

# НЕПЕРТУРБАТИВНЫЙ ПОДХОД К СКЕЙЛИНГУ КОНЕЧНОГО РАЗМЕРА В ЭФФЕКТЕ КОНДО

И.Х. Жарекешев

*Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы*

Исследуется переход между фазой свободных магнитных моментов и фазой Кондо в низкоразмерных неупорядоченных металлах. Разработан непертурбативный метод к скейлингу конечных размеров для распределения температур Кондо, полученных на основе численного ренорм-группового анализа.

## Введение

Эффект Кондо является одной из центральных проблем в физике низкотемпературных аномалий, таких как насыщение времени фазовой корреляции, нефермиевское жидкостное поведение в некоторых магнитных сплавах [1]. Для достаточно чистого металла экранирование магнитной примеси со спином  $1/2$  управляется единственным масштабом энергии, а именно температурой Кондо  $T_k$ . Известно, что термодинамические наблюдаемые и транспортные свойства подчиняются универсальным законам, которые описываются функциями, зависящими от температуры Кондо  $T_k$ . Например, для металла, в котором всегда присутствует немагнитный беспорядок, например, из-за наличия примесных атомов возникает два основных вопроса. Во-первых, изменяется ли температура Кондо под влиянием немагнитного беспорядка? Во-вторых, справедлив ли при этом закон однопараметрического скейлинга? Хорошо известно, что магнитные моменты могут оставаться неэкранированными, если электроны в зоне проводимости становятся локализованными в ограниченной области пространства. В слабо неупорядоченных двумерных системах длина локализации макроскопически большая. Ожидается поэтому, что нет никакого влияния на экранировку магнитных моментов, по крайней мере, для экспериментальных значений величины обменного взаимодействия.

Другой причиной «блокировки» эффекта Кондо может служить *глобальная псевдощель* центрированная на уровне Ферми  $E_F$  [2], в случае когда плотность состояний спадает по степенному закону  $V(E) \sim (E - E_F)^\alpha$ , где  $\alpha > 0$ . В чистых металлах псевдощель блокирует кондовское экранирование, если величина обменного взаимодействия  $J$  становится меньше некоторой пороговой величины  $J_c(\alpha)$ . До сих пор только два значения были реализованы экспериментально (а)  $\alpha = 1$  в графенах и сверхпроводниках d-типа волн и (б)  $\alpha = 2$  в сверхпроводниках p-типа волн. Более полный сравнительный анализ и расчет по ренорм-групповому анализу проведен в работах [2-6]. Также найдена особая фаза, в которой свободные магнитные моменты обусловлены возникновением неупорядоченных локальных псевдощелей на уровне Ферми. Авторы показали, что их ширина и показатель степени изменяется в зависимости от времени упругого рассеяния  $1/\tau$ . В настоящей работе изучается квантовая фазовая диаграмму магнитных моментов, распределенных в двумерной неупорядоченной матрице с использованием модифицированного метода ренормированного группового анализа (РГА). Существование свободных магнитных моментов подтверждено численно непосредственно с помощью РГА, примененного для локальной магнитной восприимчивости при низких температурах [5,6]. Поведение магнитной восприимчивости очень напоминает критическое состояние в точке Кюри при определенном расположении магнитных моментов для данной реализации беспорядка.

Мы провели аналитический и компьютерный расчет скейлинга конечных размеров, чтобы продемонстрировать подтверждение наличия свободных магнитных моментов. Более того, распределения температур Кондо, полученных численными методами, хорошо согласуются с предыдущими результатами, основанных на уравнении Нагаоки-Сула [5].

