

Электронный спектр и устойчивость насыщенного ферромагнитного состояния в модели Хаббарда с сильными корреляциями

© А.В. Зарубин, В.Ю. Ирхин

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,
620219 Екатеринбург, Россия

E-mail: Valentin.Irkhin@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 31 августа 1998 г.)

Исследуется модель Хаббарда с бесконечным кулоновским отталкиванием в представлении многоэлектронных операторов. С использованием выражений для одночастичных функций Грина в первом порядке по $1/z$ построены картины плотности состояний. Проанализированы особенности ее поведения вблизи уровня Ферми, в частности кондовского типа. Исследована устойчивость насыщенного ферромагнетизма. Найдены соответствующие значения критической концентрации носителей тока для полуэллиптической и прямоугольной затравочной плотностей состояний, квадратной и кубических решеток. Проведено сравнение с результатами предыдущих работ.

Несмотря на большое число публикаций, проблема магнетизма электронных систем с узкими энергетическими зонами, описываемых моделью Хаббарда [1], продолжает оставаться в центре внимания (см., напр., [2–12]). Физическая картина магнетизма в этом случае характеризуется наличием локальных магнитных моментов и существенно отличается от стонеровской картины слабого коллективизированного магнетизма [13].

Согласно результатам Нагаока [14], в пределе бесконечного хаббардовского отталкивания основное состояние для простых решеток является насыщенным ферромагнитным для малой концентрации носителей тока δ (двоек или дырок в почти наполовину заполненной зоне).

В работах Рот [15] с использованием вариационного приближения для электронных функций Грина были получены две критические концентрации. Первая — (δ_c) соответствует переходу из насыщенного ферромагнитного состояния в ненасыщенное, а вторая (δ'_c) — переходу из ферромагнитного состояния в парамагнитное, причем в случае простой кубической (ПК) решетки для них были найдены значения $\delta_c = 0.37$ и $\delta'_c = 0.64$.

Далее область устойчивости ферромагнитного состояния исследовалась в рамках различных методов в большом числе работ (см. [16–30]). В частности, улучшенный метод Гутцвиллера [27] дает для ПК решетки $\delta_c = 0.33$, а использование разложения по t/U [23] — $\delta_c = 0.27$. В случае квадратной решетки вариационным методом в работе [9] было получено значение $\delta_c = 0.251$, а методом ренормализационной группы для матрицы плотности в работе [10] — $\delta_c = 0.22$ и грубая оценка $\delta'_c \approx 0.40$.

Таким образом, в большинстве вычислений значение критической концентрации δ_c для широкого круга решеток находится вблизи 0.30. (Хотя в работе [22] для ПК решетки было получено значение 0.045, близкий метод Иоффе и Ларкина [25] дает гораздо большие значения δ_c : для квадратной решетки $\delta_c = 0.25$).

Интерполяционная схема для описания магнитного упорядочения в узких зонах, дающая насыщенный ферромагнетизм в случае малых концентраций носителей тока и ненасыщенный пик больших, была предложена

в [31,32] на основе анализа динамической магнитной восприимчивости. Однако сами критические концентрации определены не были.

Использование высокотемпературных разложений в ранних работах давало неопределенные результаты относительно устойчивости ферромагнетизма в рассматриваемой модели из-за плохой точности (см., напр., [19]). Однако согласно последним результатам [6,7], ферромагнетизм также возникает вблизи $\delta = 0.3$.

Отметим, что концентрация дырок $\delta = 1/3$ для симметричной затравочной плотности состояний соответствует смене знака химпотенциала (отсчитываемого от центра зоны) в приближении "Хаббард-I" [1], и в этой точке возникает неустойчивость парамагнитного состояния [3].

Экспериментальные данные по системе с сильными корреляциями $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{S}_2$ [16] дают большие значения δ_c (насыщенный ферромагнетизм сохраняется до концентраций электронов проводимости $n = 1 - \delta$ порядка 0.2), однако в этой системе, по-видимому, существенны эффекты вырождения зоны проводимости.

Рассмотренные подходы, как правило, не анализируют структуру одночастичного спектра и плотности состояний в ферромагнитной фазе модели Хаббарда. Простейшее приближение "Хаббард-I" для электронного спектра, предложенное в первой работе Хаббарда [1], соответствует нулевому порядку по обратному координационному числу $1/z$ (приближение среднего поля по переносу электронов). Оно оказывается совершенно неудовлетворительным при описании ферромагнетизма (в частности, ферромагнитные решения вообще отсутствуют для простых моделей затравочной плотности состояний).

Строгое вычисление одночастичных функций Грина для малой концентрации носителей (предел Нагаока) было выполнено в работах [33,34]. В них было показано, что некогерентный (неквазиэлектронный) вклад оказывается существенным для картины плотности состояний, а его учет является принципиальным для выполнения кинематических соотношений (см. раздел 1). Выражения

для функций Грина, справедливые в более широком интервале температур и концентраций, были получены в [35].

В настоящей работе устойчивость насыщенного ферромагнитного состояния при увеличении концентрации носителей тока исследуется с использованием одночастичных функций Грина в первом порядке по $1/z$. Такой подход позволяет построить достаточно простую и физически наглядную картину плотности состояний в насыщенном хаббардовском ферромагнетике.

