

объединенный NHCTHTYT **ЯДЕРИЫХ** исследований дубна

0326

P17-84-384

3845/84 Г.М.Гавриленко, В.К.Федянин

- О КОРРЕЛЯШИЯХ
- В МОДЕЛИ АНДЕРСОНА

Направлено на III Симпозиум по физике поверхности /ЧССР, Смолянице, сентябрь 1984 г./ 1. Начиная с шестидесятых годов, в различных задачах физики конденсированного состояния широко используется модель, впервые предложенная Андерсоном/1/ для описания магнитных примесей в металлах и перенесенная позднее на задачи хемосорбции Эдвардсоном и Ньюнсом/2/.Гамильтониан модели записывается в виде:

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k n_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d n_{d\sigma} + U n_{d-\sigma} n_{d\sigma} + \sum_{k\sigma} (V_{d\sigma} c_{d\sigma}^+ c_{k\sigma}^+ + \kappa.c.),$$
 /1/

где с да, с ка - операторы Ферми.

Первое слагаемое описывает в одночастичном приближении электронную зону твердого тела /или его поверхности/. $|\mathbf{k}>$ обозначает электронные состояния в зоне, которые в данном случае могут отличаться от блоховских волн. $\epsilon_{\mathbf{k}}$ - соответствующие собственные значения. Второй и третий члены описывают, если говорить о хемосорбции, идеализированный адатом, имеющий одно электронное состояние $|\mathbf{d}>$ с энергией $\epsilon_{\mathbf{d}}$ и корреляционной энергией \mathbf{U} . Последнее слагаемое описывает гибридизацию состояний зоны подложки $|\mathbf{k}>$ с орбиталью адатома $|\mathbf{d}>$, которая приводит к образованию энергии связи /энергии хемосорбции/.

Хорошо известно хартри-фоковское /Х-Ф/ решение этой модели $^{1/}$. Здесь корреляционная энергия $\mathrm{Un}_{d\sigma}\mathrm{n}_{d-\sigma}$ заменяется выражением вида $\mathrm{U}<\mathrm{n}_{d-\sigma}>\mathrm{n}_{d\sigma}$. Физически это означает, что на электрон, локализованный на адатоме, действует отталкивающий потенциал, пропорциональный среднему числу заполнения $<\mathrm{n}_{d-\sigma}>\mathrm{d}$ -уровня электроном с противоположным значением спина. Это приводит к переопределению энергии уровня ϵ_d на величину $\epsilon_{d\sigma}=\epsilon_d+\mathrm{U}<\mathrm{n}_{d-\sigma}>$. За счет гибридизации с зоной подложки происходит размытие состояния $\epsilon_{d\sigma}$ и превращение его в виртуальный уровень с электронной плотностью, описываемой лоренцеобразной функцией вида:

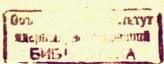
$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma(\epsilon)}{\left[\epsilon - \epsilon_{\text{opt}} - \Lambda(\epsilon)\right]^2 + \Gamma(\epsilon)^2},$$
/2/

где

$$\Gamma(\epsilon) = \sum_{\mathbf{k}} |V_{\mathbf{dk}}|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}) = (V_{\mathbf{dk}}^2)_{\text{ep.}} N(\epsilon), \quad N(\epsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}),$$

$$\Lambda(\epsilon) = \int \frac{\mathrm{d}\epsilon \, \mathrm{T}(\epsilon')}{\epsilon - \epsilon'}$$

/интеграл берется в смысле главного значения/.



В результате происходит перенос заряда и спина между адатомом и подложкой. В предположении $\Gamma(\epsilon) \sim N(\epsilon) = \text{const}$ Андерсон показал, что, наряду с всегда существующим немагнитным решением/ $<\mathbf{n}_{d\sigma}>=<\mathbf{n}_{d-\sigma}>-$ скобки означают статистическое усреднение/, при определенных условиях возникает магнитное решение $<\mathbf{n}_{d\sigma}>\neq<\mathbf{n}_{d-\sigma}>$, и получил простой критерий его существования.

$$\frac{d \langle n_{d\sigma} \rangle}{d \langle n_{d-\sigma} \rangle} | \langle -1. \rangle$$

$$\langle -1. \rangle$$
/3/

В^{/8/} Ньюнс учел влияние энергетической зависимости ширины виртуального уровня и показал, что в этом случае может происходить значительная перестройка структуры виртуального состояния. Однако магнитная структура виртуального уровня качественно не меняется и критерий /3/ существования магнитного решения не нарушается.

