Annalen der Physik. 7. Folge, Band 40, Heft 6, 1983, S. 347–351 J. A. Barth, Leipzig

Über analytische Eigenschaften der Einteilchengreenfunktionen in einem Zwei-Band-Modell

Von R. SCHUMANN und K. ELK

Wissenschaftsbereich Physik der Hochschule für Verkehrswesen „Friedrich List" Dresden

Inhaltsübersicht. Im Zusammenhang mit Integralen über Lorentz-verteilte stochastische Parameter in der Ein-Zentren-Streumatrix werden deren analytische Eigenschaften diskutiert. Dazu werden optische Theoreme für die Greenschen Einteilchenfunktionen in einem Zwei-Band-Modell hergeleitet.

On Analytical Properties of One-Particle-Greenfunctions within a Two-band-model

Abstract. In connection with integrals on Lorentz-like distributed stochastical parameters within the atomic scattering matrix its analytical properties are discussed. For this optical theorems for One-Particle-Greenfunctions within a two-band-model are deduced.

Einleitung

Um den Einfluß der Phononen auf Elektronensysteme zu untersuchen, führten CHEN, WEISZ und SHER [1] ein stochastisch fluktuierendes Potential in den Einbandhamiltonian ein. Bei der Untersuchung des periodischen Anderson Modells (PAM), welches allgemein als einfache Beschreibung für Mixed-Valence-System akzeptiert wird, kann man die Phononen ebenfalls in dieser einfachen Weise ins Modell einbeziehen, indem der Anderson-Hamiltonian H_{PAM} durch den Term H_{CWS}, der die durch die Phononen bewirkte stochastischen Potentialdeformationen erfaßt, erweitert wird:

$$H = H_{PAM} + H_{CWS} \tag{1}$$

mit

$$\begin{aligned} H_{PAM} = {} & \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k}\, d_{k\sigma}^{+} d_{k\sigma} + \sum_{i\sigma} E_0 f_{i\sigma}^{+} f_{i\sigma} + \sum_{i\sigma} \frac{U}{2} f_{i\sigma}^{+} f_{i\sigma} f_{i-\sigma}^{+} f_{i-\sigma} \\ & + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{ik\sigma} (e^{ikR_i}\, d_{k\sigma}^{+} f_{i\sigma} + \text{h.c.}) \end{aligned} \tag{2}$$

und

$$H_{CWS} = \sum_{i\sigma} \Theta_i f_{i\sigma}^{+} f_{i\sigma}, \tag{3}$$

wobei hier angenommen wird, daß die phononeninduzierten Potentialfluktuationen Θ_i nur die f-Elektronen beeinflussen. (Eine Erweiterung auf d-Elektronen würde am Prinzip der folgenden Überlegungen nichts ändern.) Indem man die Legierungsanalogie [2–4] zur Näherung heranzieht, ersetzt man den Wechselwirkungsterm durch eine Streuung der f-Elektronen an dem spinabhängigen Potential $U_{i\sigma}$ gemäß

$$\sum_{i\sigma} \frac{U}{2} f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} f_{i-\sigma}^+ f_{i-\sigma} \approx \sum_{i\sigma} U_{i\sigma} f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma}, \tag{4}$$

wobei $U_{i\sigma}$ die beiden Werte U und O mit der Wahrscheinlichkeit $n_{-\sigma}^f$ und $(1 - n_{-\sigma}^f)$ annimmt.

Das so verbleibende Zweibandsystem wird mit einer verallgemeinerten CPA behandelt, das heißt man arbeitet mit dem effektiven Hamiltonian [4, 5]

$$H_{CPA} = \sum_{k\sigma} [\varepsilon_k d_{k\sigma}^+ d_{k\sigma} + W_\sigma f_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} + V(d_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} + f_{k\sigma}^+ d_{k\sigma})], \tag{5}$$

in welchem das kohärente Potential W_σ aus der Bedingung bestimmt wird, daß die mittlere Streuung an den Potentialdifferenzen zwischen W_σ und den stochastischen Potentialen $(E_0 + U_{i\sigma} + \Theta_i)$ verschwindet, d.h. W_σ genügt der Gleichung [6]

$$\bar{\tau}_{i\sigma} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\Theta\, P(\Theta) \left[n_{-\sigma}^f \frac{E_0 + U + \Theta - W_\sigma}{1 - (E_0 + U + \Theta - W_\sigma)\, G_\sigma^{ff}(\omega)} \right.$$
$$\left. + (1 - n_{-\sigma}^f) \frac{E_0 + \Theta - W_\sigma}{1 - (E_0 + U + \Theta - W_\sigma)\, G_\sigma^{ff}(\omega)} \right] = 0. \tag{6}$$

