

# НЕСИММЕТРИЧНАЯ РЕГУЛЯРНАЯ МОДЕЛЬ АНДЕРСОНА И СПИНОВЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В КОНДО-ИЗОЛЯТОРЕ $\text{YbV}_{12}$

А. Ф. Барабанов<sup>a,c\*</sup>, Л. А. Максимов<sup>b,c</sup>

<sup>a</sup> Институт физики высоких давлений Российской академии наук  
142190, Троицк, Московская обл., Россия

<sup>b</sup> Российский научный центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия

<sup>c</sup> Московский физико-технический институт  
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 27 февраля 2009 г.

На примере кластерной задачи показано, что наблюдаемый трехуровневый характер триплетных спиновых возбуждений в  $\text{YbV}_{12}$  можно описать в рамках несимметричной модели Андерсона на фоне синглетного диэлектрического основного состояния. В случае бесконечной системы для трактовки поведения спиновой подсистемы  $f$ -электронов обосновывается использование эффективного гамильтониана  $\hat{H}_J$  с прямым антиферромагнитным обменным  $f$ - $f$ -взаимодействием. Показано, что спектр спиновых возбуждений имеет минимум на антиферромагнитном векторе, как и наблюдается в эксперименте. Отличительной чертой рассмотрения является использование синглетных и триплетных базисных операторов.

PACS: 71.28.+d, 71.27.+a, 75.30.Mb

## 1. ВВЕДЕНИЕ И МОДЕЛЬ

Известно, что кондо-диэлектрики — сильнокоррелированные системы на основе редкоземельных элементов — демонстрируют такие явления, как промежуточная валентность, узкая щель (или псевдощель) в спектре носителей заряда, необычный спектр спиновых флуктуаций (со спиновой щелью) и ряд других интересных свойств (см. обзоры [1–7]). Теория кондо-диэлектриков в последнее время базируется на периодической модели Андерсона. При этом в большинстве работ вплоть до последнего времени обычно использовался либо симметричный предел модели ( $n_f = n_d = 1$ ,  $n_f$  и  $n_d$  — соответственно заполнения  $f$ -уровня и  $d$ -электронов проводимости) [1, 8], либо случай бесконечного внутриузельного кулоновского  $f$ - $f$ -отталкивания  $U_f = \infty$  [9]. Оба эти случая приводят к заполнению  $n_f \approx 1$ , которое несправедливо в режиме сильносмешанной валентности [10]. Рассмотрение обычно исходит из однопримесной задачи Андерсона, и антиферромаг-

нитные (АФМ) корреляции между локализованными электронами возникают в высших порядках теории возмущений по гибридационному взаимодействию  $\hat{V}$  и перескоковому взаимодействию  $\hat{t}$ .

В отличие от упомянутых моделей, мы будем исследовать несимметричный вариант периодической модели Андерсона с двумя электронами на узел. При этом мы интересуемся режимом смешанной валентности с  $1 < n_f < 2$ , предполагая, что он реализуется для  $\text{YbV}_{12}$  — единственного кондо-диэлектрика на основе иттербия (который часто рассматривают как дырочный аналог цериевых кондо-диэлектриков). Модель содержит следующие основные параметры:  $U_f$  — внутриузельное отталкивание  $f$ -электронов ( $U_f \approx 0.5$ – $1.5$  эВ),  $V$  и  $t$  — амплитуды  $f$ - $d$ -гибридации и межузельного  $d$ - $d$ -перескока,  $\varepsilon_f$  и  $\varepsilon_d$  — положения  $f$ - и  $d$ -уровней, ниже положено  $\varepsilon_d = 0$ . Режиму смешанной валентности отвечают следующие соотношения между параметрами:

$$|U_f + \varepsilon_f| \approx V \approx t, \quad V, t \ll U_f \approx -\varepsilon_f.$$

Это означает, что в системе фактически отсутству-

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

ет малый параметр. Близкая ситуация реализуется в модели плоскости  $\text{CuO}_2$ , отвечающей купратам с высокотемпературной сверхпроводимостью. Для последних известно, что для адекватного учета сильных корреляций и описания низкоэнергетических возбуждений сначала следует решить задачу для кластера малого радиуса, построить низколежащий по энергии полярон Занга–Райса [11] (см. также работы [12]) и только после этого рассматривать движение этого полярона по решетке. Аналогично, ограничиваясь для принятой модели минимальным кластером из двух узлов, мы будем рассматривать систему коллективных состояний, определяющих магнитные переходы.

При низких температурах ( $T < 40$  К) динамический магнитный отклик  $\text{YbB}_{12}$  вблизи края спиновой щели формируется тремя дисперсионными возбуждениями,  $M1$ ,  $M2$  и  $M3$ , со средними энергиями 15, 20 и 40 мэВ (см. работу [13] и ссылки в ней). При этом релаксация низкоэнергетического возбуждения  $M1$  подавлена, что позволяет рассматривать его как резонансное возбуждение. Это возбуждение иногда трактуется как спиновый экситон, формирующийся внутри спиновой щели вследствие спиновых АФМ-корреляций между ионами иттербия [9, 14]. Отметим, что пик  $M1$  имеет дисперсию с минимумом в  $L$ -точке, являющейся АФМ-точкой для ГЦК-структуры  $\text{YbB}_{12}$ .

В данной работе показано, что наблюдаемый трехуровневый характер спиновых возбуждений в  $\text{YbB}_{12}$  можно описать в рамках несимметричной модели Андерсона с двумя электронами на узел в синглетном и триплетном состояниях на фоне синглетного диэлектрического основного состояния. Для этого строятся кластерные состояния (аналоги поляронов малого радиуса) и находится система синглетных и триплетных уровней.

Дисперсия интенсивности неупругого рассеяния нейтронов непосредственно связана с магнитной восприимчивостью, которая формируется как  $f$ -, так и  $d$ -электронами. Мы будем считать, что определяющей является восприимчивость  $\chi_f(\mathbf{q}, \omega)$   $f$ -электронов, даваемая двухвременной запаздывающей спиновой функцией Грина

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

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

Для вычисления  $G^z(\mathbf{q}, \omega)$  и нижней ветви спиновых волн будет введен эффективный гамильтониан  $\hat{H}_J$  с прямым обменным АФМ  $f$ - $f$ -взаимодействием

$\hat{J}$ , параметры которого находятся из сравнения с результатами кластерного расчета на основе двухузельной модели Андерсона. Показывается, что нижняя ветвь спиновых возбуждений (аналог  $M1$ ) имеет минимум дисперсии в АФМ-точке. Наше рассмотрение наиболее близко к феноменологическому рассмотрению восприимчивости [15], однако отличается тем, что носит более реалистический характер и позволяет найти спектр спиновых возбуждений.

