchange) vychází z výše uvedených aproximací RPA, TMA a aproximace stíněné interakce.

V prvé řadě si můžeme všimnout, že s výjimkou prvního řádu jsou všechny příspěvky k vrcholové funkci od třech uvedených kanálů různé (to by nebyla pravda, pokud bychom jednotlivé ireducibilní funkce aproximovali složitějšími diagramy než jen holou interakcí). Přiblížení FLEX proto připouští jejich

sečtení (musíme odečíst příspěvky nejnižšího řádu) a přitom žádný diagram nezapočte více než jednou.

Dále ve FLEX odstraníme *jednočásticovou nekonzistenci* výše uvedených jednokanálových aproximací tím, že budeme požadovat, aby selfenergie vstupující do propagátorů v příslušných „žebřících“ (případně „bublinách“) byla stejná, jako výsledná selfenergie spočtená ze Schwingerovy-Dysonovy rovnice. Tento požadavek vyplývá z tvaru Schwingerovy-Dysonovy a Betheho-Salpeterových rovnic ve kterých vystupují *plné* propagátory.

Díky jednočásticové selfkonzistenci dostaneme ve FLEX plnou Greenovu funkci řešením *integrálních* rovnic. Pro jejich složitost nepoužijeme přiblížení FLEX v plné obecnosti, ale budeme do Γ započítávat pouze příspěvky od jednočásticově „opravené“ RPA (jednokanálový FLEX).

Vrcholová funkce proto bude opět součtem „žebříků“ jako na obrázku 3.1, ale propagátory tvořící tyto žebříky budou plné. Analogicky jako v RPA tak dostáváme

$$\Gamma(i\nu_m) = \frac{-U}{1 + UX(i\nu_m)}, \quad (3.19)$$

kde tentokrát

$$X(i\nu_m) = \frac{1}{\beta} \sum_n G(i\omega_n + i\nu_m)G(i\omega_n). \quad (3.20)$$

Z vrcholové funkce spočteme selfenergii dosazením do Schwingerovy-Dysonovy rovnice (připomeňme, že Hartreeho člen jsme již započítali do G_0) jako

$$\Sigma(i\omega_n) = -\frac{U^2}{2\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} G(i\omega_n + i\nu_m) \frac{X(i\nu_m)}{1 + UX(i\nu_m)}. \quad (3.21)$$

Tato selfenergie musí být stejná jako selfenergie vstupující do propagátorů v (3.20) a (3.21). Pro SIAM je plný propagátor dán vztahem

$$G(z) = \frac{1}{z + i\Delta \operatorname{sign}(\operatorname{Im} z) - \Sigma(z)}. \quad (3.22)$$

Musíme tedy vyřešit soustavu rovnic (3.20), (3.21) a (3.22). Její složitost prakticky znemožňuje analytické řešení a jedinou možností zůstává řešení numerické.

3.4.1 Numerické řešení

Přirozeně se nabízí možnost řešit uvedené rovnice přímo na Matsubarových frekvencích. Hodnoty na reálné ose bychom ale museli získat numerickým analytickým prodloužením. To je v principu možné díky znalosti obecných

analytických vlastností G (ta je holomorfní v celé komplexní rovině s výjimkou řezu na reálné ose), ale prakticky velmi obtížné.

Hodnotu $G(i\omega)$ na imaginární ose získáme z hodnot na reálné ose s využitím reziduové věty jako

$$G(i\omega) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(\omega'_+)}{i\omega - \omega'} d\omega'. \quad (3.23)$$

Uvedený integrál představuje konvoluci G s velmi hladkým (C^∞) jádrem (dalo by se říct, že rekonstruujeme „velmi rozmazaný obrázek“). Jeho inverzi proto provedeme tak, že přejdeme do Fourierova obrazu, celý výraz vydělíme Fourierovou transformací uvedeného jádra a provedeme zpětnou transformaci. Díky zmíněné hladkosti je jeho Fourierova transformace velmi rychle klesající funkcí. Z toho plyne, že při inverzi (3.23) musíme levou stranu násobit *velmi rychle* rostoucí funkcí. Velmi malá chyba ve výpočtu hodnot G na imaginární ose proto vede k nekontrolovaně velké chybě na ose reálné (znalost hodnoty $G(i\omega_n)$ je pro vysoká n téměř bezcenná).

Abychom se vyhnuli numerickému analytickému prodloužení, budeme rovnice uvedené v minulé sekci řešit přímo na reálné ose. Jejich analytické prodloužení není možné provést jednoduchou záměnou $i\omega_n \rightarrow \omega_+$ (s výjimkou prodloužení $G(i\omega_n)$), ale musíme použít metodu frekvenčních sumací popsanou v příloze A.

Po tomto prodloužení dostáváme vztahy

$$\operatorname{Re} X(\omega_+) = \int_{-\infty}^0 dx \rho(x) \operatorname{Re} [G(x + \omega_+) + G(x - \omega_+)], \quad (3.24a)$$

$$\operatorname{Im} X(\omega_+) = -\pi \operatorname{sign}(\omega) \int_0^{|\omega|} dx \rho(x) \rho(x - |\omega|), \quad (3.24b)$$

kde $\rho(\omega) = -1/\pi \operatorname{Im} G(\omega_+)$ je hustota stavů. Pro selfenergii dostáváme vyjádření

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \Sigma(\omega_+) &= -\frac{U^2}{2} \int_{-\infty}^0 dx \left\{ \rho(x) \operatorname{Re} [C(x - \omega_+) - C(x + \omega_+)] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} C(x_+) \operatorname{Re} [G(x - \omega_+) - G(x + \omega_+)] \right\}, \end{aligned} \quad (3.25a)$$

$$\operatorname{Im} \Sigma(\omega_+) = U^2 \int_0^{|\omega|} dx \rho(x - |\omega|) \operatorname{Im} C(x_+), \quad (3.25b)$$

kde jsme označili

$$C(\omega_+) = \frac{X(\omega_+)}{1 + UX(\omega_+)}. \quad (3.26)$$

K řešení této soustavy použijeme jednoduchou iterativní proceduru. Zvolíme hodnoty U_n , pro které chceme znát řešení. Pro $U = 0$ je $G(\omega_+) = G_0(\omega_+)$. Pro každou další hodnotu U_n pak zvolíme přirozený počáteční odhad $G[U_n](\omega_+) = G[U_{n-1}](\omega_+)$ (pomalu „zapínáme“ interakci) a iterativně opakujeme následující kroky:

- Spočteme „elektron-děrovou bublinu“ $X(\omega)$ ze vzorce (3.24).
- Spočteme selfenergii ze vzorce (3.25).
- Spočteme novou Greenovu funkci z (3.22).

Iterování ukončíme, pokud se Greenovy funkce spočtené v následujících krocích příliš neliší v L_2 normě.

Konvergenci této metody můžeme zlepšit tak, že jako vstup do $n + 1$ -té iterace nedosadíme přímo Greenovu funkci spočtenou v iteraci n -té, ale její konvexní lineární kombinaci s Greenovou funkcí z iterace $(n - 1)$ -té. Přesto se potřebný počet iterací s rostoucí hodnotou U rychle zvyšuje a již kolem hodnoty $U \approx 4\Delta$ metoda přestává konvergovat úplně. Již z toho je ale vidět minimálně to, že jsme s využitím požadavku jednočásticové selfkonzistence překonali kritickou hodnotu interakce v RPA ($\pi\Delta$).

Na obrázku 3.5 vidíme výslednou hustotu stavů. Původně lorentzovský pás se s rostoucím U postupně „rozmývá“ a na Fermiho mezi se tvoří úzký kvazičásticový pík.

