

©1994

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСИ С ПЕРЕМЕННОЙ ВАЛЕНТНОСТЬЮ НА ПЕРЕХОД В ФАЗУ ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ И СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ

Е.Е.Слядников, В.В.Тугушев

Вычисляются зависимости температур перехода в фазы волн зарядовой и спиновой плотности от концентрации примеси с переменной валентностью. Методом $(1/N)$ -разложения рассчитаны поправки к собственным энергиям уровней примеси.

Воздействие электрон-примесного рассеяния на формирование дальнего и ближнего порядка в кристаллах с волнами зарядовой и спиновой плотности (ВЗП и ВСП) изучается уже достаточно давно. Начиная с ранних работ (например, [1]) наиболее активно используется простейшая модель точечного несамосогласованного потенциала примесного центра, позволяющая во многих случаях качественно верно оценить влияние примеси на структуру и параметры ВЗП или ВСП. В модели потенциального точечного рассеивателя воздействие примеси описывается единственным параметром — частотой рассеяния ν (в двухзонной модели — матрицей по зонным индексам ν_{ij}) — и приводит к подавлению амплитуды ВЗП (ВСП), а также соответствующих температур перехода $T_s = (T_t)$ (см., например, ссылки в [2]). Несколько сложнее обстоит дело в модели магнитного точечного рассеивателя (локального примесного спина) для случая ВСП. Помимо обычного механизма подавления ВСП, связанного с разрушением когерентности электрон-дырочной пары, может иметь место эффект усиления ВСП (и соответственно повышения T_t) за счет ориентации спинов в поле ВСП (см., например, обзор [3] и соответствующие ссылки). Рассеяние на локальном примесном спине в случае ВЗП, так же как и на точечном потенциальном центре, ведет к подавлению амплитуды ВЗП и уменьшению T_s .

Попытки выхода за рамки модели точечного несамосогласованного потенциала примесного центра предпринимались в нескольких направлениях. С одной стороны, крупномасштабное пространственное перераспределение зарядовой $\rho(\mathbf{r})$ и спиновой $S(\mathbf{r})$ плотности в окрестности дефекта удалось самосогласованно описать в области применимости разложения Гинзбурга-Ландау для термодинамического потенциала Ω (см. обсуждение в [4]). С другой стороны, получили распространение и различные частично самосогласованные подходы: работы [5,6] для систем с ВЗП и [7-9] для систем с ВСП. В основе всех этих работ ле-

жит приближение жесткой формы ВЗП (ВСП), т.е. при расчете $\rho(\mathbf{r})$ и $S(\mathbf{r})$ величина и форма параметра порядка $\Delta(\mathbf{r})$ считаются заданными.

Недавно [10] мы обратились к исследованию сложных многоэлектронных примесных центров в системах с ВЗП и ВСП, которые в принципе не могут быть описаны моделью точечного потенциала рассеяния. Была рассмотрена модель примеси Андерсона в Кондо-режиме в случае $T_s, T_t \ll T_k$ (T_k — температура Кондо). Оказалось, что влияние примесного рассеяния на ВЗП или ВСП можно в известных приближениях свести к действию самосогласованного псевдопотенциала $U(\omega)$ (ω — частота). Величина потенциала U и его частотная зависимость определяются характеристиками Кондо-резонанса и вычисляются из соответствующей системы уравнений самосогласования.

В данной работе мы продолжаем рассмотрение, начатое в [10], в другом предельном случае $T_k \ll T_s, T_t$ для модели примеси Андерсона в режиме переменной валентности. Ранее [11] случай $T_k \ll T_s, T_t$ уже начинал изучаться нами в модели точечного локального спина; были рассчитаны в паркетном приближении поправки к частоте рассеяния $\nu(\omega)$ и их влияние на T_s и T_t . Формально модель [11] соответствует случаю сильно удаленного от уровня Ферми энергетического уровня примесного центра. Здесь мы рассматриваем случай произвольного положения примесного одночастичного уровня, в том числе в области диэлектрической щели в спектре зонных состояний. Вычисляются зависимости T_s и T_t от концентрации примеси при различных соотношениях между параметрами — энергией резонанса и матричным элементом гибридизации зонных и примесных состояний. Все расчеты проводятся в пределе $U \rightarrow \infty$ методом $(1/N)$ -разложения (U — энергия хаббардовского отталкивания на примесном центре, N — кратность вырождения примесного состояния).