1. Вычисление функций Грина и уравнения самосогласования

Мы используем гамильтониан модели Хаббарда в пределе бесконечно сильного кулоновского отталкивания в представлении многоэлектронных X -операторов [36]

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} t_{\mathbf{k}} X_{-\mathbf{k}}^{0\sigma} X_{\mathbf{k}}^{\sigma 0}, \quad (1)$$

где $t_{\mathbf{k}}$ — зонная энергия, $X_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}$ — фурье-образ операторов Хаббарда $X_i^{\alpha\beta} = |i\alpha\rangle\langle i\beta|$ (0 — дырки, $\sigma = \pm(\uparrow, \downarrow)$ — однократно занятые состояния).

Следует отметить, что в обсуждаемой проблеме бесконечно сильного кулоновского взаимодействия возникает ряд трудностей, связанных с нефермиевской статистикой возбуждений. Эти трудности проявляются как в диаграммной технике [2], так и в методе уравнений движения [37]. В частности, в работе [37] в рамках разложения по $1/z$ было обнаружено нарушение аналитических свойств запаздывающих функций Грина для парамагнитного состояния.

Мы будем рассматривать запаздывающие антикоммутирующие функции Грина

$$G_{\mathbf{k}, \sigma}(E) = \langle\langle X_{\mathbf{k}}^{\sigma 0} | X_{-\mathbf{k}}^{0\sigma} \rangle\rangle_E, \quad \text{Im } E > 0. \quad (2)$$

Расщепление цепочки уравнений движения в низшем приближении, которое соответствует нулевому порядку по $1/z$ и известно как "Хаббард- Γ ", дает

$$\langle\langle X_{\mathbf{k}}^{\sigma 0} | X_{-\mathbf{k}}^{0\sigma} \rangle\rangle_E = (n_0 + n_{\sigma})(E - t_{\mathbf{k}, \sigma})^{-1}, \quad (3)$$

$$n_{\alpha} = \langle X_i^{\alpha\alpha} \rangle, \quad t_{\mathbf{k}, \sigma} = t_{\mathbf{k}}(n_0 + n_{\sigma}).$$

В отличие от подхода, использующего одноэлектронные операторы [1], формализм многоэлектронных операторов Хаббарда позволяет выяснить причины непригодности приближения "Хаббард- Γ " при описании ферромагнетизма. В самом деле функции Грина (3) резко нарушают кинематические соотношения на одном узле и не позволяют удовлетворить условию

$$\delta \equiv n_0 = \langle X^{00} \rangle = \langle X_i^{0\sigma} X_i^{\sigma 0} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \langle X_{\mathbf{k}}^{0\sigma} X_{-\mathbf{k}}^{\sigma 0} \rangle$$

$$= -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \int \text{Im } G_{\mathbf{k}, \sigma}(E) f(E) dE, \quad (4)$$

следующему из спектрального представления ($f(E)$ — фермиевская функция), для обеих проекций спина в

случае $\langle S^z \rangle \neq 0$. В то же время квазичастичный полюс для $\sigma = \downarrow$, соответствующий суженной зоне и лежащий выше уровня Ферми дырок, неадекватно описывает энергетический спектр и приводит к появлению конечных значений n_{\downarrow} , т.е. разрушению насыщенного ферромагнетизма.

Следуя работе [35], проведем расщепление на следующем этапе. Запишем уравнение движения в виде

$$(E - t_{\mathbf{k}, \sigma}) G_{\mathbf{k}, \sigma}(E) = n_0 + n_{\sigma} + \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \langle\langle X_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-\sigma 0} | X_{-\mathbf{k}}^{0\sigma} \rangle\rangle_E, \quad (5)$$

где мы пренебрегли продольными спиновыми флуктуациями. Уравнение движения для функции Грина $\langle\langle X_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-\sigma 0} | X_{-\mathbf{k}}^{0\sigma} \rangle\rangle_E$ имеет вид

$$E \langle\langle X_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-\sigma 0} | X_{-\mathbf{k}}^{0\sigma} \rangle\rangle_E = \langle X_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} X_{-\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma} \rangle + \langle X_{\mathbf{q}-\mathbf{k}}^{0-\sigma} + X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-\sigma 0} \rangle + \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} \langle\langle X_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{p}}^{-\sigma\sigma} X_{\mathbf{p}}^{\sigma 0} + X_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{p}}^{-\sigma\sigma} X_{\mathbf{p}}^{-\sigma 0} + X_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\mathbf{p}}^{00} X_{\mathbf{p}}^{-\sigma 0} - X_{\mathbf{q}-\mathbf{p}}^{0-\sigma} X_{\mathbf{p}}^{\sigma 0} X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-\sigma 0} + X_{-\mathbf{p}}^{0-\sigma} X_{\mathbf{q}+\mathbf{p}}^{\sigma 0} X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-\sigma 0} | X_{-\mathbf{k}}^{0\sigma} \rangle\rangle_E. \quad (6)$$

Выполняя расщепление функций Грина в правой части (6) и вводя обозначения

$$\langle X_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} X_{-\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma} \rangle = \langle S_{\mathbf{q}}^{\sigma} S_{-\mathbf{q}}^{-\sigma} \rangle = \chi_{\mathbf{q}, \sigma}, \quad \langle X_{-\mathbf{k}}^{0\sigma} X_{\mathbf{k}}^{\sigma 0} \rangle = n_{\mathbf{k}, \sigma},$$