II. В этой части мы исследуем структуру функции Грина $<< c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^+ >>$, применяя для этого теорию возмущения по энергии гибридизации V_{dk} ,и покажем, что возникновение магнитного решения происходит за счет спонтанного нарушения симметрии, при этом модель /1/ имеет, в отличие от X-Ф-решения, только одно решение: магнитное или немагнитное.

Определим антикоммутаторные двухвременные функции Грина согласно Боголюбову-Тябликову $^{/9/}$: $<< c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^+ >> , << n_{d-\sigma} c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^+ >>$ и т.д. Непосредственно из правил коммутации операторов $c_{d\sigma}$, $c_{k\sigma}$ с гамильтонианом /1/ имеем:

$$\begin{split} & [c_{k\sigma}, H]_{-} = \epsilon_{k} c_{k\sigma} + V_{dk}^{*} c_{k\sigma}, \quad [c_{d\sigma}, H]_{-} = \epsilon_{d} c_{d\sigma} + U n_{d-\sigma} c_{d\sigma} + \sum_{k} V_{dk} c_{k\sigma}, \\ & [n_{d-\sigma}, H]_{-} = \sum_{k} (V_{dk} c_{d-\sigma}^{+} c_{k-\sigma}^{-} - V_{dk}^{*} c_{k-\sigma}^{+} c_{d-\sigma}^{-}). \end{split}$$

Это приводит к следующей цепочке уравнений функции Грина:

$$(\epsilon - \epsilon_{d}) \ll c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^{+} \gg = \frac{1}{2\pi} + \sum_{k} V_{dk} \ll c_{k\sigma}; c_{d\sigma}^{+} \gg + U \ll n_{d-\sigma} c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^{+} \gg,$$

$$(\epsilon - \epsilon_{k}) \ll c_{k\sigma}; c_{d\sigma}^{+} \gg = V_{dk}^{*} \ll c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^{+} \gg,$$

$$(\epsilon - \epsilon_{d} - U) \ll n_{d-\sigma} c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^{+} \gg = \frac{i < n_{d-\sigma} >}{2\pi} + \sum_{k} V_{dk} \ll n_{d-\sigma} c_{k\sigma}; c_{d\sigma}^{+} \gg +$$

$$+ \ll [n_{d-\sigma}, H] c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^{+} \gg ,$$

$$/5/$$

$$(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}) <\!\!<\!\! \mathbf{n}_{\mathbf{d}\!-\!\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{c}_{\mathbf{k}\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{c}_{\mathbf{d}\boldsymbol{\sigma}}^{+} >\!\!> = V_{\mathbf{dk}}^{*} <\!\!<\!\! \mathbf{n}_{\mathbf{n}\!-\!\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{c}_{\mathbf{d}\boldsymbol{\sigma}}^{+} >\!\!> + <\!\!<\!\! (\mathbf{n}_{\mathbf{d}\!-\!\boldsymbol{\sigma}}^{H}) \cdot \mathbf{c}_{\mathbf{k}\boldsymbol{\sigma}}^{+} ; \cdot \mathbf{c}_{\mathbf{d}\boldsymbol{\sigma}}^{+} >\!\!> ,$$

Здесь всюду предполагается использование большого канонического ансамбля, так что ϵ будет считаться переопределенной на величину химического потенциала систем μ , т.е. $\epsilon \Rightarrow \epsilon - \mu$, где μ опреде-

ляется из условия
$$\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}\sigma}<\mathbf{n}_{\mathbf{k}\sigma}>=\frac{N}{V}=\mathbf{n}=\mathrm{const}, \ \frac{N\to\infty}{V\to\infty}$$
 . Из цепочки

