UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA

INSTITUTUL DE FIZICA APLICATĂ

Cu titlu de manuscris
C.Z.U. 517.958:538.9(043.3)

CEBOTARI IRINA

ANALIZA DIAGRAMATICA A SISTEMELOR ELECTRONILOR PUTERNIC CORELAŢI, CARE INTERACŢIONEAZA ÎNTRE EI ŞI CU FONONII OPTICI

131.01 – FIZICA MATEMATICĂ

Rezumatul tezei de doctor în ştiinţe fizice

CHIŞINĂU, 2024

Teza a fost elaborată în laboratorul de Fotonică Cuantică, Universitatea de Stat din Moldova, Institutul de Fizică Aplicată

Conducător ştiinţific:

Moscalenco Vsevolod dr. hab. în şt. fiz-mat, prof. univ., acad. al AŞM

Consultant ştiinific:

Dohotaru Leonid dr. în şt. fiz-mat, conf. univ., Universitatea Tehnica din Moldova

Referenţi oficiali:

Cliucanov Alexandr dr. hab. în şt. fiz-mat, prof. univ., Universitatea de Stat din Moldova

Tronciu Vasile dr. hab. în şt. fiz-mat, prof. univ., Universitatea Tehnica din Moldova

Componenţa consiliului ştiinţific specializat (CŞS):

Clochişner Sofia dr. hab. în şt. fiz-mat, prof. cerc., Universitatea de Stat din Moldova, Institutul de Fizică Aplicată, *Preşedinte al CŞS*

Ostrovschi Serghei dr. hab. în şt. fiz-mat, conf. cerc., Universitatea de Stat din Moldova, Institutul de Fizică Aplicată, *Secretar al CŞS*

Nica Denis dr. hab. în şt. fiz-mat, conf. cerc., Universitatea de Stat din Moldova

Rusu Spiridon dr. în şt. fiz-mat, conf. univ., Universitatea Tehnica din Moldova

Geru Ion dr. hab. în şt. fiz-mat, prof. univ., mem. cor. al AŞM

Susţinerea va avea loc la 20 decembrie 2024, ora 12:30, în şedinţa Consiliului Ştiinţific Specializat D 131.01-24-27 din cadrul Universităii de Stat din Moldova, Institutului de Fizică Aplicată, str. Academiei nr. 5, bir. 230, Chişinău, MD-2028, Republica Moldova.

Teza de doctor şi rezumatul pot fi consultate la biblioteca Universităţii de Stat din Moldova (str. A. Mateevici, 60, MD-2009, Chişinău, Republica Moldova) şi pe pagina web a ANACEC (www.anacec.md). Rezumatul a fost expediat la 20 noiembrie 2024.

Secretar ştiinţific al Consiliului ŞtiinţificSpecializat,
Ostrovschi Serghei,dr. hab., conf.cer.

Consultant ştiinific,
Dohotaru Leonid, dr., conf. univ.

Autor
Cebotari Irina

©Cebotari Irina, 2024

CUPRINS

REPERELE CONCEPTUALE ALE CERCETĂRII....4
CONŢINUTUL TEZEI....7
CONCLUZII ŞI RECOMANDĂRI GENERALE....25
BIBLIOGRAFIE....28
АННОТАЦИЯ....32
ADNOTARE....33
ABSTRACT....34

REPERELE CONCEPTUALE ALE CERCETĂRII

Actualitatea şi importana temei abordate. Teoriile corpului solid, cum ar fi teoria benzilor a conductivităii Wilson-Bloch sau teoria supraconductivităii Bardeen-Cooper-Schiffer (BCS) descriu proprietăile unui număr limitat de materiale. Există o categorie mare de materiale, reprezentată de metalele de tranziie (pământuri rare) şi compuşii lor chimici, precum şi fulleridele (AnC_{60}, unde A este un metal alcalin), care prezintă proprietăi fizice necaracteristice din punctul de vedere al acestor concepte sau în ele se realizează fenomene extraordinare. E vorba despre tranziia metal-izolator Mott-Hubbard, magnetoresistenţă gigantică cu semn negativ, supraconductivitate la temperatură înaltă (HTSC), coexistena magnetismului şi supraconductivităii şi altele. Aceste fenomene ridică multe întrebări de natură fundamentală. De exemplu, mecanismul de formare a perechilor de electroni supraconductori în supraconductorii de temperatură înaltă nu este pe deplin îneles.

Muli cercetători consideră că aceste fenomene sunt realizate datorită efectului corelaiilor puternice. Acest efect este asociat cu interaciunea Coulomb puternică a electronilor între ei, precum şi cuplarea puternică electron-fononică în cristale (inclusiv cele moleculare) şi influenta lor reciprocă [1]. Sistemele în care se manifestă efectul corelării puternice a electronilor între ei, electronilor cu fononii sau ambele împreună se numesc puternic corelate.

Teoria modernă a sistemelor puternic corelate se bazează pe formalismul Hamiltonianului, formulat în limbajul cuantizării secundare. Hamiltonianele de model, care descriu comportamentul electronilor în astfel de sisteme, includ parametrul interacţiunii coulombiene a electronilor. Modelele menţionate sunt următoarele: Modelul polar Shubin-Vonsovsky [2-4], modelul Bogolyubov-Tyablikov [5-6], modelul Hubbard [7-12] şi modelul Anderson al impurităţii [13] (precum şi generalizarea sa, cum este modelul periodic al lui Anderson) şi alţele.

Problema dezvoltării metodelor de analiză a acestor modele rămâne relevantă în continuare, deoarece metodele dezvoltate pentru studierea sistemelor cu interacţiune slabă îşi pierd valabilitatea pentru acestea. Pentru a analiza aceste sisteme au fost propuse diverse concepte, aproximări şi metode matematice, atât analitice, cât şi numerice, perturbative şi neperturbative, dintre care unele sunt prezentate în [14]. Fiecare dintre aceste metode are propriile sale avantaje şi dezavantaje. Una dintre metodele de analiză a modelelor sistemelor puternic corelate, care este dezvoltată şi utilizată în teză, a fost propusă de V. A. Moskalenco în 1990 [15, 16] si reprezintă tehnica diagramatică bazată pe teorema lui Wick generalizată pentru sisteme cu corelaţii puternice. Avantajul acestei metode, în comparaţie cu alte metode, este că aceasta permite să se calculeze funcţiile lui Green de temperatură, iar metoda funcţiei Green este cunoscută ca una dintre cele mai eficiente în statistica cuantică. Tehnica presupune obţinerea de aproximări in care se calculează funcţiile lui Green. De

asemenea, trebuie de remarcat că avantajul tehnicii diagramatice aplicate in teza, în comparaţie cu tehnicile diagramatice propuse de alţi autori, este că se bazează pe algebra simplă a operatorilor Fermi şi permite obţinerea ecuaţiilor de tip Dyson.

În [17], a fost demonstrată proprietatea de staţionaritate a potenţialului termodinamic (PTD) al modelului periodic Anderson. Iniţial, această teoremă a fost dovedită pentru sistemele cu interacţiuni slabe în stare normală, folosind tehnica diagramatică [18]. În această teză, vom demonstra şi proprietatea de staţionaritate a potenţialului termodinamic al modelului Hubbard, atât în faza normală, cât şi în cea supraconductoare. Acest lucru este necesar, inclusiv pentru studiul ulterior al proprietăţilor termodinamice ale sistemelor cu cuplare puternică, care pot fi descrise de modelul Hubbard.

În multe materiale cu corelaţii puternice, degenerarea orbitală este eliminată complet. Cu toate acestea, în unii oxizi ai metalelor de tranziţie 3d şi 4d (rutinaţi), supraconductorii pe bază de fier (vezi, de exemplu, [19]) sau în fulleride [20], există o degenerare orbitală a nivelurilor de electroni localizaţi. În aceste sisteme, apare aşa-numitul efect de corelaţie inter-orbitală, care este determinat de valoarea parametrului Hund I_H. În teză este studiat efectul datorat proceselor electronice, cum ar fi tranziţiile de fază Mott metal-izolator şi supraconductivitatea în sistemele multi-orbitale.

Rolul interacţiunii puternice electron-fononice în aceste fenomene nu este, de asemenea, suficient de clar, în special pentru HTSC. Datele experimentale obţinute din studierea efectului izotopului în supraconductori de temperatură înaltă (care arată dependenţa temperaturii tranziţiei supraconductoare de masa izotopului ionului corespunzător) sunt destul de contradictorii (vezi, de exemplu, [21-23]).

În ceea ce priveşte studiile teoretice ale rolului interacţiunii puternice electron-fononice în HTSC, este clar că un mecanism pur electron-fononic pentru formarea perechilor Cooper în supraconductorii la temperatură înaltă este puţin probabil, totuşi, unii cercetători consideră că interacţiunea electron-fononică favorizează formarea perechilor de electroni supraconductori, în timp ce alţii cred că aceasta poate participa direct la mecanismul de formare a perechilor supraconductoare (vezi, de exemplu, [24-26]). În ceea ce priveşte fenomenul de tranziţie de fază metal-izolator Mott, în funcţie de valoarea parametrilor corespunzători (cel puţin energia de repulsie coulombiană U şi constanta de interacţiune electron-fononică g), se poate realiza o imagine fizică diferită. Pentru a clarifica rolul interacţiunii puternice a electronilor între ei şi cu fononii optici (care apare, de exemplu, în manganaţi [27] şi fulleride), în teză vom lua în consideraţie modelul Anderson al impurităţii, completat de Hamiltonianul Holstein, care reprezintă sistemul de fononi şi interacţiunea acestuia cu electronii localizaţi a atomului de impuritate, atât în faza normală, cât şi în cea supraconductoare.

Cercetarea fundamentală a acestor sisteme este importantă în viitor şi pentru problemele aplicative. De exemplu, înţelegerea mecanismului de tranziţie metal-izolator Mott-Hubbard şi controlul acestuia poate duce la crearea unor elemente de dispozitiv cu funcţionalităţi noi, iar studierea proprietăţilor supraconductorilor de temperatură înaltă şi înţelegerea mecanismelor acestui fenomen este promiţătoare din punctul de vedere al posibilităţii utilizării lor ca linii electrice. Problema interacţiunii puternice electron-fononice în moleculele uriaşe pe bază organică este de mare interes pentru electronica moleculară etc.

Astfel, actualitatea şi importanţa cercetării este dictată de necesitatea unui studiu fundamental al materialelor cu corelaţii puternice şi al fenomenelor realizate în acestea, inclusiv pentru rezolvarea problemelor aplicative în viitor, şi anume, rolul interacţiunii electron-fononice în sistemele cu interacţiune Coulomb puternică a electronilor între ei, precum şi cu cuplarea puternică electron-fononică, efectul de corelaţie inter-orbitală în sistemele multibandă în procese electronice, studiul proprietăţilor termodinamice ale sistemelor puternic corelate, precum şi necesitatea dezvoltării unor noi metode de cercetare.

Scopuri şi obiectivele cercetării:

1) De a demonstra proprietatea de staţionaritate a potenţialului termodinamic al modelului Hubbard, atât în stare normală, cât şi în stare supraconductoare;

2) De a generaliza tehnica diagramatică pentru sistemele orbital nedegenerate [15,16, 28-31] cu scopul de a analiza modelele sistemelor electronice puternic corelate cu degenerarea orbitală a nivelurilor electronice. De a lua în considerare atât interacţiunea Coulomb inter-orbitală, cât şi cea intra-orbitală în procesele electronice ale sistemelor puternic corelate. De a investiga rolul parametrului Hund în procesul de tranziţie de fază Mott în cadrul modelului Hubbard dublu degenerat şi a modelului Anderson al impurităţii dublu degenerat. De a determina condiţia de apariţie a supraconductivităţii singlete în modelul Anderson dublu degenerat;

3) De a investiga rolul influenţei interacţiunii puternice a electronilor între ei, precum şi cu fononii, în supraconductibilitatea la temperatură înaltă în cadrul modelului Anderson-Holstein cu ajutorul tehnicii diagramatice.

Ipoteza de cercetare:

1) Folosind tehnica diagramatică de cuplare puternică, este posibilă stabilirea proprietăţii de staţionaritate a potenţialului termodinamic al modelului Hubbard în acelaşi mod în care s-a făcut pentru modelul periodic Anderson [17] şi pentru sistemele cu interacţiune slabă de Luttinger şi Ward [18].

2) Efectul de corelaţie inter-orbitală poate juca un rol semnificativ în procesele electronice ale sistemelor puternic corelate multi-orbitale, determinând starea dielectrică în modelul Hubbard şi amplificând starea metalică la temperaturi scăzute în modelul Anderson al impurităţii. Se presupune

că supraconductivitatea poate fi realizată în modelul Anderson al impurităţii dublu degenerat. Folosind tehnica diagramatică, putem determina şi analiza ecuaţiile pentru parametrii de ordine ale stării supraconductoare şi putem obţine condiţiile pentru determinarea temperaturii critice a tranziţiei supraconductoare. 3) Perechile Cooper formate din perechi de d(f)-electroni într-o stare cu nori de fononi grei pot avea o contribuţie semnificativă la realizarea supraconductivităţii în modelul Anderson-Holstein.

Sinteza metodologiei de cercetare:

Au fost utilizate metode de analiză şi sinteză a referinţelor în pregătirea ipotezei, introducerii şi capitolului, care este dedicat analizei situaţiei în domeniul tezei. Calculele efectuate în teză se bazează pe aparatul funcţiilor Green cuantic-statistice, teoria perturbaţiilor şi tehnica diagramatică de cuplare puternică propusă de V.A. Moscalenco [16].

