Письма в ЖЭТФ, том 35, вып. 2, стр. 77 – 81 *20 января 1982 г.*

РЕШЕНИЕ СИММЕТРИЧНОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА ПРИ $T = 0$.

П.Б.Вигман, В.М.Филев, А,М.Цвелик

На основе точного решения модели Андерсона, описывающей формирование локализованных магнитных моментов в металле, в симметричном случае вычислена примесная часть магнитной восприимчивости как функция произвольного магнитного поля.

1. Формирование локализованного момента в металле принято изучать на основе модели Андерсона I :

$$\mathcal{H}_A = \sum_{k,\sigma=\uparrow\downarrow} \epsilon_k c^+_{k\sigma} c_{k\sigma} + V \sum_{k,\sigma} (c^+_{k\sigma} d_\sigma + d^+_\sigma c_{k\sigma}) + \sum_\sigma \epsilon_d d^+_\sigma d_\sigma + U d^+_\uparrow d_\uparrow d^+_\downarrow d_\downarrow . \tag{1}$$

Величина ϵ_d – положение примесного уровня относительно уровня Ферми, U – кулоновское отталкивание электронов, локализованных на примесном центре, амплитуда V описывает туннелирование примесных электронов в зону проводимости. Хорошо известно, что в пределе $\Gamma \equiv \pi\rho(\epsilon_F)V^2 \ll \min(\epsilon_d, \epsilon_d + U)$ примесь обладает магнитным моментом и описывается гамильтонианом Кондо [2].

В работах [3, 4] показано, что гамильтонианы Андерсона и Кондо являются вполне интегрируемыми и диагонализованы точно. В настоящем сообщении мы приводим результаты для магнитной восприимчивости при произвольном магнитном поле в симметричном случае $\epsilon_d + U/2 = 0$. Энергия основного состояния была вычислена точно в работах [5].

2. Уровни энергии гамильтониана Андерсона, лежащие не очень далеко от уровня Ферми, могут быть определены из следующих трансцендентных уравнений:

$$\exp(ik_jL) = \prod_{a=1}^{M} \frac{g(k_j) - \Lambda_a + iU\Gamma}{g(k_j) - \Lambda_a - iU\Gamma} \frac{k_j - \epsilon_d + i\Gamma}{k_j - \epsilon_d - i\Gamma}; \tag{2}$$

$$-\prod_{j=1}^{N} \frac{g(k_j) - \Lambda_a - iU\Gamma}{g(k_j) - \Lambda_a + iU\Gamma} = \prod_{\beta=1}^{M} \frac{\Lambda_a - \Lambda_\beta + 2iU\Gamma}{\Lambda_a - \Lambda_\beta - 2iU\Gamma}, \tag{3}$$

где

$$g(k) = (k - \frac{U}{2} - \epsilon_d)^2.$$

Здесь N – полное количество частиц, L – размер системы, а число $M = N/2 - S^z$ связано с проекцией полного спина. При этом энергия системы есть

$$E = \sum_{j=1}^{N} k_j.$$

3. Каваками и Окиджи [5] показали, что в основном состоянии при $U > 0$ часть зарядовых возбуждений k_j образует „связанные" состояния со спиновыми возбуждениями:

$$g(k_a) = \Lambda_a \pm iU\Gamma. \tag{4}$$

В термодинамическом пределе, когда $N, L, M \to \infty$, но $N/L = \epsilon_F/\pi$ и M/L остаются конечными, числами Λ_a и „несвязанные" числа k_j $(j = M+1, \ldots N)$ распределены непрерывно на интервалах $(-Q,\ \epsilon_F^2)$, $(-\epsilon_F, B)$ с плотностями $\sigma(\Lambda)$ и $\rho(k)$ соответственно. При этом уравнения (2, 3) дают линейные интегральные уравнения на распределения $\sigma(\Lambda)$ и $\rho(k)$:

$$\rho(k) = \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{L}\delta(k) + 2k\int_{-Q}^{+\infty} a_1(k^2 - \Lambda)\sigma(\Lambda)d\Lambda; \tag{5}$$

$$\sigma(\Lambda) + \int_{-Q}^{+\infty} a_2(\Lambda - \Lambda')\sigma(\Lambda')d\Lambda' + \int_{-\infty}^{B} a_1(\Lambda - k^2)\rho(k)dk = \int_{-\infty}^{-\infty} a_1^B(\Lambda - k^2)\left(\frac{1}{2\pi} + \frac{1}{L}\delta(k)\right)dk; \tag{6}$$