## 2. СПИНОВЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В КЛАСТЕРНОМ ПОДХОДЕ

В стандартных обозначениях гамильтониан перидической модели Андерсона имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}_t &= \hat{H}_0 + \hat{t}, \quad \hat{H}_0 = \hat{H}_{00} + \hat{V}, \\ \hat{H}_{00} &= \\ &= \sum_{\mathbf{n}} \left\{ \left[ \sum_{\sigma} \varepsilon_f \hat{f}_{\sigma,\mathbf{n}}^+ \hat{f}_{\sigma,\mathbf{n}} + U_f \hat{f}_{+,\mathbf{n}}^+ \hat{f}_{+,\mathbf{n}} \hat{f}_{-,\mathbf{n}}^+ \hat{f}_{-,\mathbf{n}} \right] + \right. \\ &+ \left. \left[ \sum_{\sigma} \varepsilon_d \hat{d}_{\sigma,\mathbf{n}}^+ \hat{d}_{\sigma,\mathbf{n}} + U_d \hat{d}_{+,\mathbf{n}}^+ \hat{d}_{+,\mathbf{n}} \hat{d}_{-,\mathbf{n}}^+ \hat{d}_{-,\mathbf{n}} \right] \right\}, \quad (1) \\ \hat{V} &= V \sum_{\mathbf{n},\sigma} (\hat{f}_{\sigma,\mathbf{n}}^+ \hat{d}_{\sigma,\mathbf{n}} + \hat{d}_{\sigma,\mathbf{n}}^+ \hat{f}_{\sigma,\mathbf{n}}), \\ \hat{t} &= t \sum_{\mathbf{n},\mathbf{g},\sigma} \hat{d}_{\sigma,\mathbf{n}+\mathbf{g}}^+ \hat{d}_{\sigma,\mathbf{n}}, \quad \sigma = \pm, \end{aligned}$$

где  $\mathbf{g}$  — вектор ближайших соседей; здесь мы пренебрегаем орбитальным вырождением электронов, но учитываем внутриузельное отталкивание  $U_d$   $d$ -электронов [15].

Рассмотрим в рамках гамильтониана (1) двухузельную задачу (узлы  $\mathbf{i}$  и  $\mathbf{j}$ ) в случае, когда на два узла приходится четыре электрона, которые образуют две пары синглетных состояний.

Введем обозначение  $\hat{\phi}_{a',\mathbf{n};a'',\mathbf{m}}^+$  для оператора рождения парного синглетного состояния, где  $a'$ ,  $a''$  есть  $f$  или  $d$ ,  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{m}$  есть  $\mathbf{i}$  или  $\mathbf{j}$  и при этом  $(a', \mathbf{n}) \neq (a'', \mathbf{m})$ , и обозначение  $\hat{2}_{a',\mathbf{m}}^+$  для оператора рождения синглета с двумя электронами на уровне:

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_{a',\mathbf{n};a'',\mathbf{m}}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_{\mathbf{n}+}^{'+} \hat{a}_{\mathbf{m}-}^{''+} + \hat{a}_{\mathbf{m}+}^{''+} \hat{a}_{\mathbf{n}-}^{'+}), \\ \hat{2}_{a',\mathbf{m}}^+ &= \hat{a}_{\mathbf{m}+}^{'+} \hat{a}_{\mathbf{m}-}^{'+}. \end{aligned} \quad (2)$$

Будем считать, что самыми большими параметрами задачи являются  $\varepsilon_f < 0$  и  $U_f \approx -\varepsilon_f > 0$ . В масштабе энергий  $U_f \approx -\varepsilon_f$  значения энергий состояний кластера с одним (или двумя) незаполненным  $f$ -уровнем отстоят от остальных на величину порядка  $U_f$ . Ниже будем опускать такие высоколежащие

по энергии состояния. Набор остальных девяти синглетных состояний (с энергией порядка  $2\varepsilon_f$ ) имеет вид

$$\begin{aligned}
 C_1 = \widehat{2}_{fi}^+ \widehat{2}_{fj}^+ |0\rangle &= \begin{vmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{2f} & \mathbf{2f} \end{vmatrix}, \\
 C_2 = \widehat{2}_{fi}^+ \widehat{\phi}_{fj,dj}^+ |0\rangle &= \begin{vmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1d} \\ \mathbf{2f} & \mathbf{1f} \end{vmatrix}, \\
 C_3 = \widehat{\phi}_{fi,di}^+ \widehat{2}_{fj}^+ |0\rangle &= \begin{vmatrix} \mathbf{1d} & \mathbf{0} \\ \mathbf{1f} & \mathbf{2f} \end{vmatrix}, \\
 C_4 = \widehat{\phi}_{fi,di}^+ \widehat{\phi}_{fj,dj}^+ |0\rangle &= \begin{vmatrix} \mathbf{1d} & \mathbf{1d} \\ \mathbf{1f} & \mathbf{1f} \end{vmatrix}, \\
 C_5 = \widehat{\phi}_{fi,fj}^+ \widehat{\phi}_{di,dj}^+ |0\rangle &= \begin{vmatrix} \mathbf{1d} & -\mathbf{1d} \\ \mathbf{1f} & -\mathbf{1f} \end{vmatrix}, \\
 C_6 = \widehat{\phi}_{fi,fj}^+ \widehat{2}_{di}^+ |0\rangle &= \begin{vmatrix} \mathbf{2d} & \mathbf{0} \\ \mathbf{1f} & -\mathbf{1f} \end{vmatrix}, \\
 C_7 = \widehat{\phi}_{fi,fj}^+ \widehat{2}_{dj}^+ |0\rangle &= \begin{vmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{2d} \\ \mathbf{1f} & -\mathbf{1f} \end{vmatrix}, \\
 C_8 = \widehat{2}_{fi}^+ \widehat{\phi}_{di,fj}^+ |0\rangle &= \begin{vmatrix} \mathbf{1d} & \mathbf{0} \\ \mathbf{2f} & \mathbf{1f} \end{vmatrix}, \\
 C_9 = \widehat{2}_{fj}^+ \widehat{\phi}_{fi,dj}^+ |0\rangle &= \begin{vmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1d} \\ \mathbf{1f} & \mathbf{2f} \end{vmatrix},
 \end{aligned} \tag{3}$$

где  $|0\rangle$  — вакуумное состояние кластера. Здесь и ниже в графическом представлении состояний верхние и нижние строки отвечают заполнениям соответственно  $d$  и  $f$  уровней на узлах  $\mathbf{i}$  (первый столбец) и  $\mathbf{j}$  (второй столбец), синглетная связь между уровнями указана прямой.