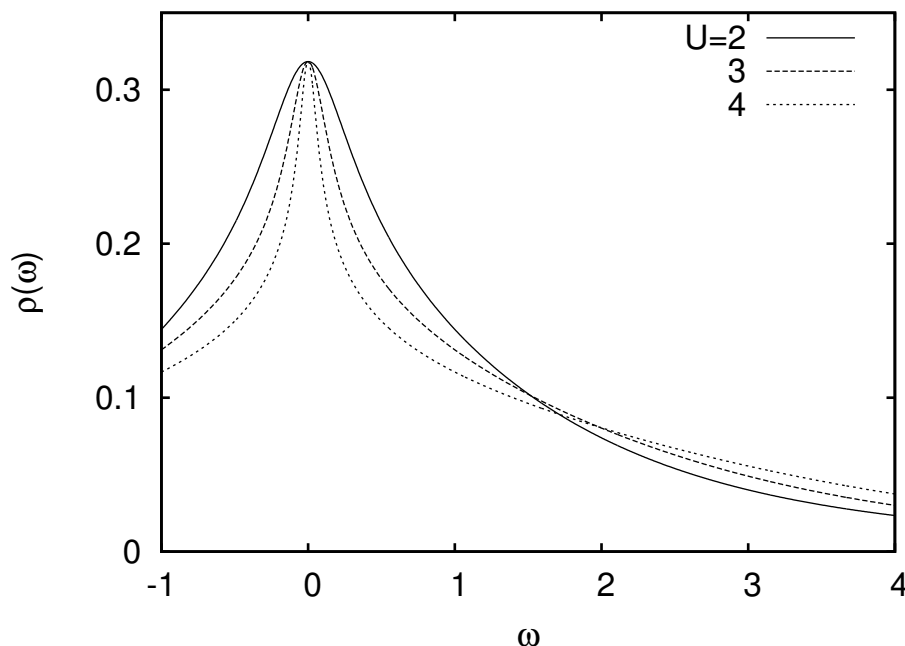
Chování tohoto píku s rostoucí silou interakce není možné na základě numerických výsledků spolehlivě stanovit, protože použitá metoda přestává konvergovat brzy poté, co se začne formovat.

Oproti očekávání se v hustotě stavů nezačínají objevovat ani náznaky satelitní pásů okolo $\omega = \pm U/2$ a jejich absence je závažným nedostatkem přiblížení FLEX.

Připomeňme, že jednočásticově neselfkonzistentní RPA přítomnost satelitních pásů předpovídá (viz. obrázek 3.2). Tyto pásy se po zahrnutí požadavku jednočásticové selfkonzistence „rozmazaly“. Stejný efekt uvidíme také v následující kapitole.

Reálnou a imaginární část výsledné selfenergie vidíme na obrázku 3.6. V souladu s teorií Fermiho kapaliny se $\text{Im } \Sigma$ pro malé hodnoty ω chová jako $\text{Im } \Sigma(\omega) \sim -\omega^2$, jak vidíme na výřezu.

Výsledky výpočtu provedeného se semieliptickou hustotou stavů se od uvedených výsledků nijak kvalitativně neliší. Semieliptický pás se s rostoucím U postupně „rozmývá“, na Fermiho mezi se tvoří úzký pík a selfenergie odpovídá chování Fermiho kapaliny. Konvergence použité metody selhává zhruba při $U \approx 2.5W$, kde W je pološířka (semieliptického) pásu.



Obrázek 3.5: Hustota stavů spočtená ve FLEX.

3.4.2 Asymptotické chování pro velká U

Na základě numerického řešení není možné rozhodnout, zda jsme použitou metodou odstranili nefyzikální pól v dvoučásticové funkci, nebo jsme pouze zvýšili kritickou sílu interakce U_c na numericky nedosažitelnou hodnotu. Abychom zodpověděli tuto otázku, musíme odhadnout chování přiblížení FLEX pro $U \rightarrow \infty$ analyticky.

Jak jsme viděli, singularita, kterou potřebujeme „dostat pod kontrolu“, se objeví s rostoucím U ve výrazu

$$C(\omega_+) = \frac{X(\omega_+)}{1 + UX(\omega_+)} \quad (3.27)$$

v bodě $\omega = 0$. Budeme proto předpokládat, že jsme v blízkosti kritického bodu a výraz ve jmenovateli (3.27) má v $\omega = 0$ *velmi malou* hodnotu $a = 1 + UX(0_+)$. Ptáme se, jak velká musí být hodnota U , aby byl tento předpoklad konzistentní, tj. aby byla hodnota $X(0_+) \approx -1/U$. Jinými slovy, chceme vědět, pro jaká U je ještě možné volbou dostatečně malého a zajistit, aby bylo $UX(0_+) > -1$.

Nejprve rozvineme výraz $X(\omega_+)$ do Taylorovy řady. Jeho derivováním

dostáváme podle definice (3.24)

$$\left. \frac{dX(\omega_+)}{d\omega} \right|_{\omega=0} = \int_{-\infty}^0 dx \rho(x) [G'(x_+) - G'(x_-)]. \quad (3.28)$$

S využitím toho, že $G(x_+) = G(x_-)^*$ můžeme tento integrál spočítat i bez explicitní znalosti $G(x_+)$ jako

$$\left. \frac{dX(\omega_+)}{d\omega} \right|_{\omega=0} = -2\pi i \int_{-\infty}^0 dx \rho(x) \rho'(x) = -i\pi \rho(0)^2. \quad (3.29)$$

Protože $\Sigma(0_+) = 0$, je tento výsledek nezávislý na síle interakce. Pro malá ω proto můžeme funkci $C(\omega_+)$ aproximovat jako

$$C(\omega_+) \approx \frac{-1/U}{a - i\pi U \rho(0)^2 \omega} \quad (3.30)$$

Pro zjednodušení označme $\alpha = \pi U \rho(0)^2$. Předpokládáme, že dominantní příspěvek do integrálů (3.25) pochází od té části integrandu, kde funkce $C(\omega)$ nabývá svého maxima, a tedy platí rozvoj (3.30). Jeho dosazením do (3.25) dostáváme

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \Sigma(\omega_+) &\approx -\frac{U}{2} \rho(\omega) \int_{-\omega}^{\omega} dx \frac{a}{a^2 + \alpha^2 x^2} \\ &\quad - \frac{U}{\pi} \operatorname{Re} G(\omega_+) \int_{-D}^0 dx \frac{\alpha x}{a^2 + \alpha^2 x^2}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\operatorname{Im} \Sigma(\omega_+) \approx -U \rho(\omega) \int_0^{|\omega|} dx \frac{\alpha x}{a^2 + \alpha^2 x^2}, \quad (3.32)$$

kde jsme zavedli efektivní šířku pásu D . Po provedení integrace

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \Sigma(\omega_+) &\approx -\frac{U}{\alpha} \rho(\omega) \operatorname{arctg} \left(\frac{\alpha \omega}{a} \right) \\ &\quad + \frac{U}{2\pi \alpha} \operatorname{Re} G(\omega_+) \ln \left(1 + \frac{\alpha^2 D^2}{a^2} \right), \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$\operatorname{Im} \Sigma(\omega_+) \approx -\frac{U}{2\alpha} \rho(\omega) \ln \left(1 + \frac{\alpha^2 \omega^2}{a^2} \right). \quad (3.34)$$

Do tohoto vztahu dosadíme vyjádření Greenovy funkce pomocí selfenergie

$$\operatorname{Re} G(\omega_+) = \frac{\omega - \operatorname{Re} \Sigma(\omega_+)}{[\omega - \operatorname{Re} \Sigma(\omega_+)]^2 + [\Delta - \operatorname{Im} \Sigma(\omega_+)]^2}, \quad (3.35)$$

$$\operatorname{Im} G(\omega_+) = \frac{\operatorname{Im} \Sigma(\omega_+) - \Delta}{[\omega - \operatorname{Re} \Sigma(\omega_+)]^2 + [\Delta - \operatorname{Im} \Sigma(\omega_+)]^2}. \quad (3.36)$$

Ze vztahu (3.34) vidíme, že

$$[\omega - \operatorname{Re} \Sigma(\omega_+)]^2 + [\Delta - \operatorname{Im} \Sigma(\omega_+)]^2 \sim \frac{1}{\rho(0)^2} \ln \left(1 + \frac{\alpha^2 \omega^2}{a^2} \right). \quad (3.37)$$

Pro dostatečně malá a tedy absolutní hodnota selfenergie diverguje (bodově pro všechna $\omega \neq 0$). Ze vztahu (3.33) potom vidíme, že se tato divergence nemůže objevit v její reálné části, protože jinak bychom dostali $\operatorname{Re} \Sigma \sim -\operatorname{Re} \Sigma$.

