Письма в ЖЭТФ, том 35, вып.3, стр. 100 – 103 *5 февраля 19*

РЕШЕНИЕ АСИММЕТРИЧНОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА ПРИ $T = 0$

П.Б.Вигман, А.М.Цвелик

На основе точного решения модели Андерсона определены валентность и магнитная восприимчивость примесного атома при $H << min\,(\sqrt{U\Gamma},\ \Gamma\,(U/_{U+2\epsilon_d})\,)$ и произвольном положении примесного уровня.

1. Хорошо известно, что физические свойства сплавов нормальных металлов с небольшим количеством примесей атомов переходных или редкоземельных элементов сильно отличаются от свойств чистых металлов. В зависимости от положения примесного уровня $d(f)$ электрона относительно поверхности Ферми металла (ϵ_d) и ширины этого уровня (Γ) наблюдаются состояния с локализованным магнитным моментом и эффект Кондо или состояния с промежуточной валентностью. Оба этих эффекта описываются моделью Андерсона[1]:

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

здесь U – кулоновское отталкивание электронов на примесной орбитали, V – амплитуда гибридизации ($\Gamma = \pi\rho(\epsilon_F)\,V^2$).

2. В работе[2] показано, что гамильтониан Андерсона (1) является вполне интегрируемым и диагонализован точно. В предыдущей работе[3] в симметричном случае $2\epsilon_d + U = 0$ была вычислена магнитная восприимчивость примеси при произвольном магнитном поле H. В настоящем сообщении мы приводим результаты для произвольного положения уровня ϵ_d и не очень большого магнитного поля $H << min\,(\sqrt{U\Gamma},\ \Gamma\frac{U}{U+2\epsilon_d})$. Основное внимание при этом уделено области переменной валентности $|\epsilon_d| \sim \Gamma \ln U/\Gamma << U$.

3. В работе[2] было показано, что уровни энергии гамильтониана (1), лежащие не очень далеко от уровня Ферми, определяются решениями $(N(N/2 - S^z)$ алгебраических уравнений на импульсы зарядовых $\{k_j\}$ и спиновых $\{\Lambda_a\}$ волн. (N – полное число частиц, S^z – спин системы). Эти уравнения выписаны в[3]. Каваками и Окиджи[4] показали, что в термодинамическом пределе ($N,\ L \to \infty,\ \pi N/_L = \epsilon_F$) система алгебраических уравнений переходит в два линейных интегральных уравнения на функции распределения $\rho(k)$ и σ . В их работах было проведено численное исследование этих уравнений.

Функции $\rho(k)$ и $\sigma(\Lambda)$ определены соответственно, в интервалах $(-\infty,\ B)$ и $(Q\ +\infty)$ Будем считать их равными нулю вне этих интервалов, зато определим функции распределения "дырок" $\tilde{\rho}(k)$ и $\tilde{\sigma}(\Lambda)$, которые отличны от нуля в интервалах (B, ∞) и $(-\infty,\ Q)$. Тогда интегральные уравнения имеют вид[4]

$$\tilde{\rho}(k) + \rho(k) = 1/_2\pi + \frac{1}{L}\,\delta(k) + g'(k)\int_{-\infty}^{\infty} a_1(g(k) - \Lambda)\,\sigma(\Lambda)\,d\Lambda; \qquad (2)$$

$$\tilde{\sigma}(\Lambda) + \sigma(\Lambda) + \int_{-\infty}^{\infty} a_2(\Lambda - \Lambda')\sigma(\Lambda')\,d\Lambda' + \int_{-\infty}^{\infty} a_1(\Lambda - g(k))\,\rho(k)dk = \int_{-\infty}^{\infty} a_1(\Lambda - g(k))(1/_2\pi + $$

$$+ 1/_L\,\delta(k))dk; \qquad (3)$$

где $g(k) = (k - \epsilon_d - U/2)^2$, а $\delta(k) = \Gamma\,((k - \epsilon_d)^2 + \Gamma^2)^{-1}$.

