

## ВОЛНА СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ В РЕШЕТКЕ КОНДО

*Е. А. Жуковский, В. В. Тугушев*

*Российский научный центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 27 марта 1996 г.,  
после переработки 2 августа 1996 г.

Рассматривается модель Андерсона с  $N$ -кратным вырождением в режиме Кондо. Предполагается, что межэлектронные корреляции в системе  $f$ -электронов предельно сильны. Методом вспомогательных бозонов с использованием  $1/N$ -разложения получен критерий неустойчивости относительно формирования слабоантиферромагнитной фазы на фоне состояния Кондо. Эффективное взаимодействие, приводящее к формированию магнитного упорядочения, возникает за счет спиновых флуктуаций в системе локализованных электронов. Построена фазовая диаграмма системы.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Влияние кондо-примесей на формирование слабого антиферромагнитного упорядочения в системе зонных электронов (называемого также волной спиновой плотности (ВСП)) обсуждалось ранее в [1, 2]. В пределе малой концентрации кондо-центров главным является эффект некогерентного рассеяния зонных электронов на этих центрах, приводящий к подавлению антиферромагнетизма. При этом считалось, что механизм формирования ВСП обусловлен обменным взаимодействием в системе зонных электронов, конкурирующим, таким образом, с упомянутым выше механизмом разрушения ВСП.

В данной работе речь пойдет о системе с регулярным расположением кондо-центров (т. е. о решетке Кондо), в которой взаимодействие между собой зонных электронов вообще не учитывается. Как известно, в режиме Кондо спин сильно коррелированного локального центра экранируется за счет перераспределения спиновой плотности зонных электронов и возникает немагнитное когерентное состояние, конкурирующее с магнитными состояниями различных типов.

Возможность магнитной неустойчивости определенного типа в тяжелофермионной системе — вопрос, который поставлен и интенсивно изучается уже довольно давно [3–10]. Ряд тяжелофермионных систем обнаруживает в эксперименте слабое антиферромагнитное упорядочение при низких температурах. Современные попытки аналитического описания магнитной неустойчивости в подобных системах, как правило, опираются на технику псевдополей. Последние вводятся либо согласно схеме Барнса [11], в которой различные сорта вспомогательных частиц подчиняются статистикам Ферми и Бозе [10], либо следуя методу Котляра и Рукенштейна [12], когда вводимые псевдочастицы являются бозонами [7, 8].

В большинстве случаев в связи с магнитными решениями исследуется задача о двукратно вырожденном  $f$ -уровне (например, [7, 9, 10]). При этом результаты получают либо в приближении среднего поля по бозонам (т. е. заменяя бозонные операторы  $c$ -чис-

лами), либо в первом порядке по флуктуациям бозонного поля. Следует отметить, что отсутствие малого параметра в теориях этого типа приводит к тому, что поправки следующих порядков к найденным (по существу — вариационным) решениям оказываются сравнимыми с самими решениями. Это обстоятельство не позволяет делать уверенные выводы о поведении тяжелофермионной системы с предполагаемым магнитным упорядочением.

Ситуация оказывается иной в случае с сильным орбитальным вырождением  $f$ -уровня. Хотя известно, что повышение этого вырождения делает тяжелофермионную систему более устойчивой относительно магнитного упорядочения, наличие малого параметра  $N^{-1} \ll 1$  ( $N$  — степень вырождения уровня) позволяет строить более последовательную теорию.

Ниже мы исследуем ситуацию, когда на фоне состояния Кондо в системе с  $N$ -кратно вырожденным затравочным  $f$ -уровнем за счет квантовых флуктуаций спиновой плотности появляется слабоантиферромагнитное состояние локализованных и зонных электронов. Считаем, что  $N \gg 1$ . Это позволяет воспользоваться  $1/N$ -разложением и разработанной для него диаграммной техникой [13–15] путем введения вспомогательных полей по Барнсу. Авторы работы [15] указали на возможность рассматривать различные типы упорядочения в кондо-решетке в рамках  $1/N$ -диаграммной техники, но сосредоточились на вычислении времени жизни квазичастиц и функций отклика на внешнее поле в общем виде с учетом вершинных поправок.

Попытка распространить схему Котляра–Рукенштейна [12] на случай орбитального вырождения была сделана в работе [8]. При этом тенденцию к антиферромагнетизму в кондо-решетке авторы не изучали и наиболее подробно рассмотрели случай  $N = 2$  в приближении среднего поля.

Подчеркнем, что в приближении среднего поля по бозонным операторам в исследуемом нами гамильтониане (см. ниже) вообще нет магнитных решений, а имеется только решение кондовского типа. Мы учитываем флуктуации бозонного поля в низшем по  $1/N$  приближении и именно в этом приближении выводим критерий Стонера как необходимое условие существования антиферромагнетизма. Естественно, антиферромагнетизм в нашей схеме получается слабым (эффективный обмен мал в меру  $N^{-2}$ , так как бозонный пропагатор сам содержит малость  $1/N \ll 1$ ), и мы следим, чтобы не выйти за пределы применимости  $1/N$ -разложения. Температура Нееля  $T_N$  и антиферромагнитная щель  $\Sigma$  в спектре зонных электронов в этой ситуации малы по сравнению с температурой Кондо  $T_K$  и энергией Кондо  $\epsilon_f$ , т.е.  $\Sigma, T_N \ll \epsilon_f, T_K$ . Таким образом, речь идет о сосуществовании антиферромагнетизма и состояния Кондо, возможном при выполнении определенных условий. Их мы и обсудим в данной работе, имея в виду случай нулевой температуры  $T = 0$ .

Переход к конечным  $N \sim 2$  в нашей схеме невозможен, так как требует учета высших по  $1/N$  корреляторов, что в условиях отсутствия малого параметра корректно выполнить не удастся.