Hodnota $X(0)$ je dána podle (3.24) integrálem

$$\begin{aligned} X(0_+) &= -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^0 dx \operatorname{Im} G(x_+) \operatorname{Re} G(x_+) \\ &= -\frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^0 dx \frac{[x - \operatorname{Re} \Sigma(x_+)] [\operatorname{Im} \Sigma(x_+) - \Delta]}{[x - \operatorname{Re} \Sigma(x_+)]^2 + [\Delta - \operatorname{Im} \Sigma(x_+)]^2}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Protože $\operatorname{Im} \Sigma$ diverguje s $a \rightarrow 0$, je možné integrand v každém bodě „stlačit“ pod libovolnou hodnotu volbou dostatečně malého a a pro $a = 0$ je tedy $X(0) = 0$ (je nutné si uvědomit, že pro všechna a má integrand integrabilní majorantu). To znamená, že pro libovolné U vždy existuje takové *nenulové* a , aby bylo $X(0) \approx -1/U$. Kritickou hodnotu interakce jsme tedy v přiblížení FLEX vytlačili do nekonečna.

Detailní analýza, kterou provedl Hamann v [6] ale ukazuje, že se Kondova energetická škála zmenšuje s rostoucím U jako $a \sim \exp(-U^2)$. To je v rozporu s exaktním výsledkem uvedeným například v [7] (a také s variačním řešením popsaným v úvodu) podle kterého má být

$\Delta_K \sim \sqrt{\Delta/U} \exp(-\pi U/8\Delta)$. Pomocí přiblížení FLEX tedy nedokážeme správně popsat chování Andersonova modelu v režimu silné vazby.

3.5 Shrnutí

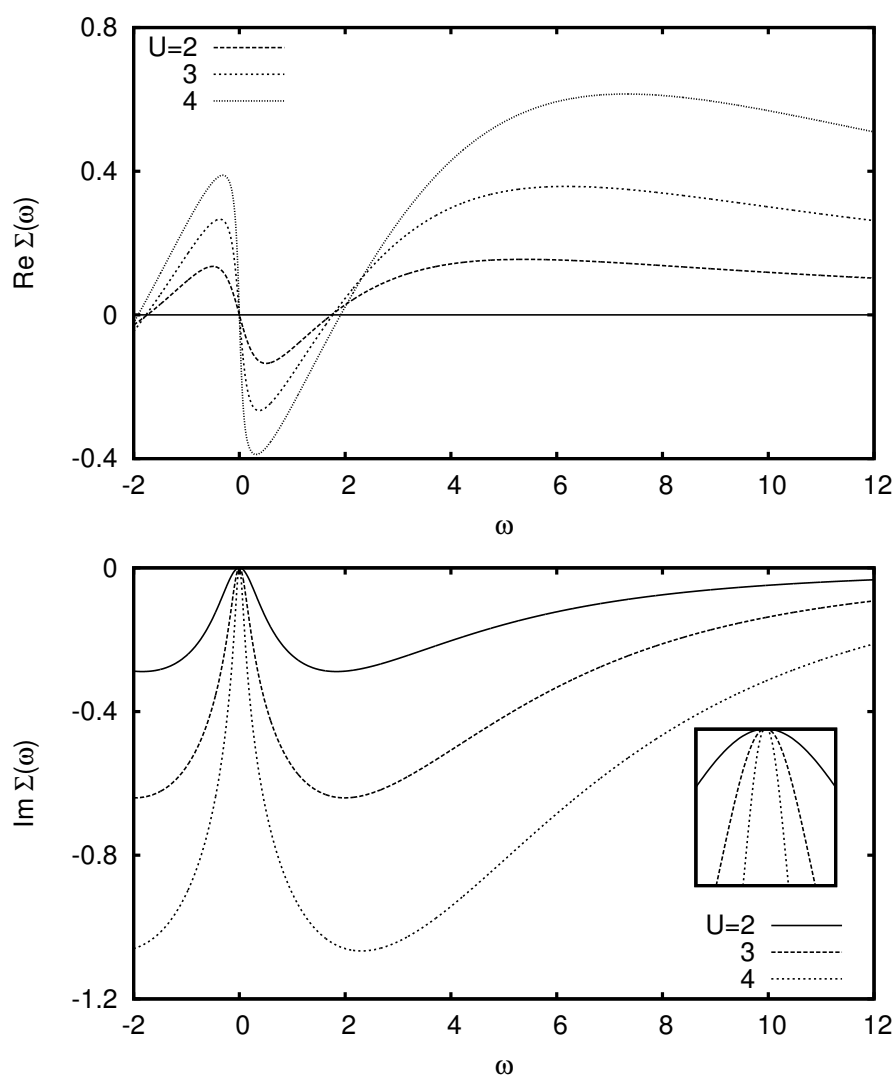
Uvedli jsme souhrn několika běžně užívaných přibližných diagramatických teorií. Žádná z nich však nedokázala uspokojivým způsobem popsat přechod do režimu silné vazby.

Hartreeho přiblížení, RPA a přiblížení stíněné interakce vedly k nestabilitě při konečné hodnotě U_c , a jejich výsledky proto není možné protáhnout do $U \rightarrow \infty$.

Naopak, přiblížení TMA představuje druhý extrém a vůbec nevystihuje tendenci k rychlému hroucení Kondova píku.

Kritickou hodnotu U_c jsme odsunuli do nekonečna zavedením požadavku jednočásticové selfkonzistence popsaném v sekci FLEX. Toto přiblížení však

není schopné zreprodukovat správnou Kondovu asymptotiku. Navíc zde v hustotě stavů nepozorujeme satelitní pásy.



Obrázek 3.6: Reálná a imaginární část selfenergie spočtená v přiblížení FLEX. Na výřezu vidíme chování imaginární části selfenergie v okolí $\omega = 0$.

Kapitola 4

Parquetové rovnice

4.1 Úvod

Značení

Pro zjednodušení zápisu dále nebudeme uvádět argumenty funkcí tam, kde to nebude nutné, a přejdeme k zjednodušenému značení typu $\Gamma(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) \equiv \Gamma$. Konvoluce dvoučásticových funkcí budeme značit jako

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\beta} \sum_{n''} \Lambda^{\text{eh}}(i\omega_n, i\omega_{n''}, i\nu_m) G(i\omega_{n''} + i\nu_m) G(i\omega_{n''}) \Gamma(i\omega_{n''}, i\omega_{n'}, i\nu_m) \\ & \equiv \langle \Lambda^{\text{eh}} G G \Gamma \rangle_{\text{eh}} \end{aligned} \quad (4.1)$$

a analogicky v ostatních kanálech. Například Betheho-Salpeterovy rovnice (2.47) a (2.46) můžeme v této notaci zapsat jako

$$\Gamma = \Lambda^\alpha + \langle \Lambda^\alpha G G \Gamma \rangle_\alpha. \quad (4.2)$$

Výchozí předpoklad

Jak jsme viděli, selfkonzistentní výpočet jednočásticové Greenovy funkce nevedl k uspokojivým výsledkům. V této kapitole se proto vydáme jinou cestou a selfkonzistentně budeme počítat funkce *dvoučásticové*. Vybudujeme tak teorii, která některé nedostatky dříve uvedených aproximací odstraňuje.

Výchozím bodem této teorie jsou takzvané *parquetové rovnice*, které vycházejí z následujícího poznatku: „*Dvoučásticová Greenova funkce reducibilní v jednom kanálu Betheho-Salpeterových rovnic je ireducibilní v ostatních kanálech*“.