где

$$a_n(x) = \frac{1}{4\pi}\frac{n}{x^2 + n^2(U\Gamma)^2}, \qquad \delta(k) = \frac{1}{4\pi}\frac{\Gamma}{(k - \epsilon_d)^2 + \Gamma^2};$$

а B и Q определяются условиями

$$S^z/L = \frac{1}{2}\int_{-\epsilon_F}^{B} \rho(k)\,dk; \qquad N/L = 2\int_{-Q}^{\epsilon_F^2} \sigma(\Lambda)d\Lambda + \int_{-\epsilon_F}^{B} \rho(k)dk. \tag{7}$$

Энергия основного состояния с заданным S^z имеет вид

$$E/L = \int_{-\epsilon_F}^{B} k\rho(k)dk + 2\int_{-Q}^{\epsilon_F^2} \mathrm{Re}\sqrt{\Lambda + iU\Gamma}\,\sigma(\Lambda)\,d\Lambda. \tag{8}$$

При диагонализации гамильтониана (1) учитывались только состояния лежащие вблизи уровня Ферми и лишь линейный участок спектра электронов проводимости, что оправдано при $U, \Gamma \ll \epsilon_F$. Это приводит к тому, что в области импульсов, далеких от ферми-поверхности, т. е. при $\Lambda \to +\infty$, $k \to -\infty$: $\sigma(\Lambda) \approx \Lambda^{-1/2}$; $\rho(k) \approx 1/2\pi$ и интегралы в формулах

[7, 8] расходятся. Поэтому эти интегралы должны быть обрезаны на импульсах порядка ϵ_F однако в уравнениях [5, 6] все интегралы сходятся и учет конечной ширины зоны приводит к малым поправкам порядка $\sqrt{U\Gamma}/\epsilon_F \ll 1$.

В симметричном случае $2\epsilon_d + U = 0$ предел $Q = \infty$. Другой предел $B = \infty$, если $S^z = 0$.

В работах [5] были найдены энергия основного состояния и зарядовая восприимчивость примеси в симметричном случае, а также численно решены уравнения [5, 6].

4. Примесную часть магнитной восприимчивости проще всего найти, используя следующий прием. В главном по $1/L$ порядке уравнения (5, 6) описывают свободный электронный газ, поэтому $S^z = H/4\epsilon_F$ (считаем $g_L\,\mu_B = 1$). Это условие дает связь параметра B с магнитным полем H. Теперь примесный момент определяется частями плотностей ρ и σ т. е. решением уравнений (5, 6), в правых частях которых стоят члены с коэффициентом $1/L$.

Уравнения (5, 6) при любом знаке B решаются методом Винера – Хопфа. Исключая из уравнения (5) $\sigma(\Lambda)$, имеем:

$$\rho(k) + 2k\int_{-\infty}^{B} R(k^2-p^2)\rho(p)\,dp = \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{L}\delta(k) + 2k\int_{-\infty}^{+\infty} R(k^2-p^2)\left(\frac{1}{2\pi} + \frac{1}{L}\delta(p)\right) dp\,,$$

где

$$R(x) = \frac{1}{\pi}\int_0^{\infty} \cos(\omega x)(1+e^{\omega})^{-1}d\omega.$$

