Письма в ЖЭТФ, том 55, вып.9, стр.512 - 515 10 мая 1992 г.

КОНКУРЕНЦИЯ ЭФФЕКТА КОНДО И МАГНИТНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ В АСИМПТОТИЧЕСКИ ТОЧНО РЕШАЕМОЙ МОДЕЛИ

А.В.Гольцев

Физико-технический институт им.А.Ф.Иоффе РАН

194021, Санкт-Петербург

Поступила в редакцию 3 февраля 1992 г.

Предлагается модель, которая в пределе большой кратности вырождения является точно решаемой, и в которой возможен как кондо-эффект, так и переход в магнитоупорядоченное состояние. Рассмотрена конкуренция эффекта Кондо и ферромагнитного упорядочения локализованных моментов.

Одной из интереснейших особенностей тяжело-фермионных соединений на основе Ce и U является конкуренция между эффектом Кондо и магнитным упорядочением [1,2]. Несмотря на широкое теоретическое изучение (см., например, последние работы и ссылки в них [2-4]), эта проблема остается нерешенной.

В настоящей работе мы предлагаем модель, описывающую взаимодействие электронов проводимости с локализованными моментами и имеющую следующие важные особенности: 1) в пределе большой кратности вырождения, $N \to \infty$, теория среднего поля дает точное решение; 2) в рамках этого точного решения возможен переход как в кондо-, так и в магнитоупорядоченное состояние; 3) тип магнитоупорядоченного состояния определяется величиной волнового вектора, при котором затравочная магнитная восприимчивость газа электронов проводимости имеет максимальное значение. Это определяется заданием зонной структуры, топологией поверхности Ферми и распределением локализованных моментов по решетке остова.

В настоящей работе мы приводим результаты изучения конкуренции эффекта Кондо, ведущего к формированию тяжело-фермионного состояния, и ферромагнитного упорядочения локализованных моментов. При том конкретном задании параметров модели (см. ниже) мы получили, что при температуре Кондо T_K большей, чем температура ферромагнитного упорядочения T_m, возникновение кондовской экранировки локализованных моментов подавляет ферромагнитный переход. При обратном соотношении $T_K < T_m$ появление спонтанного магнитного момента подавляет эффект Кондо.

Следует также отметить, что предлагаемая модель дает регулярный способ построения теории возмущения по обратной величине кратности вырождения ($1/N$-разложение). В пределе $N = 2$ модель эквивалентна модели Кондо с анизотропным взаимодействием.

Будем изучать систему, описываемую гамильтонианом

$$H = \sum_{m,\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} c^+_{m\vec{k}} c_{m\vec{k}} - \frac{J}{2N} \sum_{\alpha,m,m'} \{c_{m'\alpha} f^+_{m'\alpha} f_{m\alpha} c^+_{m\alpha} + f_{m\alpha} c^+_{m\alpha} c_{m'\alpha} f^+_{m'\alpha}\} + J_1 N^{-1} \sum_{\alpha} S^z_\alpha s^z_\alpha. \tag{1}$$

Здесь $c^+_{m\vec{k}}$, $c_{m\vec{k}}$ – операторы рождения и уничтожения электронов проводимости с волновым вектором $\vec{k}$ и орбитальным квантовым числом m, принимающим значения $-j \le m \le j$, кратность вырождения $N = 2j + 1$; $f^+_{m\alpha}$, $f_{m\alpha}$ – операторы рождения и уничтожения локализованных электронов в точках с координатами $\vec{R}_\alpha$. Спиновые операторы S^z и s^z мы определяем в виде

$$S^z_\alpha = \frac{1}{N}\sum_m m f^+_{m\alpha} f_{m\alpha}, \quad s^z_\alpha = \frac{1}{N}\sum_m m c^+_{m\alpha} c_{m\alpha}. \tag{2}$$

Число f-электронов в точках $\vec{R}_\alpha$ фиксируется условием

$$\sum_m f^+_{m\alpha} f_{m\alpha} = q_0 N. \tag{3}$$

При $J_1 = 0$ и $J > 0$ гамильтониан (1) равен гамильтониану Кокблина–Шриффера [6], который широко используется для описания термодинамических и кинетических свойств тяжело-фермионных соединений [7–9]. Используя коммутационные свойства фермиевских операторов, можно показать что при $N = 2$, то есть для спинов $j = 1/2$, гамильтониан (1) равен анизотропному гамильтониану Кондо

$$H = \sum_{m,\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} c^+_{m\vec{k}} c_{m\vec{k}} + \frac{1}{4}\sum_\alpha (J_z \hat{\tau}^z_{c\alpha}\hat{\tau}^z_{f\alpha} + J\hat{\tau}^x_{c\alpha}\hat{\tau}^x_{f\alpha} + J\hat{\tau}^y_{c\alpha}\hat{\tau}^y_{f\alpha}), \tag{4}$$