Состояния  $C_{1-9}$  (3) нормированны, при этом неортогональны только синглеты  $C_4$  и  $C_5$ :  $\langle C_5^+ C_4 \rangle = -1/2$ . Состояния, содержащие синглетный оператор

$$\widehat{\phi}_{fi,fj}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \widehat{f}_{+,i}^+ \widehat{f}_{-,j}^+ + \widehat{f}_{+,j}^+ \widehat{f}_{-,i}^+ \right),$$

явным образом описывают межузельные АФМ-корреляции  $f$ -электронов.

Для отыскания собственных функций и собственных значений гамильтониана (1) следует перейти от состояний  $C_{1-9}$  к ортонормированным четным по пе-

рестановкам узлов  $\mathbf{i}$  и  $\mathbf{j}$  состояниям  $S_1-S_6$ , и нечетным состояниям  $S_7-S_9$ . В их представлении матрица гамильтониана распадается на матрицу  $6 \times 6$  и матрицу  $3 \times 3$ . Эти состояния имеют вид

$$\begin{aligned}
 S_1 = C_1, \quad S_2 = \widehat{P}_+ C_2, \quad S_3 = C_4, \\
 S_4 = \widehat{P}_+ C_8, \quad S_5 = \widehat{P}_+ C_6, \\
 S_6 = \frac{2}{\sqrt{3}} \left( C_5 + \frac{1}{2} C_4 \right),
 \end{aligned} \tag{4}$$

и

$$S_7 M_1 = \widehat{P}_- C_2, \quad S_8 = \widehat{P}_- C_8, \quad S_9 = \widehat{P}_- C_6, \tag{5}$$

где

$$\widehat{P}_\chi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( 1 + \chi \widehat{P}_{i,j} \right),$$

$\chi = \pm 1$  — четность по отношению к оператору перестановки узлов  $\widehat{P}_{i,j}$  (например,  $S_2 = \widehat{P}_+ C_2 = (C_2 + C_3)/\sqrt{2}$ ). Явный вид матриц  $6 \times 6$  и  $3 \times 3$  гамильтониана (1) в представлении (4), (5) приведен в Приложении.

Диагонализация гамильтониана (1) в базе (3) приводит к девяти синглетным состояниям  $\Psi_{(1-9)}^{sg}$  с энергиями  $E_{(1-9)}^{sg}$ .

Будем интересоваться структурой основного синглета  $\Psi_0 = \Psi_{(1)}^{sg}$ ,  $E_0 = E_{(1)}^{sg}$ . Можно убедиться, что другие синглетные состояния лежат существенно выше  $E_0$ , при достаточно низких температурах они не заполнены и переходы из них несущественны.

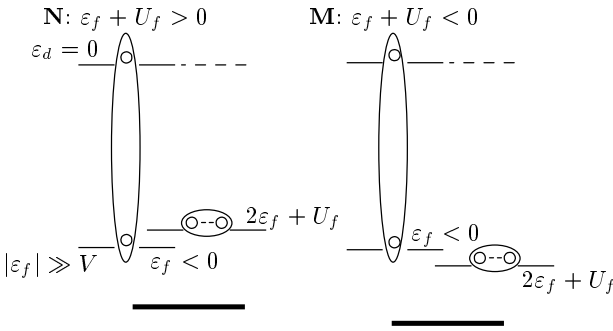
Основное состояние  $\Psi_0$  принадлежит сектору  $6 \times 6$ ,

$$\Psi_0 = \sum_{i=1-6} a_i S_i.$$

Считаем, что определяющими свойствами  $\Psi_0$  являются величина  $n_f$  и спиновая межузельная корреляционная функция  $K_{\mathbf{g}} = \langle \Psi_0 | \widehat{\mathbf{S}}_{f,i} \cdot \widehat{\mathbf{S}}_{f,j} | \Psi_0 \rangle$ . Коррелятор  $K_{\mathbf{g}}$  определяется присутствием в  $\Psi_0$  нефакторизующихся по узлам состояний, которые содержат синглетный оператор  $\widehat{\phi}_{fi,fj}^+$  (таких как  $S_5, S_6$  ( $C_6, C_5$  из (3))). Величины  $K_{\mathbf{g}}$  и  $n_f$  имеют вид

$$\begin{aligned}
 K_{\mathbf{g}} = \langle \Psi_0 | \widehat{\mathbf{S}}_{f,i} \cdot \widehat{\mathbf{S}}_{f,j} | \Psi_0 \rangle &= \frac{\sqrt{3}}{2} a_3 a_6 - \frac{1}{2} a_6^2 - \frac{3}{4} a_5^2, \\
 n_f &= \frac{1}{2} (4a_1^2 + 3a_2^2 + 2a_3^2 + 3a_4^2 + 2a_5^2 + 2a_6^2).
 \end{aligned} \tag{6}$$

Результаты диагонализации матрицы гамильтониана показывают, что при фиксированных значениях параметров  $\varepsilon_f, \varepsilon_d, V, U_d$  (при этом  $U_f \approx -\varepsilon_f \gg |\varepsilon_f + U_f| \approx V \approx t$ ) и при небольшом варьировании величины  $\varepsilon_f + U_f$  в системе возможны два разных режима, **N** и **M**. При  $\varepsilon_f + U_f \gtrsim 0.05$  реализуется режим **N** с величиной  $n_f$  близкой к единичному



**Рис. 1.** Схематическое изображение уровней для режимов **N** ( $\varepsilon_f + U_f > 0$ ;  $|B| > A$ ;  $n_f \gtrsim 1$ ) и **M** ( $\varepsilon_f + U_f < 0$ ;  $|B| < A$ ;  $n_f \lesssim 2$ ). Овалы — парные синглеты  $\hat{\phi}_{f\mathbf{m};d\mathbf{m}}^+ |0\rangle_{\mathbf{m}}$  и  $2_{f\mathbf{m}}^+ |0\rangle_{\mathbf{m}}$ . Жирные линии — уровень энергии основного одноузельного состояния  $\Psi_{\mathbf{m}} = (A\hat{2}_{f\mathbf{m}}^+ + B\hat{\phi}_{f\mathbf{m};d\mathbf{m}}^+) |0\rangle_{\mathbf{m}}$  с учетом  $V \neq 0$

заполнению  $f$ -уровня, при  $\varepsilon_f + U_f \lesssim -0.05$  — режим **M** со значением  $n_f \approx 2$  (аналогично ситуации разных режимов модели Хаббарда). Отклонения  $n_f$  от целочисленных значений диктуются соотношением между величинами  $|\varepsilon_f + U_f|$  и  $V$ .