CONŢINUTUL TEZEI

În **Capitolul 1** este examinată situaţia actuală în domeniul studierii tranziţiilor de fază metal-izolator Mott şi HTSC în conceptul fizic a sistemelor puternic corelate. Sunt luate în considerare trăsăturile materialelor care duc la efectul unor corelaţii puternice în ele, precum şi fenomenele studiate în lucrare: tranziţia metal-izolator Mott şi HTSC. Sunt prezentate rezultatele unui studiu al rolului efectului de corelaţie inter-orbitală în sistemele cu degenerare orbitală a nivelurilor electronice, precum şi interacţiunea electron-fononică în sisteme cu interacţiuni puternice electron-fononice şi Coulomb. În acest scop, a fost realizată o analiză şi sinteză a unor lucrări în care au fost studiate modelele Hubbard-Holstein, Anderson-Holstein, precum şi modelele Hubbard şi Anderson al impurităţii cu degenerare multiplicată. Se urmăreşte dezvoltarea metodei tehnicii diagramatice a cuplării puternice [16] şi se iau în calcul câteva rezultate care au fost obţinute cu ajutorul acestei abordări.

În Capitolul 2 este discutată metoda diagramatică de studiere a sistemelor puternic corelate. Prima parte este dedicată prezentării aparatului de funcţii Green cuantice-statistice şi tehnicii diagramatice pentru sisteme cu interacţiune slabă, iar a doua parte este dedicată elementelor de bază ale tehnicii diagramatice de cuplare puternică dezvoltată în teză.

În Capitolul 3 este dezvoltată abordarea diagramatică a cuplării puternice, propusă de V.A. Moscalenco. Cu ajutorul acesteia a fost demonstrată proprietatea de staţionaritate a potenţialului termodinamic al modelului Hubbard, atât în faza normală, cât şi în cea supraconductoare. În primul rând, în Hamiltonianul modelului Hubbard a fost introdusă constanta de expansiune λ (la sfârşitul calculelor se pune egală cu 1):

$$
\begin{aligned}
&H = H^0 + \lambda H', \\
&H^0 = \sum_i H_i^0, \\
&H_i^0 = -\mu \sum_\sigma C_{i\sigma}^+ C_{i\sigma} + U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \\
&H' = \sum_{i,j} \sum_\sigma t(j-i) C_{j\sigma}^\dagger C_{i\sigma}, \quad n_{i\sigma} = C_{i\sigma}^\dagger C_{i\sigma}
\end{aligned}
\tag{1}
$$

unde $C_{i\sigma}^\dagger (C_{i\sigma})$ este operatorul de creare (anihilare) al electronilor nodului i cu proiecţia de spin $z = 1/2\sigma$, $\sigma = \pm 1, \mu$ este potenţialul chimic al unui sistem de electroni, U este energia de repulsie Coulombiană a electronilor unui nod cu proiecţii opuse de spin, $n_{i\sigma}$ este operatorul numărului de electroni cu spin σ pe nodul i al reţelei cristaline, $t(i-j)$ este elementul matricial al energiei saltului de electroni de la nodul i la nodul j, care este legat cu dispersia energiei cinetice a electronului $\epsilon(\vec{k})$, unde $\vec{k}$ este impulsul electronului. Să reţinem, că toate funcţiile şi mărimile fizice, care conţin constanta de expansiune λ, sunt marcate cu indicele „λ".

La construirea teoriei perturbaţiilor, Hamiltonianul electronilor unui atom H_0, care include parametrul de repulsie Coulombiană U, a fost luat ca Hamiltonian cu aproximaţie zero, iar integrala de salt $t(i-j)$ ca perturbaţie.

Bazându-ne pe teorema lui Wick generalizată, a fost realizată o dezvoltare diagramatică a funcţiei Green uni-particule pentru Modelul Hubbard într-o serie de teorie a perturbaţiilor în termeni de $t(i-j)$ în prezenţa parametrului de expansiune λ. Aceasta dezvoltare are forma (Fig.1)

Pe lângă funcţiile Green normale, starea supraconductoare este descrisă şi de funcţiile Green anomale. După utilizarea teoremei generalizate a lui Wick, apar şi funcţii Green ireductibile multe-particule anomale, care poate conţine orice număr de operatori de creare şi anihilare. În acest sens, pentru a lua în consideraţie starea supraconductoare, a fost introdus conceptul de număr de sarcină cuantică α, care ne permite să luăm în calcul toate aceste posibilităţi:

$$
C^\alpha = \begin{Bmatrix} C, & \alpha = 1 \\ C^+, & \alpha = -1 \end{Bmatrix}
\tag{2}
$$

Funcţia Green a lui Matsubara $G^{\alpha\alpha}\left(x|x'\right)$ în reprezentarea interacţiunii în termenii de număr de sarcină cuantică α este definită ca

$$
G^{\alpha\alpha'}(x \mid x') = -\left\langle T C_{\mathbf{x}\sigma}^{\alpha}(\tau) C_{\mathbf{x}'\sigma'}^{-\alpha'}(\tau') U_\lambda(\beta) \right\rangle_0^c
\tag{3}
$$

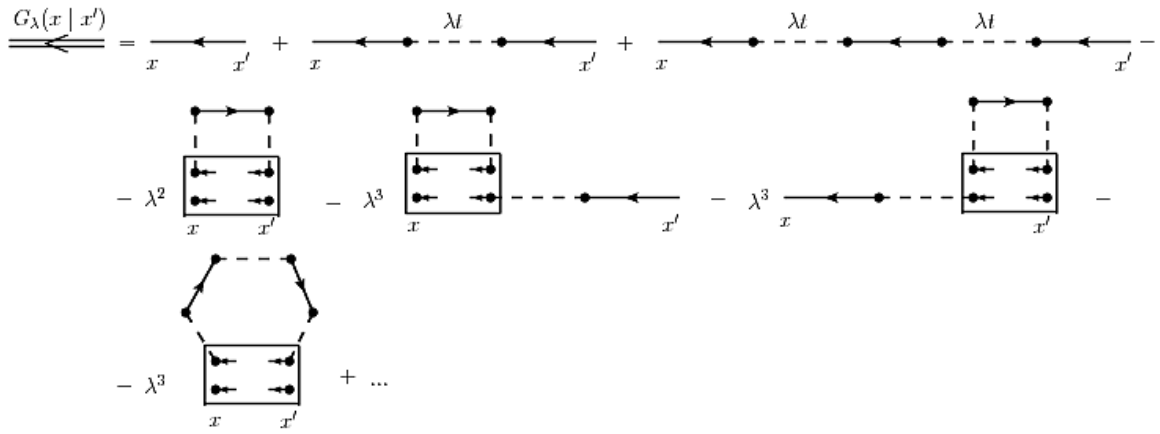


Fig. 1. Primele trei ordine ale teoriei perturbaţiilor pentru funcţia Green uni-particulă $G_\lambda(x \mid x')$. Linia dublă continuă, cu o săgeată, corespunde funcţiei Green cu o singură particulă renormalizată $G_\lambda(x \mid x')$. Liniile subţiri continue cu săgeţi descriu funcţiile Green cu o singură particulă de ordin zero, dreptunghiurile reprezintă funcţiile Green ireductibile cu două particule $G_2^{0(irr)}$. Liniile punctate subţiri corespund elementelor matricei de tunelare, iar punctele sunt vârfurile diagramelor, direcţia săgeţilor indică operatorul de creare sau anihilare.

unde x corespunde cu $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau})$, x' corespunde $(\mathbf{x}', \boldsymbol{\sigma}', \boldsymbol{\tau}')$, $\mathbf{x}$, $\mathbf{x}'$ sunt indicii nodului, $_0$ înseamnă media termodinamică asupra funcţiei statistice de ordinul întâi, indicele „c” în $\langle ... \rangle_0^c$ înseamnă diagramele conexe. $U_\lambda(\beta)$ este operatorul de evoluţie unitar:

$$U_\lambda(\beta) = T_\tau \exp(-\lambda \int_0^\beta H'(\tau) d\tau). \tag{4}$$

Aici, τ şi τ' corespunde timpului imaginar, $0 \le \tau \le \beta$, $\beta = 1/kT$, k este constanta Boltzmann, T- este temperatura, T_τ este operatorul de ordonare în timp.

Corespondenţa dintre definiţia obişnuită pentru funcţiile Green normale $G^\lambda_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\tau} \mid \mathbf{x}', \boldsymbol{\tau}')$ şi anomale $F^\lambda_{\sigma,\bar{\sigma}'}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\tau} \mid \mathbf{x}', \boldsymbol{\tau}')$, $\bar{F}^\lambda_{\bar{\sigma},\sigma'}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\tau} \mid \mathbf{x}', \boldsymbol{\tau}')$ şi în ceea ce priveşte numărul de sarcină cuantică $G^{\alpha\alpha'}(x \mid x')$ este următoarea:

$$\begin{aligned}
G_\lambda^{1,1}(x \mid x') &= -\left\langle T_\tau C_{\mathbf{x}\boldsymbol{\sigma}}(\tau) \bar{C}_{\mathbf{x}'\boldsymbol{\sigma}'}(\tau') U_\lambda(\beta) \right\rangle_0^c = G^\lambda_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\tau} \mid \mathbf{x}', \boldsymbol{\tau}'), \\
G_\lambda^{1,-1}(x \mid x') &= -\left\langle T_\tau C_{\mathbf{x}\boldsymbol{\sigma}}(\tau) C_{\mathbf{x}'\boldsymbol{\sigma}'}(\tau') U_\lambda(\beta) \right\rangle_0^c = F^\lambda_{\sigma,\bar{\sigma}'}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\tau} \mid \mathbf{x}', \boldsymbol{\tau}'), \\
G_\lambda^{-1,1}(x \mid x') &= -\left\langle T_\tau \bar{C}_{\mathbf{x}\boldsymbol{\sigma}}(\tau) \bar{C}_{\mathbf{x}'\boldsymbol{\sigma}'}(\tau') U_\lambda(\beta) \right\rangle_0^c = \bar{F}^\lambda_{\bar{\sigma},\sigma'}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\tau} \mid \mathbf{x}', \boldsymbol{\tau}'), \\
G_\lambda^{-1,-1}(x \mid x') &= -G_\lambda^{1,1}(x' \mid x).
\end{aligned} \tag{5}$$

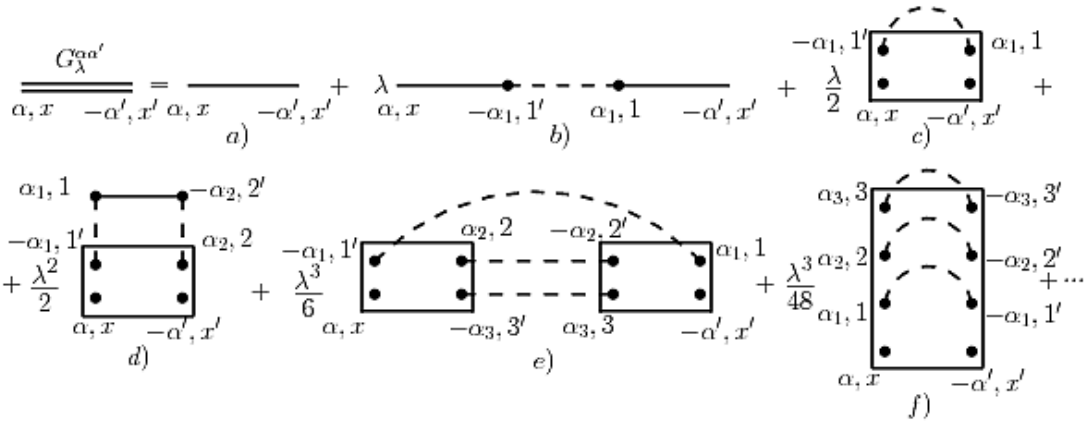


Fig. 2. Diagrame de teorie a perturbaţiilor de ordinul trei pentru $G_\lambda^{\alpha\alpha'}(x \mid x')$). Linia dublă continuă corespunde funcţiei Green renormalizate $G_\lambda^{\alpha\alpha'}(x \mid x')$). Liniile subţiri continue descriu funcţia Green uni-particulă de ordin zero, dreptunghiurile descriu funcţiile Green ireductibile două- şi patru- particule. Liniile punctate subţiri corespund elementelor matricei de tunelare Punctele sunt vârfurile diagramelor.

A fost construită o dezvoltare diagramatică a funcţiilor lui Green $G_\lambda^{\alpha\alpha'}$ şi pentru starea supraconductoare (vezi Fig. 2). Menţionăm că în starea supraconductoare, spre deosebire de starea normală, liniile funcţiilor Green nu conţin săgeţi care să determine procesele de creare şi anihilare a electronilor, datorită faptului că indicii pot lua două valori $\alpha = \pm 1$, iar fiecare vârf al diagramei conţine posibilităţi diferite. În ambele faze a fost introdus conceptul funcţiei Green de tunelare $T_\lambda(k)$, care se obţine ca urmare a procesului de renormalizare al elementului matricial al energiei saltului $t(i-j)$.

