ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4-5830

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Б. Козажевски

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ С МАГНИТНОЙ ПРИМЕСЬЮ В МОДЕЛИ АНДЕРСОНА

1971

P4-5830

Б. Козажевски

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ С МАГНИТНОЙ ПРИМЕСЬЮ В МОДЕЛИ АНДЕРСОНА

Направлено в ФТТ

Изучение свойств металла с парамагнитными примесями производилось главным образом на основе модели $s-d$ обмена [1]. Однако в последнее время начал интенсивно развиваться другой подход, основанный на модели, предложенной Андерсоном [2]. Нет сомнений в том, что существует некоторое сходство между обеими моделями. Шриффер и Вольф [3], произведя каноническое преобразование гамильтониана Андерсона,получили новый гамильтониан, не содержащий членов первого порядка по взаимодействию s и d электронов и совпадающий с точностью до членов второго порядка с гамильтонианом $s-d$ обмена. Несколько иначе это сходство было установлено Двориным [4], который, используя своеобразную теорию возмущений, обнаружил логарифмическую зависимость сопротивления от температуры в модели Андерсона. В работах [5,6] была сделана попытка устранить логарифмическую расходимость, используя самосогласованный метод уравнений движений для функций Грина. В частности, Огучи [7] показал, что в симметричном случае $(2E+U=0)$ из этих уравнений следует исчезновение всех особенностей типа Кондо. Но, с другой стороны, в вычислениях, основанных на методе функционального интегрирования [8] или теории возмущений [9], симметричный случай в основных чертах не отличается от других.

В данной работе, как и в [5,6], к модели Андерсона применяется метод функций Грина, но уравнения движения решены в более общем случае. Предполагается только, что $2E+U$ больше верхней границы зоны проводимости. С помощью полученного решения вычисляется электрическое сопротивление и термоэдс, вызванные присутствием примесей.

1. Используемая нами модель определяется гамильтонианом вида

$$H = \sum_{k,s} \epsilon_k c^+_{ks} c_{ks} + E \sum_s n_s + \frac{1}{2} U \sum_s n_s n_{-s} + \\ + \sum_{ks} (V_k c^+_{ks} d_s + V^*_k d^+_s c_{ks}). \tag{1}$$

Здесь c^+_{ks} и c_{ks} – операторы рождения и уничтожения электронов проводимости, $n_s = d^+_s d_s$ – операторы чисел заполнения электронов d-состояний атома примеси, ϵ_k и E – одночастичные энергии свободных электронов проводимости и локализованного d-состояния, отсчитываемые от поверхности Ферми. Третий член гамильтониана представляет энергию кулоновского отталкивания d-электронов с противоположными спинами. Последняя часть гамильтониана описывает энергию $s-d$ взаимодействия. Все интересующие нас величины можно получить, рассматривая функцию Грина

$$\langle\langle c_{ks}(\tau); c^+_{k's} \rangle\rangle = -\langle T c_{ks}(\tau), c^+_{k's}(0) \rangle. \tag{2}$$

Для фурье-компонент этой функции, определенных равенством

$$\langle\langle c_{ks}; c^+_{k's} \rangle\rangle = \int_0^\beta e^{z\tau} \langle\langle c_{ks}(\tau); c^+_{k's} \rangle\rangle d\tau ,$$

где $z = i\dfrac{\pi}{\beta}(2n+1)$, имеет место следующее уравнение движения:

$$(z-\epsilon_k)\langle\langle c_{ks}; c^+_{k's} \rangle\rangle = \delta_{k,k'} + V_k \langle\langle d_s; c^+_{k's} \rangle\rangle . \tag{3a}$$

Для функции Грина в правой стороне (3а) уравнение движения имеет вид

$$(z-E)\langle\langle d_s; c^+_{k's}\rangle\rangle = U\langle\langle n_{-s}d_s; c^+_{k's}\rangle\rangle +$$

$$+\sum_\ell V^x_\ell \langle\langle c_{\ell s}; c^+_{k's}\rangle\rangle . \qquad (3б)$$

