Письма в ЖЭТФ, том 70, вып.2, стр.106 - 111 © 1999г. 25 июля

ДВА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАСШТАБА И НАРУШЕНИЕ ПЕРЕНОРМИРУЕМОСТИ В ПРОБЛЕМЕ КОНДО

Ю.Н.Овчинников[1)], *А.М.Дюгаев*

Max-Planck-Institute for Physics Komplex Systems
D-01187 Dresden, Germany

Институт теоретической физики им. Л.Д.Ландау РАН
117940 Москва, Россия

Поступила в редакцию 10 июня 1999 г.

Показано, что в проблеме Кондо возникает второй масштаб энергии $T_0 \gg T_k$. Теория возмущений справедлива лишь в области $T > T_0$. Поэтому переход от слабой связи к режиму сильной связи происходит при температурах, много больших, чем температура Кондо T_k.

PACS: 75.20.Hr

Обычно при исследовании проблемы Кондо делается предположение о существовании одного энергетического масштаба и перенормируемости теории [1–3]. Исследование зависимости среднего спина электрона примесного атома от величины магнитного поля при $T = 0$ [4] показало, что теория возмущений неприменима даже в области сильных магнитных полей $\mu H > T_k$, где μ - магнетон Бора, а T_k - температура Кондо. Поэтому имеет смысл проверить гипотезу о существовании лишь одного масштаба энергии и перенормируемости обменного взаимодействия в рамках теории возмущений при конечных температурах. Исследование усложняется тем, что как будет показано ниже, свободная энергия F в проблеме Кондо не есть сумма неприводимых диаграмм.

Мы предположим, что взаимодействие магнитной примеси с электронами проводимости описывается обменным гамильтонианом

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \int d^3r_1 d^3r_2 \; V(r_1 - r_2)\chi^+_\alpha(r_1)\varphi^+_\beta(r_2)\chi_\beta(r_2)\varphi_\alpha(r_1) -$$
$$-\frac{\mu H}{2}\int \Big(\varphi^+_\uparrow(r_1)\varphi_\uparrow(r_1) - \varphi^+_\downarrow(r_1)\varphi_\downarrow(r_1)\Big)d^3r_1. \qquad (1)$$

Здесь операторы $\varphi^+_\alpha, \chi^+_\alpha$ есть операторы рождения электрона в локализованном на примеси состоянии и в непрерывном спектре, соответственно. Статистическая сумма Z при конечной температуре может быть записана в виде [5]

$$Z = \mathrm{tr}\,\exp\,(-\hat{H}/T) = \mathrm{tr}\Big\{e^{-\hat{H}_0/T}\Big[1 - \int_0^{1/T} d\tau\; \hat{V}(\tau) +$$
$$+ \int_0^{1/T} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2\; \hat{V}(\tau_1)\hat{V}(\tau_2) - ...\Big]\Big\}, \qquad (2)$$

где

$$\hat{V}(\tau) = e^{\hat{H}_0\tau}V(r)e^{-\hat{H}_0\tau}. \qquad (3)$$

Мы будем использовать симметричную модель обрезания матричных элементов с энергией обрезания D [3]. При $T = 0$ мы показали, что зависимость энергии основного состояния от величины магнитного поля не чувствительна к виду обрезания. В теории возмущений возникает величина

$$\Phi(\tau) = \sum_k (1 - n_k) e^{-\tau\varepsilon_k} = \int_{-D}^{D} d\xi\; e^{-\tau\xi} \left(1 - \frac{1}{1 + \exp\,(\xi/T)}\right), \tag{4}$$

где n_k - фермиевская функция распределения электронов, а энергия ε_k отсчитывается от поверхности Ферми. Легко проверить, что выполняется следующее равенство

$$\sum_k n_k e^{\tau\varepsilon_k} = \int_{-D}^{D} d\xi\; e^{\tau\xi} \big(1 + \exp(\xi/T)\big)^{-1} = \Phi(\tau). \tag{5}$$

Функция $\Phi(\tau)$ удовлетворяет соотношению

$$\Phi(\tau) = \Phi(1/T - \tau). \tag{6}$$

Уравнения (4), (5), (6) существенно упрощают вычисления рядов теории возмущений. Из формул (4), (5) находим

$$\Phi(\tau) = \frac{1}{\tau}(1 - e^{-D\tau}) + \left(\frac{1 - e^{-D(1/T-\tau)}}{1/T - \tau} - \frac{1}{1/T + \tau}\right) - 2\tau \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-)^n}{(n/T)^2 - \tau^2}. \tag{7}$$

Легко проверить, что вблизи особенности ($\tau T \ll 1$) функция $\Phi(\tau)$ представима в виде

$$\Phi(\tau) = \frac{1}{\tau}(1 - e^{-D\tau}) + \frac{\pi^2}{6} T^2 \tau + 0\Big(T(T\tau)^3\Big). \tag{8}$$

