Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Х. Фрам, Г. Паласиос, Интегрируемые примеси андерсоновского типа в суперсимметричной t - J -модели, *ТМФ*, 2007, том 150, номер 2, 338–352

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf5983>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.210.77.194

26 апреля 2023 г., 03:17:24

© 2007 г.

Х. Фрам*, Г. Паласиос*

ИНТЕГРИРУЕМЫЕ ПРИМЕСИ АНДЕРСОНОВСКОГО ТИПА В СУПЕРСИММЕТРИЧНОЙ t - J -МОДЕЛИ

Построена и в рамках алгебраического анзаца Бете решена интегрируемая $gl(2|1)$ -симметричная модель коррелированных электронов с примесью андерсоновского типа. В зависимости от параметров, характеризующих примесь и ее взаимодействие с цепочкой, в спектре системы наблюдается образование связанных состояний. Исследовано влияние этих связанных состояний на вклад примеси в низкотемпературные характеристики системы, в частности ее намагниченность и восприимчивость.

Ключевые слова: эффект Кондо, квантовая примесь, анзац Бете, граничные условия.

1. ВВЕДЕНИЕ

Наличие квантовой примеси, т.е. локальных центров рассеяния с внутренними степенями свободы, в системе многих тел приводит к разнообразным явлениям, непертурбативным по своей природе. Для исследования свойств таких систем используются различные средства, такие как изучение точно решаемых модельных систем, а также мощные теоретико-полевые методы (см., например, работы [1]). Недавние достижения в области нанотехнологий привели к новым реализациям квантовых примесей, при этом наблюдалась физика Кондо, например, в виде резонансов Фано в спектрах, полученных путем сканирующей туннельной микроскопии магнитных атомов на металлических поверхностях, или пик в проводимости занятых нечетным числом электронов квантовых точек при нулевой разности потенциалов [2]. Проблема контроля над описывающими примесь в этих новых системах параметрами, такими как их внутренний спектр, взаимодействие с окружением, состоящим из многих тел, а также спектральные свойства, в частности локальная плотность состояний, ставит новые вопросы, ответы на которые предстоит получить из теоретических исследований.

Для подобных исследований требуются конкретные модели квантовой примеси, которые, с одной стороны, позволили бы охватить весь спектр доступных экспериментальных параметров, а с другой стороны – установить связь с универсальным

*Institut für Theoretische Physik, Universität Hannover, D-30163 Hannover, Germany.
E-mail: frahm@itp.uni-hannover.de; palacios@itp.uni-hannover.de

поведением при низких энергиях, определяемым с помощью упомянутых выше теоретических методов. Этим требованиям можно удовлетворить в рамках подхода, основанного на интегрируемых решеточных моделях.

В рамках метода квантовой обратной задачи рассеяния [3] такие модели строятся на основе неоднородных вершинных моделей, полученных путем комбинирования $\mathcal{L}$ -операторов, удовлетворяющих сплетающему соотношению

$$\mathcal{R}^{12}(\lambda - \mu)(\mathcal{L}(\lambda) \otimes \mathcal{L}(\mu)) = (\mathcal{L}(\mu) \otimes \mathcal{L}(\lambda))\mathcal{R}^{12}(\lambda - \mu). \quad (1.1)$$

Класс таких моделей определяется конкретным выбором входящей в соотношение (1.1) $\mathcal{R}$ -матрицы, которая, в свою очередь, должна удовлетворять квантовому уравнению Янга–Бакстера

$$\mathcal{R}^{12}(\lambda)\mathcal{R}^{13}(\lambda + \mu)\mathcal{R}^{23}(\mu) = \mathcal{R}^{23}(\mu)\mathcal{R}^{13}(\lambda + \mu)\mathcal{R}^{12}(\lambda) \quad (1.2)$$

(индексы указывают те пространства в тензорном произведении $V_1 \otimes V_2 \otimes V_3$, на которых $\mathcal{R}^{ij}$ действует нетривиально). Особый интерес представляют модели, построенные на основе “фундаментальных” рациональных $\mathcal{R}$ -матриц $\mathcal{R}^{ij}(\lambda) = (\lambda 1 + i\Pi^{ij})/(\lambda + i)$, где Π^{ij} – оператор перестановки на пространстве $V_i \otimes V_j$. Коль скоро $\mathcal{R}$ выбрана, представления $\mathcal{L}$ квадратичной алгебры (1.1) можно комбинировать для построения интегрируемых решеточных моделей.

Выбирая $\mathcal{L}_0^n(\lambda) = \mathcal{R}^{0n}(\lambda)$ и отождествляя V_n с квантовым пространством, соответствующим узлу n решетки, можно построить интегрируемую решеточную модель со взаимодействием с ближайшими соседями, взяв след по вспомогательному пространству V_0 . Такой подход ведет, помимо прочего, к гейзенберговской цепочке со спином $S = 1/2$ и к одномерной суперсимметричной t - J -модели.

В такую систему можно ввести интегрируемые неоднородности, если заменить $\mathcal{L}$ -оператор в одном узле решетки другим решением сплетающего соотношения. Оператор $\mathcal{L}_{\text{imp}}$, описывающий такую неоднородность, отличается от операторов, используемых для описания других узлов, во-первых, представлением лежащей в основе алгебры (т.е. $SU(2)$ для гейзенберговской цепочки, $gl(2 | 1)$ для суперсимметричной t - J -модели) в квантовом пространстве и, во-вторых, сдвигом своего аргумента, т.е. $\mathcal{L}_{\text{imp}}(\lambda + t)$, где, изменяя t , можно управлять взаимодействием между узлом с неоднородностью и остальной решеткой.