При  $t = 0$  межузельные корреляции отсутствуют,  $a_4 = a_5 = a_6 = 0$ ,  $K_{\mathbf{g}} = 0$  (т.е. реализуются только состояний  $C_{1-4}$ ) и  $\Psi_0$  факторизуется по узлам [15]:

$$\Psi_0 = \prod_{\mathbf{m}} \left( A\hat{2}_{f\mathbf{m}}^+ + B\hat{\phi}_{f\mathbf{m};d\mathbf{m}}^+ \right) |0\rangle_{\mathbf{m}}, \quad (7)$$

где коэффициенты  $A$  и  $B$  определяются одноузельной задачей с  $V \neq 0$ , которой соответствуют  $A = \sqrt{a_1}$ ,  $B = -\sqrt{a_3}$ ,  $a_2 = \sqrt{2}AB$ . Схематическое изображение уровней для режимов **N** ( $\varepsilon_f + U_f > 0$ ;  $|B| > A$ ) и **M** ( $\varepsilon_f + U_f < 0$ ;  $|B| < A$ ) приведено на рис. 1.

На рис. 2 для фиксированных значений  $\varepsilon_f = -1.0$ ,  $U_d = 0.4$ ,  $V = 0.03$ ,  $\varepsilon_d = 0$  (все величины в электронвольтах) приведены зависимости  $n_f(t)$  и  $K_{\mathbf{g}}(t)$  при значениях  $\varepsilon_f + U_f = \pm 0.05$  (режимы **N** и **M**).

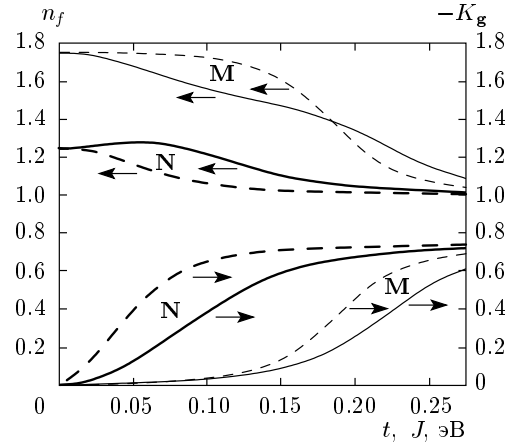
При  $t = 0$  состояние  $\Psi_0$  в режиме **N** определяется следующей структурой:

$$a_1 = 0.246, \quad a_2 = -0.609, \quad a_3 = 0.755, \quad n_f^t = 1.246,$$

$$A = \sqrt{a_1} = 0.496, \quad B = -\sqrt{a_3} = -0.869, \\ a_2 = \sqrt{2}AB,$$

а в режиме **M** —

$$a_1 = 0.755, \quad a_2 = -0.609, \quad a_3 = 0.246,$$



**Рис. 2.** Зависимости  $n_f$  и корреляционной функции  $-K_{\mathbf{g}}$  (см. выражения (6)) от перескокового интеграла  $t$  (гамильтониан  $\hat{H}_t$  (1)) — сплошные кривые, и от обменного интеграла  $J$  (гамильтониан  $\hat{H}_J$  (13)) — штриховые линии. В обоих ( $\hat{H}_t$  и  $\hat{H}_J$ ) случаях жирные линии — режим **N** ( $U_f^{\mathbf{N}} = 1.05$ ), тонкие линии — режим **M** ( $U_f^{\mathbf{M}} = 0.95$ ). Значения параметров:  $\varepsilon_f = -1.0$ ,  $U_d = 0.4$ ,  $V = 0.03$ ,  $\varepsilon_d = 0$  (в эВ)

$$n_f^t = 1.754, \quad A = 0.869, \quad B = -0.496.$$

При отличных от нуля  $t$  в  $\Psi_0$  возникают состояния  $S_{4-6}$  ( $C_{5-9}$  (3)) с межузельными корреляциями. Характерная структура  $\Psi_0$  в режиме **N** при  $t = 0.1$  имеет вид

$$a_1 = -0.144, \quad a_2 = 0.498, \quad a_3 = -0.545, \\ a_4 = -0.371, \quad a_5 = -0.287, \quad a_6 = 0.463, \quad (8) \\ n_f = 1.213, \quad K_{\mathbf{g}} = -0.387.$$

Как видно из рис. 2, в пределе больших  $t$  в обоих случаях  $n_f \rightarrow 1$ , а  $K_{\mathbf{g}}$  стремится к величине  $K_{\mathbf{g}} = -0.75$ , отвечающей АФМ-корреляциям у парного синглета  $\hat{\phi}_{f\mathbf{i};f\mathbf{j}}^+ |0\rangle$ .

Отметим, что рассмотрение металлических состояний  $\Psi^{met}$  двухузельного кластера, соответствующего полусумме состояний с тремя и пятью частицами, показывает, что в широком интервале параметров диэлектрическое состояние  $\Psi_0$  отделено от  $\Psi^{met}$  энергетической щелью (величина щели порядка 0.05 эВ в случае **N**).

Теперь рассмотрим структуру двухузельных триплетных уровней с четырьмя электронами. Нас будет интересовать энергия переходов из  $\Psi_0$  в триплетные состояния. Будем рассматривать только состояния с проекцией спина  $S^z = 1$ . Введем аналогично  $\hat{\phi}_{a',n;a'',\mathbf{m}}^+$  (2) обозначение для оператора рождения

триплетного состояния  $\hat{\theta}_{a',n;a'',m}^+$ , парного по уровням и узлам:

$$\hat{\theta}_{a',n;a'',m}^+ = \hat{a}_{n+}^+ \hat{a}_{m+}^{\prime\prime},$$

где  $a'$ ,  $a''$  — операторы рождения частиц с проекцией спина 1/2 на  $f$  или  $d$  уровнях,  $n$ ,  $m$  — узлы  $i$  или  $j$ .

Полный набор триплетных состояний (с  $S^z = 1$  и с единичным или двойным заполнением  $f$ -уровня на узле) содержит девять ортонормированных состояний:

$$\begin{aligned} L_1 &= \hat{\theta}_{fi;di}^+ \hat{\phi}_{fj;dj}^+ |0\rangle, & L_2 &= \hat{\phi}_{fi;di}^+ \hat{\theta}_{fj;dj}^+ |0\rangle, \\ L_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\theta}_{fi;dj}^+ \hat{\phi}_{di,fj}^+ - \hat{\theta}_{fj;di}^+ \hat{\phi}_{fi,dj}^+) |0\rangle, \\ L_4 &= \hat{\theta}_{fi;fj}^+ \hat{2}_{di}^+ |0\rangle, & L_5 &= \hat{\theta}_{fi;fj}^+ \hat{2}_{dj}^+ |0\rangle, \\ L_6 &= \hat{\theta}_{fi;di}^+ \hat{2}_{fj}^+ |0\rangle, & L_7 &= \hat{\theta}_{fj;dj}^+ \hat{2}_{fi}^+ |0\rangle, \\ L_8 &= \hat{\theta}_{fi;dj}^+ \hat{2}_{fj}^+ |0\rangle, & L_9 &= \hat{\theta}_{fj;di}^+ \hat{2}_{fi}^+ |0\rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

