

СИНГЛЕТ-ТРИПЛЕТНЫЙ ГАМИЛЬТониАН ДЛЯ СПиНОВЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В КОНДО-ДИЭЛЕКТРИКЕ

А. Ф. Барабанов^{a,c*}, Л. А. Максимов^{b,c}

^a Институт физики высоких давлений Российской академии наук
142190, Троицк, Московская обл., Россия

^b Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия

^c Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 30 октября 2009 г.

В рамках несимметричного варианта периодической модели Андерсона для кондо-диэлектрика строится эффективный синглет-триплетный гамильтониан \hat{H}_{s-t} с косвенным антиферромагнитным f - f -обменом, который позволяет аналитически изучать динамическую магнитную восприимчивость $\chi_f(\mathbf{k}, \omega)$ f -электронов. В рамках гамильтониана \hat{H}_{s-t} описывается наблюдаемая в эксперименте дисперсия трехуровневого спектра спиновых возбуждений в YbV_{12} . Отличительной чертой рассмотрения является введение синглетных и триплетных коллективных f - d -возбуждений малого радиуса, которые при движении по решетке формируют низко- и высоколежащие спиновые зоны.

1. ВВЕДЕНИЕ

Кондо-диэлектрики представляют собой особый класс сильнокоррелированных систем. Для них характерны такие явления как промежуточная валентность, узкая щель (или псевдощель) в спектре носителей порядка 10 мэВ, которая открывается при низких температурах, необычный спектр спиновых флуктуаций (со спиновой щелью), синглетное основное состояние и ряд других интересных свойств (см. обзоры [1–7]). Теория кондо-диэлектриков базируется на периодической модели Андерсона (ПМА), которая описывает внутриузельное гибридационное взаимодействие \hat{V} между d -электронами и локализованными f -электронами с внутриузельным кулоновским f - f -отталкиванием U_f . Межузельному взаимодействию отвечает перескоковый гамильтониан \hat{t} для d -электронов.

Рассматривая низкотемпературные спиновые флуктуации, мы будем обсуждать такой характерный кондо-диэлектрик как YbV_{12} . При $T < 40$ К у YbV_{12} вблизи края спиновой щели формируются три дисперсионных возбуждения, $M1$, $M2$ и $M3$, со

средними энергиями соответственно 15, 20 и 40 мэВ (см. работу [8] и приведенные в ней ссылки). При этом релаксация низкоэнергетического возбуждения $M1$ подавлена, что позволяет рассматривать его как резонансное возбуждение. Пик $M1$ имеет дисперсию с минимумом, а $M3$ — с максимумом в L -точке, являющейся антиферромагнитной (АФМ) точкой для ГЦК-структуры YbV_{12} .

Приведем известные принятые подходы к трактовке магнитной восприимчивости $\chi(\mathbf{k}, \omega)$ кондо-диэлектрика YbV_{12} . Часто используют симметричный относительно электронов и дырок вариант ПМА с заполнением f -уровня $n_f = 1$ [1, 9] (однако этот подход не справедлив для смешанной валентности [10]). Иногда сильная корреляция f -электронов рассматривается в подходе, использующем вспомогательные бозоны с введением кристаллического поля [11–13]. И наконец, применяется модель, базирующаяся на основном диэлектрическом синглетном состоянии, для которого предполагается, что синглетные состояния f^{14} и $f^{13}d^1$ узлов Yb почти вырождены [14]. При этом большинство рассмотрений магнитной восприимчивости YbV_{12} носит качественный характер, исходит обычно из однопримесной задачи Андерсона, а межузельные АФМ f - f -корреляции возника-

*E-mail: abarabnov@mtu-net.ru

ют в высших порядках теории возмущения по \hat{V} и \hat{t} . В частности, насколько нам известно, явный вид дисперсии восприимчивости $\chi(\mathbf{k}, \omega)$ изучался только в работах [13, 15]. В них была найдена отвечающая эксперименту дисперсия нижних спиновых мод, однако отсутствовало объяснение высокоэнергетического пика $M3$.

В настоящей работе будем исследовать несимметричный вариант ПМА (НПМА) с двумя электронами на узел в режиме смешанной валентности $n_f \gtrsim 1$, предполагая, что он реализуется для YbB_{12} .

У магнитной системы в случае смешанной валентности фактически отсутствует малый параметр. Близкая ситуация реализуется в допированной плоскости CuO_2 , отвечающей ВТСП-купратам, где косвенный АФМ-обмен локализованных d -спинов порядка взаимодействия p -дырок со спиновой подсистемой. В этом случае известно, что для адекватного учета сильных корреляций при описании низкоэнергетических возбуждений сначала следует решить задачу для кластера малого радиуса, построить низколежащий по энергии полярон Занга–Райса (коллективное возбуждение малого радиуса) [16, 17] и только после этого рассматривать движение этого полярона по решетке.

Аналогично, для принятой модели будет показано, что наблюдаемый трехуровневый характер спиновых возбуждений можно описать, если с самого начала рассматривать задачу на языке одноузельных и двухузельных коллективных триплет-синглетных f - d -возбуждений (аналоги поляронов малого радиуса). Рассмотрение отличается от предыдущих тем, что $\chi(\mathbf{k}, \omega)$ определяется именно движением этих возбуждений на фоне синглетного диэлектрического состояния (движение происходит благодаря межузельному косвенному АФМ-обмену f -спинов).

Ниже будем интересоваться только восприимчивостью $\chi_f(\mathbf{k}, \omega)$ f -электронов, предполагая, что при низких температурах она является определяющей для полной восприимчивости $\chi(\mathbf{k}, \omega)$.

Чтобы понять природу двухузельных возбуждений, рассмотрим кластер, состоящий из двух узлов с одним f - и d -электроном на каждом узле. Для нахождения возбуждений кластера и дальнейшего отыскания восприимчивости $\chi_f(\mathbf{k}, \omega)$ бесконечной решетки вводится и обосновывается эффективный синглет-триплетный гамильтониан \hat{H}_{s-t} , отражающий основные свойства НПМА. Начальные предпосылки нашего подхода наиболее близки к феноменологическому рассмотрению $\chi(\mathbf{k}, \omega)$ в работе [14], однако в целом оно более реалистично и позволяет не только

объяснить наличие пиков $M1$, $M2$, $M3$, но и найти их спектр.

2. ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТониАН И ДВУХУЗЕЛЬНЫЙ КЛАСТЕР

Как показано в работе [15], для описания спиновой подсистемы кондо-диэлектрика с $n_f \gtrsim 1$ удобно использовать эффективный гамильтониан \hat{H}_J , который получается из гамильтониана ПМА заменой перескокового члена \hat{t} на АФМ косвенное обменное f - f -взаимодействие \hat{J} на ближайших узлах.

В стандартных обозначениях гамильтониан \hat{H}_J имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}_J &= \hat{H}_0 + \hat{J}, \\ \hat{J} &= \frac{1}{2} J \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{g}} \hat{\mathbf{S}}_{f, \mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{f, \mathbf{r}+\mathbf{g}}, \quad \hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{r}} \hat{H}_{0, \mathbf{r}}, \\ \hat{H}_{0, \mathbf{r}} &= \sum_{\sigma} \left[\varepsilon_f \hat{f}_{\mathbf{r}, \sigma}^{\dagger} \hat{f}_{\mathbf{r}, \sigma} + U_f \hat{f}_{\mathbf{r}, +}^{\dagger} \hat{f}_{\mathbf{r}, +} \hat{f}_{\mathbf{r}, -}^{\dagger} \hat{f}_{\mathbf{r}, -} \right] + \\ &\quad + \sum_{\sigma} \varepsilon_d \hat{d}_{\mathbf{r}, \sigma}^{\dagger} \hat{d}_{\mathbf{r}, \sigma} + \hat{V}_{\mathbf{r}}, \\ \hat{V}_{\mathbf{r}} &= V \sum_{\sigma} (\hat{f}_{\mathbf{r}, \sigma}^{\dagger} \hat{d}_{\mathbf{n}, \sigma} + \hat{d}_{\mathbf{r}, \sigma}^{\dagger} \hat{f}_{\mathbf{r}, \sigma}), \quad \sigma = \pm, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\hat{\mathbf{S}}$ — спиновые операторы, $\hat{f}^{\dagger}(\hat{d}^{\dagger})$ и $\hat{f}(\hat{d})$ — операторы рождения и уничтожения $f(d)$ -электронов, \mathbf{g} — вектор ближайших соседей, \mathbf{r} — номер узла. Здесь мы пренебрегаем орбитальным вырождением электронов. Амплитуда V отвечает гибридационному взаимодействию, ε_f и ε_d — положения f - и d -уровней (ниже положено $\varepsilon_d = 0$), J — константа АФМ f - f -обмена. Режиму смешанной валентности с $n_f \gtrsim 1$ отвечают следующие соотношения между энергетическими параметрами: $U_f + \varepsilon_f \approx V > 0$ и $V \ll U_f \approx -\varepsilon_f$.

Для обоснования вводимого ниже эффективно-го синглет-триплетного гамильтониана, который будет отличаться от (1) только видом внутриузельного члена, приведем для $\hat{H}_{0, \mathbf{r}}$ (1) полный набор собственных состояний с двумя электронами на узле.

При $T < V$ и принятых параметрах сразу можно опустить высокоэнергетическое состояние $2_{d\mathbf{r}} = \hat{d}_{\mathbf{r}, +}^{\dagger} \hat{d}_{\mathbf{r}, -}^{\dagger} |0\rangle$ ($|0\rangle$ — вакуумное состояние узла) с двумя частицами на d -уровне.

Имеются синглетное $\phi_{\mathbf{r}}$ и три триплетных $\psi_{i=0, \pm; \mathbf{r}}$ состояния с одним электроном соответственно на f - и d -уровнях. Без учета гибридизации состояния $\phi_{\mathbf{r}}$ и $\psi_{i=0, \pm; \mathbf{r}}$ вырождены (с энергией $\varepsilon_f < 0$) и имеют вид

$$\begin{aligned}\phi_{\mathbf{r}} &= \hat{\phi}_{\mathbf{r}}^{\dagger}|0\rangle, \quad \hat{\phi}_{\mathbf{r}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{f}_{\mathbf{r}+}^{\dagger}\hat{d}_{\mathbf{r}-}^{\dagger} - \hat{f}_{\mathbf{r}-}^{\dagger}\hat{d}_{\mathbf{r}+}^{\dagger}), \\ \psi_{\pm 1, \mathbf{r}} &= \hat{\psi}_{\pm 1, \mathbf{r}}^{\dagger}|0\rangle, \quad \hat{\psi}_{\pm 1, \mathbf{r}}^{\dagger} = \hat{f}_{\mathbf{r}, \pm}^{\dagger}\hat{d}_{\mathbf{r}, \pm}^{\dagger}, \\ \psi_{0, \mathbf{r}} &= \hat{\psi}_{0, \mathbf{r}}^{\dagger}|0\rangle, \quad \hat{\psi}_{0, \mathbf{r}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{f}_{\mathbf{r}, +}^{\dagger}\hat{d}_{\mathbf{r}, -}^{\dagger} + \hat{f}_{\mathbf{r}, -}^{\dagger}\hat{d}_{\mathbf{r}, +}^{\dagger}).\end{aligned}$$

Гибридизация с состоянием $2f_{\mathbf{r}} = \hat{2}_{f_{\mathbf{r}}}^{\dagger}|0\rangle$, $\hat{2}_{f_{\mathbf{r}}}^{\dagger} = \hat{f}_{\mathbf{r}, +}^{\dagger}\hat{f}_{\mathbf{r}, -}^{\dagger}|0\rangle$ с двумя электронами на f -уровне (с энергией $2\varepsilon_f + U_f$) снимает вырождение между синглетом $\phi_{\mathbf{r}}$ и тремя триплетами $\psi_{i=0, \pm; \mathbf{r}}$. Триплетные состояния не гибридизуются с состоянием $2f_{\mathbf{r}}$, обладающим другой симметрией. В результате гибридизации состояний $\phi_{\mathbf{r}}$ и $2f_{\mathbf{r}}$ возникают два синглетных состояния,

$$\varphi_{\mathbf{r}; \pm} = \hat{\varphi}_{\mathbf{r}; \pm}^{\dagger}|0\rangle, \quad \hat{\varphi}_{\mathbf{r}; \pm}^{\dagger} = A_{\pm}\hat{\phi}_{\mathbf{r}}^{\dagger} + B_{\pm}\hat{2}_{f_{\mathbf{r}}}^{\dagger},$$