Так как особенности типа Кондо появляются вследствие корреляции между электронами проводимости и электронами d -состояния, то нужно учесть функции Грина высшего порядка. Тогда дополнительно получим следующие уравнения:

$$(z-E-U)\langle\langle n_{-s}d_s; c^+_{k's}\rangle\rangle = \sum_\ell V^x_\ell \langle\langle n_{-s}c_{\ell s}; c^+_{k's}\rangle\rangle +$$

$$+\sum_\ell V^x_\ell \langle\langle d^+_{-s}c_{\ell-s}d_s; c^+_{k's}\rangle\rangle - \sum_\ell V^x_\ell \langle\langle c^+_{\ell-s}d_{-s}d_s; c^+_{k's}\rangle\rangle ; \qquad (3в)$$

$$(z-\epsilon_k)\langle\langle n_{-s}c_{ks}; c^+_{k's}\rangle\rangle = \langle n_{-s}\rangle\delta_{k,k'} + V_k\langle\langle n_{-s}d_s; c^+_{k's}\rangle\rangle -$$

$$-\sum_\ell V_\ell \langle\langle c^+_{\ell-s}d_{-s}c_{ks}; c^+_{k's}\rangle\rangle + \sum_\ell V^x_\ell \langle\langle d^+_{-s}c_{\ell-s}c_{ks}; c^+_{k's}\rangle\rangle , \qquad (3г)$$

$$(z-\epsilon_k)\langle\langle d^+_{-s}c_{k-s}d_s; c^+_{k's}\rangle\rangle = V_k\langle\langle n_{-s}d_s; c^+_{k's}\rangle\rangle -$$

$$-\sum_\ell V_\ell \langle\langle c^+_{\ell-s}c_{k-s}d_s; c^+_{k's}\rangle\rangle + \sum_\ell V^x_\ell \langle\langle d^+_{-s}c_{k-s}c_{\ell s}; c^+_{k's}\rangle\rangle , \qquad (3д)$$

$$(z+\epsilon_k-2E-U)\langle\langle c^+_{k-s}d_{-s}d_s; c^+_{k's}\rangle\rangle = -V^x_k\langle\langle n_{-s}d_s; c^+_{k's}\rangle\rangle +$$

$$+\sum_\ell V^x_\ell \langle\langle c^+_{k-s}d_{-s}c_{\ell s}; c_{k's}\rangle\rangle + \sum_\ell V^x_\ell \langle\langle c^+_{k-s}c_{\ell-s}d_s; c^+_{k's}\rangle\rangle . \qquad (3е)$$

Оборвем цепочку уравнений (3а)-(3е), вводя расцепления

$$\langle\langle c^{+}_{\ell-s} d_{-s} c_{ks} ; c^{+}_{k's} \rangle\rangle = \langle c^{+}_{\ell-s} d_{-s} \rangle \langle\langle c_{ks} ; c^{+}_{k's} \rangle\rangle ,$$

$$\langle\langle d^{+}_{-s} c_{\ell-s} c_{ks} ; c^{+}_{k's} \rangle\rangle = \langle d^{+}_{-s} c_{\ell-s} \rangle \langle\langle c_{ks} ; c^{+}_{k's} \rangle\rangle ,$$

$$\langle\langle c^{+}_{\ell-s} c_{k-s} d_{s} ; c^{+}_{k's} \rangle\rangle = \langle c^{+}_{\ell-s} c_{k-s} \rangle \langle\langle d_{s} ; c^{+}_{ks} \rangle\rangle .$$

Чтобы получить согласованную систему уравнений, необходимо вывести, исходя из функции $\langle\langle d_s ; d^{+}_s \rangle\rangle$, уравнения, аналогичные уравнениям (3а)-(3е). С использованием расцеплений, подобных введенным выше, система уравнений решается следующим образом :

$$\langle\langle c_{ks} ; c^{+}_{k's} \rangle\rangle = \frac{\delta_{k,k'}}{z-\epsilon_k} + \frac{V_k V^{*}_{k'} t_s(z)}{(z-\epsilon_k)(z-\epsilon_{k'})} \tag{4}$$

и

$$\langle\langle d_s ; d^{+}_s \rangle\rangle = t_s(z), \tag{5}$$

причем матрица рассеяния $t_s(z)$ зависит от средних значений операторов. Если учесть, что

$$\langle\langle d_s ; c^{+}_{ks} \rangle\rangle = \frac{V^{*}_k t_s(z)}{z-\epsilon_k}, \quad \langle\langle c_{ks} ; d^{+}_s \rangle\rangle = \frac{V_k t_s(z)}{z-\epsilon_k},$$