находим

$$G_{\mathbf{k}, \sigma}(E) = \left(n_{\sigma} + n_0 + \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \frac{\chi_{\mathbf{q}, \sigma} + n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, -\sigma}}{E - t_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, -\sigma} - \sigma \omega_{\mathbf{q}}} \right) \times \left(E - t_{\mathbf{k}, \sigma} - \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \frac{t_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{q}, \sigma} - t_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - t_{\mathbf{k}}}{E - t_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, -\sigma} - \sigma \omega_{\mathbf{q}}} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, -\sigma} \right)^{-1}. \quad (7)$$

В ведущем приближении по $1/z$ для одночастичных чисел заполнения следует использовать приближение "Хаббард- Γ ", т.е.

$$n_{\mathbf{k}, \sigma} = (n_0 + n_{\sigma}) f(t_{\mathbf{k}, \sigma}),$$

однако химический потенциал должен выбираться уже из функции Грина (7). В отличие от (3) функции Грина (7) содержат члены с резольвентами и имеют разрезы, которые описывают неквазичастичные (некогерентные) вклады в плотность состояний. Именно последние позволяют обеспечить качественное согласие с правилом сумм (4) для $\sigma = \downarrow$. В то же время полюса функции Грина для этой проекции спина при малых δ выше уровня Ферми дырок отсутствуют, т.е. сохраняется состояние насыщенного ферромагнетизма.

Отметим, что в отличие от одноэлектронного подхода [18] функция Грина $G_{\mathbf{k}, \uparrow}(E)$ не сводится к функции

Грина свободных электронов даже в насыщенном ферромагнитном состоянии, поскольку, в нее вносят вклад флуктуации чисел заполнения дырок.

Результат (7) можно представить как

$$G_{k,\sigma}(E) = \frac{a_{k,\sigma}(E)}{b_{k,\sigma}(E) - a_{k,\sigma}(E)t_k}, \quad (8)$$

$$a_{k,\sigma}(E) = \sum_q t_{k-q} \frac{\chi_{q,\sigma} + n_{k-q,-\sigma}}{E - t_{k-q,-\sigma} - \sigma\omega_q}, \quad (9)$$

$$b_{k,\sigma}(E) = E - \sum_q t_{k-q}^2 \frac{n_{k-q,-\sigma}}{E - t_{k-q,-\sigma} - \sigma\omega_q}. \quad (10)$$

В случае насыщенного ферромагнитного состояния функция Грина (7) принимает форму

$$G_{k,\uparrow}(E) = \left(E / \left[1 + \sum_q \frac{t_q(1-n_0)}{E - t_q n_0} \right] - t_k \right)^{-1}, \quad (11)$$

$$G_{k,\downarrow}(E) = E \sum_q \frac{n_{k-q}}{E - t_{k-q} + \omega_q} \times \left(E \left[1 - n_0 + \sum_q \frac{(E - t_k)n_{k-q}}{E - t_{k-q} + \omega_q} \right] - \sum_q t_{k-q} n_{k-q} \right)^{-1}, \quad (12)$$

где $n_k = f(t_k)$. В пренебрежении резольвентой в (11) и последним членом в знаменателе (12) получаем

$$G_{k,\uparrow}(E) = \frac{1}{E - t_k}, \quad G_{k,\downarrow}(E) = \frac{1}{E - t_k - \Sigma_{k,\downarrow}(E)},$$

$$\Sigma_{k,\downarrow}(E) = -(1 - n_0) \left(\sum_q \frac{n_{k-q}}{E - t_{k-q} + \omega_q} \right)^{-1}, \quad (13)$$

что совпадает с результатом работ [18,38] в пределе $U \rightarrow \infty$.

От выражения (8) можно перейти к самосогласованному приближению (ср. с [37]). Для этого в уравнениях (9), (10) нужно заменить знаменатель на точные функции Грина, т. е.

$$G_{k,\sigma}(E) = \frac{A_{k,\sigma}(E)}{B_{k,\sigma}(E) - A_{k,\sigma}(E)t_k}, \quad (14)$$

$$A_{k,\sigma}(E) = \sum_q t_{k-q} \times \frac{\chi_{q,\sigma} + n_{k-q,-\sigma}}{B_{k-q,-\sigma}(E) - A_{k-q,-\sigma}(E)t_{k-q} - \sigma\omega_q}, \quad (15)$$

$$B_{k,\sigma}(E) = E - \sum_q t_{k-q}^2 \times \frac{n_{k-q,-\sigma}}{B_{k-q,-\sigma}(E) - A_{k-q,-\sigma}(E)t_{k-q} - \sigma\omega_q}. \quad (16)$$

В случае самосогласованного приближения необходимо выразить одночастичные числа заполнения также через точные функции Грина

$$n_{k,\sigma} = \langle X_{-k}^{0\sigma} X_k^{\sigma 0} \rangle = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int G_{k,\sigma}(E) f(E) dE.$$