с энергиями

$$E_{\varphi; \pm} = \frac{1}{2} \left\{ 3\varepsilon_f + U_f \pm \sqrt{(\varepsilon_f + U_f)^2 + 8V^2} \right\}.$$

При $U_f + \varepsilon_{fd} \approx V$ имеем

$$E_{\varphi} = E_{\varphi; -} \approx \varepsilon_f - V, \quad E_{\varphi; +} \approx \varepsilon_f + 2V, \quad E_{\psi} = \varepsilon_f.$$

Нижнее синглетное состояние $\varphi_{\mathbf{r}} \equiv \varphi_{\mathbf{r}; -} = A\hat{\phi}_{\mathbf{r}}^{\dagger}|0\rangle + B\hat{2}_{f_{\mathbf{r}}}^{\dagger}|0\rangle$ является основным. При рассмотрении синглет-триплетных переходов при $T < V$ верхнее синглетное состояние с $E_{\varphi; +}$ можно опустить.

Таким образом, в одноузельном гамильтониане роль гибридизации свелась к перенормировке энергии E_{φ} основного синглета $\varphi_{\mathbf{r}}$ относительно величины ε_f .

Вместо триплетных состояний $\psi_{i=0, \pm; \mathbf{r}}$ удобнее использовать базис [18]

$$w_z = \psi_0, \quad w_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{-1} - \psi_1), \quad w_y = \frac{i}{\sqrt{2}}(\psi_{-1} + \psi_1).$$

В рассматриваемых приближениях базис состояний операторов $\varphi_{\mathbf{r}}$, $w_{q, \mathbf{r}}$ ($q = x, y, z$) является полным одноузельным базисом и гамильтониан \hat{H}_0 (1) принимает диагональный вид $\hat{H}_{0, s-t}$. В результате гамильтониан \hat{H}_J трансформируется в синглет-триплетный гамильтониан \hat{H}_{s-t} :

$$\hat{H}_{s-t} = \hat{H}_{0, s-t} + \hat{J}, \quad \hat{H}_{0, s-t} = e \sum_{\mathbf{r}, q} \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{qq}. \quad (2)$$

Здесь и ниже $\hat{Z}_{\mathbf{r}}^{\lambda\lambda'}$ — проекционные операторы Хаббарда на соответствующие состояния λ , $\lambda' = \varphi, w_q$ (у \hat{Z} -операторов индексы $q = x, y, z$ отвечают w_q); $e = E_{\psi} - E_{\varphi}$, энергии будем отсчитывать от энергии

основного состояния E_{φ} , полагая $E_{\varphi} = 0$. При характерном значении $\varepsilon_f + U_f = 2V$ энергия триплетов равна $e = 0.7V$, а структура $\varphi_{\mathbf{r}} = A\phi_{\mathbf{r}} + B2f_{\mathbf{r}}$ отвечает значениям $A^2 \approx 0.8$, $B^2 \approx 0.2$. При $V \approx 30$ мэВ имеем $e \approx 20$, т.е. величина e близка к энергиям пиков $M1, M2$.

В базисе $\varphi_{\mathbf{r}}$, $w_{q, \mathbf{r}}$ узельные операторы f -спина $\hat{S}_{f_{\mathbf{r}}}^q$ ($q = x, y, z$) имеют вид

$$\hat{S}_{f_{\mathbf{r}}}^q = \frac{1}{2}(A\hat{Z}_{\mathbf{r}}^{\varphi q} + A\hat{Z}_{\mathbf{r}}^{q\varphi} + i\varepsilon_{qq'q''}\hat{Z}_{\mathbf{r}}^{q'q'}). \quad (3)$$

В дальнейшем в выражениях (3) для операторов спина f -электрона и в выражениях для матричных элементов обменного взаимодействия \hat{J} будем для простоты полагать коэффициент $A = 1$. Это означает, что мы не будем различать состояния $\varphi_{\mathbf{r}}$ и $\phi_{\mathbf{r}}$.

Чтобы понять необходимость рассмотрения двухузельных возбуждений (выход за одноузельное приближение), рассмотрим кластер, состоящий из двух узлов с одним f - и d -электроном на каждом узле. Формальный фурье-переход в \mathbf{k} -пространство в случае кластера дает представление о спектре возбуждений в двух точках, $\mathbf{k} = (0, 0)$ и $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$. В рамках гамильтониана $\hat{H}_{0, s-t}$ (2) собственные состояния кластера классифицируются фиксированными значениями $W = 0, 1, 2$ спина кластера.

Базис четырех одноузельных операторов $\hat{\phi}_{\mathbf{r}}^{\dagger}$, $\hat{w}_{q, \mathbf{r}}^{\dagger}$ приводит к шестнадцати собственным состояниям (соответствующие энергии обозначаем E^0) с фиксированным значением W .

Имеются два синглетных состояния, $\Phi_{\mathbf{n}, \mathbf{m}}$ и $X_{\mathbf{n}, \mathbf{m}}$:

$$\Phi_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} = \hat{\phi}_{\mathbf{n}}^{\dagger}\hat{\phi}_{\mathbf{m}}^{\dagger}|0\rangle, \quad X_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} = \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_q \hat{w}_{q, \mathbf{n}}^{\dagger}\hat{w}_{q, \mathbf{m}}^{\dagger}|0\rangle$$

(здесь $|0\rangle$ — вакуумное состояние кластера) отвечающие энергиям $E_{\Phi}^0 = 0$, $E_X^0 = 2e$.

Имеются шесть триплетных состояний:

$$\begin{aligned}B_1^q &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \hat{T}_{\mathbf{n}, \mathbf{m}})\hat{w}_{q, \mathbf{n}}^{\dagger}\hat{\phi}_{\mathbf{m}}^{\dagger}|0\rangle, \\ D_1^q &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \hat{T}_{\mathbf{n}, \mathbf{m}})\hat{w}_{q, \mathbf{n}}^{\dagger}\hat{\phi}_{\mathbf{m}}^{\dagger}|0\rangle.\end{aligned}$$

Здесь и ниже $\hat{T}_{\mathbf{n}, \mathbf{m}}$ — оператор перестановки узлов \mathbf{n}, \mathbf{m} . Состояния B_1^q и D_1^q обладают разной четностью T по отношению к перестановке узлов ($T_{B_1^q} = -1$, $T_{D_1^q} = 1$) и одинаковыми энергиями $E_{B_1^q(D_1^q)}^0 = e$.

