

# МАГНИТНЫЕ ФЛУКТУАЦИИ И ФОРМИРОВАНИЕ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА В ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМАХ С СИНГУЛЯРНОСТЯМИ ВАН ХОВА

П. А. Игошев<sup>a,b</sup>, А. А. Катанин<sup>a,b\*</sup>, В. Ю. Ирхин<sup>a\*\*</sup>

<sup>a</sup> Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук  
620219, Екатеринбург, Россия

<sup>b</sup> Max-Planck-Institut für Festkörperforschung  
70569, Stuttgart, Germany

Поступила в редакцию 26 апреля 2007 г.

Анализируется критерий ферромагнетизма двумерных систем с уровнем Ферми вблизи сингулярностей Ван Хова. В квазистатическом приближении, примененном к спин-фермионной модели, показано, что спектр спиновых возбуждений (парамагнонов) является положительно определенным при достаточно большой величине взаимодействия  $I$  между электронными и спиновыми степенями свободы ( $I > I_c$ ). Критическая величина взаимодействия  $I_c$  значительно превышает ее значение, определенное из критерия Стонера, который, таким образом, не является адекватным критерием ферромагнетизма в присутствии сингулярностей Ван Хова в электронном спектре. Комбинированием квазистатического приближения с методом уравнений движения получены результаты для собственной энергии электронов в первом порядке по обратному числу спиновых компонент.

PACS: 71.10.Fd, 71.10.Hf, 75.10.Lp

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Двумерные и слоистые системы с сильными электронными корреляциями уже более двух десятков лет привлекают внимание исследователей. Именно в таких системах — плоскостях  $\text{CuO}_2$  соединений  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  и  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  — пониженная размерность способствует появлению высокотемпературной синглетной сверхпроводимости [1]. С другой стороны, недавно был открыт ряд низкоразмерных соединений ( $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ ,  $\text{UGe}_2$ ), в которых сверхпроводимость, по-видимому, триплетного типа. При этом вещество  $\text{UGe}_2$  ферромагнитно при низких температурах и при давлении ниже критического. Как предполагается, ферромагнитные флуктуации играют также существенную роль в парамагнитном соединении  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  [2], что подтверждается свойствами допированного лантаном соединения  $\text{La}_x\text{Sr}_{2-x}\text{RuO}_4$ , находящегося на грани ферромагнитного перехода при  $x = 0.27$  [3], а также свойствами изоэлектронно-

го соединения  $\text{Ca}_2\text{RuO}_4$  [4], являющегося ферромагнитным под давлением. Перечисленные соединения обладают сингулярностями Ван Хова (СВХ) вблизи уровня Ферми. Описание магнитных флуктуаций в присутствии СВХ представляет собой важную задачу и может служить основой понимания магнитных и сверхпроводящих свойств указанных систем.

Согласно теории Стонера, большое значение плотности состояний на уровне Ферми, обусловленное СВХ, приводит к возможности существования ферромагнетизма. Однако, как известно, даже в системах с несингулярной плотностью состояний теория Стонера является принципиально недостаточной для описания магнитных свойств при конечных температурах, поскольку предсказывает большие значения температур магнитных переходов по сравнению с экспериментальными данными, а также приводит к неправильным температурным зависимостям термодинамических величин. Недостатки теории Стонера связаны с необходимостью учета спиновых флуктуаций. В связи с этим для описания свойств слабо- и почти ферромагнитных

\*E-mail: a.katanin@fkf.mpg.de

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

материалов, начиная с работ Мураты, Дониаха [5] и Дзялошинского [6], была развита теория парамагнетизма, систематически сформулированная Мория [7]. Указанные теории рассматривают магнитные возбуждения (парамагноны), которые вносят основной вклад в термодинамику слабых магнетиков. Свойства системы парамагнетизма вблизи квантовых фазовых переходов были позднее исследованы методом ренормгруппы Герцем в рамках модели  $\phi^4$  [8], соответствующие результаты обобщены Миллисом на случай конечных температур [9]. Применимость теории Герца–Мория–Миллиса вблизи квантовых критических точек была, однако, недавно поставлена под сомнение в работах [10], где было показано, что наименьшие поправки к спиновой восприимчивости являются неаналитическими по импульсу и существенно изменяют вид спектра магнитных возбуждений.

