

非对称 Anderson 模型的重整微扰展开*

黎 欢[†]

(北京大学物理学院, 北京 100871)

(2010 年 3 月 13 日收到; 2010 年 3 月 24 日收到修改稿)

利用 Yamada 微扰论结合重整微扰方法来计算非对称 Anderson 模型, 得到了局域电子占据数、重整化因子、重整化的局域能级以及重整化参数关于裸参数的展开式. 计算了局域电子态密度和低温杂质电导, 还计算了磁场对它们的影响, 这些结果适用于从弱耦合到强耦合的整个耦合强度区域. 由于在哈密顿量中已经将局域能级进行了初步重整, 采用的重整微扰方法比 Hewson 的重整微扰方法更适合于研究非对称 Anderson 模型.

关键词: 非对称 Anderson 模型, 重整化, 磁场

PACC: 7215Q, 1110G, 7225

1. 引 言

强关联体系中, 描述局域磁矩体系的 Anderson 模型是研究得最为广泛的模型之一. 近年来, 由于量子点实验的进展, Anderson 模型的非平衡态性质也得到了深入的研究^[1-8]. 各种方法广泛应用于 Anderson 模型的研究, 例如 Non-Crossing Approximation(NCA)^[9-11], 和 Equation of Motion(EOM)^[6,12], Bethe ansatz^[13,14] 和 Numerical Renormalization Group(NRG)^[15-17]. 虽然通常的微扰方法例如 Yamada 微扰法^[18]只适用于 Anderson 模型的弱耦合情况, 但微扰法可以提供模型的许多定性信息, 因此被研究者广泛采用^[19-21]. 由于库仑关联的存在, Anderson 模型中局域电子能级移动到费米能附近, 被强烈地重整, 因此, 量子场论中的重整微扰方法非常适合于研究 Anderson 模型, Hewson 由此建立了对称 Anderson 模型(symmetric Anderson model)的重整微扰理论^[22]. 重整微扰是将物理量按照重整化参数而不是裸参数来展开, 因此适合于从弱耦合到强耦合的整个耦合强度区域, 弥补了通常的微扰论的不足. Hewson 的重整微扰计算中直接将库仑关联项作为微扰, 零级格林函数中局域能级并未经过重整; 而 Yamada 微扰论首先将哈密顿量做了变形, 局域电子能级已经经过初步重整, 因此选择 Yamada 微扰法进行重整微扰计算无论在直观上还是计算上

都更加合适. Hewson 的重整微扰计算研究的是对称 Anderson 模型^[22,23]; 而 Yamada 微扰法可以很容易地推广到非对称 Anderson 模型(asymmetric Anderson model)以及含磁场作用的情况, 因此可以建立 Yamada 微扰论的重整微扰方法来研究非对称 Anderson 模型以及含磁场作用的情况.

在本文第 2 节首先将对称 Anderson 模型的 Yamada 微扰法推广到非对称 Anderson 模型, 并建立 Yamada 微扰论的重整微扰方法. 第 3 节计算非对称 Anderson 模型的局域电子占据数 n 和重整化因子 Z 、重整化的局域能级 \tilde{E} , 以及重整化参数 \tilde{U} , $\tilde{\Delta}$, $\tilde{u} = \tilde{U}/\pi\tilde{\Delta}$ 关于裸参数 ε_d, U 的展开式. 第 4 节进行重整微扰计算, 利用构造抵消项的方法计算自能, 给出了非对称 Anderson 模型的局域电子态密度峰的位置以及低温杂质电导关于重整化参数的表达式, 这些结果适用于从弱耦合到强耦合的整个耦合强度区域. 最后将结果推广到磁场作用下的对称 Anderson 模型, 给出了局域电子占据数, 态密度峰位置, 以及低温电导随磁场的变化关系, 对比后发现我们的结果正是 Hewson 的 NRG 结果^[24]在弱磁场下展开的主导项.

2. 非对称 Anderson 模型 Yamada 微扰论和重整微扰方法

采用单杂质的非对称 Anderson 模型^[25]

* 国家自然科学基金(批准号:10674005)资助的课题.

[†] E-mail: lihuan@pku.edu.cn

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_{d\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U \hat{n}_{d\uparrow} \hat{n}_{d\downarrow} + \sum_{k\sigma} (V_k c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} + V_k^* d_{\sigma}^\dagger c_{k\sigma}), \quad (1)$$

$d_{\sigma}^\dagger, c_{k\sigma}^\dagger$ 分别是自旋为 σ 的局域电子和传导电子的产生算符, $\varepsilon_{d\sigma} = \varepsilon_d - \sigma h, \varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_k - \sigma h$ 是它们相应的能量, $h = g\mu_B B/2, B$ 为所加的磁场. 设 $U/2|\varepsilon_d| = 1 + c$, 对于对称 Anderson 模型, $c = 0$, 具有粒子-空穴对称性.

与对称 Anderson 模型的 Yamada 微扰法类似^[18], 首先将哈密顿量(1)式等效地写为

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} (\varepsilon_{d\sigma} + n_{\sigma} U) d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U(\hat{n}_{d\uparrow} - n_{\uparrow})(\hat{n}_{d\downarrow} - n_{\downarrow}) + \sum_{k\sigma} (V_k c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} + V_k^* d_{\sigma}^\dagger c_{k\sigma}), \quad (2)$$

n_{σ} 为自旋为 σ 的局域电子的严格占据数. 记 $\varepsilon_{d\sigma} + n_{\sigma} U = E_{\sigma}$. $c = 0$ 且 $h = 0$ 时, $n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = 1/2, E_{\sigma} = 0$. 这样, 哈密顿量中局域电子能级 E_{σ} 已经是经过初步重整的, 零级格林函数也经过了初步重整, 在微扰计算中将更加方便.

可以方便地用泛函积分来表示 Anderson 模型的配分函数

$$Z = \int \prod_{\sigma} \prod_k [D[d_{\sigma}^\dagger(\tau)] D[d_{\sigma}(\tau)] \times D[c_{k\sigma}^\dagger(\tau)] D[c_{k\sigma}(\tau)] e^{-S}, \quad (3)$$

其中, 作用量为 $S = \int_0^{\beta} L_{AM}(\tau) d\tau, L_{AM}(\tau)$ 为(2)式对应的拉氏量

$$L_{AM}(\tau) = \sum_{\sigma} d_{\sigma}^\dagger(\tau) (\partial_{\tau} + E_{\sigma}) d_{\sigma}(\tau) + U[\hat{n}_{d\uparrow}(\tau) - n_{\uparrow}][\hat{n}_{d\downarrow}(\tau) - n_{\downarrow}]$$

$$+ \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger(\tau) (\partial_{\tau} + \varepsilon_{k\sigma}) c_{k\sigma}(\tau) + \sum_{k\sigma} [V_k c_{k\sigma}^\dagger(\tau) d_{\sigma}(\tau) + V_k^* d_{\sigma}^\dagger(\tau) c_{k\sigma}(\tau)], \quad (4)$$

上式中传导电子可以直接积掉, 从而得到只含局域电子的拉氏量. 局域电子的零级格林函数为^[26]

$$G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - E_{\sigma} - \Sigma_{\sigma}(i\omega_n)}, \quad (5)$$

$\Sigma_{\sigma}(i\omega_n) = \sum_k \frac{V_k^2}{i\omega_n - \varepsilon_{k\sigma}}$ 为传导电子贡献的本征自能项. 因此, 作用在传导电子上的磁场仅通过 $\Sigma_{\sigma}(i\omega_n)$ 影响体系的性质, 影响为 h/W 的量级 (Clogston-Anderson compensation theorem^[27], W 为传导电子能带宽度), 能带通常较宽, 若采用平带近似 (flat band approximation) 则有

$$\Sigma_{\sigma}(i\omega_n) = -i\Delta \text{sgn}(\omega_n), \quad (6)$$

其中 $\Delta = \pi\rho|\bar{V}_k|^2$ 为由于局域电子和传导电子的杂化作用导致的展宽. Δ 不依赖于能量和磁场, 这种近似为不少研究者采用^[18, 23, 24, 28, 29].