1. Модельный гамильтониан и основные уравнения

Запишем гамильтониан одиночного андерсоновского примесного центра в системе с ВЗП или ВСП аналогично [10]

$$H = H_1 + H_2 + H_3, \quad (1)$$

где H_i — гамильтониан зонных электронов в поле ВЗП или ВСП (для конкретности рассматриваем систему с удвоением периода, обладающую свойством «нестинга» затравочного электронного спектра $\varepsilon(\mathbf{k}) = -\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$, где \mathbf{Q} — половина вектора обратной решетки кристалла [2]).

$$H_1 = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \varepsilon(\mathbf{k}) \mathbf{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^+ \mathbf{a}_{\mathbf{k}, \alpha} - \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \beta} \left[\Delta_{\alpha, \beta} \mathbf{a}_{\mathbf{k}, \beta}^+ \mathbf{a}_{\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \alpha} + \text{к.с.} \right], \quad (2)$$

$$\Delta_{\alpha\beta} = (\Delta_t \sigma)_{\alpha\beta}, \quad \text{ВСП,}$$

$$\Delta_{\alpha\beta} = \Delta_s \sigma_{\alpha\beta}, \quad \text{ВЗП.}$$

Здесь Δ_t и Δ_s — триpletный и синглетный параметры порядка, соответствующие ВСП и ВЗП и описываемые стандартными уравнениями самосогласования [2].

Гамильтониан примеси H_2 запишем в двухконфигурационном приближении с использованием вспомогательных псевдобозонного (b) и псевдофермионного (f) полей, следуя [12]

$$H_2 = \sum_m E_f f_m^+ f_m + E_0 b^+ b. \quad (3)$$

Здесь E_f и E_0 — энергии конфигураций $|\{m\}\rangle$ и $|0\rangle$ соответственно. Суммирование по индексу m ведется от $-J$ до J , где $J = (N-1)/2$, N — кратность вырождения уровня $|m\rangle$. Гамильтониан (3) получается из стандартной модели Андерсона с N -кратным вырождением в пределе бесконечного хаббардовского отталкивания.

Одноэлектронная гибридизация между локализованными орбиталями примеси и состояниями зонных электронов описывается гамильтонианом

$$H_3 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{m,\alpha} [V_f^{m\alpha}(\mathbf{k}) f_m^+ b a_{\alpha}(\mathbf{k}) + k.c.], \quad (4)$$

$$V_f^{m\alpha}(\mathbf{k}) = \langle |\mathbf{k}|J, m | V | \mathbf{k}\alpha \rangle, \quad (4)$$

где V — потенциал взаимодействия зонного электрона с примесью.

Применение псевдобозонных и псевдофермионных операторов позволяет использовать стандартные методы теории поля, однако оно вводит лишние (нефизические) состояния, в которых число псевдобозонов и псевдофермионов на узле больше единицы. Согласно [12], эти нефизические состояния можно устранить при вычислении средних по статистическому ансамблю, если к гамильтониану H добавить член $\lambda(\sum_m f_m^+ f_m + b^+ b - 1)$ и в конечных выражениях для физических средних перейти к пределу $\lambda \rightarrow \infty$.

Статистическую сумму Z для гамильтониана (4) можно представить в виде

$$Z = Z_{\text{band}} Z_{\text{loc}}, \quad (5)$$

где Z_{band} — статистическая сумма зонных электронов; Z_{loc} — статистическая сумма локализованных электронов, имеющая, согласно [12], следующую структуру:

$$Z_{\text{loc}} = \pi^{-1} \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \int [\text{Im } D(\omega + \lambda) + \sum_m \text{Im } G_{f_m}(\omega + \lambda)] \exp(-\beta\omega) d\omega. \quad (6)$$

Здесь $D(\omega)$ и $G_{f_m}(\omega)$ — псевдобозонная и псевдофермионная одночастичные функции Грина, $\beta = (kT)^{-1}$.