A fost găsită o ecuaţie de tip Dyson pentru această funcţie. În faza normală funcţia Green de electron uni-particulă $G_\lambda(k)$ şi $T_\lambda(k)$ sunt următoarele:

$$G_\lambda(k) = \frac{\Lambda_\lambda(k)}{1-\lambda\Sigma(\vec{k})\Lambda_\lambda(k)}$$

$$\begin{aligned} T_\lambda(k) &= \lambda T_\lambda(k), \\ \tilde{T}_\lambda(k) &= \frac{\epsilon(\vec{k})}{1-\lambda\epsilon(\vec{k})\Lambda_\lambda(k)} \end{aligned} \tag{6}$$

În faza supraconductoare:

$$\hat{T} = (1-\hat{\Lambda})^{-1} = (1-\hat{T}^0\hat{\Lambda})^{-1}\hat{T}^0 \tag{7}$$

unde

$$\hat{\Lambda}=\begin{pmatrix}\Lambda_\sigma(k) & Y_{\sigma\bar{\sigma}}(k)\\ \bar{Y}_{\bar{\sigma}\sigma}(k) & -\Lambda_{\bar{\sigma}}(-k)\end{pmatrix},\hat{\epsilon}=\begin{pmatrix}\epsilon(k) & 0\\ 0 & -\epsilon(-k)\end{pmatrix}. \tag{8}$$

Aici k este impulsul electronilor, k prezent în $\Sigma(k,i\omega_n)$ corespunde frecvenţelor Matsubara impare. Rolul operatorului de masă Σ_λ este îndeplinit de funcţia de corelaţie Λ, care este suma diagramelor puternic cuplate, ce conţin funcţii Green ireductibile, înmulţită cu constanta de expansiune

$$\Sigma_\lambda(k)=\lambda\Lambda_\lambda(k).$$

A fost determinat că în starea normală şi când $\lambda=1$ operatorul de masă Σ al funcţiei Green de tunelare este egal cu funcţia de corelare Λ.

În starea supraconductoare, $\hat{\Lambda}$ este o matrice în care, pe lângă funcţia de corelare normală Λ_σ (k), există şi funcţii de corelare anomale $Y_{\bar{\sigma}\sigma}(k),\bar{Y}_{\sigma\bar{\sigma}}(k),-\Lambda_\sigma(-k)$, corespunzătoare funcţiilor Green anomale.

Pe baza relaţiei cunoscute dintre potenţialul termodinamic F şi partea diagramelor puternic cuplate ale dezvoltării operatorului de evoluţie de medie termodinamică

$$\begin{aligned}F(\beta)&=F_0-\frac{1}{\beta}\langle U_\lambda(\beta)\rangle_0^c,\\ F_0&=-\frac{1}{\beta}\ln Z_0-\frac{2}{\beta}\sum_k\ln[1+\exp(-\beta\epsilon(\mathrm{k}))]\end{aligned} \tag{9}$$

a fost stabilită o relaţie exactă între potenţialul termodinamic al sistemului şi funcţia Green uni-particulă (comparând seriile de diagrame pentru funcţia Green uni-particulă şi respectiv operatorul de evoluţie $U(\beta)$). Aici Z_0 este funcţia de partiie peste Hamiltonianul de aproximaie zero.

În faza normală avem:

$$\lambda\frac{dF(\lambda)}{d\lambda}=\sum_{\vec{k}\sigma}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}T_\lambda(k)\Sigma_\lambda(k)\exp(i\omega_n 0^+)=\frac{1}{\beta}\mathrm{Tr}(T_\lambda\Sigma_\lambda). \tag{10}$$

În faza supraconductoare a fost obţinută următoarea relaţie:

$$\lambda\frac{dF(\lambda)}{d\lambda}=\frac{1}{2\beta}Tr(\hat{T}_\lambda\hat{\Sigma}_\lambda). \tag{11}$$

Aici ω_n este frecvenţa lui Matsubara, 0^+ este o mărime infinitezimală pozitivă.

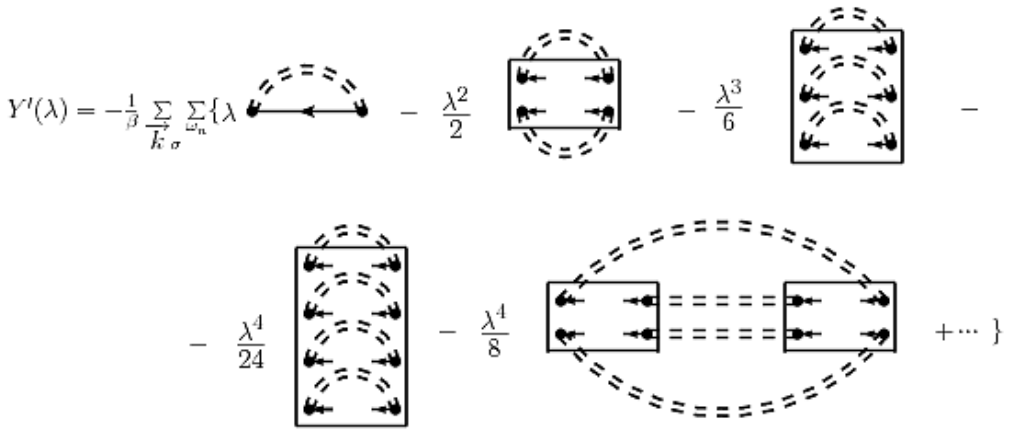
Această relaţie conţine o integrare suplimentară peste constanta de expansiune auxiliară λ. Ocolim această necesitate de integrare prin construirea unui funcţional special $Y(\lambda)$ bazat pe

diagramele scheletice pentru funcţia Green şi operatorul de evoluţie (Fig. 3), care conţine funcţiile Green ireductibile şi funcţiile Green complete de tunelare.

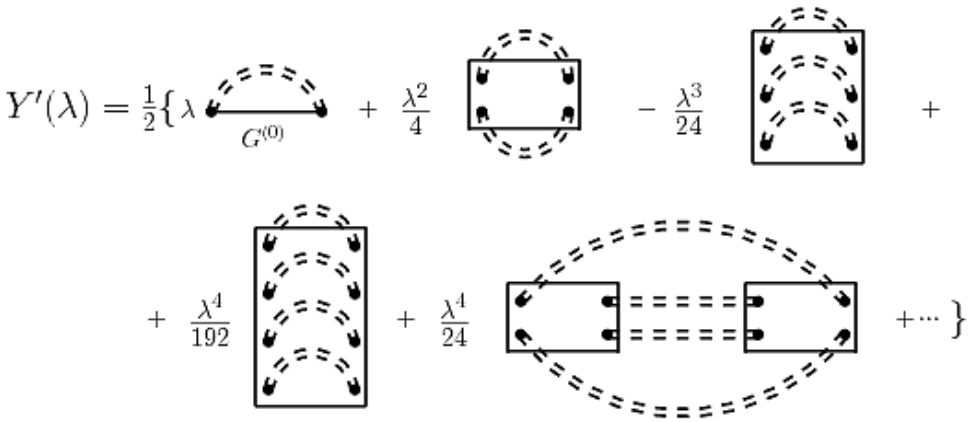
$$Y(\lambda) = Y_1(\lambda) + Y'(\lambda), \tag{12}$$

unde

$$Y_1(\lambda) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\vec{k},\sigma,\omega_n} \left[\ln(\epsilon(\vec{k}))\lambda\Lambda_\lambda(k) - 1) + T_\lambda(k)\lambda\Lambda_\lambda(k) \right] \exp(i\omega_n 0^+),$$



a)



b)

Fig. 3. Cele mai simple diagrame scheletice pentru $Y'(\lambda)$. Dreptunghiurile reprezintă funcţiile Green ireductibile. Duble linii punctate reprezintă a) funcţia Green renormalizată tunelul T în stare normală şi b) valoarea $T^{\alpha\alpha'}(x, x')$ în stare supraconductivă.

A fost demonstrată existenţa proprietăţii de staţionaritate a acestui funcţional (vorbim de staţionaritate în raport cu variaţia funcţiei de corelare).

$$\frac{\delta Y(\lambda)}{\delta \Sigma_{\lambda}(k)} = 0, \tag{13}$$

De asemenea, a fost arătat că pentru $\lambda = 1$, acest funcţional coincide cu potenţialul termodinamic

$$F(1) = Y(1) + F_0$$

În Capitolul 4, a fost studiată influenţa parametrului Hund asupra proceselor electronice în sisteme puternic corelate multi-orbitale. Pentru a face acest lucru, teoria diagramatică dezvoltată pentru modelul Hubbard şi modelul Anderson al impurităţii orbital nedegenerat a fost generalizată pentru sistemele cu degenerare orbitală dublă.

Hamiltonianul modelului Hubbard dublu degenerat are forma:

$$H = H_L + H', \tag{14}$$

$$\begin{aligned} H' &= -\sum_{i,j}\sum_{l,l'}\sum_{\sigma} t_{l,l'}(j-i) C^{\dagger}_{jl'\sigma} C_{il\sigma}, \\ H_L &= \sum_i H_{Li}, \\ H_{Li} &= U\sum_l n_{il\uparrow} n_{il\downarrow} + \frac{J}{2}\sum_{l\neq l'}\sum_{\sigma} C^{\dagger}_{il\sigma} C^{\dagger}_{il\bar{\sigma}} C_{il'\bar{\sigma}} C_{il'\sigma} - \\ &-\mu\sum_{i,l,\sigma} C^{\dagger}_{il\sigma} C_{il\sigma} + \sum_{l\neq l'}\sum_{\sigma,\sigma'}\left\{\frac{U'}{2} n_{il\sigma} n_{il'\sigma'} + \frac{J}{2} C^{\dagger}_{il\sigma} C^{\dagger}_{il'\sigma'} C_{il\sigma'} C_{il'\sigma}\right\}, \end{aligned} \tag{15}$$

Aici $C^{\dagger}_{j'\sigma}, C_{j\sigma}$ sunt operatorii de creare şi anihilare a unui electron pe nodul reţelei i cu număr cuantic orbital (l=1 sau 2) şi spin $\sigma = \uparrow$ sau $\downarrow$, $n_{il\sigma} = C^{\dagger}_{il\sigma} C_{il\sigma}$ şi $n_{il} = \sum_{\sigma} n_{il\sigma}$. Denumirile U, U' şi J înseamnă magnitudinea interacţiunii Coulomb intra- şi inter-orbitale a electronilor şi constanta Hund $(J > 0)$, respectiv. În cele ce urmează, este folosită relaţia $U = U' + 2J$ care este valabilă în unele modele orbital degenerate [13]. Cantităţile $t_{ll'}(j-i)$ sunt elemente de matrice ale tranziţiilor de tunelare de electroni între nodurile reţelei. Se iau în calcul tranziţiile de electroni intra-orbitale $(l = l')$ şi inter-orbitale $(l \neq l')$.

Funcţia Green completă a lui Matsubara în reprezentarea interacţiunii are forma:

$$G(\vec{x} l\sigma\tau \mid \vec{x}' l'\sigma'\tau') = -\left\langle T_{\tau} C_{\vec{x}l\sigma}(\tau) \bar{C}_{\vec{x}'l'\sigma'}(\tau') U(\beta)\right\rangle_0^c \tag{16}$$

Aici τ şi τ' corespund timpului imaginar cu $0 \le \tau \le \beta$, β este temperatura inversă, T_τ este operatorul ordonării cronologice.

Operatorul de evoluţie este

$$U(\beta) = T_\tau \exp(-\int_0^\beta H_{int}(\tau) d\tau \tag{17}$$

În primul rând, au fost determinate funcţiile proprii şi valorile proprii ale părţii Hamiltonianului corespunzătoare energiei de interacţiune a electronilor localizaţi şi a fost stabilită dependenţa lor de interacţiunile Coulomb intra- şi inter-orbitale şi de constanta de cuplare Hund. Teoria perturbaţiilor a fost dezvoltată în limita atomică. Apoi, a fost formulată o ecuaţie de tip Dyson pentru modelul Hubbard şi a fost definită funcţia de corelare *Λ,* care ţine cont de existenţa funcţiilor Green multi-particule ireductibile.

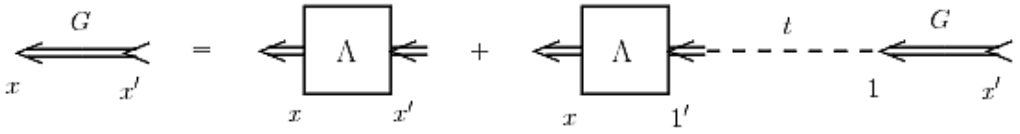


Fig. 4. Reprezentarea diagramatică a unei ecuaţii de tip Dyson. Liniile duble cu săgeţi corespund funcţiei Green renormalizate uni-particulă, casetele descriu funcţiile de corelare, iar liniile întrerupte indică elementele matricei de tunelare $\Lambda(x, x')$.

În formă analitică, această ecuaţie arată astfel:

$$\begin{aligned} &G(\vec{x} l \sigma \tau \mid \vec{x}' l' \sigma' \tau') = \Lambda(\vec{x} l \sigma \tau \mid \vec{x}' l' \sigma' \tau') + \\ &+ \sum_{l_1' l_1} \sum_{\sigma_1} \int \Lambda(\vec{x} l \sigma \tau \mid \vec{1}' l_1' \sigma_1 \tau_1) \times t_{l_1' l_1}(\vec{1}' - \vec{1}) G(\vec{1} l_1 \sigma_1 \tau_1 \mid \vec{x}' l' \sigma' \tau') d\tau_1 \end{aligned} \tag{18}$$

Sub formă de matrice:

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

unde

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

Aici, elementele diagonale corespund proceselor intra-orbitale, iar nediagonale celor inter-orbitale. Comparând cu rezultatele cunoscute pentru un sistem orbital nedegenerat, a fost arătat că, din punct de vedere diagramatic, o teorie orbital degenerată se dovedeşte a fi similară cu o teorie orbital nedegenerată dacă în aceasta din urmă înlocuim funcţiile numerice Green cu matrice cu două

linii şi coloane în care elemente diagonale corespund tranziţiilor inter-orbitale, iar elementele nediagonale corespund tranziţiilor intra-orbitale.