Таблица матрицы гамильтониана (1) распадается на две, если ввести отдельно нечетные,

$$\begin{aligned} B_1 &= \hat{P}_- L_1, & B_2 &= L_3, \\ B_3 &= \hat{P}_- L_4, & B_4 &= \hat{P}_- L_6, & B_5 &= \hat{P}_- L_8, \end{aligned} \quad (10)$$

и четные,

$$\begin{aligned} D_1 &= \hat{P}_+ L_1, & D_3 &= \hat{P}_+ L_4, \\ D_4 &= \hat{P}_+ L_6, & D_5 &= \hat{P}_+ L_8, \end{aligned} \quad (11)$$

комбинации. Явный вид матриц  $5 \times 5$  и  $4 \times 4$  гамильтониана (1) в представлении (10), (11) приведен в Приложении. Диагонализация гамильтониана (1) приводит к триплетным состояниям  $\Psi_{(1-9)}^{tr}$  с энергиями  $E_{(1-9)}^{tr}$ .

В результате имеются девять триплетных возбуждений  $M_{(i)}$  из основного синглетного состояния  $\Psi_0$ :

$$M_{(i)} = E_{(i)}^{tr} - E_0. \quad (12)$$

На рис. 3 для режимов **N** ( $U_f^N = 1.05$ ) и **M** ( $U_f^M = 0.95$ ) представлены зависимости энергий трех нижних триплетных возбуждений  $M_{(1-3)}$  от перескокового интеграла  $t$  (а также энергия нижнего синглетного возбуждения  $E_{(2)}^{sing} - E_0$ ).

Как видно из рис. 3, в случае режима **N** при  $t \approx V = 0.03$  эВ энергии триплетных возбуждений  $M_{(1)}$ ,  $M_{(2)}$ ,  $M_{(3)}$  приблизительно равны 20, 25, 50 мэВ, т. е. близки к энергиям, отвечающим возбуждениям  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$  [13].

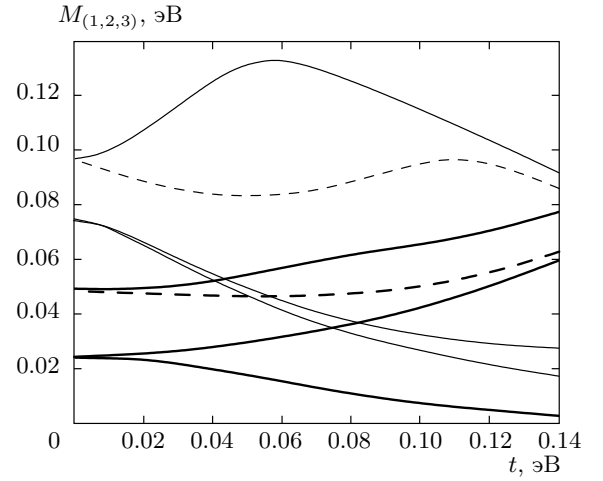


Рис. 3. Зависимости энергий нижних трех триплетных возбуждений  $M_{(1-3)}$  (кривые снизу вверх) от перескокового интеграла  $t$  (гамильтониан  $\hat{H}_t$  (1)). Жирные линии — режим **N**,  $U_f^N = 1.05$ ; тонкие линии — режим **M**,  $U_f^M = 0.95$ . Штриховые линии отвечают нижнему синглетному возбуждению  $E_{(2)}^{sing} - E_0$ . Параметры те же, что на рис. 2

В режиме **M** энергии переходов  $M_{(1-3)} \approx 60-110$  мэВ (см. рис. 3) существенно больше, чем экспериментальные. Поэтому, с нашей точки зрения, для  $\text{YbV}_{12}$  реализуется режим **N** при  $t \lesssim 0.1$ . С другой стороны, можно убедиться, что увеличение  $U_f$  приводит к уменьшению энергии переходов, а увеличение  $V$  — к увеличению. Это означает, что для модели существует довольно широкая область значений  $U_f$  и  $V$ , при которых система находится в режиме **N**, причем энергии  $M_{(1-3)}$  всех трех возбуждений остаются близки к экспериментальным значениям. Например, это имеет место для наборов  $U_f = 1.25$ ,  $V = 0.06$  и  $U_f = 1.05$ ,  $V = 0.03$ .

Таким образом, рассмотрение простейшего двухузельного кластера в рамках несимметричной модели Андерсона позволяет качественно отразить трехуровневый характер триплетных спиновых возбуждений  $\text{YbV}_{12}$ .

### 3. ЭФФЕКТИВНЫЙ СПИНОВЫЙ ГАМИЛЬТониАН И ДИСПЕРСИЯ ВОЗБУЖДЕНИЙ

Для описания реального спинового спектра следует перейти от задачи двухузельного кластера к рассмотрению бесконечной решетки.

В макроскопической системе трем нижним кластерным уровням возбуждений (12) должны соответствовать три нижних спиновых зоны. Ограничимся построением спектра нижней зоны. При этом вместо  $\hat{H}$  (1) удобнее использовать эффективный гамильтониан  $\hat{H}_J$ , который получается из (1) заменой перескокового члена  $\hat{t}$  в  $\hat{H}_t$  (1) на АФМ обменное  $f$ - $f$ -взаимодействие  $\hat{J}$  на ближайших узлах:

$$\hat{H}_J = \hat{H}_0 + \hat{J}, \quad \hat{J} = \frac{1}{2}J \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{g}} \hat{\mathbf{S}}_{f, \mathbf{r}} \hat{\mathbf{S}}_{f, \mathbf{r} + \mathbf{g}}, \quad (13)$$

где  $J$  — константа прямого АФМ  $f$ - $f$ -обмена.

Величину  $J$  в (13) следует определять так, чтобы гамильтониан (13) воспроизводил кластерные результаты гамильтониана (1) для основного состояния в области  $t \approx V$ . При этом можно надеяться, что положения максимумов спиновой восприимчивости, найденной с помощью гамильтониана (13), совпадут с энергиями  $M1$ ,  $M2$  и  $M3$ , полученными в рамках двухузельной задачи.