При наличии СВХ вблизи уровня Ферми затравочный спектр парамагнетизма в теории Герца–Мория–Миллиса не является положительно определенным. Действительно, в этих теориях спектр спиновых возбуждений определяется обратной спиновой восприимчивостью  $\chi_q^0$  невзаимодействующих электронов (для перехода к модели  $\phi^4$ , определяющей затравочный спектр парамагнетизма в теории Герца–Миллиса, предполагается использование преобразования Хаббарда–Стратоновича). Из-за влияния СВХ восприимчивость  $\chi_q^0$  может не иметь максимума в точке  $q = 0$  [11], что соответствует отсутствию положительной определенности спектра возбуждений над ферромагнитным основным состоянием. Положение максимума спиновой восприимчивости может изменяться взаимодействием электронов со спиновыми возбуждениями (парамагнонами). Теория Герца–Мория–Миллиса не рассматривает, однако, изменение импульсной зависимости восприимчивости указанным взаимодействием, так что ферромагнитное состояние в этой теории также неустойчиво относительно спиновых возбуждений с волновым вектором  $\mathbf{Q} \neq 0$ . Кроме того, энергия взаимодействия парамагнетизма в теории Герца–Мория–Миллиса отрицательна в наименьшем порядке теории возмущений по параметру электрон-парамагнетизма взаимодействия  $I$  при положении уровня Ферми вблизи СВХ, что соответствует притяжению парамагнетизма и возможности образования ими связанных состояний. Величина взаимодействия парамагнетизма может, однако, также существенно изменяться под влиянием электрон-парамагнетизма взаимодействия.

Таким образом, для исследования возможности

возникновения ферромагнетизма в присутствии СВХ необходим учет влияния взаимодействия электронов с парамагнонами на спиновую восприимчивость за пределами уже существующих спин-флуктуационных теорий. Попытка выйти за рамки этих теорий для трехмерных магнетиков была предпринята в работе Герца и Кленина [12], в которой было рассмотрено суммирование бесконечной последовательности диаграмм для неприводимой восприимчивости. Однако авторы этой работы не рассматривали изменение импульсной зависимости восприимчивости, важное в присутствии СВХ. Целью данной работы является последовательный учет влияния СВХ на возможность формирования ферромагнетизма двумерных систем.

Изложение строится на основе спин-фермионной модели, рассматривающей систему электронных и спиновых возбуждений, взаимодействующих друг с другом. Эта модель была впервые введена для описания антиферромагнитных флуктуаций в высокотемпературных сверхпроводниках [13], но может быть обобщена и на случай ферромагнитных флуктуаций [14]. В отличие от других микроскопических моделей (например, модели Хаббарда), спин-фермионная модель допускает простое аналитическое исследование возможности ферромагнетизма. Как показано в данной работе, при достаточно большой величине электрон-парамагнетизма взаимодействия  $I$  (моделирующего межэлектронное кулоновское взаимодействие в модели Хаббарда) спектр спиновых возбуждений в окрестности ферромагнитного состояния является положительно определенным, что соответствует возможности формирования ферромагнетизма при  $I > I_c$ . При этом величина  $I_c$  значительно превышает соответствующие значения, определенные из критерия Стонера, что находится в качественном согласии с результатами численных исследований [15].