и использовать известные соотношения между средними значениями операторов и соответствующими функциями Грина

$$\langle BA \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{i\omega_n \delta} \langle\langle A ; B \rangle\rangle \equiv \mathfrak{F}\{\langle\langle A ; B \rangle\rangle\} ,$$

то получается интегральное уравнение для $t_s(z)$:

$$t_s(z) = [\, z - E - U - 2F(z) + F(-z+2E+U) + U\langle n_{-s} \rangle +$$

$$+U\mathfrak{F}\{\frac{F(i\omega)-F(z)}{z-i\omega}t_{-s}(i\omega)\}-U\mathfrak{F}\{\frac{F(i\omega)-F(-z+2E+U)}{z+i\omega-2E-U}t_{-s}(i\omega)\}]\times$$

$$\times[(z-E-F(z))(z-E-U-2F(z)+F(-z+2E+U))+$$

$$+U(R(z)-R(-z+2E+U))+U\mathfrak{F}\{\frac{[F(i\omega)-F(z)]^2}{z-i\omega}t_{-s}(i\omega)\}+ \tag{6}$$

$$+U\mathfrak{F}\{\frac{F(i\omega)-F(-z+2E+U)}{z+i\omega-2E-U}[F(i\omega)+F(z)]\,t_{-s}(i\omega)\}]^{-1},$$

где введены обозначения

$$F(z)=\sum_k\frac{|V_k|^2}{z-\epsilon_k}, \tag{7}$$

$$R(z)=\mathfrak{F}\{\frac{F(i\omega)-F(z)}{z-i\omega}\}. \tag{8}$$

Это уравнение было решено в пределе $U\to\infty$ в работе /6/. Здесь рассмотрим более общий случай $2E+U\gg D$, где $2D$ – ширина зоны проводимости. Тогда, учитывая, что в отсутствие магнитного поля $t_s(z)=t_{-s}(z)=t(z)$, вместо (6) получим уравнение

$$t(z)=[z-E-U-2F(z)+U\langle n\rangle+U\mathfrak{F}\{\frac{F(i\omega)-F(z)}{z-i\omega}t(i\omega)\}]\times$$
$$\times[(z-E-F(z))(z-E-U-2F(z))+UR(z)+U\mathfrak{F}\{\frac{[F(i\omega)-F(z)]^2}{z-i\omega}t(i\omega)\}]^{-1}. \tag{9}$$

2. Для решения уравнения (9) воспользуемся обычным подходом, согласно которому решение сингулярного интегрального уравнения тако–

го типа сводится к решению задачи Римана об отыскивании кусочно-аналитической функции по заданному скачку вдоль некоторого контура. Прежде всего предположим, что плотность состояний зоны проводимости равна $N(0)$ для $|\epsilon| \leq D$ и нулю вне этой области. Тогда из (7) следует

$$F_{T,a}(\omega) \equiv F(\omega \pm i\delta) = \begin{cases} \mp i\Delta, & |\omega| \leq D, \\ 0, & |\omega| > D, \end{cases}$$

где

$$\Delta = \pi < |V_k|^2 > N(0).$$

Полагая в (9) $F_{T,a}(z)$ вместо $F(z)$, получим уравнения для $t_r(z)$ или $t_a(z)$, которые удобно записать в следующей форме:

$$1 \mp i\Delta\, t_{r,a}(z) = \frac{X_{r,a}(z)}{\Phi_{r,a}(z)}, \tag{10}$$

где

$$X_{r,a}(z) = (z \mp E \mp i\Delta)(z - E - U \pm 2i\Delta) \mp 2i\Delta U < n > + U R(z), \tag{11}$$

$$\Phi_{r,a}(z) = (z - E \pm i\Delta)(z - E - U \pm 2i\Delta) - U\phi_{r,a}(z), \tag{12}$$

$$\phi_{r,a}(z) = \frac{\Delta}{2\pi} \int_{-D}^{D} \frac{th\,\frac{\beta\omega}{2}}{z-\omega} \left[1 \pm 2i\Delta\, t_{a,r}(\omega)\right] d\omega. \tag{13}$$