Энергия основного состояния, полное число частиц и проекция полного спина [illegible]ся формулами

$$E/_L = 2\mathrm{Re}\int_Q^{\epsilon_F^2} [(\Lambda + iU\Gamma)^{1/2} + \epsilon_d + U/2\,]\,\delta(\Lambda)d\Lambda + \int_{-\infty}^{B} k\rho(k)\,dk$$

$$N/L \equiv \epsilon_F/\pi = 2\int_{Q}^{\epsilon_F^2} \sigma(\wedge)d\wedge + \int_{-\infty}^{B} \rho(k)\,dk\,; \tag{5}$$

$$S^z/L = \frac{1}{2} \times \int_{-\infty}^{B} \rho(k)\,dk; \tag{6}$$

(Обозначения в формулах (2) – (6) см. в^3).

Интегрируя уравнение (3) и используя условие (5), получаем удобную формулу, которая совместно с (2), (3) определяет предел Q:

$$\int_{-\infty}^{Q} \widetilde{\sigma}(\wedge)d\wedge = \epsilon_d + U/2. \tag{7}$$

В симметричном случае $Q = -\infty$ и $\widetilde{\sigma} = 0$. При $S^z = 0$ предел $B = -\infty$ и $\rho = 0$.

4. Уравнения (2), (3) вряд ли могут быть решены аналитически при произвольных B и Q. Однако, при $H << H_0 \equiv \Gamma \dfrac{U}{U + 2\epsilon_d}$ легко построить итерационную схему, позволяющую находить коэффициенты при степенях H/H_0. При этом условии $B^2 >> Q$, $B < 0$ и все величины раскладываются в ряд по $\exp[-\pi(B^2 - Q)]$. В этой схеме интеграл с $\rho(k)$ в уравнении (3) при $\wedge < Q$ является возмущением.

Исключая $\sigma(\wedge)$ из уравнений (2), (3), при $k < B$ и $\wedge < Q$ имеем:

$$\rho(k) + g'(k)\int_{-\infty}^{B} R(g(k) - g(p))\,\rho(p)\,dp = 1/2\pi + \frac{\delta(k)}{L} + g'(k)\int_{-\infty}^{\infty} R(g(k) - g(p)) \times$$
$$\times\left(\frac{1}{2\pi} + \frac{1}{L}\,\delta(p)\right)dp + \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \exp[-\pi(2n+1)(g(k)/2U\Gamma - q)\,\sigma^{(-)}(-i\pi(2n+1))]; \tag{8}$$

$$\widetilde{\sigma}(\wedge) - \int_{-\infty}^{Q} R(\wedge - \wedge')\,\widetilde{\sigma}(\wedge')d\wedge' = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{sech}[\pi(\wedge - g(k))/2U\Gamma]\;\frac{1}{4\pi} + \frac{\delta(k)}{2L}\;dk -$$
$$- \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \rho^{(+)}(i\pi(2n+1))\exp[-\pi b(2n+1)]; \tag{9}$$

где

$$R(x) = \int_{0}^{\infty} \cos(\omega x/2U\Gamma)(1 + e^{\omega})^{-1} d\omega/2\pi U\Gamma,$$

а

$$\sigma^{(-)}(\omega) = \int_{-\infty}^{0} \widetilde{\sigma}(\wedge + Q)\exp(i\omega/2U\Gamma)\,d\wedge/2U\Gamma;\ \rho^{(+)}(\omega) =$$
$$= \int_{-\infty}^{B} e^{i\omega[g(k)/2U\Gamma - b]}\rho(k)\,k\,dk/U\Gamma$$

аналитические функции в нижней и соответственно в верхней полуплоскостях, а $q = Q/2U\Gamma$ и $b = g(B)/2U\Gamma$.