Во втором порядке теории возмущений из формул (2), (4), (5) находим

$$Z_2 = Z_0^e Z_0^i g^2 (J_0 + J_H), \tag{9}$$

где

$$J_H = \int_0^{1/T} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} \Phi^2(\tau_1 - \tau_2) \frac{\exp\,(-\mu H(\tau_1 - \tau_2)) + \exp\,\big(-\mu H/T + \mu H(\tau_1 - \tau_2)\big)}{1 + e^{-\mu H/T}}, \tag{10}$$

$J_0 = J_{H=0}$, $Z_0^i = 2\mathrm{ch}\Big(\mu H/2T\Big)$, Z_0^e – статистическая сумма свободного электронного газа. В формуле (9) g - безразмерная константа связи, определяемая соотношением

$$\sum_k \langle V \rangle (...) \to g \int_{-D}^{D} d\xi (...).$$

Выражения (9), (10) совпадают с результатами работы [3].

В третьем порядке теории возмущений выражение для статистической суммы все еще достаточно простое

$$Z_3 = -Z_0^e Z_0^i g^3 \int_0^{1/T} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_3 \Phi(\tau_1 - \tau_2)\Phi(\tau_2 - \tau_3)\Phi(\tau_1 - \tau_3)\times$$

$$\times\left\{\mathcal{N}(\tau_1 - \tau_2) + \mathcal{N}(\tau_2 - \tau_3) + \mathcal{N}(\tau_1 - \tau_3)\right\}, \qquad (11)$$

где

$$\mathcal{N}(\tau) = \frac{e^{-\mu H\tau} + e^{-\frac{\mu H}{T} + \mu H\tau}}{1 + e^{-\mu H/T}}.$$

Члены четвертого порядка приводят к появлению второго масштаба энергии в проблеме Кондо. Поэтому выражение для поправки четвертого порядка Z_4 мы приведем полностью

$$Z_4 = Z_0^e Z_0^i g^4 \Bigg\{ \frac{1}{2}(J_0 + J_H)^2 + \int_0^{1/T} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_3 \int_0^{\tau_3} d\tau_4 \times$$

$$\times\Big[\Phi^2(\tau_1 - \tau_2)\Phi^2(\tau_3 - \tau_4)(\mathcal{N}((\tau_1 - \tau_2) + (\tau_3 - \tau_4)) - \mathcal{N}(\tau_1 - \tau_2)\mathcal{N}(\tau_3 - \tau_4)) +$$

$$+\Phi^2(\tau_1 - \tau_4)\Phi^2(\tau_2 - \tau_3)(\mathcal{N}((\tau_1 - \tau_2) + (\tau_3 - \tau_4)) - \mathcal{N}(\tau_1 - \tau_4)\mathcal{N}(\tau_2 - \tau_3)) -$$

$$-\Phi^2(\tau_1 - \tau_3)\Phi^2(\tau_2 - \tau_4)(\mathcal{N}(\tau_1 - \tau_3) + \mathcal{N}(\tau_2 - \tau_4)) + \mathcal{N}(\tau_1 - \tau_3)\mathcal{N}(\tau_2 - \tau_4))\Big] +$$

$$+ \int_0^{1/T} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_3 \int_0^{\tau_3} d\tau_4 \Big[\Phi(\tau_1 - \tau_4)\Phi(\tau_3 - \tau_4)\Phi(\tau_2 - \tau_3)\Phi(\tau_1 - \tau_2)\times$$

$$\times(2 + 2\mathcal{N}((\tau_1 - \tau_2) + (\tau_3 - \tau_4)) + \mathcal{N}(\tau_1 - \tau_2) + \mathcal{N}(\tau_1 - \tau_4) + \mathcal{N}(\tau_2 - \tau_4) +$$

$$\mathcal{N}(\tau_3 - \tau_4) + \mathcal{N}(\tau_1 - \tau_3) + \mathcal{N}(\tau_2 - \tau_3)) - \Phi(\tau_2 - \tau_4)\Phi(\tau_3 - \tau_4)\Phi(\tau_1 - \tau_3)\Phi(\tau_1 - \tau_2)\times$$

$$\times(2 + \mathcal{N}(\tau_1 - \tau_2) + \mathcal{N}(\tau_3 - \tau_4)) - \Phi(\tau_1 - \tau_4)\Phi(\tau_2 - \tau_4)\Phi(\tau_2 - \tau_3)\Phi(\tau_1 - \tau_3)\times$$

$$\times(2 + \mathcal{N}(\tau_1 - \tau_4) + \mathcal{N}(\tau_2 - \tau_3))\Big]\Bigg\}. \qquad (12)$$

Выражения (9), (11), (12) позволяют найти поправку к свободной энергии, возникающей из-за взаимодействия. В ней содержится большое слагаемое, пропорциональное энергии обрезания D и зависящее от константы взаимодействия g. Обычно этот вклад рассматривается как сдвиг уровня δE основного состояния и предполагается не зависящим от температуры во всех порядках по константе связи g. В таком случае так определенная величина δE должна совпадать во всех порядках по g (при том же обрезании) с величиной $\delta\bar{E}$, являющейся сдвигом уровня основного состояния и найденной при $T = 0$.