Еще три триплетных состояния имеют вид

$$B_2^q = \frac{1}{\sqrt{2}}i\varepsilon_{qq'q''}w_{q', \mathbf{n}}^{\dagger}w_{q'', \mathbf{m}}^{\dagger}|0\rangle$$

с энергиями $E_{B_2^q}^0 = 2e$ и четностью $T_{B_2^q} = -1$.

И наконец, пять квинтетных состояний L^l , $l = 1, \dots, 5$ с полным спином $W = 2$, энергиями $E_{L^l}^0 = 2e$ и четностью $T = 1$. Соответствующие волновые функции имеют вид

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \hat{T}_{\mathbf{n},\mathbf{m}})w_{x,\mathbf{n}}^\dagger w_{y,\mathbf{m}}^\dagger, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \hat{T}_{\mathbf{n},\mathbf{m}})w_{y,\mathbf{n}}^\dagger w_{z,\mathbf{m}}^\dagger, \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \hat{T}_{\mathbf{n},\mathbf{m}})w_{z,\mathbf{n}}^\dagger w_{x,\mathbf{m}}^\dagger, \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}(w_{x,\mathbf{n}}^\dagger w_{z,\mathbf{m}}^\dagger - w_{y,\mathbf{n}}^\dagger w_{y,\mathbf{m}}^\dagger)|0\rangle, \\ & \frac{1}{\sqrt{6}}(w_{x,\mathbf{n}}^\dagger w_{x,\mathbf{m}}^\dagger + w_{y,\mathbf{n}}^\dagger w_{y,\mathbf{m}}^\dagger - 2w_{z,\mathbf{n}}^\dagger w_{z,\mathbf{m}}^\dagger)|0\rangle. \end{aligned}$$

Учет обменного взаимодействия \hat{J} (1) приводит, во-первых, к относительному сдвигу уровней состояний одного типа, но разной пространственной четности T . Например, триплетные состояния D_1^q с четностью $T_{D_1^q} = 1$ (которая при формальном переходе в фурье-представление отвечает точке $\mathbf{k} = (0, 0)$) и B_1^q с $T_{B_1^q} = -1$ (отвечает точке $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$) имеют соответственно энергии $e + J/4$ и $e - J/4$. Во-вторых, взаимодействие \hat{J} приводит к перепутыванию состояний с одинаковой спиновой симметрией и четностью T .

Матрица гамильтониана в базисе $\Phi_{\mathbf{n},\mathbf{m}}$, $X_{\mathbf{n},\mathbf{m}}$ определяет основное состояние кластера $\Psi_{\mathbf{n},\mathbf{m}}$. Оно в первую очередь формируется за счет синглетов $\Phi_{\mathbf{n},\mathbf{m}}$; это состояние факторизуется по узлам. К нему примешивается межузельное состояние $X_{\mathbf{n},\mathbf{m}}$ — когерентная суперпозиция произведения одноузельных триплетов — с амплитудой, пропорциональной J/e при малом J .

Главным результатом проведенной классификации является построение триплетного состояния B_2^q с $E_{B_2^q}^0 = 2e$. Оно допускает возможность синглет-триплетных возбуждений с энергиями $2e$. Ниже показывается, что именно движение этого двухузельного возбуждения может приводить к ветви спинового спектра, которая отвечает положению и дисперсии пика $M3$.

3. СПИНОВАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ f -ЭЛЕКТРОНОВ

Для описания реального спинового спектра следует перейти от задачи двухузельного кластера к рассмотрению бесконечной решетки с гамильтонианом \hat{H}_{s-t} (2). Восприимчивость $\chi_f(\mathbf{k}, \omega)$ дается двухвременной запаздывающей спиновой функцией Грина

$$G_f^z(\mathbf{k}, \omega) = \langle \hat{S}_{f,\mathbf{k}}^z | \hat{S}_{f,-\mathbf{k}}^z \rangle_\omega = -\chi_f(\mathbf{k}, \omega),$$

$$\hat{S}_{f,\mathbf{k}}^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{S}_{f,\mathbf{r}}^z.$$

В соединении YbB_{12} отсутствует дальний АФМ-порядок. Поэтому будем искать функцию $G_f^z(\mathbf{k}, \omega) = \langle \hat{S}_{f,\mathbf{k}}^z | \hat{S}_{f,-\mathbf{k}}^z \rangle_\omega$ с помощью сферически-симметричного подхода (ССП), близкого к подходу работы [19]. В рамках ССП $G_f^{x(y)}(\mathbf{k}, \omega) = G_f^z(\mathbf{k}, \omega)$ и равны нулю следующие средние: $\langle \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{\phi q} \rangle = 0$, $\langle \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{q' q''} \rangle = 0$ при $q' \neq q''$.

С учетом (3) узельное представление $\langle \hat{S}_{f,\mathbf{n}}^z | \hat{S}_{f,\mathbf{r}}^{+z} \rangle_\omega$ функции Грина $G_f^z(\mathbf{k}, \omega)$ распадается на сумму членов

$$\begin{aligned} & \langle \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi z} | \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{z\phi} \rangle_\omega, \quad \langle \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{z\phi} | \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{\phi z} \rangle_\omega, \quad \langle \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi z} | \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{\phi z} \rangle_\omega, \\ & \langle \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{z\phi} | \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{z\phi} \rangle_\omega, \quad \langle i\varepsilon_{zq'q''} \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{q''q'} | i\varepsilon_{zq_1q_2} \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{q_1q_2} \rangle_\omega, \\ & \langle \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi z} | i\varepsilon_{zq_1q_2} \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{q_1q_2} \hat{T}_{\mathbf{r}}^z \rangle_\omega, \quad \langle i\varepsilon_{zq'q''} \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{q''q'} | \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{z\phi} \rangle_\omega, \\ & \langle \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{z\phi} | i\varepsilon_{zq_1q_2} \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{q_1q_2} \rangle_\omega, \quad \langle i\varepsilon_{zq'q''} \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{q''q'} | \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{z\phi} \rangle_\omega. \end{aligned}$$

Рассмотрение кластера указывает на то, что основное состояние системы преимущественно формируется за счет одноузельных синглетов $\phi_{\mathbf{r}}$. Тогда спиновое возбуждение в первую очередь должно описываться одноузельным синглет-триплетным переходом с энергией e , т. е. оператором $\hat{Z}_{\mathbf{r}}^{\phi z}$. Поэтому ниже нас будет интересовать функция Грина $\hat{G}_{\mathbf{n}-\mathbf{r}}^z(\omega) = \langle \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi z} | \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{z\phi} \rangle_\omega$, которая, очевидно, имеет основной полюс вблизи $\omega \approx e$.