Для плотности состояний имеем выражение через точную резольвенту

$$N_\sigma(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{k,\sigma} G_{k,\sigma}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} R_\sigma(E),$$

$$R_\sigma(E) = R_0 \{ B_{k,\sigma}(E) / A_{k,\sigma}(E) \}, \quad R_0(E) = \sum_k \frac{1}{E - t_k}.$$

2. Численные расчеты и обсуждение

В случае насыщенного ферромагнетизма имеем

$$\chi_{q,\sigma} \rightarrow \chi_\sigma, \quad \chi_+ = 1 - \delta, \quad \chi_- = 0.$$

Для упрощения численных расчетов используем преобразование

$$\sum_q \mathcal{F}(\omega_q) = \sum_q \int K_q(\omega) \mathcal{F}(\omega) d\omega,$$

где $K_q(\omega) = \delta(\omega - \omega_q)$ — спиновая спектральная плотность, последнюю величину заменим на среднее по зоне Бриллюэна значение

$$K_q(\omega) \rightarrow \bar{K}(\omega) = \sum_q K_q(\omega) = \sum_q \delta(\omega - \omega_q).$$

Это приближение позволяет правильно описать энергетическую зависимость плотности состояний вблизи уровня Ферми (см. [18]) и может быть оправдано в пределе больших размерностей пространства. В результате величины (9), (10), входящие в функцию Грина (8), не зависят от волнового вектора

$$G_{k,\sigma}(E) = \frac{a_\sigma(E)}{b_\sigma(E) - a_\sigma(E)t_k}, \quad (17)$$

$$a_\sigma(E) = \int \bar{K}(\omega) \sum_q t_q \frac{\chi_\sigma + n_{q,-\sigma}}{E - t_{q,-\sigma} - \sigma\omega} d\omega, \quad (18)$$

$$b_\sigma(E) = E - \int \bar{K}(\omega) \sum_q t_q^2 \frac{n_{q,-\sigma}}{E - t_{q,-\sigma} - \sigma\omega} d\omega. \quad (19)$$

В самосогласованном приближении выражения (15), (16) переписываются к аналогичному виду.

Химический потенциал определяется из условия нормировки (4), которое должно выполняться для обоих значений σ , а намагниченность находится как

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} \sum_{k,\sigma} \sigma \langle X_{-k}^{\sigma 0} X_k^{0\sigma} \rangle = -\frac{1}{2\pi} \sum_{k,\sigma} \sigma \int \text{Im} G_{k,\sigma}(E) (1 - f(E)) dE. \quad (20)$$

