

Лекция 11
Задача Кондо: решение уравнений Бете

В прошлой лекции были получены уравнения Бете для sd -модели:

$$e^{ip_a L} = e^{iJS} \prod_{i=1}^n \frac{v_i + i/2}{v_i - i/2}, \quad (1)$$

$$\left(\frac{v_i + i/2}{v_i - i/2} \right)^N \frac{v_i + iS + 1/g}{v_i - iS + 1/g} = - \prod_{j=1}^n \frac{v_i - v_j + i}{v_i - v_j - i}, \quad (2)$$

$$a = 1, \dots, N, \quad i, j = 1, \dots, n,$$

причем

$$g = \frac{1}{S + 1/2} \operatorname{tg} J(S + 1/2). \quad (3)$$

Энергия системы равна¹

$$E = \sum_{a=1}^N p_a. \quad (4)$$

Теперь мы будем исследовать эти уравнения в термодинамическом пределе $L \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$.

Прологорилируем уравнения Бете:

$$p_a L = 2\pi I_a + JS - \sum_{i=1}^n (\pi + p(v_i)), \quad (5)$$

$$Np(v_i) + \delta_S(v_i) = 2\pi J_i + \sum_{j=1}^n \Phi(v_i - v_j), \quad (6)$$

$$p(v) = 2 \operatorname{arctg} 2v, \quad \delta_S(v) = p((v + 1/g)/2S), \quad \Phi(v) = p(v/2), \quad (7)$$

$$I_a \in \mathbb{Z}, \quad J_i \in \begin{cases} \mathbb{Z}, & N - n \in 2\mathbb{Z}, \\ \mathbb{Z} + 1/2, & N - n \in 2\mathbb{Z} + 1. \end{cases} \quad (8)$$

При этом все числа J_i должны быть попарно различны и все числа I_a тоже.

Полная энергия системы (4) разбивается на два вклада:

$$E = E_{\text{ch}} + E_{\text{sp}}, \quad (9)$$

$$E_{\text{ch}} = \frac{2\pi}{L} \sum_{a=1}^N I_a - \frac{\pi N^2}{2L}, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} E_{\text{sp}} &= \frac{\pi N^2}{2L} + \frac{NJS}{L} - \frac{N}{L} \sum_{i=1}^n (\pi + p(v_i)) \\ &= -\frac{2\pi}{L} \sum_{i=1}^n J_i + \frac{\pi}{L} N \left(\frac{N}{2} - n \right) + \frac{NJS}{L} + \frac{1}{L} \sum_{i=1}^n \delta_S(v_i), \end{aligned} \quad (11)$$

Слагаемое $-\pi N^2/2L$ добавлено к зарядовой энергии, чтобы при $J = 0$, $n = N/2$ отношение $E_{\text{sp}}/E_{\text{ch}}$ обращалось в ноль в термодинамическом пределе.

Найдем сначала основное состояние. Чтобы процедура минимизации энергии была корректно определена, следует ввести обрезание $-\epsilon_F$ по для отрицательных импульсов. Именно, следует потребовать, чтобы в N -частичном основном состоянии все уровни отрицательного импульса (энергии) в интервале $[-\epsilon_F, 0]$ были бы заполнены. Поскольку плотность состояний по p_a равна $2\frac{L}{2\pi}$, имеем

$$N = \frac{L\epsilon_F}{\pi}. \quad (12)$$

¹Мы приняли $v_F = 1$. Чтобы восстановить физические определения переменных, следует всюду сделать замену $E \rightarrow E/v_F$, $J \rightarrow J/v_F$.

Поэтому термодинамический предел определяется как

$$L \rightarrow \infty, \quad N \rightarrow \infty, \quad \frac{N}{L} = \frac{\epsilon_F}{\pi} = \text{const},$$

Уровень Ферми ϵ_F следует рассматривать как параметр модели.