Первым применением такого построения явилось изучение примесей типа примесей Кондо в гейзенберговской цепочке [4]. Эта схема также многократно применялась для анализа свойств квантовых примесей, внедренных в t - J -цепочку (см., например, работы [5], [6]). В последних моделях богатая теория представлений градуированных алгебр Ли [7] позволяет дополнительно управлять внутренней структурой неоднородности.

2. ИНТЕГРИРУЕМЫЕ ПРИМЕСИ, КОМБИНИРОВАННЫЕ С ГРАНИЦАМИ

Следствием внедрения квантовой примеси в интегрируемую решеточную модель является полное отсутствие рассеяния назад на неоднородности. Потенциал рассеяния назад действует как релевантное возмущение в коррелированной системе, в

которую внесена примесь, сдвигая систему по направлению к фиксированной точке, которая эффективно разрывает цепочку в узле потенциального рассеивателя [8]. Отсюда следует, что в такой системе свойства подобной фиксированной точки можно исследовать в решеточных моделях с открытыми граничными условиями. Для квантовой примеси с внутренними степенями свободы исследования, основанные на бозонизации и конформной теории поля с границей, показывают, что следует рассматривать амплитуды рассеяния как назад, так и вперед [9]. Тем не менее комбинация неоднородности и границы позволяет ввести дополнительные параметры для управления поведением системы и открывает доступ к примесям более общего типа в интегрируемых решеточных моделях.

В рамках метода квантовой обратной задачи рассеяния интегрируемые граничные условия можно классифицировать на основе представлений двух алгебр $\mathcal{T}_{\pm}$, определяемых в терминах уравнений отражения [10], [11]. Для $\mathcal{T}_{-}$ это уравнение имеет вид

$$\mathcal{R}^{12}(\lambda - \mu) \mathcal{T}_{-}^1(\lambda) \mathcal{R}^{21}(\lambda + \mu) \mathcal{T}_{-}^2(\mu) = \mathcal{T}_{-}^2(\mu) \mathcal{R}^{12}(\lambda + \mu) \mathcal{T}_{-}^1(\lambda) \mathcal{R}^{21}(\lambda - \mu), \quad (2.1)$$

где $\mathcal{R}^{12}$ снова является решением уравнения Янга–Бакстера (1.2) на тензорном произведении $V_1 \otimes V_2$ и $\mathcal{T}_{-}^1 = \mathcal{T} \otimes I$, $\mathcal{T}_{-}^2 = I \otimes \mathcal{T}$. Алгебра $\mathcal{T}_{+}$ связана с $\mathcal{T}_{-}$ автоморфизмом. Представления алгебр $\mathcal{T}_{\pm}$ определяют граничные члены в гамильтониане на левом (правом) конце цепочки. Поскольку их можно выбирать независимо, для получения классификации возможных граничных примесей достаточно рассмотреть решения уравнения (2.1).

с-Числовые решения уравнения отражения (2.1), соответствующие этой $\mathcal{R}$ -матрице, удастся классифицировать [12]. Ниже мы ограничимся обсуждением чисто отражающих концов, соответствующих единичным матрицам во вспомогательном пространстве, $K_{-} \equiv 1$. Несложно получить обобщение, описывающее граничный потенциал или граничное магнитное поле для $gl(2 | 1)$ -симметричной t - J -модели [13], [14].

Граничные примеси, несущие внутренние степени свободы, можно построить, комбинируя их с неоднородностью, как это обсуждалось во введении. Для конкретности рассмотрим $\mathcal{L}$ -оператор, основанный на *типичном* четырехмерном представлении $[b, 1/2]$ алгебры $gl(2 | 1)$ при $\alpha \equiv b - 1/2 > 0$. Соответствующее решение сплетающего соотношения (1.1) было ранее рассмотрено в работах [5], [14]. Записанное как матрица во вспомогательном пространстве, оно имеет вид

$$\mathcal{L}_{\text{imp}}(\lambda) = \frac{\lambda - i(\alpha/2 + 1)}{\lambda + i(\alpha/2 + 1)} + \frac{i}{\lambda + i(\alpha/2 + 1)} \tilde{\mathcal{L}}, \quad \tilde{\mathcal{L}} = \begin{pmatrix} 1 - n_{\uparrow} & -S^{-} & Q_{\uparrow} \\ -S^{+} & 1 - n_{\downarrow} & Q_{\downarrow} \\ Q_{\uparrow}^{\dagger} & Q_{\downarrow}^{\dagger} & \alpha + 2 - n \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Здесь $n = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} n_{\sigma} = \sum_{\sigma} c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma}$ и $\vec{S} = (1/2) \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{\beta}$ – операторы числа электронов и спина на примесном узле, выраженные через канонические фермионные операторы рождения и уничтожения, а Q_{σ} – фермионные генераторы алгебры $gl(2 | 1)$ в данном представлении, которые можно выразить через проекционные операторы

(так называемые “операторы Хаббарда”) $\mathbf{X}^{ab} = |a\rangle\langle b|$, где $a, b = \uparrow, \downarrow, 2, 0$:

$$Q_\sigma = \sqrt{\alpha + 1} \mathbf{X}^{0\sigma} - 2\sigma\sqrt{\alpha} \mathbf{X}^{-\sigma^2}, \quad (2.3)$$

причем $\sigma = \pm 1/2$ соответствует $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