## 2. МОДЕЛЬНЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН

Запишем  $N$ -кратно вырожденный гамильтониан Андерсона для решетки в представлении псевдофермионного и псевдобозонного полей [16]:

$$H = H_b + H_f + H_{bf}, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned}
 H_b &= \sum_{km} \epsilon(\mathbf{k}) a_{km}^+ a_{km}, \\
 H_f &= \sum_{im} E_0 f_{im}^+ f_{im}, \\
 H_{bf} &= \sum_{kmi} V(\mathbf{k}, m) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_i) a_{km}^+ f_{im} b_i^+ + \text{H.c.}
 \end{aligned}$$

Здесь  $a_{km}^+$  — оператор рождения зонного электрона с проекцией «спина»  $m$ , квазиимпульсом  $\mathbf{k}$  и энергией  $\epsilon(\mathbf{k})$ ;  $f_{im}^+$  — оператор рождения псевдофермиона в узле  $i$  со «спиновой» проекцией  $m$ ;  $b_i^+$  — оператор рождения псевдобозона в узле  $i$ . Положение уровня Ферми, соответствующее половинному заполнению зоны, принято за начало отсчета всех энергий в задаче. Рассматривается режим Кондо двухзонной модели (1), что соответствует следующим условиям:  $E_0 < 0$  и  $|E_0| \gg N(0)V^2$ , где последняя величина представляет собой оценку уширения  $f$ -уровня за счет гибридизации  $V$ ,  $N(0)$  — плотность зонных состояний на уровне Ферми. Предполагается, что корреляции  $f$ -электронов предельно сильны и, таким образом,  $f$ -узлы заняты максимум однократно. Как обычно, выразим это условие в виде

$$\sum_m f_{im}^+ f_{im} + b_i^+ b_i = 1. \tag{2}$$

Ниже считаем, что кратность вырождения уровня  $E_0$  велика:  $N = 2J+1 \gg 1$  ( $-J \leq m \leq J$ ), что позволяет воспользоваться  $1/N$ -разложением [13, 14, 16]. Следуя работе [16], полагаем, что режим Кондо характеризуется возникновением аномального псевдобозонного среднего

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \langle b_{\mathbf{k}} \rangle = a \delta_{\mathbf{k},0} \tag{3}$$

и возникновением резонансного псевдофермионного уровня  $\epsilon_f$  вблизи уровня Ферми. Среднеполевая часть гамильтониана (1) имеет вид

$$\begin{aligned}
 H_{mf} &= \sum_{\mathbf{k},m} \epsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k},m}^+ a_{\mathbf{k},m} + \sum_{\mathbf{k},m} \epsilon_f f_{\mathbf{k},m}^+ f_{\mathbf{k},m} + \\
 &+ \sum_{\mathbf{k},m} [aV(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k},m}^+ f_{\mathbf{k},m} + \text{H.c.}] + N \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon - E_0) A_{\mathbf{k}}^+ A_{\mathbf{k}},
 \end{aligned} \tag{4}$$

где мы перешли к новому масштабу величин:

$$V \rightarrow V/\sqrt{N}, \quad b_i^+ = \sqrt{N} A_i^+.$$

Гамильтониан (4) можно диагонализировать путем стандартной процедуры перехода к новым квазичастицам, спектр которых имеет две ветви:

$$\epsilon_{1,2}(\mathbf{k}) = \frac{\epsilon(\mathbf{k}) + \epsilon_f \mp \sqrt{[\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon_f]^2 + 4(Va)^2}}{2}. \tag{5}$$

Здесь и далее используем обозначение  $V^2 = \langle V^2(\mathbf{k}) \rangle$ , где угловые скобки означают усреднение по направлениям вектора  $\mathbf{k}$  на поверхности Ферми.

Фурье-образы функций Грина соответственно зонных электронов, псевдофермионов и псевдобозонов для гамильтониана (4) имеют следующий вид [16]:

$$\begin{aligned}
 G_{aa,m}(\mathbf{k}, i\omega) &= \frac{i\omega - \epsilon_f}{(i\omega - \epsilon_f)[i\omega - \epsilon(\mathbf{k})] - V^2 a^2}, \\
 G_{ff,m}(\mathbf{k}, i\omega) &= \frac{i\omega - \epsilon(\mathbf{k})}{(i\omega - \epsilon_f)[i\omega - \epsilon(\mathbf{k})] - V^2 a^2}, \\
 G_{af,m}(\mathbf{k}, i\omega) &= \frac{V(\mathbf{k})a}{(i\omega - \epsilon_f)[i\omega - \epsilon(\mathbf{k})] - V^2 a^2}, \\
 D(\mathbf{k}, i\nu) &= \frac{1}{N(\epsilon_f - E_0)},
 \end{aligned}
 \tag{6}$$

где  $i\omega = i\pi T(2n + 1)$ ,  $i\nu = 2in\pi T$ ,  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  — мацубаровские ферми- и бозе-частоты.

Взаимодействие между зонными и локализованными электронами в режиме Кондо вводится флуктуационной частью гамильтониана  $H_{bf}$ :

$$H_{int} = \sum_{\mathbf{k}m} V(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k},m}^+ f_{\mathbf{k}+\mathbf{q},m} b_{\mathbf{q}}^+ + \text{H.c.}
 \tag{7}$$

Именно в меру  $H_{int}$ , как показано ниже, оказывается возможным возникновение антиферромагнитного упорядочения на фоне состояния Кондо.

### 3. КРИТЕРИЙ СУЩЕСТВОВАНИЯ СЛАБОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИЗМА

Антиферромагнитное упорядочение в рассматриваемой системе характеризуется появлением антисимметричных по спиновому индексу  $m$  собственно-энергетических частей функций Грина на некотором волновом векторе  $\mathbf{Q}$ :  $\Sigma_{aa,m}, \Sigma_{ff,m}$ . Далее мы ограничимся рассмотрением наиболее простого случая линейно поляризованной структуры

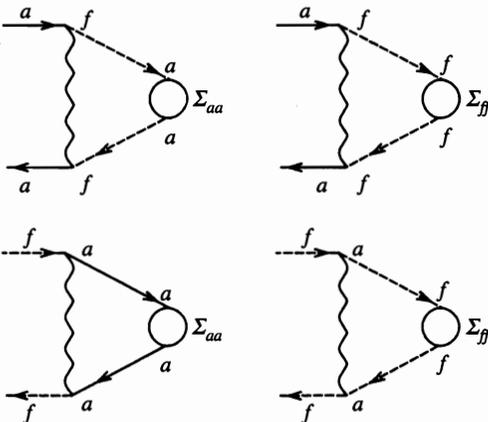


Рис. 1. Диаграммы для собственно-энергетических частей псевдофермионов и зонных электронов