При $B \leqslant 0$ $(H \leqslant H_C = \mathrm{const}\sqrt{U\Gamma})$

$$\frac{H}{\sqrt{U\Gamma}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\pi b^2(2n+1)}\,\frac{G^-(-i\pi(2n+1))}{\pi(2n+1)^{3/2}}, \tag{10}$$

где $G^-(2\pi\omega) = \left(\dfrac{i\omega}{e}\right)^{i\omega}\dfrac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma\left(\frac{1}{2}+i\omega\right)}$ —функция аналитическая в нижней полуплоскости, а $b \equiv B/\sqrt{2U\Gamma}$. Отметим, что b зависит только от $H/\sqrt{U\Gamma}$, и не зависит от ϵ_F. Формула (10) справедлива при $H \leqslant H_C$, где H_C определяется той же формулой при $B = 0$.

Магнитный момент примеси имеет вид:

$$M^{\mathrm{imp}} = M^{\mathrm{Kondo}} + \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{G^-(-i\pi(2n+1))}{2n+1}\,e^{-\pi b^2(2n+1)}\int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{-\frac{\pi t^2(2n+1)}{2U\Gamma}}\,\delta(it), \tag{11}$$

где

$$M^{\mathrm{Kondo}} = -\frac{i}{2\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{\omega - i0}\,G^-(\omega)\,e^{-i\omega(b^2-(U^2-4\Gamma^2)/8U\Gamma)}\,\frac{1}{2\mathrm{ch}\,\omega/2}\,. \tag{12}$$

Формулы (10 – 12) полностью определяют зависимость примесной части магнитного момента при $H < H_C$ и произвольных U и Γ. Из этих формул следует, что независимо от соотношения между U и Γ, при $H \to 0$ примесный парамагнетизм исчезает. Основное состояние примеси синглетно. Магнитная восприимчивость при $H = 0$ конечна и имеет вид:

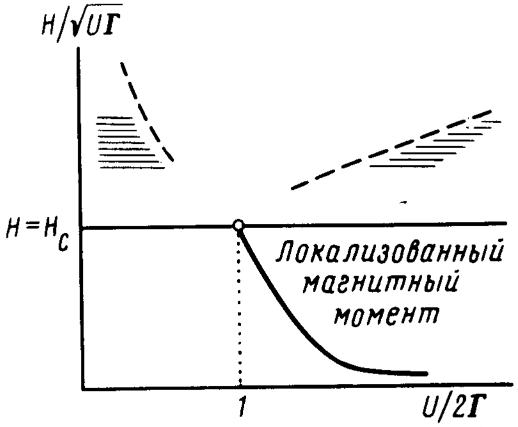
$$\chi(0) = \frac{1}{2\sqrt{2U\Gamma}}\left(\exp\left(\frac{U^2-4\Gamma^2}{8U\Gamma}\,\pi\right) + \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{-\pi t^2}{2U\Gamma}}\,\delta(it)dt\right). \tag{13}$$

При $U \gg 2\Gamma$ магнитная восприимчивость экспоненциально велика:

$$\chi(0) = \frac{1}{2\pi T_K}\,; \qquad T_K = \frac{1}{\pi}\sqrt{2U\Gamma}\,e^{-U/8\Gamma}$$ – температура Кондо [6].

При уменьшении U член M^{Kondo} становится экспоненциально малым и происходит плавный переход в область, где справедлива теория возмущения по U/Γ. При этом $\chi(0) = (1/2\pi\Gamma)\times$ $\times\,(1 + 0(\Gamma/U))$. Известные четыре члена ряда по U [7] могут быть получены из формулы (13).

5. При $H \ll H_C$ можно ограничиться только первым членом ряда (10) так, что $b^2 = -\frac{1}{\pi} \ln\left[\left(\frac{U\Gamma}{\pi e}\right)^{1/2C} / H\right]$. Если $U \gg \Gamma$ в (11) дает основной вклад член M^{Kondo}, который совпадает с магнитным моментом примеси, вычисленным в рамках обменного гамильтониана Кондо [3]. Отметим, что эквивалентность между моделями имеет место только при $U \gg \Gamma$, $H \ll \sqrt{U\Gamma}$.



