Письма в ЖЭТФ, том 36, вып. 4, стр. 128 – 131 *20 августа 1982 г.*

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ МАГНИТНЫЕ СОСТОЯНИЯ В МЕТАЛЛАХ

В.Л.Седов

Показано, что собственные волновые функции гамильтониана Андерсона, соответствующие магнитному и немагнитным состояниям примесного атома, при некоторых условиях находятся в простой взаимосвязи друг с другом. Разности энергии этих состояний определяются полюсами двухчастичной электрон-дырочной функции Грина.

1. В настоящей работе показано, что при определенных условиях существует простая связь между волновыми функциями магнитного и немагнитных состояний примеси определяемых гамильтонианом Андерсона [1]. Условия сводятся к требованию, чтобы расстоя-

ния между энергетическими уровнями этих состояний были много больше энергии взаимодействия примеси с электронами проводимости. В общем виде волновые функции магнитного и немагнитных состояний можно представить в форме

$$\Phi = A_1 \left(a_\sigma^+ \psi_1 + a_{-\sigma}^+ \psi_1' \right) + A_2 a_\sigma^+ a_{-\sigma}^+ \psi_2 + A_3 \psi_3, \tag{1}$$

где нормированные функции ψ_1, ψ_1', ψ_2 и ψ_3 – описывают состояние вырожденного электронного газа, взаимодействующего с примесным атомом; a_σ^+ – оператор рождения электрона на локализованном d-уровне со спином σ; A_1, A_2 и A_3 – постоянные коэффициенты. Ниже будет показано, что волновые функции для магнитного и немагнитных состояний, записанные в форме (1), отличаются друг от друга только значениями коэффициентов A_1, A_2 и A_3. Этот вывод является точным и не связан с пренебрежением какими-либо малыми величинами. Выражение (1) представляет волновую функцию Φ всей системы в виде суперпозиции состояний, в которых числа заполнения локализованного d-уровня примесного атома соответственно равны 1, 2 и 0. Под магнитным состоянием подразумевается состояние, для которого $|A_1^{\text{маг.}}|^2 > |A_1^{\text{немаг.}}|^2$. Члены в (1), перед которыми стоит коэффициент A_1 соответствуют частям Φ описывающим два взаимно противоположные направления магнитного момента примесного атома. Спонтанный магнитный момент примеси в таком „магнитном" состоянии равен нулю [3,4]. Общие свойства волновых функций магнитного и немагнитного состояний дают возможность связать разности энергий этих состояний с полюсами двухчастичной электрон-дырочной функции Грина.

2. Используя коммутационные соотношения для $a_{d\sigma}^+$ и $a_{d\sigma}$ – операторов рождения и уничтожения электрона на примесном d-уровне со спином σ, перепишем известный гамильтониан Андерсона [1] в виде

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_k a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_\sigma \left(\epsilon_d + \frac{U}{2} \right) a_{d\sigma}^+ a_{d\sigma} - \frac{U}{2} \left(a_{d\sigma} a_{d\sigma}^+ a_{d-\sigma}^+ a_{d-\sigma} + a_{d\sigma}^+ a_{d\sigma} a_{d-\sigma} a_{d-\sigma}^+ \right) +$$

$$+ V \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left(a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{d\sigma} + a_{d\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} \right). \tag{2}$$

В этом выражении все обозначения имеют обычный смысл. При такой записи гамильтониана, внутриатомное $d-d$-взаимодействие входит в H только в виде электрон-дырочного взаимодействия.

Положим константу $s-d$- взаимодействия V равной нулю. Оставшуюся часть гамильтониана (2) обозначим H°. Уравнение Шредингера для H° имеет решения, которые представляют собой волновые функции для системы состоящей из двух невзаимодействующих частей. Одной из этих частей соответствует изолированный примесный атом, другой – вырожденный электронный газ.