с  $Q = G/2$ , где  $G$  — вектор обратной решетки. Это соответствует антиферромагнитному упорядочению с удвоением периода. Простейшие диаграммы, дающие вклад в  $\Sigma_{aa}, \Sigma_{ff}$  в низшем по  $1/N$  порядке, показаны на рис. 1. Отметим, что недиагональная по зонным индексам собственно-энергетическая часть  $\Sigma_{af,m}$  исчезает из-за условия симметрии  $\langle V_m(\mathbf{k}) \rangle = 0$  при интегрировании по направлениям вектора  $\mathbf{k}$  в зоне Бриллюэна. Ось квантования считаем направленной вдоль вектора поляризации ВСП. В этом случае зависимость  $\Sigma_m$  от спинового индекса для простоты запишем в виде

$$\Sigma_m = \text{sign}(m)\Sigma. \tag{8}$$

В первом порядке по  $\Sigma$ , таким образом, получаем следующую систему уравнений самосогласования:

$$\begin{aligned} \Sigma_{aa}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{Q}) = & T \sum_{i\omega \mathbf{q}} \frac{V^2}{N(\epsilon_f - E_0)} G_{ff,m}(\mathbf{q}, i\omega) G_{ff,m}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, i\omega) \Sigma_{ff}(\mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{Q}) + \\ & + T \sum_{i\omega \mathbf{q}} \frac{V^2}{N(\epsilon_f - E_0)} G_{fa,m}(\mathbf{q}, i\omega) G_{af,m}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, i\omega) \Sigma_{aa}(\mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{Q}), \end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{aa}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{Q}) = & T \sum_{i\omega \mathbf{q}} \frac{V^2}{N(\epsilon_f - E_0)} G_{aa,m}(\mathbf{q}, i\omega) G_{aa,m}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, i\omega) \Sigma_{aa}(\mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{Q}) + \\ & + T \sum_{i\omega \mathbf{q}} \frac{V^2}{N(\epsilon_f - E_0)} G_{af,m}(\mathbf{q}, i\omega) G_{fa,m}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, i\omega) \Sigma_{ff}(\mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{Q}), \end{aligned} \tag{10}$$

Из уравнений (9), (10) следует, что величины  $\Sigma_{aa}, \Sigma_{ff}$  не зависят от квазиимпульса и частоты. В этом случае имеем следующие уравнения:

$$\Sigma_{aa} = \frac{V^2}{N(\epsilon_f - E_0)} [\Pi_{af}(\mathbf{Q})\Sigma_{aa} + \Pi_{ff}(\mathbf{Q})\Sigma_{ff}], \tag{11}$$

$$\Sigma_{ff} = \frac{V^2}{N(\epsilon_f - E_0)} [\Pi_{af}(\mathbf{Q})\Sigma_{ff} + \Pi_{aa}(\mathbf{Q})\Sigma_{aa}], \tag{12}$$

где

$$\begin{aligned} \Pi_{ff}(\mathbf{Q}) &= T \sum_{i\omega \mathbf{q}} G_{ff,m}(\mathbf{q}, i\omega) G_{ff,m}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, i\omega), \\ \Pi_{aa}(\mathbf{Q}) &= T \sum_{i\omega \mathbf{q}} G_{aa,m}(\mathbf{q}, i\omega) G_{aa,m}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, i\omega), \\ \Pi_{af}(\mathbf{Q}) &= T \sum_{i\omega \mathbf{q}} G_{af,m}(\mathbf{q}, i\omega) G_{fa,m}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, i\omega). \end{aligned} \tag{13}$$

Приравнявая нулю детерминант системы уравнений (11), (12), можно получить критерий антиферромагнитной неустойчивости:

$$\left[ 1 - \frac{V^2}{N(\epsilon_f - E_0)} \Pi_{af}(\mathbf{Q}) \right]^2 - \frac{V^4}{N^2(\epsilon_f - E_0)^2} \Pi_{ff}(\mathbf{Q}) \Pi_{aa}(\mathbf{Q}) = 0, \tag{14}$$

или в иной форме:

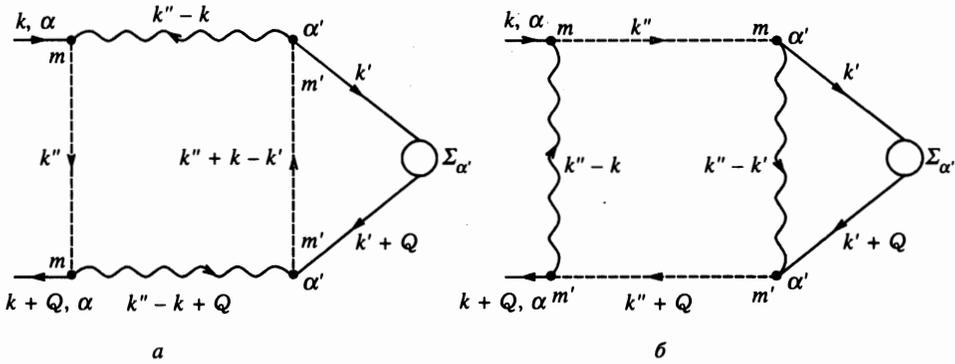


Рис. 2. Диаграммы для собственно-энергетических частей зонных электронов

$$1 = \frac{V^2}{N(\epsilon_f - E_0)} \Pi_{af}(\mathbf{Q}) \pm \sqrt{\frac{V^4}{N^2(\epsilon_f - E_0)^2} \Pi_{ff}(\mathbf{Q}) \Pi_{aa}(\mathbf{Q})}. \quad (15)$$

Легко показать, что в (15) следует выбрать только знак «+», так как в рассматриваемой системе

$$\sqrt{\Pi_{ff}(\mathbf{Q}) \Pi_{aa}(\mathbf{Q})} \gg |\Pi_{af}(\mathbf{Q})|,$$

так что можно опустить первое слагаемое в (15) (детали приведены ниже).

