

## ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ $s$ - $d$ ОБМЕННОЙ МОДЕЛИ ПРИ $T = 0$

*П.Б. Вигман*

Показано, что  $s$ - $d$  обменная модель является вполне интегрируемой. Найдена магнитная восприимчивость магнитной примеси в немагнитном металле при  $T = 0$ .

1. Взаимодействие электронов проводимости немагнитного металла с магнитной примесью принято изучать на примере так называемой  $s$ - $d$

модели:

$$\mathcal{H}_{sd} = \sum_{k, \sigma = \uparrow, \downarrow} \epsilon_k C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} + J \sum_{k, k'} C_{k\sigma}^+ \bar{\sigma}_{\sigma\sigma'} C_{k'\sigma'} \bar{S}; \quad S = 1/2; \quad J > 0. \quad (1)$$

Хорошо известно, что при  $T < T_K$  ( $T_K = \epsilon_F \exp(-1/J\rho)$  — температура Кондо), даже при  $J \ll 1$  эффективное взаимодействие электронов с примесью значительно и теория возмущения не позволяет выяснить свойства системы [1]. В настоящее время, по-видимому, не существует корректной приближенной схемы, позволяющей решить проблему Кондо. Тем не менее, задача решается точно, если сделать следующие упрощения. Предположим, что только  $s$ -волна взаимодействует с примесью. Так как кинетическая энергия электронов диагональна по парциальным волнам, это означает, что частицы с разными направлениями импульса рассеиваются примесью независимо, и, по существу, мы имеем дело с одномерной задачей. Кроме того, будем считать, что константа связи настолько мала, именно  $J \ln J \ll 1$ , что при низких температурах и малых магнитных полях можно пренебречь электронными состояниями, лежащими вдали от ферми-поверхности. Поэтому достаточно рассмотреть только линейный участок спектра  $\epsilon_k - \epsilon_F \approx v_F k$ . В этих предположениях задача является вполне интегрируемой.

2. Уравнение Шредингера для системы из  $N$  частиц имеет вид

$$\left( -E - i \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \psi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}^a(x_1 \dots x_N) + J \sum_{j=1}^N \bar{\sigma}_{\alpha_j \alpha_j'} \bar{S}_{\alpha\alpha'} \delta(x_j) \times \\ \times \psi_{\alpha_1' \dots \alpha_j' \dots \alpha_N'}^a(x_1 \dots x_N) = 0. \quad (2)$$

$\{\alpha_j\}$  — спины частиц, координаты которых  $\{x_j\}$  сосредоточены на произвольно выбранной прямой, проходящей через примесь. Перед тем как выписать решение уравнения (2) для произвольного  $N$ , сделаем следующее замечание. Пусть  $N = 2$ . В области  $x_1, x_2 < 0$  частицы свободны и  $\psi$ -функция может быть выбрана в виде плоской волны

$$\psi_{\alpha_1 \alpha_2}^a(x_1, x_2) = A_{\alpha_1 \alpha_2}^a e^{ik_1 x_1 + ik_2 x_2} - A_{\alpha_2 \alpha_1}^a e^{ik_1 x_2 + ik_2 x_1}, \quad (3)$$

где  $A_{\alpha_1 \alpha_2}^a$  — произвольная постоянная матрица. Попробуем искать  $\psi$ -функцию в других областях тоже в виде плоской волны, но с другой матрицей  $A$ . Уравнение Шредингера определяет величину скачков коэффициентов  $A$  при  $x_j = 0$ . Например:

$$A_{\alpha_1 \alpha_2}^a(x_1 > 0) = R_{\alpha_1 \alpha_2}^{\alpha_1' \alpha_2'} A_{\alpha_1' \alpha_2'}^a(x_1 < 0), \quad (4)$$

где

$$R_{10} \equiv R_{\alpha_1 \alpha_2}^{\alpha_1' \alpha_2'} = a + bP_{10}; \quad R_{10}^+ \equiv R_{01}.$$

Величины  $b$  и  $a$  — соответственно амплитуды рассеяния электрона примесью с переворотом и без переворота спина

$$a = -e^{-iJ} \cos 2J; \quad b = ie^{-iJ} \sin 2J, \quad (5)$$

а  $P_{10} = 2(\frac{1}{2} \times \frac{1}{2} + \bar{\sigma}\bar{S})$  — оператор перестановки спинов частицы и примеси. Однако, условия (4), определяющие скачки  $A_{\alpha_1\alpha_2}^a$ , противоречивы.

Действительно, пусть два электрона, один со спином  $\uparrow$ , а другой со спином  $\downarrow$  рассеиваются примесью, спин которой  $\uparrow$ . Если сначала рассеивается первый электрон, а затем второй, то спин примеси перевернется. Если же рассеяние происходит в другом порядке, то после рассеяния спин примеси останется прежним. Ясно, что порядок рассеяния не должен играть роли, так как частицы тождественны. Другими словами, матрицы  $R_{10}$  и  $R_{20}$  не коммутируют. Это означает, что электроны не могут рассматриваться независимо, т. е. задача является многочастичной.

