Письма в ЖЭТФ, том 52, вып. 6, стр. 949 - 951 25 сентября 1990 г.

НЕСТАБИЛЬНОСТЬ НАГАОКОВСКОГО СОСТОЯНИЯ В ПРИБЛИЖЕНИИ САМОСОГЛАСОВАННОГО КИНЕТИЧЕСКОГО ПОЛЯ ПРИ $U \longrightarrow \infty$

Е.Г.Горячев, Е.В.Кузьмин

В приближении кинематического поля [1] показано, что состояние нагаоковского ферромагнетика $(R = n = n^{\sigma}, n^{\sigma} = 0)$ является нестабильным при конечных дырочных концентрациях $(p_c \approx 0,2)$ что совпадает со строгим утверждением работы [2]

1. Термодинамическое обобщение теоремных результатов Нагаока [3] является наиболее актуальным вопросом сегодняшнего дня, поскольку его решение может привести к понижению физической природы основного состояния в модели Хаббарда. Недавно в этом направлении был сделан важный шаг. В работе *B.S.Shastry, H.R.Krishamurthy, P.W.Anderson* [2] было строго доказано, что состояние насыщенного ферромагнетика $(R = n = n^{\sigma}, n^{\bar{\sigma}} = 0)$ при $U = \infty$ является неустойчивым при некотором пороговом значении концентрации дырок (p_c), зависящей от симметрии и размерности решетки.

2. В работе авторов [1] было показано, что в модели Хаббарда существует регулярное представление для собственно-энергетической части в виде ряда по степеням интеграла туннелирования $t(\vec{f} - \vec{f'})$. Одночастичная функция Грина, возникающая в первом порядке по $t(\vec{f} - \vec{f'})$, удовлетворяла четырем точным соотношениям для спектральных моментов, соответствующих линейному каноническому преобразованию Калашникова - Фрадкина, и поэтому является наилучшим одночастичным приближением задачи на классе решений с двумя дельта-функциями.

В дальнейшем исследовались однородные решения задачи при $U \to \infty$ $(t > 0)$, система самосогласованных уравнений для которых имеет следующий вид

$$n^{\bar{\sigma}} = (1 - n^{\sigma}) \int d\epsilon \rho(\epsilon) f[(1 - n^{\sigma})\epsilon + n^{\sigma}\Omega^{I}_{\sigma}(\epsilon)], \tag{1а}$$

$$n^{\bar{\sigma}}(1 - n^{\bar{\sigma}})\Omega^{I}_{\sigma}(\epsilon) = \varphi^{\bar{\sigma}}(\epsilon) - \Psi^{\bar{\sigma}}, \tag{1б}$$

$$\Psi^{\bar{\sigma}} = (1 - n^{\sigma}) \int d\epsilon \rho(\epsilon) \epsilon f[(1 - n^{\sigma})\epsilon + n^{\sigma}\Omega^{1} - \Omega^{I}_{\sigma}(\epsilon)], \tag{1в}$$

$$\varphi^{\bar\sigma}(\vec{k}) = -\frac{\epsilon(\vec{k})}{W^2(1-n)}[n^{\bar\sigma}_{-}(\Psi^{\bar\sigma})^2 + \Psi^{\sigma}\Psi^{\bar\sigma}], \tag{1г}$$

$$\epsilon(\vec{k}) = \sum_{\vec{h}\neq 0} t(h)e^{i\vec{k}\vec{h}}, \ \ n^{\bar\sigma}_{+} = n^{\bar\sigma}, \ \ n^{\bar\sigma}_{-} = 1 - n^{\bar\sigma}, \ \ n = n^{\bar\sigma} + n^{\sigma}, \ \ W = |t|z. \tag{1д}$$

Уравнение для поля $\Psi^{\bar\sigma}$ (1б) обусловлено кинематической природой вакуумных переходов, связывающих кинетическую степень свободы со спиновой конфигурацией на решетке и следует из нелокальной корреляционной функции вида

$$\Phi^{\bar\sigma} = \sum_{\vec{h}\neq 0} t(\vec{h}) < X_0^{\bar\sigma 0}X_{\vec{h}}^{0\bar\sigma} >, \qquad X_f^{\bar\sigma 0} = n^{\sigma}_{f-}a^{+}_{f\bar\sigma} \tag{2}$$

Кинематическое поле $\Psi^{\bar\sigma}(\Psi^{\sigma})$ приводит к сдвигу центра тяжести спиновых подзон и новому балансу энергий между ферро- и пара-фазой. Бинарная корреляционная функция

$$\varphi^{\bar\sigma}(k) = \sum_{h\neq 0} t(h)e^{i\vec{k}\vec{h}}[< n_0^{\bar\sigma}n_h^{\bar\sigma} > -(n^{\bar\sigma})^2 + < X_0^{\bar\sigma\sigma}X_{\vec{h}}^{\sigma\bar\sigma} >] \tag{3}$$

в линейном приближении по $t(\vec{h})$ квадратична по кинетическим полям (см. 1г) и определяет корреляционное сужение спиновых подзон [1].