Для выяснения физического смысла условия (14) рассмотрим, полагая  $\Pi_{af} = 0$ , более реалистичную модель с гамильтонианом

$$H_{int} = \sum_{\mathbf{k}m\alpha} V_{m,\alpha}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k},\alpha}^{\dagger} f_{\mathbf{k}+\mathbf{q},m} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} + \text{H.c.}, \quad (16)$$

где  $\alpha = \pm 1$  — спиновый индекс зонных электронов. Во втором порядке по флуктуациям бозонного поля появляются два типа диаграмм для антисимметричной по спиновому индексу собственно-энергетической части  $\Sigma_{\alpha}$  (рис. 2):

$$\begin{aligned} \Sigma_{\alpha}^{(a)}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{Q}) = & -T^2 \sum_{i\omega'} \sum_{i\omega''} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} \sum_{m m' \alpha'} |V_{m\alpha}|^2 |V_{m'\alpha'}|^2 D(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}) \times \\ & \times D(\mathbf{k}'' - \mathbf{k} + \mathbf{Q}) G_{ff,m}(\mathbf{k}'') G_{ff,m'}(\mathbf{k}'' + \mathbf{k}' - \mathbf{k}) \times \\ & \times G_{\alpha}(\mathbf{k}') G_{\alpha}(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \Sigma_{\alpha'}^{(a)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}' + \mathbf{Q}), \end{aligned} \quad (17)$$

где  $k = (\mathbf{k}, i\omega)$ ,  $k' = (\mathbf{k}', i\omega')$ ,  $k'' = (\mathbf{k}'', i\omega'')$ ,  $Q = (\mathbf{Q}, 0)$ ,

$$\begin{aligned} \Sigma_{\alpha}^{(b)}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{Q}) = & T^2 \sum_{i\omega'} \sum_{i\omega''} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} \sum_{m m' \alpha'} V_{m\alpha}^* V_{m\alpha'} V_{m'\alpha'}^* V_{m'\alpha} D(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}) \times \\ & \times D(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}') G_{ff,m}(\mathbf{k}'') G_{ff,m'}(\mathbf{k}'' + \mathbf{Q}) \times \\ & \times G_{\alpha}(\mathbf{k}') G_{\alpha}(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}) \Sigma_{\alpha'}^{(b)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}' + \mathbf{Q}). \end{aligned} \quad (18)$$

В выражения (17), (18) входят среднеполевые функции Грина, симметричные по индексам  $m, \alpha$ . В общем случае мы не можем представить  $G_{ff}$  и  $G_{aa}$  в простой форме,

подобной выражениям (6), и вычисления в (17), (18) становятся гораздо сложнее, чем в (9), (10). Тем не менее для качественного анализа мы выберем простейшую форму зависимости  $V_{m\alpha}$  от индексов в приближении изотропного рассеивающего потенциала:

$$V_{m\alpha} = V g_{m\alpha}, \quad g_{m\alpha} = \sqrt{\frac{J + m\alpha}{2J}},$$

где  $g_{m\alpha}$  — коэффициенты Клебша-Гордана. Зависимость  $\Sigma_\alpha$  от спинового индекса имеет вид

$$\Sigma_\alpha = \alpha \Sigma, \quad \alpha = \pm 1. \tag{19}$$

Можно показать, что диаграмма рис. 2а пропорциональна величине

$$A = \sum_{\alpha' m m'} \alpha' g_{m\alpha}^2 g_{m'\alpha'}^2 = 0, \tag{20}$$

тогда как вклад в  $\Sigma$  от диаграммы рис. 2б конечен в меру конечности величины  $B$ :

$$B = \frac{1}{2} \sum_{m m'} \left( \sum_{\alpha} \alpha g_{m\alpha} g_{m'\alpha} \right)^2 \neq 0. \tag{21}$$

Из анализа диаграмм рис. 2 можно заключить, что диаграмма а фактически представляет собственно-энергетическую часть зонных электронов, в которой учтены флуктуационные поправки к бозонному пропагатору. Такие поправки не приводят к возникновению псевдофермионной функции Грина, зависящей от двух различных магнитных индексов. В то же время диаграмма б содержит флуктуационную поправку к  $G_{ff}$ , которая приводит к такого рода зависимости (т. е. эффективно появляется пропагатор псевдофермионов  $G_{ff, m m'}$  с  $m \neq m'$ ). Это позволяет заключить, что антиферромагнитное упорядочение появляется одновременно в подсистемах зонных и локализованных электронов.

Из (17)–(21) можно получить условие неустойчивости

$$1 \leq \frac{BV^4}{N^2(\epsilon_f - E_0)^2} \Pi_{ff}(\mathbf{Q}) \Pi_{aa}(\mathbf{Q}), \tag{22}$$

которое подобно (14), если положить  $B = 1$  и  $\Pi_{af}(\mathbf{Q}) = 0$ .

Отметим, что условие (22) имеет определенную аналогию с обобщенным критерием Стонера [17]

$$1 \leq \tilde{U} \chi_0(\mathbf{Q}), \tag{23}$$

где  $\tilde{U}$  — эффективное взаимодействие,  $\chi_0(\mathbf{Q})$  — статическая магнитная восприимчивость невзаимодействующей системы на векторе  $\mathbf{Q}$ . Когда имеет место равенство в (23), магнитная восприимчивость, рассчитанная в приближении хаотических фаз, имеет полюс:

$$\chi(\mathbf{Q}) = \frac{\chi_0(\mathbf{Q})}{1 - \tilde{U} \chi_0(\mathbf{Q})},$$

что сигнализирует о появлении в системе антиферромагнитного упорядочения с волновым вектором  $\mathbf{Q}$ .

Если рассматривать (22) (или его аналог (14)) с точки зрения зонных электронов, то роль  $\chi_0$  здесь играет величина  $\Pi_{aa}(\mathbf{Q})$ , а роль эффективного обменного взаимодействия играет величина  $BV^4(\epsilon_f - E_0)^{-2}N^{-2}\Pi_{ff}(\mathbf{Q})$  (в (14)  $B = 1$ ). Можно трактовать критерий (22) и с точки зрения локализованных электронов, связанных эффективным РККИ-взаимодействием  $BV^4(\epsilon_f - E_0)^{-2}N^{-2}\Pi_{aa}(\mathbf{Q})$ . В этом случае роль  $\chi_0(\mathbf{Q})$  играет величина  $\Pi_{ff}(\mathbf{Q})$ .