## 2. МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМ

### 2.1. Спектр и магнитная восприимчивость невзаимодействующих электронов

Для исследования влияния СВХ на магнитные свойства рассмотрим электронный спектр

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t'(\cos k_x \cos k_y + 1) - \mu, \quad (1)$$

где  $t$  и  $t'$  — интегралы переноса соответственно в первой и второй координационной сферах,  $\mu$  — химический потенциал. На рис. 1 приведены графики

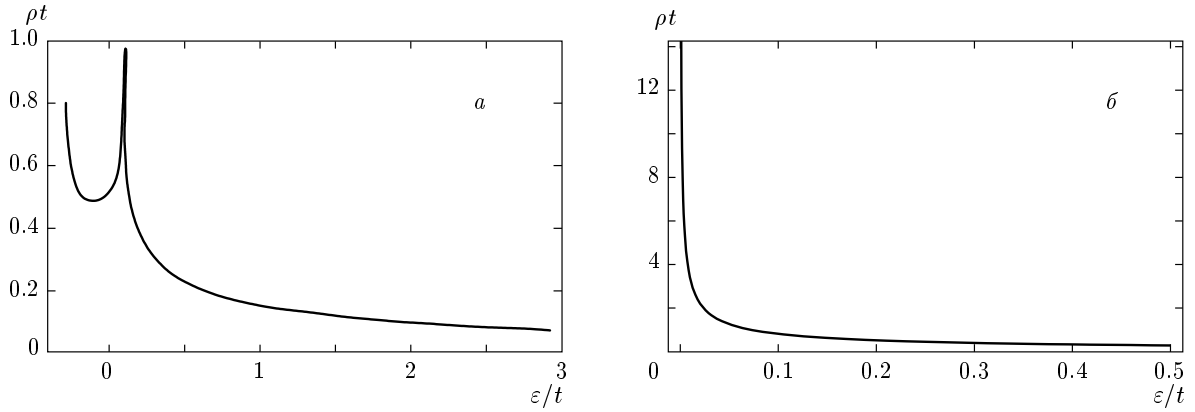


Рис. 1. Электронная плотность состояний  $\rho(\varepsilon)$  при  $t' = 0.45t$  (а) и  $t' = 0.50t$  (б)

плотности состояний при разных  $t'$ . При  $t' < 0.5t$  плотность состояний имеет логарифмическую сингулярность, отстоящую на энергию  $4t - 8t'$  от дна зоны. При  $t' = 0.5t$  появляются линии СВХ вдоль направлений  $k_x = 0$  и  $k_y = 0$ , что приводит к более сильной расходимости плотности состояний на дне зоны,  $\rho(\varepsilon) \propto \varepsilon^{-1/2}$  (так называемый случай плоской зоны [15, 16]). Указанные линии являются аналогом гигантских СВХ в трехмерных системах [17]. Неоднородная динамическая восприимчивость невзаимодействующего электронного газа со спектром (1) есть

$$\chi_q^{0,el} = -\frac{T}{2N} \sum_k \mathcal{G}_k \mathcal{G}_{k+q}, \quad (2)$$

где  $\mathcal{G}_k = (i\nu_n - \varepsilon_{\mathbf{k}})^{-1}$  — функция Грина свободных электронов, здесь и далее  $k = (\mathbf{k}; i\nu_n)$  и  $q = (\mathbf{q}; i\omega_n)$ ,  $\nu_n = (2n + 1)\pi T$  и  $\omega_n = 2n\pi T$  — соответственно фермиевские и бозевские мацубаровские частоты. СВХ приводят к логарифмической особенности однородной восприимчивости,

$$\chi_{q=0}^{0,el} \approx \frac{1}{4\pi t} \ln \frac{t}{\max(|\mu|, T)}, \quad (3)$$

вблизи ван-хововских заполнений, для которых  $\mu = 0$ . При этом импульсная зависимость  $\chi_q^{0,el}$  при низких температурах  $T \ll t$  имеет максимум при  $\mathbf{q} \neq 0$  (см. [11] и рис. 4, 5 ниже). Как обсуждалось во Введении, наличие этого максимума приводит к неустойчивости ферромагнитного основного состояния в имеющихся спин-флуктуационных теориях.