Числа I_a должны удовлетворять условию

$$I_a \gtrsim -\frac{\epsilon_F}{2\pi L} = -\frac{N}{2}.$$

В основном состоянии I_a пробегает значения примерно от $-N/2$ до $N/2$ и, следовательно, $\sum_a I_a \ll N^2$. Поэтому в термодинамическом пределе зарядовая энергия равна

$$E_{\text{ch}} = -\frac{\pi N^2}{2L} = -L \frac{\epsilon_F^2}{2\pi}. \quad (13)$$

Найдем допустимую область для чисел J_i . При $v_i \rightarrow +\infty$ из (6) имеем $J_i \rightarrow (N+2-n)/2$, а при $v_i \rightarrow -\infty$ имеем $J_i \rightarrow -(N+2-n)/2$. Поэтому

$$-\frac{N+1-n}{2} \leq J_i \leq \frac{N+1-n}{2}. \quad (14)$$

Чтобы найти минимум по спиновым состояниям электронов, предположим, что J достаточно мало, так что двумя последними членами в (11) можно пренебречь. Первый член в E_{sp} падает с ростом J_i , поэтому можно предположить, что основному состоянию соответствуют полное заполнение достаточно больших J_i . Следовательно, имеется некоторое значение J_{min} , такое что в основном состоянии корням отвечают все

$$J_{\text{min}} \leq J_i \leq \frac{N-n}{2}. \quad (15)$$

В переменных v_i это соответствует интервалу

$$-b \leq v < +\infty \quad (16)$$

Полагая $J_i = i$ в (6) и дифференцируя по v_i , получим

$$\rho(v) = a_1(v) + \frac{1}{N} a_{2S}(v+1/g) - \int_{-b}^{\infty} dv' a_2(v-v') \rho(v'), \quad -b \leq v < \infty, \quad (17)$$

где $\rho(v) = \frac{1}{N} \frac{dI}{dv}$, а

$$a_t(v) = \frac{2}{\pi} \frac{t}{4v^2 + t^2}. \quad (18)$$

При этом

$$n = N \int_{-b}^{\infty} dv \rho(v). \quad (19)$$

Это значит, что суммарный спин равен

$$S^z = \frac{N}{2} + S - N \int_{-b}^{\infty} dv \rho(v). \quad (20)$$

Спиновая энергия равна

$$E_{\text{sp}} = \frac{N\epsilon_F}{2} - \frac{N\epsilon_F}{\pi} \int_{-b}^{\infty} dv \rho(v) (\pi + p(v)). \quad (21)$$

Разложим плотность по степеням $1/N$ до первого порядка

$$\rho(v) = \rho_0(v) + \frac{\rho_1(v)}{N}. \quad (22)$$

Уравнение для ρ_0

$$\rho_0(v) = a_1(v) - \int_{-b}^{\infty} dv' a_2(v-v')\rho_0(v'), \quad -b \leq v < \infty, \quad (23)$$

совпадает с интегральным уравнением для ХХХ-модели. Вычитая (23) из (17), получим

$$\rho_1(v) = a_2S(v+1/g) - \int_{-b}^{\infty} a_2(v-v')\rho_1(v'), \quad -b \leq v < \infty. \quad (24)$$

Намагниченность распадается на электронную и примесную части:

$$S^z = NM_{\text{el}} + M_{\text{im}}, \quad M_{\text{el}} = \frac{1}{2} - \int_{-b}^{\infty} dv \rho_0(v), \quad M_{\text{im}} = S - \int_{-b}^{\infty} dv \rho_1(v). \quad (25)$$

Спиновая энергия распадается на две части

$$E_{\text{sp}} = E_{\text{sp}}^{\text{el}} + E_{\text{im}}, \quad (26)$$

$$E_{\text{sp}}^{\text{el}} = \epsilon_F \left(\frac{N}{2} - n \right) - 2\epsilon_F \int_{-b}^{\infty} dv J_0(v)\rho_0(v), \quad (27)$$

$$E_{\text{im}} = -\frac{\epsilon_F}{\pi} \int_{-b}^{\infty} dv \rho_1(v)(\pi + p(v)). \quad (28)$$