CHEN, WEISZ und SHER konnten ausgehend vom Fröhlichhamiltonian zeigen, daß die stochastischen Potentiale einer Gaußverteilung genügen [1]. Da für qualitative Untersuchungen die genaue Form der Verteilung unwesentlich ist (solange die Bandbreite w^d groß gegen die Verteilungsbreite ist und der Schwerpunkt der Potentialverteilung E_0 in der Bandmitte liegt), schlugen RICHTER und SCHILLER [7] vor, eine Lorentzverteilung zu verwenden, d.h.

$$P(\Theta) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{\Delta^2 + \Theta^2}. \tag{7}$$

Damit läßt sich die Integration (6) umschreiben in

$$0 = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Theta \left(\frac{1}{\Theta + i\Delta} - \frac{1}{\Theta - i\Delta} \right) F(\Theta), \tag{8}$$

wobei $F(\Theta)$ für die eckige Klammer in (6) steht.

Das Integral längs der reellen Achse läßt sich jetzt in der unteren Halbebene schließen und durch Anwendung des Residuensatzes analytisch lösen, wenn die Funktion $F(\Theta)$ in der unteren Halbebene analytisch ist. Für das Einbandmodell hat das LLOYD [6] gezeigt. Hier soll der Beweis für das Zwei-Band-System des PAM geführt werden.

Optisches Theorem für die Einteilchengreenfunktion G_{eff}^{dd} und G_{eff}^{ff} im PAM

Zunächst sollen die optischen Theoreme für die effektiven Einteilchengreenfunktionen $G_{\text{eff}}^{dd} = G_{ii}^{dd}$ und $G_{\text{eff}}^{ff} = G_{ii}^{ff}$ hergeleitet werden. Dazu werden zunächst die Bewegungsgleichungen mit dem effektiven Hamiltonian H_{CPA} (5) in der ω-Darstellung aufgeschrieben:

$$\omega G_{ij}^{dd} = \delta_{ij} + \sum_l t_{il} G_{lj}^{dd} + V G_{ij}^{fd} \tag{9}$$

und

$$(\omega - W_\sigma)\, G_{ij}^{fd} = V G_{ij}^{dd}. \tag{10}$$

Multipliziert man (9) mit $(\omega - W_\sigma)$ und ersetzt dann G_{ij}^{fd} mit Hilfe von (10), so ergibt sich

$$(\omega - W_\sigma)\,\omega G_{ij}^{dd} = (\omega - W_\sigma)\left(\delta_{ij} + \sum_l t_{il} G_{lj}^{dd}\right) + V^2 G_{ij}^{dd}. \tag{11}$$

Multipliziert man Gleichung (11) mit G_{ij}^{dd*} und summiert über i, so erhält man

$$G_{jj}^{dd*} = \left(\omega - \frac{V^2}{\omega - W_\sigma}\right) \sum_i |G_{ij}^{dd}|^2 - \sum_{il} t_{il} G_{lj}^{dd} G_{ij}^{dd}. \tag{12}$$

Mit der Annahme hermitescher Hopping-Integrale $t_{il} = t_{li}^*$ [6] folgt wegen

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \sum_{il} t_{il} G_{lj}^{dd} G_{ij}^{dd} &= \sum_{il} \operatorname{Im}\left(\frac{1}{2} t_{il} G_{lj}^{dd} G_{ij}^{dd} + \frac{1}{2} t_{li} G_{ij}^{dd} G_{lj}^{dd}\right) \\ &= \sum_{il} \frac{1}{2} \operatorname{Im}\,[t_{il} G_{lj}^{dd} G_{ij}^{dd} + (t_{il} G_{lj}^{dd} G_{ij}^{dd})^*] = 0 \end{aligned} \tag{13}$$

das „optische Theorem" für die d-Elektronen:

$$-\operatorname{Im} G_{jj}^{dd} = \operatorname{Im}\left(\omega - \frac{V^2}{\omega - W_\sigma}\right) \sum_i |G_{ij}^{dd}|^2. \tag{14}$$