Уравнение для функции Грина $\langle \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi z} | \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{z\phi} \rangle_\omega$ имеет вид

$$(z - e) \langle \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi z} | \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{z\phi} \rangle_\omega = \delta_{\mathbf{n},\mathbf{r}} P_{\phi\omega} + \langle [\hat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi z}; \hat{J}] | \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{z\phi} \rangle_\omega, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} z &= \omega + i\delta, \quad P_{\phi\omega} = P_\phi - P_\omega, \\ P_\phi &= \langle \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{\phi\phi} \rangle, \quad P_\omega = \langle \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{q\omega} \rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

Выполняя в явном виде коммутацию $[\hat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi z}; \hat{J}]$ с учетом подстановки выражений (3) в обменное взаимодействие \hat{J} , получим для $\langle \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi z} | \rangle_\omega$ следующее выражение (здесь и в очевидных случаях у функции Грина опускаем индекс ω и оператор $\hat{Z}_{\mathbf{r}}^{\phi z}$ в правой обкладке):

$$\begin{aligned} (z - e) \langle \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi z} | \rangle_\omega &= \delta_{\mathbf{n},\mathbf{r}} P_{\phi\omega} + \frac{J}{8} \sum_{\mathbf{g}} \{ \langle \hat{R}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} | \rangle + \langle \hat{\Pi}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} | \rangle + \\ &+ \langle \hat{D}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} | \rangle + \langle \hat{L}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} | \rangle - \langle \hat{N}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} | \rangle + \\ &+ 2[\langle \hat{U}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}^\dagger | \rangle - \langle \hat{W}_{\mathbf{n}+\mathbf{g};-\mathbf{g}}^\dagger | \rangle] \}, \end{aligned} \quad (6)$$

где

$$\langle \hat{\Pi}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} | \rangle = \langle \hat{V}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} | \rangle - \langle \hat{W}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} | \rangle + 2(\langle \hat{U}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} | \rangle - \langle \hat{V}_{\mathbf{n};-\mathbf{g}} | \rangle),$$

$$\widehat{\Pi}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} = \widehat{V}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} - \widehat{W}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} + 2(\widehat{U}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} - \widehat{V}_{\mathbf{n};-\mathbf{g}}),$$

а для возникших после коммутации с \widehat{J} двухузельных операторов введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \widehat{U}_{\mathbf{m};\mathbf{g}} &= \widehat{Z}_{\mathbf{m}+\mathbf{g}}^{\phi z} \widehat{Z}_{\mathbf{m}}^{\phi\phi}, & \widehat{V}_{\mathbf{m};\mathbf{g}} &= \widehat{Z}_{\mathbf{m}+\mathbf{g}}^{dz} \widehat{Z}_{\mathbf{m}}^{\phi d}, \\ \widehat{W}_{\mathbf{m};\mathbf{g}} &= \widehat{Z}_{\mathbf{m}+\mathbf{g}}^{zd} \widehat{Z}_{\mathbf{m}}^{\phi d}, & \widehat{R}_{\mathbf{m};\mathbf{g}} &= i\varepsilon_{zuq} \widehat{Z}_{\mathbf{m}+\mathbf{g}}^{\phi u} \widehat{Z}_{\mathbf{m}}^{\phi q}, \\ \widehat{D}_{\mathbf{m};\mathbf{g}} &= i\varepsilon_{zuq} \widehat{Z}_{\mathbf{m}+\mathbf{g}}^{u\phi} \widehat{Z}_{\mathbf{m}}^{\phi q}, \\ \widehat{L}_{\mathbf{m};\mathbf{g}} &= i\varepsilon_{zuq} \widehat{Z}_{\mathbf{m}+\mathbf{g}}^{qu} \widehat{Z}_{\mathbf{m}}^{\phi\phi}, \\ \widehat{N}_{\mathbf{m};\mathbf{g}} &= i\varepsilon_{duq} \widehat{Z}_{\mathbf{m}+\mathbf{g}}^{qu} \widehat{Z}_{\mathbf{m}}^{dz}, \\ \widehat{\Pi}_{\mathbf{m};\mathbf{g}} &= \widehat{V}_{\mathbf{m};\mathbf{g}} - \widehat{W}_{\mathbf{m};\mathbf{g}} + 2(\widehat{U}_{\mathbf{m};\mathbf{g}} - \widehat{V}_{\mathbf{m}+\mathbf{g};-\mathbf{g}}). \end{aligned} \quad (7)$$

Функции Грина в правой части уравнения (6) имеют полюсы с энергиями $\omega \approx -e$ (операторы $\widehat{U}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}^\dagger$, $\widehat{W}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}^\dagger$), $\omega \approx 0$ (операторы $\widehat{D}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$, $\widehat{L}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$, $\widehat{N}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$), $\omega \approx e$ (операторы $\widehat{U}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$, $\widehat{V}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$, $\widehat{W}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$, $\widehat{V}_{\mathbf{n}+\mathbf{g};-\mathbf{g}}$, входящие в $\widehat{\Pi}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$) и $\omega \approx 2e$ (оператор $\widehat{R}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$). Остановимся на физическом смысле этих функций Грина.