Электронную часть энергии нетрудно вычислить. Действительно,

$$\int_{-b}^{\infty} dv J(v)\rho(v) = \frac{1}{N} \int_{-b}^{\infty} dv J(v) \frac{dJ(v)}{dv} = \frac{1}{N} \int_{J_{\text{min}}}^{(N-n)/2} dJ J = \frac{1}{2N} \left(\frac{N-n}{2} \right)^2 - \frac{J_{\text{min}}^2}{2N}.$$

Кроме того,

$$\frac{N-n}{2} - J_{\text{min}} = N \int_{-b}^{\infty} dv \rho(v) = n.$$

Отсюда

$$J_{\text{min}} = \frac{N-3n}{2} \quad (29)$$

и

$$\int_{-b}^{\infty} dv J(v)\rho(v) = \frac{n}{2} - \frac{n^2}{N}. \quad (30)$$

Окончательно, находим в лидирующем по $1/N$ порядке

$$E_{\text{sp}}^{\text{el}} = N\epsilon_F M_{\text{el}}^2 = N\epsilon_F \frac{(S^z)^2}{N^2}. \quad (31)$$

Отсюда легко получить связь между S^z и магнитным полем H . Действительно, минимизацией функции $E_{\text{sp}}^{\text{el}}(H) = E_{\text{sp}}^{\text{el}} - HS^z$ по S^z находим

$$H = \frac{2\epsilon_F}{N} S^z. \quad (32)$$

Это просто вклад s -электронов в парамагнетизм Паули. Эта формула точна в нулевом порядке по $1/N$ и ее можно использовать в дальнейшем для вычисления связи между H и b . Чтобы получить (32) нам не потребовалось решать явно уравнения Бете (23). Однако решать их непременно придется, если мы захотим установить связь между b и n .

Начнем со случая $b = \infty$. Интегральные уравнения (23) и (24) в этом случае можно решить методом Фурье. Легко проверить, что

$$\tilde{a}_t(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dv a_t(v) e^{ikv} = e^{-t|k|/2}. \quad (33)$$

Отсюда имеем

$$\tilde{\rho}_0(k) = e^{-|k|/2} - e^{-|k|}\tilde{\rho}_0(k), \quad \tilde{\rho}_1(k) = e^{-S|k|-ik/g} - e^{-|k|}\tilde{\rho}_1(k).$$

Следовательно,

$$\tilde{\rho}_0(k) = \frac{1}{2 \operatorname{ch} \frac{k}{2}}, \quad \tilde{\rho}_1(k) = \frac{e^{-(S-1/2)k-ik/g}}{2 \operatorname{ch} \frac{k}{2}}. \quad (34)$$

Особый интерес представляет точка $k = 0$:

$$\tilde{\rho}_0(0) = \int dv \rho_0(v) = \frac{1}{2}, \quad \tilde{\rho}_1(0) = \int dv \rho_1(v) = \frac{1}{2}. \quad (35)$$

Отсюда получаем

$$M_{\text{el}} = 0, \quad (36a)$$

$$M_{\text{im}} = S - 1/2. \quad (36b)$$

Первая формула (36a) означает, что случай $b = -\infty$ соответствует случаю нулевого электронного магнитного момента, т. е. нулевого внешнего магнитного поля. Более точно, это соответствует пределу $H \rightarrow 0^+$, поскольку конечным b соответствует положительное магнитное поле. Формула (36b) означает, что в слабом магнитном поле цепочка приобретает момент $S^z = S - 1/2$, то есть спин цепочки равен $S - 1/2$. Это значит, что спин примеси частично экранируется электронами и *основное состояние $2S$ -кратно вырождено*.

Рассмотрим теперь случай

$$1 \ll b < \infty. \quad (37)$$

Условие $b \gg 1$ соответствует физически осмысленному режиму не слишком сильного магнитного поля $H \ll \epsilon_F$. Интегральные уравнения с одним конечным пределом решаются методом Винера–Хопфа. Изложим вкратце этот метод.

