Письма в ЖЭТФ, том 38, вып. 10, стр. 489 – 493 *25 ноября 1983 г.*

РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ КОНДО ДЛЯ ОРБИТАЛЬНОГО СИНГЛЕТА

П.Б.Вигман, А.М.Цвелик

Получено точное решение задачи о поведении сплава нормального металла с небольшим количеством d магнитных примесей, находящихся в состоянии орбитального синглета. Решение обобщается на случай произвольного спина примесей S. Показано также, что при $2S > 2l+1$ (l – орбитальный момент незаполненной оболочки примесного иона) функция Гелл-Манна – Лоу обращается в ноль в некоторой конечной точке. Нетривиальный скейлинг, впервые обнаруженный в одномерной квантовой системе многих тел, исследуется в рамках точного решения.

1. Ион Mn^{+3} в металле является орбитальным синглетом ($L = 0$) и обладает спином $S = 5/2$. Его терм ($3d^5\ {}^6S_{5/2}$). Поэтому в процессе рассеяния электронов проводимости металла такой примесью проекция орбитального момента электронов сохраняется. Обменное спиновое взаимодействие принято описывать гамильтонианом [1]:

$$\mathcal{H} = \sum_{k,\,m,\,\sigma} \epsilon_k C^+_{km\sigma} C_{km\sigma} + J \sum_{\substack{m=1\\ k,\,k',\,\sigma,\,\sigma'}}^{n} C^+_{km\sigma}\, \vec{\sigma}_{\sigma\sigma'}\, \mathbf{S}\, C_{k'm\sigma'} \,. \tag{1}$$

Здесь $C_{km\sigma}$ – оператор электрона проводимости с модулем импульса k, спином $\sigma = \pm 1/2$ и проекцией m орбитального момента $l = (n-1)/2$, а $\mathbf{S}$ – оператор спина примесного иона (имеется в виду, что только d – парциальная волна электронов проводимости взаимодействует с примесью) Гамильтониан (1) описывает также сплавы с Co ($n = 2S = 3$) и $V(n = 2S = 2)$ в сильном кубическом кристаллическом поле [2]. При произвольном n и $2S$ гамильтониан (1), в английской литературе называемый "n-channel Kondo problem", является модельным [1)].

2. В последнее время было показано, что традиционно изучаемые в теории магнитных сплавов обменные модели, являются вполне интегрируемыми и большинство из них было решено точно методом Бете [3, 4], исключением оставалась проблема Кондо для орбитального синглета (1), наивное применение техники Bethe Ansatz" к которой, приводило к физически бессмысленным результатам (примером может служить [5]). Напомним, что одним из основных условий интегрируемости обменных гамильтонианов является: а) возможность считать примесь точечной и б) ограничиться линейным участком спектра зоны проводимости вблизи поверхности Ферми [6]. Оказывается, что в рамках этих предположений невозможно правильно учесть квантовую аксиальную аномалию в дивергенции плотности частиц с заданной проекцией орбитального момента (отметим, что в других решаемых обменных моделях эта трудность отсутствует). Действительно, приближения а) и б) приводят к тому, что "голая" S-матрица взаимодействия частицы с примесью не зависит от энергии частицы. В нашем случае $S = \exp(iJ\vec{\sigma}\cdot\mathbf{S})_{\sigma\sigma'}\delta_{mm'}$ есть тензорное произведение $SU(2) \otimes GL(n)$ – спинового и орбитального процессов рассеяния. Формальное использование метода Бете [5] приводит к тому, что физическая S-матрица, хотя и приобретает зависимость от энергии, оставляет, однако, спиновый и орбитальный каналы независимыми. Бессмысленность этого результата обнаруживается уже во втором порядке теории возмущения. Ниже мы откажемся от точечности взаимодействия.

3. Для этого рассмотрим интегрируемую модель Андерсона, описывающую орбитально вырожденную оболочку примесного иона, такую, что при соответствующем выборе параметров

---

1) При $n \neq 2S$, гамильтониан (1) реализуется, возможно, в сплавах с некоторыми изотопами Mn, у которых сверхтонкое расщепление сравнимо с температурой Кондо.

