Письма в ЖЭТФ, том 56, вып.4, стр.205 - 208 25 августа 1992 г.

ПАРАМАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ И КРОССОВЕР-ПЕРЕХОД ПАРАМАГНЕТИК-ФЕРРОМАГНЕТИК В ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ $U=\infty$ МОДЕЛИ ХАББАРДА

*Е.Г.Горячев, Д.В.Кузнецов**

Институт физики им.В.Л.Киренского Сибирского отделения РАН, 660036, Красноярск, Россия

**Красноярский государственный университет 660062, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 8 июля 1992 г.

Вычисляется парамагнитная восприимчивость $\chi(0,0) = dR(H)/dH$ $(H \to 0, U = \infty)$ модели Хаббарда во втором порядке по кинематическому взаимодействию. Результат кардинально изменяет вывод о парамагнитной неустойчивости при $T = 0$, который следовал из теории первого порядка по кинематическому полю [1]. Выражение для $\chi(0,0)$ согласуется с паулиевской восприимчивостью в газовом пределе $(n \Rightarrow 0)$, дает сильное корреляционное усиление (≈ 5 раз) в области промежуточного заполнения $(n \approx 0,5)$ и кроссовер-переход в ферромагнитное состояние в точке $n \approx 0,83$ для $\rho(E) = \rho = 1/2W$.

1. Во втором порядке по $t(f - f')$ для $U = \infty$ квазичастичная функция Грина имеет вид [2,3]:

$$G_\sigma(\omega, \mathbf{k}) = \frac{n_-^{\bar\sigma}}{\omega - n_-^{\bar\sigma} E(\mathbf{k}) - \Omega_\sigma(\omega, \mathbf{k})/n_-^{\bar\sigma}}, \tag{1}$$

$$\Omega_\sigma(\omega, \mathbf{k}) = \Omega_\sigma^{\mathrm{I}}(\mathbf{k}) + \Omega_\sigma^{\mathrm{II}}(\omega), \tag{2}$$

где собственно энергетическая часть $\Omega_\sigma^{\mathrm{I}}(\mathbf{k})$ учитывает все эффекты (локальные и нелокальные), линейные по $t(\mathbf{f}-\mathbf{f}')$ [1)].

$$\Omega_\sigma^{\mathrm{I}}(\mathbf{k}) = K_\sigma(\mathbf{h})E(\mathbf{k}) - W\Delta_\sigma(\mathbf{h}), \tag{3}$$

$$\Delta_\sigma(\mathbf{h}) = < X_0^{\bar\sigma 0} X_{\mathbf{h}}^{0\bar\sigma} >, \tag{4}$$

$$K_\sigma(\mathbf{h}) = < n_0^{\bar\sigma} n_{\mathbf{h}}^{\bar\sigma} > -(n^{\bar\sigma})^2 + < X_0^{\bar\sigma\sigma} X_{\mathbf{h}}^{\sigma\bar\sigma} >, \tag{5}$$

$$W = |t|z, \qquad E(\mathbf{k}) = \sum_h t(\mathbf{h}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{h}}. \tag{6}$$

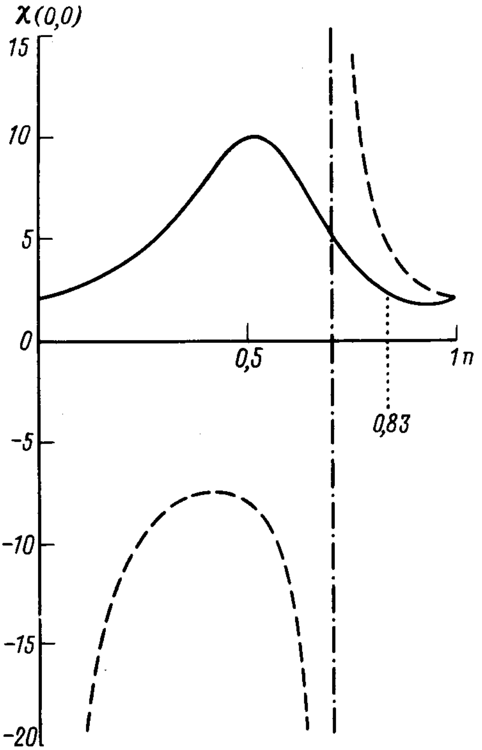
Система уравнений, следующая из [1], для $\Omega_\sigma^{\mathrm{II}}(\omega) = 0$ описывает как состояние Стонера–Нагаока (насыщенный ферромагнетизм: $R = n^\sigma, n^{\bar\sigma} = 0$), так и нестабильность этого состояния при конечных дырочных концентрациях [2-4]. В работе [5] показано, что в специальном случае трехчастичной проблемы (один перевернутый спин в состоянии Стонера–Нагаока), одночастичная функция Грина (1) совпадает с точным решением задачи [6].