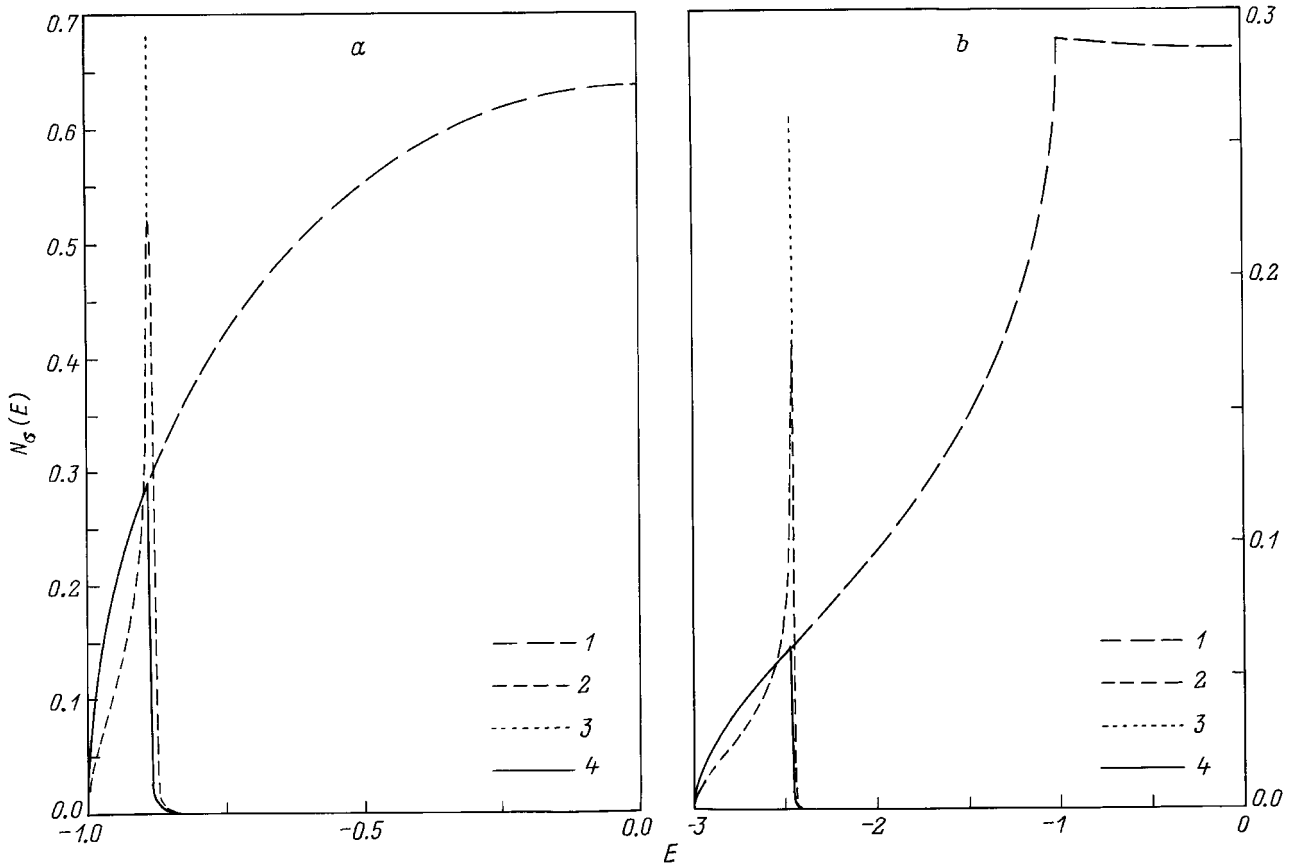


Рис. 1. Плотность состояний в различных приближениях для концентрации дырок $\delta = 0.02$: 1 — $N_T(E)$ (вид кривой совпадает во всех приближениях); 2 и 3 — $N_\downarrow(E)$ в несамосогласованном приближении (7) с учетом и без учета спиновой динамики; 4 — $N_\downarrow(E)$ в самосогласованном приближении (14). Кривые 2 и 3 практически совпадают вплоть до вершины пика, определяемой динамикой. *a* — полуэллиптическая затравочная плотность состояний, *b* — ПК решетка, энергия E в единицах полуширины зоны и интеграла переноса соответственно.

Приближение Эдвардса и Герца (13) не нарушает аналитических свойств функции Грина. В то же время такое нарушение возможно для приближения (7). В случае, когда основное состояние является насыщенным ферромагнитным, функция Грина $G_{k,\downarrow}(E)$ (7) не имеет особенностей в верхней полуплоскости. Поэтому условие нормировки (4) выполняется для $\sigma = \downarrow$, если выбирать химпотенциал из условия на $G_{k,\downarrow}(E)$. Однако правило сумм

$$n_0 + n_\sigma = -\frac{1}{\pi} \sum_k \int \text{Im} G_{k,\sigma}(E) dE \quad (21)$$

нарушается для обеих проекций спина. Это нарушение обусловлено существованием у функции Грина (7) паразитного полюса в верхней полуплоскости

$$E = - \left(t_{k,\sigma} \frac{n_\sigma}{n_{-\sigma} + n_0} + \sum_q t_{k-q}^2 \frac{n_{k-q,-\sigma}}{E - t_{k-q,-\sigma} - \sigma \omega_q} \right) \times \left(1 - \frac{t_k}{n_{-\sigma} + n_0} \sum_q \frac{\chi_{q,\sigma} + n_{k-q,-\sigma}}{E - t_{k-q,-\sigma} - \sigma \omega_q} \right)^{-1}. \quad (22)$$

Указанный полюс существует, как видно из выражения (22), при любой концентрации носителей тока. Он приводит к небольшому отрицательному вкладу в плотность состояний в центре зоны. Однако при малых концентрациях дырок δ нарушение нормировки практически незаметно и даже при δ , близких к δ_c , оно все еще мало. В приближении Эдвардса и Герца (13) указанные патологии отсутствуют. Отметим, что самосогласование может приводить к новым причинам нарушения правила сумм (21), однако численно это нарушение может оказаться даже более слабым, чем в несамосогласованном приближении (см. [37]).

Неустойчивость насыщенного ферромагнетизма в рассматриваемом подходе возникает вследствие появления спин-поляронных состояний со спином вниз ниже уровня Ферми [18,38] и возникновения соответствующего вклада в n_\downarrow при $T = 0$.

Для простоты используем дебаевское приближение для магнного спектра. Однако отметим, что результаты существенно не меняются при более реалистическом выборе спиновой динамики. Ширина модельной зоны полуэллиптической плотности состояний магнонов выби-