În cea mai simplă aproximare Hubbard-I, care ia în considerare numai diagrame de tip lanţ (care nu conţin funcţii Green ireductibile şi care corespund teoremei lui Wick obişnuite), a fost calculată densitatea stărilor electronice:

$$\rho^{11}(E)=\frac{1}{2}\left[\rho_0(\varepsilon_A)+\rho_0(\varepsilon_B)\right] \tag{19}$$

Ea este determinată de densitatea zero a stărilor electronice $\rho_0(\epsilon)$ adică densitatea stărilor electronice în banda iniţială, fără a lua în considerare interacţiunea Coulomb.

Argumentele funcției ε_A și ε_B din (19) au fost calculate și determinate de parametrii modelului. Argumentul funcției $\rho_0(E)$ din (19) este egal cu -∞, care se află în afara intervalului $\left(-\frac{W}{2},\frac{W}{2}\right)$ în care funcția este diferită de zero. Aici W este lățimea benzii de energie. În consecință, în această aproximare, cazul special al umplerii la jumătate a benzilor de energie electronică ale sistemului corespunde doar stării dielectrice.

Argumentele ε_A și ε_B funcției $\rho^{11}(E)$ (19) au fost calculate și determinate de parametrii modelului. Argumentul funcției $\rho^{11}(E)$ din (19) este egal cu , care se află în afara intervalului în care funcția este diferită de zero. Aici este lățimea benzii de energie. În consecință, în această aproximare, cazul special al umplerii la jumătate a benzilor de energie electronică ale sistemului corespunde doar stării dielectrice.Este arătată că în această aproximare, cazul special de umplere pe jumătate a benzilor de energie electronică ale sistemului corespunde doar stării dielectrice.

De asemenea, a fost construită teoria perturbaţiilor bazată pe tehnica diagramatică de cuplare puternică pentru a studia modelul Anderson degenerat dublu, care include următoarele relaii:

$$H \ = H^0 + H_{int}, \tag{20}$$

$$H^0 = H_c^0 + H_d^L, \tag{21}$$

$$H_c^0 = \sum_{\vec{k}l\sigma} \varepsilon_l(\vec{k}) C^+_{\vec{k}l\sigma} C_{\vec{k}l\sigma}, \tag{22}$$

$$\begin{aligned} H_d^L = {} & \sum_{l,\sigma} \varepsilon^d d^+_{l\sigma} d_{l\sigma} + U \sum_l n_{l\uparrow} n_{l\downarrow} + U' n_1 n_2 + I_H \sum_{\sigma\sigma'} d^+_{1\sigma} d^+_{2\sigma} d_{1\sigma'} d_{2\sigma'} + \\ & + I'_H (d^+_{1\uparrow} d^+_{1\downarrow} d_{2\downarrow} d_{2\uparrow} + h.\text{c.}), \end{aligned} \tag{23}$$

$$H_{int} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}l\sigma} (V_{\vec{k}l} d^+_{l\sigma} C_{\vec{k}l\sigma} + V^*_{\vec{k}l} C^+_{\vec{k}l\sigma} d_{l\sigma}), \tag{24}$$

Aici H_d^L este Hamiltonianul local (unui nod), $C_{\vec{k}l\sigma}$ este operatorul de anihilare al unui electron de conducţie cu impuls $\vec{k}$, număr orbital $l=1,2$ şi spin $\sigma=\pm1(\uparrow,\downarrow)$ şi $d_{l\sigma}$ este operatorul de anihilare al unui d-electron localizat. Funcia de undă a unui electron de conducie în starea 1 orbitală se suprapune numai cu funcia de undă a unui electron localizat situat în aceeaşi stare orbitală, $V_{\vec{k}l}$ este element matricial de hibridizare $n_{l\sigma}=d_{l\sigma}^{+}d_{l\sigma}$, $n_l=\sum_{\sigma} n_{l\sigma}$ $V_{\vec{k}l}$, U este repulsia coulombiană între d-electroni din aceeaşi stare orbitală şi *U'* - între electroni din diferite stări orbitale, I_H, $I_{H'}$ sunt constante Hund, $\varepsilon_l(\vec{k})$ este dispersia benzii şi ε^d este energia electronului de impuritate, calculată de la nivelul potenţialului chimic, μ, N este numărul de noduri a reţelei cristaline.

Ca şi în cazul precedent, se presupune că este verificată relaţia:

$$U'=U-2I_H, I'_H=I_H.$$

Funcţiile Green ale electronilor de conducţie şi ale electronilor localizaţi sunt definite, respectiv

$$\begin{aligned} G(\vec{k}l\sigma\tau\,|\,\vec{k}'l'\sigma'\tau') &= -\langle T_\tau C_{\vec{k}l\sigma}(\tau)\bar{C}_{\vec{k}'l'\sigma'}(\tau')U(\beta)\rangle_0^c, \\ g(l\sigma\tau\,|\,l'\sigma'\tau') &= -\langle T_\tau d_{l\sigma}(\tau)\bar{d}_{l'\sigma'}(\tau')U(\beta)\rangle_0^c. \end{aligned} \tag{25}$$

Funcţiile Green anomale ale electronilor de conducţie $F(\vec{k}l\sigma\tau\,|\,\vec{k}'l'\sigma'\tau')$, $\bar{F}(\vec{k}l\sigma\tau\,|\,\vec{k}'l'\sigma'\tau')$ şi ale electronilor localizaţi $f(l\sigma\tau\,|\,l'\sigma'\tau')$, $\bar{f}(l\sigma\tau\,|\,l'\sigma'\tau')$ sunt definite după cum urmează:

$$\begin{aligned} F(\vec{k}l\sigma\tau\,|\,\vec{k}'l'\sigma'\tau') &= -\left\langle T_\tau C_{\vec{k}l\sigma}(\tau)C_{\vec{k}'l'\sigma'}(\tau')U(\beta)\right\rangle_0^c \\ \bar{F}(\vec{k}l\sigma\tau\,|\,\vec{k}'l'\sigma'\tau') &= -\left\langle T_\tau \bar{C}_{\vec{k}l\sigma}(\tau)\bar{C}_{\vec{k}'l'\sigma'}(\tau')U(\beta)\right\rangle_0^c \\ f(l\sigma\tau\,|\,l'\sigma'\tau') &= -\left\langle T_\tau d_{l\sigma}(\tau)d_{l'\sigma'}(\tau')U(\beta)\right\rangle_0^c \\ \bar{f}(l\sigma\tau\,|\,l'\sigma'\tau') &= -\left\langle T_\tau \bar{d}_{l\sigma}(\tau)\bar{d}_{l'\sigma'}(\tau')U(\beta)\right\rangle_0^c \end{aligned} \tag{26}$$

Media statistică din (25) şi (26) este efectuată folosind matricea de densitate de ordin zero a electronilor de impurităţi şi a electronilor de conducţie. Indicele „c" indică diagramele cuplate.

Pentru acest model, au fost determinate şi funcţiile proprii şi valorile proprii E_n (n ia valori de la 1 la 16) ale părţii Hamiltonianului corespunzătoare energiei d-electronilor localizaţi, precum a fost stabilită şi dependenţa lor de interacţiunile Coulomb intra- şi inter-orbitale U, U' şi de constanta Hund I_H. A fost dezvoltată teoria perturbaţiilor în limita atomică şi au fost determinate funcţiile Green a lui Matsubara în stările normală şi supraconductoare. A fost obţinută, prin aproximarea locală, densitatea spectrală a stărilor electronice

$$A^{(0)}(E)=\frac{2\pi}{Z_0}\{(e^{-\beta E_1}+e^{-\beta E_2})\delta(E+E_1-E_2)+(e^{-\beta E_2}+e^{-\beta E_6})\delta(E+E_2-E_6)+$$
$$+\frac{1}{2}(e^{-\beta E_2}+e^{-\beta E_7})\delta(E+E_2-E_7)+\frac{3}{2}(e^{-\beta E_2}+e^{-\beta E_9})\delta(E+E_2-E_9)+$$
$$+(e^{-\beta E_6}+e^{-\beta E_{12}})\delta(E+E_6-E_{12})+\frac{1}{2}(e^{-\beta E_7}+e^{-\beta E_{12}})\delta(E+E_7-E_{12})+ \quad (27)$$
$$+\frac{3}{2}(e^{-\beta E_9}+e^{-\beta E_{12}})\delta(E+E_9-E_{12})+(e^{-\beta E_{12}}+e^{-\beta E_{16}})\delta(E+E_{12}-E_{16})\},$$

Pentru funcţia Green a electronilor de conducţie şi a electronilor atomilor de impurităţi (Fig. 5.), au fost obţinută respectiv ecuaţia Dyson şi ecuaţia de tip Dyson.

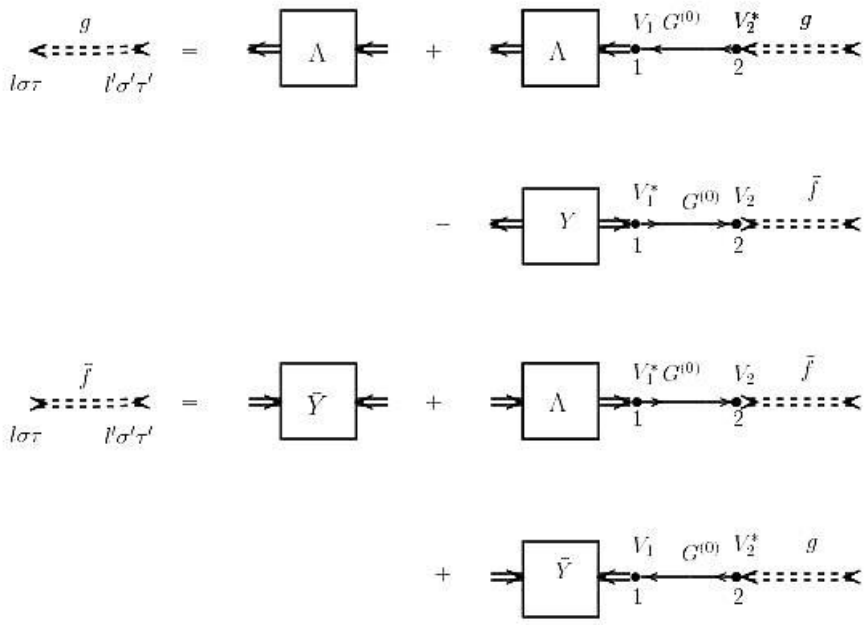


Fig. 5. Ecuaţii de tip Dyson pentru electronii de impurităţi. Λ, Y, $\bar{Y}$ sunt funcţii de corelare.

Funcţia Green renormalizată corespunzătoare electronilor de conducţie este egală cu:

$$G_{l\sigma l'\sigma'}(\vec{k}\vec{k'}\,|\,\mathrm{i}\omega_n)=\delta_{\vec{k}\vec{k'}}\delta_{ll'}\delta_{\sigma\sigma'}G^{(0)}_{l\sigma}(\vec{k}\,|\,\mathrm{i}\omega_n)+$$
$$+\frac{V^*_{\vec{k}l}V_{\vec{k'}l'}}{N}G^{(0)}_{l\sigma}(\vec{k}\,|\,\mathrm{i}\omega_n)g_{l\sigma,l'\sigma'}(\mathrm{i}\omega_n)G^{(0)}_{l'\sigma'}(\vec{k'}\,|\,\mathrm{i}\omega_n), \quad (28)$$

unde $g_{l\sigma l'\sigma'}(\mathrm{i}\omega_n)$ este reprezentarea Fourier a funcţiei Green complete pentru electronii impurităţilor, ω_n este frecvenţa lui Matsubara, δ este funcţia delta.

O relaţie similară este valabilă pentru funcţia anomală a electronilor în starea supraconductoare:

$$F_{l\sigma l'\sigma'}(\vec{k},-\vec{k'}\,|\,i\omega_n)=\frac{V^*_{\vec{k}l}V_{\vec{k'}l'}}{N}G^{(0)}_{l\sigma}(\vec{k}\,|\,i\omega_n)\,f_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n)G^{(0)}_{l'\sigma'}(-\vec{k'}\,|\,-i\omega_n) \quad (29)$$

În Fig. 5. liniile duble punctate cu săgeţi reprezintă funcţiile Green renormalizate ale electronilor localizaţi f şi $\bar{f}$, iar liniile groase şi solide reprezintă funcţia Green a electronilor de conducţie G^0. Funcţia V_1 înseamnă $V_{\vec{k}_1 l_1}$. Se presupune sumarea după indici repetaţi. Λ, Y, $\bar{Y}$, sunt funcţii de corelare care conţin diagrame ireductibile puternic cuplate. Cel mai simplu exemplu de astfel de diagrame este prezentat în Fig. 6.

