

МАКРОСКОПИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ В ТЯЖЕЛО-ФЕРМИОННЫХ СОЕДИНЕНИЯХ

A.B.Гольцев¹⁾

*Физико-технический институт им.А.Ф.Иоффе РАН
194021 Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 27 июня 1995 г.

Дано обобщение уравнения Ландау–Силина для описания электронных кинетических явлений в тяжело-фермионных соединениях. В рамках этого подхода рассмотрена макроскопическая диэлектрическая реакция.

Электроны в тяжело-фермионных соединениях (ТФС) являются примером когерентной ферми-жидкости. Когерентное электронное состояние формируется благодаря эффекту Кондо в области температур ниже температуры Кондо T_0 . Это проявляется как в термодинамических, так и в кинетических свойствах ТФС [1].

В нашей предыдущей работе [2] мы развили макроскопическое описание термодинамических свойств ТФС в рамках обобщенной теории Ландау. В настоящей работе мы предлагаем макроскопическое описание кинетических явлений в ТФС. В качестве примера применения этого феноменологического подхода мы исследуем диэлектрическую реакцию. В частности, мы рассмотрим экранировку заряда и плазменные колебания.

Согласно [2], макроскопическое описание свойств ТФС в рамках теории Ландау [3, 4] основывается на двух предположениях: 1) волновая функция квазичастиц вблизи поверхности Ферми есть суперпозиция блоховских волновых функций электронов в широкой зоне проводимости $\epsilon(\mathbf{k})$ и узкой f -зоне (дисперсией последней мы пренебрегаем и фактически полагаем узким уровнем); 2) число f -электронов на f -уровне фиксировано. Первое предположение характеризует формирование когерентного состояния Кондо. Как следствие, электронное распределение описывается матричной функцией распределения $N_{\alpha\beta}^{ab}(\mathbf{k})$, имеющей как зонные индексы a и b , принимающие значения c и f , так и спиновые индексы α и β для спина $1/2$:

$$N = \begin{pmatrix} N_{\alpha\beta}^c(\mathbf{k}) & N_{\alpha\beta}^{cf}(\mathbf{k}) \\ N_{\alpha\beta}^{fc}(\mathbf{k}) & N_{\alpha\beta}^f(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Диагональные элементы $N_{\alpha\beta}^c(\mathbf{k})$ и $N_{\alpha\beta}^f(\mathbf{k})$ описывают электронное распределение в зоне проводимости в f -зоне, соответственно. Недиагональные элементы $N_{\alpha\beta}^{cf}(\mathbf{k}) = (N_{\beta\alpha}^{fc}(\mathbf{k}))^*$ характеризуют когерентные явления в ТФС. Другим важным понятием теории является матрица квазичастичных энергий $\epsilon_{\alpha\beta}^{ab}(\mathbf{k})$, которая в парамагнитном состоянии имеет вид

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \epsilon(\mathbf{k}) & b \\ b^* & \epsilon_f \end{pmatrix}, \quad (2)$$

¹⁾e-mail: goltsev@masha.shuv.pti.spb.su

где $\epsilon(\mathbf{k})$ есть энергия электронов в зоне проводимости, ϵ_f есть эффективная энергия f -уровня, определяемая из условия заполнения f -зоны N_f электронами: $N_f = \sum_{\alpha\mathbf{k}} N_{\alpha\alpha}^f(\mathbf{k})$. Параметр когерентности b определяется соотношением $b = \sum_{\alpha p} \varphi(\mathbf{k}, \mathbf{p}) N_{\alpha\alpha}^{cf}(\mathbf{p})$. В общем случае это комплексное число. В настоящей работе мы ограничимся случаем $\varphi(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = \varphi_0 = \text{const}$, когда параметр b не зависит от \mathbf{k} .

Рассмотрим отклонение функции распределения от равновесного значения N_0 : $N(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = N_0(\mathbf{k}) + N_1(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$. Это приводит к изменению матрицы квазичастичных энергий: $\epsilon(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = \epsilon_0(\mathbf{k}) + \epsilon_1(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$. В парамагнитном состоянии мы имеем

$$\epsilon_1(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = \delta_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} 0 & b_1(\mathbf{r}, t) \\ b_1^*(\mathbf{r}, t) & \epsilon_f(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Согласно (3), матричный элемент ϵ_1^c равен нулю, что является следствием учета только обменного взаимодействия между электронами. В общем случае флуктуации комплексной функции $b_1(\mathbf{r}, t)$ описывают флуктуации модуля и фазы параметра когерентности. Важно также отметить независимость ϵ_1 от \mathbf{k} .