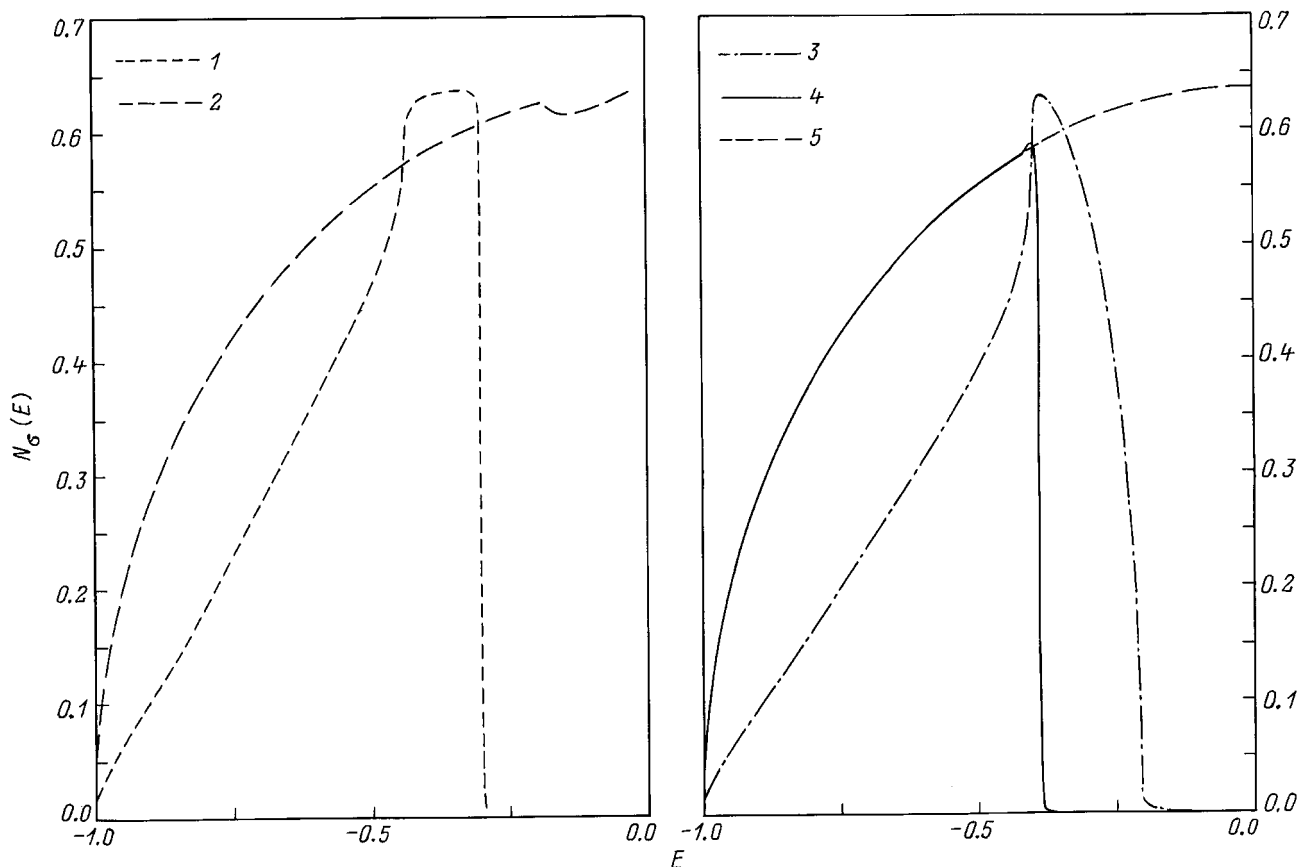


Рис. 2. Плотность состояний в различных приближениях для концентрации дырок $\delta = 0.2$, близкой к критической: 1 и 2 — $N_{\downarrow}(E)$ и $N_{\uparrow}(E)$ в несамосогласованном приближении (7) (спиновая динамика не влияет существенно на вид этих кривых); 3 и 4 — $N_{\downarrow}(E)$ в приближении Эдвардса и Герца (13) с учетом спиновой динамики (без учета динамики пик обостряется) и самосогласованном приближении (14); 5 — $N_{\uparrow}(E)$, которая практически совпадает с затравочной плотностью состояний в последних двух приближениях. Затравочная плотность состояний — полуэллиптическая.

ралась равной ширине магнной плотности состояний для простой кубической решетки

$$\bar{K}(\omega) = \begin{cases} D\omega^{3/2}, & \omega < \omega_{\max} \\ 0, & \omega \geq \omega_{\max} \end{cases}, \quad (23)$$

где

$$\omega_{\max} = Dq_D^2, \quad q_{\max} = q_D = \left(\frac{6\pi^2}{v_0} \right)^{1/3},$$

q_D — дебаевский волновой вектор, v_0 — объем элементарной ячейки, D — постоянная спиновой жесткости. Используя выражение для магнной частоты в первом порядке по $1/z$ [34]

$$\omega_q = \sum_{\mathbf{k}} (t_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - t_{\mathbf{k}}) n_{\mathbf{k}},$$

для ПК решетки находим $D = |t|\delta$, где t — интеграл переноса.

Результаты вычисления плотности состояний в насыщенном ферромагнитном состоянии с использованием формул (17)–(19), (23) показаны на рис. 1 и 2. Плотность состояний $N_{\downarrow}(E)$ отлична от нуля ниже уровня

Ферми только благодаря некогерентному вкладу. При малых концентрациях дырок условие нормировки (4) выполняется с большой точностью для обеих проекций спина. При увеличении δ условие (4) начинает зависеть от способа выбора химического потенциала, но нарушение нормировки незначительно (при $\delta = 0.20$ нарушение нормировки составляет примерно 2–3%).

В пренебрежении спиновой динамикой ($\bar{K}(\omega) = \delta(\omega)$) в несамосогласованном приближении (7) и в приближении (13) плотность состояний $N_{\downarrow}(E)$ скачком меняется до нуля при переходе через уровень Ферми (рис. 1). При малых концентрациях дырок ниже уровня Ферми (вплоть до его узкой окрестности) имеем $N_{\uparrow}(E) \approx N_{\downarrow}(E)$, а при увеличении δ в плотности состояний $N_{\downarrow}(E)$ все более заметным становится пик на E_F . Его математическое происхождение связано с логарифмической особенностью кондовского типа, которая возникает в интеграле

$$\sum_{\mathbf{q}} \frac{f(t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{E - t_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \approx -\ln |E - E_F| N(E_F).$$

При очень малых δ заметная логарифмическая особенность имеется только в мнимой части функции Гри-

Значения критических концентраций δ_c для прямоугольной (га) и полуэллиптической (се) затравочной плотностей состояний, квадратной, простой, объемноцентрированной и гранецентрированной кубических решеток в приближении ближайших соседей.