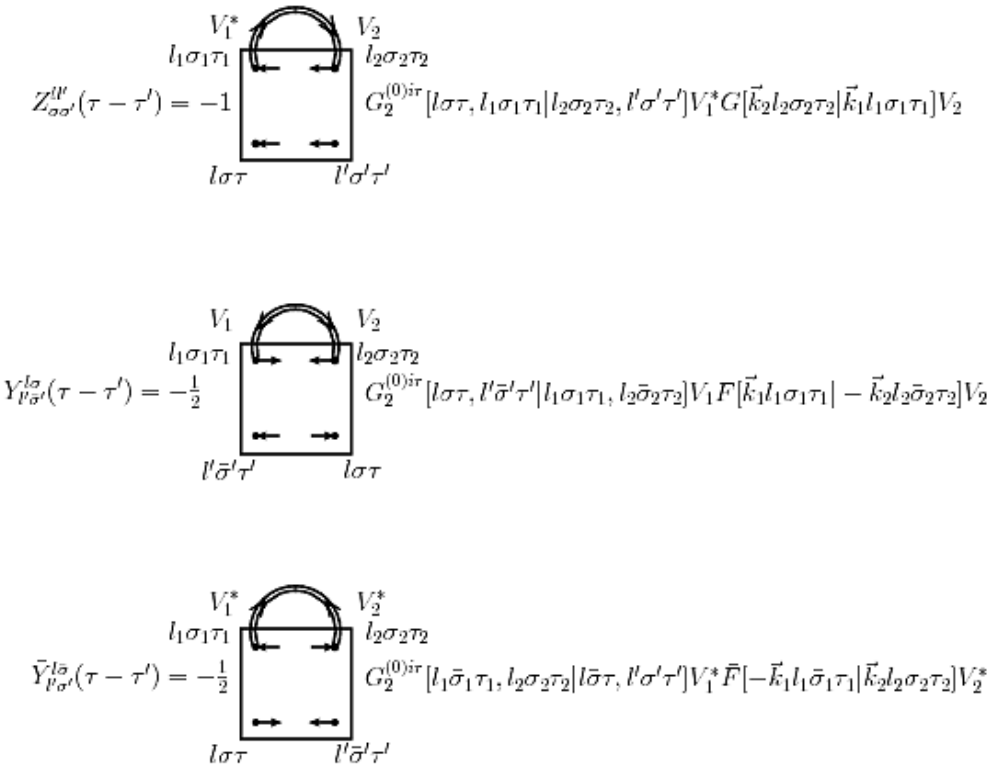


Fig. 6. Aproximaţia principală pentru funcţiile de corelare Z, Y, $\bar{Y}$. Liniile duble solide cu săgeţi reprezintă funcţia completă a electronilor de conducţie a lui Green. Dreptunghiurile reprezintă funcţiile ireductibile ale lui Green ale electronilor impurităţilor.

Forma analitică (în reprezentarea Fourier) a ecuaţiilor prezentate în Fig. 5. are următoarea formă:

$$g_{l\sigma l'\sigma'}(\mathrm{i}\omega_n) = \Lambda_{l\sigma l'\sigma'}(\mathrm{i}\omega_n) + \Lambda_{l\sigma l_1\sigma_1}(\mathrm{i}\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}_{l_1\sigma_1}(\mathrm{i}\omega_n) g_{l_1\sigma_1 l'\sigma'}(\mathrm{i}\omega_n). \tag{30}$$

$$\begin{aligned}\bar{f}_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) = \bar{Y}_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n) + \Lambda_{l_1\sigma_1 l\sigma}(-i\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}_{l_1\sigma_1}(-i\omega_n)\,\bar{f}_{l_1\sigma_1 l'\sigma'}(i\omega_n) \\ + \bar{Y}_{l\sigma l'\sigma'}(i\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}_{l_1\sigma_1}(i\omega_n)\mathcal{g}_{l_1\sigma_1 l'\sigma'}(i\omega_n)\end{aligned} \tag{31}$$

iar funcţia Green de aproximaţie zero pentru electronii atomilor impurităţilor are forma

$$\mathcal{G}^{(0)}_{l\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \left|V_{\vec{k}l}\right|^2 G^0_{l\sigma}(\vec{k}\,|\,i\omega_n) = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}l}|^2}{i\omega_n - \varepsilon(\vec{k})}$$

Acest sistem de ecuaţii ne permite să discutăm despre starea normală a sistemului şi starea supraconductivă singletă pe un fundal paramagnetic ($\bar{\sigma} = -\sigma$).

Funcţia Green completă a electronilor de conducţie, reprezentată în Fig. 6 este rezultatul unei însumări de tip „ladder" a diagramelor principale. Această aproximare este o generalizare a aproximării de fază aleatorie a teoriei perturbaţiilor de cuplare slabă. A fost calculată cea mai simplă funcţie Green ireductibilă bi-particulă $\Lambda = g^0 + Z$ (indicii orbitali şi de spin au fost omişi pentru simplitate). Această este o valoare, care poate fi calculată doar în limita temperaturilor scăzute, şi care este de asemenea aproximativă, ţinând cont de contribuţia ponderii statistice $e^{-\beta E_9}$. Se presupune că starea fundamentală a sistemului studiat este o stare tripletă cu două particule E_9. După ce am calculat această valoare şi am sumat o anumită clasă de diagrame (Fig. 6), a fost obţinută funcţia de corelare $\Lambda_{l\sigma l'\sigma'}$.

$$\Lambda_{l\sigma l'\sigma'}(\mathrm{i}\omega) = \delta_{ll'}\delta_{\sigma\sigma'}[m_l(\mathrm{i}\omega) + \frac{p^2(\mathrm{i}\omega)}{2}\mathcal{G}_l^{(0)}(\mathrm{i}\omega)] + \frac{p^2(\mathrm{i}\omega)}{2}\mathcal{G}_l^{(0)}(\mathrm{i}\omega)\mathcal{G}_{l'}^{(0)}(\mathrm{i}\omega)g_{l\sigma l'\sigma'}(\mathrm{i}\omega), \quad (32)$$

Cu următoarele realizări:

$$\begin{aligned}
\Lambda_{11}(i\omega) &= m_1(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2}\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2}[\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)]^2 \boldsymbol{g}_{11}(i\omega), \\
\Lambda_{22}(i\omega) &= m_2(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2}\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega) + \frac{p^2(i\omega)}{2}[\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)]^2 \boldsymbol{g}_{22}(i\omega), \qquad (33) \\
\Lambda_{12}(i\omega) &= \frac{p^2(i\omega)}{2}\mathcal{G}_1^{(0)}(i\omega)\mathcal{G}_2^{(0)}(i\omega)\boldsymbol{g}_{12}(i\omega),
\end{aligned}$$

$$p(\mathrm{i}\omega) = \left(\frac{1}{\mathrm{i}\omega + E_2 - E_9} - \frac{1}{\mathrm{i}\omega + E_9 - E_{12}}\right).$$

$$m_l(i\omega) = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{i\omega + E_2 - E_9} + \frac{1}{i\omega + E_9 - E_{12}}\right) \qquad (34)$$

Ca rezultat, au fost găsite două soluţii pentru funcţiile Green renormalizate ale d-electronilor (localizaţi).

Prima dintre ele:

$$\Lambda_{11}(\mathrm{i}\omega) = m_1(\mathrm{i}\omega), \quad g_{11}(\mathrm{i}\omega) = -\frac{1}{\mathcal{G}_1^{(0)}(\mathrm{i}\omega)},$$

$$\Lambda_{22}(\mathrm{i}\omega) = \frac{1}{\mathcal{G}_2^{(0)}(\mathrm{i}\omega)}, \quad g_{22}(\mathrm{i}\omega) = -\frac{1}{\mathcal{G}_2^{(0)}(\mathrm{i}\omega)}\left(1 + \frac{m_2(\mathrm{i}\omega)\mathcal{G}_2^{(0)}(\mathrm{i}\omega) - 1}{\frac{p^2(\mathrm{i}\omega)}{2}(\mathcal{G}_2^{(0)}(\mathrm{i}\omega))^2}\right), \tag{35}$$

$$\Lambda_{12}(\mathrm{i}\omega) = \Lambda_{21}(\mathrm{i}\omega) = \pm\frac{\mathrm{i}p(\mathrm{i}\omega)}{\sqrt{2}}, \quad g_{12}(\mathrm{i}\omega) = \pm\frac{\mathrm{i}\sqrt{2}}{p(\mathrm{i}\omega)\mathcal{G}_1^{(0)}(\mathrm{i}\omega)\mathcal{G}_2^{(0)}(\mathrm{i}\omega)},$$

cu condiţia ca

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

A doua soluţie se obţine din (35) prin înlocuirea indicilor 1 şi 2.

Pentru a analiza tranziţia metal-izolator Mott, a fost determinată densitatea stărilor electronice: De exemplu, contribuţia intra-orbitală are forma

$$\rho_{11}(E) = -\frac{2\,\mathrm{Im}\,\mathcal{G}_1^{(0)}(E + \mathrm{i}\delta)}{(Re\mathcal{G}_1^{(0)})^2 + (\mathrm{Im}\,\mathcal{G}_1^{(0)})^2}, \tag{36}$$

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

Valoarea $\rho_{11}(E)$ este diferită de zero datorită existenţei unui element de matriceal de hibridizare şi a unei densităţi zero de stări $\rho_0(E)$ (densitate de stări fără interacţiune). Cu toate acestea, există o contribuţie suplimentară datorată efectului de corelaţie inter-orbitală, care rezultă din soluţia obţinută (35) şi are forma:

$$\rho_{12}(E) = -\,\mathrm{Im}\,g_{12}(E + \mathrm{i}\delta) = \frac{2(E + \triangle E_1)(\triangle E_2 - E)}{Im\mathcal{G}_1^{(0)}(0)Im\mathcal{G}_2^{(0)}(0)(\triangle E_1 + \triangle E_2)}, \tag{37}$$

Unde $\Delta E_1 = E_2 - E_9 > 0, \quad \Delta E_2 = E_{12} - E_9 > 0.$ Această valoare este pozitivă pentru . $-\Delta E_1 < E < \Delta E_2$. Astfel, s-a demonstrat că la temperaturi scăzute, datorită tranziţiilor orbitale, starea sistemului poate fi doar metalică.

A fost obţinută o expresie aproximativă pentru funcţiile de corelare şi, în special, pentru parametrii de ordine supraconductor $\bar{Y}^{ll}$ (deoarece funcţiile de corelare în starea supraconductivă pot juca rolul unui parametru de ordine supraconductoare)

$$\bar{Y}^{ll'}(i\omega_n) = \lambda q_l(-i\omega_n)q_{l'}(i\omega_n)\,\bar{f}^{ll'}(i\omega_n),$$

unde

$$q_{l\sigma} = p(i\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}_{l\sigma}(i\omega_n). \tag{38}$$

$\lambda = -\frac{1}{2}$ pentru supraconductivitatea singletă şi $\lambda = \frac{1}{6}$ pentru tripletă.

Au fost formulate şi analizate ecuaţiile liniare pentru parametrii de ordine (obţinute din ecuaţiile de tip Dyson, rescrise pentru starea supraconductivă) şi a fost gasită o condiţie pentru realizarea supraconductivităţii singlete şi determinarea temperaturii critice:

$$\begin{vmatrix} Q^2_\sigma(k)Q^2_{\bar\sigma}(-k) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_1(-k)q_1(k)} & \mathcal{G}^{(0)}_2(k)Q^2_{\bar\sigma}(-k)\Lambda^{21}_\sigma(k) & \mathcal{G}^{(0)}_2(-k)Q^2_\sigma(k)\Lambda^{21}_{\bar\sigma}(-k) & \mathcal{G}^{(0)}_2(-k)\mathcal{G}^{(0)}_2(k)\Lambda^{21}_\sigma(k)\Lambda^{21}_{\bar\sigma}(-k) \\ \mathcal{G}^{(0)}_1(k)Q^2_{\bar\sigma}(-k)\Lambda^{12}_\sigma(k) & Q^1_\sigma(k)Q^2_{\bar\sigma}(-k) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_1(-k)q_2(k)} & \mathcal{G}^{(0)}_2(-k)\mathcal{G}^{(0)}_1(k)\Lambda^{12}_\sigma(k)\Lambda^{21}_{\bar\sigma}(-k) & \mathcal{G}^{(0)}_2(-k)Q^1_\sigma(k)\Lambda^{21}_{\bar\sigma}(-k) \\ \mathcal{G}^{(0)}_1(-k)Q^2_\sigma(k)\Lambda^{21}_{\bar\sigma}(-k) & \mathcal{G}^{(0)}_1(-k)\mathcal{G}^{(0)}_2(k)\Lambda^{21}_\sigma(k)\Lambda^{12}_{\bar\sigma}(-k) & Q^2_\sigma(k)Q^1_{\bar\sigma}(-k) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_2(-k)q_1(k)} & Q^2_\sigma(k)Q^1_{\bar\sigma}(-k) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_2(-k)q_1(k)} \\ \mathcal{G}^{(0)}_1(-k)\mathcal{G}^{(0)}_1(k)\Lambda^{12}_\sigma(k)\Lambda^{12}_{\bar\sigma}(-k) & \mathcal{G}^{(0)}_1(-k)Q^1_\sigma(k)\Lambda^{12}_{\bar\sigma}(-k) & \mathcal{G}^{(0)}_1(k)Q^1_{\bar\sigma}(-k)\Lambda^{12}_\sigma(k) & Q^1_\sigma(k)Q^1_{\bar\sigma}(-k) - \frac{\Delta_4}{\lambda q_2(-k)q_2(k)} \end{vmatrix} = 0, \tag{39}$$

Unde $k = i\omega_n$. $Q^l_\sigma(i\omega_n) = 1 - \Lambda^{ll}_\sigma(i\omega_n)\mathcal{G}^{l(0)}_\sigma(i\omega_n)$.

Această condiţie este determinată de parametrii liberi ai teoriei şi determină temperatura critică T_c. În cazul nostru, temperatura critică T_c este reprezentată de dependenţa de frecvenţa Matsubara $\omega_n = (2n+1)\pi k_B T_c$.