Следуя Склинину [11], можно получить операторнозначные матричные решения уравнения отражения посредством “одевания” c -числового решения этого уравнения $K_-(\lambda)$ с помощью $\mathcal{L}$ -операторов. Выражение

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_-(\lambda) &= \mathcal{L}_{L+1}(\lambda) \dots \mathcal{L}_2(\lambda) \mathcal{L}_{\text{imp}}(\lambda + t) \times \\ &\times K_-(\lambda) (\mathcal{L}_{\text{imp}}(-\lambda + t))^{-1} (\mathcal{L}_2(-\lambda))^{-1} \dots (\mathcal{L}_{L+1}(\lambda))^{-1} \end{aligned} \quad (2.4)$$

определяет интегрируемую модель с $L + 1$ узлами (примесь (2.2) посажена в узел 1) через трансфер-матрицу

$$\tau(\lambda) = \text{str}_0 [K_+(\lambda) \mathcal{T}_-(\lambda)], \quad (2.5)$$

где $\text{str}_0(M) = \sum_a (-1)^{[a]} M_{aa}$ – (градуированный) суперслед, взятый по вспомогательному пространству. Гамильтониан цепочки с отражающими концами, т.е. $K_\pm \equiv \mathbf{1}$, получается дифференцированием трансфер-матрицы по спектральному параметру:

$$\mathcal{H} \propto i \frac{\partial}{\partial \lambda} \tau(\lambda) \Big|_{\lambda=0}. \quad (2.6)$$

Это приводит к следующему гамильтониану квантовой цепочки:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\mathcal{P} \left(\sum_{j=2}^L \sum_{\sigma} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j+1,\sigma} + c_{j+1,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \right) \mathcal{P} + \\ &+ 2 \sum_{j=2}^L \left[\vec{S}_j \vec{S}_{j+1} - \frac{n_j n_{j+1}}{4} + \frac{1}{2} (n_j + n_{j+1}) \right] - HS^z - \mu N + \mathcal{H}_b. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Система в объеме является суперсимметричной t - J -моделью: оператор $\mathcal{P}$ устраняет путем проектирования двойную занятость узлов от $j = 2$ до $j = L + 1$, а $\vec{S}_j$ и n_j – операторы спина и числа электронов в узле j , соответственно. Внешнее магнитное поле H и химический потенциал μ управляют намагниченностью и концентрацией дырок $\delta = 1 - \sum_j n_j / L$ в системе.

Внутренний спектр примесей в узле 1 и его взаимодействие с объемом определяются граничным членом в (2.7) [14]:

$$\mathcal{H}_b = V_0 \left[\alpha n_2 + 2\vec{S}_1 \vec{S}_2 - \frac{n_1 n_2}{2} + n_1 + n_2 - \sum_{\sigma} (Q_{2,\sigma}^\dagger Q_{1,\sigma} + Q_{1,\sigma}^\dagger Q_{2,\sigma}) \right], \quad (2.8)$$

где $Q_{2,\sigma} = |0\rangle\langle\sigma|_2$ и $Q_{1,\sigma}$ были определены в (2.3). Управляемый общим множителем $V_0 \equiv 4/(4t^2 + (\alpha + 2)^2)$ гамильтониан $\mathcal{H}_b$ содержит дополнительный член с граничным химическим потенциалом в примесном узле и примыкающем объемном узле ($j = 2$), кулоновское и обменное взаимодействия между электронами в узле 1

и в узлах цепочки, а также гибридизующий член, учитывающий прыжки электронов между объемом и примесью. Поэтому выражение (2.8) описывает примесь андерсоновского типа, а параметр V_0 управляет гибридизацией между примесными и объемными орбиталями. В данном контексте, т.е. для открытой цепочки, параметр t можно выбрать или вещественным положительным, или чисто мнимым, что позволяет покрыть весь интервал $-\infty < V_0 < \infty$ для данного взаимодействия. Кроме того, для управления внутренним спектром неоднородности можно настраивать параметр представления α .

3. РЕШЕНИЕ НА ОСНОВЕ АНЗАЦА БЕТЕ

t - J -Модель с граничной примесью, определяемая уравнениями (2.7), (2.8), решается с помощью алгебраического анзаца Бете. Псевдовакуум $|\Omega\rangle \equiv |\uparrow\uparrow \dots \dots \uparrow\rangle_{\text{bulk}} \otimes |\uparrow\downarrow\rangle_{\text{imp}}$ с максимальным числом электронов и полной поляризацией в объеме представляет собой тривиальное собственное состояние гамильтониана. $gl(2 | 1)$ -Состояния старшего веса, являющиеся собственными для гамильтониана (2.7) с числом электронов $N_e = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$, можно параметризовать с помощью $M_s = L + 1 - N_{\uparrow}$ корней λ_j и $M_c = L + 2 - N_e$ корней ϑ_{γ} уравнений анзаца Бете (УАБ)

$$e_1^{2L}(\lambda_j)\Phi_s(\lambda_j) = \prod_{k \neq j}^{M_s} e_2(\lambda_j - \lambda_k)e_2(\lambda_j + \lambda_k) \times \prod_{\beta=1}^{M_c} e_{-1}(\lambda_j - \vartheta_{\beta})e_{-1}(\lambda_j + \vartheta_{\beta}), \quad j = 1, \dots, M_s, \quad (3.1)$$

$$\Phi_c(\vartheta_{\gamma}) = \prod_{k=1}^{M_s} e_{-1}(\vartheta_{\gamma} - \lambda_k)e_{-1}(\vartheta_{\gamma} + \lambda_k), \quad \gamma = 1, \dots, M_c,$$