Nunmehr soll die entsprechende Gleichung für die f-Elektronen hergeleitet werden. Wieder geht man von der Bewegungsgleichung aus:

$$(\omega - W_\sigma)\, G_{ij}^{ff} = \delta_{ij} + V G_{ij}^{df}. \tag{15}$$

Multiplizieren der Gleichung (15) mit G_{ij}^{ff*} und summieren über i führt zu

$$G_{jj}^{ff*} = (\omega - W_\sigma) \sum_i |G_{ij}^{ff}|^2 - V \sum_i G_{ij}^{df} G_{ij}^{ff}. \tag{16}$$

Der letzte Term von (16) läßt sich umformen in

$$\sum_i G_{ij}^{df} G_{ij}^{ff*} = \sum_i (\omega - W_\sigma)^* G_{ij}^{ff*} \frac{G_{ij}^{df}}{(\omega - W_\sigma)^*}. \tag{17}$$

Mit der konjugiert komplexen Gleichung (15) ergibt dies

$$\sum_i G_{ij}^{df} G_{ij}^{ff*} = \sum_i \frac{1}{(\omega - W_\sigma)^*} (\delta_{ij} + V G_{ij}^{df*})\, G_{ij}^{df}. \tag{18}$$

Einsetzen von (18) in (16) führt zu

$$\begin{aligned} G_{ij}^{ff*} &= (\omega - W_\sigma) \sum_i |G_{ij}^{ff}|^2 - \frac{V}{(\omega - W_\sigma)^*} G_{jj}^{df} \\ &\quad - \frac{V^2}{(\omega - W_\sigma)^*} \sum_i |G_{ij}^{df}|^2. \end{aligned} \tag{19}$$

Wegen

$$G_{jj}^{df} = G_{jj}^{fd} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{V}{(\omega - \varepsilon_k)(\omega - W_\sigma) - V^2} \tag{20}$$

und Gleichung (10) folgt

$$\begin{aligned} -\operatorname{Im} G_{jj}^{ff} &= \operatorname{Im}\,(\omega - W_\sigma) \sum_i |G_{ij}^{ff}|^2 - \frac{V^2}{|\omega - W_\sigma|^2} \operatorname{Im} G_{jj}^{dd} \\ &\quad - \frac{V^2}{|\omega - W_\sigma|^2} \operatorname{Im}\,(\omega - W_\sigma) \sum_i |G_{ij}^{df}|^2. \end{aligned} \tag{21}$$

Ersetzt man Im G_{jj}^{dd} durch Gleichung (14), so ergibt sich

$$\begin{aligned}-\mathrm{Im}\, G_{jj}^{ff} &= \mathrm{Im}\,(\omega - W_\sigma) \sum_i |G_{ij}^{ff}|^2 \\ &+ \frac{V^2}{|\omega - W_\sigma|^2} \mathrm{Im}\left(\omega - \frac{V^2}{\omega - W_\sigma}\right) \sum_i G_{ij}^{dd} \\ &- \frac{V^2}{|\omega - W_\sigma|^2} \mathrm{Im}\,(\omega - W_\sigma) \sum_i |G_{ij}^{df}|^2 .\end{aligned} \tag{22}$$

Der letzte Term läßt sich wiederum mit der Bewegungsgleichung (10) ersetzen, und es verbleibt

$$\begin{aligned}-\mathrm{Im}\, G_{jj}^{ff} &= \mathrm{Im}\,(\omega - W_\sigma) \sum_i |G_{ij}^{ff}|^2 \\ &+ \frac{V^2}{|\omega - W_\sigma|^2} \mathrm{Im}\left(\omega - \frac{V^2}{\omega - W_\sigma}\right) \sum_i |G_{ii}^{dd}|^2 \\ &- \frac{V^4}{|\omega - W_\sigma|^4} \mathrm{Im}\,(\omega - W_\sigma) \sum_i |G_{ij}^{dd}|^2 .\end{aligned} \tag{23}$$

Durch einfache Umformungen, wobei sich einige Terme wegheben, gelangt man zu

$$-\mathrm{Im}\, G_{jj}^{ff} = \mathrm{Im}\,(\omega - W_\sigma) \sum_i |G_{ij}^{ff}|^2 + \frac{V^2}{|\omega - W_\sigma|^2} \mathrm{Im}\,\omega \sum_i |G_{ij}^{dd}|^2 . \tag{24}$$

Das ist das optische Theorem für die f-Elektronen.