Yamada 的微扰展开主要针对对称 Anderson 模型^[18], 由于对非对称 Anderson 模型, $n_{\uparrow}; n_{\downarrow} \neq 1/2$, 微扰展开将与对称 Anderson 模型不同. 在(2)式中以含 U 的一项为微扰, 以 $G_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n)$ 为零级格林函数, 得到下列展开公式:

$$\begin{aligned} G_{\sigma}(\tau, \tau') &= -\langle T_{\tau} d_{\sigma}(\tau) d_{\sigma}^{\dagger}(\tau') \rangle \\ &= G_{\sigma}^{(0)}(\tau, \tau') + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-U)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \cdots d\tau_n \\ &\quad \times [\tilde{D}_{n+1}^{\sigma}(\tau, \tau'; 1 \cdots n) D_n^{\sigma}(1 \cdots n)]_{\text{connected}}, \quad (7) \end{aligned}$$

其中两个行列式为

$$\tilde{D}_{n+1}^{\sigma}(\tau, \tau'; 1 \cdots n) = \begin{vmatrix} n_{\sigma}^{(0)} - n_{\sigma} & G_{\sigma}^0(\tau, 1) & \cdots & G_{\sigma}^0(\tau, n) \\ G_{\sigma}^0(1, \tau') & n_{\sigma}^{(0)} - n_{\sigma} & G_{\sigma}^0(1, 2) \cdots & G_{\sigma}^0(1, n) \\ G_{\sigma}^0(2, \tau') & G_{\sigma}^0(2, 1) & n_{\sigma}^{(0)} - n_{\sigma} \cdots & G_{\sigma}^0(2, n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ G_{\sigma}^0(n, \tau') & G_{\sigma}^0(n, 1) & G_{\sigma}^0(n, 2) \cdots & n_{\sigma}^{(0)} - n_{\sigma} \end{vmatrix}, \quad (8)$$

$$D_n^{\sigma}(1 \cdots n) = \begin{vmatrix} n_{\sigma}^{(0)} - n_{\sigma} & G_{\sigma}^0(1, 2) & \cdots & G_{\sigma}^0(1, n) \\ G_{\sigma}^0(2, 1) & n_{\sigma}^{(0)} - n_{\sigma} & \cdots & G_{\sigma}^0(2, n) \\ G_{\sigma}^0(3, 1) & G_{\sigma}^0(3, 2) & n_{\sigma}^{(0)} - n_{\sigma} \cdots & G_{\sigma}^0(3, n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ G_{\sigma}^0(n, 1) & G_{\sigma}^0(n, 2) & \cdots & n_{\sigma}^{(0)} - n_{\sigma} \end{vmatrix}, \quad (9)$$

其中 $n_\sigma^{(0)} = \frac{1}{2} - \arctan \frac{E_\sigma}{\Delta}$ 是零级格林函数(5)式对应的粒子占据数. 而 $G_\sigma^0(1,2) = G_\sigma^{(0)}(\tau_1 - \tau_2)$. 由于需要计算顶角, 因此定义双粒子格林函数为

$$G(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4) = \langle T_\tau d_\uparrow(\tau_1) d_\downarrow(\tau_2) d_\uparrow^\dagger(\tau_3) d_\downarrow^\dagger(\tau_4) \rangle. \quad (10)$$

得到和(7)式类似的微扰展开式

$$\begin{aligned} G(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4) &= G^{(0)}(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-U)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau^{(1)} \cdots d\tau^{(n)} \\ &\times [\tilde{D}_{n+1}^\uparrow(\tau_1, \tau_3; \tau^{(1)} \cdots \tau^{(n)}) \\ &\times \tilde{D}_{n+1}^\downarrow(\tau_2, \tau_4, \tau^{(1)} \cdots \tau^{(n)})]_c, \end{aligned} \quad (11)$$

其中行列式 \tilde{D}_{n+1}^σ 由(8)式给出. 相应的四点正规顶角记为 $\Gamma(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4)$, 其中一阶正规顶角即为树图, $\Gamma^{(1)}(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4) = U$.

与对称 Anderson 模型的 Yamada 微扰展开^[18]不同, 我们得到的非对称 Anderson 模型微扰展开式中两个行列式(8)式和(9)式的对角元不再为零, 因此两者的微扰展开得到的费曼图也并不相同. 图1中显示了由展开式(7)式得到的非对称 Anderson 模型的一阶和二阶本征自能图.

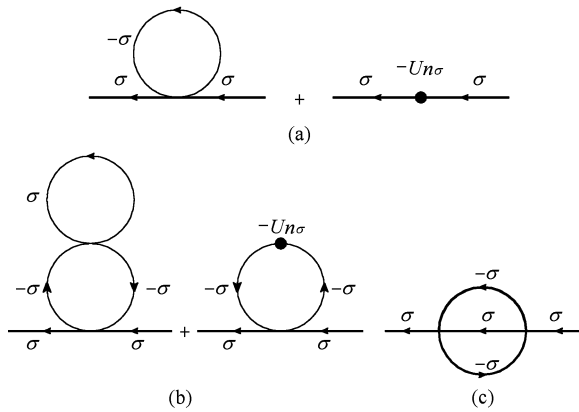


图1 (a) 非对称 Anderson 模型的一阶本征自能图; (b), (c) 二阶本征自能图

首先研究不加磁场的非对称 Anderson 模型即 $c \neq 0, h = 0$ 的情况, 此时

$$E_\sigma = E = \left(n - \frac{1}{2(1+c)} \right) U, \quad (12)$$

由于格林函数与自旋无关, 下文中如无需要不再强调自旋. 记本征自能为 $\Sigma(\omega, E)$, 则推迟格林函数为

$$G(\omega, E) = \frac{1}{\omega - E + i\Delta - \Sigma(\omega, E)}, \quad (13)$$

对应的态密度为 $\rho_d(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\omega, E)$. 图2显示了二级微扰论(7)式得出的非对称 Anderson 模型 $U/2|\varepsilon_d| = 1.3$ 时态密度随 $U/\pi\Delta$ 的变化.