Мы сейчас покажем, что такое совпадение существует лишь во втором и третьем порядках по константе связи g. В четвертом порядке возникает отличие, приводящее ко второму масштабу энергии в проблеме Кондо.

Из уравнений (9), (11), (12) находим

$$-\delta E = D\left\{g^2 4\ln 2 - 3g^3 \int\limits_0^{\infty}\frac{dx}{x}\int\limits_0^{x}\frac{dy(1-e^{-x})(1-e^{-y})(1-e^{-(x-y)})}{y(x-y)} + \right.$$

$$+g^4\left[6\int\limits_0^{\infty} dxdydz\frac{(1-e^{-x})(1-e^{-y})(1-e^{-z})(1-e^{-(x+y+z)})}{xyz(x+y+z)} - \right.$$

$$\left.\left. -3\int\limits_0^{\infty} dxdydz\frac{(1-e^{-(x+y)})^2(1-e^{-(y+z)})^2}{(x+y)^2(y+z)^2}\right]\right\}. \tag{13}$$

Величина $\delta\bar{E}$ была найдена в работе [4]. Используя результаты работы [4] (см. Appendix C), приведем выражение для величины $\delta\bar{E}$ к виду

$$-\delta\bar{E} = D\left\{g^2 4\ln 2 - 3g^3\int\limits_0^1\frac{d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3}{(\xi_1+\xi_2)(\xi_1+\xi_3)} + \right.$$

$$+g^4\int\limits_0^1 d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 d\xi_4\left[\frac{10}{(\xi_1+\xi_2)(\xi_1+\xi_3)(\xi_1+\xi_4)} - \frac{4}{(\xi_1+\xi_2)(\xi_1+\xi_3)(\xi_3+\xi_4)} - \right.$$

$$\left.\left. -\frac{4}{(\xi_1+\xi_2)(\xi_1+\xi_3)(\xi_1+\xi_2+\xi_3+\xi_4)} + \frac{1}{(\xi_1+\xi_2)(\xi_3+\xi_4)(\xi_1+\xi_2+\xi_3+\xi_4)}\right]\right\}. \tag{14}$$

Далее находим из уравнений (13), (14)

$$\int\limits_0^1\frac{d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3}{(\xi_1+\xi_2)(\xi_1+\xi_3)} = 2\ln^2 2 + \frac{\pi^2}{6};$$

$$\int\limits_0^{\infty}\frac{dx}{x}\int\limits_0^{x}\frac{dy}{y}\frac{(1-e^{-x})(1-e^{-y})(1-e^{-(x-y)})}{x-y} = \frac{\pi^2}{6} + \left(\frac{\pi^2}{3} - 4\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{2^n n^2}\right). \tag{15}$$

Поскольку выполняется равенство

$$\frac{\pi^2}{3} - 4\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{2^n n^2} = 2\ln^2 2, \tag{16}$$

то выражения для δE и $\delta\bar{E}$ совпадают во втором и третьем порядках теории возмущений. В четвертом порядке из формул (13), (14) находим

$$-(\delta\bar{E} - \delta E) = 4g^4 D\int\limits_0^1 d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 d\xi_4\left\{\frac{1}{(\xi_1+\xi_2)(\xi_1+\xi_3)(\xi_1+\xi_4)} - \right.$$

$$-\frac{1}{(\xi_1+\xi_2)(\xi_1+\xi_3)(\xi_3+\xi_4)} - \frac{1}{(\xi_1+\xi_2)(\xi_1+\xi_3)(\xi_1+\xi_2+\xi_3+\xi_4)} +$$

$$+\frac{1}{(\xi_1+\xi_2)(\xi_3+\xi_4)(\xi_1+\xi_2+\xi_3+\xi_4)}\Bigg\}. \tag{17}$$

Используя соотношение

$$\int_0^1 \frac{d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 d\xi_4}{(\xi_1+\xi_2)(\xi_1+\xi_3)(\xi_1+\xi_2+\xi_2+\xi_3+\xi_4)} = \frac{1}{2}\int_0^1 \frac{d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 d\xi_4}{(\xi_1+\xi_3)(\xi_1+\xi_2)(\xi_3+\xi_4)}, \tag{18}$$