Пусть имеется уравнение

$$f(x) + \int_0^\infty dx' K(x-x')f(x') = g(x), \quad x > 0. \quad (38)$$

Можно произвольно продолжить данную функцию $g(x)$ в область отрицательных x и распространить уравнение на всю ось. При этом значения $f(x)$ при $x < 0$ несущественны, а решение $f(x)$ при $x > 0$ не зависит от этого продолжения.

Сделаем преобразование Фурье:

$$\tilde{f}_+(k) = \int_0^\infty dx e^{ikx} f(x), \quad \tilde{f}_-(k) = \int_{-\infty}^0 dx e^{ikx} f(x). \quad (39)$$

Функция $\tilde{f}_+(k)$ ($\tilde{f}_-(k)$) не имеет особенностей в верхней (нижней) полуплоскости. Здесь и ниже такое свойство будет предполагаться для всех функций с индексами \pm .

Уравнение (38) принимает вид

$$(1 + \tilde{K}(k))\tilde{f}_+(k) + \tilde{f}_-(k) = \tilde{g}(k). \quad (40)$$

Представим ядро $\tilde{K}(k)$ в виде

$$1 + \tilde{K}(k) = \frac{\tilde{K}_+(k)}{\tilde{K}_-(k)}. \quad (41)$$

Кроме того, положим

$$\tilde{K}_-(k)g(k) = \tilde{q}_+(k) + \tilde{q}_-(k). \quad (42)$$

Умножая (40) на $\tilde{K}_-(k)$, получаем

$$\tilde{K}_+(k)\tilde{f}_+(k) + \tilde{K}_-(k)\tilde{f}_-(k) = \tilde{q}_+(k) + \tilde{q}_-(k). \quad (43)$$

Перенесем все функции, не имеющие особенностей в верхней полуплоскости в левую часть:

$$\tilde{K}_+(k)\tilde{f}_+(k) - \tilde{q}_+(k) = \tilde{q}_-(k) - \tilde{K}_-(k)\tilde{f}_-(k).$$

Левая часть не имеет особенностей в верхней полуплоскости, а правая — в нижней. Таким образом, обе части этого уравнения не имеют особенностей. При некоторых дополнительных ограничениях на рост функций (которые надо проверять отдельно в каждом конкретном случае), отсюда следует, что

$$\tilde{K}_+(k)\tilde{f}_+(k) = \tilde{q}_+(k), \quad \tilde{K}_-(k)\tilde{f}_-(k) = \tilde{q}_-(k), \quad (44)$$

откуда следует, что

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\tilde{q}_+(k)}{\tilde{K}_+(k)} e^{-ikx}, \quad x > 0. \quad (45)$$

Построение функций, аналитических в верхней или нижней полуплоскости составляет некоторое искусство, но для разумных функций, выражаемых через элементарные функции, это задача вполне решаемая (сводящаяся, более или менее, к подсчету полюсов и нулей).

Я не буду приводить явных формул для решения уравнений (23), (24) методом Винера–Хопфа (подробно этот вывод изложен в [1]). Приведу лишь ответы. Положим

$$f(x) = \rho(x - b).$$

Тогда

$$\tilde{K}_+(k) = (\tilde{K}_-(-k))^{-1} = \sqrt{2\pi} \left(\frac{ik+0}{2\pi e} \right)^{ik/2\pi} \Gamma^{-1} \left(\frac{ik+\pi}{2\pi} \right). \quad (46)$$

Плотность состояний при $v > -b$ равна

$$\rho_0(v) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(v+b)} \tilde{f}_+(k), \quad \tilde{f}_+(k) = \frac{1}{ik+\pi} \frac{\tilde{K}_+(i\pi)}{\tilde{K}_+(k)} + \frac{1}{2 \operatorname{ch} k/2}. \quad (47)$$

Это приводит к связи между магнитным полем и b :

$$\frac{H}{2\epsilon_F} = e^{-\pi b} \left(\frac{2}{\pi e} \right)^{1/2}. \quad (48)$$

