

**ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ**  
**ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ**

---

---

ЕФИ-472(15)-81

Н.Ш.ИЗМАИЛЯН, А.Н.КОЧАРЯН

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ФАЗОВЫХ  
ПЕРЕХОДАХ В ДВУХУРОВНЕВОЙ МОДЕЛИ

**ԵՐԵՎԱՆ 1981 ԵՐԵՎԱՆ**

Н.Ш.ИЗМАИЛЯН, А.Н.КОЧАРЯН

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДАХ  
В ДВУХУРОВНЕВОЙ МОДЕЛИ

Получено точное решение задачи об электронных фазовых переходах в простейшей модели электронной структуры редкоземельных соединений, учитывающей взаимодействие  $S$  и  $f$  электронов в пределе сильной связи. Вычислены термодинамические характеристики (энергия, теплоёмкость, уравнение состояния) и анализировано поведение валентности под давлением. Показано, что без взаимодействия с решеткой фазовые переходы всюду оказываются плавными (II рода). Учет взаимодействия электронов с однородной деформацией решетки приводит к возможности скачкообразных фазовых переходов. Приведено сравнение с другими приближенными решениями задачи и показано, что только метод обобщенного самосогласованного поля дает результаты, близкие к точным. Эти результаты находятся в соответствии с выводами, полученными в модели андерсоновской решетки, и в хорошем качественном согласии с имеющимися экспериментальными данными для веществ на основе редкоземельных элементов типа  $SmS$ ,  $SmTe$  и т.д.

Ереванский физический институт

Ереван 1981

N.SH.IZMAILYAN, A.N.KOCHARYAN

EXACT SOLUTION OF THE PROBLEM OF PHASE TRANSITIONS  
IN THE TWO-LEVEL MODEL

The exact solution of the problem of electron phase transitions in the simplest model of electron structure of rare-earth compounds is obtained taking into account the interaction of  $S$  and  $f$  electrons within strong coupling limit. Thermodynamic characteristics (energy, heat capacity, equation of state) are calculated and valency behaviour under pressure is analyzed. It is shown that in the absence of the interaction with the lattice the phase transitions turn out smooth everywhere (of the II order). The allowance for the interaction of the electrons with the lattice homogeneous deformation results in the possibility of jumplike phase transitions. The comparison with other approximate solutions of the problem is presented and it is shown that only the generalized self-consistent method gives results close to the exact ones. These results are in agreement with those obtained in the Anderson lattice model and in good qualitative agreement with the available experimental data for rare-earth compounds like  $S_mS$ ,  $S_mTe$  etc.

Yerevan Physics Institute

Yerevan 1981

ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ЕФИ-472 (15)-81

Н.Ш.ИЗМАИЛЯН, А.Н.КОЧАРЯН

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ФАЗОВЫХ  
ПЕРЕХОДАХ В ДВУХУРОВНЕВОЙ МОДЕЛИ

Ереван 1981

© *Ереванский физический институт, 1981*

Теория электронных фазовых переходов (ЭФП) и состояний с промежуточной валентностью (СПВ) в редкоземельных металлах (РЗМ) была развита в работах [1,2], где для описания их свойств привлекалась модель андерсоновской решетки с изолированными (некогерентными) РЗ примесями. При описании же переходов в непроводящих соединениях типа  $S_m S$ ,  $S_m Te$  и т.д. более подходящей для рассмотрения является периодическая модель, учитывающая также эффекты когерентности РЗ ионов на отдельных центрах [3, 4].

В обоих случаях в качестве исходной модели, учитывающей основные особенности электронной структуры РЗ соединений [5] привлекался гамильтониан вида

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{k\epsilon} \epsilon_k a_{k\epsilon}^+ a_{k\epsilon} + \sum_{i\epsilon} T_i f_{i\epsilon}^+ f_{i\epsilon} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{ik\epsilon} (V_{ik} a_{k\epsilon}^+ f_{i\epsilon} + \text{з.с.}) + \\
 & + \frac{U}{2} \sum_{i\epsilon} f_{i\epsilon}^+ f_{i\epsilon} f_{i-\epsilon}^+ f_{i-\epsilon} + \frac{1}{N} \sum_{ikk'} \delta_{ikk'} a_{k\epsilon}^+ a_{k'\epsilon} f_{i\epsilon}^+ f_{i\epsilon}
 \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь первые два члена - кинетическая энергия  $s$ - электронов проводимости и энергия связи локализованных  $f$ -электронов. Третье слагаемое - гибридизация  $S$  и  $f$  состояний, четвертое

- внутриатомное кулоновское отталкивание  $f$  - электронов и последнее - кулоновское  $S$ - $f$  - взаимодействие.