уравнений /5/ видно, что описание можно замкнуть, если получить замкнутое уравнение относительно функции Грина $<\!\!\!<\!\!n_{d-\sigma}\,c_{d\sigma}\,;c_{d\sigma}^{+}\!\!>\!\!>\!\!>$. С этой целью ограничимся в /5/ приближением о(V_{dk}^{2}). Это означает, что в дальнейшем мы будем учитывать только те функции Грина и только те корреляционные функции, которые дадут вклад в уравнение для определения $<\!\!\!<\!\!n_{d-\sigma}c_{d\sigma}\,;c_{d\sigma}^{+}\!\!>\!\!>$ не выше второго порядка по V_{dk} , т.е. если перед функцией Грина уже стоит параметр V_{dk} , то в дальнейшем она будет рассчитываться в первом по V_{dk} приближении; если перед функцией Грина стоит параметр V_{dk} , то необходимо определить только нулевое по V_{dk} приближение, остальными функциями Грина мы пренебрежем. В итоге получим следующую систему уравнений для определения $<\!\!\!\!<\!\!n_{d-\sigma}\,c_{d\sigma}\,;c_{d\sigma}^{+}\!\!>\!\!>$.

$$(\epsilon - \epsilon_{d} - U) << n_{d-\sigma} c_{d\sigma} ; c_{d\sigma}^{+}>> = \frac{i}{2\pi} < n_{d-\sigma}> + \sum_{k} V_{dk} << n_{d-\sigma} c_{k\sigma} ; c_{d\sigma}^{+}>> +$$

$$+ \sum_{k} V_{dk} << c_{d-\sigma}^{+} c_{k-\sigma} c_{d\sigma} ; c_{d\sigma}^{+}>> - \sum_{k} V^{*} << c_{d-\sigma}^{+} c_{k-\sigma} c_{d\sigma} ; c_{d\sigma}^{+}>> ,$$

$$(\epsilon - \epsilon_{k}) << n_{d-\sigma} c_{k\sigma} ; c_{d\sigma}^{+}>> = V_{dk}^{*} << n_{d-\sigma} c_{d\sigma} ; c_{d\sigma}^{+}>> ,$$

$$(\epsilon - \epsilon_{k}) << c_{d-\sigma}^{+} c_{k-\sigma} c_{d\sigma} ; c_{d\sigma}^{+}>> = \frac{i}{2\pi} < c_{d-\sigma}^{+} c_{k-\sigma} >^{(1)} +$$

$$+ V_{dk}^{*} << n_{d-\sigma} c_{d\sigma} ; c_{d\sigma}^{+}>> + \sum_{k'} V_{dk'} << c_{k'-\sigma}^{+} c_{k-\sigma} c_{d\sigma} ; c_{d\sigma}^{+}>> ,$$

$$(\epsilon + \epsilon_{k} - 2\epsilon_{d} - U) << c_{k-\sigma}^{+} c_{d-\sigma} c_{d\sigma} ; c_{d\sigma}^{+}>> = \frac{i}{2\pi} < c_{k-\sigma}^{+} c_{k-\sigma} c_{d-\sigma} > -$$

$$\begin{split} &-V_{dk} \ll n_{d-\sigma} c_{d\sigma} ; c_{d\sigma}^{+} \gg + \sum_{k'} V_{dk'} \ll c_{k-\sigma}^{+} c_{k+\sigma}^{+} c_{d\sigma}^{+} ; c_{d\sigma}^{+} \gg, \\ &(\epsilon + \epsilon_{k}^{-} - \epsilon_{k'}^{-} - \epsilon_{-}) \ll c_{k-\sigma}^{+} c_{k'-\sigma}^{-} c_{d\sigma}^{-} ; c_{d\sigma}^{+} \gg = \frac{i}{2\pi} \ll c_{k-\sigma}^{+} c_{k'-\sigma}^{-} \gg, \\ &+ U \ll c_{k-\sigma}^{+} c_{k'-\sigma}^{-} n_{d-\sigma}^{-} c_{d\sigma}^{-} ; c_{d\sigma}^{+} \gg, \\ &(\epsilon_{k}^{+} + \epsilon_{k}^{-} - \epsilon_{k'}^{-} - \epsilon_{d}^{-} - U) \ll c_{k-\sigma}^{+} c_{k'-\sigma}^{-} n_{d-\sigma}^{-} c_{d\sigma}^{-} ; c_{d\sigma}^{+} \gg = \frac{1}{2\pi} \ll c_{k-\sigma}^{+} c_{k'-\sigma}^{-} n_{d-\sigma}^{-} \gg, \end{split}$$