Функции Грина с операторами $\widehat{D}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$, $\widehat{L}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$, $\widehat{N}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$ отвечают триплет-триплетным переходам на фоне синглетного состояния, должны приводить к квазиупругому пику, который мы не рассматриваем, и малы в интересующей нас области энергий $\omega \approx e, \dots, 2e$. По аналогичной причине можно опустить функции Грина $\langle \widehat{U}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}^\dagger | \rangle$, $\langle \widehat{W}_{\mathbf{n}+\mathbf{g};-\mathbf{g}}^\dagger | \rangle$.

В уравнении (6) оператору $\widehat{\Pi}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$ (7) отвечают возбуждения с энергией e (как и оператору $\widehat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi z}$). При этом входящие в функцию Грина $\langle \widehat{\Pi}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} | \rangle$ слагаемые $\langle \widehat{U}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} | \rangle$ и $\langle \widehat{V}_{\mathbf{n}+\mathbf{g};-\mathbf{g}} | \rangle$ описывают движение триплетного возбуждения с узла \mathbf{n} на соседний узел $\mathbf{n}+\mathbf{g}$. Операторы $\widehat{U}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$, $\widehat{V}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$, $\widehat{W}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$, $\widehat{V}_{\mathbf{n}+\mathbf{g};-\mathbf{g}}$ допускают выделение среднего поля. Это приводит к «замыканию» на функцию Грина $\langle \widehat{Z}_{\mathbf{i}}^{\phi z} | \rangle$:

$$\langle \widehat{\Pi}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} | \rangle \approx 2P_{\phi w} \langle \widehat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{\phi z} | \widehat{Z}_{\mathbf{r}}^z \rangle.$$

В этом приближении уравнение (6) принимает вид

$$(z - e) \langle \widehat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi z} | \rangle = \delta_{\mathbf{n},\mathbf{r}} P_{\phi w} + \frac{J}{8} \sum_{\mathbf{g}} \{ \langle \widehat{R}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} | \rangle + 2P_{\phi w} \langle \widehat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{\phi z} | \rangle \}. \quad (8)$$

На примере функции Грина $\langle \widehat{\Pi}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} | \rangle$ проясним, чему соответствует процедура выделения среднего поля относительно более строго проекционного подхода Мори [20], в рамках которого

$$\langle \widehat{\Pi}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} | \rangle \approx \sum_{\mathbf{m}} \frac{\langle [\widehat{\Pi}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}; \widehat{Z}_{\mathbf{m}}^{\phi\Phi}] \rangle}{P_{\phi w}} \langle \widehat{Z}_{\mathbf{m}}^{\phi z} | \widehat{Z}_{\mathbf{r}}^z \rangle.$$

В результате прямого вычисления $\langle [\widehat{\Pi}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}; \widehat{Z}_{\mathbf{m}}^{\phi\Phi}] \rangle$ сводится к корреляторам вида $\langle \widehat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{\phi\phi} \widehat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi\phi} \rangle$, $\langle \widehat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{zz} \widehat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi\phi} \rangle$, $\langle \widehat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{zz} \widehat{Z}_{\mathbf{n}}^{zz} \rangle$, $\langle \widehat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{\alpha z} \widehat{Z}_{\mathbf{n}}^{z\alpha} \rangle$, $\langle \widehat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{\alpha\phi} \widehat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi\alpha} \rangle$, которые не вычисляются через функцию Грина $\langle \widehat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{\phi z} | \widehat{Z}_{\mathbf{r}}^z \rangle$. Для их вычисления можно либо провести расщепление на уровне корреляторов, либо находить их путем усреднения в рамках двухузельного кластера. В первом случае выражение для $\langle [\widehat{\Pi}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}; \widehat{Z}_{\mathbf{m}}^{\phi\Phi}] \rangle$ сводится к $\delta_{\mathbf{m},\mathbf{n}+\mathbf{g}} P_{\phi w}^2$, так что мы точно возвращаемся к результату среднего поля. Второй подход (кластерное усреднение) приводит к близкому результату при условии, что $(J/e)^2 \ll 1$, $T/e \ll 1$.

Переход в (8) к импульсному представлению дает

$$\left[z - e - \frac{J}{4} P_{\phi w} z_l g_{\mathbf{k}} \right] \widetilde{G}_{\mathbf{k}}^z(\omega) = P_{\phi w} + \frac{J}{8} \sum_{\mathbf{g}} \langle \widehat{R}_{\mathbf{k};\mathbf{g}} | \rangle, \quad (9)$$

$$\widetilde{G}_{\mathbf{k}}^z(\omega) = \langle \widehat{Z}_{\mathbf{k}}^{\phi z} | \widehat{Z}_{-\mathbf{k}}^z \rangle,$$

где z_l — число ближайших соседей, $g_{\mathbf{k}} = z_l^{-1} \sum_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{g}}$. Для соединения YbB₁₂, обладающего ГЦК-решеткой, имеем

$$z_l = 12,$$

$$g_{\mathbf{k}} = \frac{1}{3} [\cos k_x \cos k_y + \cos k_y \cos k_z + \cos k_z \cos k_x],$$

АФМ-вектором является вектор $\mathbf{Q} = (\pi/2)[1; 1; 1]$.

Если в уравнении (9) опустить функцию Грина $\langle \widehat{R}_{\mathbf{k};\mathbf{g}} | \rangle$, то оно будет описывать спектр спиновых возбуждений

$$E_{\mathbf{k};1}^0 = e + \frac{J}{4} P_{\phi w} z_l g_{\mathbf{k}}$$

со щелью, даваемой величиной e , и дисперсией $(J/4)P_{\phi w} z_l g_{\mathbf{k}}$. Дисперсионная часть имеет минимум на АФМ-векторе \mathbf{Q} , как и наблюдается в эксперименте для ветви $M1$.

Если же в уравнении (6) опустить функцию Грина $\langle \widehat{R}_{\mathbf{k};\mathbf{g}} | \rangle$, но не ограничиваться среднеполевым приближением для операторов

$$\widehat{U}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} = \widehat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{\phi z} \widehat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi\phi}, \quad \widehat{V}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} = \widehat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{dz} \widehat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi d},$$

$$\widehat{W}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} = \widehat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{zd} \widehat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi d},$$

то для функций Грина с этими операторами следует учесть соответствующие уравнения движения, которые мы не представляем из-за громоздкости. Можно убедиться, что решение этих уравнений совместно с (6) приведет к дополнительным ветвям спектра вблизи полюса $z \approx e$. Это эффективно отвечает уширению пика $M1$ с некоторой структурой на энергетическом масштабе J . Последнее можно трактовать как аналог пика $M2$.