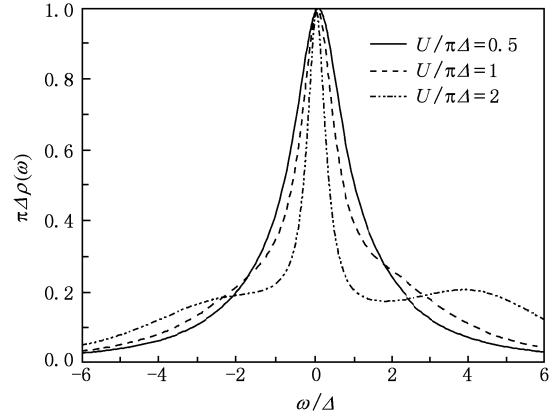


图2 由二级微扰展开(7)式得出的非对称 Anderson 模型 $U/2|\varepsilon_d| = 1.3$ 时态密度随 $U/\pi\Delta$ 的变化. 可见随耦合常数 $U/\pi\Delta$ 的增大, 费米能附近的共振越来越强, 非对称 Anderson 模型的态密度不再是关于费米能对称的, 共振中心也不在费米能处

Hewson 建立的是对称 Anderson 模型的重整微扰方法^[23], 对于非对称 Anderson 模型, 由于 $E \neq 0$, 重整微扰展开并不相同. 下面用展开公式(7)式和(11)式建立非对称 Anderson 模型的重整微扰方法. 采用与 Hewson 类似的自能展开方法^[23]

$$\begin{aligned} \Sigma(\omega, E) &= \Sigma(0,0) + (\omega - E)\Sigma'(0,0) \\ &+ \Sigma^{\text{rem}}(\omega, E), \end{aligned} \quad (14)$$

实际上, 有 $\Sigma(0,0) = 0$, 这是由于 Yamada 微扰论中对称 Anderson 模型的局域能级已经位于费米能处, 即 $E = 0$, 不再重整^[18]. 引入重整化因子 $Z = 1/(1 - \Sigma'(0,0))$, 以及重整化参数

$$\tilde{\Delta} = Z\Delta; \tilde{\Sigma}^{\text{rem}}(\omega, E) = Z\Sigma^{\text{rem}}(\omega, E). \quad (15)$$

采用展开式(14)式是因为易于定义实数的重整化因子 Z , 这与重整微扰中的减除点 ($\omega = 0, \tilde{E} = 0$) 相对应. 按(14), (15)式可以将推迟格林函数(13)式写为

$$\begin{aligned} G(\omega, E) &= \frac{Z}{\omega - E + i\tilde{\Delta} - \tilde{\Sigma}^{\text{rem}}(\omega, E)} \\ &= Z\tilde{G}(\omega, E), \end{aligned} \quad (16)$$

这里 E 并不经过重整. 定义重整化的场: $\tilde{d}_\sigma(\tau) = \frac{1}{Z} d_\sigma(\tau)$. 重整化的正规顶角和裸的正规顶角的关系

系为

$$\begin{aligned} & \tilde{I}(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4) \\ & = Z^2 \Gamma(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4), \end{aligned} \quad (17)$$

定义零频率处的重整正规顶角为重整化参数

$$\tilde{U} = \tilde{I}(0, 0, 0, 0), \quad (18)$$

上面是从裸拉氏量出发的重整方法. 也可以用场论中的重整微扰方法, 称(4)式定义的拉氏量为裸拉氏量, 则定义场重整化 $\tilde{d}_\sigma(\tau) = \frac{1}{\sqrt{Z}} d_\sigma(\tau)$ 后, 可以将裸拉氏量分成两部分

$$L_{\text{AM}}(\tau) = \tilde{L}_{\text{AM}}(\tau) + \tilde{L}_{\text{CT}}(\tau), \quad (19)$$

其中重整化拉氏量和抵消项拉氏量分别为

$$\begin{aligned} \tilde{L}_{\text{AM}}(\tau) & = \sum_{\sigma} \tilde{d}_{\sigma}^{\dagger}(\tau) (\partial_{\tau} + \tilde{E}) \tilde{d}_{\sigma}(\tau) \\ & + \tilde{U} [\tilde{n}_{d\uparrow}(\tau) - \tilde{n}] [\tilde{n}_{d\downarrow}(\tau) - \tilde{n}] \\ & + \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger}(\tau) (\partial_{\tau} + \varepsilon_{k\sigma}) c_{k\sigma}(\tau) \\ & + \sum_{k\sigma} [\tilde{V}_k c_{k\sigma}^{\dagger}(\tau) \tilde{d}_{\sigma}(\tau) \\ & + \tilde{V}_k^* \tilde{d}_{\sigma}^{\dagger}(\tau) c_{k\sigma}(\tau)], \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \tilde{L}_{\text{CT}}(\tau) & = \sum_{\sigma} \tilde{d}_{\sigma}^{\dagger}(\tau) [(Z-1)\partial_{\tau} + \lambda_d] \tilde{d}_{\sigma}(\tau) \\ & + \lambda_U [\tilde{n}_{d\uparrow}(\tau) - \tilde{n}] \\ & \times [\tilde{n}_{d\downarrow}(\tau) - \tilde{n}], \end{aligned} \quad (21)$$

上两式中 $\tilde{n} = n/Z$, $\tilde{V}_k = \sqrt{Z}V_k$, $\lambda_d = -Z\Sigma(0, 0)$, $\lambda_U = Z^2[U - \Gamma(0, 0, 0, 0)]$, $\tilde{E} = Z(E + \Sigma(0, 0))$. (20)式对应的零级格林函数为

$$\tilde{G}_{\sigma}^{(0)}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \tilde{E} + i\tilde{\Delta} \text{sgn}(\omega_n)}, \quad (22)$$

按照 \tilde{U} 的级次, 由 $\tilde{L}_{\text{AM}} + \tilde{L}_{\text{CT}}$ 联合进行微扰, 并且使得每一级 \tilde{U} 下都满足重整化条件

$$\begin{aligned} & \tilde{\Sigma}(0, 0) = 0; \\ & \tilde{\Sigma}'(0, 0) = 0; \\ & \tilde{I}(0, 0, 0, 0) = \tilde{U}, \end{aligned} \quad (23)$$

上式中采用减除点 ($\omega = 0, \tilde{E} = 0$) 的原因是通常的“零动量减除” ($\omega = 0, \tilde{E}$) 和“质壳减除” ($\omega = \tilde{E}, \tilde{E}$) 都将产生含有虚部的 Z , 因此并不合适. 这里的

减除方案对应了自能的展开式(14)式.

重整化的格林函数为

$$\tilde{G}(\omega, \tilde{E}) = \frac{1}{\omega - \tilde{E} + i\tilde{\Delta} - \tilde{\Sigma}(\omega, \tilde{E})}, \quad (24)$$

$\tilde{G}(\omega, \tilde{E})$ 与(16)式中的 $\tilde{G}(\omega, E)$ 本质上是相同的, 但它们对应了不同的重整方法. 而 $\tilde{\Sigma}(\omega, \tilde{E})$ 和 $\tilde{\Sigma}^{\text{rem}}(\omega, E)$ 表达式并不相同, 因为前者包含了抵消项的贡献.

我们得到的非对称 Anderson 模型的重整微扰方法与 Hewson 的对称 Anderson 模型的重整微扰^[23]不同之处在于零级重整化格林函数(22)式含有非零的重整能级 \tilde{E} , 并且微扰展开不同. 图6和图7中分别给出了非对称 Anderson 模型的一阶和二阶自能图, 下文将用它们计算态密度和低温电导.