В такой постановке точное решение задачи не представляется возможным. Поэтому в вышеуказанных работах  $S$ - $f$  взаимодействие электронов учитывалось в различных приближениях самосогласованного поля. В ряде случаев для решения задачи об ЭФП в гамильтониане (I) пренебрегали членом гибридизации (см. [6]).

Ниже мы попытаемся упростить модель, которая сохранила бы все характерные особенности исходной, так, чтобы иметь возможность точно решить задачу об ЭФП, и сравнить результаты с приближенными, полученными в более реалистической модели [1]. Для этого мы сохраним в предлагаемой модели все слагаемые взаимодействия, ответственные за появление ЭФП и СПВ.

В случае периодического кристалла нам необходимо учесть локальный характер матричных элементов гибридизации ( $V_{ik} = V e^{ikR_i}$ ) и кулоновского  $S$ - $f$  взаимодействия ( $g_{ikk'} = g e^{i(k-k')R_i}$ ). Переходя в (I) к узельному представлению для  $S$ -электронов ( $a_{k\epsilon} = N^{-\frac{1}{2}} \sum_i a_{i\epsilon} e^{ikR_i}$ ), пренебрежем интегралом перехода ( $T_{ij} = \frac{1}{N} \sum_k \epsilon_k e^{ik(R_i - R_j)}, i \neq j$ ). Это соответствует случаю сильной связи, когда  $S$ -зона аппроксимируется узким  $S$ -уровнем без дисперсии  $\epsilon_k = \text{const} = T_0$ . Имеется и экспериментальные указания на то, что состояния  $S$ -зоны проводимости являются в значительной мере локальными [7]. В итоге из (I) получаем

$$\begin{aligned}
 H = & T_0 \sum_{i\epsilon} a_{i\epsilon}^+ a_{i\epsilon} + T_1 \sum_{i\epsilon} f_{i\epsilon}^+ f_{i\epsilon} + \sum_{i\epsilon} (V a_{i\epsilon}^+ f_{i\epsilon} + \text{э.с.}) + \\
 & + \frac{V}{2} \sum_{i\epsilon} f_{i\epsilon}^+ f_{i\epsilon} f_{i-\epsilon}^+ f_{i-\epsilon} + g \sum_{i\epsilon\epsilon'} a_{i\epsilon}^+ a_{i\epsilon} f_{i\epsilon'}^+ f_{i\epsilon'} \quad (2)
 \end{aligned}$$

Тем самым мы приходим к двухуровневой модели. В ряде работ [8-11], задача в двухуровневой модели решалась без учета кулоновского  $s-f$  взаимодействия, а если оно и учитывалось, то только в приближении самосогласованного поля (ПСП) [10]. Задача с полным гамильтонианом (2) решается точно. Чтобы не усложнять выкладок в настоящей работе мы рассмотрим для простоты бесспиновый случай, с одним электроном на атом, соответствующий пределу  $U \rightarrow \infty$ , когда можно исключить состояние с двумя  $f$ -электронами на центр. При этом предположении модельный гамильтониан электронной системы имеет простой вид.

$$H = \sum_i \left\{ T_0 a_i^\dagger a_i + T_1 f_i^\dagger f_i + (V a_i^\dagger f_i + \text{э.с.}) + g a_i^\dagger a_i f_i^\dagger f_i \right\} \quad (3)$$