Остальные функции Грина вклада в рассматриваемое приближение не дадут. Значки /1/ и /0/ над корреляционными функциями означают, что они должны быть рассчитаны в первом и нулевом по V_{dk} приближении соответственно. Так же, как и в 1,3 , будем рассматривать основное состояние системы /1/, когда температура $\theta=0$. В этом случае тривиально следует:

$$\langle c_{k-\sigma}^+ c_{k-\sigma}^+ \rangle^{(0)} = \delta_{kk}^+, \quad \langle c_{k-\sigma}^+ c_{k-\sigma}^+ c_{k-\sigma}^- c_{k-\sigma}^- \rangle^{(0)} = \delta_{kk}^+, \langle c_{d-\sigma}^+ c_{d-\sigma}^+ \rangle^{(0)}.$$
 (7)

Корреляционные функции $< c_{\mathbf{d}-\sigma}^+ c_{\mathbf{k}-\sigma}^- >^{(1)}, < c_{\mathbf{k}-\sigma}^+ c_{\mathbf{d}-\sigma}^- >^{(1)}$ определяются из следующей системы уравнений:

$$\begin{aligned} &(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}) <\!\!< \mathbf{c}_{\mathbf{k} - \sigma} \; ; \; \mathbf{c}_{\mathbf{d} - \sigma}^{+} >\!\!>^{(1)} = V_{\mathbf{dk}}^{*} <\!\!< \mathbf{c}_{\mathbf{d} - \sigma} \; ; \; \mathbf{c}_{\mathbf{d} - \sigma}^{+} >\!\!>^{(0)}, \\ &(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{d}}) <\!\!< \mathbf{c}_{\mathbf{d} - \sigma} \; ; \; \mathbf{c}_{\mathbf{d} - \sigma}^{+} >\!\!>^{(0)} = \frac{\mathbf{i}}{2\pi} + <\!\!< \mathbf{n}_{\mathbf{d}\sigma} \; \mathbf{c}_{\mathbf{d} - \sigma} \; ; \; \mathbf{c}_{\mathbf{d} - \sigma}^{+} >\!\!>^{(0)} \mathbf{U} \; , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{d}} - \mathbf{U}) <\!\!< \mathbf{n}_{\mathbf{d}\sigma} \; \mathbf{c}_{\mathbf{d} - \sigma} \; ; \; \mathbf{c}_{\mathbf{d} - \sigma}^{+} >\!\!> = \frac{\mathbf{i}}{2\pi} <\!\!< \mathbf{n}_{\mathbf{d}\sigma} >^{(0)}, \\ &< \mathbf{c}_{\mathbf{d} - \sigma}^{+} \; \mathbf{c}_{\mathbf{k} - \sigma} \; >^{(1)} = \int\limits_{-\infty}^{\epsilon_{\mathbf{F}}} \; \mathbf{d} \; \epsilon \; [<\!\!< \mathbf{c}_{\mathbf{k} - \sigma} \; ; \; \mathbf{c}_{\mathbf{d} - \sigma}^{+} >\!\!>^{(1)}_{\epsilon + \mathbf{i}0} - <\!\!< \mathbf{c}_{\mathbf{k} - \sigma} \; ; \; \mathbf{c}_{\mathbf{d} - \sigma}^{+} >\!\!>^{(1)}_{\epsilon - \mathbf{i}0} \;], \\ &< \mathbf{n}_{\mathbf{d} + \sigma} >^{(0)} = \int\limits_{-\infty}^{\epsilon_{\mathbf{F}}} \; \mathbf{d} \; \epsilon (<\!\!< \mathbf{c}_{\mathbf{d}\sigma} \; ; \; \mathbf{c}_{\mathbf{d}\sigma}^{+} >\!\!>^{(0)}_{\epsilon + \mathbf{i}0} - <\!\!< \mathbf{c}_{\mathbf{d}\sigma} \; ; \; \mathbf{c}_{\mathbf{d}\sigma}^{+} >\!\!>_{\epsilon - \mathbf{i}0} \;). \end{aligned}$$