### 2.2. Спин-фермионная модель

Для выхода за рамки перечисленных теорий и систематического учета взаимодействия электронов с парамагнонами рассмотрим спин-фермионную модель [18]. Ее производящий функционал в формализме континуального интегрирования [19] имеет вид (здесь и далее мы опускаем нормировочный множитель)

$$\mathcal{Z}_{sf}[\eta, \eta^\dagger] = \int D[\mathbf{S}; c, c^\dagger] e^{-\beta \mathcal{S}},$$

$$\begin{aligned} \mathcal{S} = & \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger (-i\nu_n + \varepsilon_{\mathbf{k}}) c_{k\sigma} + \mathcal{S}_S + \\ & + I \sum_q \mathbf{s}_q \cdot \mathbf{S}_{-q} - \sum_{k\sigma} \left( \eta_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^\dagger \eta_{k\sigma} \right), \quad (4) \end{aligned}$$

$$\mathcal{S}_S = \frac{1}{2N} \sum_q \chi_q^{-1} \mathbf{s}_q \cdot \mathbf{S}_{-q}.$$

Здесь переменные  $c_{k\sigma}, c_{k\sigma}^\dagger$  соответствуют электронным степеням свободы,  $\eta_{k\sigma}, \eta_{k\sigma}^\dagger$  — фермионным источникам,

$$\mathbf{s}_q = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma\sigma'} c_{k\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{k+q\sigma'},$$

— оператор спина коллективизированных электронов,  $\beta = 1/T$  — обратная температура,  $\boldsymbol{\sigma}$  — матрицы Паули,  $N$  — число узлов,  $I$  — параметр взаимодействия спиновой и электронной подсистем,  $\chi_q$  — «затравочная» восприимчивость спиновой подсистемы. Импульсная зависимость величины  $\chi_q$  определяется магнитными свойствами спиновой подсистемы и может быть произвольной.

Поля  $\mathbf{S}_q$  описывают коллективные спиновые степени свободы, соответствующие парамагнонам и

происходящие микроскопически из-за магнитных флуктуаций электронной подсистемы. Модель (4) может быть использована, в частности, для описания магнитных флуктуаций в модели Хаббарда в режиме слабых и промежуточных электронных корреляций  $U < W$ , где  $W$  — ширина зоны электронного спектра,  $U$  — величина одноузельного кулоновского взаимодействия; при этом  $I = U$ ,  $\chi_q^{-1} = 2U$  [12].

Для исследования магнитных свойств модели (4) удобно перейти к действию, записанному только через бозонные переменные [12]. Разлагая функционал, получающийся интегрированием электронных степеней свободы, в ряд по  $I$ , находим

$$\begin{aligned} Z_{sf}[\eta, \eta^\dagger] &= \int D[\mathbf{S}] \times \\ &\times \exp \left[ -\beta \tilde{S}_S - \beta S_{int} - \sum_{kk'\sigma\sigma'} \eta_{k\sigma}^\dagger \mathbb{G}_{k\sigma, k'\sigma'} \eta_{k'\sigma'} \right], \\ \tilde{S}_S &= \frac{1}{2N} \sum_q (\chi_q^S)^{-1} \mathbf{S}_q \cdot \mathbf{S}_{-q}, \\ S_{int} &= T \sum_{n=3}^{\infty} \frac{\text{Tr} \left[ \left( \frac{I}{N} \mathcal{G}_k \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S}_{k-k'} \right)^n \right]}{n}, \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbb{G}_{k\sigma, k'\sigma'}[\mathbf{S}] &= \\ &= \{ (i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'} - (I/N) \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \cdot \mathbf{S}_{k-k'} \}_{k\sigma, k'\sigma'}^{-1} \end{aligned} \quad (6)$$

— функция Грина электронов, распространяющихся в присутствии полей  $\mathbf{S}$ ,  $\chi_q^S$  — точная восприимчивость спиновой подсистемы, определяющая спектр возбуждения парамагнетиков (см. ниже формулу (7)),  $S_{int}$  соответствует энергии взаимодействия парамагнетиков.