Поляризационные петли в (14) в общем случае можно рассчитать только численно. Для их анализа воспользуемся модельным спектром зонных электронов с постоянной плотностью состояний  $N(0)$ , что позволяет легко перейти от суммирования по квазиимпульсу к интегрированию по энергии  $\epsilon(\mathbf{k})$ . Предположим, что уровень Ферми находится в зоне, соответствующей ветви  $\epsilon_1(\mathbf{k})$  спектра (5). Наши вычисления показывают, что главный вклад в поляризационный оператор зонных электронов вносят состояния с энергиями от дна зоны до энергий порядка ширины гибридационной щели  $\Delta = Va$ , где затравочный спектр зонных электронов существенно модифицируется за счет гибридализации с  $f$ -уровнем. В то же время основной вклад в  $\Pi_{ff}(\mathbf{Q})$  вносят состояния в диапазоне энергий шириной  $\Delta$  ниже  $\epsilon_f$ . Вне этого диапазона гриновские функции псевдофермионов не отличаются сильно от функций Грина бездисперсных частиц и дают близкий к нулю вклад в  $\Pi_{ff}(\mathbf{Q})$ .

Ниже мы приводим результаты наших расчетов при  $T = 0$  для наиболее интересного случая  $\Delta/\epsilon_f \gg 1$ . Рассматриваем для простоты расчетов случай почти половинного заполнения затравочной зоны  $\epsilon(\mathbf{k})$ , обладающей свойством идеального нестинга:  $\epsilon(\mathbf{k}) = -\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ . В принципе, это условие не является критическим для существования антиферромагнетизма, как продемонстрировано ниже, хотя и наиболее благоприятно. Спектр (5) в кондо-фазе свойством нестинга, разумеется, не обладает. Главные члены поляризационных операторов по порядку величины есть

$$\begin{aligned}\Pi_{aa}(\mathbf{Q}) &\sim -N(0) \ln \frac{W}{\Delta}, \\ \Pi_{af}(\mathbf{Q}) &\sim -N(0) \ln \frac{\Delta}{\epsilon_f}, \\ \Pi_{ff}(\mathbf{Q}) &\sim -\frac{\Delta^2}{\epsilon_f^2} N(0),\end{aligned}\quad (24)$$

где  $W$  — энергия порядка полуширины зоны ( $W \gg \Delta$ ). Отметим, что в соответствии с (24)  $\Pi_{ff}(\mathbf{Q})\Pi_{aa}(\mathbf{Q}) \gg \Pi_{af}^2(\mathbf{Q})$ , так как  $\Delta/\epsilon_f \gg 1$ .

Подставляя (24) в (14) и учитывая, что  $\epsilon_f \ll |E_0|$ , получаем следующий критерий неустойчивости:

$$1 \leq \frac{V^4 N^2(0)}{N^2 E_0^2} \frac{\Delta^2}{\epsilon_f^2} \ln \frac{W}{\Delta}. \quad (25)$$

Как показано в работе [16], величина  $\Delta^2/\epsilon_f^2$  определяет рост эффективной массы:

$$\frac{\Delta^2}{\epsilon_f^2} = \frac{m^*}{m} \sim \frac{W}{\epsilon_f N} = \frac{\exp[|E_0|/V^2 N(0)]}{N}. \quad (26)$$

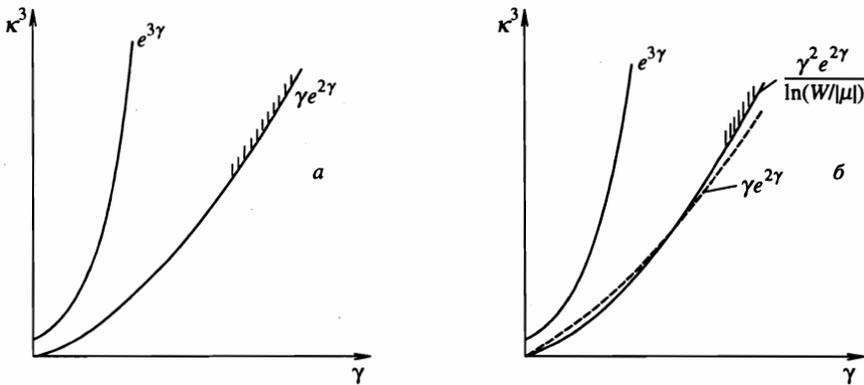


Рис. 3. Фазовая диаграмма  $\kappa^3$ - $\gamma$ . Заштрихованы области антиферромагнитной фазы: а — в системе с идеальным нестингом; б — в системе с нарушенным нестингом

Рассмотрим критерий (25) в тяжелофермионной фазе. Удобно ввести следующие обозначения:  $\kappa \equiv m^*/m$ ,  $\gamma \equiv |E_0|/V^2 N(0)$ . Режиму Кондо соответствует предел  $\gamma \gg 1$ . В новых обозначениях из (25), (26) получаем следующее неравенство:

$$\frac{\kappa^3 e^{-2\gamma}}{\gamma^2} \left( \gamma - \frac{1}{2} \ln \kappa \right) \geq 1. \tag{27}$$

Потребуем также выполнения условия  $N \gg 1$ , которое обеспечивает применимость  $1/N$ -разложения и в новых обозначениях приобретает вид

$$\frac{e^\gamma}{\kappa} \gg 1. \tag{28}$$

Применение  $1/N$ -разложения позволяет опустить логарифмическое слагаемое в (27). Окончательно имеем

$$\gamma e^{2\gamma} \leq \kappa^3 \ll e^{3\gamma}, \tag{29}$$

где предполагается, что  $\gamma \gg 1$ .

Область существования антиферромагнетизма в решетке Кондо качественно показана на фазовой диаграмме  $\kappa^3 - \gamma$ , представленной на рис. 3а.