При произвольных U и Γ во всей области $H \ll T_K, H_C$ (см. рис.) намагниченность примеси раскладывается в ряд по целым степеням H и локализованный магнитный момент отсутствует. При $T_K \ll H \ll H_C$ формулы (10 – 12) дают известные в теории возмущения по Γ/U логарифмические асимптотики [8].

При

$$H = H_C \qquad \chi(H_C) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma}{\Gamma^2 + U^2/4}. \tag{14}$$

6. Если $H \geqslant H_C$ $(B \geqslant 0)$, из уравнения (9) имеем:

$$\frac{H}{\sqrt{U\Gamma}} = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\omega + i0} e^{-i\omega b^2} G^-(\omega) \int_0^\infty e^{i\omega k^2} dk \tag{15}$$

и

$$M^{\text{imp}} = \frac{i}{2\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\omega + i0} e^{-i\omega B^2} G^-(\omega) \int_0^\infty e^{\frac{i\omega k^2}{2U\Gamma}} \delta(k)\, dk. \tag{16}$$

При $H \gg H_C$ магнитный момент примеси раскладывается по степеням $\max(\Gamma, U)/H$. В областях $U \gg \Gamma$ и $\Gamma \gg U$ (заштрихованные области на рис.) электрон на примесном атоме является почти свободным. В этих областях в гамильтониане (1) можно пренебречь либо членом гибридизации при $\Gamma \ll H \ll U$ либо кулоновским отталкиванием при $U \ll H \ll \Gamma$ либо тем и другим, если $H \gg U, \Gamma$.

7. Приведем без вывода значение примесной части теплоемкости $T \to 0$.

$$\frac{C}{T} = \frac{\pi^2}{3} \frac{1}{\sqrt{2U\Gamma}} \left(e^{\pi \frac{U^2 - 4\Gamma^2}{8U\Gamma}} + \int_{-\infty}^{+\infty} (\delta(it) + \delta(t))\, e^{-\frac{\pi t^2}{2U\Gamma}} dt \right). \tag{17}$$

Формулы (13) и (17) определяют функцию $R(U/\Gamma) \equiv \frac{4}{3} \pi^2 \frac{T\chi}{C}$, которая как известно (см. например [6, 7, 9]), меняется от 1 до 2 при изменении U/Γ от 0 до ∞.

8. Решение асимметричной модели Андерсона и низкотемпературная термодинамика при произвольном ϵ_d будут опбликованы в следующем выпуске журнала.

Авторы благодарны А.И.Ларкину и Р.Г.Архипову за полезное обсуждение и Н.Каваками и А.Окиджи за информацию о работах [5]до их публикации.

Литература

1. *Anderson P.W.* Phys. Rev. 1961, **124**, 41.

2. *Anderson P.W.*, *Clogston A.M.* Bull. Am. Phys. Soc. 1961, **6**, 124; *Kondo J.* Prog. Theor. Phys.,1962, **28**, 846; *Schrieffer J.R.*, *Wolf P.A.* Phys. Rev., 1966, **149**, 491.

3. *Вигман П.Б.* Письма в ЖЭТФ, 1980, **31**, 392.

4. *Wiegman P.N.* Phys. Lett., 1980, **80A**, 175.

5. *Kawakami N.*, *Okiji A.* Phys. Lett., A, 1981 in press., and J. Jap. Phys. Soc., 1981 in press.

6. *Krishna-Murthy H.R.*, *Wilkins K.W.*, *Wilson K.G.* Phys. Rev. 1980, **B21**, 1003.

7. *Yamada K.* Progr. Theor. Phys.,1975, **54**, 316.

8. *Abricosov A.A.* Physics, 1965, **2**, 21.

9. *Nozieres P.* J. Low Temp. Phys., 1974, **17**, 31.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
9 декабря 1981 г.