3. 非对称 Anderson 模型的局域电子占据数 n , 局域能级 E 及 $\tilde{U}, \tilde{\Delta}$ 的计算

Anderson 模型的零温局域电子占据数可由 Friedel sum rule 严格给出^[23,30]

$$n = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{E + \Sigma(0, E)}{\Delta}\right). \quad (25)$$

下面由(7)式将正规自能 $\Sigma(\omega, E)$ 计算到 U 的二级项. 一阶和二阶自能图见图1.

$$\Sigma^{(1)}(\omega, E) = U(n_0 - n), \quad (26)$$

$$\Sigma^{(2)}(\omega, E) = \Sigma^A(\omega, E) + \Sigma^B(\omega, E), \quad (27)$$

$$\Sigma^A(\omega, E) = -\frac{\Delta U^2}{\pi} (n_0 - n) \frac{1}{E^2 + \Delta^2}, \quad (28)$$

其中 $n_0 = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctan \frac{E}{\Delta}$ 是零级格林函数对应的粒子占据数. $\Sigma^A(\omega, E)$ 和 $\Sigma^B(\omega, E)$ 分别是图1(b)和(c)所示的自能图. 记 $u = U/\pi\Delta$, 将 $\Sigma^B(0, E)$ 展开到了 E 的三级

$$\begin{aligned} \Sigma^B(0, E) & = \Delta u^2 \left\{ \left(2 - \frac{\pi^2}{4}\right) \frac{E}{\Delta} + \left(\frac{\pi^2}{4} - 2 + \frac{1}{9}\right) \right. \\ & \left. \times \left(\frac{E}{\Delta}\right)^3 + 0 \left[\left(\frac{E}{\Delta}\right)^5\right] \right\}. \end{aligned} \quad (29)$$

将诸自能带入(25)式, 利用 E 和 n 的关系(12)式, 就得到了任一自旋局域电子占据数

$$n = \frac{1}{2} - uD + u^2 D$$

$$+ u^3 \left[\frac{\pi^2}{3} D^3 - D \left(3 - \frac{\pi^2}{4} \right) \right] + 0(u^4), \quad (30)$$

其中 $D = \frac{1}{2} - \frac{1}{2(1+c)}$. 由于三级正规自能贡献了 n 展开式中的 u^4 级, 因此(30)式是准确的主导项. 对于对称 Anderson 模型, $c=0$, 自然有 $n=1/2$. 图 3 中给出了(30)式表示的 n 随 c 的变化, 图中还将结果与 Hartree Fock 近似的结果对比. 实际上 Hatree Fock 近似得到的占据数只相当于在(25)式中取一级自能的结果.

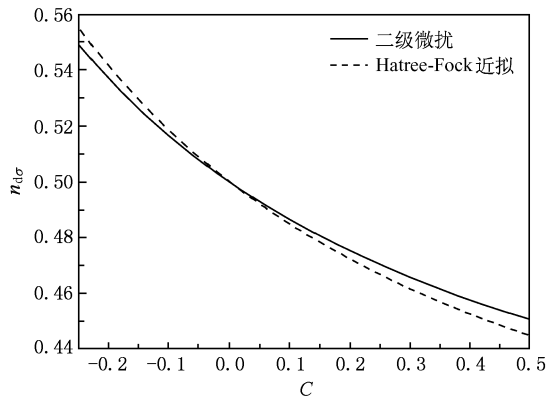


图 3 $U/\pi\Delta=0.5$ 时由二级微扰论算出的局域电子占据数 $n_{d\sigma}$ 随 $c=(U/2|\varepsilon_d|)-1$ 的变化(实线). 图中还与 Hatree-Fock 近似的结果(虚线)进行了对比

将(30)式代入(12)式中, 得到

$$E = U \left\{ D - uD + u^2 D + u^3 \left[\frac{\pi^2}{3} D^3 - D \left(3 - \frac{\pi^2}{4} \right) \right] + 0(u^4) \right\}, \quad (31)$$

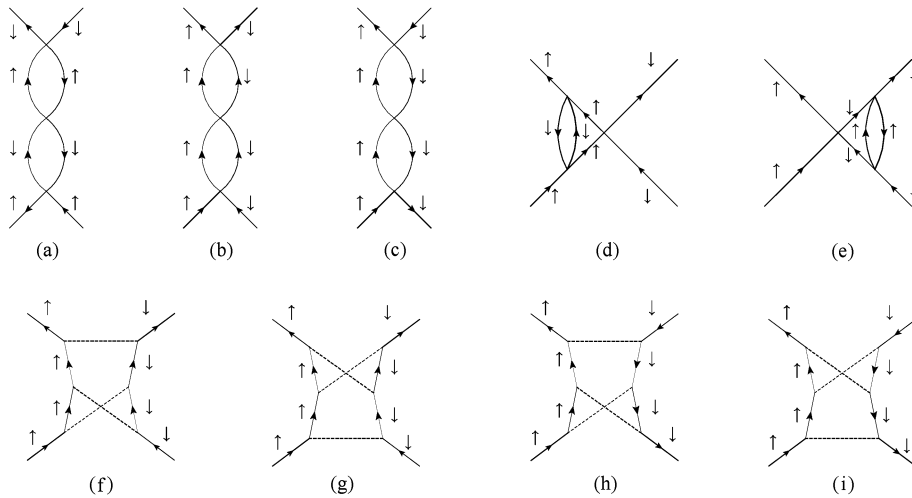


图 5 三阶正规顶角

对于对称 Anderson 模型, 由上式就得到 $E=0$, 局域能级位置在费米能处. 计算了二级自能的导数在零频率处的值

$$\Sigma'(0, E) = u^2 \left\{ \frac{\pi^2}{4} - 3 + \left(3 - \frac{8.08}{4} \right) \left(\frac{E}{\Delta} \right)^2 + 0 \left[\left(\frac{E}{\Delta} \right)^4 \right] \right\}, \quad (32)$$

其中 8.08 是数值解. 这样, 由定义就得到重整化因子

$$Z = 1 - \left(3 - \frac{\pi^2}{4} \right) u^2 + 0(u^4). \quad (33)$$

由于 $E=0$ 时三级自能恒为 0, 因此上式不含 u^3 项. 正规顶角由(11)式算出, 二级和三级正规顶角分别见图 4, 图 5.

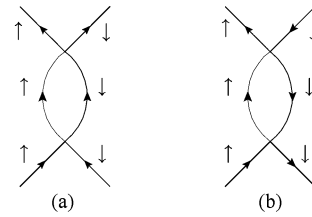


图 4 二阶正规顶角

其中二阶正规顶角算出为

$$\Gamma^{(2)}(0, 0, 0, 0) = \frac{U^2}{\pi\Delta} \left\{ \frac{1}{(E/\Delta)^2 + 1} - \frac{1}{E/\Delta} \arctan \frac{E}{\Delta} \right\}, \quad (34)$$

上式按照 E/Δ 展开则为

$$\Gamma^{(2)}(0, 0, 0, 0)$$

$$= Uu \left\{ -\frac{2}{3}(E/\Delta)^2 + 0[(E/\Delta)^4] \right\}, \quad (35)$$

将三阶正规顶角按 E/Δ 展开的结果是

$$\begin{aligned} & \Gamma^{(3)}(0,0,0,0) \\ &= Uu^2 \left\{ \left(15 - \frac{3}{2}\pi^2\right) \right. \\ & \quad \left. + \left(\frac{9}{2}\pi^2 - 38 - \frac{2}{3}\right)\left(\frac{E}{\Delta}\right)^2 + 0[(E/\Delta)^4] \right\}, \quad (36) \end{aligned}$$

将 E 的表达式(31)式代入(35), (36)式, 即可得到计算到三阶时正规顶角的表达式

$$\begin{aligned} \Gamma(0,0,0,0) &= \Gamma^{(1)}(0,0,0,0) + \Gamma^{(2)}(0,0,0,0) \\ & \quad + \Gamma^{(3)}(0,0,0,0) \\ &= U \left\{ 1 + \left(15 - \frac{3}{2}\pi^2\right)u^2 \right. \\ & \quad \left. - \frac{2}{3}\pi^2 D^2 u^3 + 0(u^4) \right\}. \quad (37) \end{aligned}$$

四阶以及更高阶正规顶角贡献上式中的 $0(u^4)$ 项. 对于对称 Anderson 模型, 在上式中取 $D=0$, 正得到 Hewson 的结果^[23].