Pentru a determina temperatura critică, punem în (39) λ egala cu $-\frac{1}{2}$, valoare corespunzătoare stării singlete şi ecuaţiei de conservare. Un alt argument în favoarea alegerii $\lambda = -\frac{1}{2}$ este aproximarea bazată pe egalitatea cu zero a funcţiilor $Q^l_\sigma(i\omega_n) = 0$.

În acest caz particular

$$D_s = (\Delta^{(0)}_4)^2\left[\frac{\Delta^{(0)}_4}{\lambda^2 q_1(-i\omega_n)q_1(i\omega_n)q_2(-i\omega_n)q_2(i\omega_n)} - 1\right]^2, \tag{40}$$

unde $\Delta^{(0)}_4$ este Δ_4 cu condiţia $Q^l_\sigma(i\omega_n) = 0$:

$$\Delta^{(0)}_4 = \mathcal{G}^{(0)}_1(i\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}_1(-i\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}_2(i\omega_n)\mathcal{G}^{(0)}_2(-i\omega_n)\Lambda^{12}_\sigma(i\omega_n)\Lambda^{12}_{\bar\sigma}(-i\omega_n)\Lambda^{21}_\sigma(i\omega_n)\Lambda^{21}_{\bar\sigma}(-i\omega_n). \tag{41}$$

Ţinând cont de soluţia (33)

$$\Lambda_\sigma^{12}(i\omega_n)\Lambda_\sigma^{21}(i\omega_n) = -\frac{p^2(i\omega_n)}{2}, \tag{42}$$

şi definiţia q_σ^l obţinem

$$D_s = (\Delta_4^{(0)})^2\left(\frac{1}{(2\lambda)^2} - 1\right)^2 = 0 \tag{43}$$

Se vede că această condiţie, pentru ca acest determinant să fie zero, corespunde cazului de egalitate λ=±1/2, ceea ce corespunde supraconductivităţii singlete.

În al cincilea capitol, a fost dezvoltată o abordare diagramatică pentru modelul Anderson-Holstein în ipoteza unei interacţiuni Coulomb puternice a electronilor de impurităţi, precum şi a unei interacţiuni puternice electron-fononice a acestor electroni cu fononii optici.

Hamiltonianul modelului Anderson-Holstein are forma:

$$\begin{aligned}
&H = H_{el} + H_{ph} + H_{hyb} + H_{el-ph},\\
&H_{el} = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon(\vec{k}) C_{\vec{k}\sigma}^+ C_{\vec{k}\sigma} + \sum_\sigma \varepsilon_f^0 f_\sigma^+ f_\sigma + U_0 n_\uparrow n_\downarrow,\\
&H_{ph} = \hbar\omega_0(a^+a + \frac{1}{2}), \quad q = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+), \quad p = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(a^+ - a),\\
&H_{hyb} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}\sigma}(V_{\vec{k}} f_\sigma^+ C_{\vec{k}\sigma} + V_{\vec{k}}^* C_{\vec{k}\sigma}^+ f_\sigma),\\
&H_{el-ph} = \bar{g} q n, \quad n = \sum_\sigma n_\sigma, \quad n_\sigma = f_\sigma^+ f_\sigma
\end{aligned} \tag{44}$$

unde q şi p sunt coordonatele locale şi impulsul fononilor optici, ω_0 este frecvenţa lor şi $a(a^+), C_{\vec{k}\sigma}(C_{\vec{k}\sigma}^+)$ sunt operatorii de anihilare (creare) al fononilor, electronilor de conducţie şi, electronilor de impurităi, respectiv, $\varepsilon(\vec{k})$ este energia cinetică a electronilor de conducţie, ε_f^0 este energia locală a electronilor de impurităţi (ambele valori energetice sunt calculate de la nivelul potenţialul chimic al sistemului μ_0 : $\varepsilon(\vec{k}) = \xi(\vec{k}) - \mu_0$, $\varepsilon_f^0 = \bar{\varepsilon}_f^0 - \mu_0$, U_0 este repulsia Coulombiană pe un singur nod a electronilor impurităţilor cu spini opuşi, $V_{\vec{k}}$ este elementul matriceal de hibridizare, N este numărul de noduri ale reţelei, $\bar{g}$ este constantă de interacţiune electron-fononică.

Deoarece ambele dintre aceste interacţiuni sunt considerate a fi puternice, ele au fost incluse în Hamiltonianul cu aproximaţie zero, în timp ce operatorul Hamiltonianului corespunzător hibridizării d-stărilor ale electronilor localizaţi cu stările s(p)- a electronilor de conducţie a fost

considerat o perturbare. Pentru a exclude termenul liniar în coordonatele fononului, a fost folosită transformarea Lang-Firsov [32].

În acest caz interacţiunea puternică electron-fononică determină formarea de polaroni cu nori de fononi „grei" care înconjoară atomul de impuritate. În acest caz, apare un nou grup de produse medii, format din operatorii norului fonon $\Phi_0(\tau_1\tau_2 \mid \tau_3\tau_4)$. Pentru acest grup a fost propusă o teoremă Wick generalizată, obţinută folosind aproximarea Laplace în limita de cuplare puternică.

$$\Phi_0(\tau_1\tau_2|\tau_3\tau_4) \cong \Phi_0(\tau_1 \mid \tau_3)\Phi_0(\tau_2 \mid \tau_4) + \Phi_0(\tau_1 \mid \tau_4)\Phi_0(\tau_2 \mid \tau_3) \tag{45}$$

Generalizarea (45) la argumente multi-time este considerată teorema lui Wick pentru funcţiile Green a norilor de fononi în regimul polaronilor puternic cuplaţi.

În limita de cuplare puternică $\alpha \gg 1$ pe care o luăm în consideraţie, folosind aproximarea Laplace, transformata Fourier a funcţiilor Green a aproximării zero a norilor de fononi $\Phi_0(i\Omega)$ a fost calculată în [33, 34] şi are forma:

$$\Phi_0(\mathrm{i}\Omega) = \frac{2\omega_c}{\Omega^2 + \omega_c^2}, \quad \omega_c = \alpha\omega_0. \tag{46}$$

Această expresie este un propagator armonic al modului colectiv al fononilor aparţinând unui nor polaron cu o frecvenţă colectivă ω_c (conceptul de oscilaţii colective libere ale norilor de fononi care înconjoară polaronii).

Folosind tehnica diagramatică, a fost investigată dinamica norilor de fononi ai polaronilor, stabilind procesul de renormalizare a frecvenţei lor colective.

$$\Phi(\mathrm{i}\,\Omega) = \frac{\omega_c}{\Omega^2 + \omega_c^2 + 2\omega_c\Pi(\mathrm{i}\,\Omega)} \tag{47}$$

Polul acestei ecuaţii determină renormalizarea frecvenţei fononului colectiv. Noua frecvenţă este determinată din ecuaţie

$$E^2 - \omega_c^2 + 2\omega_c\Pi(\mathrm{E}) = 0. \tag{48}$$

Cea mai simplă funcţie de polarizare $\Pi_2(i\Omega)$ în condiţii de paramagnetism şi în stare normală, este determinată de cele mai simple funcţiile Green de aproximare zero ale electronilor de conducţie $G_\sigma^0(i\omega)$ şi electronilor de impurităţi localizaţi $g_\sigma^0(i\omega - i\Omega)$

$$\Pi_2(\mathrm{i}\Omega) = -\frac{1}{\beta}\sum_{\omega} G_\sigma^0(\mathrm{i}\,\omega) g_\sigma^0(\mathrm{i}\,\omega - \mathrm{i}\Omega). \tag{49}$$

Aceste funcii au fost calculate în cea mai simplă aproximare şi, inând cont de ele, relaţie (49) are forma:

$$\Pi_2(i\Omega) = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}\sigma}|V_{\vec{k}}|^2 \left\{\frac{1-n_{\bar{\sigma}}}{i\Omega-\epsilon(\vec{k})+\epsilon_f}\left[\frac{1}{e^{\beta\epsilon(\vec{k})}+1}-\frac{1}{e^{\beta\epsilon_f}+1}\right]+\right.$$
$$\left.+\frac{n_{\bar{\sigma}}}{i\Omega-\epsilon(\vec{k})+U+\epsilon_f}\left[\frac{1}{e^{\beta\epsilon(\vec{k})}+1}-\frac{1}{e^{\beta(U+\epsilon_f)}+1}\right]\right\} \quad (50)$$

Folosind ecuaţia (48) pentru cazul T = 0 la densitatea zero a stărilor electronice ρ(E)*:*

$$\rho(\mathrm{E}) = \frac{1}{2W}\begin{cases}1, \mathrm{E} < |W| \\ 0, \mathrm{E} > |W|\end{cases} \quad (51)$$

În aceasta teza a fost investigată dependenţa energiei de mod colectiv E în raport cu parametrul de hibridizare V (Fig. 7). Aici W este lăţimea benzei. A fost constatat că modul colectiv al norilor de fononi în cazul lui $T=0$ scade pe măsură ce hibridizarea creşte.

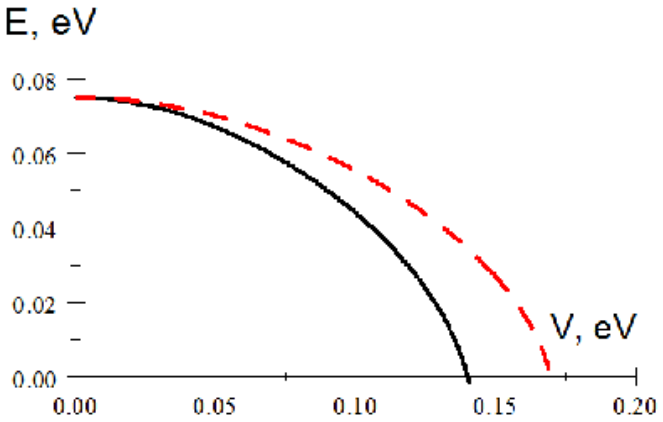


Fig. 7. Energia modului colectiv E în funcţie de parametrul de hibridizare V pentru diferite lăţimi de bandă: $W=0,5$ *eV* (linie continuă) şi $W=1$ *eV* (linie întreruptă). La calcularea altor parametri, au fost luate următoarele valori: $\omega c=0,075$ *eV* , U = 5,85 *eV* , $\varepsilon_f=-0,095$ *eV* .

A fost formulat un sistem de ecuaţii de tip Dyson care definesc relaţia dintre funcţiile Green totale ale electronilor de impurităţi şi funcţiile lor de corelare, precum şi un sistem de ecuaţii Dyson pentru funcţiile Green complete ale electronilor de conducţie şi operatorii lor de masă. S-au obţinut diagramele pentru funcţiile de corelare ce corespund primului ordin al teoriei perturbaţiilor, atât în stare normală, cât şi în cea supraconductoare. S-a dovedit că funcţiile de corelare ale ecuaţiilor de tip Dyson ale electronilor localizaţi coincid cu operatorii de masă ale ecuaţiilor Dyson pentru funcţiile Green ale electronilor de conducţie.

CONCLUZII ŞI RECOMANDĂRI GENERALE

Toate obiectivele tezei au fost realizate. În teza a fost dezvoltă abordarea diagramatică a cuplării puternice propusă de V.A. Moscalenco în an. 1991 [15, 16] pentru a studia proprietăţile termodinamice ale sistemelor descrise de modelul Hubbard, efectul de corelaţie inter-orbitală, precum şi efectul combinat al interacţiunilor puternice Coulomb şi electron-fononice asupra proceselor electronice în aceste sisteme.

Studiile au fost realizate pe baza modelului Hubbard, modelelor Hubbard şi Anderson al impurităţii dublu degenerate şi modelului Anderson-Holstein, care ia în consideraţie, pe lângă interacţiunea puternică a electronilor între ei, dar şi. interacţiunea electron-fononică. În acest ultim caz, se presupune că ambele interacţiuni sunt puternice.

Tehnica diagramatică dezvoltată în teza se bazează pe teorema lui Wick generalizată pentru sisteme puternic corelate. Problema imposibilităţii utilizării teoremei lui Wick obişnuite din cauza nebilinearităţii Hamiltonienilor de aproximaţie zero se rezolvă luând în considerare structurile multiparticule - funcţiile Green ireductibile. Aceste funcţii ireductibile reflectă atât fluctuaţiile de spin, de sarcină, cât şi fluctuaţiile de perechi ale sistemului. Teorema lui Wick generalizată a fost utilizată pentru sisteme de electroni localizaţi în stările d(f)- în toate modelele, în timp ce pentru subsistemul de electroni în stările s(p-) în modelul Anderson al impurităţii dublu degenerat şi fononi optici „liberi” în modelul Anderson-Holstein, a fost folosită teorema lui Wick obişnuită. Teorema lui Wick a fost formulată şi pentru propagatorii norilor de fononi în regim de interacţiune electron-fononică puternică.