Далее нас будет интересовать область температур $T \gg T_k$ (T_k — температура Кондо), и более того, ограничимся лишь задачей о расчете перенормированной температуры перехода (в состоянии ВЗП либо ВСП), т.е. $T \sim T_s$, $T_t \gg \Delta_s$, Δ_t ($\Delta_{s,t}$ — параметр порядка). В этом случае для расчета Z_{loc} справедливо квазичастичное двухуровневое приближение [13], соответствующее δ -образной аппроксимации спектральных плотностей функций $D(\omega)$ и $G_{f_m}(\omega)$ с единичными вычетами

в полюсах $\omega = E_0^*$ и $\omega = E_{fm}^*$ соответственно. Здесь E_0^* и E_{fm}^* — перенормированные энергии локальных уровней. В приближении слабой связи по гибридизации ($V/W \ll 1$, W — ширина зоны коллективизированных электронов), которым только и ограничимся, для Z_{loc} имеем, таким образом, соотношение

$$Z_{loc} = \exp[-\beta E_0^*] + \sum_m \exp[\beta E_{fm}^*]. \quad (7)$$

Явная зависимость $E_0^*(\Delta)$ и $E_{fm}^*(\Delta)$ может быть найдена из системы уравнений

$$\begin{aligned} E_0^* &= E_0 + \prod_0 (E_0^*, E_{fm}^*), \\ E_{fm}^* &= E_f + \sum_m (E_0^*, E_{fm}^*). \end{aligned} \quad (8)$$

Собственно-энергетические поправки \prod_0 и \sum_m к энергиям квазичастиц запишем в приближении непересекающихся диаграмм (НСА), для которого можно получить явные выражения термодинамических функций Грина

$$\begin{aligned} G_{fm}(\omega_n, \lambda) &= [i\omega_n - E_f - \sum_m (\omega'_n, \lambda) - \lambda]^{-1}, \\ D(\nu_n, \lambda) &= [i\nu_n - E_0 - \prod(\nu'_n, \lambda) - \lambda]^{-1}. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \sum_m (\omega_n, \lambda) &= -T \sum_{\nu_1} \sum_{k_1, l_1, l_2} \sum_{\alpha_1, \alpha_2} V_{m\alpha_1}^{f l_1}(\mathbf{k}_1) \times \\ &\times D(\nu_1, \lambda) G_{l_1 l_2}^{0 \alpha_1 \alpha_2}(\mathbf{k}_1, \omega_n - \nu_1) V_{\alpha_2 m}^{* i_2 f}(\mathbf{k}_1), \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \prod(l_n, \lambda) &= T \sum_{\omega_1} \sum_{l_1, l_2, k_1} \sum_{\alpha_1, \alpha_2, m_1} V_{m_1 \alpha_1}^{f l_1}(\mathbf{k}_1) \times \\ &\times G_{m_1}(\omega_1, \lambda) G_{l_1 l_2}^{0 \alpha_1 \alpha_2}(\mathbf{k}_1, \omega_1 - \nu_n) V_{\alpha_2 m_1}^{* i_2 f}(\mathbf{k}_1), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\prod_0 = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \prod(\nu + \lambda, \lambda)|_{\nu + \lambda = E_0^*},$$

$$\sum_m = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \sum_m (\omega + \lambda, \lambda)|_{\omega + \lambda = E_{fm}^*}. \quad (12)$$

Заметим, что \prod_0 и \sum_m являются сложными функциями E_0^* , E_{fm}^* , так что система (8) в общем случае может быть решена лишь численно.

Функции Грина кристалла без примеси $G_{l_1 l_2}^{0 \alpha_1 \alpha_2}$ имеют известный вид

$$G_{ij}^{0 \alpha_1 \alpha_2}(\mathbf{k}, \omega_n) = G^{0 \alpha_1 \alpha_2}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \omega_n) = \frac{i\omega_n + \varepsilon(\mathbf{k})}{(i\omega_n)^2 - \varepsilon^2(\mathbf{k}) - |\Delta|^2}, \quad (13)$$

$$G_{ij}^{\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{k}, \omega_n) = G^{\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{Q}, \omega_n) = -\frac{\Delta_{\alpha_1\alpha_2} \delta_{ij\pm 1}}{(i\omega_n)^2 - \varepsilon^2(\mathbf{k}) - |\Delta|^2}. \quad (14)$$

Нижние индексы введены для удобства обозначения нормальных (13) и аномальных (14) функций Грина, параметры $\Delta_{\alpha_1\alpha_2}$ определены в соответствии с (2).