Метод двухвременных функций Грина позволяет получить из (3) замкнутую цепочку уравнений движения

$$\begin{aligned} (E - T_0) \langle\langle a_i | a_i^\dagger \rangle\rangle &= 1 + V \langle\langle f_i | a_i^\dagger \rangle\rangle + g \langle\langle f_i^\dagger f_i a_i | a_i^\dagger \rangle\rangle \\ (E - T_1) \langle\langle f_i | a_i^\dagger \rangle\rangle &= V \langle\langle a_i | a_i^\dagger \rangle\rangle + g \langle\langle a_i^\dagger a_i f_i | a_i^\dagger \rangle\rangle \\ (E - T_0 - g) \langle\langle f_i^\dagger f_i a_i | a_i^\dagger \rangle\rangle &= \langle f_i^\dagger f_i \rangle + V \langle\langle a_i^\dagger a_i f_i | a_i^\dagger \rangle\rangle \\ (E - T_1 - g) \langle\langle a_i^\dagger a_i f_i | a_i^\dagger \rangle\rangle &= -\langle a_i^\dagger f_i \rangle + V \langle\langle f_i^\dagger f_i a_i | a_i^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (4)$$

и соответственно

$$\begin{aligned} (E - T_1) \langle\langle f_i | f_i^\dagger \rangle\rangle &= 1 + V \langle\langle a_i | f_i^\dagger \rangle\rangle + g \langle\langle a_i^\dagger a_i f_i | f_i^\dagger \rangle\rangle \\ (E - T_0) \langle\langle a_i | f_i^\dagger \rangle\rangle &= V \langle\langle f_i | f_i^\dagger \rangle\rangle + g \langle\langle f_i^\dagger f_i a_i | f_i^\dagger \rangle\rangle \\ (E - T_1 - g) \langle\langle a_i^\dagger a_i f_i | f_i^\dagger \rangle\rangle &= \langle a_i^\dagger a_i \rangle + V \langle\langle f_i^\dagger f_i a_i | f_i^\dagger \rangle\rangle \\ (E - T_0 - g) \langle\langle f_i^\dagger f_i a_i | f_i^\dagger \rangle\rangle &= -\langle f_i^\dagger a_i \rangle + V \langle\langle a_i^\dagger a_i f_i | f_i^\dagger \rangle\rangle \end{aligned} \quad (5)$$

где  $n_s = \langle a_i^\dagger a_i \rangle$ ,  $n_f = \langle f_i^\dagger f_i \rangle$ ,  $\Delta = \langle a_i^\dagger f_i \rangle = \Delta^*$

Заметим, что и с использованием гамильтониана (2) также получается замкнутая система уравнений.

Из (4) и (5) легко находятся соответствующие гриновские функции. Приведем выражение для гриновской функции  $\langle\langle a_i | a_i^\dagger \rangle\rangle$

$$\begin{aligned} \langle\langle a_i | a_i^\dagger \rangle\rangle = & \frac{V\Delta - E_0 n_s}{(E-\alpha)(E-\beta)} - \frac{V\Delta + E_0 n_f}{(E-\alpha-g)(E-\beta-g)} + \\ & + \frac{1}{2} \left( \frac{n_s}{E-\alpha} + \frac{n_s}{E-\beta} + \frac{n_f}{E-\alpha-g} + \frac{n_f}{E-\beta-g} \right), \end{aligned} \quad (6)$$

где

$$E_0 = \frac{T_1 - T_0}{2}, \quad \alpha, \beta = \frac{T_1 + T_0}{2} \mp \sqrt{E_0^2 + V^2}$$

В дальнейшем, при получении соответствующих формул, мы для сравнения будем приводить результаты расчетов с гамильтонианом (3) в обобщенном приближении самосогласованного поля (ОПСП), соответствующем учету в кулоновском  $S-f$  взаимодействии наряду с обычными средними  $n_s$  и  $n_f$  (приближение самосогласованного поля (ПСП)) также и аномальных средних  $\Delta$ .

$$\begin{aligned} g a_i^\dagger a_i f_i^\dagger f_i \rightarrow & g n_f a_i^\dagger a_i + g n_s f_i^\dagger f_i - g \Delta (a_i^\dagger f_i + \text{э.с.}) + \\ & + g(\Delta^2 - n_s n_f) \end{aligned} \quad (7)$$