由 \tilde{U} 的定义(18)式及(37)式即可得到

$$\begin{aligned} \tilde{U} &= U \left[1 - (\pi^2 - 9)u^2 \right. \\ & \quad \left. - \frac{2}{3}\pi^2 D^2 u^3 + 0(u^4) \right], \quad (38) \end{aligned}$$

$$\tilde{\Delta} = \Delta \left[1 - \left(3 - \frac{\pi^2}{4}\right)u^2 + 0(u^4) \right]. \quad (39)$$

还可以用 $\tilde{U}, \tilde{\Delta}$ 来表示 \tilde{E}, n , 即

$$\begin{aligned} \tilde{E} &= \pi\tilde{\Delta} \left\{ D\tilde{u} - D\tilde{u}^2 + D\left(\frac{5}{4}\pi^2 - 11\right)\tilde{u}^3 \right. \\ & \quad \left. + \left[\pi^2 D^3 + D\left(21 - \frac{9}{4}\pi^2\right)\right]\tilde{u}^4 + 0(\tilde{u}^5) \right\}, \quad (40) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{2} - \tilde{u}D + \tilde{u}^2 D \\ & \quad + \tilde{u}^3 \left[\frac{\pi^2}{3} D^3 - D(\pi^2 - 9) \right] + 0(\tilde{u}^4). \quad (41) \end{aligned}$$

对于对称 Anderson 模型, $D=0$, 由上面的式子自然得到 $\tilde{E}=0, n_\sigma=1/2$, 并且 $\tilde{U}, \tilde{\Delta}$ 也回到 Hewson 的结果^[23].

只有在弱耦合 $u \ll 1$ 时才能得到各种重整化参数的具体表达式, 对于强耦合的情况, 需要利用 $\chi_c, \gamma_{\text{imp}}$ 的 Bethe ansatz 或者 NRG 结果^[23,28]. Hewson 发现, 弱耦合 ($U/\pi\Delta \ll 1$) 时 $\tilde{u} = \tilde{U}/\pi\tilde{\Delta} \ll 1$, 而强耦

合 ($U/\pi\Delta \gg 1$) 时 $\tilde{u} \rightarrow 1$. 由于重整微扰方法选择 $\tilde{U}/\pi\tilde{\Delta}$ 作为展开参数, 因此重整微扰比普通的微扰法更适合于研究 Anderson 模型. 下面将用上面建立的重整微扰方法来计算非对称 Anderson 模型.

4. 态密度共振性质及低温电导

从(19)式出发, 利用重整微扰方法来计算非对称 Anderson 模型局域电子态密度和低温电导. 在 \tilde{U} 一级下, 重整化拉氏量和抵消项拉氏量产生的自能图见图 6. 由于图 6(a), (b), (c) 诸自能均与频率 ω 无关, 而且 $\tilde{E}=0$ 时 (a) 和 (b) 相互抵消, 因此由重整化条件(23)式得到

$$\lambda_d^{(1)} = 0; Z^{(1)} = 0. \quad (42)$$

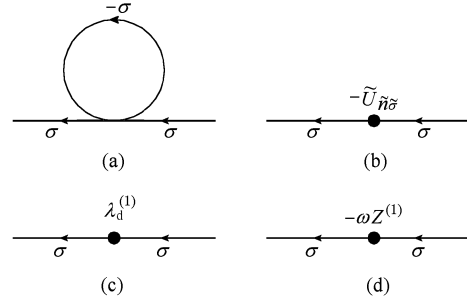


图 6 重整拉氏量和抵消项拉氏量产生的一阶图

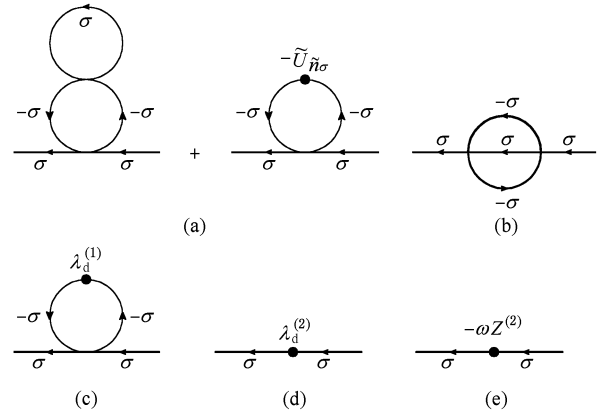


图 7 重整拉氏量和抵消项拉氏量产生的二阶图

一阶正规顶角即为树图, 无需引入减除项, 故有 $\lambda_U^{(1)}=0$. 因此一级正规自能为

$$\begin{aligned} \tilde{\Sigma}^{(1)}(\omega, \tilde{E}) &= \tilde{\Sigma}^{(1)}(0, \tilde{E}) \\ &= \tilde{U}(\tilde{n}_0 - \tilde{n}), \quad (43) \end{aligned}$$

其中 $\tilde{n}_0 = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctan \frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}$. 在 \tilde{U} 二级下, 自能图见图 7. 由于 $Z^{(1)} = 0$, 故它不再产生相应的抵消项自能图. 其中图 7(a) 自能为

$$\begin{aligned} \tilde{\Sigma}^A(\omega, \tilde{E}) &= \tilde{\Sigma}^A(0, \tilde{E}) \\ &= -\frac{\tilde{\Delta} \tilde{U}^2}{\pi} (\tilde{n}_0 - \tilde{n}) \frac{1}{\tilde{E}^2 + \tilde{\Delta}^2}, \quad (44) \end{aligned}$$

由于 $\lambda_d^{(1)} = 0$ 故图 7(c) 为 0. 记图 7(b) 为 $\tilde{\Sigma}^B(\omega, \tilde{E})$, 则由 (32) 式得 $\tilde{\Sigma}^{B'}(0, 0) = -\left(3 - \frac{\pi^2}{4}\right) \tilde{u}^2$. 由于 $\tilde{\Sigma}^A(\omega, \tilde{E})$ 与 ω 无关, 因此 $Z^{(2)} = -\left(3 - \frac{\pi^2}{4}\right) \tilde{u}^2$. 由于所有自能图在 $(\omega = 0, \tilde{E} = 0)$ 时都为 0, 故有 $\lambda_d^{(2)} = 0$. 因此, 至 \tilde{U}^2 级, 得到的推迟格林函数为

$$\tilde{G}(\omega, \tilde{E}) = \frac{1}{\omega + i\tilde{\Delta} - \tilde{E} - \{\tilde{\Sigma}^{(1)}(0, \tilde{E}) + \tilde{\Sigma}^A(0, \tilde{E}) + \tilde{\Sigma}^B(\omega, \tilde{E}) - Z^{(2)}\omega\}}, \quad (45)$$

将 $\tilde{\Sigma}^B(\omega, \tilde{E})$ 展开

$$\begin{aligned} \tilde{\Sigma}^B(\omega, \tilde{E}) &= \tilde{\Sigma}^B(0, 0) + (\omega - \tilde{E}) \tilde{\Sigma}^{B'}(0, 0) + \tilde{\Sigma}^{\text{rem}B}(\omega, \tilde{E}) \\ &= \tilde{\Sigma}^B(0, 0) + (\omega - \tilde{E}) Z^{(2)} + \tilde{\Sigma}^{\text{rem}B}(\omega, \tilde{E}), \quad (46) \end{aligned}$$