Для двухузельного кластера с  $\hat{H}_J$  (13) основное синглетное состояние  $\Psi_0^J$  и отвечающие ему величины  $K_{\mathbf{g}}^J$ ,  $n_f^J$  имеют вид (введено обозначение с верхним индексом « $J$ », указывающее на то, что величина относится к случаю гамильтониана  $\hat{H}_J$  (13))

$$\begin{aligned} \Psi_0^J &= b_1 S_1 + b_2 S_2 + b_3 S_3 + b_6 S_6, \\ K_{\mathbf{g}}^J &= \langle \Psi_0^J | \hat{\mathbf{S}}_{f, \mathbf{i}} \hat{\mathbf{S}}_{f, \mathbf{j}} | \Psi_0^J \rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} b_3 b_6 - \frac{1}{2} b_6^2, \\ n_f^J &= \frac{1}{2} (4b_1^2 + 3b_2^2 + 2b_3^2 + 2b_6^2) \end{aligned} \quad (14)$$

(ср. с выражениями (6)). Матрица  $\hat{H}_J$  (13), определяющая  $\Psi_0^J$ , приведена в Приложении. Зависимости  $n_f^J(J)$  и  $K_{\mathbf{g}}^J(J)$  для режимов  $\mathbf{N}$  и  $\mathbf{M}$  приведены выше на рис. 2 штриховыми линиями.

Будем интересоваться только режимом  $\mathbf{N}$ . Как видно из рис. 2, в области  $t \lesssim 0.1$ , двухузельная задача для основных состояний гамильтонианов  $\hat{H}_t$  (1) и  $\hat{H}_J$  (13) дает близкие результаты, если принять  $J \approx 0.5t$ .

При этом близкими являются не только корреляторы  $K_{\mathbf{g}}$ , но и структуры основных состояний  $\Psi_0 \approx \Psi_0^J$ . Например, результаты (8) при  $t = 0.1$  близки к структуре  $\Psi_0^J(J = 0.05)$ , которая имеет вид

$$b_1 = -0.19, \quad b_2 = 0.499, \quad b_3 = -0.594, \quad b_6 = 0.471,$$

$$n_f^J = 1.16, \quad K_{\mathbf{g}}^J = -0.397.$$

Это означает, что гамильтониан  $\hat{H}_J$  (13), по крайней мере качественно, отражает спиновые свойства гамильтониана  $\hat{H}_t$  (1).

Рассмотрим теперь восприимчивости  $\chi_f(\mathbf{q}, \omega)$   $f$ -электронов в рамках гамильтониана  $\hat{H}_J$  (13). В соединении  $\text{YbB}_{12}$  отсутствует дальний АФМ-порядок, и для описания свойств спиновой системы этого соединения следует использовать сферически-симметричный подход, близкий к подходу из работы [16]. Будем искать функцию Грина  $G^z(\mathbf{q}, \omega) = \langle \hat{S}_{\mathbf{q}}^z | \hat{S}_{-\mathbf{q}}^z \rangle$  (здесь и ниже у операторов  $f$ -спина опускаем индекс « $f$ »). В рамках сферически-симметричного подхода имеем  $G^{x(y)}(\mathbf{q}, \omega) = G^z(\mathbf{q}, \omega)$ .

Для отыскания функции Грина  $G^z(\mathbf{q}, \omega)$  следует найти выражение для оператора спина  $\hat{S}_{\mathbf{r}}^z$  через полный набор синглетных и триплетных узельных операторов с двумя электронами на узел. Нижнему синглетному состоянию  $\varphi_{\mathbf{r}}$  отвечает оператор

$$\hat{\varphi}_{\mathbf{r}}^+ = A \hat{2}_{f\mathbf{r}}^+ + B \hat{\phi}_{\mathbf{r}}^+, \quad \hat{\phi}_{\mathbf{r}}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{f}_{\mathbf{r}+}^+ \hat{d}_{\mathbf{r}-}^+ + \hat{d}_{\mathbf{r}+}^+ \hat{f}_{\mathbf{r}-}^+)$$

и энергия

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

Трем триплетным состояниям  $\psi_{i=0, \pm; \mathbf{r}}$  узла с энергией  $E_{\psi} = \varepsilon_f$  отвечают операторы

$$\hat{\psi}_{0, \mathbf{r}}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{f}_{\mathbf{r}+}^+ \hat{d}_{\mathbf{r}-}^+ - \hat{d}_{\mathbf{r}+}^+ \hat{f}_{\mathbf{r}-}^+), \quad \hat{\psi}_{\pm 1, \mathbf{r}}^+ = \hat{f}_{\mathbf{r}, \pm}^+ \hat{d}_{\mathbf{r}, \pm}^+.$$

Будем опускать высоколежащее по энергии состояние  $\hat{2}_{\mathbf{r}}^+ |0\rangle$  и не будем учитывать верхнее по энергии синглетное состояние. В этих приближениях базис операторов  $\hat{\varphi}_{\mathbf{r}}^+$ ,  $\hat{\psi}_{0, \mathbf{r}}^+$ ,  $\hat{\psi}_{\pm 1, \mathbf{r}}^+$  является полным искомым базисом, в рамках которого можно выразить операторы  $\hat{S}_{\mathbf{r}}^{\alpha}$ . Энергия одноузельных возбуждений  $E_{\psi\varphi} = E_{\psi} - E_{\varphi}$  совпадает с энергией  $M_{(1)}$  (12) нижних триплетных возбуждений двухузельного кластера в пределе  $t \rightarrow 0$ .

В базисе состояний  $\varphi$ ,  $\psi$  гамильтониан  $\hat{H}_0$  (13) принимает диагональный вид:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{r}, \lambda} E_{\lambda} \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{\lambda\lambda},$$

здесь и ниже  $\hat{Z}_{\mathbf{r}}^{\lambda\nu}$  ( $\lambda, \nu = \varphi, \psi_{i=0, \pm}$ ) — проекционные операторы Хаббарда на соответствующие состояния.

В этом базисе операторы  $\hat{S}_{\mathbf{r}}^{\alpha}$ ,  $\alpha = x, y, z$  имеют вид

$$\begin{aligned} \hat{S}_{\mathbf{r}}^{\alpha} &= \hat{A}_{\mathbf{r}}^{\alpha} + \hat{A}_{\mathbf{r}}^{+\alpha} + \hat{T}_{\mathbf{r}}^{\alpha}, \quad \hat{A}_{\mathbf{r}}^{\alpha} = \sum_{\psi_j} S_{\varphi\psi_j}^{\alpha} \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{\varphi\psi_j}, \\ \hat{T}_{\mathbf{r}}^{\alpha} &= \sum_{\psi_j, \psi_i} S_{\psi_j\psi_i}^{\alpha} \hat{Z}_{\mathbf{r}}^{\psi_j\psi_i}, \quad S_{\lambda\mu}^{\alpha} = \langle \lambda_{\mathbf{r}} | \hat{S}_{\mathbf{r}}^{\alpha} | \mu_{\mathbf{r}} \rangle, \end{aligned} \quad (15)$$