În primul rând, în teza se dezvoltă tehnica diagramatică pentru modelul Hubbard, iar cu ajutorul acesteia este dovedită proprietatea de staţionaritate a potenţialului termodinamic al modelului. A fost introdus conceptul de funcţie Green de tunelare şi a fost obţinută o ecuaţie de tip Dyson pentru aceasta. A fost găsit un operator de masă, care, atunci când constanta de expansiune a dezvoltării teoriei perturbaţiilor λ este egală cu 1 (pe care am introdus-o în Hamiltonian), coincide cu funcţia de corelare. În continuare, am stabilit relaţia exactă dintre funcţia Green uni-particulă şi potenţialul termodinamic al sistemului (datorită faptului că acesta din urmă este exprimat prin media diagramelor puternic cuplate pentru operatorul de evoluţie). Această relaţie conţine integrare suplimentară peste constanta de expansiune λ. Pentru a omite această integrare, a fost introdus un funcţional special compus din diagrame scheletice ale operatorului de evoluţie şi a fost făcută o variaţie a acestui funcţional în funcţie de operatorul de masă pe care l-am găsit şi am constatat că este egală cu zero. Apoi punând $\lambda = 1$, comparând acest funcţional cu diagramele pentru potenţialul termodinamic şi, identificând coincidenţa acestora, am stabilit proprietatea de staţionaritate a potenţialului termodinamic al modelului Hubbard. O teoremă similară a fost

demonstrată pentru starea supraconductoare. În acest caz, s-a presupus existenţa perechilor supraconductoare de electroni şi cvasi-medii Bogoliubov non-zero. Funcţiile Green ireductibile în faza supraconductoare pot conţine orice număr par de operatori de creare şi anihilare a fermionilor, în timp ce în faza normală numărul ambelor tipuri este acelaşi. În acest sens, am folosit conceptul de număr de sarcină cuantică, care ia în considerare automat toate posibilităţile, luând în consideraie interferenţa particulelor şi a golurilor în stare supraconductoare. Comparând rezultatele obţinute cu cele pentru modelul Anderson periodic [17], am ajuns la concluzia că, din punct de vedere termodinamic, modelul Anderson periodic se transformă în modelul Hubbard dacă înlocuim funcţiile lui Green ale electronilor de conducţie în modelul Anderson periodic cu funcţiile Green de tunelare ale modelului Hubbard.

În al doilea rând, teoria diagramatică de cuplare puternică a fost generalizată pentru sistemele cu degenerare orbitală. Şi anume, pentru analiza modelul Anderson al impurităţii şi Hubbard dublu degenerate, a fost construită o teorie a perturbaţiilor în limita atomică pentru ambele modele. Pentru modelul Anderson, funcţia spectrală este de asemenea definită în această limită. În ambele modele, au fost obţinute ecuaţii de tip Dyson pentru funcţiile Green uni-particule al electronilor localizaţi şi care puternic interacţionează. A fost arătat că teoria diagramatică a modelului Hubbard orbital degenerat se dovedeşte a fi similară cu modelul orbital nedegenerat dacă în acesta din urmă înlocuim funcţiile numerice Green cu matrice de ordinul doi în care elementele diagonale corespund tranziţiilor inter-orbitale şi elementele nediagonale corespund tranziţiilor intra-orbitale. În cea mai simplă aproximare a diagramelor în lanţ pentru modelul Hubbard, a fost calculată densitatea stărilor electronice, care este determinată de densitatea zero a stărilor. Am arătat că în această aproximare, cazul special al umplerii la jumătate a benzilor de energie electronică ale sistemului corespunde doar stării dielectrice a sistemului. Un rezultat similar în această aproximare este cunoscut pentru modelul Hubbard nedegenerat, când densitatea stărilor electronice este egală cu funcţia zero a densităţii stărilor şi are forma $\rho_0 (E^2-\mu^2)/E$ [35].

În cadrul modelului Anderson dublu degenerat, sumând o clasă infinită de diagrame de un anumit tip, am obţinut o expresie aproximativă pentru funcţiile de corelare (în special, pentru parametrii de ordine supraconductoare) şi am determinat densitatea stărilor electronice. Am arătat că la temperaturi scăzute, starea sistemului poate fi doar metalică, iar efectul de corelaţie inter-orbitală are o contribuţie pozitivă la această stare metalică. Am obţinut şi analizat ecuaţiile liniare pentru parametrii de ordine a stării supraconductoare şi am formulat o condiţie pentru implementarea supraconductivităţii singletice şi determinarea temperaturii critice în sistem.

În al treilea rând, a fost dezvoltată o abordare diagramatică pentru modelul Anderson-Holstein al impurităţii în presupunerea unei interacţiuni Coulomb puternice a electronilor de impurităţi şi a unei interacţiuni puternice electron-fononice a acestor electroni cu fononii optici. În

acest caz, toate interacţiunile din sistem au fost incluse în Hamiltonianul de aproximaţie zero, iar extinderea într-o serie de teorie a perturbaţiilor a fost realizată după parametrul de hibridizare. S-a aplicat transformarea canonică Lang-Firsov, care a redus problema studiată la luarea în considerare a polaronilor în mişcare (electroni înconjuraţi de nori de fononi grei). Studiind dinamica norilor de fononi, a fost arătat că pe măsură ce parametrul de hibridizare creşte, energia modului colectiv de vibraţii ale fononului scade. De asemenea, am obţinut ecuaţii de tip Dyson pentru funcţiile polaronice Green în cazul general (inclusiv funcţiile anormale Green) şi a fost obţinută o coincidenţă a operatorilor lor de masă cu operatorii de masă pentru sistemul electronilor de conducţie.

Contribuţia personală a autorului la rezultatele prezentate în teză: autorul a studiat şi analizat literatura de specialitate pe tema tezei, a stăpânit tehnica diagramatică pentru sisteme puternic corelate, a efectuat şi a analizat toate calculele, a analizat şi sintetizat rezultatele şi a contribuit la redactarea şi pregătirea desenelor şi manuscriselor publicaţiilor legate de rezultatele prezentate în această teză.

Recomandări:

Este, de asemenea, interesant să se ia în consideraie funcţiile ireductibile Green atunci când se analizează tranziţia metal-izolator Mott în cadrul modelului Hubbard dublu degenerat, precum şi calculul caracteristicilor termodinamice ale modelului, cum ar fi, de exemplu, capacitatea termică specifică.

Se poate presupune că perechile Cooper formate din d-electroni într-o stare fără nori de fononi înconjuraţi au o contribuţie mai semnificativă la supraconductibilitatea modelului Anderson al impurităţii decât cele formate din electroni într-o stare cu nori de fononi grei. Această ipoteză poate fi confirmată printr-un studiu suplimentar al modelului Anderson-Holstein al impurităţii.

BIBLIOGRAFIE

[1] KOLLER, W., MEYER, D., ONO, Y., HEWSON, A. C., Phase diagram and dynamic response functions of the Holstein-Hubbard model. In: Europhys. Lett., 2004, vol. 66, nr. 4, pp. 559–564, arXiv: cond-mat/0312367.

[2] SCHUBIN, S.P., WONSOWSKII, S.V. On the electron theory of metals. In: Proc. Roy. Soc. A, 1934, vol. 145, nr. 854, pp.159-180. ISSN 1364-5021, 1471-2946

[3] SCHUBIN, S.P., WONSOWSKY, S. Zur Elektronentheorie der Metalle I. In: Phys. Zs. UdSSR. 1935, vol. 7, nr. 1, pp. 292-328. ISSN 0369-9811

[4] SCHUBIN, Von. S., WONSOWSKY S. Zur Elektronentheorie der Metalle II. In: Phys. Zs. UdSSR. 1936, vol. 10, nr. 3, pp. 348-377. ISSN 0369-9811

[5] БОГОЛЮБОВ, П.И., ТЯБЛИКОВ, С.В. Об одном применении теории возмущений к полярной модели металла. In: ЖЭТФ. 1949, vol. 19, nr.3 pp. 251-255. ISSN 0044-4510.

[6] БОГОЛЮБОВ, П.И., ТЯБЛИКОВ, С.В. Приближенный метод нахождения низших энергетических уровней электронов в металле. In: ЖЭТФ. 1949, vol. 19, pp. 256-268. ISSN 0044-4510.

[7] HUBBARD, J., Electron correlations in narrow energy bands. In: Proc. Roy. Soc. A 1963. vol. 236. nr. 1365. pp. 238-257. ISSN 1364-5021, 1471-2946

[8] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands II. The degenerate band case. In: Proc. Roy. Soc. A 1694, vol. 277 nr. 1369, pp.237-259. ISSN 1364-5021, 1471-2946.

[9] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands.III. An improved Solution. In: Proc. Roy. Soc. A. 1964, vol. 281, nr.1386, pp. 401-419. ISSN 1364-5021, 1471-2946.

[10] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. IV. The atomic representation. In: Proc. Roy. Soc. A. 1965. vol. 285, nr. 1403, pp. 542-560. ISSN 1364-5021, 1471-2946.

[11] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. V. A Perturbation Expansion about the Atomic Limit. In: Proc. Roy. Soc. A. 1967, vol. 296, nr. 1444, pp. 82-99. ISSN 1364-5021, 1471-2946.

[12] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands.VI. The connection with many-body perturbation theory. In: Proc. Roy. Soc. A. 1967, vol. 296, nr. 1444, pp. 100-112. ISSN 1364-5021, 1471-2946.

[13] ANDERSON, P.W. Localized Magnetic States in Metals. In: Phys. Rev. 1961, vol.124, nr. 1, pp. 41-53. ISSN 0031-899X, 1536-6065.

[14] Theoretical Methods for Strongly correlated electrons. Editors: SEĬNEĬCHAL, D., TREMBLAY, A-M., BOURBONNAIS, C. Canada: CRM series in Mathematical Physics. 2004, 380 p. ISBN 13: 978-0387008950 ; ISBN 10: 0387008950.

[15] МОСКАЛЕНКО, В.А., Обобщенная теорема Вика для электронных систем с сильными корреляциями. Вопросы квантовой теории конденсированных сред: [сб. ст.]. Кишинев: Штиинца. 1990, pp. 122-134. ISBN 5-376-00774-X.

[16] ВЛАДИМИР, М.И., МОСКАЛЕНКО, В.А. Диаграммная техника для модели Хаббарда. In: ТМФ, vol. 82, nr. 3, pp. 428–437, 2305-3135, 0564-6162 ; VLADIMIR, M.I., MOSKALENKO, V.A. Diagram technique for the Hubbard model. In: Theoret. and Math. Phys. 1990, vol. 82, nr. 3, pp. 301–308. ISSN 0040-5779, 1573-9333

[17] МОСКАЛЕНКО, В.А., ДОХОТАРУ, Л.А., Читро, Р. Диаграммная теория для периодической модели Андерсона. Свойство стационарности термодинамического потенциала. In: ТМФ. 2010, vol. 162, nr. 3,pp. 439–458. ISSN 0564-6162, 2305-3135; MOSKALENKO, V.A., DOHOTARU, L.A., CITRO, R. Diagram theory for the periodic Anderson model: Stationarity of the thermodynamic potential. Theoret. and Math. Phys. 2010, vol. 162, nr. 3, pp. 366–382. ISSN 0040-5779, 1573-9333.

[18] LUTTINGER, J.M., WARD, J.C. Ground-State Energy of a Many-Fermion System. II. In: Phys. Rev. 1960, vol. 118, nr. 5, pp. 1417-1427. ISSN 0031-899X, 1536-6065

[19] RICHARD, P., SATO, T., NAKAYAMA, K., SOUMA, S. et. al. Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy of the Fe-Based Ba0.6K0.4Fe2As2 High Temperature Superconductor: Evidence for an Orbital Selective Electron-Mode Coupling.In: Phys. Rev. Lett. 2009, vol. 102, nr. 4, pp. 047003 {4}. ISSN 0031-9007; 1079-7114.

[20] GUNNARSSON, O. Superconductivity in fullerides In: Rev. Modern Phys. 1997, 69, nr. 2, pp. 575–606. ISSN 1539-0756

[21] GWEON, Gh., SASAGAWA, T., ZHOU, S. et al. An unusual isotope effect in a high-transition-temperature superconductor. In: Nature. 2004, vol. 430, pp. 187–190. ISSN 1476-4687, 0028-0836

[22] FRANCK, J. Pm. Physical Properties of High Temperature Superconductors IV. Singapore: World Scientific. 1994, pp. 189–293. ISBN 9814525146, 9789814525145

[23] WEN-MIN, H., HSIU-HAU, L. Anomalous isotope effect in iron-based superconductors. In: Nature Sci Rep. 2019, vol. 9, nr. 1, pp. 5547. ISSN 2045-2322

[24] АЛЕКСАНДРОВ, А.С., КРЕБС А.Б., Поляроны в высокотемпературных сверхпроводниках. In: УФН. 1992, vol. 162, nr. 5, pp. 1–85; ISSN 0042-1294, 1996-6652 ALEXANDROV, A. S, KREBS A. B. Polarons in high-temperature superconductors. In: Sov. Phys. Usp. 1992, vol. 35, nr. 5, pp. 345–383. ISSN 1063-7869, 1468-478

[25] ALEXANDROV, A.S. Superconducting Polarons and Bipolarons. In: Polarons in Advanced Materials. Springer Series in Materials Science. 2007, vol. 103, pp. 257–310. ISBN 978-1-4020-6347-3; 978-1-4020-6348-0.

[26] MOSKALENKO, V.A., ENTEL P., MARINARO, M., DIGOR, D.F. Strong interaction of correlated electrons with phonons: exchange of phonon clouds by polarons. In: Zh. Eksp. Teor. Fiz. 2003, vol. 124, nr. 3, pp. 700-713.; In: JETP, vol. 97, nr. 3, pp. 632-644. ISSN 0044-4510.

[27] ARMITAGE, N.P., FOURNIER, P., and GREENE, R.L. Progress and perspectives on electron-doped cuprates. In: Rev. Mod. Phys. 2010, vol. 82, nr. 3, pp. 2421-2487. ISSN 0034-6861 , 1539-0756

[28] ВАКАРУ, С.И., ВЛАДИМИР, М.И. МОСКАЛЕНКО, В.А. Диаграммная техника для Модели Хаббарда II. Переход металл–диэлектрик. In: ТМФ. 1990, vol. 85, nr. 2, pp. 248–257; ISSN 0564-6162, 2305-3135; VAKARU, S.I., VLADIMIR, M.I., MOSKALENKO, V.A. Diagram technique for the Hubbard model. II. Metal-insulator transition. In: Theoret. and Math. Phys. 1990, vol. 85, nr. 2, pp. 1185–1192. ISSN 0040-5779, 1573-9333.