2. Функцию Грина (1) легко обобщить на случай внешнего магнитного поля:

[1)] Все определения такие же как в [1-3].

$$G^{\sigma}(\omega, \mathbf{k}, n^{\bar{\sigma}}, H) = G^{\sigma}(\omega + \eta(\sigma)H, \mathbf{k}, n^{\bar{\sigma}}(H), H = 0). \tag{7}$$

В работе [1] была вычислена парамагнитная восприимчивость $\chi(0,0)$ в первом порядке по кинематическому полю. Полученное выражение для $\chi(0,0)$ оказалось отрицательным в области $0,7 \geq n \geq 0$, где согласно уравнениям кинематического поля (см. [2,3]) $R = n^{\sigma} - n^{\bar{\sigma}} = 0$ (то есть состояние либо парамагнитно, либо синглетно). При $n = 0$ и $n \approx 0,7$ $\chi(0,0) \to -\infty$ (рисунок). Подобный результат мог бы служить указанием на нестабильность парамагнитного состояния и возможность существования синглетной фазы в основном состоянии модели Хаббарда. Однако в настоящее время мы ставим под сомнение такой результат.



Однородная статическая парамагнитная восприимчивость как функция концентрации в $U = \infty$ модели Хаббарда для плотности состояний $\rho(E) = \rho = 1/2W$: сплошная линия – $\chi(0,0)$ вычисленная во втором порядке по кинематическому полю; пунктирная линия – $\chi(0,0)$ в первом порядке по кинематическому полю (результат работы [1])

3. Вычислим $\chi(0,0)$ во втором порядке по кинематическому полю. Собственно энергетическая часть $\Omega^{\mathrm{II}}_{\sigma}(\omega)$ для $U = \infty$ имеет вид [2]:

$$\Omega^{\mathrm{II}}_{\sigma}(\omega) = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} E^2(\mathbf{k}) \frac{(n^{\bar{\sigma}}_{-})^2 - [(n^{\bar{\sigma}}_{-})^2 + K_{\sigma}]^2}{(n^{\bar{\sigma}}_{-})^2} - \frac{(W\Delta_{\sigma})^2}{(n^{\bar{\sigma}}_{-})^2} \right\} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} G^{\sigma}(\omega, \mathbf{k}').$$

Найдем $\Omega^{\mathrm{II}}_{\sigma}(\omega)$ в полюсном приближении, то есть $\Omega^{\mathrm{II}}_{\sigma}(\omega = \omega^{\mathrm{I}})$, где ω^{I} – полюс функции Грина в линейной по $t(\mathbf{f} - \mathbf{f}')$-теории. Такой подход сохраняет симметрию уравнений первого порядка [1] для нахождения $\chi(0,0)$:

$$n^{+} = (1 - n_{-}) \frac{1}{2\alpha_{-}} [\xi_{+} + \alpha_{-} - \Delta_{-}], \tag{9}$$

$$n^{-} = (1 - n_{+}) \frac{1}{2\alpha_{+}} [\xi_{-} + \alpha_{+} - \Delta_{+}], \tag{10}$$

но существенно изменяет составляющие его слагаемые: $\xi_\pm(R,n,H)$; $\alpha_\pm(R,n)$; $\Delta_\pm(R,n)$ [2]. Эти кардинальные отличия легко проследить из сравнения полюсов функции Грина в теории первого (ω^{I}) и второго (ω^{II}) порядков в газовом пределе ($n \to 0$):

$$\omega^{\mathrm{I}} = E(\mathbf{k})\left[1 - \frac{n}{2} - \frac{n^2}{2}\right] + \frac{Wn}{2} - \frac{R}{2}\left[W\left(1 - \frac{n^2}{4}\right) - E(\mathbf{k})\left(1 + n - \frac{n^2}{4}\right)\right], \tag{11}$$

$$\omega^{\mathrm{II}} = E(\mathbf{k})\left[1 - \frac{5n^2}{8}\right] + \frac{Wn}{2} - \frac{R}{2}\left[W\left(1 - \frac{n^2}{4}\right) - E(\mathbf{k})\left(\frac{5n}{2} - \frac{n^2}{8}\right)\right]. \tag{12}$$