Как мы уже отмечали, величину перед логарифмическим множителем в (25) можно рассматривать как эффективное взаимодействие зонных электронов через флуктуации псевдополей. Согласно (25), это взаимодействие является убывающей функцией  $N$ , что соответствует исчезновению флуктуаций в пределе  $N \rightarrow \infty$ . С помощью (25), (26) можно показать, что в тяжелофермионной фазе с антиферромагнитным упорядочением величина  $N$  ограничена сверху:

$$1 \ll N < \frac{e^{\gamma/3}}{\gamma^{1/3}}. \tag{30}$$

До сих пор мы предполагали, что спектр зонных электронов подчиняется условию точного нестинга  $\epsilon(\mathbf{k}) = -\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ . Выражения (24) приведены именно для этого

случая. Если нестинг нарушается (например, когда заполнение зоны отклоняется от половинного, имеем  $\epsilon(\mathbf{k}) = -\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) + \mu$ , где  $\mu$  — сдвиг уровня Ферми от положения в наполовину заполненной зоне) в  $\Pi_{aa}(\mathbf{Q})$  (24) входит множитель  $\ln(W/\max[|\mu|, \Delta])$  вместо  $\ln(W/\Delta)$ . В то же время выражение для  $\Pi_{ff}(\mathbf{Q})$  в главном порядке по  $\epsilon_f/\Delta$  не меняется.

Когда  $\mu > \Delta$ , вместо (29) получаем

$$\frac{\gamma^2 e^{2\gamma}}{\ln(W/|\mu|)} \leq \kappa^3 \ll e^{3\gamma}. \quad (31)$$

Как следует из этого неравенства, отклонение от идеального нестинга сужает область антиферромагнетизма (рис. 3б) и, когда  $|\mu|$  достаточно велико, параметр  $1/N$ -разложения должен быть ограничен сверху условием

$$1 \ll N^3 < \frac{e^\gamma}{\gamma^2} \ln \frac{W}{|\mu|}. \quad (32)$$

#### 4. АМПЛИТУДА СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ

Обратимся к расчету амплитуды  $S$  спиновой плотности в основном состоянии вблизи границы области существования антиферромагнитной фазы. Рассмотрим для примера зонную компоненту  $S_a$ , которая определяется через аномальную функцию Грина  $\mathcal{G}_m^{aa}(k, k + Q)$  следующим образом:

$$S_a = \frac{T}{N} \sum_{i\omega} \sum_m \sum_k \text{sign}(m) \mathcal{G}_m^{aa}(k, k + Q), \quad (33)$$

где наряду с уже известными параметрами задачи в  $\mathcal{G}_m^{aa}(k, k + Q)$  сложным образом входят собственно-энергетические части  $\Sigma_{aa,m}$  и  $\Sigma_{ff,m}$ , которые в свою очередь определяются из уравнений самосогласования:

$$\begin{aligned} \Sigma_{aa,m} &= \frac{V^2}{(\epsilon_f - E_0)N} T \sum_{i\omega} \sum_k \mathcal{G}_m^{ff}(k, k + Q), \\ \Sigma_{ff,m} &= \frac{V^2}{(\epsilon_f - E_0)N} T \sum_{i\omega} \sum_k \mathcal{G}_m^{aa}(k, k + Q). \end{aligned} \quad (34)$$

Для расчета функций  $\mathcal{G}_m^{aa,ff}(k, k + Q)$  требуется решить две системы линейных уравнений четвертого порядка: в первую входят функции  $\mathcal{G}_m^{aa}(k, k)$ ,  $\mathcal{G}_m^{aa}(k, k + Q)$ ,  $\mathcal{G}_m^{af}(k, k)$ ,  $\mathcal{G}_m^{af}(k, k + Q)$ , вторая система получается из первой заменой индексов  $a \leftrightarrow f$ . Для иллюстрации мы приводим диаграммную запись такой системы уравнений на рис. 4. Выражения для функций Грина  $\mathcal{G}_m^{ij}(i, j = a, f)$  чрезвычайно громоздки, что заставляет прибегать к численным методам решения системы уравнений самосогласования (34). Тем не менее вблизи линии неустойчивости относительно перехода в фазу с ВСП (заштрихованная область на рис. 3), где параметр  $\Sigma_{aa,m}$  мал, можно найти аналитическое решение, пользуясь разложением по параметру  $\Sigma_{aa,m}/\Delta \ll 1$ .

$$\begin{aligned} \frac{a}{k} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k} &= \frac{a}{k} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k} + \frac{a}{k} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k} \Sigma_{aa} \frac{a}{k+Q} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k} + \frac{a}{k} \xrightarrow{\quad} \frac{f}{k} \Sigma_{ff} \frac{f}{k+Q} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k}, \\ \frac{a}{k+Q} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k} &= \frac{a}{k+Q} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k+Q} \Sigma_{aa} \frac{a}{k} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k} + \frac{a}{k+Q} \xrightarrow{\quad} \frac{f}{k+Q} \Sigma_{ff} \frac{f}{k} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k}, \\ \frac{f}{k+Q} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k} &= \frac{f}{k+Q} \xrightarrow{\quad} \frac{f}{k+Q} \Sigma_{ff} \frac{f}{k} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k} + \frac{f}{k+Q} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k+Q} \Sigma_{aa} \frac{a}{k} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k}, \\ \frac{f}{k} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k} &= \frac{f}{k} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k} \Sigma_{ff} \frac{f}{k+Q} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k} + \frac{f}{k} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k} \Sigma_{aa} \frac{a}{k+Q} \xrightarrow{\quad} \frac{a}{k}, \end{aligned}$$

Рис. 4. Система уравнений для функций Грина в антиферромагнитной фазе

Воспользуемся анзацем (8) для описания зависимости  $\Sigma_{aa,ff,m}$  от индекса  $m$ . Оставляя в (34) члены со степенями  $\Sigma_{aa,ff,m}$  не выше кубических и антисимметризуя по индексу  $m$ , получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \Sigma_{aa} &= L_f \Sigma_{ff} + A_3 \Sigma_{aa}^3 + A_0 \Sigma_{ff}^3 + A_2 \Sigma_{aa}^2 \Sigma_{ff} + A_1 \Sigma_{ff}^2 \Sigma_{aa}, \\ \Sigma_{ff} &= L_a \Sigma_{aa} + F_3 \Sigma_{ff}^3 + F_0 \Sigma_{aa}^3 + F_2 \Sigma_{ff}^2 \Sigma_{aa} + F_1 \Sigma_{aa}^2 \Sigma_{ff}, \end{aligned} \tag{35}$$