Зная гриновские функции, обычным образом можно получить соответствующие средние

$$\langle \dots \rangle = -\frac{1}{gT} \text{Im} \int \langle \langle \dots | \dots \rangle \rangle_{E+i\epsilon} f(E) dE, \quad (8)$$

где  $\mu$  в функции распределения  $f(E) = \frac{1}{1 + \exp \frac{E-\mu}{T}}$ , найденное из условия сохранения числа частиц  $n_s + n_f = 1$ , имеет вид

$$\mu = \frac{T_1 + T_0 + g}{2}. \quad (9)$$

В результате получаем средние

$$n_f = \frac{1}{2} - \frac{E_0}{2u} \cdot \frac{\text{sh} \frac{u}{T}}{\text{ch} \frac{u}{T} + e^{-g/2T}} \quad (10)$$

и

$$\Delta = -\frac{V}{2u} \cdot \frac{\text{sh} \frac{u}{T}}{\text{ch} \frac{u}{T} + e^{-g/2T}} \quad (11)$$

где

$$u = \sqrt{E_0^2 + V^2}$$

соответствующие уравнения согласования в ОПСП имеют вид

$$\bar{n}_f = \frac{E_0 + g \bar{n}_f}{2 \bar{u}} \text{th} \frac{\bar{u}}{2T} \quad (10^I)$$

и

$$\Delta = -\frac{V - g \Delta}{2 \bar{u}} \text{th} \frac{\bar{u}}{2T} \quad (11^I)$$

где

$$\bar{n}_f = \frac{1}{2} - n_f, \quad \bar{u} = \sqrt{(E_0 + g \bar{n}_f)^2 + (V - g \Delta)^2}$$

Аналогично найдем среднее значение энергии системы, приходящейся на один атом.

$$E = \frac{T_1 + T_0}{2} - u \frac{\operatorname{sh} \frac{u}{T}}{\operatorname{ch} \frac{u}{T} + e^{-g/2T}} + \frac{g}{2} \frac{e^{-g/2T}}{\operatorname{ch} \frac{u}{T} + e^{-g/2T}} \quad (12)$$

$$E = \frac{T_1 + T_0 + g}{2} - \bar{u} \operatorname{th} \frac{\bar{u}}{2T} - \frac{g}{4 \operatorname{ch}^2 \frac{\bar{u}}{2T}} \quad (12^I)$$

Приведем также выражения для термодинамического потенциала  $\Omega$ , получаемые интегрированием по константе связи (см. Приложение).

$$\Omega = -\frac{g}{2} - T \ln 2 \left( \operatorname{ch} \frac{u}{T} + e^{-g/2T} \right) \quad (13)$$

$$\Omega = -T \ln 2 \left( 1 + \operatorname{ch} \frac{\bar{u}}{T} \right) + g \left( \Delta^2 - n_s n_f \right) \quad (13^I)$$

В (13<sup>I</sup>)  $\Omega$  есть функция независимых переменных  $n_s$ ,  $n_f$  и  $\Delta$  и минимизация по ним дает соответствующие уравнения согласования (10)<sup>I</sup> и (11)<sup>I</sup>.

Как видно из (10)-(12) при  $T=0$  поведение  $n_f$ ,  $\Delta$  от  $E_0$  оказывается плавным и зависимость от  $g$  в этих выражениях выпадает. Физически это понятно, так как мы по существу рассматриваем взаимодействие на одном центре, на котором находится один электрон, естественно, что сам с собой он не взаимодействует. Этот результат получается и в ОПСП, в отличие от выводов ПСП [10, 11], где при  $T=0$  за счет кулоновского  $s-f$  взаимодействия ( $g$ ) происходит скачкообразный фазовый переход. Таким образом при  $T=0$  ОПСП дает результаты совпадающие с точным решением. Это позволяет предположить, что метод

ОПСИ может быть с успехом применим и при переходе к более реалистическим моделям.

Как видно из (10) - (13) легко анализировать поведение системы и при всех конечных температурах.