она была бы эквивалентна обменному гамильтониану (1)

$$\mathcal{H} = \sum_{k,m,\sigma} v_F(k-k_F)\, C^+_{km\sigma} C_{km\sigma} + V \sum_{k,m,\sigma} (C^+_{km\sigma} d_{m\sigma} + h.c.) + \mathcal{H}_{at}, \tag{2}$$

где

$$\mathcal{H}_{at} = \epsilon_d \sum_{m,\sigma} d^+_{m\sigma} d_{m\sigma} - \frac{U}{2} \sum_{\substack{m,m',\\ \sigma,\sigma'}} d^+_{m\sigma} d^+_{m'\sigma'} d_{m'\sigma} d_{m\sigma'}, \tag{3}$$

а $d_{m\sigma}$ – оператор электрона на примесной оболочке. Действительно, при $0 < \frac{U(n-1)}{2} < \epsilon_d < \frac{U(n+2)}{2}$ основное состояние оболочки – орбитальный синглет ($n_d = n$, $S = n/2$, $L = 0$). Модели (1) и (2) эквивалентны, если амплитуда гибридизации $\Gamma = \pi\hat{\rho}(\epsilon_F)V^2$ мала настолько, что все возбужденные состояния виртуальны. Именно

$$(U, \epsilon_d - U(n-1)/2) \gg n\Gamma. \tag{4}$$

4. Нетрудно построить Bethe Ansatz для гамильтониана (3). Для простоты рассмотрим только гибридизацию состояний с $n_d = n$, $n_d = n-1$, считая $U \gg \epsilon_d - U(n-1)/2$. Двухчастичная S-матрица "голых" частиц в этой модели есть также тензорное произведение

$$S(k-p) = S_\sigma(k-p) \otimes S_m(k-p) \tag{5}$$

здесь S_σ – матрица модели Андерсона без орбитального вырождения с отталкиванием на атомной оболочке, а S_m – то же в модели без вырождения по спинам, но с притяжением [7, 8]

$$S_{\sigma(m)}(k) = (k/2\Gamma \mp iP)/(k/2\Gamma \mp i),$$

где P – оператор перестановки действующий в спиновом (орбитальном) пространстве.

Спектральное уравнение на квантованные импульсы частиц получаются "склеиванием" спиновой и орбитальной частей:

$$\exp(ik_jL)(k_j - \epsilon_d - i\Gamma)/(k_j - \epsilon_d + i\Gamma) = t^\sigma(k_j)\, t^m(k_j), \tag{6}$$

где t^a – собственные значения операторов

$$T^a(k_j) = \prod_{\substack{p=1\\ p\neq j}}^{N} S^a_{jp}(k_j - k_p) \qquad (a = \sigma, m).$$

Энергия состояния $E = \sum_{j=1}^{N} k_j$ теперь не распадается на независимые спиновую и орбитальную части. Они связаны уравнением (6).

Величины t^a хорошо известны (см., например [7, 8])

$$t^\sigma(k) = \prod_{\alpha=1}^{M} e_1(k/2\Gamma - \lambda_\alpha); \qquad t^m(k) = \prod_{\alpha=1}^{m^{(1)}} e_1^{-1}(k/2\Gamma - \mu^{(1)}_\alpha), \tag{7}$$

где λ, μ удовлетворяют условию:

$$\prod_{j=1}^{N} e_1(\lambda_\alpha - k_j/2\Gamma) = \prod_{\beta=1}^{M} e_2(\lambda_\alpha - \lambda_\beta), \tag{8}$$

$$\prod_{\tau=\pm 1} \prod_{\beta=1}^{m(j+\tau)} e_1(\mu_\alpha^{(j)} - \mu_\beta^{(j+\tau)}) = \prod_{\beta=1}^{m(j)} e_2(\mu_\alpha^{(j)} - \mu_\beta^{(j)}); \quad (j = 1, \dots n-1),$$

$e_n(x) = (x - in/2)/(x + in/2)$, N – полное число частиц $m^{(j)} = \sum_{k=j+1}^{n} n_k$, $M = N/2 - S$, где S – полный спин, а n_k – число частиц с проекцией орбитального момента $n/2 - k$.