这样, 格林函数可以写为

$$\begin{aligned} \tilde{G}(\omega, \tilde{E}) &= \frac{1}{\omega + i\tilde{\Delta} - \tilde{E} + Z^{(2)}\tilde{E} - \{\tilde{\Sigma}^{(1)}(0, \tilde{E}) + \tilde{\Sigma}^A(0, \tilde{E}) + \tilde{\Sigma}^{\text{rem}B}(\omega, \tilde{E})\}}, \\ \tilde{\Sigma}^B(0, \tilde{E}) &= \tilde{\Delta} \tilde{U}^2 \left\{ \left(2 - \frac{\pi^2}{4}\right) \frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}} + \left(\frac{\pi^2}{4} - 2 + \frac{1}{9}\right) \left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right)^3 + 0 \left[\left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right)^5 \right] \right\}. \quad (47) \end{aligned}$$

因此由 (46) 式得

$$\tilde{\Sigma}^{\text{rem}B}(0, \tilde{E}) = \tilde{\Delta} \tilde{U}^2 \left\{ -\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}} + \left(\frac{\pi^2}{4} - 2 + \frac{1}{9}\right) \left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right)^3 + 0 \left[\left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right)^5 \right] \right\}, \quad (48)$$

另外, 由

$$\tilde{\Sigma}^{B'}(0, \tilde{E}) = \tilde{u}^2 \left\{ \frac{\pi^2}{4} - 3 + \left(3 - \frac{8.08}{4}\right) \left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right)^2 + 0 \left[\left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right)^4 \right] \right\}, \quad (49)$$

得出

$$\begin{aligned} \tilde{\Sigma}^{\text{rem}B}(\omega, \tilde{E}) &= \tilde{\Delta} \tilde{u}^2 \left\{ -\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}} + \left(\frac{\pi^2}{4} - 2 + \frac{1}{9}\right) \left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right)^3 + 0 \left[\left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right)^5 \right] \right\} \\ &\quad + \omega \tilde{u}^2 \left\{ \left(3 - \frac{8.08}{4}\right) \left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right)^2 + 0 \left[\left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right)^3 \right] \right\} - i \frac{1}{\tilde{\Delta}} \omega^2 \alpha_l \tilde{u} \left\{ 1 + 0 \left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right) \right\}. \quad (50) \end{aligned}$$

其中 $-i\omega^2 \alpha_l \tilde{u}^2 / \tilde{\Delta}$ 是二阶自能 $\tilde{\Sigma}^B(\omega, 0)$ 的虚部, Yamada 已给出 $\alpha_l = 1/2$ ^[18]. 上式是零温时的结果, $T \neq 0$ 时, 还有一项虚部^[18]: $-i\pi^2 T^2 \alpha_l \tilde{u}^2 / \tilde{\Delta}$. 因此非零温时此项自能为

$$\tilde{\Sigma}^{\text{rem}B}(\omega, \tilde{E}) = \tilde{\Delta} \tilde{u}^2 \left\{ -\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}} + \left(\frac{\pi^2}{4} - 2 + \frac{1}{9}\right)$$

$$\begin{aligned} &\times \left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right)^3 + 0 \left[\left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right)^5 \right] \right\} \\ &+ \omega \tilde{u}^2 \left\{ \left(3 - \frac{8.08}{4}\right) \left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right)^2 + 0 \left[\left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right)^3 \right] \right\} \\ &- i \frac{1}{\tilde{\Delta}} (\omega^2 + \pi^2 T^2) \alpha_l \tilde{u}^2 \left\{ 1 + 0 \left(\frac{\tilde{E}}{\tilde{\Delta}}\right) \right\}. \quad (51) \end{aligned}$$

将(43), (44), (50)式代入(47)式即得到了推迟格林函数, 相应的准粒子态密度为 $\tilde{\rho}(\omega, \tilde{E}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\tilde{G}(\omega, \tilde{E})$, 由 $\frac{\partial}{\partial\omega}\tilde{\rho}(\omega, \tilde{E}) = 0$, 保留到 \tilde{E} 的一级, 得到它对应的重整化粒子的态密度峰位置为

$$\omega_{\max} = \frac{2\tilde{E}}{2 + 2\alpha_1\tilde{u}^2} = \frac{2\tilde{E}}{2 + \tilde{u}^2}, \quad (52)$$

此结果是保留到 \tilde{E} 的一次项的结果, 即适用于弱耦合 $u = U/\pi\Delta \ll 1$, $\tilde{u} \ll 1$, 也适用于强耦合 $u = U/\pi\Delta \gg 1$, $\tilde{u} \rightarrow 1$. 图 8 中给出了由(52)式得出的峰位置和数值计算得到的态密度峰的对比, 其中 \tilde{E} , \tilde{u} 利用(38), (39), (40)式的结果. 可以看出(52)式所示的峰位置和态密度峰是符合的.

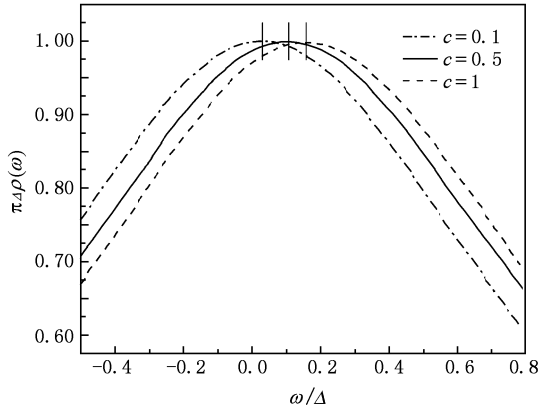


图 8 $U/\pi\Delta = 0.3$ 时非对称 Anderson 模型的态密度, 三条曲线对应的 $c = U/2|\varepsilon_d| - 1$ 分别为 0.1 (虚点线), 0.5 (实线), 1 (虚线). 竖线是由(52)式算出的相应的峰的位置

杂质散射产生的电导可以由玻尔兹曼方程得到

$$\sigma_{\text{imp}} = -\frac{ne^2}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} \tau(\omega) \frac{\partial f(\omega)}{\partial\omega} d\omega, \quad (53)$$

其中 n 为传导电子密度, $f(\omega)$ 为费米分布函数. 经 Summerfield 公式^[22]得到低温下电导的展开式

$$\sigma_{\text{imp}} = \frac{ne^2}{m} \left[\tau(\omega = 0, T, \tilde{E}) + \frac{\pi^2}{6} T^2 \tau''(\omega = 0, T, \tilde{E}) \right]. \quad (54)$$

Anderson 模型中传导电子的散射矩阵即为局域电子的推迟格林函数, 由于弛豫率正比于散射矩阵的虚部, 因此弛豫时间为^[31]

$$\tau(\omega) = \frac{1}{2\pi c_{\text{imp}} V^2 \rho(\omega)} = \frac{1}{2\pi c_{\text{imp}} V^2 Z \tilde{\rho}(\omega)}, \quad (55)$$

重整化粒子态密度 $\tilde{\rho}(\omega, \tilde{E}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\tilde{G}(\omega, \tilde{E})$, $\tilde{G}(\omega, \tilde{E})$ 已由(47)式给出. 由(55)式求出弛豫时间后代入(54)式, 保留到 T^2 级, 得到电导

$$\sigma(T, \tilde{E}) = \sigma(0, 0) \left\{ 1 + (\tilde{E}/\tilde{\Delta})^2 + \left(\frac{\pi T}{\tilde{\Delta}} \right)^2 \frac{1}{3} (1 + 2\tilde{u}^2) \right\}, \quad (56)$$

上式既适用于弱耦合, 也适用于强耦合. 上式保留到 $(\tilde{E}/\tilde{\Delta})^2$ 及 $T^2 \tilde{U}^2$, 因此计算电导时自能 $\tilde{\Sigma}^{(1)}(\omega, \tilde{E})$ 和 $\tilde{\Sigma}^A(\omega, \tilde{E})$ 均不产生贡献. 可以看到, 由于 $\tilde{E} \neq 0$, 导致零温电导增加, 这是因为由于态密度峰的移动, 导致费米面处态密度下降, 从而费米面处的弛豫时间增大, 所以零温电导也增大. 上式的电导中 T^2 项显示了 local Fermi liquid 行为.

