Письма в ЖЭТФ, том 37, вып. 12, стр. 580 – 583 *20 июня 1983 г.*

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ВЫРОЖДЕННОЙ МОДЕЛИ АНДЕРСОНА

П.Б.Вигман, Е.И.Огиевецкий, А.М.Цвелик

На основе точного решения модели Андерсона, полученного методом Бете, в аналитической форме вычислены зависимости магнитной восприимчивости и валентности примесей Ce и Yb в состоянии с промежуточной валентностью при $T = 0$.

1. Хорошо известно, что $(4f^{1}\ {}^{2}F_{5/2})$ и $(4f^{0}\ {}^{1}S_{0})$ состояния иона Ce^{+3} в металле сильно гибридизованы. Состояния с промежуточной валентностью принято изучать на основе вырожденной модели Андерсона [1]:

$$\mathcal{H} = \sum_{k,j} v_F (k - k_F) C^{+}_{kj} C_{kj} + V \sum_{k,j} (C^{+}_{kj} X_{0j} + \text{h. c.}) + \epsilon_f \sum_{j=1}^{n} X_{jj} . \qquad (1)$$

Здесь ϵ_f – положение энергетического уровня однократно заполненной оболочки, характеризующейся полным моментом $J = 5/2$ для Ce и $J = 7/2$ для Yb; C^{+}_{kj} – оператор рождения электрона проводимости в состоянии с полным моментом J и проекцией j; X_{0j} – проекционный оператор, переводящий оболочку из состояния $|J_j>$ в состояние $|0>$, в котором оболочка незаполнена. Операторы X_{ab} удовлетворяют алгебре $X_{ab} X_{cd} = \delta_{bc} X_{ad}$.

Универсальные свойства гамильтониана (1) известны [2,3] : все физические величины зависят от перенормированного уровня энергии:

$$\epsilon_f^* = \epsilon_f + (n-1)\frac{\Gamma}{\pi}\ln D^{(+)}/\Gamma ,$$

где $D^{(+)}$ — верхняя граница зоны проводимости, $\Gamma = \pi\rho(\epsilon_F)V^2$ — ширина резонансного уровня, а $n = 2J+1$ — кратность вырождения уровня ϵ_f .

В этом сообщении мы представляем точные результаты для магнитной восприимчивости и валентности (т.е. среднего числа электронов на примесной оболочке):

$$\chi = \frac{\pi(n^2-1)}{12n\Gamma}\left\{\frac{(en)^{\frac{n-1}{n}}}{n\Gamma(1+\frac{1}{n})}e^{-\pi\epsilon_f^*/n\Gamma} + \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{1-i\omega}\Gamma(1+i\omega)\times\right.$$

$$\left.\times\left(\frac{-i\omega+0}{e}\right)^{-i\omega(n-1)/n}\frac{1}{\Gamma(1+i\omega/n)}\exp\left[-i\omega\left(\frac{\pi\epsilon_f^*}{n\Gamma}-\frac{\ln n}{n}\right)-\frac{\pi|\omega|}{n}\right]\right\}, \quad (2)$$

$$n_f = 1-\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{\omega+i0}\frac{\Gamma(1+i\omega)}{\Gamma(1+\frac{i\omega}{n})}e^{-\pi|\omega|/n}\left(\frac{-i\omega+0}{e}\right)^{-i\omega\frac{(n-1)}{n}}\times$$

$$\times\exp\left[-i\omega\left(\epsilon_f^*\pi/n\Gamma-\frac{1}{n}\ln n\right)\right]. \quad (3)$$

Эти формулы описывают плавный переход из состояния с локализованным моментом ($n_f = 1$) в состояние с промежуточной валентностью ($|\epsilon_f^*| \sim \Gamma$) и могут быть использованы для количественного описания эксперимента [4].

2. Гамильтониан (1) является вполне интегрируемым. Используя метод Бете, изложение которого применительно к модели Андерсона см. в [5], нетрудно получить спектр гамильтониана (1) [6]. Состояние, преобразующееся по неприводимому представлению группы $SU(n)$: $S \equiv [N-m^{(1)}, m^{(1)}-m^{(2)}, \ldots m^{(n-1)}]$ характеризуется импульсами $\{k_j, \lambda^{(1)}_{\alpha_1}, \ldots \lambda^{(n-1)}_{\alpha_{n-1}}\}$, которые квантуются согласно уравнениям

$$\exp(ik_jL)\frac{(k_j-\epsilon_f-i\Gamma)}{k_j-\epsilon_f+i\Gamma} = \prod_{\alpha=1}^{m^{(1)}}\frac{\frac{k_j}{2\Gamma}-\lambda^{(1)}_\alpha-\frac{i}{2}}{\frac{k_j}{2\Gamma}-\lambda^{(1)}_\alpha+\frac{i}{2}}. \quad (4)$$

$$\prod_{\tau=\pm 1}\prod_{\beta=1}^{m^{(j+\tau)}}\left(\frac{\lambda^{(j)}_\alpha-\lambda^{(j+\tau)}_\beta+i/2}{\lambda^{(j)}_\alpha-\lambda^{(j+\tau)}_\beta-i/2}\right) = \prod_{\beta=1}^{m^{(j)}}\left(\frac{\lambda^{(j)}_\alpha-\lambda^{(j)}_\beta+i}{\lambda^{(j)}_\alpha-\lambda^{(j)}_\beta-i}\right). \quad (5)$$