5. Опуская технические детали и вычисления, приведем интегральное уравнение описывающие примесную часть распределения решений уравнений (6) $\rho(k)$ непосредственно в пределе Кондо (4):

$$\rho(k) - \int_0^\infty F(k-k')\,\rho(k')dk' = (2\,\mathrm{ch}\,\pi(k - \frac{1}{\pi}\ln H/T_H))^{-1} \tag{9}$$

здесь H – магнитное поле,

$$F(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega k}\left(1 - \frac{\mathrm{th}\,\omega/2}{1 - e^{-n|\omega|}}\right)d\omega\,, \tag{10}$$

а T_H – температура Кондо, определяемая решением другого интегрального уравнения, которое мы здесь не приводим. Отметим лишь, что при $J \ll 1$, $T_H \sim J^{1/n} e^{-1/J}$, что соответствует результатам теории возмущений [2]. Нас будет интересовать намагниченность примеси во внешнем магнитном поле;

$$M_{imp}(H) = \int_0^\infty \rho(k)\,dk. \tag{11}$$

6. Приведем без доказательства обобщение результатов (9) – (11) для произвольных n и S. При этом в уравнениях (9) – (11) происходит одно, но важное изменение: меняется только правая часть уравнения (9)

$$\text{Правая часть уравнения (9)} = \frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\, e^{-2i\omega k}\left(e^{-|n-2S||\omega|} - e^{-(n+2S)|\omega|}\right) \times$$

$$\times\ (1 - e^{-2n|\omega|})^{-1}\,(2\,\mathrm{ch}\,\omega)^{-1} \tag{9*}$$

7. Уравнение (9*) решается явно методом Винера – Хопфа, что позволяет представить намагниченность в виде

$$M_{imp}(H) = -\frac{-in}{4\pi^{3/2}}\int \frac{d\omega}{\omega - i0}\exp(2i\omega\ln H/T_H)\left(\frac{i\omega+0}{e}\right)^{i\omega n}$$

$$\frac{\Gamma(1+i\omega)\Gamma(1/2 - i\omega)}{\Gamma(1+i\omega n)}\left(\exp(-\pi|n-2S||\omega|) - \exp(-\pi(n+2S)|\omega|)\right) \times \tag{12}$$

$$\times\ (1 - \exp(-2\pi n|\omega|))^{-1}.$$

Эта формула обобщает результат полученный ранее в [9] для $n = 1$. Проанализируем (12) при различных параметрах H/T_H, n, S.

а) **Большое магнитное поле** $H/T_H \gg 1$. Эта область контролируется теорией возмущения. Определим инвариантный заряд z уравнения. Гелл-Манна – Лоу суммирующим результатом двухпетлевого приближения [2];

$$\frac{1}{z} - \frac{n}{2}\ln|z| = \ln H/T_H. \tag{13}$$

Общее требование перенормируемости озаозначает что все физические величины раскладываются в ряд по целым степеням $|z| \ll 1$. Действительно из (12) имеем

$$M_{imp}(H) = S\ (1 - z + \sum_{k=2}^{\infty} a_k(n, S)\, z^k);\ H \gg T_H. \tag{14}$$

При $n \to \infty$ $a_k \sim n^{k-2}$. Поэтому ряд теории возмущения (14) справедлив при $nz \ll 1$, т.е. при $H \gg e^n\ T_H$.

б) **Малое магнитное поле** $H \ll T_H$. Здесь мы ожидаем существенно разное поведение при разных n и S.