Последние два равенства в /8/ есть результат спектрального представления для функций Грина $<\!\!\!<\!\!c_{k-\sigma},c_{d\sigma}^+>\!\!\!>^{(1)},<\!\!\!<\!\!c_{d\sigma}^+;c_{d\sigma}^+>\!\!>^{(0)}$ при нулевой температуре $\theta=0^{-9}$. При этом здесь учтено, что $\mu(0)=\epsilon_{\rm F}^-$ энергия Ферми электронной зоны. Из систем уравнений /7/ и /8/ следует, что функция Грина $<\!\!\!<\!\!{\bf n}_{d\!-\!\sigma}^-c_{d\!\sigma}^-;c_{d\!\sigma}^+>\!\!\!>$ представляется в виде:

$$<<\mathbf{n}_{\mathbf{d}-\sigma} \mathbf{c}_{\mathbf{d}\sigma} ; \mathbf{c}_{\mathbf{d}\sigma}^{+}>> = \frac{1}{2\pi} <\mathbf{n}_{\mathbf{d}-\sigma}> \cdot \frac{1}{\epsilon - \epsilon_{\mathbf{d}} - \mathbf{U} - \Lambda(\epsilon)} +$$

$$+<\mathbf{n}_{\mathbf{d}-\sigma}>^{(0)} \mathbf{f}(\epsilon) + <\mathbf{n}_{\mathbf{d}+\sigma}>^{(0)} \mathbf{g}(\epsilon),$$

$$/9/$$

где

$$\Lambda(\epsilon) = 2 \sum_{k} \frac{|V_{dk}|^{2}}{\epsilon - \epsilon_{k}} + \sum_{k} \frac{|V_{dk}|^{2}}{\epsilon - 2\epsilon_{d} - U + \epsilon_{k}},$$

$$f(\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{(\epsilon - \epsilon_d - U - \Lambda(\epsilon))} \cdot \sum_{k} |V_{dk}|^2 \left[\frac{1 - \Theta(\epsilon_F - \epsilon_d)}{(\epsilon - \epsilon_k)(\epsilon_k - \epsilon_d)} - \frac{1}{(\epsilon - \epsilon_k)(\epsilon_k - \epsilon_d)} \right]$$

$$\frac{1 - \Theta(\epsilon_{\mathbf{F}} - \epsilon_{\mathbf{d}})}{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{d}})(\epsilon + \epsilon_{\mathbf{k}} - 2\epsilon_{\mathbf{d}} - \mathbf{U})} - \frac{1}{(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{d}} - \mathbf{U})(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}})} - \frac{1}{(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{d}} - \mathbf{U})(\epsilon + \epsilon_{\mathbf{k}} - 2\epsilon_{\mathbf{d}} - \mathbf{U})}],$$

$$g(\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{(\epsilon - \epsilon_{d} - U - \Lambda(\epsilon))} \sum_{k} |V_{dk}|^{2} \left[\frac{1 - \Theta(\epsilon_{F} - \epsilon_{d})}{(\epsilon + \epsilon_{k} - 2\epsilon_{d} - U)(\epsilon_{k} - \epsilon_{d})} - \frac{1}{(\epsilon + \epsilon_{k} - 2\epsilon_{d} - U)(\epsilon_{k} - \epsilon_{d})} \right]$$

$$-\frac{1-\Theta(\epsilon_{\mathbf{F}}-\epsilon_{\mathbf{d}}-\mathbf{U})}{(\epsilon_{\mathbf{k}}-\epsilon_{\mathbf{d}}-\mathbf{U})(\epsilon+\epsilon_{\mathbf{k}}-2\epsilon_{\mathbf{d}}-\mathbf{U})}-\frac{1}{(\epsilon-\epsilon_{\mathbf{d}})(\epsilon-\epsilon_{\mathbf{k}})}-\frac{1}{(\epsilon-\epsilon_{\mathbf{d}})(\epsilon+\epsilon_{\mathbf{k}}-2\epsilon_{\mathbf{d}}-\mathbf{U})}.$$

⊕(x) - обозначает ступенчатую функцию

$$\Theta(x) = 1, \quad x \ge 0$$

$$\Theta(x) = 0, \quad x < 0 \quad ,$$

откуда

$$<\!\!<\!\!c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^{+}>\!\!> = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\epsilon - \epsilon_{d} - \Sigma \frac{V_{dk}^{2}}{\epsilon - \epsilon_{k}}} + \frac{1}{\epsilon - \epsilon_{d} - \Sigma \frac{V_{dk}^{2}}{\epsilon - \epsilon_{k}}} \times$$

$$\times \left[\frac{1}{2\pi} \frac{U < n_{d-\sigma}>}{(\epsilon - \epsilon_{d} - U - \Lambda(\epsilon))} + f(\epsilon) < n_{d-\sigma}>^{(0)} + g(\epsilon) < n_{d\sigma}>^{(0)} \right],$$

$$/10/$$

$$\langle\langle c_{d\sigma}; c_{d\sigma}^{+} \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} [A(\epsilon) \langle n_{d-\sigma} \rangle + B(\epsilon) \langle n_{d-\sigma} \rangle^{(0)} + C(\epsilon) \langle n_{d\sigma} \rangle^{(0)} + D(\epsilon)],$$