3. Рассмотрим случай $T=0$ и ограничимся прямоугольной плотностью состояний $\rho(\epsilon) \equiv \rho = 1/2W$. Уравнение для намагниченности $R(n) = n^{\sigma} - n^{\bar\sigma}$ возникает при выполнении следующих условий:

$$\xi_{+} = \xi_{-} = \xi, \tag{4а}$$

$$\xi_{+} \geq \omega_{+}, \tag{4б}$$

$$\xi_{-} \geq \omega_{-}, \tag{4в}$$

где $\xi_{\pm} = \mu_{\pm}/W$ - безразмерный химпотенциал в спиновой подзоне (+) и (-); $\omega_{\pm}$ - нижний край соответствующих подзон[1)]

Уравнение (4а) наряду с решением $R(n)=0$ приводит к следующему результату:

$$R^2 = (1+p)^2 - 8p\sqrt{1+p-p^2/3}\cos[(\pi-\varphi)/3], \varphi = \arccos[(1+p)(1+p-p^2/3)], \ \ p = 1-n. \tag{5}$$

Уравнение (5) описывает состояние ненасыщенного ферромагнитного металла с точкой концентрационного перехода ферромагнетик-парамагнетик $p_c \approx 0{,}3$ [1]. Используя (5), находим самосогласованные значения $\xi, \omega_{\pm}$ (рис. 1). Из рис. 1 видно, что в области концентраций дырок $0 \leq p \lesssim 0{,}2$ неравенство (4в) не имеет места и, следовательно, в этой области реализуются два решения

$$R = 0; \qquad R = n^{+} = n \qquad (n^{-} = 0). \tag{6}$$

В области концентраций $0{,}2 < p < 0{,}3$ реализуются решение (5) и $R = 0$. В области концентраций $0{,}3 \lesssim p \leq 1$ существует одно решение $R = 0$, соответствующее парамагнитному состоянию.

Сравним какое из полученных решений имеет наименьшую энергию в соответствующих областях концентрации дырок. Используя выражение для одночастичной функции Грина $G^{\sigma}_{k}(\omega + i\delta)$ [1] и формулу для энергии системы [4] [2)]

[1)] Условия (4б) и (4в) в работе [1] были опущены.

[2)] Предельный переход $U \to \infty$ совершался после интегрирования в (7)

$$E_0 = \sum_{\vec{k}\sigma} \int \frac{1}{2}(\omega + \epsilon(\vec{k})) f(\omega)(-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}) G^{\sigma}_{\vec{k}}(\omega + i\delta) d\omega, \tag{7}$$

убеждаемся, что

$$E_0(R = n) \le E_0(R = 0), \qquad 0 \le p \lesssim 0,2; \tag{8}$$

$$E_0(R < n) \le E_0(R = 0), \qquad 0,2 \lesssim p \lesssim 0,3; \tag{9}$$

где $E_0(R = n)$ - энергия насыщенного ферромагнетика; $E_0(R = 0)$ энергия парафазы; $E_0(R < n)$ - энергия ненасыщенного ферромагнитного состояния, описываемого формулой (5).

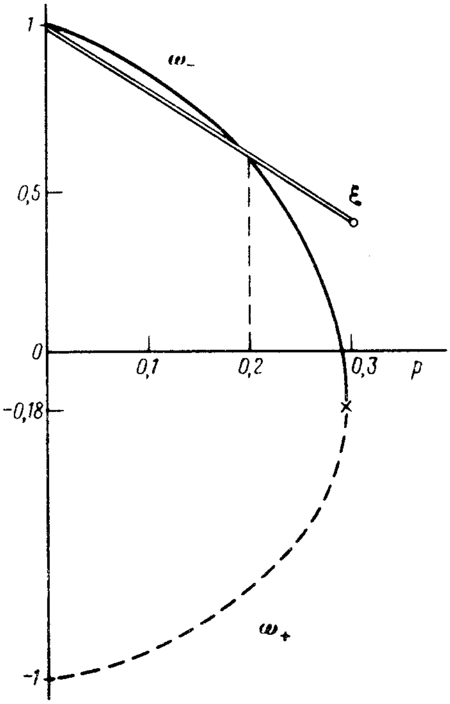

Рис. 1. Самосогласованная зависимость химпотенциала $\xi = \mu/W$ нижнего края спиновых подзон ω_+ и ω_- от концентрации дырок p

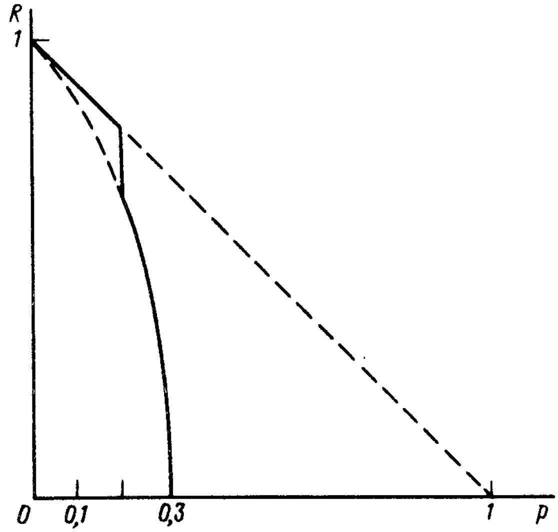

Рис. 2. Самосогласованная зависимость ферромагнитного момента $R = n^+ - n^-$ от концентрации дырок $p = 1 - n$ в модели Хаббарда при $U \to \infty, t > 0$ и прямоугольной плотности состояний $\rho(\epsilon) \equiv \rho = 1/2W$

Зависимость $R(n)$ приведена на рис. 2. Наша теория предсказывает первородную неустойчивость нагаоковского состояния, что также согласуется с выводами работы [2].

Авторы благодарят А.И.Ларкина и В.В.Валькова за полезные дискуссии по данной работе.

Литература

1. *Goryachev E.G., Kuzmin E.V.* Phys. Lett. A., 1988, 131, 481.
2. *Shastry B.S., Krishnamurthy H.R., Anderson P.W.* Phys. Rev. B, 1990, 41, 2375.
3. *Nagaoka Y.* Phys.Rev.,1966, 147, 392.
4. *Мартин П., Швингер Ю.* Теория систем многих частиц. М.: ИИЛ, 1962, с.167.

Институт физики им. Л.В.Киренского
СО АН СССР

Поступила в редакцию
20 июня 1990 г.