В (11)-(13) мы перешли от сумм по ω_n к контурным интегралам. Если преобразовать (8) к

$$R(z) = -\frac{\Delta}{2\pi} \int\limits_{-D}^{D} \frac{th\,\frac{\beta\omega}{2}}{z-\omega}\, d\omega, \tag{8a}$$

то видно, что (8а) и (13) определяют кусочно-аналитические функции, испытывающие при переходе через отрезок $(-D, D)$ вещественной оси скачки

$$R^{+}(\omega) - R^{-}(\omega) = i\Delta\, th\, \frac{\beta\omega}{2}$$

и

$$\phi^{+}_{r,a}(\omega) - \phi^{-}_{r,a}(\omega) = -i\Delta\,[1 \pm 2i\Delta\, t_{a,r}(\omega)]\, th\, \frac{\beta\omega}{2}.$$

Таким образом,

$$\Phi^{+}_{r}(\omega) - \Phi^{-}_{r}(\omega) = [X^{+}_{r}(\omega) - X^{-}_{r}(\omega)]\, \frac{X^{-}_{a}(\omega)}{\Phi^{-}_{a}(\omega)}, \tag{14а}$$

$$\Phi^{+}_{a}(\omega) - \Phi^{-}_{a}(\omega) = [X^{+}_{a}(\omega) - X^{-}_{a}(\omega)]\, \frac{X^{+}_{r}(\omega)}{\Phi^{+}_{r}(\omega)}. \tag{14б}$$

Из соотношений (14а) и (14б) получаем

$$\Phi^{+}_{r}(\omega)\,\Phi^{+}_{a}(\omega) - X^{+}_{r}(\omega)\,X^{+}_{a}(\omega) = \Phi^{-}_{r}(\omega)\,\Phi^{-}_{a}(\omega) - X^{-}_{r}(\omega)\,X^{-}_{a}(\omega),$$

откуда следует, что функция

$$w(z) = \Phi_{r}(z)\,\Phi_{a}(z) - X_{r}(z)\,X_{a}(z) \tag{15}$$

непрерывна при переходе через разрез $(-D, D)$ и, таким образом, аналитична на всей плоскости и равна своему значению на бесконечности

$$w = 4\Delta^2 U[(E+3U)\langle n\rangle - U\langle n\rangle^2 + A], \tag{16}$$

где

$$A = \frac{i}{4\pi}\int_{-D}^{D} th\,\frac{\beta\omega}{2}[\omega(t_r(\omega)-t_a(\omega))+3i\Delta(t_r(\omega)+t_a(\omega))]\,d\omega\ -$$

величина порядка Δ, которой в дальнейшем будем пренебрегать.

Из формул (14) и (15) непосредственно вытекает основное соотношение задачи Римана (см., например, [10])

$$\Phi_r^+(\omega)\Phi_a^-(\omega) = X_r^+(\omega)X_a^-(\omega) + w,$$

или

$$\frac{\Phi_r^+(\omega)}{(\omega-E+i\Delta)(\omega-E-U+2i\Delta)}\ \frac{\Phi_a^-(\omega)}{(\omega-E-i\Delta)(\omega-E-U-2i\Delta)} = K(\omega) \tag{17}$$

где

$$K(\omega) = \frac{X_r^+(\omega)X_a^-(\omega)+w}{[(\omega-E)^2+\Delta^2][(\omega-E-U)^2+4\Delta^2]}.$$

Решение уравнения (17) запишем в следующем виде (опуская верхние индексы):

$$\Phi_{r,a}(z) = (z-E\pm i\Delta)(z-E-U\pm 2i\Delta)\,K^{1/2}(z)\,e^{\pm i\eta(z)}, \tag{18}$$

где

$$\eta(z) = \frac{1}{2\pi} P \int_{-D}^{D} \frac{\ln K(\omega)}{z-\omega} d\omega . \qquad (19)$$

Подставляя (11) и (18) в (10), получим выражение для матрицы рассеяния.