В рамках теории Ландау (см., например, [5, 6]) неравновесная функция распределения N описывается кинетическим уравнением

$$\partial N / \partial t + \{\nabla_{\mathbf{r}} N \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon\} - \{\nabla_{\mathbf{k}} N \nabla_{\mathbf{r}} \epsilon\} - i[\epsilon, N] = I(N_1), \quad (4)$$

где $I(N_1)$ – интеграл столкновений и $2\{AB\} = AB + BA$. Линеаризуя уравнение (4), получим

$$\partial N_1 / \partial t + \{\nabla_{\mathbf{r}} N_1 \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_0\} - \{\nabla_{\mathbf{k}} N_0 \nabla_{\mathbf{r}} \epsilon_1\} - i[\epsilon_1, N_0] - i[\epsilon_0, N_1] = I(N_1). \quad (5)$$

Суммируем (5) по всем \mathbf{k} и берем след по зонным и спиновым индексам. Так как вклад интеграла столкновений равен нулю, А матрица ϵ_1 , согласно (3), не зависит от \mathbf{k} , приходим к уравнению непрерывности:

$$\partial \mathcal{N} / \partial t + \text{div} \mathbf{J} = 0, \quad (6)$$

которое связывает изменение концентрации полного числа электронов $\mathcal{N} = \sum_{\alpha\mathbf{k}} (N_{\alpha\alpha}^c + N_{\alpha\alpha}^f)$ с потоком частиц

$$\mathbf{J} = \sum_{\alpha\mathbf{k}} \mathbf{v}_{0\mathbf{k}} N_{1\alpha\alpha}^c(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t). \quad (7)$$

Здесь $\mathbf{v}_{0\mathbf{k}} = \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k})$ есть неперенормированная скорость электронов проводимости. С физической точки зрения этот результат обусловлен тем, что f -электроны локализованы и поток создается движением электронов проводимости. Отметим, что если амплитуда взаимодействия $\varphi(\mathbf{k}, \mathbf{p})$ не является константой, тогда выражение для потока содержит дополнительные слагаемые. Однако эта проблема выходит за рамки данной работы.

Кинетическое уравнение (4) необходимо дополнить еще двумя уравнениями:

$$\sum_{\alpha\mathbf{k}} N_{1\alpha\alpha}^f(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = 0, \quad (8)$$

$$\varphi_0 \sum_{\alpha\mathbf{k}} N_{1\alpha\alpha}^{cf}(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t) = b_1(\mathbf{r}, t), \quad (9)$$

первое из которых означает, что число f -электронов фиксирано и не зависит от \mathbf{r} и t . Уравнение (9) связывает флуктуации параметра когерентности $b(\mathbf{r}, t) = b_0 + b_1(\mathbf{r}, t)$ с флуктуациями функции распределения. Уравнения (5), (8) и (9) дают полное описание незаряженной ТФС.

Обобщим кинетическое уравнение (5) на случай заряженной системы. Пусть $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ есть макроскопическое продольное электрическое поле, равное сумме полей, создаваемых сторонними зарядами, и поляризационного поля. Мы полагаем, что поле действует как на электроны проводимости, так и на f -электроны. Тогда обобщенное уравнение Ландау–Силина имеет вид

$$\partial N_1 / \partial t + \{\nabla_{\mathbf{r}} N_1 \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_0\} - \{\nabla_{\mathbf{k}} N_0 \nabla_{\mathbf{r}} \epsilon_1\} + e \mathbf{E} \nabla_{\mathbf{k}} N_0 - i[\epsilon_1, N_0] - i[\epsilon_0, N_1] = I(N_1). \quad (10)$$

Совместное решение уравнений (8), (9) и (10) позволяет определить диэлектрическую реакцию в ТФС на продольное электрическое поле. Мы ограничимся рассмотрением случая, когда частота столкновений много меньше частоты колебаний электрического поля ω . В этом пределе можно пренебречь интегралом столкновений. Тогда кинетическое уравнение (10) решается точно, и мы находим матрицу N_1 как функционал от ϵ_1 .