Хотя и в этом случае поведение кривых  $n_f(E_0)$  и  $\Delta(E_0)$  оказывается всюду плавным как в точном решении, так и в ОПСИ, все же имеется некоторое различие, заключающееся в том, что в ОПСИ получается несколько завышенное значение наклона кривой  $n_f(E_0)$ . (см. рис. 1а).

Таким образом, приходим к выводу, что в рамках двухуровневой модели, ни в ОПСИ, ни в точном решении не удастся описать скачкообразных фазовых переходов, в отличие от ПСП [2, 10, 11] (см. рис. 1б). Это находится в разумном согласии с принятым предположением о локальном характере кулоновского  $S-f$  взаимодействия.

Учет же конечной ширины зоны проводимости ( $W$ ) в ОПСИ, как показано в работе [3], уже при  $T=0$  приводит к еще более плавному изменению чисел заполнения  $S$  и  $f$  уровней от  $E_0$ .

Представляется интересным сравнить выражения для теплоемкостей, получаемые в СПСИ и в точном решении. Из (12) и (12)<sup>I</sup> находим

$$C = \frac{u^2}{T^2} \frac{1 + e^{-g/2T} \left[ \frac{g}{u} \operatorname{sh} \frac{u}{T} + \left(1 + \frac{g^2}{4u^2}\right) \operatorname{ch} \frac{u}{T} \right]}{\left( \operatorname{ch} \frac{u}{T} + e^{-g/2T} \right)^2} \quad (14)$$

и

$$C = \frac{\bar{u}^2}{2T^2 \left( \operatorname{ch}^2 \frac{u}{2T} - \frac{g}{4T} \right)} \quad (14)^I$$

Качественное поведение теплоемкости при  $V \neq 0$  в обоих случаях сказывается схожим. Однако при  $V = 0$  и  $E_0 = 0$  в ОПСП в отличие от точного решения имеется скачок в теплоёмкости (см.рис.2), характерный для фазовых переходов II рода.

Как было показано, в чисто электронной системе, кулоновское  $S-f$  взаимодействие не приводит к скачкообразному фазовому переходу и для их описания необходимо привлечь другие факторы. В частности, как и в работах [12-14] мы учтем взаимодействие электронов с решеткой, введя для этого линейную зависимость от удельного объема в электронных характеристиках  $\tilde{E}_0 = E_0 - \gamma V$  и  $\tilde{V} = V - \alpha V$ , и выбирая энергию упругости в виде  $E_{\text{реш}} = \frac{B V^2}{2}$  ( $B$  -модуль упругости). Вследствие этого становится возможным исследовать поведение системы под давлением. Обычным образом найдем уравнение состояния  $p = - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial V}$ , где  $\mathcal{E} = E + E_{\text{реш}}$ . Область неустойчивости дается неравенством  $\frac{\partial p}{\partial V} > 0$ , которое в точке  $V = \frac{a}{b}$  дает необходимое и достаточное условие скачкообразных фазовых переходов

$$\frac{b}{4u_0} \left\{ \frac{\text{sh} \frac{u_0}{T}}{\text{ch} \frac{u_0}{T} + e^{-g/2T}} + \frac{u_0}{T} \frac{1 + e^{-g/2T} (\text{ch} \frac{u_0}{T} + \frac{g}{2u_0} \text{sh} \frac{u_0}{T})}{(\text{ch} \frac{u_0}{T} + e^{-g/2T})^2} \right\} > B, \quad (15)$$

где  $a = 2\gamma E_0 + 4\alpha V$ ,  $b = \gamma^2 + 4\alpha^2$ ,  $c = 2\alpha E_0 - \gamma V$

$$u_0 = \frac{u}{V = a/b} = \frac{|c|}{\sqrt{b}}.$$

Условие скачкообразного фазового перехода при  $T = 0$  имеет вид

$$\frac{(\gamma^2 + 4\alpha^2)^{3/2}}{4|2\alpha E_0 - \gamma V|} > B \quad (16)$$