где $\hat{\tau}^\mu_{c\alpha} = \Sigma c^+_{m\alpha}\tau^\mu_{mm'} c_{m'\alpha}$, $\hat{\tau}^\mu_{f\alpha} = \Sigma f^+_{m\alpha}\tau^\mu_{mm'} f_{m'\alpha}$, τ^μ – матрицы Паули. Константа обменного взаимодействия $J_z = J + J_1/8$. Таким образом изотропному случаю соответствует $J_1 = 0$. В дальнейшем для определенности полагаем $J,\ J_1 > 0$.

В рамках температурной техники Мацубары статистическую сумму модели (1) с условием (3) можно представить в виде функционального интеграла по грассмановым полям c^+, c, f^+, f и бозевским полям b^*, b, ψ^*, ψ, λ:

$$Z = \int D(c^+ c f^+ f b^* b \psi^* \psi \lambda) \exp(-\int_o^\beta d\tau \mathcal{Z}(\tau)), \tag{5}$$

$$\mathcal{Z}(\tau) = \sum_{m\vec{k}} c^+_{m\vec{k}}(\partial_\tau + \epsilon_{\vec{k}} - \mu)c_{m\vec{k}} + \sum_{m\alpha} f^+_{m\alpha}\partial_\tau f_{m\alpha} + N\sum_\alpha (J^{-1} b^*_\alpha b_\alpha + J_1 \psi^*_\alpha \psi_\alpha) -$$

$$- \sum_{m\alpha}(b^*_\alpha f^+_{m\alpha} c_{m\alpha} + b_\alpha c^+_{m\alpha} f_{m\alpha}) + J_1 \sum_\alpha (\psi^*_\alpha s^z_\alpha - \psi_\alpha S^z_\alpha) + i\sum_{\alpha m} \lambda_\alpha (f^+_{m\alpha} f_{m\alpha} - q_0 + \frac{1}{2}). \tag{6}$$

При $N \gg 1$ интегрирование по бозевским полям можно выполнить, используя метод перевала. В перевальной точке полагаем

$$b_\alpha(\tau) = b^*_\alpha(\tau) = b_\alpha, \quad J_1\psi_\alpha(\tau) = h_\alpha, \quad \psi^*_\alpha(\tau) = M_\alpha, \quad i\lambda_\alpha(\tau) = \epsilon_{f\alpha} - \mu. \tag{7}$$

Физический смысл этих параметров следующий: b_α определяет эффективный параметр гибридизации c- и f-электронов в точке α; h_α – локальное спонтанное магнитное поле, действующее на локальный момент в точке α; M_α есть величина спонтанного момента ($M_\alpha = \langle S^z \rangle / N$); $\epsilon_{f\alpha}$ определяет эффективное положение вырожденного f-уровня. В результате для свободной энергии получим

$$\mathcal{F}_{MF} = N\sum_\alpha (J^{-1} b^2_\alpha + h_\alpha M_\alpha - (q_0 - \frac{1}{2})(\epsilon_{f\alpha} - \mu)) + \Phi[\epsilon_\alpha, b_\alpha, h_\alpha, M_\alpha], \tag{8}$$

$$\Phi[\epsilon_\alpha, b_\alpha, h_\alpha, M_\alpha] = -T\ln \int D(c^+ c f^+ f) \exp\{\sum_{\omega m\vec{k}} (i\omega - \epsilon_{\vec{k}} +$$

$$+\mu) c^+_{m\vec{k}}(\omega) c_{m\vec{k}}(\omega) + \sum_{\omega m\alpha} [(i\omega - \epsilon_{f\alpha} + \mu + \frac{m}{N} h_\alpha) f^+_{m\alpha} f_{m\alpha} - \tag{9}$$

$$-\frac{m}{N}J_1M_\alpha c^+_{m\alpha}(\omega)c_{m\alpha}(\omega)+b_\alpha(f^+_{m\alpha}(\omega)c_{m\alpha}(\omega)+c^+_{m\alpha}(\omega)f_{m\alpha}(\omega))]\}.$$