5. Как и раньше^3 пределы b и q следует определять в главном порядке по $1/L$, т.е. отбрасывая в правых частях уравнений (8), (9) примесные члены, идущие с коэффициентом $1/L$, и, полагая $S^z/N = H/4\epsilon_F$.

В главном порядке по $\exp(-\pi b)$ имеем

$$H/\sqrt{2U\Gamma} = \sqrt{\frac{2}{\pi e}}\,e^{-\pi b}\left(1 + \sigma^{(-)}(-i\pi)\,e^{\pi q}\right);\ \epsilon_d + U/2 = \sqrt{2U\Gamma}\,\sigma^{(-)}(0), \tag{10}$$

где

$$\sigma^{(-)}(\omega) = \frac{-i}{2\sqrt{\pi}}\,G^{(-)}(\omega)\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega - \omega' - i0}\;\frac{\exp\left(-\dfrac{|\omega'|}{2} - i\omega' q\right)}{G^{(-)}(\omega')(-i\omega' + 0)^{1/2}}\;;$$

$$G^{(-)}(\omega) = \frac{\sqrt{2\pi}\left(\frac{i\omega+0}{2\pi e}\right)^{i\omega/2\pi}}{\Gamma\left(1/2+\frac{i\omega}{2\pi}\right)}$$ — решения уравнения (9) при $b=\infty$.

В почти симметричном случае $-q>>1$, поэтому $\epsilon_d + U/2 \cong \sqrt{2U\Gamma}e^{-\pi q}$ и поправка к (10), связанная с $\sigma^{(-)}(-i\pi)$ мала по $(\epsilon_d + U/2)/\sqrt{U\Gamma}$.

В асимметричном случае $q>>1$.В этой области функция $\sigma^{(-)}(\omega)$ раскладывается в ряд по q_*^{-1} , где $q=q_* + {}^1/_{2\pi}\ln(2\pi e q_*)$

$$({}^U/_2 + \epsilon_d)/\sqrt{2U\Gamma} = q_*^{1/2} + O(q_*^{-3/2}). \qquad (11)$$

Теперь в формуле (10) член с $\sigma^{(-)}(-i\pi)$ экспоненциально велик и

$$H/\sqrt{2U\Gamma} \cong (\pi e\sqrt{q_*})^{-1}e^{-\pi(b-q)}. \qquad (12)$$

6. Валентность и магнитная восприимчивость примесного иона определяются поправками $1/N$ к формулам (5), (6). Эти поправки даются решениями уравнений (8), (9), в правых частях которых оставлены только примесные члены с коэффициентом $1/L$.

При $H=0$, в почти симметричном случае легко показать, что валентность $n_d = 1 + O(U+2\epsilon_d)^2/U\Gamma)$.

В асимметричном случае определим $\epsilon_d^* = -U/2 + (2U\Gamma q_*)^{1/2}$. Тогда

$$n_d = -\frac{i}{\pi\sqrt{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\omega - i0}\;\frac{\exp(-|\omega| + i\omega/J_*)}{G^{(-)}(\omega)}, \qquad (13)$$

где $J_* = -2U\Gamma/\epsilon_d^*(\epsilon_d^* + U)$ имеет смысл эффективной константы Шриффера – Вольфа[5]. При $|J_*| << 1$ валентность раскладывается по степеням инвариантного заряда J_{**} , где $2J_{**}^{-1} - \ln|J_{**}|/e = 2J_*^{-1}$ [6,7] . При $J_* < 0$ из (13) следует: $n_d = -J_{**}/\pi + O(J_{**}^3)$, а при $J_* > 0 - n_d = 1 - J_{**}/2\pi + O(J_{**}^3)$ [8,10].

При $|\epsilon_d| << U$ величину $\epsilon_d^* = \epsilon_d + \frac{\Gamma}{2\pi}\ln\left[\frac{Ue\pi}{4\Gamma}\right]$ можно интерпретировать как перенормировку примесного уровня[6,7].