Пусть электрическое поле есть периодическая функция в пространстве и времени:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega) \exp(i\mathbf{qr} - i\omega t) + \text{к.с.}$$

Производя преобразование Фурье по координате r , а затем решая временное дифференциальное уравнение, получим

$$N_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) = i \int_{-\infty}^0 dy \exp(-i\epsilon_- y - i\omega y) (\epsilon_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) N_+ - N_- \epsilon_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \omega) + ie \mathbf{E} \nabla_{\mathbf{k}} N_0) \exp(i\epsilon_+ y), \quad (11)$$

где мы обозначили $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{q}, \omega)$. Кроме того, введены матрицы

$$\epsilon_{\pm} = \epsilon_0(\mathbf{k}) \pm \frac{1}{2} \mathbf{q} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_0(\mathbf{k}), \quad N_{\pm} = N_0(\mathbf{k}) \pm \frac{1}{2} \mathbf{q} \nabla_{\mathbf{k}} N_0(\mathbf{k}). \quad (12)$$

Решение (11) можно несколько упростить, если использовать приближение $\epsilon_{\pm} \approx \epsilon_0(\mathbf{k} \pm 1/2\mathbf{q})$, $N_{\pm} \approx N_0(\mathbf{k} \pm 1/2\mathbf{q})$, которое соответствует пренебрежению слагаемыми порядка $O(q^2)$. Это приближение оказывается достаточным для решения задач, когда электрическое поле меняется в пространстве достаточно медленно. В рамках этого приближения матрицы ϵ_{\pm} и N_{\pm} можно привести одновременно к диагональному виду с помощью унитарного преобразования U : $\epsilon_0(\mathbf{k}) = U_{\mathbf{k}}^{-1} E_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}}$, $N_0(\mathbf{k}) = U_{\mathbf{k}}^{-1} f_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}}$. Здесь $E_{\mathbf{k}}$ и $f_{\mathbf{k}}$ – диагональные матрицы

$$E_{\mathbf{k}} = \delta_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} E_{1\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & E_{2\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad f_{\mathbf{k}} = \delta_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} f(E_{1\mathbf{k}}) & 0 \\ 0 & f(E_{2\mathbf{k}}) \end{pmatrix}. \quad (13)$$

$E_{1\mathbf{k}}$ и $E_{2\mathbf{k}}$ – нижняя и верхняя гибридизированные зоны, соответственно. Кроме того, $f(x) = [\exp((x - \mu)/T) + 1]^{-1}$. В дальнейшем мы полагаем, что суммарное число электронов проводимости и f -электронов в одной элементарной ячейке меньше 2. Следовательно, нижняя зона $E_{1\mathbf{k}}$ заполнена лишь

частично. Выражения для этих зон приведены, например, в [2]. Окончательно, для приближенного решения кинетического уравнения (10) имеем

$$N_1(k, q, \omega) = i \int_{-\infty}^0 dy U_-^{-1} \exp(-iE_- y - i\omega y) [U_- \epsilon_1(k, q, \omega) U_+^{-1} f_+ - \\ - f_- U_- \epsilon_1(k, q, \omega) U_+^{-1} + ieEU_- \nabla_k N_0 U_+^{-1}] \exp(iE_+ y) U_+. \quad (14)$$

Нижние индексы \pm соответствуют волновым векторам $k \pm q/2$. К сожалению, полное выражение для всех матричных элементов N_1 слишком громоздко, поэтому мы приведем лишь результат для N_1^c :

$$N_1^c(k, q, \omega) = ie(Ev_k) f'(E_{1k}) \cos^2 \theta_k (qv_k - \omega)^{-1} - \\ - ie\omega(Ev_k) f(E_{1k}) \sin^2 \theta_k \sin(2\theta_k) b_0^{-1} (\Delta_k^2 - \omega^2)^{-1} + \\ + \cos^2 \theta_k \sin \theta_k f'(E_{1k}) [\epsilon_1^f \sin \theta_k - (b_1(q, \omega) + b_1^*(-q, -\omega)) \cos \theta_k] \frac{qv_k}{qv_k - \omega}. \quad (15)$$

Здесь функция θ_k связана с зоной E_{1k} соотношением $E_{1k} = \epsilon_f - b_0 \operatorname{ctg} \theta_k$. Величина $\Delta_k = E_{2k} - E_{1k} = 2b_0 / \sin(2\theta_k)$ есть прямая щель между гибридизированными зонами. Величина $v_k = \nabla_k E_{1k} = v_{0k} \cos^2 \theta_k$ есть скорость тяжелых квазичастиц в зоне E_{1k} , при этом величина $\cos^2 \theta_k = m_0/m^*$ описывает перенормировку массы электронов.