где все коэффициенты выражаются через функции Грина (6):

$$\begin{aligned} L_{a,f} &= \frac{V^2}{(\epsilon_f - E_0)N} \Pi_{aa,ff}(\mathbf{Q}), \\ A_3 &= \frac{V^2}{(\epsilon_f - E_0)N} T \sum_{i\omega} \sum_{\mathbf{k}} G_{aa}(k) G_{aa}(k+Q) G_{af}(k) G_{af}(k+Q), \\ A_0 &= \frac{V^2}{(\epsilon_f - E_0)N} T \sum_{i\omega} \sum_{\mathbf{k}} G_{ff}^2(k) G_{ff}^2(k+Q), \\ A_2 &= \frac{V^2}{(\epsilon_f - E_0)N} T \sum_{i\omega} \sum_{\mathbf{k}} [2G_{aa}(k) G_{ff}(k) G_{af}^2(k+Q) + G_{af}^2(k) G_{af}^2(k+Q)], \\ A_1 &= \frac{V^2}{(\epsilon_f - E_0)N} T \sum_{i\omega} \sum_{\mathbf{k}} 3G_{af}(k) G_{af}(k+Q) G_{ff}(k) G_{ff}(k+Q). \end{aligned} \tag{36}$$

Здесь  $\Pi_{aa,ff}(\mathbf{Q})$  даются выражениями (13). Выражения для коэффициентов  $F_j$

( $j = 0, 1, 2, 3$ ) через функции Грина (6) можно получить из соответствующих выражений в (36) для  $A_j$ , сделав в последних замену индексов  $a \leftrightarrow f$ .

Выражая  $\Sigma_{ff}$  через  $\Sigma_{aa}$  в (35) с точностью до кубических членов, имеем

$$\Sigma_{aa} = L_a L_f \Sigma_{aa} + [L_f(L_a^3 F_3 + F_0 + L_a^3 F_2 + L_a F_1) + A_3 + L_a^3 A_0 + L_a A_2 + L_f^2 A_1] \Sigma_{aa}^3. \quad (37)$$

Согласно (36), каждый из коэффициентов в (37) содержит множитель  $N^{-1} \ll 1$ . Оставляя в (37) члены не выше  $N^{-2}$ , имеем

$$\Sigma_{aa}^2 = \frac{1 - L_a L_f}{L_f F_0 + L_a A_2 + A_3}. \quad (38)$$

Наши расчеты, проведенные с модельным затравочным законом дисперсии зонных электронов с постоянной плотностью состояний для случая идеального нестинга, приводят к следующим результатам для ведущих членов в коэффициентах  $F_0, A_{2,3}$  ( $\Delta/\epsilon_f \gg 1, \epsilon_f \ll |E_0|, \mu = 0$ ) при  $T = 0$ :

$$\begin{aligned} F_0 &\sim -\frac{V^2 N(0)}{E_0 N \Delta^2}, \\ A_2 &\sim -\frac{V^2 N(0)}{E_0 N \Delta^2} \ln \frac{\Delta^2}{\epsilon_f^2}, \\ A_3 &\sim -\frac{V^2 N(0)}{E_0 N \Delta^2}. \end{aligned} \quad (39)$$

Подставив (13), (36) и (39) в (38), получим

$$\Sigma_{aa}^2 = -\frac{1}{Z} \left[ 1 - \frac{V^4 N^2(0) \Delta^2}{N^2 E_0^2 \epsilon_f^2} \ln \frac{W}{\Delta} \right], \quad (40)$$

где

$$Z = \frac{V^2 N(0)}{E_0 N \Delta^2} \left[ \frac{V^2 N(0)}{E_0 N} \left( \ln \frac{W}{\Delta} \ln \frac{\Delta^2}{\epsilon_f^2} + \frac{\Delta^2}{\epsilon_f^2} \right) + 1 \right]. \quad (41)$$

Для анализа (40), (41) перейдем к обозначениям  $\kappa, \gamma$ , введенным ранее. В области существования антиферромагнитной фазы, определяемой условием (29), числитель в (40) отрицателен, т. е.  $\Sigma_{aa}^2 > 0$ . Знаменатель  $Z$  (41) в области (29) имеет следующий вид:

$$Z = \frac{\kappa e^{-\gamma}}{\gamma \Delta^2} \left[ \kappa e^{-\gamma} \left( \ln \kappa + \frac{\kappa}{\gamma} \right) - 1 \right]. \quad (42)$$

Заметим, что вблизи перехода в антиферромагнитную фазу

$$\kappa = \gamma^{1/3} e^{2\gamma/3} + \alpha, \quad (43)$$

где  $\alpha$  — малая величина по сравнению с первым слагаемым. При этом отношение слагаемых в круглых скобках в выражении (42) есть

$$\frac{\gamma \ln \kappa}{\kappa} \sim \gamma^{5/3} e^{-2\gamma/3} \ll 1,$$

так что доминирует второе слагаемое (напомним, что  $\gamma \gg 1$ ). Воспользовавшись (43), сравним теперь второе слагаемое в (42) с единицей:

$$\frac{\kappa^2 e^{-\gamma}}{\gamma} \sim \gamma^{-1/3} e^{\gamma/3} \gg 1.$$

Таким образом, вблизи линии перехода в антиферромагнитную фазу в (42) доминирует второе слагаемое, следовательно

$$\Sigma_{aa}^2 = \frac{g \ln(W/\Delta) - 1}{g} \Delta^2, \tag{44}$$

где

$$g = \frac{V^4 N^2(0) \Delta^2}{E_0^2 N^2 \epsilon_f^2}.$$

Вблизи линии перехода в антиферромагнитную фазу

$$\frac{g \ln(W/\Delta) - 1}{g} \ll 1,$$

так что разложение по параметру  $\Sigma_{aa}/\Delta \ll 1$  является оправданным. Отметим, что антиферромагнитная фаза в рассматриваемой системе реализуется при больших, но конечных  $N$  (см. неравенство (30)). Наличие такого ограничения и делает возможным превалирование слагаемого, пропорционального  $1/N^2$ , над слагаемым, пропорциональным  $1/N$ , в выражении (41) для  $Z$  в области существования ВСП.