## Модель

Рассмотрим гамильтониан Кондо для магнитной примеси в неупорядоченном металле:

$$H_{sd} = \sum_{n\sigma} E_n a_{n\sigma}^+ a_{n\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{n,n'} J_{nn'} [S^+ a_{n\downarrow}^+ a_{n'\uparrow} + S^- a_{n\uparrow}^+ a_{n'\downarrow} + S_z (b_{n\uparrow}^+ b_{n'\uparrow} - b_{n\downarrow}^+ b_{n'\downarrow})], \quad (1)$$

где  $E_n$  – собственные энергии невзаимодействующих неупорядоченных электронов. Их квантовая динамика описывается моделью сильной связи с беспорядком (модель Андерсона):

$$H_{sd} = -t \sum_{k \neq m, \sigma} (a_{k\sigma}^+ a_{m\sigma} + a_{k\sigma} a_{m\sigma}^+) + \sum_{n\sigma} V_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}, \quad (2)$$

с шириной зоны  $D$ , интегралом перекрытия  $t$ , хаотичным распределением потенциалов узлов решетки, которое для простоты выбрано равномерным (с разбросом  $W$  и центром в нуле). Мы ограничимся рассмотрением двумерной квадратной решетки длиной  $L$  с числом узлов  $N = L^2$  (Рис.1). На волновые функции двумерных электронов наложены периодические граничные условия. Матричные элементы оператора энергии обменного взаимодействия даются следующей формулой:

$$J_{nn'} = J \psi_n^*(\vec{r}) \psi_{n'}(\vec{r}), \quad (3)$$

где  $\psi_n(\vec{r})$  является амплитудой собственных функций в одноэлектронном приближении в точке  $\vec{r}$ , где находится магнитный момент примесного атома. Все энергии измеряются в единицах интеграла перекрытия  $t$ .

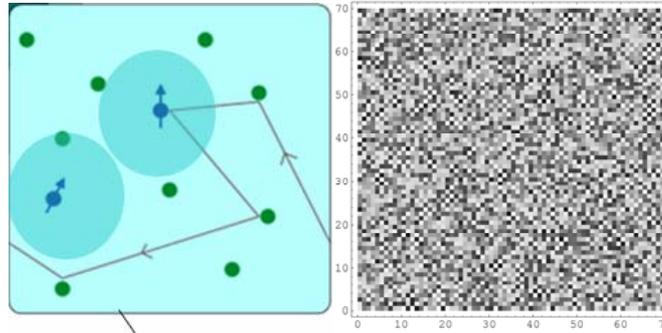


Рисунок 1 - Слева. Схематическое положение магнитных моментов (изображены со стрелкой) и немагнитных примесных атомов (без стрелки) в неупорядоченном металле. Ломанной линией показана траектория электрона, который рассеивается на моментах и примесях.

Справа. Пространственное распределение температур Кондо. Волновые функции и собственные значения берутся из решений модели сильной связи. Беспорядок  $W=2t$ , энергия Ферми  $E_F=D/4$ , параметр обменного взаимодействия  $J/D=0.3$ . См. уравнения (1)-(2)

## Скейлинг конечного размера

При помощи методов численной делокализации, специально разработанных для гигантских матриц [3,7], были получены весь набор собственных значений и собственных функций для большого ансамбля реализаций беспорядка хаотического потенциала. Температуры Кондо  $T_k$  определяются кокретными распределениями примесных атомов, как

показано на Рис.2. Они вычисляются из решения самосогласованного однопетлевого уравнения Нагаоки-Сула (УНС):

$$\frac{J}{2} \sum_{n=1}^N \frac{L^2 |\psi_n(\vec{r})|^2}{E_n - E_F} \tanh\left(\frac{E_n - E_F}{2T_k}\right) = N, \quad (4)$$

Мы предполагаем, что  $E_F$  все время находится между дискретными уровнями энергии электрона с четным числом электронов в основном состоянии системы. Численное решение уравнения (4) дает, таким образом, распределение температур Кондо, которое сильно отличается от гауссового распределения, даже при слабом беспорядке. Рисунок 3 показывает, что при степени беспорядка  $W=3$  появляются два пика, которые сохраняются при увеличении размеров системы от 900 до 4900 узлов. Такая двухпиковая структура в распределении  $T_k$  далее переходит в степенной закон (который расходится) при пределе сильной степени беспорядка  $V \gg V_c$ . Для того, чтобы проверить это нетривиальное «двугорбовое» поведение  $P(T_k)$  был дополнительно проведен сравнительный анализ с непертурбативным методом, основанном на РГА.

