Лекция 11
Задача Кондо: решение уравнений Бете

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

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

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

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

причем

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

Энергия системы равна[1]

$$E = \sum_{a=1}^{N} p_a. \tag{4}$$

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

Прологорифмируем уравнения Бете:

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

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

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

$$I_a \in \mathbb{Z}, \qquad J_i \in \begin{cases} \mathbb{Z}, & n \in 2\mathbb{Z} + 1, \\ \mathbb{Z} + 1/2. & n \in 2\mathbb{Z}. \end{cases} \tag{8}$$

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

Полная энергия системы (4) разбивается на два вклада:

$$E = E_{\text{ch}} + E_{\text{sp}}, \tag{9}$$

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

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

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

$$N = \frac{L\epsilon_F}{\pi}. \tag{12}$$

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

Поэтому термодинамический предел определяется как

$$L \to \infty, \qquad N \to \infty, \qquad \frac{N}{L} = \frac{\epsilon_F}{\pi} = \text{const}\,,$$

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

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

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

$$-\frac{N+1-n}{2} \le J_i \le \frac{N+1-n}{2}. \tag{14}$$

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

$$J_{\min} \le J_i \le \frac{N-n}{2}. \tag{15}$$

В переменных v_i это соответствует интервалу

$$-b \le v < +\infty \tag{16}$$

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

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

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

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

При этом

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

Это значит, что суммарный спин равен

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

Спиновая энергия равна

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

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

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

Уравнение для ρ_0

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

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

$$\rho_1(v) = a_{2S}(v+1/g) - \int_{-b}^{\infty} a_2(v-v')\rho_1(v'), \qquad -b \le v < \infty. \tag{24}$$

Намагниченность распадается на электронную и примесную части:

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

Спиновая энергия распадается на две части

$$E_{\rm sp} = E_{\rm sp}^{\rm el} + E_{\rm im}, \tag{26}$$

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

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

Электронную часть энергии нетрудно вычислить. Действительно,

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

Кроме того,

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

Отсюда

$$J_{\rm min} = \frac{N-3n}{2} \tag{29}$$

и

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

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

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

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

$$H = \frac{2\epsilon_F}{N} S^z. \tag{32}$$

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

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

Отсюда имеем

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

Следовательно,

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

Особый интерес представляет точка $k = 0$:

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

Отсюда получаем

$$M_{\mathrm{el}} = 0, \tag{36a}$$
$$M_{\mathrm{im}} = S - 1/2. \tag{36b}$$

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 $H \to 0^+$, 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

$$1 \ll b < \infty. \tag{37}$$

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

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

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:

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

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

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

Представим ядро $\tilde{K}(k)$ в виде

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

Кроме того, положим

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

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

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

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

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

откуда следует, что

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

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

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

Плотность состояний при $v > -b$ равна

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

Это приводит к связи между магнитным полем и b:

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

Отсюда выводится формула для намагниченности

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

где

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

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 $N \to \infty$ корни уравнений Бете образуют *p-струны* ($k = 1, 2, \ldots$):

$$v^p_{j,k} = v^p_j + \frac{i}{2}(p + 1 - 2k) + O(e^{-\operatorname{const} N}), \qquad k = 1, 2, \ldots, p. \tag{51}$$

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 $N \to \infty$. Чтобы построить уравнения для вещественных частей струны $v^p_{j,k}$, следует перемножить p уравнений Бете для всех k. После этого уравнения Бете примут вид

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

$$(e_p(v^p_j))^N e_{p,2S}(v^p_j + 1/g) = \prod_{p'=1}^{\infty} \prod_{j'=1}^{n_m} E_{pp'}(v^p_j - v^{p'}_{j'}), \tag{53}$$

где

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

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

Очевидно,

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

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

$$\begin{aligned} S &= \log \prod_{p,v} \frac{(N\rho_p(v)dv)!}{(N\rho^+_p(v)dv)!(N\rho^-_p(v)dv)!} \\ &= N \sum_{p=1}^{\infty} \int dv \left(\rho_p(v) \log \rho_p(v) - \rho^+_p(v) \log \rho^+_p(v) - \rho^-_p(v) \log \rho^-_p(v)\right). \end{aligned} \tag{54}$$

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.