Диаграммная техника для модели (5) рассматривается в Приложении 1 и содержит следующие элементы:

- 1) пропагаторы продольных и поперечных парамагнетиков  $\chi_q^S$ ;
- 2) электронные функции Грина  $\mathcal{G}_k$ , объединенные в петли;
- 3) вершины электрон-парамагнетиконного взаимодействия  $I\boldsymbol{\sigma}$ .

Диаграммы, порождаемые взаимодействием  $S_{int}$  и содержащие парамагнетиконные собственно-энергетические вставки (входящие в точную восприимчивость  $\chi_q^S$ ), должны быть исключены. Обозначая соответствующие собственно-энергетические поправ-

ки через  $4I^2 H_q$ , общее выражение для спинового пропагатора можем представить в виде

$$(\chi_q^S)^{-1} = \chi_q^{-1} - 4I^2 H_q. \quad (7)$$

Приближение случайных фаз соответствует  $H_q = \chi_q^0$  (см. выражение (2)) и пренебрежению взаимодействием парамагнетиков, описываемых величиной  $S_{int}$ .

Разложение  $S_{int}$  по степеням спиновых переменных  $S_{k-k'}^j$  ( $j = x, y, z$ ) определяет величины

$$\begin{aligned} \Gamma_0^{j_1 \dots j_r}(q_1, \dots, q_r) &= \\ &= \frac{T I^r}{r} \sum_{\mathcal{P}_q} \sum_k \text{Tr}_\sigma \left[ \prod_{i=1}^r (\mathcal{G}_{k+\sum_{i=1}^i q_i} \sigma^{j_i}) \right], \end{aligned} \quad (8)$$

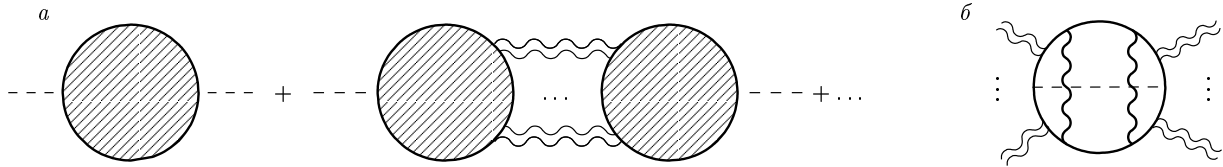
являющиеся коэффициентами разложения порядка  $r$  и имеющие смысл затравочных вершин парамагнетиконного взаимодействия ( $\mathcal{P}_q$  отвечает всевозможным перестановкам импульсов  $q_i$ ,  $\text{Tr}_\sigma$  — взятию следа по спиновым переменным). Ограничение вершиной четвертого порядка приводит в этом случае к эффективной модели типа  $\phi^4$  [8, 9]. В рассматриваемом случае упорядоченного основного состояния (вдали от квантовых критических точек) достаточно ограничиться пределом вершин с  $q_i \rightarrow 0$ , поскольку указанный предел не приводит к сингулярностям. Однако, как показано в п. 2.1, при положении уровня Ферми вблизи СВХ спектр возбуждения статических парамагнетиков,  $\omega_{\mathbf{q}} = 1/\chi_{(\mathbf{q}, 0)}^S$ , не является положительно определенным при  $T \rightarrow 0$  в наинишем (втором) порядке теории возмущений по  $I$ , соответствующему приближению случайных фаз. Кроме того, соответствующая энергия взаимодействия парамагнетиков,

$$\Gamma_0(0, 0, 0, 0) = -12I^4 \rho''(\mu),$$

также отрицательна вблизи СВХ.