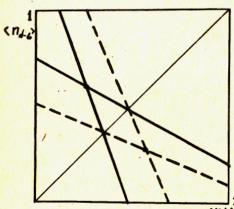
где функции $\mathbf{A}(\epsilon)$, $\mathbf{B}(\epsilon)$, $\mathbf{C}(\epsilon)$, $\mathbf{D}(\epsilon)$ не зависят от спиновых переменных. Определим $\mathbf{A}(\epsilon+i0)$ как $\mathbf{A}(\epsilon+i0)=\mathbf{A}_{\mathbf{R}}(\epsilon)-i\mathbf{A}_{\mathbf{I}}(\epsilon)$ и аналогично $\mathbf{B}(\epsilon+i0)=\mathbf{B}_{\mathbf{R}}(\epsilon)-i\mathbf{B}_{\mathbf{I}}(\epsilon)$, $\mathbf{C}(\epsilon+i0)=\mathbf{C}_{\mathbf{R}}(\epsilon)-i\mathbf{C}_{\mathbf{I}}(\epsilon)$; $\mathbf{D}(\epsilon+i0)=\mathbf{D}_{\mathbf{R}}(\epsilon)-i\mathbf{D}_{\mathbf{I}}(\epsilon)$. Тогда по спектральной теореме для функций Грина $<\!<\mathbf{C}_{\mathbf{d}\sigma}$; $\mathbf{c}_{\mathbf{d}\sigma}^{+}>>$ имеем $^{/9/}$:

$$\langle \mathbf{n}_{d\sigma} \rangle = 1 - \frac{1}{\pi} \int_{\epsilon_{\mathbf{F}}}^{\infty} d\epsilon \mathbf{A}_{\mathbf{I}}(\epsilon) \langle \mathbf{n}_{d-\sigma} \rangle - \frac{1}{\pi} \int_{\epsilon_{\mathbf{F}}}^{\infty} d\epsilon \mathbf{B}_{\mathbf{I}}(\epsilon) \langle \mathbf{n}_{d-\sigma} \rangle^{(0)} - \frac{1}{\pi} \int_{\epsilon_{\mathbf{F}}}^{\infty} d\epsilon \mathbf{C}_{\mathbf{I}}(\epsilon) \langle \mathbf{n}_{d+\sigma} \rangle^{(0)} - \frac{1}{\pi} \int_{\epsilon_{\mathbf{F}}}^{\infty} d\epsilon \mathbf{D}_{\mathbf{I}}(\epsilon) .$$

Второе уравнение для $< n_{d-\sigma} >$ можно получить из /11a/ заменой $\sigma \to -\sigma$:

$$\langle \mathbf{n}_{\mathbf{d}-\sigma} \rangle = 1 - \frac{1}{\pi} \int_{\epsilon_{\mathbf{F}}}^{\infty} d\epsilon \mathbf{A}_{\mathbf{I}}(\epsilon) \langle \mathbf{n}_{\mathbf{d}\sigma} \rangle - \frac{1}{\pi} \int_{\epsilon_{\mathbf{F}}}^{\infty} d\epsilon \mathbf{B}_{\mathbf{I}}(\epsilon) \langle \mathbf{n}_{\mathbf{d}+\sigma} \rangle - \frac{1}{\pi} \int_{\epsilon_{\mathbf{F}}}^{\infty} d\epsilon \mathbf{C}_{\mathbf{I}}(\epsilon) \langle \mathbf{n}_{\mathbf{d}-\sigma} \rangle - \frac{1}{\pi} \int_{\epsilon_{\mathbf{F}}}^{\infty} d\epsilon \mathbf{D}_{\mathbf{I}}(\epsilon).$$