Tento výrok dokážeme sporem. Upozorňujeme, že následující důkaz se vztahuje pouze na diagramy zkonstruované podle Feynmanových pravidel,

kteřá používáme v této práci. Idea parketových rovnic je použitelná i v jiných případech, nikoliv však zcela obecně.

Uvedené tvrzení můžeme ekvivalentně zformulovat tak, že neexistuje diagramatický příspěvek k vrcholové funkci Γ (připomeňme její definici (2.45)) reducibilní zároveň ve dvou kanálech Betheho-Salpeterových rovnic. Pro spor tedy předpokládejme, že takový diagram existuje.

Jako důsledek reducibility uvažovaného diagramu v prvním kanálu (viz. definice v sekci 2.5) by v něm musely existovat dva propagátory, jejichž přetnutím by se tento diagram rozpadnul na dva nesouvislé poddiagramy a každý z těchto poddiagramů by obsahoval dva z vnějších vrcholů.

Díky reducibilitě v druhém kanálu by v něm pak musely existovat další dva propagátory (ty mohou ale nemusí být shodné s předchozíma dvěma), jejichž přetnutím bychom oddělili jiné dvě dvojice vnějších vrcholů.

Z toho plyne, že by se po rozetnutí všech těchto (nejvýše čtyř) propagátorů musel uvažovaný diagram rozpadnout na čtyři nesouvislé poddiagramy (označme je 1,2,3 a 4) a každý by obsahoval právě jeden z vnějších vrcholů.

Na druhou stranu, pokud lze nějaký z diagramů 1,2,3 nebo 4 oddělit od zbylých tří přetnutím nejvýše čtyř propagátorů, musí být tento diagram se zbylými třemi diagramy spojen těmito nejvýše čtyřmi propagátory (a ničím jiným).

Každý Feynmanův diagram musí mít sudý počet vnějších vrcholů. Každý z diagramů 1,2,3 a 4 bude mít po oddělení od zbylých tří diagramů $n+1$ vnějších vrcholů, kde n je počet propagátorů jejichž rozetnutím byl oddělen. Protože $n \leq 4$, je $n = 1$ nebo $n = 3$.

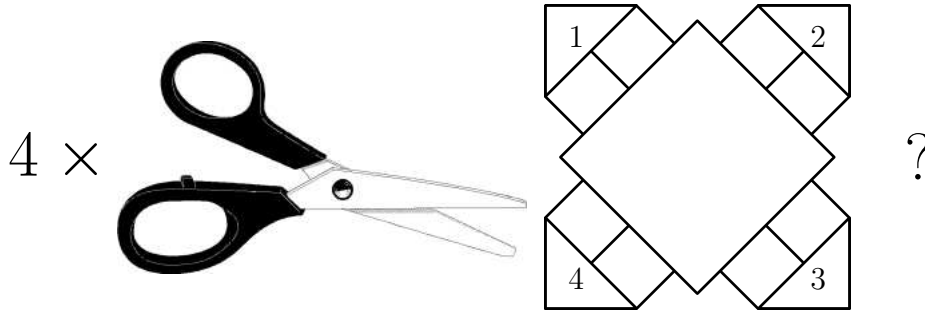
Možnost $n = 1$ můžeme vyloučit, protože jinak by původní (nerozstříhaný) diagram nepřispíval do vrcholové funkce Γ (z diagramatického příspěvku ke Γ nelze z definice oddělit jeden z vnějších vrcholů přetnutím jednoho propagátoru). Jedinou možností je proto $n = 3$.

Z těchto faktů vyplývá, že každý diagram reducibilní zároveň ve dvou kanálech Betheho-Salpeterových rovnic musí mít nutně strukturu naznačenou na obrázku 4.1. Ve čtverci uprostřed tohoto diagramu jsou nějakým způsobem po dvojicích pospojovány konce všech dvanácti naznačených propagátorů (jejich orientace je nepodstatná).

Z toho vidíme, že poddiagramy 1,2,3 a 4 není možné oddělit pomocí méně než šesti „střihnutí“, a dostáváme tak *spor*.

Parketové rovnice

Z uvedeného tvrzení plyne, že všechny reducibilní diagramy v jednom kanále jsou podmnožinou ireducibilních diagramů v libovolném ze zbylých dvou kanálů.



Obrázek 4.1: Struktura hypotetického diagramu reducibilního současně ve dvou kanálech Betheho-Salpeterových rovnic. Poddiagramy 1,2,3 a 4 jsou s ostatními spojeny třemi propagátory.

Všechny reducibilní diagramy v daném kanále získáme jako rozdíl vrcholové funkce a funkce v tomto kanále ireducibilní. Platí tedy $\Gamma - \Lambda^\alpha \subset \Lambda^{\alpha'}$ kde α, α' označují dva různé kanály.

Evidentně, množina diagramů $I^{\alpha\alpha'} = \Lambda^{\alpha'} - (\Gamma - \Lambda^\alpha)$ je ireducibilní v obou kanálech α, α' , a proto ji budeme nazývat úplně ireducibilní funkce. Odtud dostáváme pro vrcholovou funkci *parketovou rovnici*

$$\Gamma = \Lambda^\alpha + \Lambda^{\alpha'} - I^{\alpha\alpha'}. \quad (4.3)$$

Nyní bychom mohli vzít do úvahy ještě třetí kanál Betheho-Salpeterových rovnic a z $I^{\alpha\alpha'}$ „oddělit“ diagramy reducibilní v tomto třetím kanále. Takový postup by vedl k diagramaticky bohatší, ale matematicky složitější teorii (s prakticky nedostupným řešením), a proto ho nepoužijeme.

Dosadíme-li (4.3) do Betheho-Salpeterových rovnic v kanálech α a α' , dostáváme *selfkonzistentní* vztah svazující Λ^α a $\Lambda^{\alpha'}$

$$\Lambda^{\alpha'} = I^{\alpha\alpha'} + \langle \Lambda^\alpha GG[\Lambda^\alpha + \Lambda^{\alpha'} - I^{\alpha\alpha'}] \rangle_\alpha. \quad (4.4)$$

Vstupem do této soustavy rovnic jsou plný propagátor G a úplně ireducibilní funkce $I^{\alpha\alpha'}$. Tím jsme se dostali „o krok dál“ za Betheho-Salpeterovy rovnice. Místo toho, abychom přímo aproximovali funkce Λ^α a $\Lambda^{\alpha'}$ nám stačí aproximovat pouze úplně ireducibilní funkci $I^{\alpha\alpha'}$. Úplně ireducibilních diagramů je však výrazně méně než diagramatických příspěvků do Λ^α a $\Lambda^{\alpha'}$ a započtením každého příspěvku k $I^{\alpha\alpha'}$ vygenerujeme nekonečnou řadu příspěvků k Λ^α a $\Lambda^{\alpha'}$.

Dodejme ještě, že ze znalosti Λ^α a $\Lambda^{\alpha'}$ spočteme vrcholovou funkci buď z parketové rovnice (4.3), nebo z *jednoho* z kanálů α, α' Betheho-Salpeterových rovnic a výsledek je ve všech třech případech stejný. Příspěvky od jednotlivých kanálů *nesčítáme* tak, jak to bylo možné v přiblížení FLEX.

4.2 Aproximační schéma

Cenou ze to, že řešením parketových rovnic započteme velmi širokou třídu Feynmanových diagramů, je jejich matematická složitost. Ve tvaru (4.4) jsou tyto rovnice příliš složité a je potřeba je dále zjednodušit tak, aby byly numericky řešitelné, ale zároveň stále dostatečně „bohaté“.

V první řadě musíme zvolit, které dva kanály Betheho-Salpeterových rovnic započteme.

V předcházející kapitole jsme viděli, že s rostoucí silou interakce se v dvoučásticové funkci spočtené v jednobanální aproximaci v interakčním a elektron-děrovém kanále objeví pól, zatímco dvoučásticová funkce spočtená v kanále elektron-elektronovém je regulární pro libovolné U .