При этом энергия состояния есть $E = \sum_1^N k_j$; $\lambda^{(0)}_j = k_j/2\Gamma$, $m^{(0)} = N$ — число электронов в зоне с моментом J, $m^{(j)} = \sum_{j+1}^{n} n_k$, где n_k — парциальное число электронов с проекцией k.

3. В основном состоянии в представлении S импульсы k_j и $\lambda^{(j)}_\alpha$ образуют связанные состояния — „комплексы"

$$\lambda^{(j)}_{(p-1)r_{j+p-2}+pr_{j+p-1}-q} = \lambda^{(j+1)}_{r_{j+p-1}} + i\left(\frac{p+1}{2}-q\right);\ q = 1,\ldots p,$$

$$m_{k-1} = r_k + 2r_{k+1} + \ldots + (n+1-k)\, r_n .$$

В термодинамическом пределе центры комплексов $\chi_\alpha^{(j)}$ описываются распределением $\rho_j(\lambda)$. Пусть $\tilde{\rho}_j(\lambda)$ – распределение дырок (строгое определение (см. в [7]). После некоторой стандартной и громоздкой алгебры получим следующие уравнения:

$$\frac{\Gamma_j}{\pi} + \frac{1}{L}\, a_j\left(\lambda - \frac{\epsilon_f}{2\Gamma}\right) = \tilde{\rho}_j(\lambda) + \int_{-\infty}^{B_k} \mathcal{F}_{jk}(\lambda - \lambda')\, \rho_k(\lambda')\, d\lambda' , \qquad (6)$$

$$j = 1, \ldots n$$

где

$$\mathcal{F}_{jk}(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, e^{-i\omega\lambda - \frac{|\omega|}{2}(\max(j,k) - 1)} \frac{\operatorname{sh}\left(\min(j,k)\frac{\omega}{2}\right)}{\operatorname{sh} \omega/2} . \qquad (7)$$

$$a_j(\lambda) = \frac{2}{\pi} \frac{j}{(4\lambda^2 + j^2)} .$$

Параметры B_j определяются из условий

$$r_j / L = \int_{-\infty}^{B_j} \rho_j(\lambda)\, d\lambda . \qquad (8)$$

4. Функции $\rho_j(\lambda)$ экспоненциально малы при $\lambda \to -\infty$ $(j \neq n)$. Напротив $\sigma(\lambda) \equiv \equiv \rho_n(\lambda) \to \text{const}$ при $\lambda \to -\infty$ и интегралы в (6) и (8) расходятся. Это связано, с тем, что в уравнениях (4 – 6) не учитывается ограниченность зоны проводимости снизу. Следует учитывать, что $D^{(-)}/2\Gamma < \lambda^{(n)} < D^{(+)}/2\Gamma$, где $D^{(\pm)}$ – границы зоны, и считать плотность состояний электронов проводимости равной нулю вне интервала $(D^{(-)}, D^{(+)})$. Тогда интегрируя уравнение (6) с $j = n$ получим условие на предел $Q \equiv B_n$:

$$\int_Q^{\infty} \tilde{\sigma}(\lambda)\, d\lambda = n D^{(+)} / 2\pi .$$

В этот интеграл вносит вклад область $1 \ll |\lambda| \ll D^{(-)}/2\Gamma$. Из (6) следует, что при $|\lambda| \gg \gg 1$

$$\tilde{\sigma}(\lambda) = \frac{\Gamma n}{\pi} \left(1 - \frac{n-1}{2\pi} \frac{1}{|\lambda|} + \ldots\right).$$

Отсюда находим

$$Q = -\frac{n-1}{2\pi} \ln \frac{D^{(+)}}{2\Gamma} + O(1) .$$

Сдвигая аргументы функций $\rho_j(\lambda)$ на Q получим универсальные уравнения, зависящие только от перенормированного уровня ϵ_f^*.