Polstellen von F(Θ)

Mit (14) und (24) sind die Mittel bereitgestellt, die Lage das Polstellen von $F(\Theta)$ zu diskutieren. Pole treten nach (6) auf bei

$$\Theta_1 = \frac{1}{G_{ii}^{ff}(\omega)} - E_0 - U + W_\sigma , \tag{25}$$

$$\Theta_2 = \frac{1}{G_{ii}^{ff}(\omega)} - E_0 + W_\sigma . \tag{26}$$

Der Imaginärteil beider Pole ist also gegeben durch

$$\mathrm{Im}\, \Theta_{1,2} = \mathrm{Im}\left(W_\sigma + \frac{1}{G_{ii}^{ff}}\right) = \mathrm{Im}\, W_\sigma - \frac{\mathrm{Im}\, G_{ij}^{ff}}{|G_{ii}^{ff}|^2} . \tag{27}$$

Wendet man jetzt Gleichung (24) an, so erhält man

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\, \Theta_{1,2} &= \mathrm{Im}\, W_\sigma + \mathrm{Im}\,(\omega - W_\sigma) \sum_i \frac{|G_{ii}^{ff}|^2}{|G_{jj}^{ff}|^2} \\ &+ \mathrm{Im}\,\omega \frac{V^2}{|\omega - W_\sigma|^2} \sum_i \frac{|G_{ij}^{dd}|^2}{|G_{jj}^{ff}|^2} .\end{aligned} \tag{28}$$

Nach einigen Umformungen ergibt sich

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\, \Theta_{1,2} &= \mathrm{Im}\,\omega \left(1 + \frac{V^2}{|\omega - W_\sigma|^2} \sum_i \frac{|G_{ij}^{dd}|^2}{|G_{jj}^{ff}|^2}\right) \\ &+ \mathrm{Im}\,(\omega - W_\sigma) \sum_{i \neq j} \frac{|G_{ii}^{ff}|^2}{|G_{jj}^{ff}|^2} .\end{aligned} \tag{29}$$

Da alle physikalisch relevanten Größen aus den hier benutzten retardierten Greenschen Funktionen mittels $\omega \to \omega + i\,\delta$, $\delta \gtrsim 0$ berechnet werden, gilt $\mathrm{Im}\,\omega > 0$. Der Imaginärteil von W_σ besitzt die Eigenschaft $\mathrm{Im}\,W_\sigma < 0$ [8] ($\mathrm{Im}\,W_\sigma$ beschreibt die effektive Dämpfung). Da die Faktoren neben $\mathrm{Im}\,\omega$ bzw. $\mathrm{Im}\,(\omega - W_\sigma)$ positiv definit sind, gilt immer

$$\mathrm{Im}\,\Theta_{1,2} > 0, \tag{30}$$

und die Funktion $F(\Theta)$ ist somit in der unteren Halbebene analytisch. Das Integral (8) wird deshalb wie oben behauptet allein durch den Pol der Lorentzverteilung bei $(-i\,\Delta)$ bestimmt. Die CPA-Gleichung gewinnt damit die einfache Gestalt

$$0 = F(-i\,\Delta), \tag{31}$$

was in [9] und [10] benutzt wurde.

Literaturverzeichnis

[1] Chen, A.-B.; Weisz, G.; Sher, A.: Phys. Rev. **B 5** (1972) 2897.
[2] Hubbard, J.: Proc. Roy. Soc. **A 281** (1964) 401.
[3] Elk, K.: phys. stat. sol. (b) **105** (1981) 507.
[4] Czycholl, G.; Leder, H. J.: Z. Phys. **B 44** (1981) 59.
[5] Elk, K.; Richter, J.; Christoph, V.: J. Phys. **F 9** (1979) 307.
[6] Lloyd, P.: J. Phys. **C 2** (1969) 1717.
[7] Richter, J.; Schiller, W.: phys. stat. sol. (b) **92** (1979) 511.
[8] Soven, P. A.: Phys. Rev. **156** (1967) 809.
[9] Elk, K.: phys. stat. sol. (b) **112** (1982) 659.
[10] Schumann, R.: phys. stat. sol. (b) **120** (1983) K 183.

Bei der Redaktion eingegangen am 12. Oktober 1983.

Anschr. d. Verf.: Dipl.-Phys. Rolf Schumann, Prof. Dr. sc. nat. Klaus Elk
Wissenschaftsbereich Physik der
Hochschule für Verkehrswesen „Friedrich List"
DDR-8072 Dresden, PSF 103