Решения системы /11/ удобно иллюстрировать графически. Рассмотрим интересный для хемосорбции случай, когда $\epsilon_{\mathbf{F}} > \epsilon_{\mathbf{d}}$, но $\epsilon_{\mathbf{F}} < \epsilon_{\mathbf{d}} + \mathbf{U}$. Нарушим симметрию системы, включив бесконечно малое магнитное поле по спину σ , тогда из системы уравнений /8/ следует, что $<\mathbf{n}_{d\sigma}>^{(0)}=1$, $<\mathbf{n}_{d-\sigma}>^{(0)}=0$. Решение, отвечающее такому случаю спонтанного нарушения симметрии, показано на рисунке сплошными линиями. При обратном способе спонтанного нарушения симметрии $<\mathbf{n}_{\mathbf{d}+\sigma}>^{(0)}=0$, $<\mathbf{n}_{\mathbf{d}-\sigma}>^{(0)}=1$. Этот случай показан на рисунке пунктирными линиями. Немагнитному решению /11/ отвечает пересечение прямых на диагонали квадранта $<\mathbf{n}_{\mathbf{d}\sigma}>=<\mathbf{n}_{\mathbf{d}-\sigma}>$. При $<\epsilon_{\mathbf{d}}<\epsilon_{\mathbf{d}}+\mathbf{U}<\epsilon_{\mathbf{F}}$, $\epsilon_{\mathbf{d}}+\mathbf{U}>\epsilon_{\mathbf{d}}>\epsilon_{\mathbf{F}}$ существует только немагнитное решение, и симметрия системы относительно смены $\sigma \to -\sigma$ восстанавливается.



Можно проверить, что, как и в X-Ф-случае, выражения для $< n_{d\sigma} >$ и $< n_{d-\sigma} >$, рассчитанные в предположении малости V_{dk} , имеют смысл при всех значениях параметров U и V_{dk} .

III. Формально проделанные выше разложения можно продолжить и до более высоких порядков по V_{dk} , при этом структура функции Грина /10/, а следовательно, и структура уравнений /11/, не изменится.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Anderson P.W. Phys. Rev., 1961, 124, p. 41.
- 2. Edwards D.M., Newns D.M. Phys.Lett., 1967, 24A, p. 236.
- 3. Newns D.M. Phys.Rev., 1969, 178, p. 1123.
- 4. Эйнштейн Т., Герц Д., Шриффер Д. "Проблемы теории хемосорбции", в книге "Теория хемосорбции", "Мир", М., 1983.
- 5. Brenig W., Schonhammer K. Z.Phys., 1974, 267, p. 201.
- 6. Гавриленко Г.М., Федянин В.К. ТМФ, 1975, т. 25, с. 80. 7. Madhukar A., Bell B. Phys.Rev., 1976, B14, p. 4281.
- 8. Anda E., Majlis N., Grenupel A. J. Phys., 1977, C10B, p. 2365.
- 9. Боголюбов Н.Н., Тябликов С.В. ДАН СССР, 1959, т. 126, с. 53.

нет ли пробелов в вашей виблиотеке?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

	Труды VI Всесованого совещания по ускорителям заря- женных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заря- женных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
	Труды УШ Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Протвино, 1982 /2 тома/	11 р. 40 к.
д11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЗВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
д2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам кван- товой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
Д10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	.2 р. 50 к.
д17-81-758	Труды II Неждународного симпозиума по избранным пробленам статистической механики. Дубна, 1981.	5 p. 40 K.
P18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно- физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
д2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
Д9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 p. 30 k.
. дз,4-82-704	Труды IV Неждународной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 p. 00 K.
Д11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЗВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	_2 р. 50 к.
Д7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
д2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.
Д13-84-63	Труды XI Неждународного симпозиума по ядерной электронике. Братислава,	4 р. 50 к.
	Чехословакия, 1983.	

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу: 301000 Москва, Главпочтамт, п/я 79 Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований Гавриленко Г.М., Федянин В.К. О корреляциях в модели Андерсона P17-84-384

В рамках теории возмущения по параметру гибридизации проанализирована структура функции Грина виртуального уровня в модели Андерсона, Показано, что магнитное решение возникает в системе в результате спонтанного нарушения симметрии.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод О.С.Виноградовой

Gavrilenko G.M., Fedyanin V.K. On Correlations in the Anderson Model P17-84-384

Within the perturbation theory in hybridization parameter we have analysed the structure of the Green function of virtual lead in the Anderson model. It is shown that the magnetic solution results from the spontaneously broken symmetry.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984