Функциональный интеграл (9) является гауссовым и легко вычисляется, если структура основного состояния определена. Значения величин $\epsilon_{f\alpha}$, b_α, h_α, и M_α определяются из решения системы уравнений

$$\frac{\partial \mathcal{F}_{MF}}{\partial \epsilon_{f\alpha}}=\frac{\partial \mathcal{F}_{MF}}{\partial b_\alpha}=\frac{\partial \mathcal{F}_{MF}}{\partial h_\alpha}=\frac{\partial \mathcal{F}_{MF}}{\partial M_\alpha}. \tag{10}$$

Чтобы определить тип магнитного упорядочения рассмотрим статические магнитные восприимчивости подрешетки локализованных моментов и газа электронов проводимости. Для этого необходимо найти следующие корреляционные функции

$$\chi_{f\alpha\beta}=\frac{T}{N}\langle S^z_\alpha(\omega_n=0)S^z_\alpha(\omega_n=0)\rangle,\quad \chi_{c\alpha\beta}=\frac{T}{N}\langle s^z_\alpha(\omega_n=0)s^z_\beta(\omega_n=0)\rangle, \tag{11}$$

которые связаны с магнитной восприимчивостью простым соотношением: $\chi^{zz}_{\alpha\beta}=g^2\mu_B^2\chi_{\alpha\beta}$. Точное суммирование ряда теории возмущения в ведущем порядке по $1/N$ дает для области температур $T>T_m$, T_K

$$\chi_f(\vec q)=\frac{\chi^0_f}{1-J_1^2\chi^0_f\chi^0_c(\vec q)},\quad \chi_c(\vec q)=\frac{\chi^0_c(\vec q)}{1-J_1^2\chi^0_f\chi^0_c(\vec q)},\quad \chi^0_c(\vec q)=\sum_\alpha \exp(i\vec q\vec R_\alpha)\chi^0_c(R_\alpha), \tag{12}$$

где $g^2\mu_B^2\chi^0_f$ – восприимчивость свободного локального момента ($\chi^0_f=j(j+1)q_0(1-q_0)/3N^2T$); $g^2\mu_B^2\chi^0_c(\vec R)$ – затравочная (без учета взаимодействия с f-электронами) восприимчивость газа электронов проводимости. Суммирование в (12) ведется по всем узлам подрешетки $\vec R_\alpha$ f-электронов, $\vec q$ – волновой вектор в этой подрешетке. Из (12) следует, что температура магнитного перехода T_m при $T_m>T_k$ определяется из уравнения

$$J_1^2\chi^0_f\max\chi^0_c(\vec q)=1. \tag{13}$$

Величина $\vec q_m$, при которой $\chi^0_c(\vec q)$ имеет максимум, определяет структуру магнитоупорядоченной фазы. Так $q_m=0$ соответствует переходу в ферромагнитное состояние. Зависимость χ^0_c от q определяется зонной структурой остова, топологией поверхности Ферми и параметрами подрешетки локализованных моментов (см. например [10–12]). Согласно (12) магнитный фазовый переход в модели (1) обусловлен усилением особенностей магнитной восприимчивости газа электронов проводимости из-за обменного взаимодействия с локализованными моментами.

Рассмотрим теперь простейший случай, когда плотность состояний ρ_F в зоне проводимости почти константа, f- и c-подрешетки совпадают и восприимчивость χ^0_c газа c-электронов имеет стандартный вид с максимумом при $q_m=0$. В этом случае в системе возможен ферромагнитный переход. Температура перехода легко находится из (13):

$$T_m=\left[\frac{j(j+1)}{3N^2}\right]^2 J_1^2\rho_F q_0(1-q_0). \tag{14}$$

Зависимость спонтанного момента $M(T)$ и $h(T)$ определяется из системы (10), которая при $M_\alpha=M$, $h_\alpha=h$, $\epsilon_{f\alpha}=\epsilon_f$, $b_\alpha=0$ имеет вид:

$$q_0=\frac{1}{N}\sum_m n(\epsilon_f-mh/N),\quad M=\frac{1}{N}\sum_m\frac{m}{N}n(\epsilon_f-mh/N), \tag{15}$$

$$h = (J_1/N\mathcal{N}) \sum_{m\vec{k}} \frac{m}{N} n(\epsilon_{\vec{k}} - mJ_1M/N),$$

где $n(\epsilon) = [\exp((\epsilon - \mu)/T) + 1]^{-1}$, $\mathcal{N}$ – число элементарных ячеек.