где

$$\Phi_s(\lambda) \equiv 1, \quad \Phi_c(\vartheta) = e_{\alpha}(\vartheta + t)e_{\alpha}(\vartheta - t). \quad (3.2)$$

Спиновые (зарядовые) быстроты λ_j (ϑ_{γ}) описывают перевернутые спины (дырки), добавленные к $|\Omega\rangle$, а Φ_c и Φ_s , зависящие от параметров α и t , представляют собой фазовые сдвиги, обусловленные присутствием примеси в системе. Тогда соответствующая энергия состояния Бете задается выражением

$$E = V_0(\alpha + 2) + 2(L - 1) - \sum_{j=1}^{M_s} \frac{1}{\lambda_j^2 + 1/4} + \left(\mu - \frac{H}{2}\right)M_c + HM_s - \mu(L + 2) - \frac{H}{2}L. \quad (3.3)$$

Для анализа вклада примеси, внедренной в коррелированную систему, необходимо отождествить¹⁾ корневые конфигурации, решающие УАБ (3.1), которые соответствуют основному состоянию, и некоторые низколежащие возбужденные состояния системы. Из решения t - J -модели с периодическими и отражающими открытыми

¹⁾Мы ограничимся случаем $T = 0$, чтобы избежать сложностей, возникающих при рассмотрении открытых границ при конечных температурах [15].

границами, но без примеси, известно, что основное состояние описывается вещественными спиновыми и зарядовыми быстрыми [13], [16]. Это остается верным и для настоящего случая примесей, описываемых вещественным t . Как обсуждалось в предыдущем разделе, комбинация примеси и открытых граничных условий позволяет выбрать чисто мнимое $t = i\tau \in i\mathbb{R}^+$ и, следовательно, расширить область, охватываемую гибридизацией V_0 . В УАБ (3.1) это сводится к выбору

$$\Phi_c(\vartheta) = e_{\alpha+2\tau}(\vartheta_\gamma) e_{\alpha-2\tau}(\vartheta_\gamma). \quad (3.4)$$

В гамильтониане (2.8) выбор мнимого t соответствует режиму сильной или отрицательной гибридизации V_0 . Поэтому следует ожидать, что для дырки будет энергетически выгодно оказаться связанной с примесью. Для УАБ с фазовым сдвигом (3.4) механизм образования связанного состояния аналогичен механизму, обсуждавшемуся для t - J -модели в присутствии граничных полей [17]: настройка τ через пороги $\tau_k = (\alpha + k)/2$, $k = 0, 1, 2$, порождает последовательность примесных связанных состояний, которые соответствуют изолированным мнимым корням ($\vartheta_{\gamma_0} = i(\tau - \tau_0)$, $\lambda_{j_0} = i(\tau - \tau_1)$ и $\vartheta_{\gamma_1} = i(\tau - \tau_2)$ с экспоненциальной точностью в системе размера L) в конфигурации состояний Бете.

Явно учитывая эти мнимые корни и переформулируя уравнения, мы в конце концов приходим к трем различным наборам УАБ в зависимости от заселенности связанных состояний.

Корневая конфигурация (I), $\tau > \tau_0$: $\tilde{\vartheta}_0 = i(\tau - \tau_0)$,

$$\begin{aligned} \Phi_s(\lambda) &= e_{2\tau+1-\alpha}(\lambda) e_{1+\alpha-2\tau}(\lambda), \\ \Phi_c(\vartheta) &= e_{\alpha+2\tau}(\vartheta) e_{\alpha-2\tau}(\vartheta). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Мнимый корень $\tilde{\vartheta}_0$ определяет примесные фазовые сдвиги Φ_c , Φ_s . Поэтому в произведении по двухчастичным фазам рассеяния в правых частях (3.1) входят только вещественные быстрые, т.е. λ_j , $j = 1, \dots, M_s$ и ϑ_γ , $\gamma = 1, \dots, M_c - 1$.

Корневая конфигурация (II), $\tau > \tau_1$: $\tilde{\vartheta}_0$ и $\tilde{\lambda}_0 = i(\tau - \tau_1)$,

$$\begin{aligned} \Phi_s(\lambda) &= e_{2\tau-\alpha-3}(\lambda) e_{1+\alpha-2\tau}(\lambda), \\ \Phi_c(\vartheta) &= e_{\alpha+2\tau}(\vartheta) e_{2+\alpha-2\tau}(\vartheta). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Кроме $\tilde{\vartheta}_0$, определенной ранее, решением УАБ является также мнимая спиновая быстрая $\tilde{\lambda}_0 = i(\tau - \tau_1)$. Вещественные быстрые теперь параметризуются с помощью λ_j , $j = 1, \dots, M_s - 1$, и ϑ_γ , $\gamma = 1, \dots, M_c - 1$. В уравнении (3.3) $\tilde{\lambda}_0 = i(\tau - \tau_1)$ дает вклад в энергию, равный $E_{M_s} = [(\tau - \alpha/2)(1 - \tau + \alpha/2)]^{-1}$, что должно интерпретироваться как энергия связанного состояния спинов.