3. Функция (3) не единственное решение уравнения Шредингера. Действительно, если  $\psi_0$  есть решение, то  $\psi_0 f(x_1 - x_2)$  — тоже решение. Оказывается, что  $\psi$ -функцию в области  $x_1, x_2 < 0$  можно выбрать так, что во всех остальных областях она будет иметь тот же вид, что и в области  $x_1, x_2 > 0$ . Эта функция отражает "упорядочение" спинов по координате и имеет вид

$$\psi_{\alpha_1\alpha_2}^a = \{A_{\alpha_1\alpha_2}^a \theta(x_1 - x_2) + A_{\alpha_2\alpha_1}^a \theta(x_2 - x_1)\} (e^{ik_1x_1 + ik_2x_2} - e^{ik_1x_2 + ik_2x_1}). \quad (6)$$

При этом коэффициенты  $A$  имеют скачки при  $x_j = 0$ , которые даются формулами (4) и (5). Теперь, рассматривая рассеяние двух частиц, необходимо следить за упорядочением их координат, независимо от того, разделены они примесью или нет. По-прежнему коэффициенты  $A_{\alpha_1\alpha_2}^a$  в областях  $x_1 < x_2 < 0$  и  $0 < x_2 < x_1$  можно связать друг с другом двумя разными способами, но сейчас они приводят к одинаковым результатам, так как имеет место условие факторизации:

$$P_{12}R_{10}R_{20} = R_{20}R_{10}P_{12}. \quad (7)$$

Поэтому формула (6) с условиями (4)–(5) дает решение уравнения Шредингера для  $N = 2$ . Величины  $k_1$  и  $k_2$  в (6) никогда не равны друг другу, даже в том случае, когда спины частиц противоположны. При рассеянии частиц примесью сохраняется не только сумма  $k_1 + k_2$ , которая есть энергия системы, но и каждое  $k_j$  по отдельности.

4. Для системы из  $N$  частиц справедлива *подстановка Бете*: пусть  $k_1 \dots k_N$  не равные друг другу числа. В области  $Q = \{x_{q_1} < \dots < 0 < \dots < x_{q_{N+1}}\}$

$$\psi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}^a(x_1 \dots x_N) = \sum_P (-1)^P A_{\alpha_1 \dots \alpha_N}^a(QP) \exp \left\{ i \sum_{j=1}^N x_j k_{p_j} \right\} \quad (8)$$

здесь  $P = \{p_1 \dots p_{N+1}\}$  и  $Q = \{q_1 \dots 0 \dots q_{N+1}\}$  — перестановки из чисел  $0, 1, \dots, N$ , а  $QP$  — произведение перестановок. Коэффициенты  $A(QP)$  связа-

ны друг с другом и могут быть выражены через  $A(I)$  ( $I = \{1 \dots N, 0\}$  — единичная перестановка)

$$A_{\alpha_1 \dots \alpha_N}^a(Q) = S_{\alpha_1 \dots \alpha_N, a}^{\alpha'_1 \dots \alpha'_N, a} \cdot (QI) A_{\alpha'_1 \dots \alpha'_N}^a(I).$$

Матрица  $S(QI)$  является двухчастично факторизованной — она есть произведение матриц, соответствующих перестановкам двух частиц. Для того, чтобы построить эту матрицу, нужно представить  $Q$  в виде последовательного произведения перестановок пар. Далее, каждому множителю сопоставляется матрица  $P_{ij}$ , если он осуществляет перестановку частиц  $(x_i, x_j)$  и  $R_{j0}$ , если перестановку частицы и примеси. Например, коэффициенты при  $\exp\{i \sum k_j x_j\}$  в областях  $I$  и  $I_1 = \{2 \dots N, 0, 1\}$  связаны матрицей  $R_{10} P_{1N} \dots P_{13} P_{12}$ . Конечно, разбиение на перестановки пар неоднозначно. Однако так же как и в случае двух частиц, выполнение условия факторизации (7) и условия унитарности

$$P_{ij} P_{ji} = 1, \quad R_{j0} R_{0j} = 1. \quad (9)$$

необходимо и достаточно для справедливости гипотезы Бете [2, 3], т. е. разные способы разбиения на последовательные перестановки пар приводят к одинаковым результатам. То, что система в разных областях  $Q$  описывается одинаковым набором  $\{k_j\}$  означает наличие бесконечного ряда законов сохранения.