Учет члена $\langle \hat{R}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} \rangle$ в уравнениях (6) и (9) принципиально важен, так как оператор $\hat{R}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} = i\varepsilon_{zuv} \hat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{\phi u} \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi v}$ отвечает переходу между синглетным двухузельным состоянием $\Phi_{\mathbf{n},\mathbf{m}}$ и триплетным состоянием B_2^g . Эти переходы приводят к возникновению у $\langle \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi z} | \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{z\phi} \rangle$ полюса вблизи энергии $2e$, которая близка к энергии 40 мэВ пика $M3$ (при $e \approx 20$ мэВ).

Уравнение для $\langle \hat{R}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} \rangle$ имеет вид

$$\begin{aligned} (z - 2e) \sum_{\mathbf{g}} \langle \hat{R}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} \rangle &= K_{\hat{R}_{\mathbf{n}}; \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{z\phi}} + \\ &+ \sum_{\mathbf{g}} \left\{ \frac{J}{4} \left\{ 2(\langle \hat{U}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} \rangle - \langle \hat{U}_{\mathbf{n}} \rangle) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \langle \hat{R}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} \rangle - \langle \hat{M}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} \rangle \right\} + 4J \times \right. \\ &\quad \times \left\{ \sum_{\mathbf{b}} \bar{\Delta}_{\mathbf{b};\mathbf{g}} \left[-C_{ZZ,g}^x \langle \hat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{b}}^{\phi z} \rangle + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + C_{ZZ,|\mathbf{g}-\mathbf{b}|}^x \langle \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi z} \rangle \right] + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\mathbf{b}} \bar{\Delta}_{\mathbf{b};\bar{\mathbf{g}}} \left[C_{ZZ,g}^x \langle \hat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}+\mathbf{b}}^{\phi z} \rangle - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - C_{ZZ,|\mathbf{g}+\mathbf{b}|}^x \langle \hat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{\phi z} \rangle \right] \right\}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$K_{\hat{R}_{\mathbf{n}}; \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{z\phi}} = \sum_{\mathbf{g}} \langle [\hat{R}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}; \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{z\phi}] \rangle,$$

$$C_{ZZ,l}^x = \langle \hat{Z}_{\mathbf{n}+1}^{\phi x} \hat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi x} \rangle,$$

$$\bar{\Delta}_{\mathbf{b};\bar{\mathbf{g}}} = 1 - \Delta_{\mathbf{b};\mathbf{g}}, \quad \bar{\mathbf{g}} = -\mathbf{g}.$$

В правой части уравнения (10) опущены функции Грина с трехузельными операторами, которые не допускают замыкания на операторы $\hat{Z}_{\mathbf{m}}^{\phi z}$, $\hat{R}_{\mathbf{m};\mathbf{g}}$ при выделении средних. Легко видеть, что корреляционная функция $K_{\hat{R}_{\mathbf{n}}; \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{z\phi}}$ обращается в нуль, если ее находить по основному состоянию двухузельного кластера $\Psi_{\mathbf{n},\mathbf{m}}$. После простейшего выделения средних у функций Грина в правой части уравнения (10) и перехода в \mathbf{k} -представление имеем

$$(z - 2e + \frac{J}{4}) \sum_{\mathbf{g}} \langle \hat{R}_{\mathbf{k};\mathbf{g}} \rangle = JP_{\phi} z_l (1 - g_{\mathbf{k}}) \tilde{G}_{\mathbf{k}}. \quad (11)$$

Уравнения (9) и (11) дают окончательное выражение для $\tilde{G}_{\mathbf{k}}$:

$$\begin{aligned} [(z - E_{\mathbf{k};1}^0)(z - E_2^0) - V_{\mathbf{k}}^2] \tilde{G}_{\mathbf{k}} &= \\ &= (z - E_2^0) P_{\phi w}, \quad z = \omega + i\delta, \\ E_{\mathbf{k};1}^0 &= e + \frac{J}{4} P_{\phi w} z_l g_{\mathbf{k}}, \quad E_2^0 = 2e - \frac{J}{4}, \\ V_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{J^2}{16} P_{\phi} z_l (1 - g_{\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (12)$$

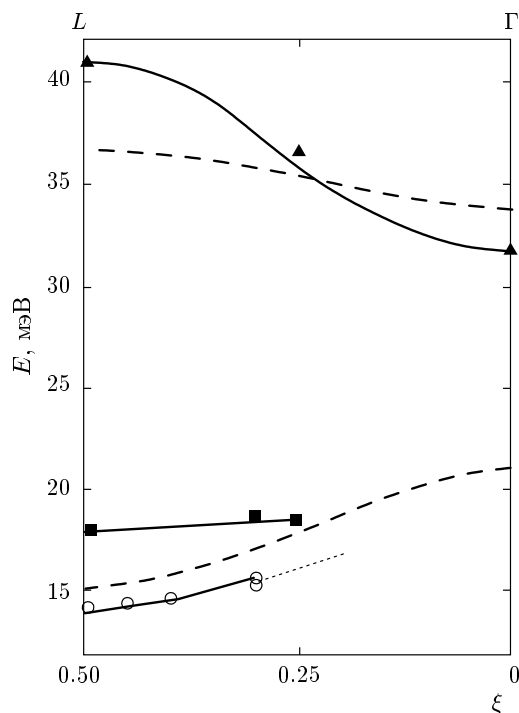
Выражение (12) для $\tilde{G}_{\mathbf{k}}$ описывает две зоны триплетных возбуждений:

$$E_{\mathbf{k};\pm} = \frac{1}{2} \left\{ (E_{\mathbf{k};1}^0 + E_2^0) \pm \sqrt{(E_{\mathbf{k};1}^0 - E_2^0)^2 + 4V_{\mathbf{k}}^2} \right\}.$$