DOS	I	II	III	IV	V
га	0.284	0.279	0.272		
се	0.271	0.266	0.265		
square	0.265	0.253	0.253	0.49	0.405
sc	0.243	0.237	0.238	0.32	0.237
bcc	0.231	0.221	0.224	0.32	0.239
fcc	0.253	0.227	0.231	0.62	

Примечание. I — несамосогласованное приближение (7), II — приближение (13), III — самосогласованное приближение (15) и (16), IV — результаты работы [4], V — результаты работы [29] (вариант расчета RES0, для гцк решетки неустойчивость не обнаружена).

на, что означает конечный скачок в плотности состояний [33,34]. Однако при увеличении δ необходимо учитывать резольвенты как в числителе, так и в знаменателе функции Грина, так что вещественная и мнимая часть "перемешиваются" и возникает логарифмическая особенность в плотности состояний. При учете в знаменателях (9) и (10) магнонных частот особенность размывается на интервале ω_{\max} , а пик сглаживается. В рамках самосогласованного приближения (15), (16) вид $N_{\downarrow}(E)$ приближается к затравочной плотности состояний и пик оказывается полностью размытым даже без учета спиновой динамики (рис. 1), так что последняя не играет существенной роли.

Вблизи критической концентрации пик в приближении (7) (но не в приближении Эдвардса и Герца) снова размывается (рис. 2), однако это размытие еще не заметно при $\delta = 0.15$. На рис. 2 видно также существенно разное положение химпотенциала (обращения в нуль $N_{\downarrow}(E)$) в различных приближениях.

Критическая концентрация устойчивости насыщенного ферромагнетизма для ПК решетки во всех приближениях (8), (13), (14) определяется появлением полюса у функции Грина $G_{\mathbf{k},\downarrow}(E)$ при $\mathbf{k} = (\pi, \pi, \pi)$. В приближениях (8), (14) при $\delta > \delta_c$ условие нормировки (4) для обеих проекций спина резко нарушается, а плотность состояний $N_{\downarrow}(E)$ перестает быть положительно определенной ниже энергии Ферми (напомним, что эти патологические особенности имеются и ниже критической концентрации, но там они практически незаметны). Таким образом, вопрос о дальнейшей эволюции электронного спектра и описании ненасыщенного ферромагнетизма не может быть рассмотрен в рамках этих приближений.

Вычисленные в рамках всех рассмотренных приближений значения критической концентрации потери устойчивости насыщенного ферромагнетизма δ_c для ряда затравочных плотностей состояний приведены в таблице. В случае гцк решетки (где затравочная плотность состояний асимметрична и имеет на одном краю логарифмическую расходимость) выбран знак интеграла переноса, для которого насыщенный ферромагнетизм устойчив при

малых δ (см. [14]). Отметим, что необходимо использовать уравнение для химического потенциала (4), полученное из полных функций Грина (7) (использование здесь приближения "Хаббард-I" [1] приводит к уменьшению δ_c на величину порядка 0.1); при этом условие нормировки для $\sigma = \downarrow$ выполняется автоматически.

Из таблицы видно, что результаты являются достаточно устойчивыми и не слишком зависят от вида приближения. В частности, их слабо меняет самосогласование, которое приводит к небольшому уменьшению значения δ_c . Зависимость от спиновой динамики (магнонного спектра), даже в несамосогласованном приближении, оказывается еще более слабой (критическая концентрация меняется лишь в третьем знаке). Интересно отметить, что результаты приближения Эдвардса и Герца (к сожалению, в [18] была сделана лишь грубая оценка δ_c с использованием квадратичного закона дисперсии электронов) оказываются ближе к результатам самосогласованного приближения (14), чем несамосогласованного (8).

Полученные нами значения можно сравнить с результатами в пределе бесконечной размерности пространства (следует ожидать, что наш метод разложения по $1/z$ достаточно близок к этому приближению), где были получены значения $\delta_c = 0.42$ [27] и $\delta_c = 0.33$ [11]. В то же время наш подход позволяет воспроизвести зависимость δ_c от размерности пространства и вида затравочной плотности состояний.

В недавних работах [4,29] были получены значения δ_c для большого числа решеток. Эти результаты также приведены для сравнения в таблице. Можно видеть, что в ряде случаев наши результаты дают лучшее согласие с рядом других расчетов, особенно для квадратной решетки (см. введение). Отметим в этой связи, что в [5] вариационным методом была получена строгая оценка для квадратной решетки $\delta_c < 0.29$. Таким образом, наши результаты можно считать достаточно надежными даже в количественном отношении.

Авторы благодарят А.О. Анохина за помощь в численных расчетах и полезные обсуждения.

Работа частично финансирована РФФИ (грант № 96-02-16000).