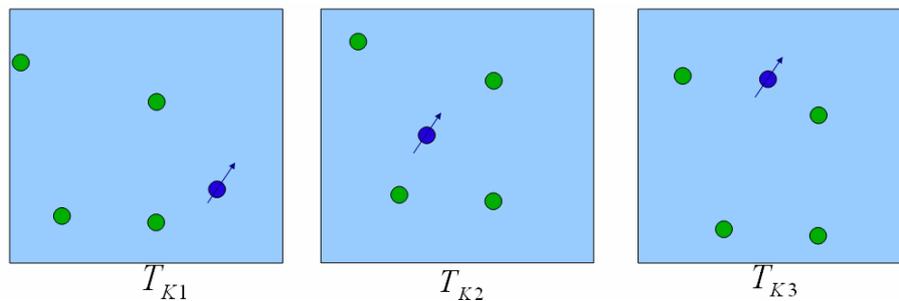


Рисунок 2 - Температура Кондо  $T_k$  зависит от конкретного положения магнитной примеси и определяется разным набором волновых функций и собственных значений для данного неупорядоченного образца

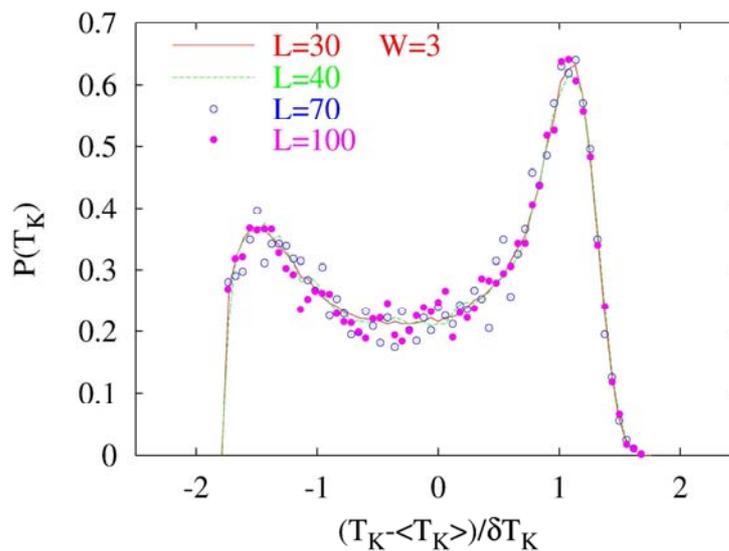


Рисунок 3 - Распределение температур Кондо  $T_k$ , полученных из решений уравнения УНС (4) для электронов в квадратной решетке различных размеров  $L = 30, 40, 70$  и  $100$  для значения беспорядка  $W=3$ . Параметр обменного взаимодействия фиксирован  $J/D = 0.35$

### Фаза свободных моментов

Для того, чтобы применить РГА-метод к неупорядоченным системам мы использовали набор собственных значений и собственных функций электронов, заранее вычисленных на основе модели сильной связи с андерсоновским беспорядком из формулы (2) методом численной диагонализации по Ланцошу [3,7].

Были проанализированы состояния с примесными узлами, где ренормированные константы магнитной восприимчивости становились незначительными, чтобы сформировать конечную температуру Кондо  $T_k$ . На таких узлах магнитный момент остается свободным даже при низких температурах, при этом локальная восприимчивость  $\chi_{loc}$  расходится. Этот критерий использовался, чтобы определить наличие свободных моментов (их число и положение) и, в последствие, сравнить их долю с теми результатами, которые были получены из условия, что уравнение (4) не имеет никакого решения с конечным  $T_k$ . Из рисунка 4 видно, что часть свободных моментов УНС меньше, чем та, что получена из РГА. Это может быть объяснено тем фактом, что поправки более высокого порядка (следующие петли) уравнения (4) имеют тенденцию к низким температурам Кондо.