где  $S_{\lambda\mu}^\alpha$  — матричные элементы оператора узельного  $f$ -спина. Учитывая явный вид функций  $\varphi_{\mathbf{r}}$  и  $\psi_{i=0,\pm;\mathbf{r}}$ , можно найти все ненулевые матричные элементы:

$$\begin{aligned} B^{-1}S_{0,\varphi}^z &= S_{1,1}^z = -S_{-1,-1}^z = 2^{-1}, \\ B^{-1}S_{-1,\varphi}^x &= -B^{-1}S_{1,\varphi}^x = S_{1,0}^x = S_{-1,0}^x = 2^{-3/2}, \\ B^{-1}S_{1,\varphi}^y &= B^{-1}S_{-1,\varphi}^y = S_{-1,0}^y = -S_{1,0}^y = 2^{-3/2}i. \end{aligned}$$

Отметим, что в рамках сферически-симметричного подхода равны нулю следующие средние:

$$\begin{aligned} \langle \widehat{Z}_{\mathbf{r}}^{\varphi\psi_j} \rangle &= 0, \quad \langle \widehat{Z}_{\mathbf{r}}^{\psi_j\psi_i} \rangle = 0 \quad \text{при } \psi_j \neq \psi_i, \\ \sum_{\psi_i} S_{\psi_i\psi_i}^\alpha \langle \widehat{Z}_{\mathbf{r}}^{\psi_i\psi_i} \rangle &= 0. \end{aligned}$$

В результате обменное взаимодействие  $\widehat{J}$  можно переписать через операторы  $\widehat{A}_{\mathbf{r}}^\alpha$ ,  $\widehat{A}_{\mathbf{r}}^{+\alpha}$ ,  $\widehat{T}_{\mathbf{r}}^\alpha$  (15).

Функция Грина  $\langle \widehat{S}_{\mathbf{i}}^z | \widehat{S}_{\mathbf{m}}^{+z} \rangle_\omega$  распадается на сумму членов

$$\begin{aligned} \langle \widehat{A}_{\mathbf{i}}^z | \widehat{A}_{\mathbf{m}}^{+z} \rangle_\omega, \quad \langle \widehat{A}_{\mathbf{i}}^{+z} | \widehat{A}_{\mathbf{m}}^z \rangle_\omega, \quad \langle \widehat{A}_{\mathbf{i}}^z | \widehat{A}_{\mathbf{m}}^z \rangle_\omega, \\ \langle \widehat{A}_{\mathbf{i}}^{+z} | \widehat{A}_{\mathbf{m}}^z \rangle_\omega, \quad \langle \widehat{T}_{\mathbf{i}}^z | \widehat{T}_{\mathbf{m}}^z \rangle_\omega, \quad \langle \widehat{A}_{\mathbf{i}}^z | \widehat{T}_{\mathbf{m}}^z \rangle_\omega, \\ \langle \widehat{T}_{\mathbf{i}}^z | \widehat{A}_{\mathbf{m}}^z \rangle_\omega, \quad \langle \widehat{A}_{\mathbf{i}}^{+z} | \widehat{T}_{\mathbf{m}}^z \rangle_\omega, \quad \langle \widehat{T}_{\mathbf{i}}^z | \widehat{A}_{\mathbf{m}}^{+z} \rangle_\omega. \end{aligned}$$

Нас будут интересовать вклад в  $G^z(\mathbf{q}, \omega)$  в наименьшем порядке по параметру  $J/E_{\psi\varphi}$  и вблизи энергий  $\pm E_{\psi\varphi}$ , отвечающих возбуждениям типа  $M1$ , т. е. переходам в нижнее триплетное состояние. Легко видеть, что такой вклад определяется только членами  $\langle \widehat{A}_{\mathbf{i}}^z | \widehat{A}_{\mathbf{m}}^{+z} \rangle_\omega$ ,  $\langle \widehat{A}_{\mathbf{i}}^{+z} | \widehat{A}_{\mathbf{m}}^z \rangle_\omega$ .

Уравнение для функции Грина  $\langle \widehat{A}_{\mathbf{i}}^z | \widehat{A}_{\mathbf{m}}^{+z} \rangle_\omega$  имеет вид

$$\begin{aligned} (z - E_{\psi\varphi}) \langle \widehat{A}_{\mathbf{i}}^z | \widehat{A}_{\mathbf{m}}^{+z} \rangle_\omega &= B^2 R_{\mathbf{i},\mathbf{m}} + \langle [\widehat{A}_{\mathbf{i}}^z; \widehat{J}] | \widehat{A}_{\mathbf{m}}^{+z} \rangle_\omega, \\ R_{\mathbf{i},\mathbf{m}} &= \delta_{\mathbf{i},\mathbf{m}} R, \\ R &= \langle [\widehat{A}_{\mathbf{i}}^z; \widehat{A}_{\mathbf{i}}^{+z}] \rangle = \frac{1}{4} B^2 \left[ \langle \widehat{Z}_{\mathbf{i}}^{\varphi\varphi} \rangle - \langle \widehat{Z}_{\mathbf{i}}^{\psi_0\psi_0} \rangle \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

В коммутаторе  $[\widehat{A}_{\mathbf{i}}^z; \widehat{J}] = J \sum_{\mathbf{g}} [\widehat{A}_{\mathbf{i}}^z; \widehat{S}_{\mathbf{i}+\mathbf{g}}^\alpha] \widehat{S}_{\mathbf{i}+\mathbf{g}}^\alpha$  заменим  $[\widehat{A}_{\mathbf{i}}^z; \widehat{S}_{\mathbf{i}}^\alpha]$  на его среднее значение, оператор  $\widehat{S}_{\mathbf{i}+\mathbf{g}}^\alpha$  представим в форме (15) и перейдем в фурье-представление. В результате для искомой функции Грина имеем

$$\langle \widehat{A}_{\mathbf{q}}^\alpha | \widehat{A}_{\mathbf{q}}^{+\alpha} \rangle_\omega = \frac{R}{z - E_{\psi\varphi,\mathbf{q}}}, \quad (17)$$

где спектр  $E_{\psi\varphi,\mathbf{q}}$  спиновых возбуждений дается выражением

$$E_{\psi\varphi,\mathbf{q}} = E_{\psi\varphi} + JR \sum_{\mathbf{g}} \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{g}). \quad (18)$$

Функция Грина  $\langle \widehat{A}_{\mathbf{q}}^{+\alpha} | \widehat{A}_{\mathbf{q}}^\alpha \rangle_\omega$  задается выражением (17) с заменой  $z$  на  $-z$ .

