

для спонтанного момента является точным в пределе $d \rightarrow \infty$ или $z \rightarrow \infty$. Для Х. м. формулировка этого предела оказывается нетривиальной; Метцнером и Фолхардтом [3] показано, что в этом пределе все вычисления сильно упрощаются, при этом сохраняются все физ. свойства модели. Эти упрощения в пределе $d \rightarrow \infty$ обусловлены тем, что собственная энергия электрона становится диагональной в узельном представлении:

$$\sum_{ij}(\omega) = \sum(\omega)\delta_{ij}, \quad (6)$$

т. е. Σ не зависит от квазиимпульса, а является только ф-цией частоты. Одновременно оказывается, что во всех вершинных частях диаграммной техники можно пренебречь законом сохранения квазиимпульса, т. е. заменить соответствующую δ -функцию на 1. При выполнении предела $d \rightarrow \infty$ для Х. м. необходимо соответствующим образом масштабировать параметры гамильтониана:

$$t = t^*/2\sqrt{d}, \quad t^* = \text{const.} \quad (7)$$

Тогда спектру (2) в пределе $d \rightarrow \infty$ соответствует плотность состояний

$$\rho_0(\omega) = \frac{1}{t^*\sqrt{\pi}} e^{-\omega^2/(t^*)^2}, \quad (8)$$

а ср. квадрат энергии $\mathcal{E}^2(k)$ в спектре (8) становится конечным в пределе $d \rightarrow \infty$. Кроме того, ф-ции Грина на решётке

$$G_{ij}^0(\omega) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{e^{ik(R_i - R_j)}}{\omega - \mathcal{E}(k)} \quad (9)$$

имеют асимптотику $\sim (1/\sqrt{d})^{|i-j|}$, где $|i-j|$ — мин. число шагов по ближайшим соседям (в единицах параметра решётки) между узлами i и j . В частности, для ближайших соседей $G_{ij}^0 \sim 1/\sqrt{d}$. Т. о., в пределе $d \rightarrow \infty$ все Ван-Хова особенности в плотности состояний сглаживаются.

Благодаря локальному характеру собственной энергии в пределе $d \rightarrow \infty$ Х. м. сводится к однопримесной задаче в решётке [4—7] со специально подобранными двумя ф-циями энергии $\Sigma(\omega)$ и $\mathcal{G}(\omega)$, характеризующими эфф. однородную среду, к-рые в случае магн. упорядочения зависят ещё и от спина. $\Sigma(\omega)$ играет роль нек-рого эфф. поля, действующего на электрон со стороны всех др. электронов, а $\mathcal{G}(\omega)$ является затравочным линейным пропагатором для $G_{ii}(\omega)$. Т. о., имеются два выражения для $G_{ii}(\omega)$:

$$G_{ii}(\omega) = \int d\epsilon \frac{\rho_0(\epsilon)}{\omega - \epsilon - \Sigma(\epsilon)}, \quad (10)$$

$$G_{ii}(\omega) = [\mathcal{G}^{-1}(\omega) - \Sigma(\omega)]^{-1}, \quad (11)$$

приводящие к ур-нию, связывающему $\Sigma(\omega)$ и $\mathcal{G}(\omega)$. С др. стороны, величина $G_{ii}(\omega)$ как ф-ция Грина однопримесной модели может быть найдена численно (напр., с помощью квантового Монте-Карло метода). В этом смысле ур-ния (10) и (11) представляют точное решение Х. м. в пределе $d \rightarrow \infty$, выражая результат через точное решение однопримесной модели. Имеется и др. способ исследовать Х. м. в пределе $d \rightarrow \infty$ [4] на основе известных выражений для затравочной ф-ции Грина $\mathcal{G}(\omega)$ однопримесной Х. м. Разл. характер поведения $\mathcal{G}(\omega)$ в зависимости от соотношения между параметрами однопримесной модели определяет возможные режимы для точного однопримесного пропагатора $G_{ii}(\omega)$, а следовательно, и характер решения для Х. м. Плотность состояний $\rho(\omega)$ даётся ф-лой