из которого видно, что область малых  $|c|$  (например, малые  $V$  и  $\alpha$ ) благоприятствуют скачку. В этой области при конечных температурах получаем следующее неравенство

$$\frac{b}{2T(1+e^{-g/2T})} \left[ 1 + \frac{g}{4T(1+e^{g/2T})} \right] > 0 \quad (I7)$$

При  $g = 0$  из (I7) находим критическую температуру, при которой переход сглаживается.  $T_c = \frac{b}{4B}$ . При малых  $g/T \ll 1$   $T_c$  растет ( $T_c = \frac{b}{4B} (1 + \frac{3g}{8T})$ ), и в пределе  $g/T \gg 1$  она максимальна и равна  $T_c = \frac{b}{2B}$ .

Таким образом, мы видим, что хотя само по себе  $s-f$  взаимодействие в точном решении не приводит к скачкам, тем не менее при наличии решеточного механизма оно может заметным образом повысить  $T_c$ .

Перейдем теперь к обсуждению полученных результатов. Было показано, что в точном решении задачи об ЭП в пределе сильной связи, когда можно пренебречь кинетической энергией  $S$ -электронов по сравнению с энергией их взаимодействия, не удается получить скачкообразные фазовые переходы (I рода). Размытие переходов и появление состояний с дробной валентностью (СПВ) возникает здесь за счет гибридизации  $S$  и  $f$  электронов. Можно ожидать, что, как и в ОПСП [1, 3], в точном решении учет конечной ширины  $W$  приведет к дальнейшему размытию перехода и к стабилизации состояний с промежуточной валентностью даже при  $V \neq 0$ . Стало быть основным фактором, приводящим к скачкообразным переходам, является электрон-решеточное взаимодействие. При этом, как мы видим, кулоновское  $s-f$  взаимодействие может

заметным образом усилить переход. Сравнение результатов ОПСП с точным решением показало, что в широкой области температур ОПСП является в достаточной степени надежным приближением и может быть использован при исследовании более реалистического случая широкой зоны проводимости.

Таким образом, одновременный учет в двухуровневой модели электрон-электронного и электрон-решеточного взаимодействий позволяет описать состояние с промежуточной валентностью и объяснить многообразие фазовых переходов с изменением валентности, наблюдаемые экспериментально в целом ряде редкоземельных соединений  $S_m S$ ,  $S_m Te$ ,  $Eu O$  и т.д. [5]

И следовательно, все основные выводы о характере ЭП, о поведении  $n_f(p)$ ,  $\Delta(p)$  и об уравнении состояния, полученные ранее в "примесной" модели Андерсона [3], сохраняются и в простейшей двухуровневой модели.

В заключение авторы благодарят Амагуни А.Ц. за внимание и поддержку, С.Г.Матиняна и участников теоретического семинара за полезные обсуждения.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

Термодинамический потенциал  $\Omega$  находим по формуле Гельмана-Фейнмана

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} = \langle \frac{\partial}{\partial \lambda} (\hat{H} - \mu \hat{N}) \rangle \quad (\text{П.1})$$

в гамильтониане  $\hat{H}$  и в химическом потенциале  $\mu$  константы взаимодействий  $V$  и  $g$  взяты помноженными на  $\lambda$ . Интегрируя в (П.1) по  $\lambda$ , находим

$$\Omega - \Omega_0 = \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} (\langle H_{int} \rangle - \frac{\lambda g}{2}) \quad (\text{П.2})$$

Здесь в качестве  $H_{int}$  взяты последние два члена в гамильтониане (3), а  $\Omega_0 = -T \ln 2 (1 + \text{ch} \frac{E_0}{T})$  — термодинамический потенциал невзаимодействующих частиц. В  $\langle H_{int} \rangle$  фигурируют средние  $\Delta$  и  $\langle a_i^+ a_i f_i^+ f_i \rangle$ , которые легко находятся из (4), (8) и (9).

$$\langle a_i^+ a_i f_i^+ f_i \rangle = \frac{e^{-g/2T}}{2 (\text{ch} \frac{u}{T} + e^{-g/2T})} \quad (\text{П.3})$$