5. Для того, чтобы найти спектр системы, необходимо удовлетворить граничным условиям, которые удобно выбрать периодическими, помещая систему в сферу радиусом  $L/2$ . Условия, которые налагаются при этом на коэффициенты  $A(Q)$  не зависят от  $Q$ . Выпишем их, например, для  $A(I) = \Phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}^a$

$$T(J)_{\alpha_1 \dots \alpha_N, a}^{\alpha'_1 \dots \alpha'_N, a} \cdot \Phi_{\alpha'_1 \dots \alpha'_N}^a \equiv P_{jj+1} \dots P_{jN} R_{j0} P_{j1} \dots P_{jj-1} \Phi = e^{ik_j L} \Phi. \quad (10)$$

Легко проверить, что все операторы  $T(J)$  равны друг другу. Собственные значения оператора  $T$  определяют  $k_j$  и, тем самым, спектр системы.

6. Задача на собственные значения впервые решена Янгом и Годенном [2, 4] и, с более общих позиций, Бакстером [3]. Решение дается системой уравнений (11, 12). Пусть спин системы  $S^z = N/2 - M$ . Тогда

$$Lk_j = 2\pi J_j + \sum_{\alpha=1}^M \theta(2\lambda_\alpha); \quad j = 1 \dots N. \quad (11)$$

$$N\theta(2\lambda_\alpha) + \theta(2\lambda_\alpha + 2/g) = 2\pi J_\alpha + \sum_{\alpha'=1}^M \theta(\lambda_\alpha - \lambda_{\alpha'}); \quad \alpha = 1 \dots M$$

$$E = \sum k_j, \quad (12)$$

где  $g = \text{tg } 2J$ , а  $\theta(x) = 2 \arcsin \text{tg } x$ .

Величины  $I_j$  и  $J_\alpha$  — целые, неравные друг другу числа, суть квантовые числа системы.

7. Просуммируем уравнения (11) — (12):

$$LE = 2\pi(\sum I_j + \sum J_\alpha) - \sum_\alpha \theta(2\lambda_\alpha + 2/g) = E + \epsilon. \quad (13)$$

Первый член в (13) определяет эквидистантную часть уровней энергии. Он описывает спектр свободного электронного газа. Второй член приводит к относительному изменению энергии на величину порядка  $N^{-1}$  и представляет собой энергию, связанную с примесью. С этой точностью второй член в уравнении (12) можно опустить.

Основному состоянию системы с заданным спином соответствует последовательное распределение чисел от  $-N/4 - S^z$  до  $N/4$ . При этом в уравнениях (11) — (13) можно перейти к термодинамическому пределу:  $N, M, L \rightarrow \infty$  вводя плотность "спиновых импульсов"

$$\rho(\lambda) = \frac{4}{1 + 4\lambda^2} - \frac{1}{2\pi} \int_{-b}^{\infty} \frac{2\rho(\lambda') d\lambda'}{1 + (\lambda - \lambda')^2}, \quad (14)$$

$$\epsilon = -\frac{N}{L} \int_{-b}^{\infty} \rho(\lambda) \theta\left(2\lambda + \frac{2}{g}\right) \frac{d\lambda}{2\pi}; \quad \frac{S^z}{N} = \frac{1}{2} - \int_{-b}^{\infty} \rho(\lambda) \frac{d\lambda}{2\pi}, \quad (15)$$

причем  $b = \infty$ , если  $S^z = 0$ . При  $b = \infty$  уравнение (14) совпадает с аналогичным уравнением, описывающим одномерную антиферромагнитную модель Гайзенберга (см., например, [5]).

8. Вычислим восприимчивость магнитной примеси в немагнитном металле при  $T = 0$  и как функцию магнитного поля  $H \ll \epsilon_F$ . Для этого так же как и в [5] удобно перейти к функции  $r(-\lambda - b)$ , определенной при всех  $\lambda$  и совпадающей с  $\rho(\lambda)$  при  $-b < \lambda < \infty$ . Эта функция удовлетворяет уравнению Винера — Хопфа

$$r(\lambda) = \frac{\pi}{\text{ch} \pi(\lambda + b)} - \int_0^{\infty} R(\lambda - \lambda') r(\lambda') d\lambda', \quad (16)$$

где  $R(\lambda)$  — резольвента уравнения (14) при  $b = \infty$ . Энергия и спин при этом —

$$\epsilon(H) - \epsilon(0) = \frac{N}{2L} \int_0^{\infty} r(\lambda) \text{arc tg sh} \pi(-\lambda - b + \frac{1}{g}) d\lambda; \quad S^z = N \int_0^{\infty} r(\lambda) \frac{d\lambda}{4\pi}. \quad (17)$$

В главном порядке по  $N^{-1}$  полный спин системы определяется магнетизмом электронов проводимости, поэтому  $S^z = H/2\epsilon_F$ . Так как  $H \ll \epsilon_F$  величина  $b \gg 1$ , поэтому уравнение (16) достаточно решить