由(56)式, 非对称 Anderson 模型的零温电导和对称 Anderson 模型的零温电导之比为

$$\frac{\sigma(0, \tilde{E})}{\sigma(0, 0)} = 1 + (\tilde{E}/\tilde{\Delta})^2. \quad (57)$$

5. 磁场作用下的态密度和电导

利用得到的关于非对称 Anderson 模型的结果, 推广到磁场下的对称 Anderson 模型. 仍用 Friedel sum rule 来计算粒子占据数^[23,30]

$$n_\sigma = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{E_\sigma + \Sigma_\sigma(0, h)}{\Delta}\right), \quad (58)$$

若令 $n_\sigma = \frac{1}{2} + \sigma a$ 则 $E_\sigma = \varepsilon_{d\sigma} + n_\sigma U = -\sigma(h + aU)$.

一阶自能和二阶自能图见图 1. 此时自能和自旋有关. 图 1(a) 对应的自能为

$$\Sigma_\sigma^{(1)}(\omega, h) = U(n_\sigma^{(0)} - n_\sigma), \quad (59)$$

其中 $n_\sigma^{(0)} = \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arctan \frac{E_\sigma}{\Delta}$. 图 1(b) 和 (c) 分别记为 $\Sigma_\sigma^A(\omega, h)$ 和 $\Sigma_\sigma^B(\omega, h)$.

$$\Sigma_\sigma^{(2)}(\omega, h) = \Sigma_\sigma^A(\omega, h) + \Sigma_\sigma^B(\omega, h), \quad (60)$$

$$\Sigma_\sigma^A(\omega, h) = -\frac{\Delta U^2}{\pi} (n_\sigma^{(0)} - n_\sigma) \frac{1}{E_\sigma^2 + \Delta^2}. \quad (61)$$

由于 $E_\sigma \propto \sigma$, 此时的零级格林函数具有特殊的对称性: $G_\sigma^{(0)}(i\omega_n) = -G_\sigma^{(0)}(-i\omega_n)$, 因此发现只要将非对称 Anderson 模型的相应自能 $\Sigma^B(\omega, E)$ 中 E 换为 E_σ 就得到了磁场作用下对称 Anderson 模型的自能

$$\Sigma_{\sigma}^B(\omega, h) = \Sigma^B(\omega, E \Rightarrow E_{\sigma}), \quad (62)$$

代入(29)式就得到

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma}^B(0, h) = \Delta u^2 & \left\{ \left(2 - \frac{\pi^2}{4} \right) \frac{E_{\sigma}}{\Delta} + \left(\frac{\pi^2}{4} - 2 + \frac{1}{9} \right) \right. \\ & \left. \times \left(\frac{E_{\sigma}}{\Delta} \right)^3 + 0 \left[\left(\frac{E_{\sigma}}{\Delta} \right)^5 \right] \right\}, \quad (63) \end{aligned}$$

Hewson 用数值方法得到的第二个系数的大小是 0.578^[23], 正与我们算出的 $\pi^2/4 - 2 + 1/9$ 相符. 将 (59), (61), (63) 式代入 (58) 式中, 展开到 h 的一级项, 得到电子占据数为

$$\begin{aligned} n_{\sigma} = \frac{1}{2} + \sigma \frac{1}{\pi} \frac{h}{\Delta} \\ \times \left\{ 1 + u + \left(3 - \frac{\pi^2}{4} \right) u^2 + 0(u^3) \right\}, \quad (64) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_{\sigma} = -\sigma h & \left\{ 1 + u + u^2 \right. \\ & \left. + \left(3 - \frac{\pi^2}{4} \right) u^3 + 0(u^4) \right\}, \quad (65) \end{aligned}$$

$$Z = 1 - \left(3 - \frac{\pi^2}{4} \right) u^2 + 0(u^4). \quad (66)$$

Yamada 曾用不同的方法得到与 (64) 式相同的结果^[18].

此时顶角与磁场有关. 图 4 所示二阶正规顶角为

$$\begin{aligned} \Gamma^{(2)}(0, 0, 0, 0) \\ = \frac{U^2}{\pi \Delta} & \left[\frac{1}{(E_{\uparrow}/\Delta)^2 + 1} - \frac{1}{E_{\uparrow}/\Delta} \arctan \frac{E_{\uparrow}}{\Delta} \right] \\ = Uu & \left\{ -\frac{2}{3} (E_{\uparrow}/\Delta)^2 + 0[(E_{\uparrow}/\Delta)^4] \right\}, \quad (67) \end{aligned}$$

将(65)式代入(67)式, 由 \tilde{U} 的定义式(18)式得到

$$\tilde{U} = U \left\{ 1 - \frac{2}{3} \left(\frac{h}{\Delta} \right)^2 u + 0(u^2) \right\}, \quad (68)$$

$$\tilde{u} = u \left\{ 1 - \frac{2}{3} \left(\frac{h}{\Delta} \right)^2 u + 0(u^2) \right\}, \quad (69)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{\sigma} = ZE_{\sigma} & = -\sigma h \\ & \times \left\{ 1 + u + \left(\frac{\pi^2}{4} - 2 \right) u^2 + 0(u^4) \right\} \\ & \approx -\sigma h(1 + \tilde{u}). \quad (70) \end{aligned}$$

代入(52)式就得到在磁场作用下自旋为 σ 的态密度峰的位置为

$$\omega_{\max}^{(\sigma)} = \frac{-2\sigma h(1 + \tilde{u})}{2 + \tilde{u}^2}, \quad (71)$$

Hewson 曾经分析过 Logan 和 Dickens 的结果, 给出了和上式完全相同的结果^[23,32]. 从上式可以看出, peak position 从弱耦合 $\tilde{u} \ll 1$ 的 $\omega_{\max}^{(\sigma)} \approx -\sigma h$ 到强耦合 $\tilde{u} \sim 1$ 的 $\omega_{\max}^{(\sigma)} \approx -\frac{4}{3}\sigma h$. 自旋向上和自旋向下的两个峰之间的距离为

$$\Delta_{\text{DOS}} = \frac{4|h|(1 + \tilde{u})}{2 + \tilde{u}^2}, \quad (72)$$

峰之间的距离从耦合 $\tilde{u} \ll 1$ 的 $\omega_{\max}^{(\sigma)} \approx 2|h|$ 即为塞曼分裂的大小; 到强耦合 $\tilde{u} \sim 1$ 的 $\omega_{\max}^{(\sigma)} \approx \frac{8}{3}|h|$, 即 $\frac{4}{3}$ 倍塞曼分裂. Anderson 模型 Bethe ansatz 严格解的结果是磁场下态密度峰的分裂大于塞曼分裂而显著小于两倍塞曼分裂^[33], 因此(72)式是一个颇为合理的结果.