приведем выражение (16) для разности энергий $(\delta\tilde{E}-\delta E)$ к виду

$$-(\delta\tilde{E}-\delta E) = 4g^4 D\left\{\int_0^1 dx\,\ln^3\left(\frac{1+x}{x}\right) - \frac{3}{2}\int_0^1 dxdy\frac{\ln\left(\frac{1+x}{x}\right)\ln\left(\frac{1+y}{y}\right)}{x+y} + I\right\}, \tag{19}$$

где интеграл I определяется выражением

$$I = \int_0^1 \frac{d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 d\xi_4}{(\xi_1+\xi_2)(\xi_3+\xi_4)(\xi_1+\xi_2+\xi_2+\xi_3+\xi_4)} = 40\ln 2 - 24\ln 3 + 2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^2 2^{2n}}. \tag{20}$$

Два оставшихся интеграла в форуле (19) удобно вычислять вместе. В результате несложных преобразований находим

$$\int_0^1 dx\ln^3\left(\frac{1+x}{x}\right) - \frac{3}{2}\int_0^1 \frac{dxdy}{x+y}\ln\left(\frac{1+x}{x}\right)\ln\left(\frac{1+y}{y}\right) = \tag{21}$$

$$= \ln^3 2 - 6\int_2^{\infty}\frac{dx\ln x\ln(x/2)}{x(x-1)(x-2)} = -2\ln^3 2 - 6\left(\zeta(3) - 2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{2^n n^3}\right),$$

где $\zeta(x)$ – дзета функция Римана.

Подставляя выражения (20), (21) в формулу (19), находим

$$-(\delta\tilde{E}-\delta E) = 4g^4 D\Big\{40\ln 2 - 24\ln 3 + 2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^2 2^{2n}} - 2\ln^3 2 - \tag{22}$$

$$-6\left(\zeta(3) - 2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{2^n n^3}\right) = g^4 D\cdot 3.8506.$$

Отличие от нуля правой части в формуле (22) означает, что в проблеме Кондо существует второй характерный масштаб энергии T_0, такой что $T_k \ll T_0 \ll \epsilon_F$. Для его определения необходимо исследовать члены теории возмущений в старших порядках. В нулевом магнитном поле аномальные члены появляются лишь в восьмом порядке теории возмущений и приводят к поправке δF в свободной энергии, равной

$$\delta F = 24JDg^8\int_0^{\infty} dxdydz\frac{I_1(y+z)I_1(x+z)}{(x+y+z)^2}(1-e^{-(x+y+z)})^2, \tag{23}$$

где интеграл $I_1(a)$ определяется выражением

$$I_1(a) = \int\limits_a^\infty \frac{dx(1-e^{-x})^2}{x^2}. \tag{24}$$

По порядку величины поправка δF равна

$$\delta F \sim g^8 D^2/T. \tag{25}$$

Сравнение поправок к теплоемкости, возникающих из членов четвертого порядка, определяемых уравнением (23), и членов восьмого порядка в уравнении (25) показывает, что второй характерный масштаб энергии T_0 в проблеме Кондо по порядку величины равен

$$T_0 \sim g^2 D. \tag{26}$$

Это значение T_0 совпадает с выражением, полученным в работе [6] в приближении самосогласованного поля.

В выражении для статистической суммы величина $\mathcal{N}(\tau)$ в любом порядке теории возмущений может появиться не более чем в виде одного сомножителя. Это свойство связано с тем, что в локализованном состоянии всегда находится только один электрон. Тем не менее, в магнитном поле аномальные члены появляются в свободной энергии также лишь в восьмом порядке по константе связи g. Точка T_0, по-видимому, является кроссовером от теории возмущений к сильной связи. Теория возмущений справедлива лишь в области $T \gg T_0$. В области $T \ll T_0$ реализуется сильная связь.

Авторы выражают благодарность проф. P.Fulde за ценные замечания и поддержку работы.

---

1. A.A.Abrikosov and A.A.Migdal, J. of Low Temp. Phys. **3**, 519 (1970).
2. A.M.Tsvelick and P.B.Wigmann, Advances in Physics **32**, 453 (1983).
3. N.Andrei, K.Furuya, and J.H.Lowenstein, Rev. Mod. Phys. **55**, 331 (1983).
4. Yu.N.Ovchinnikov and A.M.Dyugaev, ZhETF **115**, 1263 (1999); JETP **88**, 696 (1999).
5. A.A.Abrikosov, L.P.Gor'kov, and I.E.Dzyaloshinski. *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J. 1963.
6. Yu.N.Ovchinnikov, A.M.Dyugaev, P.Fulde, and V.Z.Kresin. JETP Lett. **66**, 195 (1997); Pis'ma v ZhETF **66**, 184 (1997).