[29] БОГОЛЮБОВ, Н.Н., МОСКАЛЕНКО, В.А. К вопросу о существовании сверхпроводимости в модели Хаббарда. ТМФ. In: 1991, vol. 86, nr. 1, pp. 16–30; ISSN 0564-6162, 2305-3135; BOGOLYUBOV, N.N., MOSKALENKO, V.A. On the existence of superconductivity in the Hubbard model. In: Theoret. and Math. Phys. 1991, vol. 86, nr. 1, pp. 10–19. ISSN 0040-5779, 1573-9333.

[30] БОГОЛЮБОВ, Н.Н., МОСКАЛЕНКО, В.А. Сверхпроводимость в модели Хаббарда с отклонением от половинного заполнения. In: ТМФ. 1992, vol. 92, nr. 2, pp. 182–190 ISSN 0564-6162, 2305-3135; Bogolyubov, N.N., Moskalenko, V.A. Superconductivity in the Hubbard model with deviation from half filling. In: Theoret. and Math. Phys. 1992, vol. 92, nr. 2, pp. 820–825. ISSN 0040-5779, 1573-9333

[31] MOSKALENKO, V.A., ENTEL, P., DOHOTARU, L.A., DIGOR, D.F., CITRO, R. Diagrammatic theory for Anderson impurity model Dubna. 2008, 36 p. (Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research).

[32] ЛАНГ, И.Г., ФИРСОВ, Ю.А. Кинетическая теория полупроводников с малой подвижностью. In: ЖЭТФ. 1962, vol. 43, nr. 11, pp. 1843–1860; LANG, I.G., FIRSOV, Y.A. Kinetic Theory of Semiconductors with Low Mobility. In: Zh. Eksper. Teor. Fiz. 1962, vol. 43, pp. 1843. ISSN 0044-4510.

[33] MOSKALENKO, V.A. Electron-phonon interaction of strong correlated systems. In: TMF. 1997, vol. 111, nr. 3, 439–451. ISSN 0564-6162, 2305-3135; In: Theoret. and Math. Phys. 1997, vol. 111, nr. 3, pp. 744–753. ISSN 0040-5779, 1573-9333.

[34] MOSKALENKO, V.A. Electron-phonon interaction of strongly correlated systems. II. Strong coupling limit. In: TMF. 1997, vol. 113, nr. 3, 432–437. ISSN 0564-6162, 2305-3135; Theoret. and Math. Phys. 1997, vol. 113, nr.3, pp. 1559–1563. ISSN 0040-5779, 1573-9333

[35] ИЗЮМОВ, Ю.А., СКРЯБИН, Ю.Н., Статистическая механика магнитоупорядоченных систем, Москва: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987, p. 264

АННОТАЦИЯ
к диссертации «Диаграммный анализ систем сильно коррелированных электронов, взаимодействующих между собой и с оптическими фононами», представленной Ириной Чеботарь на соискание ученой степени доктора физических наук по специальности 131.01 «Математическая физика», Кишинэу, 2024

Диссертация написана на русском языке и состоит из введения, 5 глав, заключения и рекомендаций, списка литературы из 152 источников. Диссертация содержит 143 страниц основного текста, 29 рисунков и 307 формул. Результаты диссертации опубликованы в 16 работах.

Ключевые слова: диаграммная техника, сильно коррелированные системы, теорема Вика, переход металл-диэлектрик Мотта, высокотемпературная сверхпроводимость, двукратно вырожденная модель Хаббарда, двукратно вырожденная модель Андерсона, модель Андерсона-Холстейна.

Цели диссертации: доказать свойство стационарности термодинамического потенциала модели Хаббарда; исследовать влияние как внутриорбитального, так и межорбитального корреляционного эффекта на электронные процессы орбитально вырожденных систем, а также роли сильного взаимодействия оптических фононов с электронами на свойства сильно коррелированных электронных систем.

Задачи диссертации: развить диаграммную технику для модели Хаббарда, двукратно вырожденных моделей Хаббарда и Андерсона, а так же Андерсона-Холстейна, с помощью которой получить соответствующие уравнения и динамические величины.

Научная новизна и оригинальность результатов. Было доказано свойство стационарности термодинамического потенциала модели Хабббарда. В рамках двукратно вырожденной модели показано, что в приближении Хаббарда-I случай половинного заполнения зоны, соответствует только диэлектрическому состоянию, а орбитально-вырожденная теория оказывается аналогичной орбитально невырожденной, если в последней заменить числовые функции Грина двухрядными матрицами, в которых диагональные элементы соответствуют межорбитальным переходам, а недиагональные – внутриорбитальным переходам. В рамках двукратно вырожденной модели Андерсона было показано, что при низких температурах, состояние системы может быть только металлическим, а межорбитальный корреляционный эффект дает положительный вклад в это металлическое состояние; были получены и проанализировали линейные уравнения для сверхпроводящих параметров порядка и сформулировано условие для реализации синглетной сверхпроводимости и определения критической температуры. С помощью диаграммной техники была проанализирована модель Андерсона-Холстейна, в рамках которой была исследована динамика фононных облаков. Показано, что коллективная мода фононных облаков в случае $T=0$ затухает по мере усиления гибридизации.

Полученные результаты, способствующие решению важной научной задачи, заключаются в обобщении диаграммной техники сильной связи Москаленко для анализа модели Хаббарда, двукратно вырожденных моделей Хаббарда и Андерсона, а так же Андерсона-Холстейна, что позволяет исследовать свойства сильно коррелированных материалов, в том числе с орбитальным вырождением электронных уровней и с сильной элекрон-фононой связью.

Теоретическая значимость и прикладная ценность. Диаграммный подход анализа сильно коррелированных систем и результаты, которые он позволяет получить представляет, как методологическую и фундаментальную, так и прикладную в перспективе ценность.

Внедрение научных результатов: исследования, представленные в этой диссертации, были успешно внедрены в рамках национального проекта (11.817.05.02F).

ADNOTARE

la teza „Analiza diagramatică a sistemelor cu electroni puternic corelaţi ce interacţionează între ei şi cu fononii optici”, elaborată de Irina Cebotari pentru conferirea gradului ştiinţific de Doctor în Ştiinţe Fizice doctor în ştiinţe fizice la Specialitatea 131.01”Fizică matematică”, Chişinău, 2024.

Teza este scrisă în limba rusă şi constă din introducere, 5 capitole, concluzii generale şi recomandări, bibliografie din 152 de titluri. Teza conţine 143 pagini de text de bază, 29 de figuri şi 307 de formule. Rezultatele tezei au fost publicate în 16 lucrări ştiinţifice.

Cuvinte cheie: tehnica diagramatică, sisteme puternic corelate, teorema lui Wick, tranziţie metal-izolator Mott, supraconductivitate la temperaturi înalte, modelul Hubbard dublu degenerat, modelul Anderson dublu degenerat, modelul Anderson-Holstein.

Scopul tezei: demonstrarea proprietăţii staţionarităţii faţă de operatorul de masă al potenţialului termodinamic al modelului Hubbard; studiul influenţei efectelor de corelaţie atât intraorbitale, cât şi interorbitale asupra proceselor electronice ale sistemelor orbital degenerate, precum şi, rolul interacţiunii puternice a fononilor optici cu electronii asupra proprietăţilor supraconductoare ale sistemelor electronice puternic corelate.

Obiectivele tezei: dezvoltarea tehnicii diagramatice pentru modelul Hubbard, modelele Hubbard şi Anderson dublu degenerate, precum şi Anderson-Holstein, cu ajutorul căreia să se obţină ecuaţiile şi mărimile dinamice corespunzătoare.

Noutatea ştiinţifică şi originalitatea rezultatelor: A fost demonstrată proprietatea de staţionaritate a potenţialului termodinamic al modelului Hubbard. În cadrul modelului dublu degenerat, se arată că în aproximarea Hubbard-I, cazul semi-ocupării benzii, doar starea dielectrică se observă, iar teoria orbital degenerată se dovedeşte a fi similară cu cea orbital nedegenerată, dacă în cel din urmă înlocuim funcţiile numerice ale lui Green cu matrici pătrate, în care elementele diagonale corespund tranziţiilor interorbitale, iar tranziţiile nediagonale – intra-orbitale. În cadrul modelului Anderson dublu degenerat, s-a demonstrat că la temperaturi scăzute, starea sistemului poate fi doar metalică, iar efectul de corelaţie interorbitală contribuie pozitiv la această stare metalică. Au fost obţinute şi analizate ecuaţii liniare pentru parametrii de ordine supraconductori şi a fost formulată o condiţie pentru realizarea supraconductivităţii singlet şi pentru determinarea temperaturii critice. Tehnica diagramatică a fost dezvoltată pentru modelul Anderson-Holstein, şi cu ajutorul acesteia a fost studiată dinamica norilor de fononi Se arată că modul colectiv al norilor de fononi în cazul lui $T=0$ se descompune odată cu creşterea parametrului de hibridizării.

Rezultatul obţinut care contribuie la soluţionarea unei probleme ştiinţifice importante constă în generalizarea tehnicii diagramatice a lui Moskalenko pentru analiza modelului Hubbard, modelelor Hubbard şi Anderson dublu degenerate, precum şi Anderson-Holstein, ceea ce îl face este posibil să se studieze proprietățile materialelor puternic corelate, inclusiv cele cu niveluri electronice de degenerare orbitală și cu cuplare puternică electron-fononică.

Semnificaţia teoretică şi valoarea aplicativă. Abordarea diagramatică a analizei sistemelor puternic corelate şi a rezultatelor pe care le permite să le obţină este atât de valoare fundamentală, metodologica cât şi aplicativă de perspectivă în viitor.

Implementarea rezultatelor ştiinţifice: cercetarea prezentată în această teză a fost implementată cu succes în cadrul unui proiect naţional (11.817.05.02F).

ABSTRACT

to the thesis "Diagram analysis of systems of strongly correlated electrons interacting with each other and with optical phonons", presented by Irina Chebotar for conferring the scientific degree of Ph.D. in Physics, Speciality 131.01"Mathematical Physics", Chişinau, 2024.

The thesis has been written in Russian and consists of Introduction, 5 chapters, general Conclusions and recommendations, List of 152 references. The thesis contains 143 pages of basic text, 29 figures and 307 formulae. The results presented in the thesis are published in 16 scientific papers.

Keywords: diagram technique, strongly correlated systems, Wick's theorem, Mott metal-insulator transition, high-temperature superconductivity, twofold-degenerate Hubbard model, twofold-degenerate Anderson model, Anderson-Holstein model.

The purpose of the Thethys: the proof of the property of stationarity of the thermodynamic potential of the Hubbard model; studying the influence of both intra-orbital and inter-orbital correlation effects on the electronic processes of orbitally degenerate systems, as well as the role of the strong interaction of optical phonons with electrons on the superconducting properties of strongly correlated electronic systems.

Research objectives: the development of the diagram technique for the Hubbard model, twofold-degenerate Hubbard and Anderson models, as well as Anderson-Holstein, obtaining the corresponding equations and dynamic quantities.

The scientific novelty and originality of the results: The stationarity property of the thermodynamic potential of the Hubbard model was proved. Within the framework of the twofold-degenerate model, it is shown that in the Hubbard-I approximation, the case of half-filling of the band corresponds only to the dielectric state, and the orbitally degenerate theory turns out to be similar to the orbitally nondegenerate one, if in the latter we replace the numerical Green's functions with two-row matrices, in which the diagonal elements correspond to the interorbital transitions, and off-diagonal – intra-orbital transitions. Within the framework of twofold-degenerate Anderson model, it was shown that at low temperatures, the state of the system can only be metallic, and the interorbital correlation effect makes a positive contribution to this metallic state; linear equations for superconducting order parameters were obtained and analyzed, and a condition was formulated for the realization of singlet superconductivity and for determining the critical temperature. The diagram technique was developed for the Anderson-Holstein model, and the dynamics of polaron phonon clouds was studied using it. It is shown that the collective mode of phonon clouds in the case of $T=0$ decays with increasing hybridization.

The obtained result that contributes to the solution of an important scientific problem consists in the generalization of Moskalenko's diagrammatic technique for the analysis of the Hubbard model, the two-fold degenerate Hubbard and Anderson models, as well as Anderson-Holstein, which allows us to study the properties of strongly correlated materials, including those with orbital degeneracy of electron levels and with strong electron-phonon coupling.

Theoretical significance and applied value. The diagrammatic approach to the analysis of strongly correlated systems and the results that it allows to obtain is of fundamental, methodological and applied value in the future.

Implementation of scientific results: the research presented in this thesis was successfully implemented within the framework of a national project (11.817.05.02F).

CEBOTARI IRINA

ANALIZA DIAGRAMATICA A SISTEMELOR ELECTRONILOR PUTERNIC CORELAŢI, CARE INTERACŢIONEAZA ÎNTRE EI ŞI CU FONONII OPTICI

131.01 – FIZICA MATEMATICĂ

Rezumatul tezei de doctor în ştiinţe fizice

Aprobat spre tipar: 8.11.2024	Formatul hârtiei 60x84 1/16
Hârtie ofset. Tipar ofset.	Tiraj 25 ex.
Coli de tipar: 2.1	Comanda nr. 144/24

Centrul Editorial-Poligrafic al U.S.M.,
str. A. Mateevici 60, MD-2009, Chișinău