Tento pól chceme odstranit (odsunout do nekonečna) na dvoučásticové úrovni, tedy vypsáním širší třídy dvoučásticových diagramů než jen obyčejných „žebříků“ (snaha o jeho odstranění na úrovni jednočásticové nebyla příliš úspěšná). Intuitivně očekáváme, že to zajistí právě regulární elektron-elektronový kanál. Právě ten tedy „smícháme“ pomocí parketových rovnic s jedním ze zbývajících dvou singulárních kanálů.

Protože chceme, aby byly výsledné rovnice co nejjednodušší, použijeme kanál elektron-děrový (Betheho-Salpeterovy rovnice mají ve vertikálním kanále složitější strukturu). Dále tedy budou α a α' označovat kanály ee a eh .

Nyní musíme zvolit vstupy do rovnic (4.4), tj. musíme vybrat, které diagramy započteme do úplně ireducibilní funkce a jakou aproximaci plného propagátoru použijeme.

Volba aproximace G není pro následující výpočet podstatná, a proto ji ponecháme stranou.

Úplně ireducibilní funkci nahradíme nejjednodušším diagramem, který do ní přispívá, holou interakcí, tedy $I^{\alpha\alpha'} = -U$.

Jednoduchou úpravou rovnic (4.4) dostáváme

$$\Lambda^{\alpha'} = U[\langle \Lambda^{\alpha}GG \rangle_{\alpha} - 1] + \langle \Lambda^{\alpha}GGA^{\alpha} \rangle_{\alpha} + \langle \Lambda^{\alpha}GGA^{\alpha'} \rangle_{\alpha}, \quad (4.5)$$

kde jsme použili zkrácené značení $\langle \Lambda^{\alpha}GG \rangle_{\alpha} \equiv \langle \Lambda^{\alpha}GG1 \rangle_{\alpha}$.

Tyto rovnice jsou stále příliš složité na to, abychom je mohli numericky, či dokonce analyticky řešit.

Na tomto místě můžeme využít výsledků předcházející kapitoly. V té jsme viděli, že dvoučásticová funkce spočtená v RPA je ve skutečnosti netriviálně závislá pouze na jedné ze tří svých proměnných $\Gamma_{\text{RPA}}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) = \Gamma_{\text{RPA}}(i\nu_m)$ (a v této proměnné je singulární).

Ze struktury parketových rovnic plyne, že elektron-elektronově ireducibilní funkce Λ^{ee} musí obsahovat právě takové součty elektron-děrových „žeb-

říků“, jako jsme sčítali v RPA. Proto očekáváme, že se nedopustíme velké chyby, když budeme předpokládat, že také Λ^{ee} závisí stejně jako Γ_{RPA} pouze na bosonové frekvenci

$$\Lambda^{ee}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) \approx \Lambda^{eh}(i\nu_m). \quad (4.6)$$

Analogicky, elektron-děrově ireducibilní funkce bude (mimo jiné) obsahovat součty žebříků elektron-elektronových, které se chovají regulárně. Singulární elektron-děrové žebříky vstupují do této funkce pouze prostřednictvím dvoučásticových konvolucí, tedy až po přeintegrování, které jejich „singulárnost“ zeslabuje. V nejjednodušší aproximaci ji proto položíme rovnu konstantě představující efektivní sílu elektron-děrové interakce

$$\Lambda^{eh}(i\omega_n, i\omega_{n'}, i\nu_m) \approx -\bar{U}. \quad (4.7)$$

Po těchto zjednodušeníh se v podstatě vracíme k přiblížení RPA. Požadavek dvoučásticové selfkonzistence nás ale dovedl k renormalizaci síly elektron-děrové interakce vstupující do příslušných žebříků.

Díky (4.6) můžeme zjednodušit všechny elektron-děrové konvoluce, do kterých vstupuje elektron-elektronově ireducibilní funkce jako, $\langle \Lambda^{ee} GGA \rangle_{eh} = \Lambda^{ee} \langle GGA \rangle_{eh}$

Zbývá ještě určit, jak spočteme konstantu \bar{U} ze znalosti pravé strany rovnice (4.4), která je podle předpokladu funkcí frekvence $i\nu_m$. Protože se zajímáme především o chování v okolí Fermiho meze, provedeme tento krok dosazením $i\nu_m = 0$.

Rovnice (4.4) se tak po jednoduché úpravě redukuje na

$$\Lambda^{ee}(i\nu_m) = \frac{-U(\bar{U}X(i\nu_m) + 1) + \bar{U}^2 X(i\nu_m)}{1 + \bar{U}X(i\nu_m)}, \quad (4.8)$$

$$\bar{U} = \frac{U(1 - \langle \Lambda^{ee} GG \rangle_{ee}(0)) - \langle \Lambda^{ee} GGA \rangle_{ee}(0)}{1 + \langle \Lambda^{ee} GG \rangle_{ee}(0)}, \quad (4.9)$$

kde v souladu s dříve použitým značením

$$X(i\nu_m) = \langle GG \rangle_{eh}(i\nu_m) = \frac{1}{\beta} \sum_n G(i\nu_m + i\omega_n) G(i\omega_n). \quad (4.10)$$

V limitě $U \rightarrow \infty$ očekáváme, že hodnota výrazu $\langle \Lambda^{ee} GGA \rangle_{ee}(0)$ bude rychle divergovat. To by znamenalo, že se pro dostatečně vysoké U obrátí výraz na pravé straně (4.9) znaménko a efektivní interakce \bar{U} změní svůj charakter z odpudivé na přitažlivou. Takový výsledek je evidentně nefyzikální a je pouze artefaktem naší aproximace. Proto nahradíme jednu z funkcí Λ^{ee}

v diskutovaném výrazu příspěvkem nejnižšího řádu, holou interakcí $-U$, a tím se (4.9) redukuje na

$$\bar{U} = \frac{U}{1 + \langle \Lambda^{ee} G G \rangle_{ee}(0)}. \quad (4.11)$$

Abychom mohli tyto rovnice numericky řešit, musíme je analyticky prodloužit na reálnou osu. To provedeme metodou popsanou v příloze A a dostáváme

$$\langle \Lambda^{ee} G G \rangle_{ee}(0) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 d\omega |G(\omega_+)|^2 \operatorname{Im} \Lambda^{ee}(\omega_+), \quad (4.12)$$

$$\operatorname{Re} X(\omega_+) = \int_{-\infty}^0 dx \rho(x) \operatorname{Re} [G(x + \omega_+) + G(x - \omega_+)],$$

$$\operatorname{Im} X(\omega_+) = -\pi \int_0^{\omega} dx \rho(x) \rho(x - |\omega|). \quad (4.13)$$

Jakkoliv se mohou zdát uvedené aproximace drastické, níže uvedené výsledky ukazují, že nejsou zcela neopodstatněné.

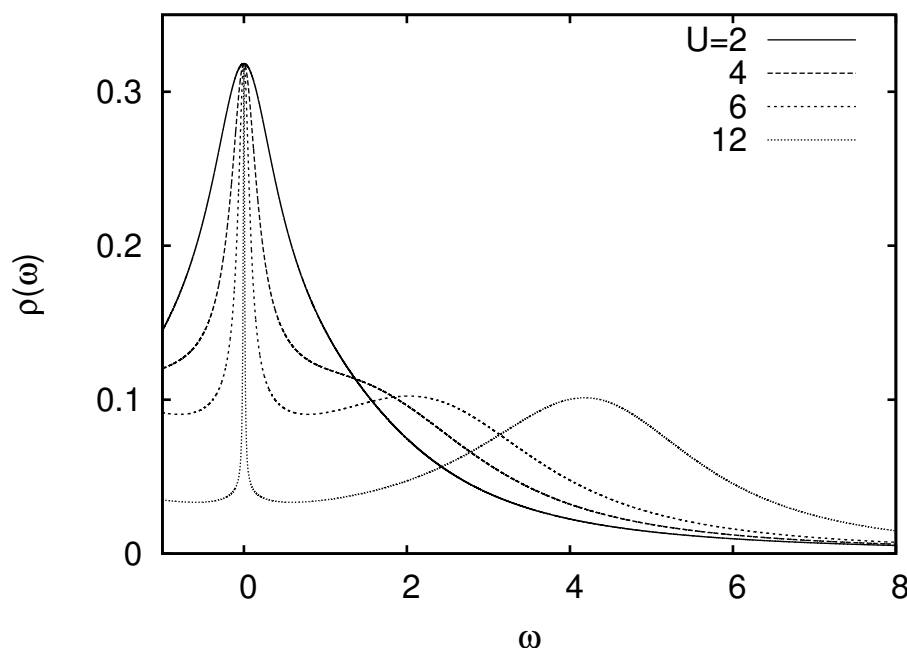
4.3 Numerické řešení

Rovnice (4.8) a (4.11) můžeme snadno numericky řešit. V nejjednodušším případě položíme $G(\omega) = G_0(\omega)$ a postupujeme takto:

- Spočteme „elektron-děrovou bublinu“ $X(\omega)$ ze vztahu (3.24).
- Metodou půlení intervalů spočteme z rovnic (4.8), (4.11) hodnotu \bar{U} (předpokládáme, že $\bar{U} \in (0, U_c)$).
- Z parketové rovnice (4.3) spočteme vrcholovou funkci Γ .
- Ze Schwingerovy-Dysonovy rovnice (2.51) spočteme selfenergii $\Sigma(\omega)$.

Numerická náročnost této procedury je velmi nízká. Díky metodě půlení intervalů při výpočtu hodnoty \bar{U} (v iterativní části výpočtu) je *zaručena* její konvergence a to již po malém počtu iterací a nezávisle na síle interakce U . Navíc nepotřebujeme opakovaně počítat konvoluce, ale pouze integrály. Jejím nedostatkem je ale jednočásticová nekonzistence.

Na obrázku 4.2 vidíme výslednou hustotu stavů Andersonova hamiltoniánu. Na rozdíl od výsledků aproximace FLEX má očekávanou třípásovou strukturu. Horní a dolní satelitní pásy nejsou umístěny přesně v $\omega = \pm U/2$,



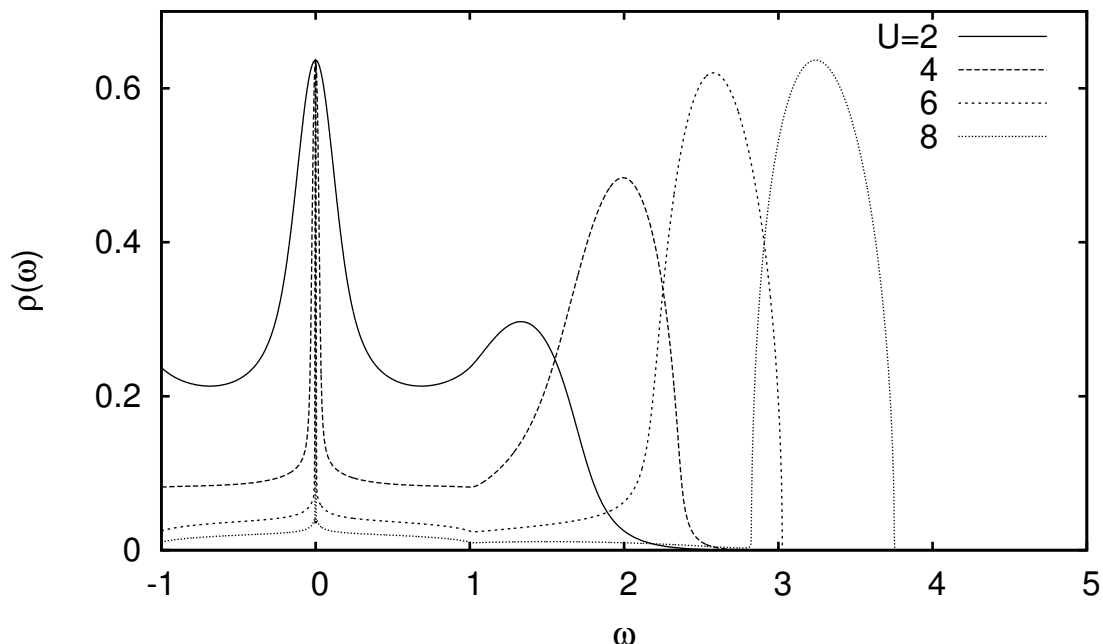
Obrázek 4.2: Hustota stavů Andersonova hamiltoniánu spočtená pomocí parketových rovnic bez zahrnutí požadavku jednočásticové selfkonzistence.

jak by odpovídalo atomové limitě, ale s rostoucím U se vůči této hodnotě mírně posouvají směrem k Fermiho mezi. Centrální kvazičásticový pík vykazuje kvalitativně správnou Kondovu asymptotiku a s rostoucí silou interakce se exponenciálně zužuje. Závislost logaritmu šířky tohoto píku v polovině jeho výšky na síle interakce U je vynesena v grafu 4.4. Vidíme, že tato závislost je přibližně lineární.

Pro zajímavost uvedme také výslednou hustotu stavů Hubbardova hamiltoniánu, kterou vidíme na obrázku 4.3. V porovnání s obrázkem 4.2 zde vidíme ostřejší ohraničené satelitní pásy a hustota stavů v okolí Fermiho meze klesá poměrně rychle k nule. Provedený výpočet tedy naznačuje tendenci Hubbardova modelu k přechodu kov-izolátor. Tento přechod však nemůže použitá teorie předpovědět, jak vyplývá z níže uvedeného odhadu asymptotického chování.

Otevřenou otázkou zůstává, zda tento přechod uvidíme po přesnějším vyřešení parketových rovnic.

Reálná a imaginární část selfenergie jsou vyneseny na obrázku 4.5 Stejně jako u výsledků přiblížení FLEX, které vidíme na obrázku 3.6, vidíme chování odpovídající teorii Fermiho kapaliny.



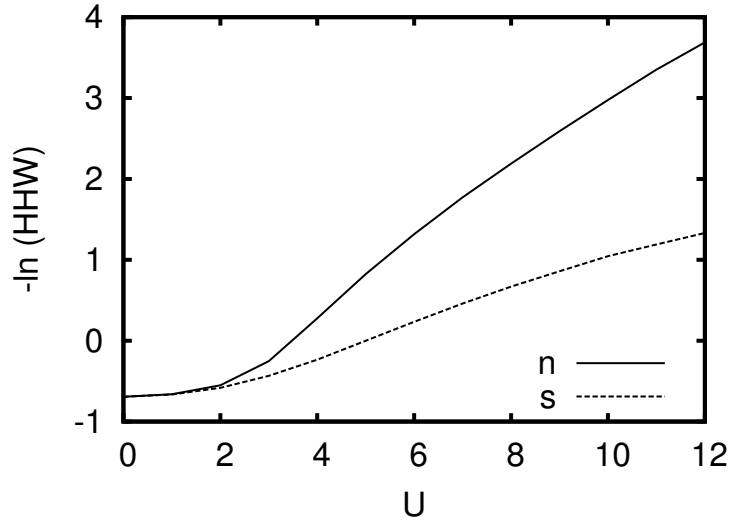
Obrázek 4.3: Hustota stavů Hubbardova hamiltoniánu spočtená pomocí par-
ketových rovnic.

Do našeho postupu můžeme zahrnout také požadavek jednočásticové self-konzistentnce. Pomocí selfenergie vypočtené ze Schwingerovy-Dysonovy rovnice opravíme Greenovu funkci a budeme opakovat proceduru popsanou na začátku této sekce tak dlouho, dokud se hodnota selfenergie nebude příliš lišit od hodnoty spočtené v předcházející iteraci.

Po provedení tohoto výpočtu jsme však zjistili, že v porovnání s neself-konzistentním případem dává jednočásticově selfkonzistentní teorie oproti očekávání horší výsledky.