Список литературы

- [1] J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. **A276**, 1365, 238 (1963).
- [2] Ю.А. Изюмов. УФН **165**, 4, 403 (1995).
- [3] Ю.А. Изюмов, М.И. Кацнельсон, Ю.Н. Скрябин. Магнетизм коллективизированных электронов. Физматлит, М. (1994). 368 с.
- [4] B.S. Shastry, H.R. Krishnamurthy, P.W. Anderson. Phys. Rev. **B41**, 4, 2375 (1990).
- [5] W. von der Linden, D.M. Edwards. J. Phys.: Condens. Matter **3**, 26, 4917 (1991).
- [6] D.F.B. ten Haaf, J.M.J. van Leeuwen. Phys. Rev. **B46**, 10, 6313 (1992).
- [7] D.F.B. ten Haaf, P.W. Brouwer, J.M.J. van Leeuwen. Phys. Rev. **B51**, 1, 353 (1995).

- [8] R. Strack, D. Vollhardt. *J. Low Temp. Phys.* **99**, 3/4, 385 (1995).
- [9] P. Wurth, G. Uhrig, E. Müller-Hartmann. *Ann. Phys.* **5**, 2, 148 (1996).
- [10] S. Liang, H. Pang. Preprint, cond-mat/9404003, *Europhys. Lett.* **32**, 2, 173 (1995).
- [11] T. Obermeier, T. Pruschke, J. Keller. *Phys. Rev.* **B56**, 14, R8479 (1997).
- [12] D. Vollhardt, N. Blümer, K. Held, M. Kollar, J. Schlipf, M. Ulmke. *Z. Phys.* **B103**, 2, 283 (1997).
- [13] Т. Мория. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами. Мир, М. (1988). 287 с.
- [14] Y. Nagaoka. *Phys. Rev.* **147**, 1, 392 (1966).
- [15] L.M. Roth. *Phys. Rev.* **B184**, 2, 451 (1969); *Phys. Rev.* **B186**, 2, 428 (1969).
- [16] H.S. Jarrett, W.H. Cloud, R.J. Bouchard, S.R. Butler, C.G. Frederick, J.L. Gillson. *Phys. Rev. Lett.* **21**, 9, 617 (1968).
- [17] J.B. Sokoloff. *Phys. Rev.* **B2**, 9, 3707 (1970); *Phys. Rev.* **B3**, 11, 3826 (1971).
- [18] J.A. Hertz, D.M. Edwards. *J. Phys.* **F3**, 12, 2174 (1973); D.M. Edwards, J.A. Hertz. *J. Phys.* **F3**, 12, 2191 (1973).
- [19] M. Plischke. *J. Stat. Phys.* **11**, 2, 159 (1974).
- [20] Y. Takahashi. *J. Phys. Soc. Japan* **51**, 11, 3475 (1982).
- [21] А.В. Ведяев, М.Ю. Николаев. Письма в ЖЭТФ **41**, 1, 18 (1985).
- [22] M.Yu. Nikolaev, N.V. Ryzhanova, A.V. Vedyayev, S.M. Zubritskii. *Phys. Stat. Sol. (b)* **128**, 2, 513 (1985).
- [23] B.H. Zhao, H.Q. Nie, K.Y. Zhang, K.A. Chao, R. Micnas. *Phys. Rev.* **B36**, 4, 2321 (1987).
- [24] А.В. Ведяев, С.М. Зубрицкий, Н.В. Рьжанова. ФММ **65**, 5, 882 (1988).
- [25] L.B. Ioffe, A.I. Larkin. *Phys. Rev.* **B37**, 10, 5730 (1988).
- [26] Y. Fang, A.E. Ruckenstein, E. Dagotto, S. Schmitt-Rink. *Phys. Rev.* **B40**, 10, 7406 (1989).
- [27] P. Fazekas, B. Menge, E. Müller-Hartmann. *Z. Phys.* **B78**, 1, 69 (1990).
- [28] Е.Г. Горячев, Д.В. Кузнецов. Письма в ЖЭТФ **56**, 4, 205 (1992).
- [29] T. Hanisch, G.S. Uhring, E. Müller-Hartmann. *Phys. Rev.* **B56**, 21, 13 960 (1997); preprint, cond-mat/9707286.
- [30] T. Okabe. *Phys. Rev.* **B57**, 1, 403 (1998).
- [31] М.И. Ауслендер, В.Ю. Ирхин, М.И. Кацнельсон. ФММ **65**, 1, 57 (1988).
- [32] M.I. Auslender, V.Yu. Irkhin, M.I. Katsnelson. *J. Phys.* **C21**, 32, 5521 (1988).
- [33] В.Ю. Ирхин, М.И. Кацнельсон. ФТТ **25**, 11, 3383 (1983).
- [34] V.Yu. Irkhin, M.I. Katsnelson. *J. Phys.* **C18**, 21, 4173 (1985).
- [35] В.Ю. Ирхин, М.И. Кацнельсон. ФММ **66**, 1, 41 (1988).
- [36] J. Hubbard. *Proc. Roy. Soc.* **A285**, 1403, 542 (1965).
- [37] A.O. Anokhin, V.Yu. Irkhin. *Phys. Stat. Sol. (b)* **165**, 1, 129 (1991).
- [38] V.Yu. Irkhin, M.I. Katsnelson. *J. Phys.: Cond. Mat.* **2**, 34, 7151 (1990).