Корневая конфигурация (III), $\tau > \tau_2$: $\tilde{\vartheta}_0$, $\tilde{\lambda}_0$ и $\tilde{\vartheta}_1 = i(\tau - \tau_2)$,

$$\begin{aligned} \Phi_s(\lambda) &\equiv 1, \\ \Phi_c(\vartheta) &= e_{\alpha+2\tau}(\vartheta) e_{2+\alpha-2\tau}(\vartheta). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Корневая конфигурация (III) характеризуется возникновением третьего мнимого решения УАБ в зарядовом секторе, $\tilde{\vartheta}_1 = i(\tau - \tau_2)$. Вещественные быстрые, таким образом, занумерованы с помощью λ_j , $j = 1, \dots, M_s - 1$, и ϑ_γ , $\gamma = 1, \dots, M_c - 2$.

ЗАМЕЧАНИЕ. Возрастание τ выше значения $\alpha/2 + 1$ не ведет к возникновению дополнительных связанных состояний, как этого следует ожидать для примеси с одиночной орбиталью, допускающей заполнение максимум двумя зарядами.

В термодинамическом пределе вещественные корни $\{\lambda_j\}$ ($\{\vartheta_\gamma\}$) образуют непрерывные распределения, которые удобно описывать в терминах их плотностей $\rho_s(\lambda)$ ($\rho_c(\vartheta)$):

$$\begin{pmatrix} \rho_s(\lambda) \\ \rho_c(\vartheta) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2a_1(\lambda) \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{L} \begin{pmatrix} \hat{\rho}_s^{(R)}(\lambda) + \hat{\rho}_s^{(b)}(\lambda) \\ \hat{\rho}_c^{(R)}(\vartheta) + \hat{\rho}_c^{(b)}(\vartheta) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\int_{-A}^A a_2 & \int_{-B}^B a_1 \\ \int_{-A}^A a_1 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} \rho_s(\lambda) \\ \rho_c(\vartheta) \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Здесь мы ввели

$$a_y(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{y}{y^2/4 + x^2},$$

а $\int_{-k}^k f * g$ обозначает свертку $\int_{-k}^k dy f(x-y)g(y)$. Вынуждающие члены ядерного уравнения (3.8) соответствуют объемному (порядка L^0) и примесным или граничным (порядка L^{-1}) вкладам в плотности. В наших обозначениях вынуждающие члены примесей имеют индекс (R) , указывающий на рассматриваемый сектор спектра связанных состояний. Границы A и B для спинowego и зарядового секторов фиксированы соответствующими условиями

$$\int_{-A}^A d\lambda \rho_s(\lambda) = \frac{2[M_s - \theta(\tau - \tau_1)] + 1}{L}, \quad (3.9)$$

$$\int_{-B}^B d\vartheta \rho_c(\vartheta) = \frac{2[M_c - \theta(\tau - \tau_0) - \theta(\tau - \tau_2)] + 1}{L}, \quad (3.10)$$

где $\theta(x)$ – ступенчатая функция Хевисайда, а τ_k – пороги появления связанных состояний, определенные выше. Альтернативным образом основное состояние при заданном химическом потенциале μ и магнитном поле H получается путем заполнения всех мод с отрицательными одетыми энергиями $\varepsilon_s(\lambda)$ и $\varepsilon_c(\vartheta)$, являющимися решениями интегральных уравнений

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_s(\lambda) \\ \varepsilon_c(\vartheta) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2\pi a_1(\lambda) + H \\ \mu - \frac{H}{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\int_{-A}^A a_2 & \int_{-B}^B a_1 \\ \int_{-A}^A a_1 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} \varepsilon_s(\lambda) \\ \varepsilon_c(\vartheta) \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

где A и B выбираются такими, что $\varepsilon_s(\pm A) = 0$ и $\varepsilon_c(\pm B) = 0$.

Поскольку (3.8) представляет собой линейную систему интегральных уравнений, решение общего вида как для спиновой, так и для зарядовой плотностей можно записать как

$$\rho = \rho_\infty + \frac{1}{L}(\rho_{\text{imp}} + \rho_b). \quad (3.12)$$

Первый член в (3.12) есть объемная плотность, полученная путем решения уравнения (3.8) при $L = \infty$. Два других члена порядка $1/L$ представляют собой вклады, один из которых обусловлен примесным узлом, а другой – открытостью цепочки (границами). Мнимые корни, которые рассматриваются отдельно от континуума

вещественных решений, порождают различные вынуждающие члены для обусловленных примесью $1/L$ -поправок. Из уравнений (3.4)–(3.7) получаем

$$\hat{\rho}_s^{(R)}(\lambda) = \begin{cases} 0, & t \in \mathbb{R}, \quad R = 0, \\ a_{2\tau+1-\alpha}(\lambda) + a_{1+\alpha-2\tau}(\lambda), & R = \text{I}, \\ -a_{3+\alpha-2\tau}(\lambda) - a_{2\tau-\alpha-1}(\lambda), & R = \text{II}, \\ 0, & R = \text{III} \end{cases} \quad (3.13)$$

для спинного сектора и

$$\hat{\rho}_c^{(R)}(\vartheta) = \begin{cases} a_\alpha(\vartheta + t) + a_\alpha(\vartheta - t), & t \in \mathbb{R}, \\ a_{\alpha+2\tau}(\vartheta) + a_{\alpha-2\tau}(\vartheta), & R = 0, \text{I}, \\ a_{\alpha+2\tau}(\vartheta) + a_{2+\alpha-2\tau}(\vartheta), & R = \text{II}, \text{III} \end{cases} \quad (3.14)$$