Подставив (П.3) и (II) в (П.2) получим

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{g}{2} + \int_0^1 \frac{d\lambda}{\text{ch} \frac{1}{T} \sqrt{E_0^2 + (\lambda V)^2} + e^{-\frac{2g}{2T}}} \left[ \frac{g}{2} e^{-\frac{\lambda g}{2T} - \lambda V} \frac{\text{sh} \frac{1}{T} \sqrt{E_0^2 + (\lambda V)^2}}{\sqrt{E_0^2 + (\lambda V)^2}} \right] \quad (\text{П.4})$$

подынтегральное выражение в (П.4) может быть представлено в виде полной производной по  $\lambda$

$$-T \frac{d}{d\lambda} \ln \left\{ \operatorname{ch} \frac{\sqrt{E_0^2 + (\lambda V)^2}}{T} + e^{-\frac{\lambda g}{2T}} \right\} \quad (\text{П.5})$$

подставив (П.5) в (П.4) и интегрируя по  $\lambda$  получим окончательное выражение для  $\Omega$  (I3). Аналогичным образом, с использованием соответствующих функций Грина в ОПСП (см.(3)), получаем (I3<sup>I</sup>).

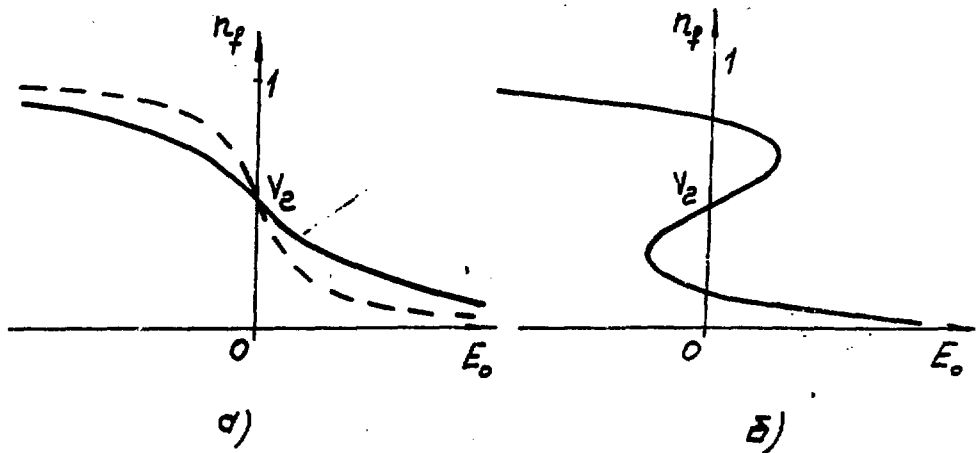


Рис. I а) Плавной линией изображен ход кривой  $n_f(E_0)$ , получаемый в точном решении, пунктирной - в ОПСП.  
 б) Скачок  $n_f(E_0)$  в точке абсолютного перехода получаемый в ПСП.