Для определения температуры перехода в когерентное состояние Кондо ищем решение уравнений (10) при $M_\alpha = h_\alpha = 0$, $b_\alpha = b \neq 0$, $\epsilon_{f\alpha} = \epsilon_f$. Уравнения для b и ϵ_f имеют стандартный для модели Кокблина–Шриффера вид [7,9]. Для наполовину заполненной зоны проводимости и $q_0 = 1/2$, то есть f-уровень заполнен почти на половину, также, имеем

$$T_K = \mu \exp(-1/J\rho_F - 0,126). \tag{16}$$

Рассмотрим теперь проблему конкуренции эффекта Кондо и ферромагнетизма. Согласно (14) и (16), меняя J и J_1, мы можем получить произвольные соотношения между T_m и T_K. Рассмотрим сначала случай $T_m > T_K$. Тогда при $T < T_m$ возникает спонтанное поле $h(T)$. Хорошо известно, что когерентное состояние Кондо разрушается, если поле, действующее на локализованный момент, превышает критическое поле $h_K(T)$. Отсюда ясно, что при $h(T) > h_K(T)$ переход в когерентное состояние Кондо в области $T < T_m$ становится невозможным. В случае половинного заполнения мы получили: $h_K(T) = 7,5 T_K \ln^{1/2}(T_K/T)$ и $h(T) \simeq 8,9 T_m (1 - T/T_m)^{1/2}$. Отсюда следует, что если $T_m > T_K$, но T_m и T_K близки, поле $h(T)$ нарастает быстрее, чем $h_K(T)$, что означает подавление эффекта Кондо из-за ферромагнетизма.

При $T_K > T_m$ сначала происходит переход в когерентное состояние Кондо с эффективной гибридизацией $b(T) \simeq \left[(T\mu/2q_0(1-q_0)) \ln \frac{T_K}{T}\right]^{1/2}$ для T вблизи T_K. Анализ стабильности состояния Кондо относительно магнитных флуктуаций показывает, что в обсуждаемом частном случае выбора зоны ϵ_K и половинного заполнения возникновение $b \neq 0$ подавляет переход в ферромагнитное состояние. Таким образом при $T_K > T_m$ полная магнитная восприимчивость ведет себя следующим образом. При понижении температуры до $T = T_K$ восприимчивость растет как $\chi^{zz} = C/(T - T_m)$. При $T = T_K$ восприимчивость имеет излом и начинает падать с понижением температуры, достигая конечной, но большой величины C/T_0, где $T_0 \sim T_K$.

В заключение еще раз отметим, что результаты модели (1) чувствительны к выбору зонной структуры остова и подрешетки локализованных моментов. Поэтому для анализа экспериментальных данных в рамках модели (1) необходимо использовать соответствующие структуры зон. В частности очень важно исследовать поведение магнитной восприимчивости $\chi_c^0(\vec{q})$ газа электронов проводимости, что является важным для определения структуры магнитоупорядоченной фазы.

---

1. Proc. Int. Conf. on Magnetism (Paris, 1988), J.Phys. Coll. **49**, C8 (1988).
2. Proc. 6-th Int. Conf. on Valence Fluctuation, Phys. B **171** (1991).
3. B.A.Jones, C.M.Varma, and J.W.Wilkins, Phys. Rev. Lett. **61**, 125 (1988).
4. S.Doniach, Phys. Rev. B **35**, 1814 (1987).
5. V.Yu.Irkhin, and M.I.Katsnelson, J. Phys.: Cond. Mat. **2**, 8715 (1990).
6. B.Coqblin, and J.R.Schrieffer, Phys.Pev. **185**, 847 (1969).
7. D.M.Newns, and N.Read, Adv. Phys. **36**, 799 (1987).
8. A.Auerbach, and K.Levin, Phys. Rev. Lett. **57**, 877 (1986).
9. V.I.Belitsky, and A.V.Goltsev, Phys. B **172**, 459 (1991).
10. В.С.Вонсовский, Магнетизм, М.: Наука, 1971, 592.
11. Р.Уайт, Квантовая теория магнетизма. М.: Мир, 1985, 147.
12. Н.И.Куликов, В.В.Тугушев, УФН **144**, 643 (1984).