для зарядового сектора. Обозначение R используется для обсуждавшихся выше корневых конфигураций, причем $R = 0$ является конфигурацией без решений для связанных состояний, обусловленных фазовыми сдвигами (3.4). $1/L$ -Вклады, обусловленные границами, следует вычислять с учетом вынуждающих членов $\hat{\rho}_s^{(b)}(\lambda) = a_2(\lambda)$ и $\hat{\rho}_c^{(b)}(\vartheta) = -a_1(\vartheta)$. Заметим, что любую термодинамическую величину также можно разбить на части, соответствующие объему, примеси и границам. Например, энергия основного состояния, приходящаяся на один узел, имеет вид

$$E_0 = L\epsilon_\infty + (\epsilon_{\text{imp}} + \epsilon_b) + \dots \quad (3.15)$$

Ниже мы сосредоточимся на примесных вкладах в эти величины, определяемых плотностями $\rho_s^{(R)}$, $\rho_c^{(R)}$. Влияние границ, имеющих чисто геометрическую природу и поэтому не зависящих от примесных параметров, было исследовано Эсслером в работе [13].

4. ХАРАКТЕРИСТИКА ПРИМЕСИ

До сих пор были отождествлены четыре области пространства параметров α – τ примеси, допускающие различные возможные конфигурации связанных состояний. Каждая из этих конфигураций описывается различной системой УАБ. Зависимость свойств системы от заселенности связанных состояний можно получить из примесного вклада (порядка L^0) в энергию низшего состояния, получающегося внутри этих областей. Формально этот вклад, выраженный в терминах плотностей, имеет вид

$$\begin{aligned} \epsilon_{\text{imp}} = & V_0(\alpha + 2) - 2 - \pi \int_{-A}^A d\lambda \rho_s^{(R)}(\lambda) a_1(\lambda) + \left(\mu - \frac{H}{2} \right) \left(\frac{1}{2} \int_{-B}^B d\vartheta \rho_c^{(R)}(\vartheta) + \right. \\ & \left. + \theta(\tau - \tau_0) + \theta(\tau - \tau_2) \right) + H \left(\frac{1}{2} \int_{-A}^A d\lambda \rho_s^{(R)}(\lambda) + \theta(\tau - \tau_1) \right) - 2\mu. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Заметим, что для отождествления истинного основного состояния системы при заданных примесных параметрах α и t (соответственно τ) эти выражения следует сравнить для различных разрешенных конфигураций связанных состояний. Можно

показать, что при положительной гибридизации V_0 максимальное число разрешенных связанных состояний (в конфигурациях (0), (I), (II)) следует рассматривать для основного состояния [18]. Однако при отрицательной гибридизации V_0 , $\tau > \tau_2 = \alpha/2 + 1$, основное состояние описывается только вещественными быстройми, т.е. УАБ (3.1) с примесными фазовыми сдвигами (3.4).

4.1. Примесная восприимчивость в случае нулевого поля. Для нашей параметризации корней УАБ примесный вклад в намагниченность имеет вид

$$-\frac{\partial \epsilon_{\text{imp}}}{\partial H} \equiv M_{\text{imp}} = \frac{1}{4} \int_{-B}^B d\vartheta \rho_c^{(R)}(\vartheta) + \frac{1}{2} (\theta(\tau - \tau_0) + \theta(\tau - \tau_2)) - \frac{1}{2} \int_{-A}^A d\lambda \rho_s^{(R)}(\lambda) - \theta(\tau - \tau_1). \quad (4.2)$$

В режиме слабого поля ($A \gg 1$, $A \gg B$) это выражение можно переписать в виде интеграла только по спиновой плотности:

$$M_{\text{imp}} = \frac{1}{2} \int_A^\infty d\lambda \rho_s^{(R)}(\lambda) - \theta(\tau - \tau_1) + \frac{1}{2} (\theta(\tau - \tau_0) + \theta(\tau - \tau_2)), \quad (4.3)$$

который можно вычислить с помощью анализа Винера–Хопфа интегральных уравнений (3.8). Тогда в случае нулевого поля результирующее выражение для примесной восприимчивости будет иметь вид

$$\chi_{\text{imp}}(H = 0) = \frac{1}{2\pi(2\pi - C)} \begin{cases} C_{\alpha,\tau}^{(0)}, & R = 0, \\ C_{\alpha,\tau}^{(I)} + 2 \cos \pi(\tau - \tau_0), & R = I, \\ C_{\alpha,\tau}^{(II)} + 2 \cos \pi(\tau - \tau_0), & R = II, \\ C_{\alpha,\tau}^{(III)}, & R = III, \end{cases} \quad (4.4)$$

где мы определили $C_{\alpha,\tau}^{(R)} \equiv \int_{-B}^B d\vartheta e^{\pi\vartheta} \rho_c^{(R)}(\vartheta)$ и $C = \int_{-B}^B d\vartheta e^{\pi\vartheta} \epsilon_c(\vartheta)$, а ϵ_c – решение уравнения (3.11). На рис. 1 представлены некоторые результаты численных расчетов примесной восприимчивости в случае нулевого поля как функции V_0 для двух различных концентраций дырок ($\delta = 20\%$ и 80%) и различных значений α (здесь мы рассматриваем конфигурацию, в которой все возможные связанные состояния заселены), а также вклад примеси в электронную плотность, который определяется выражением

$$-\frac{\partial \epsilon_{\text{imp}}}{\partial \mu} \equiv D_{\text{imp}} = 2 - \frac{1}{2} \int_{-B}^B d\vartheta \rho_c^{(R)}(\vartheta) - \theta(\tau - \tau_0) - \theta(\tau - \tau_2). \quad (4.5)$$