Термодинамический потенциал системы с одиночным центром имеет вид

$$\tilde{\Omega} = \Omega_0 - \beta^{-1} \ln Z_{\text{loc}}, \quad (15)$$

где Ω_0 — потенциал зонных электронов. Для случая конечной, но малой концентрации примесей x в приближении невзаимодействующих центров запишем плотность термодинамического потенциала системы

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{\beta^{-1}}{N_{\text{at}}} \sum_{R_j} \ln Z_{\text{loc}}^{(j)}, \quad (16)$$

где суммирование ведется по узлам R_j , занятым примесями; N_{at} — число атомов в решетке. Равновесное значение параметра порядка Δ (индексы s, t будем далее опускать там, где это не вызовет недоразумений) определяется минимизацией функционала (16)

$$\frac{\delta \Omega}{\delta \Delta} = \frac{\delta \Omega_0}{\delta \Delta} - \frac{\beta^{-1}}{N_{\text{at}}} \sum_{R_j} \frac{1}{Z_{\text{loc}}^{(j)}} \frac{\delta Z_{\text{loc}}^{(j)}}{\delta \Delta} = 0. \quad (17)$$

2. Температура перехода в фазы ВЗП и ВСП

Для нахождения температуры перехода достаточно разложить величины \prod_0 и Σ_m до квадратичных по Δ слагаемых

$$\Sigma_m(\mathbf{R}_j) = \Sigma^0 + A^{s,t} \Delta^2 + \tilde{m} D^{s,t} \Delta \cos \mathbf{QR}_j, \quad (18)$$

$$\prod_0(\mathbf{R}_j) = \prod_0^0 + A_0^{s,t} \Delta^2 + D_0^{s,t} \Delta \cos \mathbf{QR}. \quad (19)$$

Здесь $\tilde{m} = -1$ для ВЗП и $\tilde{m} = m/J + 1$ для ВСП. Коэффициенты $A^{s,t}$ и $D^{s,t}$ не зависят явно от m . Явный вид всех величин (Σ^0 , \prod_0^0 , $A^{s,t}$, $A_0^{s,t}$, $D^{s,t}$, $D_0^{s,t}$) приведен в Приложении. Вычисляя $Z_{\text{loc}}(\Delta)$ согласно (7), (8) и (18), (19), из (17) можем получить интересующие нас уравнения для критических температур $T_{s,t}$.

Выпишем явно эти уравнения только для случая $T_{s,t} \ll |\varepsilon|$, $\varepsilon = E_{f_m}^* - E_0^*$, когда расстояние между уровнями не является аномально малым. С экспоненциальной точностью, т.е. отбрасывая слагаемые $\sim \exp(-|\varepsilon|/T)$, имеем

$$\bar{N}(0) \ln \frac{T_s}{T_0^s} = -x[A_0^s \theta(\varepsilon) + A^s \theta(-\varepsilon)], \quad (20)$$

$$\bar{N}(0) \ln \frac{T_t}{T_t^0} = -x[A_0^t \theta(\varepsilon) + \left(A^t - \frac{(D^t)^2}{N6T_t}\right) \theta(-\varepsilon)]. \quad (21)$$