Нижняя ветвь $E_{\mathbf{k};-}$ (аналог ветви $M1$) находится вблизи e и имеет дисперсию с минимумом на АФМ-векторе \mathbf{Q} . В АФМ-точке $\mathbf{k} = \mathbf{Q}$ эффективная гибридизация $V_{\mathbf{k}}^2$ (12) максимальна. Поэтому уровень E_2^0 , гибридизуясь с $E_{\mathbf{k};1}^0$, дает спектр верхней ветви $E_{\mathbf{k};+}$ (аналог ветви $M3$) с максимумом в точке \mathbf{Q} (как это наблюдается для дисперсии пика $M3$). Наше рассмотрение показывает, что если в системе существует нижняя зона в окрестности e , то с необходимостью должна существовать зона в окрестности $2e$. С повышением температуры величина $\chi_f(\mathbf{k}, \omega)$ уменьшается благодаря фактору $P_{\phi w} = \langle \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{\phi\phi} \rangle - \langle \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{qq} \rangle$: при росте T заселенность $\langle \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{\phi\phi} \rangle$ уменьшается, а $\langle \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{qq} \rangle$ увеличивается. В пределе $T \gg e$ интенсивность стремится к нулю, так как заселенность одноузельных синглетного и триплетных уровней стремится к одному значению $1/4$. При этом, очевидно, должна возрастать интенсивность квазилокального пика, которая определяется не учитываемыми нами триплет-триплетными переходами.

На рисунке приведен экспериментально наблюдаемый трехуровневый спектр спиновых возбуждений при $T = 5$ К [8] вдоль направления $\mathbf{k} = [\xi, \xi, \xi]$, точка L отвечает АФМ-вектору \mathbf{Q} , Γ — центр зоны Бриллюэна. Там же двумя штриховыми кривыми представлен теоретический спектр, отвечающий решениям $E_{\mathbf{k};\pm}$ уравнения (12) при принятых значениях $e = 18$ мэВ, $J = 8$ мэВ, $P_{\phi w} \approx P_{\phi} = 1$. Как видно из рисунка, решения $E_{\mathbf{k};\pm}$ правильно отражают положения и характер дисперсии пиков $M1$ и $M3$. Что касается почти бездисперсионного пика $M2$ (квадраты на рисунке), его положение относительно $M1$ укладывается в масштаб $J = 8$ и качественно, как отмечалось выше, пик $M2$ должен описываться выходящим за рамки приближения среднего поля учетом функции Грина с операторами $\hat{U}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$, $\hat{V}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$, $\hat{W}_{\mathbf{n};\mathbf{g}}$ в (6). Аналитически ясно, что подобный учет приводит в первую очередь к расщеплению нижней штриховой ветви $E_{\mathbf{k};-}$ в масштабе J . Корректный учет этого расщепления требует численных подходов и выходит за пределы настоящей работы.

Таким образом, наше рассмотрение позволяет отразить основные особенности динамического магнитного отклика кондо-диэлектрика YbV_{12} [8], в первую очередь трехуровневый характер возбуждений со специфической дисперсией. В заключение



Экспериментально наблюдаемый для YbV_{12} трехуровневый (треугольники, квадраты и кружки) спектр спиновых возбуждений при $T = 5 \text{ K}$ [8] вдоль направления $\mathbf{k} = [\xi, \xi, \xi]$ (точка L соответствует АФМ-вектору \mathbf{Q}). Штриховые кривые отвечают теоретическому спектру, т.е. решениям $E_{\mathbf{k},\pm}$ уравнения (12), при значениях параметров $e = 18 \text{ meV}$, $J = 8 \text{ meV}$, $P_{\phi w} \approx P_{\phi} = 1$

отметим, что наше описание дисперсии нижнего пика $M1$ в работе [15] близко к настоящему, но в нем не учитывались сугубо двухузельные триплетные возбуждения $\hat{R}_{\mathbf{n};\mathbf{g}} = i\varepsilon_{zuv}\hat{Z}_{\mathbf{n}+\mathbf{g}}^{\phi u}\hat{Z}_{\mathbf{n}}^{\phi v}$, без которых невозможно объяснить природу пика $M3$.

Авторы благодарны П. А. Алексею и К. С. Немковскому за полезные обсуждения. Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 10-02-00614-а).

ЛИТЕРАТУРА

1. N. Grewe and F. Steglich, in *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths*, Vol. 14, ed. by K. G. Schneider Jr. and L. L. Eyring, Elsevier, Amsterdam (1991), p. 343.

2. A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1993).

3. G. Aeppli and Z. Fisk, *Comm. Condens. Matter Phys.* **16**, 155 (1992).

4. Z. Fisk, J. Sarrao, S. Cooper et al., *Physica B* **223–224**, 409 (1996).

5. T. Takabatake, F. Iga, N. Yoshina et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **177–181**, 277 (1998).

6. L. Degiorgi, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 687 (1999).

7. P. S. Riseborough, *Adv. Phys.* **49**, 257 (2000).

8. K. S. Nemkovski, J.-M. Mignot, and P. A. Alekseev, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 137204 (2007).

9. N. S. Vidhyadhiraja, V. E. Smith, D. E. Logan et al., *Eur. Phys. J. B* **32**, 49 (2003).

10. A. Gilbert, N. S. Vidhyadhiraja, and D. E. Logan, arXiv:0711.0121v1.

11. P. S. Riseborough, *Phys. Rev. B* **68**, 235213 (2003); *J. Magn. Magn. Mater.* **226–230**, 127 (2001).

12. P. A. Alekseev, J.-M. Mignot, and K. S. Nemkovski, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, 2631 (2004).

13. A. Akbari, P. Thalmeier, and P. Fulde, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 106402 (2009).

14. S. H. Liu, *Phys. Rev. B* **63**, 115108 (2001); **64**, 184108 (2001).

15. A. F. Varabanov and L. A. Maksimov, *Phys. Lett. A* **373**, 1787 (2009); А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, *ЖЭТФ* **136**, 110 (2009).

16. F. C. Zhang and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **37**, 3759 (1988).

17. L. A. Maksimov, R. Hayn, and A. F. Varabanov, *Phys. Lett. A* **238**, 288, (1998); А. Ф. Барабанов, А. М. Белемук, *Письма в ЖЭТФ* **87**, 725 (2008).

18. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989), с. 259.

19. H. Shimahara and S. Takada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **60**, 2394 (1991).

20. H. Mori, *Progr. Theor. Phys.* **33**, 423 (1965); **34**, 399 (1965).