Можно составить три волновые функции, описывающие различные магнитные состояния примесного атома при условии, что вырожденный электронный газ находится в основном состоянии. Эти функции и соответствующие им энергии, имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
&\Phi_1^\circ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(a_\sigma^+ + a_{-\sigma}^+ \right) |2N>, && E_1^\circ = 2E^\circ + \epsilon_d ; \\
&\Phi_2^\circ = a_\sigma^+ a_{-\sigma}^+ |2N-1>, && E_2^\circ = 2E^\circ - \epsilon_F + 2\left(\epsilon_d + \frac{U}{2} \right) ; \\
&\Phi_3^\circ = |2N+1>, && E_3^\circ = 2E^\circ + \epsilon_F ,
\end{aligned} \tag{3}$$

где $|2N>$ – обозначает основное состояние вырожденного электронного газа, содержащего N электронов со спином σ и N электронов со спином $-\sigma$. В состоянии $|2N-1>$ имеется $2N-1$ частиц. Образующаяся в этом состоянии одна дырка равновероятно распределена по поверхностям Ферми, соответствующим спинам σ и $-\sigma$. Аналогичный смысл имеет символ $| 2N + 1 >$. Величина $2E^{\circ}$ представляет собой энергию основного состояния $| 2N>$ вырожденного электронного газа. Функция Φ_1° – описывает суперпозицию магнитных состояний примесного атома; Φ_2° – относится к немагнитному ~~спинсинглетному~~ состоянию и Φ_3° – представляет собой немагнитное состояние примесного атома, в котором оба d-уровня пусты.

Учет $s-d$-взаимодействия в гамильтониане (2) нельзя производить методами обычной теории возмущений даже при физически сколь угодно малых V. Это связано с тем, что под действием V в вырожденном электронном газе возбуждается большое число электрон-дырочных пар, энергии которых стремятся к нулю. При включении взаимодействия происходит смешивание функций Φ_1°, Φ_2°, Φ_3° и возбуждение электрон-дырочных пар.

3. Рассмотрим немагнитное состояние примесного атома. Общее выражение волновой функции всей системы для этого состояния имеет вид (1). Подставляя это выражение в уравнение Шриденгера, умножая его слева на функции $(a_{\sigma}^{+}\psi_1)^{+}$, $(a_{\sigma}^{+}a_{-\sigma}^{+}\psi_2)^{+}$, ψ_3^{+} и интегрируя по координатам всех частиц, получаем следующую систему алгебраических уравнений :

$$\begin{aligned} A_1 H_{11}^{\circ} + A_2 V_{12} + A_3 V_{13} &= A_1 E, \\ A_2 H_{22}^{\circ} + A_1 V_{21} + A_1 V_{21'} &= A_2 E, \\ A_3 H_{33}^{\circ} + A_1 V_{31} + A_1 V_{31'} &= A_3 E, \end{aligned} \qquad (4)$$

где H_{ii}° – диагональный матричный элемент оператора H°; V_{ij} – матричный элемент оператора $s-d$-взаимодействия, описываемого последним членом в гамильтониане (2). Матричные элементы в (4), вычисленные с помощью функций $a_{\sigma}^{+}\Phi_1$ и $a_{-\sigma}^{+}\Phi'_1$ соответственно равны, т.е. $H_{11}^{\circ} = H_{1'1'}^{\circ}$ и $V_{i1} = V_{i1'}$; В связи с этим система (4) содержит только три уравнения. Секулярное уравнение для определения собственных значений системы (4), имеет вид

$$E^3 - E^2 (H_{11}^{\circ} + H_{22}^{\circ} + H_{33}^{\circ}) + E(H_{11}^{\circ} H_{22}^{\circ} + H_{11}^{\circ} H_{33}^{\circ} + H_{22}^{\circ} H_{33}^{\circ} - 2|V_{12}|^2 -$$

$$- 2|V_{13}|^2) - H_{11}^{\circ} H_{22}^{\circ} H_{33}^{\circ} + 2|V_{12}|^2 H_{33}^{\circ} + 2|V_{13}|^2 H_{22}^{\circ} = 0. \qquad (5)$$

При $V = 0$, корни этого кубического уравнения совпадают с величинами E_1°, E_2° и E_3°, определяемыми выражениями (3).

Согласно известной формуле Кардана, алгебраическое уравнение третьей степени имеет три различных действительных корня только если величина $Q < 0$, где

$$Q = \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2; \qquad p = -\frac{a^2}{3} + b \quad \text{и} \quad q = 2\left(\frac{a}{3}\right)^3 - \frac{ab}{3} + c$$

константы a, b и c представляют собой коэффициенты в уравнении (5), находящиеся соответственно в членах содержащих E в квадрате, первой и в нулевой степенях. Для вычисления Q, энергию основного состояния удобно определить так, чтобы один из трех матричных элементов оператора H°, например H_{33}°, был равен нулю. При $V = 0$ величина $Q_{\circ}$ оказывается равной

$$Q_{\circ} = \frac{-1}{108} H_{11}^{\circ 2} H_{22}^{\circ 2} (H_{11}^{\circ} - H_{22}^{\circ})^2. \qquad (6)$$