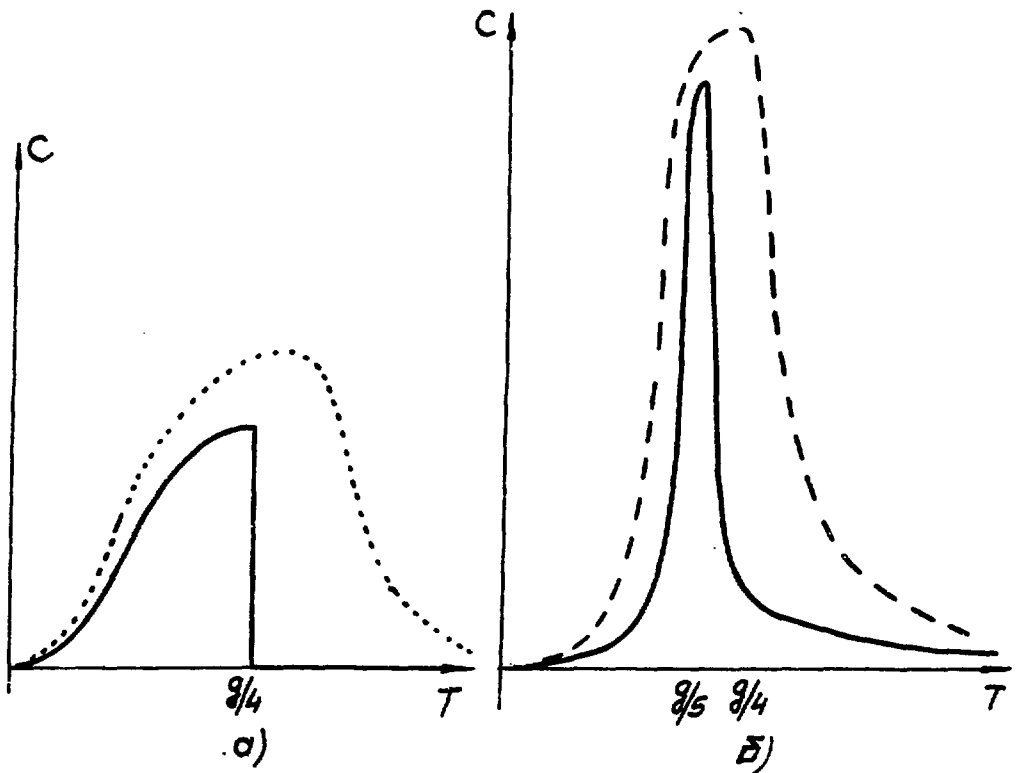


Рис.2 Поведение теплоемкости

- а) для ОИСП  $C = -2gx \frac{dx}{dT}$ , где  $x = \frac{1}{2} \operatorname{th} \frac{gx}{2T}$
- б) для точного решения  $C = \frac{g^2}{16T^2 \operatorname{ch}^2 \frac{g}{4T}}$

Пунктирной линией показаны кривые при  $E_0 = 0$ , а  
 сплошными - кривые при  $V=0$  и  $E_0 = 0$ , площади  
 под соответствующими кривыми одинаковы и равны  
 $\frac{g}{2} + V$ .

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] А.Н.Кочарян, Д.И.Хомский. ЖЭТФ, 71, 767, 1976.
- [2] L.M.Falicov, J.C.Kimball Phys.Rev.Lett., 22, 397, 1969
- [3] А.Н.Кочарян, П.С.Обнаниян, Д.И.Хомский. Препринт ФИАН 196, 1969.
- [4] H.J.Leder. Sol.St.Comm., 27, 579, 1978.
- [5] C.N.Varma. Rev.Mod.Phys., 48, 213, 1976.
- [6] A.C.Hewson, F.S.Reiseborough, Sol.St.Comm., 22, 379, 1977.
- [7] J.M.Lowrence, R.D.Parks. Phys.Rev., B16, 2225, 1977.
- [8] B.R.Alascio, R.Allub, A.Aligia J.Phys., C13, 2869, 1980
- [9] M.E.Foglio, L.M.Falicov Phys.Rev., B20, 4554, 1979; M.E. Foglio, C.A.Balseiro, L.M.Falicov, B20, 4560, 1979.
- [10] B.R.Alascio, H.Wio, A.Lopez, Z.Physik, B36, 37, 1979.
- [11] J.S.Goncalves da Silva, L.M.Falicov. Sol.St.Comm., 17, 1521 1975.
- [12] L.D.Hirst. J.Phys.Chem.Solids, 35, 1285, 1974.
- [13] P.Entel, H.J.Leder, N.Grewe. Z.Physik, D30, 277, 1978.
- [14] F.D.M.Halde a. Phys.Rev. B15, 181, 1977.

Рукопись поступила 9-го марта 1981 г.



Редактор Л.П.Мукаян  
Тех. редактор А.С. Абрамян

Заказ 35I

ВФ-0487I

Тираж 299

---

Препринт ЕФМ

Формат издания 60x84/16

Подписано к печати 28/У-8Iг. I,0 уч.изд.л. Ц. 7 к.

---

Издано Отделом научно-технической информации  
Ереванского физического института, Ереван-36, пер.Маркаряна 6

индекс 3624