В (15) первое слагаемое соответствует обычному для нормальных фермий жидкостей изменению функции распределения под действием электрического поля E . Второе слагаемое описывает изменение функции распределения в результате межзонных переходов. Последнее слагаемое описывает изменение N_1^c вследствие изменения энергии взаимодействия электронов при отклонении от равновесия.

Для полного решения задачи необходимо найти изменение матрицы квазичастичной энергии (3) при включении поля E . Для этого матричные элементы N_1^f и N_1^{cf} , найденные из (14), следует подставить в (8) и (9) и решить полученную систему уравнений.

Рассмотрим случай почти статического поля: $0 < \omega \leq qv_F$. Решение уравнений (8) и (9) дает $\epsilon_1^f = -ie|E|/q$, $b_1 = 0$. Теперь функция (15) определена полностью. Это позволяет, используя (7), найти проводимость: $eJ(q, \omega) = \sigma(q, \omega)E$. Отсюда в пределе $\omega \rightarrow 0$ для диэлектрической функции получим

$$\epsilon(q, 0) = 1 + \frac{4\pi i\sigma(q, \omega)}{\omega} = \epsilon_0 + \frac{q_s^2}{q^2}. \quad (16)$$

Здесь $\epsilon_0 = 1 + \omega_{pc}^2/6b_0^2$, причем второе слагаемое – это вклад межзонных переходов в поляризацию, $\omega_{pc}^2 = 4\pi e^2 N_c/m_0$ – это квадрат плазменной частоты для невзаимодействующих электронов проводимости с концентрацией N_c и массой m_0 . Для волнового вектора экранировки имеем $q_s^2 = 4\pi e^2 \rho_0$, где ρ_0 есть плотность состояний в зоне $\epsilon(k)$ на поверхности Ферми с учетом спина.

В другом важном случае однородного переменного электрического поля ($q = 0$) последнее слагаемое в (15) не дает вклада в N_1^c . Тогда, вычисляя сначала проводимость $\sigma(0, \omega)$, для диэлектрической функции получим выражение

$$\epsilon(0, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2 \rho_0 v_{0F}^2 m_0}{3\omega^2 m^*} + \frac{2\pi e^2}{3b} \sum_{k \leq k_F} v_{0k}^2 \sin^3(2\theta_k) (\Delta_k^2 - \omega^2)^{-1}, \quad (17)$$

которое приводит к результатам в полном согласии с микроскопической теорией [7] для решеточной модели Андерсона. А именно, изучаемая система характеризуется двумя плазменными частотами. Низкочастотная плазменная частота определяется соотношением $\omega_p^2 = 6T_0^2$, то есть она порядка температуры Кондо T_0 . Высокочастотная плазменная частота равна неперенормированной частоте ω_{pc} , то есть в области высокочастотных колебаний взаимодействие электронов проводимости с f -электронами несущественно.

В заключение отметим, что результат (15) (или (16)) можно использовать для изучения других видов коллективных возбуждений, например спиновых волн. Включение магнитного поля в (10) позволит также исследовать гальваниомагнитные свойства ТФС, используя методы, разработанные для нормальных металлов.

-
1. N.B.Brandt and V.V.Moshchalkov, *Adv. Phys.* **33**, 373 (1984).
 2. А.В.Гольцев, В.В.Красильников, Письма в ЖЭТФ **61**, 274 (1995).
 3. Л.Д.Ландау, ЖЭТФ **30**, 1058 (1956).
 4. В.П.Силин, ЖЭТФ **33**, 495 (1957).
 5. Д.Пайнс, Ф.Нозерь, *Теория квантовых жидкостей*, М.: Мир, 1967 (D.Pines, P.Nozières, *The theory of quantum liquids*, 1966, New York: Benjamin).
 6. Р.Уайт, *Квантовая теория магнетизма*, М.: Мир, 1985 (R.M.White, *Quantum theory of magnetism*, 1983, Berlin: Springer – Verlag).
 7. A.J.Millis, M.Lavagna, and P.A.Lee, *Phys. Rev. B* **36**, 864 (1987).