Очевидно, что по крайней мере при достаточно малых V величина Q остается отрицательной. Таким образом, в этом случае секулярное уравнение (5) имеет три разных действительных корня, которым соответствуют волновые функции вида (1), отличающиеся друг от друга только значениями коэффициентов A_1, A_2 и A_3. Если $V \neq 0$, но является достаточно малой величиной, к выражению (6) для Q добавляются члены пропорциональные $|V_{12}|^2$ и $|V_{13}|^2$. Чтобы определить порядок величины этих членов, рассмотрим из каких частей складывается полное значение E. С этой целью выразим коэффициенты A_2 и A_3 входящие в два нижних уравнения (4), через A_1 и подставим их значения в первое уравнение этой системы. В результате это уравнение приобретает вид

$$H^{\circ}_{11} + \frac{2\,|V_{12}|^2}{E - H^{\circ}_{22}} + \frac{2\,|V_{13}|^2}{E - H^{\circ}_{33}} = E. \tag{7}$$

Если значение E в этом уравнении равно энергии магнитного состояния, то члены в левой части (7) имеют простой физический смысл. Именно, H°_{11} – представляет собой сумму собственных энергий вырожденного электронного газа и примесного атома, два остальных слагаемых описывают энергию взаимодействия E_{int} между этими подсистемами. Значение E_{int} является малой величиной по сравнению с U при условии, что $U \gg \Gamma$ – виртуальной ширины примесного атома [2]. Таким образом из (6) и (7) следует, что если разности энергий, соответствующих различным магнитным состояниям примесного атома, много больше E_{int}, то $Q < 0$.

4. Частное значение двухчастичной электрон-дырочной функции Грина определяется выражением

$$G_{-\sigma\sigma}(t_1 - t_2) = \langle 0\,|\,T\tilde{a}_{\sigma}(t_1)\tilde{a}_{-\sigma}(t_2)\tilde{a}^{+}_{\sigma}(t_2)\tilde{a}^{+}_{-\sigma}(t_1)\,|\,0\rangle, \tag{8}$$

где $\tilde{a}^{+}_{\sigma}(t)$ и $\tilde{a}_{\sigma}(t)$ операторы рождения и уничтожения электрона на d-уровне примесного атома со спином σ в гайзенберговском представлении; T – символ хронологического упорядочения операторов. Фурье образ $G_{-\sigma\sigma}(t_1 - t_2)$ равен

$$G_{-\sigma\sigma}(\omega) = i\sum_n \left[\frac{\langle 0\,|a_{\sigma}a^{+}_{-\sigma}|\,n\rangle\langle n\,|a_{-\sigma}a^{+}_{\sigma}|\,0\rangle}{\omega - E_n + E_{\circ} + i\delta} - \frac{\langle 0\,|a_{-\sigma}a^{+}_{\sigma}|\,n\rangle\langle n\,|a_{\sigma}a^{+}_{-\sigma}|\,0\rangle}{\omega + E_n - E_{\circ} - i\delta}\right]. \tag{9}$$

В этом выражении суммирование по n производится по всем состояниям рассматриваемой системы с фиксированным полным числом частиц. Если за основное состояние $|\,0\rangle$ принять немагнитное состояние с энергией $E_{\circ}$, : то магнитное состояние, входящее в сумму по n в (9), приводит к образованию полюсов при значениях ω равных $\pm(E_m - E_{\circ})$, где E_m – энергия магнитного состояния.

Автор выражает благодарность И.Е.Дзялошинскому за обсуждение результатов настоящей работы.

Литература

1. *Anderson P.W.* Phys. Rev., 1961, 124, 41.
2. *Krishna-murthy H.R., Wilkins J.W., Wilson K.G.* Phys. Rev., 1980, **B21**, 1044.
3. *Kiwi M., Pestana E., Ramirez R.* Phys. Stat. Sol., 1979, **(b) 95**, 497.
4. *Nolting W., Oles A.M.* Phys. Stat. Sol., 1981, **(b) 104**, 563.

Московский
государственный университет
им. М.В.Ломоносова

Поступила в редакцию
10 июля 1981 г.
После переработки
2 июля 1982 г.