в главном приближении по  $\exp(-\pi b)$ . При этом

$$H = \epsilon_F \sqrt{\frac{2\pi}{e}} \exp(-\pi b) + O(\exp(-3\pi b)),$$

а энергия дается формулой

$$\epsilon(H) - \epsilon(0) = \frac{iH}{4\pi\sqrt{2-i\infty}} \int_{-i\infty}^{i\infty} \frac{G(x)}{x(x - \frac{1}{2})\cos \pi x} e^{-2xz} dx, \quad (18)$$

где  $z \equiv \ln \frac{H}{T_K} = -\pi(b - \frac{1}{g})$ , а

$$G(x) = \sqrt{2\pi} \frac{\left(-\frac{x}{e}\right)^{-x}}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - x\right)}; \quad G(\infty) = 1.$$

Функция  $G(x)$  аналитична во всей комплексной полуплоскости с разрезом по положительной части вещественной оси. Зависимость магнитной восприимчивости качественно согласуется с известными экспериментами [6]:

$$\chi(H) = \frac{1}{2\pi^{3/2}iH} \int_{-i\infty}^{i\infty} \Gamma\left(x + \frac{1}{2}\right) \left(-\frac{x}{e}\right)^{-x} e^{-2xz} dx. \quad (19)$$

При  $\frac{H}{T_K} \ll 1$

$$\chi(H) = \chi(0) \sum_{n=0}^{\infty} (H\chi(0))^{2n} \frac{(-1)^n 2(\pi(n + \frac{1}{2}))^{n + \frac{1}{2}}}{n! \sqrt{\pi}},$$

где

$$\chi(0) = \text{const } T_K^{-1}.$$

Восприимчивость, таким образом, конечна при  $T = 0$  [7 - 9].

При  $H/T_K \gg 1$  интеграл (19) имеет другую асимптотику

$$\chi(H) = \frac{1}{2H \left(\ln \frac{H}{T_K}\right)^2} \left(1 + O\left(\frac{\ln \ln \frac{H}{T_K}}{\ln \frac{H}{T_K}}\right)\right).$$

Последняя формула может быть получена суммированием главных логарифмов теории возмущения.

9. Гипотеза Бете справедлива также для модели Андерсона, которая описывает образование локализованного момента в металле [10]

$$H_A = \sum_{k\sigma} \epsilon_k C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} + V \sum_{k\sigma} (C_{k\sigma}^+ d_\sigma + d_\sigma^+ C_{k\sigma}) + \sum_{\sigma=1,2} \epsilon_d d_\sigma^+ d_\sigma + U d_1^+ d_1 d_2^+ d_2.$$

Для этой модели уравнения, аналогичные (11), (12) имеют вид

$$L k_j + \theta \left( \frac{V^2}{k_j - \epsilon_d} \right) = 2\pi I_j - \sum_{\alpha=1}^M \theta(2g(k_j) - 2\lambda_\alpha),$$

$$\sum_{\alpha'=1}^M \theta(\lambda_\alpha - \lambda_{\alpha'}) + 2\pi J_\alpha = \sum_{j=1}^N \theta(2\lambda_\alpha - 2g(k_j)), \quad (20)$$

$$g(k) = (k - U - \epsilon_d)(k - \epsilon_d) / V^2 U.$$

В пределе  $U/V^2, \epsilon_d/V^2 \rightarrow \infty$  уравнения (20), очевидно, переходят в уравнения (11), (12), при этом  $J = UV^2/\epsilon_d(U + \epsilon_d)$ .

Автор выражает признательность А.А.Белавину, А.А.Гоголину, А.И.Ларкину и Д.Е.Хмельницкому за обсуждения.

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

Поступила в редакцию  
5 февраля 1980 г.

### Литература

- [1] А.А.Абрикосов. *Physics*, **2**, 21, 1965.
- [2] С.Н.Янг. *Phys. Rev. Lett.*, **19**, 1312, 1967.
- [3] Р.Дж.Бакстер. *Ann. of Phys.*, **70**, 193, 1972.
- [4] М.Гюдин. *Phys. Lett.*, **24A**, 55, 1967.
- [5] С.Н.Янг. *Phys. Rev.*, **150**, 327, 1966.
- [6] П.Штайнер, С.Хүфнер. *Phys. Rev.*, **B12**, 842, 1975.
- [7] П.В.Андерсон, Г.Йвал, Д.Р.Наманн. *Phys. Rev.*, **B1**, 4664, 1970.
- [8] К.Д.Шотте, У.Шотте. *Phys. Rev.*, **B4**, 2228, 1974.
- [9] К.Уилсон. *Rev. Mod. Phys.*, **47**, 773, 1975.
- [10] Р.В.Вiegmann. to be published.