Подставляя (44) в (33), в линейном по  $\Sigma_{aa}/\Delta$  приближении получаем

$$S_a = N(0) \Delta \ln \frac{W}{\Delta} \sqrt{\ln \frac{W}{\Delta} - \frac{1}{g}}. \tag{45}$$

Результат (45) получен для системы с точным нестингом ( $\mu = 0$ ). В случае значительного отклонения от нестинга ( $|\mu| \gg \Delta$ ) величину  $\Delta$  в логарифмических членах в (44) следует заменить на  $|\mu|$ , что приведет к уменьшению амплитуды  $S_a$  спиновой плотности. Аналогично рассчитывается и амплитуда спиновой плотности локализованных электронов  $S_f$ , которую мы здесь не выписываем.

### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, мы показали возможность выполнения критерия существования антиферромагнитного упорядочения в решетке Кондо в рамках  $1/N$ -разложения. Взаимодействие, приводящее к формированию магнитоупорядоченной фазы, появляется за счет флуктуаций бозонного поля. Наряду с возникновением ВСП в системе зонных электронов имеет место антиферромагнитное выстраивание частично экранированных спинов в локализованной системе. Взаимодействие между локализованными электронами через поляризацию зонных электронов имеет характер эффективного РККИ-взаимодействия, перенормированного кондовским экранированием. Это состояние решетки Кондо можно рассматривать как антиферромагнитное состояние системы с несколькими подрешетками с существенно различной локализацией магнитных моментов в них.

Описание состояния с магнитным упорядочением мы проводили в низшем порядке по флуктуациям бозонного поля в рамках  $1/N$ -разложения. Полученные нами решения претендуют на описание только слабого антиферромагнетизма и не могут быть распространены на сильные антиферромагнетики. Фактически речь идет о системах с  $g < 1$  (см. (44)). По мере продвижения в область фазовой диаграммы с  $g > 1$ , соответствующую сильному антиферромагнетизму, учет флуктуаций высших порядков (т. е. высших по  $1/N$  слагаемых) для определения параметров  $\Sigma_{aa,ff}$  становится существенным. При этом система уравнений (34) должна быть переформулирована в духе схемы самосогласования флуктуаций [18].

В рамках нашего подхода всюду считалось, что влияние антиферромагнитного упорядочения на состояние Кондо очень слабое ( $T_N \ll T_K$ ). Это позволило не учитывать перенормировку псевдобозонного пропагатора в магнитной фазе. Такой подход во всяком случае представляется оправданным с точки зрения  $1/N$ -разложения, так как все перенормировки псевдобозонной функции Грина будут содержать высшие по  $1/N$  порядки. В случае  $N = 2$  (который в данной работе мы не рассматриваем), безусловно, задача о сосуществовании кондо-состояния и антиферромагнетизма должна решаться в рамках иной схемы самосогласования. При этом возможна существенная модификация фазовой диаграммы рис. 3.

Сделаем в заключение замечание относительно температуры перехода в антиферромагнитную фазу в рассматриваемой системе. Перенормировка эффективного обменного взаимодействия в магнитной фазе остается слабой, т. е., имея в виду неравенство  $T_N \ll \Delta$ , можно при вычислении температуры Нееля воспользоваться той же эффективной константой связи  $g = \tilde{U}N(0)$ , что и в случае  $T = 0$ . При этом величина  $\chi_0(\mathbf{Q}) \propto \ln(W/\Delta)$  также оказывается слабо зависящей от температуры. Такая ситуация известна в теории самосогласованных спиновых флуктуаций Мория-Кавабата [19], когда температура перехода в магнитную фазу определяется не слабой зависимостью от температуры величины  $\chi_0(\mathbf{Q})$ , а поправками за счет термодинамических спиновых флуктуаций. При этом согласно [19]

$$T_N \sim \Delta [g \ln(W/\Delta) - 1]^{4/3}.$$

В теории самосогласованных спиновых флуктуаций [19] в аналогичное выражение для температуры Нееля входит в качестве первого сомножителя энергия порядка энергии Ферми, что соответствует энергетическому интервалу, в котором осуществляется взаимодействие, формирующее магнитное состояние. В нашем случае эта величина определяется энергетическим параметром режима Кондо.

Авторы благодарят Б. А. Волкова, Л. В. Келдыша и участников семинара по физике твердого тела Отделения теоретической физики ФИАН за обсуждение результатов работы. Работа частично поддерживалась Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 96-02-19693).

## Литература

1. Е. Е. Слядников, В. В. Тугушев, ЖЭТФ 102, 271 (1992).
2. В. В. Тугушев, ЖЭТФ 106, 269 (1994).

3. S. Doniach, *Physica B* **91**, 231 (1977).
4. C. Lacroix and M. Syrot, *Phys. Rev. B* **20**, 1969 (1979).
5. N. Read, D. M. Newns, and S. Doniach, *Phys. Rev. B* **30**, 3844 (1984).
6. S. Doniach, *Phys. Rev. B* **35**, 1814 (1987).
7. V. Dorin and P. Schlottmann, *Phys. Rev. B* **46**, 10800 (1992).
8. V. Dorin and P. Schlottmann, *Phys. Rev. B* **47**, 5095 (1993).
9. Y. Kuramoto and K. Miyake, *Progr. Theor. Phys. Suppl.* **108**, 199 (1992).
10. F. J. Ohkawa, *Progr. Theor. Phys. Suppl.* **108**, 209 (1992).
11. S. E. Barnes, *J. Phys. F* **6**, 1375 (1976).
12. G. Kotliar and A. E. Ruckenstein, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1362 (1986).
13. N. F. Bickers, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 845 (1978).
14. P. Coleman, *Phys. Rev. B* **29**, 3035 (1984).
15. R. Miura, T. Maturura, and Y. Kuroda, *Physica C* **179**, 411 (1991).
16. A. J. Millis and P. A. Lee, *Phys. Rev. B* **35**, 3394 (1987).
17. C. Herring, in *Magnetism IV*, ed. by C. T. Rado and H. Suhl, Academic Press, New York (1966).
18. Е. А. Жуковский, В. В. Тугушев, *ЖЭТФ* **103**, 568 (1993).
19. Т. Морня, *Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами*, Мир, Москва (1988).