将(70)式代入(56)式, 考虑到两个自旋分量后, 得到磁场作用下的低温电导

$$\begin{aligned} \sigma(T, h) = \sigma(0, 0) & \left\{ 1 + \left(\frac{h}{\Delta} \right)^2 (1 + 2\tilde{u}) \right. \\ & \left. + \left(\frac{\pi T}{\tilde{\Delta}} \right)^2 \frac{1}{3} (1 + 2\tilde{u}^2) \right\}, \quad (73) \end{aligned}$$

磁场作用下的零温电导与零场电导之比为

$$\frac{\sigma(0, h)}{\sigma(0, 0)} = 1 + \left(\frac{h}{\Delta} \right)^2 (1 + 2\tilde{u}), \quad (74)$$

这是弱场的结果. 对于任意大小的磁场, Hewson 利用 NRG 的结果得到^[24]

$$\begin{aligned} \frac{\sigma(0, h)}{\sigma(0, 0)} & = 1/\cos^2 \left[\arctan \frac{\tilde{E}(h)}{\tilde{\Delta}(h)} \right] \\ & = 1 + \left(\frac{\tilde{E}(h)}{\tilde{\Delta}(h)} \right)^2 + 0 \left[\left(\frac{\tilde{E}(h)}{\tilde{\Delta}(h)} \right)^4 \right]. \quad (75) \end{aligned}$$

我们的结果(57)和(74)式正是将 Hewson 的结果保

留到 $\left(\frac{\tilde{E}(h)}{\tilde{\Delta}(h)} \right)^2$ 的结果. 从这里可以看出, 二级重整微扰的结果已经可以正确地给出低温电导的主导项. 因此, 重整微扰与普通的从裸参量出发的微扰相比具有很大的优势, 它不但可以处理弱耦合, 也可以处理包括强耦合的整个耦合强度区域, 并可以给出许多物理量正确的主导项贡献.

6. 结 论

我们将对称 Anderson 模型的 Yamada 微扰论推广到了非对称 Anderson 模型,并建立了与 Hewson 重整微扰方法不同的重整微扰方法,得到了非对称 Anderson 模型的重整化参量和裸参量的关系、由于粒子空穴对称破缺引起的态密度峰的位移量、以及低温电导.虽然只有在弱耦合下才能给出重整化参量和裸参量关系的具体表达式,但是重整微扰的低阶微扰结果已经可以给出物理量的正确结果^[23].还计算了对称 Anderson 模型在弱场下的行为,得到了自旋向上和向下态密度峰的分裂与磁场的关系,以及磁场对低温电导的影响.将结果与 Hewson 的 NRG 结果^[24]对比后,发现我们的结果正是后者在

弱场下的主导项贡献.发现 Yamada 微扰方法比 Hewson 的将库仑关联项直接作为微扰的方法更加适合进行非对称 Anderson 模型的重整微扰计算.因为在进行微扰计算之前,Yamada 微扰法先将哈密顿量进行了变形,重新定义了 local 能级,这相当于已经进行了局域能级的初步重整,因此特别适合接下来的重整微扰计算.Yamada 微扰论也普遍应用于 Anderson 模型的非平衡态研究中^[21,34],由于非常适合进行重整微扰计算,用 Yamada 重整微扰方法也可以用来研究 Anderson 模型的非平衡性质.正是由于局域电子格林函数只是 ω 的函数,因此 Anderson 杂质模型的重整化非常简单,重整微扰方法也可以推广到重整化群方法,用重整化群可能会得到比重整微扰更好的结果.

-
- [1] Kastner M A 1992 *Rev. Mod. Phys.* **64** 849
- [2] Gordon D G, Shtrikman H, Mahalu D, Magder D A, Meirav U, Kastner M A 1998 *Nature* **391** 156
- [3] Cronenwett S M, Oosterkamp T H, Kouwenhoven L P 1998 *Science* **281** 540
- [4] Meir Y, Wingreen N S, Lee P A 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 3048
- [5] Meir Y, Wingreen N S 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 2512
- [6] Meir Y, Wingreen N S, Lee P A 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 2601
- [7] Deng Y X, Yan Y H, Tang N S 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2027 (in Chinese) [邓宇翔、颜晓红、唐娜斯 2006 物理学报 **55** 2027]
- [8] Chen X W, Chen B J, Shi Z G, Song K H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2720 (in Chinese) [谌雄文、谌宝菊、施振刚、宋克慧 2006 物理学报 **58** 2720]
- [9] Wingreen N S, Meir Y 1994 *Phys. Rev. B* **49** 11040
- [10] Read N, Newns D M 1983 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **16** L1055
- [11] Houghton A, Read N, Won H 1987 *Phys. Rev. B* **35** 5123
- [12] Chen M L, Wang S J 2007 *Chin. Phys.* **16** 2096
- [13] Andrei N 1983 *Rev. Mod. Phys.* **55** 331
- [14] Wiegmann P B, Tselick A M 1983 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **16** 228
- [15] Wilson K G 1975 *Rev. Mod Phys.* **47** 773
- [16] Krishna H R, Wilkins J W, Wilson K G 1980 *Phys. Rev. B* **21** 1003
- [17] Sun K W, Xiong S J 2006 *Chin. Phys.* **15** 828
- [18] Yamada K 1975 *Prog. Theor. Phys.* **53** 970
- [19] Oguri A 2001 *Phys. Rev. B* **64** 153305
- [20] Neal H L, Collins D J 1993 *Phys. Rev. B* **48** 4299
- [21] Fujii T, Ueda K 2003 *Phys. Rev. B* **68** 155310
- [22] Hewson A C 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 4007
- [23] Hewson A C 2001 *J. Phys.: Condens. Matter* **13** 10011
- [24] Hewson A C, Bauer J, Koller W 2006 *Phys. Rev. B* **73** 045117
- [25] Anderson P W 1961 *Phys. Rev.* **124** 41
- [26] Nagaosa N 1999 *Quantum Field Theory in Strongly Correlated Electron Systems* (Berlin: Springer) p117
- [27] Clogston A M, Anderson P W 1961 *Bull. Am. Phys. Soc.* **6** 124
- [28] Hewson A C, Oguri A, Meyer D 2004 *Eur. Phys. J. B* **40** 177
- [29] Dong B, Lei X L 2001 *Phys. Rev. B* **63** 235306
- [30] Hewson A C 1993 *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Londo: Cambridge University Press) p114
- [31] Hewson A C 1993 *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Londo: Cambridge University Press)
- [32] Logan D E, Dickens N L 2001 *J. Phys.: Condens. Matter* **13** 9713
- [33] Moore J E, Wen X G 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 1722
- [34] Hershfield S 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3720

Renormalized perturbation expansion of asymmetric Anderson model*

Li Huan[†]

(*School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China*)

(Received 13 March 2010; revised manuscript received 24 March 2010)

Abstract

We generalize Yamada's perturbation theory and develop a renormalized perturbation method to study the asymmetric Anderson model. We obtain the occupancy of the local electrons, the renormalization factor, the renormalized energy level, and the renormalized parameters, which are expanded by the bare parameters. We also calculate the density of states of local electrons and the conductance of impurity scattering. The results covers the range from weak to strong coupling. We find that the approach we adopted is more convenient than Hewson's renormalization method in studying the asymmetric Anderson model.

Keywords: asymmetric Anderson model, renormalized perturbation, magnetic field

PACC: 7215Q, 1110G, 7225

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10674005).

[†] E-mail: lihuan@pku.edu.cn