Окончательно для динамической восприимчивости  $f$ -электронов имеем

$$\begin{aligned} \chi_f(\mathbf{q}, \omega) &= -\langle \widehat{A}_{\mathbf{k}}^\alpha | \widehat{A}_{\mathbf{k}}^{+\alpha} \rangle_\omega - \langle \widehat{A}_{\mathbf{q}}^{+\alpha} | \widehat{A}_{\mathbf{q}}^\alpha \rangle_\omega = \\ &= -\frac{2E_{\psi\varphi,\mathbf{q}}R}{z^2 - E_{\psi\varphi,\mathbf{q}}^2}. \end{aligned} \quad (19)$$

Таким образом, как видно из соотношений (17), (19), спектр спиновых возбуждений имеет щель, даваемую величиной  $E_{\psi\varphi}$ , и дисперсионную часть  $JR \sum_{\mathbf{g}} \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{g})$ . В случае кубической решетки дисперсионная часть имеет минимум на АФМ-векторе  $\mathbf{Q}$ , что и наблюдается в эксперименте. Отметим, что ширина спектра определяется величиной  $JR$ , т. е. значением, которое при малых значениях  $B^2$  может быть значительно меньше  $J$ .

С повышением температуры динамическая восприимчивость  $\chi_f(\mathbf{q}, \omega)$  (19) меняется благодаря величине  $R$  (16): при росте  $T$  среднее значение  $\langle \widehat{Z}_{\mathbf{i}}^{\varphi\varphi} \rangle$  уменьшается, а  $\langle \widehat{Z}_{\mathbf{i}}^{\psi_0\psi_0} \rangle$  увеличивается.

Подчеркнем, что выражение (19) описывает только нижнюю часть спектра спиновых возбуждений  $M1$ . Для получения ветвей спектра, отвечающих возбуждениям  $M2$  и  $M3$  [13], следует при вычислении функции Грина выйти за рамки базисных операторов  $\widehat{A}_{\mathbf{r}}^z$ ,  $\widehat{A}_{\mathbf{r}}^{+z}$ ,  $\widehat{T}_{\mathbf{r}}^z$ .

Авторы благодарны П. А. Алексееву и К. С. Немковскому за полезные обсуждения. Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 07-02-00456).

## ПРИЛОЖЕНИЕ

Приведем явный вид матриц синглетных и триплетных состояний гамильтониана  $\widehat{H}_t$  (1), а также матрицу, определяющую основное синглетное состояние  $\Psi_0^J$  гамильтониана  $\widehat{H}_J$  (13).

Матрицы  $6 \times 6$  и  $3 \times 3$  синглетных состояний гамильтониана  $\widehat{H}_t$  в представлении синглетных состояний (4), (5) имеют вид

$$\begin{pmatrix} S_1 & S_2 & S_3 & S_4 & S_5 & S_6 \\ 4\varepsilon_f + 2U_f & 2V & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2V & 3\varepsilon_f + U_f & 2V & t & 0 & 0 \\ 0 & 2V & 2\varepsilon_f & 0 & -t & 0 \\ 0 & t & 0 & 3\varepsilon_f + U_f & -V & 0 \\ 0 & 0 & -t & -V & 2\varepsilon_f + U_d & t\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t\sqrt{3} & 2\varepsilon_f \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} S_7 & S_8 & S_9 \\ 3\varepsilon_f + U_f & t & 0 \\ t & 3\varepsilon_f + U_f & -V \\ 0 & -V & 2\varepsilon_f + U_d \end{pmatrix}.$$

Матрицы гамильтониана (1) в базисе триплетных состояний (10), (11) представимы как

$$\begin{pmatrix} B_1 & B_2 & B_3 & B_4 & B_5 \\ 2\varepsilon_f & 0 & -t\sqrt{2} & \sqrt{2}V & 0 \\ 0 & 2\varepsilon_f & -\sqrt{2}t & 0 & 0 \\ -t\sqrt{2} & -\sqrt{2}t & 2\varepsilon_f + U_d & 0 & -V \\ \sqrt{2}V & 0 & 0 & 3\varepsilon_f + U_f & t \\ 0 & 0 & -V & t & 3\varepsilon_f + U_f \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} D_1 & D_3 & D_4 & D_5 \\ 2\varepsilon_f & 0 & \sqrt{2}V & 0 \\ 0 & 2\varepsilon_f + U_d & 0 & V \\ \sqrt{2}V & 0 & 3\varepsilon_f + U_f & t \\ 0 & V & t & 3\varepsilon_f + U_f \end{pmatrix}.$$

Матрица  $\hat{H}_J$  (13), определяющая основное синглетное состояние  $\Psi_0^J$ , имеет вид

$$\begin{pmatrix} S_1 & S_2 & S_3 & S_6 \\ 4\varepsilon_f + 2U_f & 2V & 0 & 0 \\ 2V & 3\varepsilon_f + U_f & 2V & 0 \\ 0 & 2V & 2\varepsilon_f & \frac{\sqrt{3}}{4}J \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{4}J & 2\varepsilon_f - \frac{1}{2}J \end{pmatrix}.$$

## ЛИТЕРАТУРА

1. N. Grewe and F. Steglich, *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths*, Vol. 14, ed. by K. A. Gschneider Jr. and L. L. Eyring, Elsevier, Sci. Publ., 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. L. Sarraoa, S. L. Cooper et al., *Physica B* **223-224**, 409 (1996).
5. T. Takabatake, F. Iga, T. Yoshino et al., *J. Magn. Magn. Mat.* **177-181**, 277 (1998).
6. L. Degiorgi, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 687 (1999).
7. P. S. Riseborough, *Adv. Phys.* **49**, 257 (2000).
8. N. S. Vidhyadhiraja, V. E. Smith, D. E. Logan et al., *Eur. Phys. J. B* **32**, 49 (2003).
9. P. S. Riseborough, *Phys. Rev. B* **68**, 235213 (2003).
10. A. Gilbert, N. S. Vidhyadhiraja, and D. E. Logan, arXiv:cond-mat/0711.0121v1.
11. F. C. Zhang and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **37**, 3759 (1988).
12. L. A. Maksimov, R. Hayn, and A. F. Barabanov, *Phys. Lett. A* **238**, 288 (1998); A. Ф. Барабанов, А. М. Белемук, *Письма в ЖЭТФ* **87**, 725 (2008).
13. K. S. Nemkovski, J.-M. Mignot, and P. A. Alekseev, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 137204 (2007).
14. P. S. Riseborough, *J. Magn. Magn. Mat.* **226-230**, 127 (2001).
15. S. H. Liu, *Phys. Rev. B* **64**, 184108 (2001); *Phys. Rev. B* **63**, 115108 (2001).
16. H. Shimahara and S. Takada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **60**, 2394 (1991).