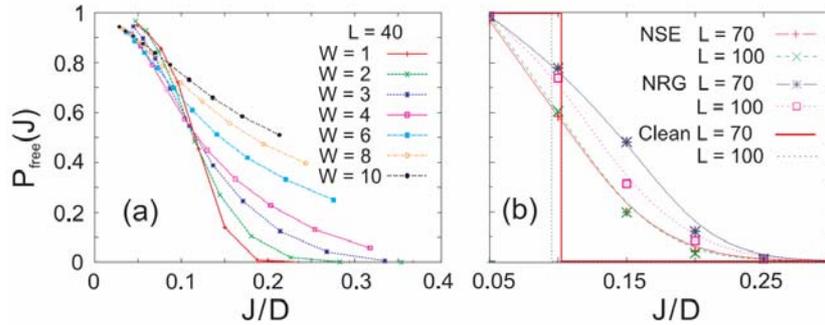


Рисунок 4 - Доля свободных моментов  $P_{free}$  как функция параметра обменного взаимодействия  $J/D$ , полученного (а) из условия, что уравнения УНС (4) не имеет решения и (б) из температурной зависимости локальной спиновой восприимчивости

Таким образом, критерий того, что УНС не имеет решения, дает нижнюю границу для доли свободных магнитных моментов. Это соответствует тому, что  $T_k$  стремится нулю в уравнении (4). Свободные магнитные моменты существуют, только если локальная плотность состояний:

$$\rho_{eff} = \frac{1}{2N} \sum_{n=1}^N \frac{L^2 |\psi_n(\vec{r})|^2}{|E_n - E_F|}, \quad (5)$$

меньше чем обратная величина энергии обменного взаимодействия  $1/J$ . Для фиксированной реализации беспорядочного потенциала это условие дает нижнюю границу (порог) для критической величины параметра обменного взаимодействия  $J_c$ , ниже которой магнитные моменты остаются свободными.

### Литература

1. Miranda E., Dobrosavlevic V., Disorder-driven non-Fermi liquid behavior of correlated electrons. Rep. Prog. Phys., 2005, 68, 2337-2408.
2. Kettemann S., Mucciolo E.R., Disorder-quenched Kondo effect in mesoscopic electronic systems, Phys. Rev. B, 2007, 75, 184407-184414.
3. Zharekeshv I.Kh, Kramer B., Advanced Lanczos diagonalization for models of quantum disordered systems. Comp. Phys. Comm. 1999, 121-122, 502-506.

4. Fritz L., Vojta M., Kondo screening in unconventional superconductors: The role of anomalous propagators, Phys. Rev. B, 2005, 72, 212510-212513.

5. Kettemann S., Mucciolo E.R., and Varga I., Critical Metal Phase at the Anderson Metal-Insulator Transition with Kondo Impurities, Phys. Rev. Lett., 2009, 103, 126401-126405.

6. Zhuravlev A., Zharekeshev I.Kh., Gorelov E., Lichtenstein A.I., Mucciolo E.R., Kettemann S., Nonperturbative Scaling Theory of Free Magnetic Moment Phase in Disordered Metals, Phys. Rev. Lett. 2007, 99, 247202-247205.

7. Cullum J.K., Willoughby R.K., Lanczos algorithms for large symmetric eigenvalue problems, 1985, (Ed. Birkhauser, Boston). 355p.

## **КОНДО ЭФФЕКТИСІНДЕГІ СКЕЙЛИНГІНІҢ АҚЫРҒЫ КӨЛЕМІНЕ ПЕРТУРБАТИВТЫҚ ЕМЕС ТӘСІЛ**

**И.Х. Жарекешев**

Реттелмеген металдардағы бос магниттік мезеттердің скейлинг теориясы зерттелген. Кондо эффектісіне пертурбативтік емес тәсіл жасап шығарылған.

## **NONPERTURBATIVE APPROACH TO FINITE-SIZE-SCALING OF THE KONDO EFFECT**

**Isa Kh. Zharekeshev**

The scaling theory of the free magnetic moments in disordered metals is investigated. A non-perturbative approach to the Kondo effect is developed.