Для дальнейших вычислений удобно ввести характеристическую температуру модели T_K, определенную условием $Re\, X_T(0)$. Учитывая, что интеграл (8а) равен

$$R^{\pm}(\omega) = \frac{\Delta}{\pi}\left[\ln \frac{\beta D}{2\pi} - \psi\left(\frac{1}{2} \pm \frac{\beta\omega}{2\pi i}\right)\right],$$

имеем

$$T_K = \frac{2\alpha D}{\pi} \exp\left\{ \frac{\pi}{\Delta U}\left[E(E+U) + 2\Delta^2 \right]\right\}, \qquad (20)$$

где

$$\psi(x) = \frac{d}{dx} \ln \Gamma(x), \qquad \ln 4a = -\psi\left(\frac{1}{2}\right).$$

В случае, когда $|E(E+U)| \gg \Delta^2$, такая температура соответствует эффективному обменному взаимодействию, которое в два раза меньше величины, полученной с помощью канонического преобразования /3/. В пределе $U \to \infty$ формулы (18)-(20) переходят в соответствующие результаты работы /6/.

3. Применим найденное нами решение к вычислению электрического сопротивления $\rho(T)$ и термоэдс $S(T)$, вызванных взаимодействием электронов проводимости с примесью. Согласно общим формулам

$$\frac{1}{\rho(T)} = -\frac{2}{3} e^2 L_0 \quad \text{и} \quad S(T) = \frac{1}{ekT} \frac{L_1}{L_0},$$

где

$$L_n = \int \omega^n \; v^2(\omega)\, N(\omega) \; \frac{\partial f}{\partial \omega} \; \tau(\omega)\, d\omega$$

и $\tau(\omega) = -2\, c \langle |V_k|^2 \rangle \, t_r(\omega)$, c – концентрация примесей.

Вычисляя интегралы L_n с точностью до первого неисчезающего члена в разложении Зоммерфельда, получаем

$$\rho(T) = \rho_0 \left(1 + \frac{E r + a b}{\lambda \sqrt{E^2 + \Delta^2}}\right) \tag{21}$$

и

$$S(T) = \frac{\pi^3}{12 e} \; \frac{a - \frac{1}{2} b \lambda^{-2} (E r + a b)}{\lambda \sqrt{E^2 + \Delta^2} + E r + a b} \; , \tag{22}$$

где введены обозначения

$$r = \ln \frac{T}{T_k}, \quad a = \Delta \left(1 + \frac{2E}{E + U}\right), \quad b = \pi \left(1 - 2\langle n \rangle - \frac{E}{U}\right),$$

$$\lambda = \left\{ r^2 + \pi^2 \left[\left(1 - \frac{E}{U}\right)^2 + 4\left(1 + 2\frac{E}{U}\right)\langle n \rangle \right] \right\}^{1/2} .$$

В этих формулах остается неопределенной величина $\langle n \rangle$, которую здесь рассматриваем как параметр, хотя в принципе ее можно вычислить из следующего соотношения:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{4\pi i} \int_{-D}^{D} \operatorname{th} \frac{\beta \omega}{2} \left[t_r(\omega) - t_a(\omega) \right] d\omega \, .$$

Кроме того, мы предполагали, что $E + U \gg \Delta$. В случае, когда $|E| \gg \Delta$, температурные зависимости сопротивления и термоэдс, данные формул (21) и (22), будут очень велики к поведению этих величин в модели $s-d$ обмéна.

В заключение автор выражает благодарность Д.Н. Зубареву за обсуждения и постоянный интерес к работе.

Литература

1. K. Fischer. Springer Tracts in Modern Physics., vol.54, p.1. Springer-Verlag, Berlin, 1970.
2. P.W. Anderson. Phys. Rev., 124, 41, 1961 (перев. Сб. "Теория ферромагнетизма металлов и сплавов", стр. 386, ИЛ, М.,1963).
3. J.R. Schrieffer, P.A. Wolff. Phys. Rev., 149, 491 (1966).
4. L. Dworin. Phys. Rev., 164, 818 (1967).
5. A. Theumann. Phys. Rev., 178, 978 (1969).
6. H. Mamada, F. Takano. Progr. Theor. Phys., 43, 1458 (1970).
7. A. Oguchi. Progr. Theor. Phys., 43, 257 (1970).
8. D.R. Hamman. Phys. Rev., B2, 1373 (1970).
9. H. Keiter, J.C. Kimball. Phys. Rev. Lett., 25, 672 (1970).
10. Ф.Д. Гахов. Краевые задачи. ГИФМЛ, М., 1963.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 мая 1971 года.