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{ii}(\omega). \quad (12)$$

возможная структура $\rho(\omega)$ определяется характером решения однопримесной задачи, т. е. поведением ф-ции Грина $G_{ii}(\omega)$ в модели Андерсона. Затравочная ф-ция Грина $\mathcal{G}(\omega)$ для этой модели содержит два независимых параметра — атомный уровень d -состояния E_d и ширину этого уровня Δ . В зависимости от соотношения между ними

плотность состояний однопримесной модели имеет двухпиковую структуру (при $E_d \ll \Delta$), один широкий пик (при $E_d \gg \Delta$) или узкий пик, соответствующий электронному резонансу в Кондо эффекте, наряду с одним или двумя широкими сателлитами (при $|E_d| \sim \Delta$). Этим трём режимам однопримесной модели соответствуют три возможных режима Х. м. вблизи половинного заполнения: расщеплённый на две подзоны спектр, нерасщеплённый спектр и спектр с резонансом Кондо на поверхности Ферми. Подобный перенос свойств однопримесной модели Андерсона на Х. м. хорошо подтверждается численными расчётами. На рис. 2 показана эволюция плотности со-

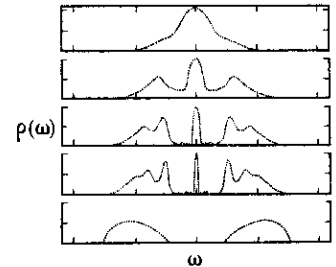


Рис. 2. Плотность состояний $\rho(\omega)$ для Хаббарда модели при половинном заполнении и $T=0$ в пределе $d \rightarrow \infty$ для значений U (сверху вниз): 1; 2.3; 2.7; 3; 4 [5].

стояний Х. м. с увеличением параметра U . При $U \geq 3$ появляется щель в спектре, отвечающая фазовому переходу. В отличие от результатов приближения «Хаббард-3» (рис. 1), появляется узкий квазичастичный пик на поверхности Ферми в металлич. фазе, соответствующий кондо-резонансу, с шириной порядка темп-ры Кондо T_K . Высота этого центр. пика не меняется с ростом U вплоть до критич. значения U_c , когда он исчезает скачком и открывается щель на поверхности Ферми. При $U > U_c$ в диэлектрич. фазе возникает антиферромагн. упорядочение с волновым вектором Q и локализованными магн. моментами. Металлич. фаза имеет ферми-жидкостное поведение с тяжёлыми фермионами, масса к-рых возрастает по мере приближения к границам диэлектрич. фазы. Ожидаемая фазовая диаграмма при половинном заполнении показана на рис. 3, где заштрихована грубо оценённая переходная

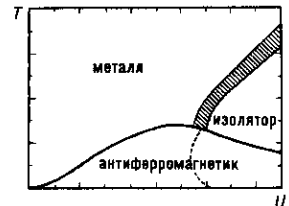


Рис. 3. Фазовая диаграмма при $n=1$ и $d \rightarrow \infty$ на плоскости (T, U) [6].

область от металла к изолятору, в к-рой нарушается ферми-жидкостная картина, т. е. исчезает скачок в n_K на поверхности Ферми.

При отклонении от половинного заполнения диэлектрич. фаза быстро заменяется металлической. В частности, на поверхности Ферми при низких темп-рах возникают узкие резонансы, соответствующие кондовской экранировке локализованных магн. моментов, и при $n < 0,8$ система ведёт себя как обычная ферми-жидкость. Возможная фазовая диаграмма на плоскости (n, U) показана на рис. 4.

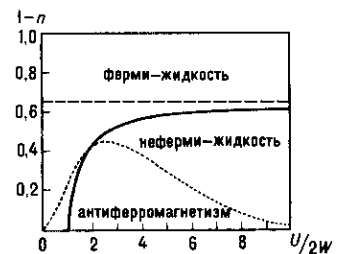


Рис. 4. Фазовая диаграмма при $T=0$ на плоскости (n, U) [7].