7. В отличие от валентности, магнитный момент примеси при $H << min(\sqrt{U\Gamma}, H_0)$ и $J_* << 1$ имеет характерные кондовские аномалии. Поэтому возникает еще один масштаб энергии – температура Кондо:

$$T_k = \pi^{-1}(2U\Gamma)^{1/2}(1 + e^{\pi q}\sigma^{(-)}(-i\pi))\exp\left(-\pi\frac{U^2 - 4\Gamma^2}{8U\Gamma}\right).$$

Из формул (6 – 8, 12) находим магнитную восприимчивость примеси при $H=0$ и произвольных ϵ_d, U, Γ :

$$\chi^{imp}(0) = \frac{1}{2\pi T_k}\left\{1 + e^{-\pi\frac{(U^2-4\Gamma^2)}{8U\Gamma}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\pi t^2/2\Gamma U}\delta(it)\frac{dt}{2\pi\sqrt{2U\Gamma}} + \right.$$
$$\left. + e^{2\pi U\Gamma/\epsilon_d(\epsilon_d+U)}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{\pi - i\omega}\;\frac{e^{-|\omega|/2}}{G^{(-)}(\omega)}\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\omega(k^2/2U\Gamma - q)}\delta(k)\frac{dk}{2\pi\sqrt{U\Gamma}}\right\}. \qquad (14)$$

Основное состояние примеси при любых ϵ_d, U, Γ является синглетным.

В асиметирчном случае магнитная восприимчивость при $H << H_0$, но произвольном по отношению к T_k , имеет вид

$$\chi^{imp}(H) = \chi^{\text{Kondo}}(H/T_\text{k}) + \frac{1}{4\sqrt{2\Gamma}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi - i\omega} \frac{e^{-|\omega| + i\omega/J_*}}{G^{(-)}(\omega)} + O\left(\frac{H^2}{H_0^2}\right), \quad (15)$$

где $\chi^{\text{Kondo}}(H/T_\text{k})$ вычислена в [2,3], а

$$T_\text{k} = \frac{4\Gamma}{\pi\sqrt{2\pi e}} e^{-\pi/J_*} = \frac{\sqrt{2U\Gamma}}{\pi} e^{2\pi\Gamma U/\epsilon_d(\epsilon_d + U)} .$$

Отметим, что предэкспоненциальные множители в T_k в симметричном и асимметричном пр делах совпадают вплоть до числа[9].

При $J_* \sim 1$ в формуле (14) первые два члена становятся одного порядка и исчезает состояние с локализованным моментом. В этой области зарядовые флюктуации значительны и валентность значительно отличается от единицы.

Первый член разложения по $J_{**}(\epsilon_d = 0)$ в формулах (13), (15) вычислены в[10].

Литература

1. *Anderson P.W.* Phys. Rev., 1961, **124**, 41.
2. *Wiegmann P.B.* Phys. Lett., 1980, **80A**, 163.
3. *Вигман П.Б., Филев В.М., Цвелик А.М.* Письма в ЖЭТФ, 1982, **35**, 77.
4. *Kawakami N., Okiji A.* J. Phys. Soc. Jap., 1981 in press; *Kawakami N., Okiji A.* Phys. Lett., 1981, **86A**, 483.
5. *Schrieffer J.R., Wolf P.A.* Phys. Rev., 1966, **149**, 491.
6. *Барабанов А.Ф., Кикоин К.А., Максимов Л.А.* ТМФ, 1974, **20**, 364.
7. *Haldane F.D.M.* Phys. Rev. Lett., 1978, **40**, 416.
8. *Цвелик А.М., Барабанов А.Ф.* ЖЭТФ, 1978, 75, 153.
9. *Krishna-murthy H.R., Wilson K.G., Wilkins J.W.* Phys. Rev., 1980, **B21**, 1044.
10. *Fukuyama H., Sakurai A.* Prog. Theor. Phys., 1979, **62**, 595.

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

Поступила в редакцию
17 декабря 1981 г.