Здесь $T_{s,t}^0$ — температуры перехода в отсутствие примеси, $\bar{N}(0)$ — плотность электронных состояний на уровне Ферми. Заметим, что коэффициенты $A^{s,t}$ и D^t содержат по отношению к $A_0^{s,t}$ дополнительную малость $\sim (N^{-1})$ и в рамках схемы $(1/N)$ -разложения при $N \gg 1$ влияние примеси сильно подавляется при

$$\varepsilon < 0, \quad |\varepsilon| \gg T_{s,t}^0. \quad (22)$$

Рассмотрим некоторые предельные случаи, когда удается записать коэффициенты в (20), (21) в достаточно компактной форме и вычислить $T_{s,t}$ аналитически. Если $\varepsilon > 0$, $T_{s,t} \ll \varepsilon$, то в случае идеального «нестинга» электронного и дырочного участков поверхности Ферми запишем

$$A_0^s = \frac{D^s(0)}{2\varepsilon} [1 + (n^0 + 2)D^s(0)], \quad (23)$$

$$A_0^t = \frac{D^t(0)}{2\varepsilon}, \quad (24)$$

$$D^{s,t}(0) = n^0 \ln \frac{4\gamma\varepsilon}{\pi T_{s,t}}, \quad n^0 = \frac{2V^2 N(0)N}{\varepsilon + 2V^2 N(0)N}. \quad (25)$$

Здесь $\gamma = \exp C$, C — постоянная Эйлера. Напомним, что в нашей модели $V^2 \sim N^{-1}$, так что (23)-(25) содержат только низший (нулевой) порядок $1/N$ -разложения. Из (20), (21) с учетом (23)-(25) получаем для ВЗП

$$T_s = \frac{4\gamma\varepsilon}{\pi} \exp[-F_s], \quad (26)$$

$$F_s = \frac{(1-b) \pm [(1-b)^2 - 4abd]^{1/2}}{2ab}, \quad (27)$$

$$a = n^0(n^0 + 2), \quad b = x \frac{n^0}{2\varepsilon N(0)}, \quad d = \ln \frac{4\gamma\varepsilon}{\pi T_s^0}.$$

Для ВСП выражение оказывается более простым

$$T_t = T_t^0 \left[\frac{\pi T_t^0}{4\gamma \varepsilon} \right]^{b/1-b}, \quad (28)$$

$T_{s,t}^0$ — температура перехода в отсутствие примеси. В пределе $x \rightarrow 0$ одно из решений (26) переходит в T_s^0 , а (28) — в T_t^0 . Второе решение (26) дает $T_s \rightarrow 0$ при $x \rightarrow 0$, т.е. зависимость $T_s(x)$ оказывается неоднозначной. Обе ветки $T_s(x)$ существуют только при концентрациях $x < x_s^*$, где последняя определяется соотношением

$$(1 - b_2^*)^2 = 4ab_2^*d. \quad (29)$$

При $x > x_s^*$ величина F_s становится мнимой и формула (26) теряет смысл. При $x = x_s^*$ значение $T_s(x_s^*)$ остается конечным. Возможно, что

наличие двух ветвей (26) указывает на первый род перехода в фазу ВЗП по концентрации либо на переход в неоднородную (модулированную) структуру. Подробнее данный вопрос здесь не анализируется. Подчеркнем, что всюду речь идет только о случае малых концентраций $x \ll 1$.

Для решения (28) дело обстоит проще: температура $T_t(x)$ монотонно падает до нуля при $x \rightarrow x_t^*$, где $x_t^* = (n^0/2\varepsilon N(0))^{-1}$. При $x > x_t^*$ фаза ВСП не реализуется. Такое поведение целиком укладывается в традиционную картину влияния примесного рассеяния на переход второго рода в модели типа «экситонного диэлектрика» [2].

Обсудим теперь ситуацию $\varepsilon < 0$. Для системы с ВЗП, как можно убедиться, при $|\varepsilon| \gg T_s^0$ в низшем по N^{-1} приближении

$$T_s = T_s^0 \left[1 - b_1 \ln \frac{4\gamma|\varepsilon|}{\pi T_s^0} \right], \quad b_1 = x \frac{V^2}{\varepsilon^2} \ll 1. \quad (30)$$

Для системы с ВСП при $|\varepsilon| \gg T_t^0$

$$T_t = T_t^0 \left[1 - b_1 \ln \frac{4\gamma|\varepsilon|}{\pi T_t^0} \left(1 - \frac{2}{3} \frac{V^2 N(0)}{T_t^0} \ln \frac{4\gamma|\varepsilon|}{\pi T_t^0} \right) \right]. \quad (31)$$

Таким образом, поправка за счет электрон-примесного взаимодействия приводит в случае ВЗП к уменьшению температуры перехода. В случае ВСП может иметь место как уменьшение, так и увеличение температуры перехода в зависимости от соотношения слагаемых в круглых скобках (31). Последний результат в принципе не является неожиданным и связан с двояким влиянием магнитной примеси на переход в фазу ВСП: обычное уменьшение T_t за счет разрушения когерентной электрон-дырочной пары (аналогично ситуации в системе с ВЗП) и увеличение T_t за счет ориентации примесных спинов в поле ВСП [3].