Třípásová struktura hustoty stavů opět vymizela a satelitní pásy se zcela „rozmazaly“. Centrální pík se oproti neselfkonzistentní verzi rozšířil (stejný důsledek jednočásticové selfkonzistence jsme viděli při přechodu RPA \rightarrow FLEX). Kondova asymptotika však zůstala alespoň kvalitativně zachována a s rostoucí silou interakce se tento pík exponencialně zužuje. Závislost jeho šířky v polovině výšky je vynesena v grafu 4.4. Ta je přibližně lineární, ale její směrnice je zhruba třikrát menší než v neselfkonzistentním případě a souhlas s exaktním výsledkem je tedy horší.

Dodejme, že metoda dobře konverguje i při vysokých hodnotách U .



Obrázek 4.4: Šířka centrálního píku v polovině výšky (Half Height Width) spočtená pomocí parкетовých rovnic. s-jednočásticově selfkonzistentí verze, n-jednočásticově neselfkonzistentí verze.

4.4 Asymptotické chování pro velká U

Chování Kondova píku můžeme v limitě $U \rightarrow \infty$ odhadnout analyticky.

V jednočásticově neselfkonzistentním případech rozvineme podle vztahu (3.28)

$$1 + \bar{U} X_0(\omega) \approx a - i\pi \bar{U} \rho(0)^2 \omega \quad (4.14)$$

a předpokládáme, že a je velmi malé. Díky tomu se zjednoduší čitatel (4.8) na

$$-U(\bar{U} X_0(0_+) + 1) + \bar{U}^2 X_0(0_+) \approx -\bar{U} \quad (4.15)$$

a pro malá ω tedy platí

$$\Lambda^{ee}(\omega) \approx \frac{-\bar{U}}{a - i\pi \bar{U} \rho(0)^2 \omega}. \quad (4.16)$$

Dominantní příspěvek do integrálu (4.12) má okolí bodu $\omega = 0$, protože zde integrand s $a \rightarrow 0$ diverguje. Imaginární část $G_0(\omega_+)$ se v okolí tohoto bodu mění jen velmi pomalu, a proto ji nahradíme konstantou rovnou její hodnotě

na Fermiho mezi $G(\omega_+) \approx -\pi\rho(0)$ a vytkneme před integrál. Dostáváme tak

$$\begin{aligned} \langle \Lambda^{ee} GG \rangle_{ee} &\approx -\pi\rho(0)^2 \int_{-D}^0 d\omega \operatorname{Im} \frac{\bar{U}}{a - i\pi\bar{U}\rho(0)^2\omega} \\ &= -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{a^2}{a^2 + (\pi\bar{U}\rho(0)^2 D)^2} \right), \end{aligned} \quad (4.17)$$

kde D je efektivní šířka pásu. Parametr a ve jmenovateli argumentu logaritmu je oproti druhému členu podle předpokladu zanedbatelný, a tedy

$$\langle \Lambda^{ee} GG \rangle_{ee} \approx -\ln \left(\frac{a}{\pi\bar{U}\rho(0)^2 D} \right). \quad (4.18)$$

Protože a je velmi malé, musí být $\bar{U} \approx U_c = -1/X(0_+)$, a dostáváme tak odhad

$$a \approx \pi U_c \rho(0)^2 D \exp \left(-\frac{U}{U_c} \right). \quad (4.19)$$

Ze vzorce (3.24) vidíme, že

$$X_0(0_+) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 dx \operatorname{Im} (G(x_+)^2). \quad (4.20)$$

Pro neporušenou Greenovu funkci Andersonova modelu platí $G'_0 = -G_0^2$, a tedy

$$X(0_+) = -\rho(0), \quad U_c = \frac{1}{\rho(0)}. \quad (4.21)$$

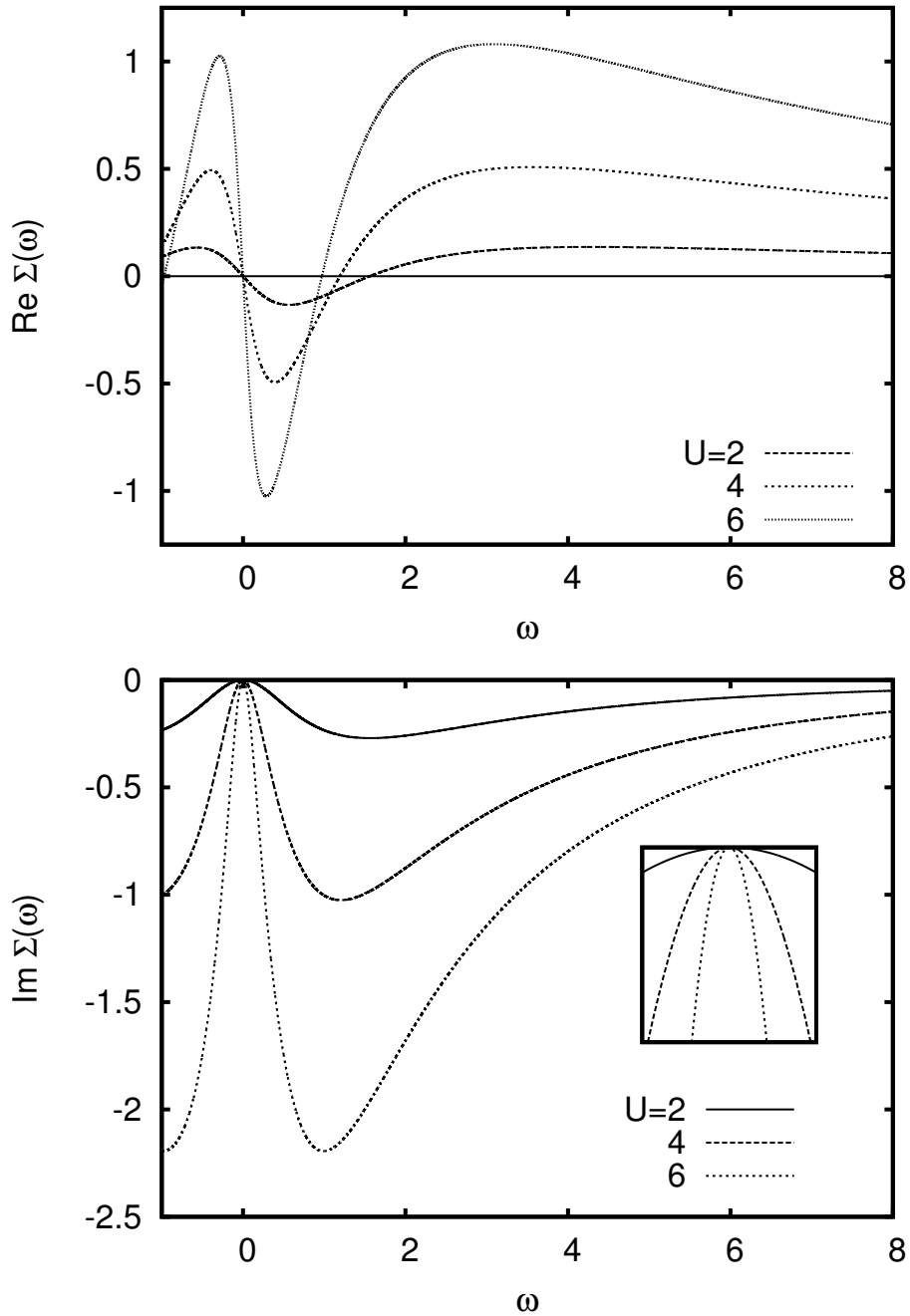
Vzorec (4.19) se tedy pro Andersonův model redukuje na