(1) При $n < 2S$ основное состояние магнитных примесей $2S + 1 - n$ кратно вырождено, $M_{imp}(0) = S - {}^n/_2$, что соответствует пределу сильной связи. Это означает,что фиксированная точка гамильтониана (1) есть $J^* = \infty$. Обменные взаимодействия при $H \ll T_H$ имеет ферромагнитный характер. Вблизи устойчивой ферромагнитной фиксированной точки $J^* = \infty$ (т.е. при $H \to 0$), также как и вблизи неустойчивой антиферромагнитной фиксированной точки $J^* = 0$ (т.е. при $H \to \infty$) физические величины имеют логарифмический характер. Из (12) следует „дуальность" высоко и низкоэнергетических разложений

$$M_{imp}(H) = (S - {}^n/_2)(1 - z + \sum_{k=2}^{\infty} a_k(n, S - {}^n/_2)\, z^k);\ H \ll T_H. \tag{15}$$

(2) При $n = 2S$, основное состояние синглетно. Фиксированная точка также есть предел сильной связи, но поведение физических величин совсем иное

$$M_{imp}(H) = \sum_{k=1}^{\infty} b_k(n)(H/T_H)^{2k-1}. \tag{16}$$

Между областями $H \ll T_H$ и $H \gg e^n T_H$, в которых применимы формулы (14) и (16), при $n \to \infty$ имеется любопытный промежуточный режим $T_H \ll H \ll e^n T_H$.

$$M_{imp}(H) = \frac{1}{\pi}(n \ln {}^H/_{T_H})^{1/2}\,(1 + \frac{\pi \ln 2}{2 \ln {}^H/_{T_H}} + \ldots). \tag{17}$$

(3) Наиболее интересным представляется случай $n > 2S$. Эта ситуация качественно обсуждалась Нозьером и Бландэном [2]. Ими было замечено, что в этом случае фиксированная точка не может быть пределом сильной связи, так как последний при $n > 2S$ имеет антиферромагнитный характер и, тем самым, является неустойчивым. На основании этого Нозьер и Бландэн аргументировали, что фиксированная точка гамильтониана (1) при $n > 2S$ соответствует конечному значению эффективного взаимодействия $J^* < \infty$. Это означало бы,что при низких энергиях физические величины имеют *скейлинговый степенной характер*. [2)] . Магнитный момент при $H \to 0$, например, имел бы вид

$$M_{imp}(H) \sim (H/T_H)^{\alpha}, \tag{18}$$

где $0 < \alpha < 1$ – число зависящее, возможно, от n и S. Из формулы (12) следует, что это действительно так,причем $\alpha = 2/n$ при $n \neq 2$. При $n = 2$, $S = 1/2$, $H < T_H$

$$M_{imp}(H) = \sum_{k=0}^{\infty} (H/T_H)^{2k+1} A_k \ln {}^H/_{b_k T_H}. \tag{19}$$

[2)] Отметим, что формальная возможность скейлинга обсуждалась ранее в [10,9]. Однако авторы этих работ, обсуждали случай $n = 1$, в котором, скейлинг как раз отсутствует.

Гамильтониан (1) является по-видимому первым примером одномерной квантовой системой многих тел подобного рода.

Авторы выражают благодарность В.А.Фатееву и С.В.Покровскому за полезные обсуждения на разных этапах работы.

Литература

1. *Schrieffer J.R.* J. Appl. Phys., 1967, **38**, 1143.
2. *Nozieres P., Blandin A.* J. de Physique, 1980, **41**, 193.
3. *Andrei N., Furuya K., Lowenstein J.H.* Rev. Mod. Phys., 1983, **55**, 331.
4. *Wiegmann P.B.* In. "Quantum Theory of Solids" ed by. I.M.Lifschitz. M.: Мир, 1982.
5. *Furuya K., Lowenstein J.H.* Phys. Rev., 1982, **B25**, 5935.
6. *Вигман П.Б.* Письма в ЖЭТФ, 1980, **31**, 392.
7. *Wiegmann P.B.* Phys. Lett., 1980, **80A**, 163.
8. *Schlottmann P.A.* Z. Phys., 1982, **49**, 109.
9. *Fateev V.A., Wiegmann P.B.* Phys. Lett., 1980, **81A**, 179.
10. *Abrikosov A.A., Migdal A.A.* J. Low Temp. Phys., 1970, **3**, 579.
11. *Fowler M., Zawadowskii A.* J. Solid State Comm., 1971, **9**, 471.

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

Поступила в редакцию
18 октября 1983 г.