Наконец, рассмотрим влияние слабого легирования системы зонных электронов ($|\mu|/2\pi T_{s,t} \ll 1$) на температуру перехода в состояние с ВСП (ВЗП). Из формул Приложения следует, что изменение температуры перехода, вызванное легированием системы, в линейном по μ приближении имеет вид

$$T_{s,t}(x, \mu) - T_{s,t}(x, 0) = \Delta T_{s,t}^{(x, \mu)} = -x N^{-1}(0) B_0^{s,t} \frac{\mu}{T_{s,t}(x, 0)}, \quad \varepsilon > 0, \quad (32)$$

$$\Delta T_{s,t} = x N^{-1}(0) B_0^{s,t} \frac{\mu}{T_{s,t}(x, 0)}, \quad \varepsilon < 0, \quad (33)$$

$$B_0^t = B_0^s = \frac{2n^0}{\pi^2}, \quad (34)$$

$$B^s = B^t = \frac{4V^{-2} N(0)}{\pi^2 |\varepsilon|}. \quad (35)$$

Легко видно, что выражения (32), (33) симметричны относительно одновременной замены $\mu \rightarrow -\mu$, $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$, $B_0 \rightarrow B$. Физический смысл

(32), (33) также прозрачен: при электронном допировании $\mu > 0$ уровень Ферми приближается к энергии локального центра ($\varepsilon > 0$) или удаляется от нее ($\varepsilon < 0$). Соответственно частота резонансного рассеяния в первом случае возрастает и температура перехода уменьшается (см. (32) при $\mu > 0$), во втором случае частота рассеяния уменьшается и температура перехода возрастает (см. (33) при $\mu > 0$). Для случая дырочного допирования $\mu < 0$ все рассуждения аналогичны с точностью до замены $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$. Заметим, что в отсутствие примеси ($x = 0$) величина $T_{s,t}(\mu)$ зависит только от $|\mu|$ и начинается с μ^2 , поэтому в (32) и (33) соответствующие вклады опущены.

3. Заключение

Важные качественные особенности зависимостей температур перехода $T_{s,t}(x)$ в фазу ВСП или ВЗП от концентрации примеси с флуктуирующей валентностью, полученные выше, состоят в следующем.

1. Даже при малой концентрации примеси эти зависимости имеют сильно нелинейный характер. Обычно используемые характеристики $dT_{s,t}/dx = Z_{s,t}$ (скорости убывания или возрастания температур перехода), удобные для модели точечного потенциального дефекта, где $Z_{s,t} \simeq \text{const}$ во всей области применимости приближения невзаимодействующих дефектов, теряют практический смысл из-за сильной зависимости $Z_{s,t}(x)$.

2. В системах с ВСП зависимость $T_t(x)$ монотонно убывает до нуля с ростом x до значения $x = x_{\text{max}}$. В то же время в системах с ВЗП зависимость $T_s(x)$ имеет как убывающую, так и возрастающую ветви в интервале концентраций $0 \leq x \leq x_{\text{max}}$. Это указывает на возможность расслоения однородной структуры ВЗП и (или) первый род перехода из нормальной фазы в упорядоченную. В модели потенциального точечного дефекта подобное поведение $T_s(x)$ не имеет места и зависимости $T_t(x)$ и $T_s(x)$ монотонны.

3. Отклонение от идеального нестинга может приводить как к уменьшению, так и к увеличению $T_{s,t}$ в зависимости от уменьшения (увеличения) расстояния между уровнем Ферми и уровнем одночастичного резонанса на примесном центре. Напомним, что в модели точечного потенциального дефекта оба фактора (рассеяние и сдвиг уровня Ферми при легировании) ведут только к уменьшению $T_{s,t}$.