$$a \approx \pi\rho(0)D \exp(-U\rho(0)). \quad (4.22)$$

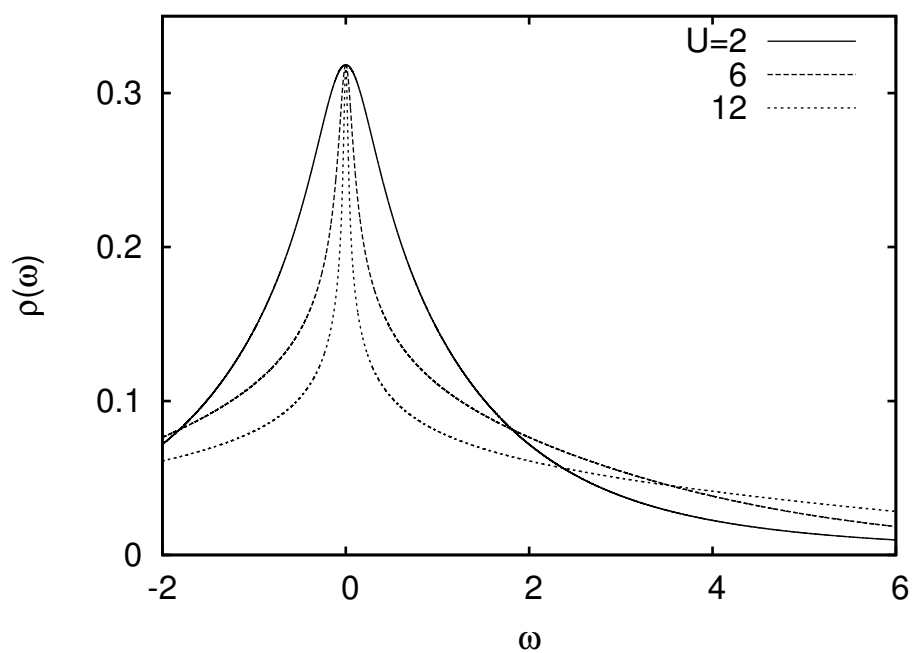
Snadno zjistíme, že parametr a udává rychlost „hroucení“ Kondova píku.

Porovnáním s exaktním výsledkem uvedeným například v [7] zjistíme, že faktor v argumentu exponenciály je $8/\pi^2 \approx 0.8$ -násobkem správné hodnoty. Náš výsledek tedy není úplně přesný, ale chyba, které jsme se dopustili není příliš velká.

Z uvedených výsledků vidíme, že i ve velmi jednoduché podobě parketové rovnice správně popisují přechod do režimu silné vazby a poměrně přesně reprodukuje Kondovu energetickou škálu.



Obrázek 4.5: Reálná a imaginární část selfenergie Andersonova modelu spočtená pomocí parquetových rovnic. Na výřezu vidíme chování imaginární části selfenergie v okolí $\omega = 0$.



Obrázek 4.6: Hustota stavů Andersonova hamiltoniánu spočtená pomocí par-
ketových rovnic se zahrnutím požadavku jednočásticové selfkonzistence.

Kapitola 5

Závěr

Rozebrali jsme několik přibližných diagramatických teorií, které vycházely z různých metod jak sčítat nekonečné řady Feynmanových diagramů. Pro popis přechodu Andersonova modelu jedné příměsi do režimu silné vazby byly teorie založené na Dysonově a Betheho-Salpeterových rovnicích neúspěšné. Až použití parketových rovnic vedlo k částečnému úspěchu. Pomocí těchto rovnic jsme došli k aproximaci, která dává kvalitativně správné výsledky nezávisle na síle interakce U . Velikost Kondovy energetické škály spočtená v tomto přiblížení je v dobrém souhlasu s teorií a v jednočásticově neselfkonzistentní verzi předpovídá vznik Hubbardových satelitních pásů.

Otevřenou otázkou zůstává, jaké výsledky dostaneme přesnějším řešením parketových rovnic. Současná metoda zjednodušení těchto rovnic je numericky velmi nenáročná, a proto nám nechává značné rezervy pro další zdokonalování.

Příloha A

Frekvenční sumace

Pomocí teplotní diagramatické teorie získáme vztahy pro výpočet hodnot Greenovy funkce (rezolventy) v Matsubarových frekvencích. Přímý fyzikální význam ale mají hodnoty Greenovy funkce na reálné ose. Pokud se chceme vyhnout numerickému analytickému prodlužování, jehož nevýhody jsou diskutovány v sekci 3.4.1, musíme analyticky prodloužit všechny použité rovnice před jejich numerickým řešením. Techniku tohoto prodlužování demonstrujeme na příkladu diagramatické „bubliny“

$$X(i\nu_m) = \frac{1}{\beta} \sum_n G(i\omega_n + i\nu_m)G(i\omega_n). \quad (\text{A.1})$$

Podrobnější popis je uveden například v [11].

Naším cílem je vyjádření hodnoty X na reálné ose pomocí hodnot G na reálné ose. Toho nemůžeme docílit jednoduchou záměnou $i\nu_n \rightarrow \nu_+$, protože tak bychom získali vyjádření X na reálné ose pomocí hodnot G v různých bodech komplexní roviny.

K řešení tohoto problému můžeme použít trik. Všimneme si, že Fermiho-Diracova distribuční funkce $f_{\text{FD}}(\omega) = [\exp(\beta\omega) + 1]^{-1}$ má v rovině komplexních ω póly přesně ve fermionových Matsubarových frekvencích $i\omega_n$. Hodnota reziduí f_{FD} je ve všech těchto bodech $-1/\beta$. Analogické pozorování platí pro Boseho-Einsteinovu distribuční funkci a bosonové Matsubarovy frekvence.

Greenova funkce je holomorfní s výjimkou řezu (případně pólů) na reálné ose, kde má skok v imaginární části ($G(\omega_+) = [G(\omega_-)]^*$), a pro velká ω se chová jako $G(\omega) \approx 1/\omega$.

S využitím těchto faktů a reziduové věty můžeme vyjádřit sumu (A.1) pomocí integrálu přes vhodně zvolenou křivku (nebo křivky) $\gamma(z)$ v komplexní rovině jako

$$X(i\nu_m) = \frac{-\beta}{2\pi i} \int_{\gamma} d\gamma(z) \frac{1}{\beta} G(\gamma(z) + i\nu_m)G(\gamma(z))f_{\text{FD}}(\gamma(z)). \quad (\text{A.2})$$

Zvolíme-li křivku γ tak, aby byla složena ze tří částí které vedou těsně nad a pod osami $\text{Im } z = 0$, ν_m a uzavírají se v nekonečnu, dostaneme vztah

$$X(i\nu_m) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 dx \text{Im } G(x_+) [G(x + i\nu_m) + G(x - i\nu_m)]. \quad (\text{A.3})$$

Na tomto místě již můžeme provést záměnu $i\nu_m \rightarrow \omega_+$ a dostáváme výsledek

$$X(\omega_+) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^0 dx \text{Im } G(x_+) [G(x + \omega_+) + G(x - \omega_+)]. \quad (\text{A.4})$$

Analogicky můžeme prodloužit i další vztahy obsahující sumy přes Matsubarovy frekvence.

Literatura

- [1] Anderson P.W., *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [2] Baym G., Kadanoff L.P., *Phys. Rev.* **124**, 287 (1961).
- [3] Formánek J. (2000): *Úvod do kvantové teorie I, II*, Academia, Praha.
- [4] Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M. *Rev. Mod. Phys.* **68** 13 (1996).
- [5] de Haas, de Boer, van der Berg, *Physica 1*, **1115** (1933).
- [6] Hamann D. R., *Phys. Rev.* **186**, 549 (1969).
- [7] Hewson A. C. (1993): *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge University Press, Cambridge.
- [8] Hubbard J. (1963) *Proc. R. Soc. A* **276**, 238.
- [9] Janiš V. *Phys. Rev. B60* (1999) 11345-60.
- [10] Kondo J., *Prog. Theor. Phys.* **32**, 37 (1964).
- [11] Mahan G. D. (2000): *Many Particle Physics*, Kluwer Academic / Plenum Publishers, New York.
- [12] Rickayzen G. (1991): *Green's Functions and Condensed Matter*, Academic Press, London.
- [13] Wilson K. G. *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).
- [14] Zagoskin A. M. (1998): *Quantum Theory of Many-Body Systems* Springer-Verlag, New York.