Полная компенсация главных вириальных коэффициентов в (12) в дисперсионной части уравнения приводит к следующему результату для $\chi(0,0)$ в газовом пределе:

$$\chi_{n\Rightarrow 0}(0,0) = \frac{2-n}{-\xi\left(1 - \frac{5n}{2} + \frac{11n^2}{8}\right) + n - \frac{13n^2}{8}},$$

$$\xi = \frac{\mu}{W} = -1 + \frac{3n}{2} + \frac{7n^2}{8}. \tag{13}$$

Полное выражение для $\chi(0,0)$, справедливое для всех n в области $R = 0$, имеет вид:

$$\chi(0,0) = \frac{2-n}{\alpha - \left\{(\xi - \Delta)\left[1 - \frac{\alpha'(2-n)}{\alpha}\right] + \Delta'(2-n)\right\}}, \tag{14}$$

$$\xi = -\alpha + \Delta + \frac{2\alpha n}{(2-n)}, \tag{14а}$$

$$\alpha = \frac{2-n}{2} - \frac{2m}{2-n} + \frac{2c}{2-n}\frac{a_1 - a_2}{a_1 + a_2}; \qquad \Delta = \frac{2s}{2-n} \tag{14б}$$

$$\alpha' = \frac{1}{2} + \beta + \frac{2m}{(2-n)^2} - \frac{2p}{2-n}; \quad \Delta' = \frac{2}{2-n}\left[Q + \frac{s}{2-n}\right]; \tag{14в}$$

$$\beta = \frac{2}{2-n}\left[\frac{a_2 b_1 - b_2 a_1}{(a_1 + a_2)^2}c + \frac{a_1 - a_2}{a_1 + a_2}\left(d - \frac{c}{2-n}\right)\right]; \tag{14г}$$

$$s = \frac{n(1-n)}{2-n}; \quad m = \frac{n^2(1-n)(4-n)}{2(2-n)^2}; \quad Q = \frac{2(1-n)^2}{(2-n)^2}; \tag{14д}$$

$$a_1 = \frac{(2-n)^2}{4} - 4s^2; \quad a_2 = c^2; \quad b_1 = (2-n) + 16sQ; \quad b_2 = 4cd, \tag{14е}$$

$$p = \frac{n(1-n)(5n-4)}{2(2-n)^2}; \quad c = \frac{(2-n)^2}{4} - m; \quad d = \frac{2-n}{2} - p. \tag{14ж}$$

Восприимчивость (14) как функция n приведена на рисунке. Минимальное значение $\chi_{min}(0,0) = 2$, соответствующее паулиевскому значению для данной

[2] Можно показать, что вклад от некогерентной части $\mathrm{Im}\Omega^{\mathrm{II}}_\sigma(\omega = \omega^{\mathrm{I}}) \le \mathrm{Re}\Omega^{\mathrm{II}}_\sigma(\omega = \omega^{\mathrm{I}})$, но опасная близость существует вблизи $n \approx 0,5$.

плотности состояний $\rho = 1/2W$, достигается в точках $n+0$, $n = 0,83$ и $n = 1$ [3]. Очевидно, что полученный результат кардинально изменяет концентрационную зависимость $\chi(0,0)$, следующую из теории первого порядка (пунктирная линия на рисунке). Значение $n = 0,83$ свидетельствует о парамагнитной неустойчивости системы, которая по отношению к значению $n \approx 0,7$ $(\Omega_\sigma^{II}(\omega) \equiv 0)$ сдвигается в область больших концентраций. Переход от сильно коррелированной парамагнитной фазы в упорядоченное ферромагнитное состояние не сопровождается появлением точек разрыва функции $\chi(0,0)$ и поэтому является кроссовер-переходом.

Один из авторов (Е.Г.Г.) благодарен Д.И.Хомскому, А.И.Ларкину и A.E.Ruckenstein за интерес, проявленный к этим результатам.

---

1. E.G.Goryachev, Preprint 1C/91/191. Miramare-Trieste, 1991.
2. Е.Г.Горячев, Е.В.Кузьмин, ЖЭТФ **98**, 1718 (1990).
3. Е.Г.Горячев, Е.В.Кузьмин, Письма в ЖЭТФ **52**, 6949 (1990).
4. B.S.Shastry, H.R.Krishnamurthy, and P.W.Anderson, Phys. Rev. B **41**, 2375 (1991).
5. Е.Г.Горячев, ЖЭТФ, **102**, в печати (1992).
6. A.E.Ruckenstein, S.Schmitt-Rink, Inter. J. of Mod. Phys. **3**, 1809 (1989).

---

[3] Для $\rho(E) \sim \sqrt{W^2 - E^2}$ это будет $\chi_{min}(0,0) = 0$