Заметим прежде всего, что при $\alpha = 0$ и $0 < V_0 < 1$ примесь является дважды заполненной, $D_{\text{imp}} \equiv 2$. Поэтому она не дает вклада в магнитную восприимчивость системы, т.е. $\chi_{\text{imp}} = 0$. При $V_0 > 1$ (конфигурации (I) и (II)) и $V_0 < 0$ (конфигурация (III)) заполнение меньше 2 из-за заполненного связанного состояния холона, и имеется небольшой конечный примесный вклад в восприимчивость. Резонанс восприимчивости в случае нулевого поля представляет собой отклик неспаренного электрона в примесном узле, появляющийся при $D_{\text{imp}} \approx 1$. Резонансная

Рис. 1. Примесная восприимчивость χ_{imp} и вклад примеси в электронную плотность D_{imp} в нулевом магнитном поле для концентраций дырок 20% ((а), (б)) и 80% ((в), (г)) и различных значений параметра α ($\alpha = 0.0$ – сплошные линии, $\alpha = 0.1$ – штриховые линии, $\alpha = 1.0$ – штрихпунктирные линии, $\alpha = 10.0$ – пунктир).

Рис. 1. (продолжение).

восприимчивость, хотя и ограниченная пока флуктуациями заполнения примесей, быстро увеличивается с ростом δ : в то время как при $\delta \rightarrow 0$ максимальное значение $\chi_{\text{imp}}(H = 0)$ приближается к значению объемной восприимчивости, при $\delta \rightarrow 1$, т.е. при обращающейся в нуль объемной плотности электронов, оно расходится. В этом пределе электрон, остающийся в примесном узле, в основном представляет собой неспаренный локальный момент.

4.2. Намагниченность примеси в случае конечного магнитного поля.

Магнитный отклик системы на наличие примеси становится нетривиальным в режиме слабой гибридизации, который соответствует вещественным значениям t . При $V_0 \ll 1$ масштаб Кондо можно определить как функцию параметра t :

$$H_K \sim H_0 e^{-\pi t}, \quad (4.6)$$

где $H_0 = \sqrt{2\pi}/e(2\pi - C)$. Как было показано в предыдущем пункте, в пределе нулевого поля восприимчивость стремится к некоторому значению (4.4), которое зависит от параметров α и t . Поэтому можно ожидать, что главный член, описывающий поведение примесной намагниченности, в случае слабого поля будет линейным по H . Более тщательный анализ Винера–Хопфа уравнения (4.3) позволяет отождествить в зависимости от поля следующий за главным член, который имеет вид логарифмических поправок к главному линейному члену. Эти поправки указывают на наличие логарифмической сингулярности в примесном вкладе в восприимчивость в случае нулевого поля (см. вставку на рис. 2а):

$$\chi_{\text{imp}}(H \rightarrow 0) = \chi_{\text{imp}}(0) \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\ln H/H_0} - \frac{1}{(\ln H/H_0)^2} \right) \right]. \quad (4.7)$$

Эта особенность хорошо известна из исследований магнитного отклика в изотропных одномерных антиферромагнетиках (см., например, работу [19]).

Вследствие конечной ширины зоны решеточной системы намагниченность примеси насыщается при $H = H^{\text{sat}} \equiv 4 \cos^2(\pi\delta/2)$, когда система в объеме становится полностью поляризованной. При достаточно больших t , т.е. при $H_K \ll H^{\text{sat}}$, физика Кондо может наблюдаться как магнитный отклик примеси. На рис. 2б ясно видно изменение зависимости примесной намагниченности от внешнего поля H – от линейной в слабом поле $H < H_K$ до нелинейной в сильном поле.

При приближении величины H к значению, соответствующему насыщению, можно получить аналитические выражения для примесных намагниченности и восприимчивости. В интегральных УАБ такой режим соответствует $B \gg A$ при $B \rightarrow \infty$ в случае $H \rightarrow H^{\text{sat}}$:

$$M_{\text{imp}} = M_{\text{imp}}^{\text{sat}} - \frac{1}{2} \left(\int_{-\infty}^{-B} + \int_B^{\infty} \right) d\vartheta \left[1 + \frac{2}{\pi} \arctg(2\vartheta - 2A) \right] \rho_c^{\text{imp}}(\vartheta). \quad (4.8)$$

Разлагая арктангенс при больших значениях аргументов $\vartheta \gg 1$, получаем асимптотическое поведение намагниченности в виде

$$M_{\text{imp}} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi} \left(\arctg \frac{2(A_s - t)}{\alpha + 1} + \arctg \frac{2(A_s + t)}{\alpha + 1} \right) \left(1 + \frac{1}{\pi B_s} \right) - \frac{\alpha}{2\pi B_s}, \quad (4.9)$$

Рис. 2. Восприимчивость (а) и намагниченность (б) примеси как функции внешнего поля при $t = 1$ (сплошные линии), $t = 2$ (штриховые линии) и $t = 3$ (штрихпунктир) и фиксированных $\alpha = 1$ и $\delta = 0.8$. Пунктирные кривые соответствуют поведению вблизи насыщения (4.9). На вставке на рис. 2а показана логарифмическая особенность (уравнение (4.7)) для χ_{imp} при нулевом поле.