Отсюда выводится формула для намагниченности

$$M_{\text{im}}(H) = S - \frac{1}{2} + \frac{i}{8\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left(\frac{H}{T_H} \right)^{-2i\omega} \frac{\Gamma(i\omega + 1/2)}{\omega + i0} \left(\frac{-i\omega + 0}{e} \right)^{-2iS\omega} \left(\frac{i\omega + 0}{e} \right)^{i(2S-1)\omega}, \quad (49)$$

где

$$T_H = \left(\frac{2\pi}{e} \right)^{1/2} \frac{2\epsilon_F}{\pi} e^{-\pi/g} \sim T_K. \quad (50)$$

Это выражение допускает разложения при $H \gg T_H$ (что можно сопоставить с рядами по теории возмущений) и при $H \ll T_H$ (что недостижимо по теории возмущений).

Теперь кратко коснемся проблемы вычисления термодинамических характеристик при конечных температурах. Здесь есть несколько особенностей.

Прежде всего, в отличие от основного состояния, решения уравнений Бете v_i могут быть не только вещественными, но и комплексными. Именно, при $N \rightarrow \infty$ корни уравнений Бете образуют p -струны ($k = 1, 2, \dots$):

$$v_{j,k}^p = v_j^p + \frac{i}{2}(p+1-2k) + O(e^{-\text{const} N}), \quad k = 1, 2, \dots, p. \quad (51)$$

Вещественные решения соответствуют 1-струнам.

Можно показать, что если подставить струнное решение в уравнения Бете, то правая часть обратиться в нуль или бесконечность, в то время как левая будет стремиться к нулю или, соответственно, бесконечности при $N \rightarrow \infty$. Чтобы построить уравнения для вещественных частей струны $v_{j,k}^p$, следует перемножить p уравнений Бете для всех k . После этого уравнения Бете примут вид

$$e^{ip_a L} = e^{iJS} \prod_{p=1}^{\infty} \prod_{j=1}^{n_p} e_p(v_j^p), \quad (52)$$

$$(e_p(v_j^p))^N e_{p,2S}(v_j^p + 1/g) = \prod_{p'=1}^{\infty} \prod_{j'=1}^{n_{m'}} E_{pp'}(v_j^p - v_{j'}^{p'}), \quad (53)$$

где

$$e_p(v) = \frac{v + ip/2}{v - ip/2}, \quad e_{p,2S}(v) = \prod_{k=1}^p \frac{v + \frac{i}{2}(p+1-2k) + iS}{v + \frac{i}{2}(p+1-2k) - iS},$$

$$E_{pp'}(v) = e_{|p-p'|}(v) e_{|p-p'|+2}^2(v) \dots e_{p+p'-2}^2(v) e_{p+p'}(v).$$

Очевидно,

$$S^z = \frac{N}{2} - \sum_{p=1}^{\infty} pn_p.$$

Как и раньше, уравнения следует прологорифмировать и перейти к непрерывному пределу. Однако при ненулевой температуре состояния заполняются неплотно, поэтому если в левой части интегральных уравнений возникают *плотности состояний* $\rho_p(v)$, то в правой (под интегралами) только *плотности частиц* $\rho_p^+(v)$. Разность $\rho_p^-(v) = \rho_p(v) - \rho_p^+(v)$ представляет собой *плотность дырок*. С этим связана энтропия

$$S = \log \prod_{p,v} \frac{(N\rho_p(v)dv)!}{(N\rho_p^+(v)dv)!(N\rho_p^-(v)dv)!}$$

$$= N \sum_{p=1}^{\infty} \int dv (\rho_p(v) \log \rho_p(v) - \rho_p^+(v) \log \rho_p^+(v) - \rho_p^-(v) \log \rho_p^-(v)). \quad (54)$$

Правильная система уравнений на плотности частиц представляет собой условие минимума свободной энергии

$$F[\rho^+] = E - TS - HS^z$$

(величины ρ и ρ^- определяются по ρ^+ из уравнений Бете в интегральной форме). Это дает систему нелинейных интегральных уравнений, которую обычно можно решить в пределе низких или высоких температур.

Литература

- [1] N. Andrei, K. Furuya, and J. H. Lowenstein, *Reviews of Modern Physics*, **55** (1983) 331.