В качестве стандартных объектов качественного применения рассмотренной выше теоретической модели для систем с ВСП можно указать, по-видимому, разбавленные сплавы Cr с Al, Ga и Si, а также тройные сплавы типа Cr-(V,Mn)-(Al,Si,Ga). Некоторые особенности магнитных фазовых диаграмм этих сплавов свидетельствуют в пользу такого предположения. Именно немонотонность зависимости температуры Нееля от концентрации легирующей компоненты, наличие локального минимума и максимума в некотором интервале концентраций могут быть интерпретированы в рамках представлений о резонансном характере электрон-примесного рассеяния и одновременном изменении нестинга при легировании. В качестве интересных примеров систем с ВЗП можно рекомендовать для изучения рассмотренных выше особенностей чистые поверхности (100) W или Mo с сорбированными на них атомами РЗМ. Если допустить, что в последнем случае

реконструкция поверхности идет по механизму ВЗП, то, меняя положение уровня Ферми в поверхностной зоне, например, за счет хемосорбирования Н, можно попытаться обнаружить эффект резонансного рассеяния на локальном уровне РЗМ в такой структуре.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Выполняя в (10), (11) суммирование по частотам и переходя к пределу $\lambda \rightarrow \infty$, получим

$$\Sigma(\omega) = V^2 \sum_{\mathbf{K}} \left\{ \overset{\circ}{D}(\omega + \mu + \sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{K}) + \Delta^2}) f(\mu + \sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{K}) + \Delta^2}) \left[1 - \frac{\tilde{m} \cos(\mathbf{QR}_l)}{\sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{K}) + \Delta^2}} \right] + \overset{\circ}{D}(\omega + \mu - \sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{K}) + \Delta^2}) f(\mu - \sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{K}) + \Delta^2}) \left[1 + \frac{\tilde{m} \cos(\mathbf{QR}_l)}{\sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{K}) + \Delta^2}} \right] \right\}, \quad (\text{П.1})$$

$$\begin{aligned} \Pi(\nu) = V^2 \sum_{m\mathbf{K}} \left\{ \overset{\circ}{G}_m(u - \mu + \sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{K}) + \Delta^2}) f(-\mu + \sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{K}) - \Delta^2}) \times \right. \\ \times \left[1 + \frac{\tilde{m}\Delta \cos(\mathbf{QR}_l)}{\sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{K}) + \Delta^2}} \right] \overset{\circ}{G}_m(u - \mu - \sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{K}) + \Delta^2}) \times \\ \left. \times f(-\mu - \sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{K}) + \Delta^2}) \left[1 - \frac{\tilde{m}\Delta \cos(\mathbf{QR}_l)}{\sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{K}) + \Delta^2}} \right] \right\}, \quad (\text{П.2}) \end{aligned}$$

(E) — фермиевская функция распределения.

Коэффициенты в (18), (19) имеют вид

$$\Sigma^0 = 2V^2 N(0) \left\{ -\ln \frac{\tilde{\omega}}{2\pi T} + \text{Re} \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon}{2\pi T} \right) \right\}, \quad (\text{П.3})$$

$$D^{s,t} = -V^2 N(0) (\varepsilon + \mu)^{-1} \left[\text{Re} \psi \left(\frac{1}{2} - \frac{i\mu}{2\pi T} \right) - \text{Re} \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon}{2\pi T} \right) \right] (1 + \lambda)^{-1}, \quad (\text{П.4})$$

$$\begin{aligned} A^{s,t} = A - 2V^2 N(0) \tilde{m}^2 \left[D^{s,t} \left\{ (\varepsilon + \mu)^{-2} \left[\text{Re} \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon}{2\pi T} \right) \right] - \text{Re} \psi' \left(\frac{1}{2} - \frac{i\mu}{2\pi T} \right) \right\} + \right. \\ \left. + (\varepsilon + \mu)^{-1} \frac{1}{2\pi T} \text{Im} \psi' \left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon}{2\pi T} \right) \right\} + \frac{1}{2} (D^{s,t}) \frac{1}{2\pi T} \text{Re} \psi'' \left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon}{2\pi T} \right) \right] (1 + \lambda)^{-1}, \quad (\text{П.5}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A = V^2 N(0) \left\{ (\varepsilon + \mu)^{-2} \left[\text{Re} \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon}{2\pi T} \right) - \text{Re} \psi \left(\frac{1}{2} - \frac{i\mu}{2\pi T} \right) \right] + (\varepsilon + \mu)^{-1} \times \right. \\ \left. \times \frac{1}{2\pi T} \text{Im} \psi' \left(\frac{1}{2} - \frac{i\mu}{2\pi T} \right) \right\} (1 + \lambda)^{-1}, \quad (\text{П.6}) \end{aligned}$$