где A_s и B_s – границы, близкие к насыщению. Их асимптотическое поведение вблизи $H = H^{\text{sat}}$ определяется уравнением

$$A_s \approx \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4}{H} - 1}, \quad \delta = \left(1 - \frac{1}{\pi B_s}\right) \frac{2}{\pi} \arctg 2A_s. \quad (4.10)$$

Используя эту связь границ с магнитным полем и допированием δ , получаем, что главный член в зависимости намагниченности от поля при значениях H ниже H^{sat} является линейным, $\propto H^{\text{sat}} - H$. На рис. 2 пунктирные кривые соответствуют выражению (4.9) для намагниченности и полученному выражению для примесной восприимчивости.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, мы построили одномерную решеточную модель для коррелированных электронов с внедренными примесями андерсоновского типа. Для тонкой настройки свойств примеси можно регулировать значения нескольких параметров. При изменении гибридизации наблюдается образование последовательности связанных состояний аналогично ситуации, наблюдающейся в системах с открытыми граничными условиями со статическими граничными потенциалами. С помощью анзаца Бете получен спектр модели, в котором легко отождествляются объемные, граничные и примесные вклады. При слабой гибридизации примесная восприимчивость демонстрирует сильный резонанс типа резонанса Кондо в случае низких электронных плотностей в системе, в которую внедрена примесь. Заметим, что мы рассмотрели только вклад примеси в отклики системы порядка $1/L$. Хорошо известно, что наличие границ приводит к появлению дополнительных членов в этом порядке, расходящихся как $1/\chi_{\text{ОВС}} \propto H(\ln H)^2$ при $H \rightarrow 0$ [13].

Интересное расширение модели, исследованной в настоящей работе, получено путем комбинации примеси с граничным потенциалом [14]. Дополнительные граничные фазовые сдвиги приводят к другой последовательности связанных состояний, которые интерферируют с примесными. Синхронизация примеси с граничным полем позволяет по отдельности изучать различные секторы примесного внутреннего гильбертова пространства [20]. В частности, можно реализовать точное отображение, аналогичное преобразованию Шриффера–Вольфа из модели Андерсона в модель Кондо. Вопрос о том, как различные конфигурации связанных состояний соответствуют этим секторам, составляет предмет проводимых в настоящее время исследований.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Deutsche Forschungsgemeinschaft.

Список литературы

- [1] A. M. Tsvelick, P. B. Wiegmann, *Adv. Phys.*, **32** (1983), 453; N. Andrei, K. Furuya, J. H. Lowenstein, *Rev. Mod. Phys.*, **55** (1983), 331; I. Affleck, A. W. W. Ludwig, *Nucl. Phys. B*, **352** (1991), 849; A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, A. M. Tsvelik, *Bosonization and strongly correlated systems*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1998.

- [2] J. Li, W.-D. Schneider, R. Berndt, B. Delley, *Phys. Rev. Lett.*, **80** (1998), 2893; V. Madhavan, W. Chen, T. Jamneala, M.F. Crommie, N.S. Wingreen, *Science*, **280** (1998), 567; D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Ambusch-Magder, U. Meirav, M.A. Kastner, *Nature*, **391** (1998), 156.
- [3] V.E. Korepin, N.M. Bogoliubov, A.G. Izergin, *Quantum inverse scattering method and correlation functions*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1993.
- [4] N. Andrei, H. Johannesson, *Phys. Lett. A*, **100** (1984), 108.
- [5] G. Bedürftig, F. H.L. Eßler, H. Frahm, *Phys. Rev. Lett.*, **77** (1996), 5098; *Nucl. Phys. B*, **489** (1997), 697.
- [6] P. Schlottmann, A.A. Zvyagin, *Phys. Rev. B*, **55** (1997), 5027; A. Foerster, J. Links, A.P. Tonel, *Nucl. Phys. B*, **552** (1999), 707.
- [7] M. Scheunert, W. Nahm, V. Rittenberg, *J. Math. Phys.*, **18** (1977), 155; M. Marcu, *J. Math. Phys.*, **21** (1980), 1277.
- [8] C.L. Kane, M.P.A. Fisher, *Phys. Rev. Lett.*, **68** (1992), 1220.
- [9] D.-H. Lee, J. Toner, *Phys. Rev. Lett.*, **69** (1992), 3378; A. Furusaki, N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.*, **72** (1994), 892; P. Fröjdh, H. Johannesson, *Phys. Rev. Lett.*, **75** (1995), 300; R. Egger, A. Komnik, *Phys. Rev. B*, **57** (1998), 10620.
- [10] И.В. Чередник, *ТМФ*, **61** (1984), 35.
- [11] E.K. Sklyanin, *J. Phys. A*, **21** (1988), 2375.
- [12] A. González-Ruiz, *Nucl. Phys. B*, **424** (1994), 468.
- [13] F.H.L. Eßler, *J. Phys. A*, **29** (1996), 6183.
- [14] G. Bedürftig, H. Frahm, *J. Phys. A*, **32** (1999), 4585.
- [15] F. Göhmann, M. Bortz, H. Frahm, *J. Phys. A*, **38** (2005), 10879.
- [16] P. Schlottmann, *Phys. Rev. B*, **36** (1987), 5177.
- [17] F.H.L. Eßler, H. Frahm, *Phys. Rev. B*, **56** (1997), 6631.
- [18] H. Frahm, G. Palacios, *Phys. Rev. B*, **73** (2006), 214419.
- [19] S. Eggert, I. Affleck, M. Takahashi, *Phys. Rev. Lett.*, **73** (1994), 332.
- [20] H. Frahm, N.A. Slavnov, *J. Phys. A*, **32** (1999), 1547.