5. **Валентность.** В отсутствие магнитного поля $(H = 0)$ пределы $B_k = -\infty$ $(k = 1, \ldots n-1)$ и система уравнений (6) решается явно методом Винера – Хопфа. Решение приводит к формуле (3). Легко получить асимптотическое поведение валентности при $|\epsilon_f^*| \gg \Gamma$

$$n_f = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k Z^k \quad (\epsilon_f^* < 0), \qquad n_f = \sum_{k=1}^{\infty} b_k Z^k \quad (\epsilon_f^* > 0), \qquad (9)$$

где

$$Z = \frac{\Gamma}{\pi \epsilon_f^{**}} , \text{ а } \epsilon_f^{**} = \epsilon_f^* - \Gamma \frac{(n-1)}{\pi} \ln \frac{|\epsilon_f^{**}|}{2\Gamma n^{n/n-1}} .$$

Первые коэффициенты $a_1 = 1$, $b_1 = n$ были вычислены ранее по теории возмущения [2,3,8,9]. Асимметрия между a_1 и b_1 связана с различной кратностью вырождения основного состояния примеси при $\epsilon_f^* < 0$ и $\epsilon_f^* > 0$

6. Магнитная восприимчивость в нулевом поле.

Для вычисления магнитной восприимчивости достаточно учесть только главные по $\exp(2\pi(B_k + \lambda))$ члены разложения функций ρ_j. Вычисления, которые мы опускаем, приводят к формуле (2). При $-\epsilon_f^* \gg \Gamma$ примесь магнитна ($n_f = 1$) и имеет место эффект Кондо,

$$\chi = \frac{n(n^2-1)}{12\pi T_k},$$

где

$$T_K = \frac{\Gamma}{\pi^2}\left(\Gamma(1/n)/(e\,n)^{\frac{n-1}{n}}\right)\exp\left(\frac{\pi\epsilon_f^*}{n\Gamma}\right) \qquad (10)$$

температура Кондо.

В немагнитном режиме $\Gamma\chi = \sum_{p=2}^{\infty} C_p Z^p$ ($C_2 = n(n^2-1)/12\pi$ вычислен в рамках теории возмущений [9,10]

7. Предел $n \to \infty$. Характер перехода из состояния с локализованным моментом в режим промежуточной валентности меняется с ростом n. При $n \to \infty$, $\epsilon_f^*/n\Gamma = \text{const} < 0$ члены ряда теории возмущений (9) обращаются в нуль; т.е. в каждом порядке теории возмущений состояние иона с $n_f = 1$ является стабильным. Однако существуют процессы непертурбативного характера, разрушающие это состояние даже при $n \to \infty$. Согласно (3), имеем:

$$n_f^\infty = 1 - \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{\omega + i0}\,\Gamma(1+i\omega)\left(\frac{-i\omega+0}{e}\right)^{-i\omega} e^{-i\omega\frac{\pi\epsilon_f^*}{n\Gamma}}. \qquad (11)$$

При $\epsilon_f^* < 0$ интеграл (11) раскладывается по $\exp(\pi\epsilon_f^*/12\Gamma)$ и переход состояние промежуточной валентности должен быть более резким, по сравнению с переходом из области промежуточной валентности в немагнитное состояние ($n_f = 0$). При $\epsilon_f^* > 0$

$$n_f^\infty = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{dt}{t}\,\Gamma(1+t)(t/e)^{-t}\sin\pi t\; e^{-t\epsilon_f^*\pi/n\Gamma}. \qquad (12)$$

Отметим, что в литературе распространено ошибочное мнение, что $1/n$ разложение упрощает анализ состояния с промежуточной валентностью и может быть получено путем суммирования лестничных диаграмм теории возмущения. В действительности, предел $n \to \infty$ определяется суммой всех планарных диаграмм и, по-видимому, не может быть получен вне точного решения

Литература

1. *Coqblin B., Schrieffer J.R.*, Phys. Rev., 1969, **185**, 847.
2. *Барабанов А.Ф., Кикоин К.А., Максимов Л.А.* ТМФ, 1974, **20**, 364.
3. *Haldane F.D.M.* Phys. Rev. Lett., 1978, **40**, 416.; J. Phys.,C 1978, **11**, 5015.
4. *Barth H., Luszik-Bhadra M., Riegel D.* Phys. Rev. Lett., 1982, **50**, 608.
5. *Wiegmann P.B.* Phys. Lett., 1980, **80A**, 163.
6. *Schlottmann P.A.* Z. für Phys., 1982, **49**, 109.
7. *Yang C.N., Yang C.P.*, J. Math. Phys., 1969, **10**, 1115.
8. *Bringer A., Lustfield H.* Z. für. Phys.,1977, **B28**, 213.
9. *Цвелик А.М., Барабанов А.Ф.* ЖЭТФ, 1978, **75**, 153.

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

Поступила в редакцию
3 мая 1983 г.