$$\lambda = 2V^2 N(0) \frac{1}{2\pi T} \operatorname{Im} \psi' \left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon}{2\pi T} \right), \quad (\text{П.7})$$

$$\prod_0 = 2V^2 N(0) N \left\{ -\ln \frac{\bar{\omega}}{2\pi T} + \operatorname{Re} \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon}{2\pi T} \right) \right\}, \quad (\text{П.8})$$

$$D_0^{s,t} = \sum_m \tilde{m} 2V^2 N(0) (\varepsilon - \mu_0)^{-1} \left[\operatorname{Re} \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{i\mu}{2\pi T} \right) - \operatorname{Re} \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon}{2\pi T} \right) \right] (1 + \lambda)^{-1}, \quad (\text{П.9})$$

$$A_0^{s,t} = A_0 + 2V^2 N(0) \left[\sum_m \tilde{m} D_0^{s,t} \left\{ (\varepsilon - \mu)^{-2} \left[\operatorname{Re} \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon}{2\pi T} \right) - \operatorname{Re} \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{i\mu}{2\pi T} \right) \right] + (\varepsilon - \mu)^{-1} \frac{1}{2\pi T} \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \operatorname{Im} \psi' \left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon}{2\pi T} \right) \right\} - \frac{1}{2} \frac{(D_0^{s,t})}{(2\pi T)^2} \operatorname{Re} \psi'' \left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon}{2\pi T} \right) \right] (1 + \lambda')^{-1}, \quad (\text{П.10})$$

$$A_0 = V^2 N(0) N \left\{ (\varepsilon - \mu)^{-2} \left[\operatorname{Re} \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{i\varepsilon}{2\pi T} \right) - \operatorname{Re} \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{i\mu}{2\pi T} \right) \right] + (\varepsilon - \mu)^{-1} \frac{1}{2\pi T} \times \right. \\ \left. \times \operatorname{Im} \psi' \left(\frac{1}{2} + \frac{i\mu}{2\pi T} \right) \right\} (1 + \lambda')^{-1}, \quad (\text{П.11})$$

$$\lambda' = N\lambda. \quad (\text{П.12})$$

Список литературы

- [1] Everts H., Zittarts J. // J. Low Temp. Phys. V. 11. P. 349.
- [2] Копаев Ю.В. // Труды ФИАН, 1975. Т. 86.
- [3] Куликов Н.И., Тугушев В.В. // УФН. Т. 144. С. 694.
- [4] Меньшов В.Н., Тугушев В.В. // ЖЭТФ. Т. 96. С. 1340.
- [5] Tutto I., Zawadowski A. // Phys. Rev. B. 1985. V. 32. P. 2449.
- [6] Voit J. // J. Phys. C. 1988. V. 21. P. L649.
- [7] Behera S., Viswarathan K. // Can. J. Phys. 1969. V. 47. P. 477.
- [8] Tua P., Ruwals J. // Phys. Rev. B. 1985. V. 32. P. 4660.
- [9] Tutto I., Zawadowski A. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 60. P. 1442.
- [10] Слядников Е.Е., Тугушев В.В. // ЖЭТФ. 1992. Т. 102. С. 271.
- [11] Слядников Е.Е., Тугушев В.В. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 3. С. 881.
- [12] Coleman P. // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. P. 3035.
- [13] Bickers N. // Rev. Mod. Phys. 1987. V. 59. P. 845.

РНЦ «Курчатовский институт»
Институт молекулярной физики
Москва

Поступило в Редакцию
7 сентября 1993 г.