### 2.3. Спиновые восприимчивости

Для исследования магнитных свойств модели (4) за пределами приближения случайных фаз рассмотрим восприимчивости коллективизированной и спиновой подсистем, соответственно  $\chi_q^{el} = \langle \langle s_q^z | s_{-q}^z \rangle \rangle / 4$  и  $\chi_q^S = \langle \langle S_q^z | S_{-q}^z \rangle \rangle$ . Общее выражение (7) для восприимчивости спиновой подсистемы было найдено выше. Электронную восприимчивость  $\chi_q^{el}$  можно непосредственно получить, дифференцируя (5) по фермионным источникам. Классифицируя соответству-



**Рис. 2.** Ряд диаграмм для неприводимой восприимчивости электронной подсистемы (а) и пример однопетлевых диаграмм (б); заштрихованные круги — сумма всех однопетлевых диаграмм; двойные волнистые линии соответствуют пропагатору продольных (штриховые линии) или поперечных (волнистые линии) парамагнетизма

ющие вклады на одночастично приводимые и неприводимые, находим

$$\chi_q^{el} = \frac{\chi_q^{el,ir}}{1 - 4I^2 \chi_q \chi_q^{el,ir}} \quad (9)$$

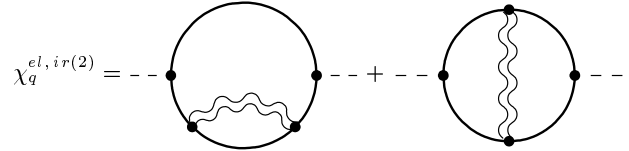
с  $\chi_q^{el,ir} = H_q$ . Равенство неприводимой восприимчивости  $\chi_q^{el,ir}$  и собственной энергии спинового пропагатора  $H_q$  может быть установлено диаграммно и является следствием вида взаимодействия в модели (4). Формально выражения (7) и (9) имеют тот же вид, что и в приближении случайных фаз с заменой восприимчивости  $\chi_q^{0,el}$  невзаимодействующих электронов на точную неприводимую восприимчивость  $\chi_q^{el,ir}$ .

Восприимчивость  $\chi_q^{el,ir}$  представляется в виде набора диаграмм, содержащих петли электронных функций Грина (однопетлевые вершинные части), которые могут быть связаны двумя и более парамагнетизмными линиями (см. рис. 2 и Приложение 1). Поскольку вблизи возникновения магнитного упорядочения основную роль играет неустойчивость в частично-дырочном канале, можно пренебречь диаграммами для  $\chi_q^{el,ir}$ , содержащими более одной электронной петли (второй и последующий члены на рис. 2а). Вклад диаграмм с одной петлей (рис. 2б) определяет однопетлевую 2-вершину согласно соотношению

$$\begin{aligned} \chi_q^{el,ir} &= \frac{1}{2} \langle \Pi_q[\mathbf{S}] \rangle_0 = -\frac{1}{4I^2} \Gamma_{1-loop}^{zz}(q, -q), \\ \Pi_q[\mathbf{S}] &= -\frac{T}{2N} \times \\ &\times \sum_{k_1 k_2} \text{Tr}_\sigma [\mathbb{G}_{k_1, k_2}[\mathbf{S}] \sigma^z \mathbb{G}_{k_2 + q, k_1 + q}[\mathbf{S}] \sigma^z], \end{aligned} \quad (10)$$

выражающему неприводимую восприимчивость электронной подсистемы как среднее восприимчивости электронного газа по всевозможным флуктуациям спинового поля.

Согласно теореме Мермина–Вагнера [20], дальний магнитный порядок в двумерных системах возможен лишь при  $T = 0$ . При этом в пределе  $T \rightarrow 0$



**Рис. 3.** Диаграммы для электронной неприводимой восприимчивости  $\chi_q^{el,ir}$  в наинизшем порядке по  $I$  (обозначения те же, что и на рис. 2)

восприимчивости (7) и (9) соответствуют усредненным по направлениям восприимчивостям упорядоченной фазы:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \chi_q^{S,el} = \frac{1}{3} (\chi_q^{zz} + \chi_q^{+-})_{T=0}^{S,el} \quad (11)$$

Для формирования ферромагнетизма в основном состоянии необходимо выполнение условия

$$4I^2 \chi_0 \chi_0^{el,ir} = 1 \quad \text{при } T \rightarrow 0 \quad (12)$$

(обобщенный критерий Стонера), а также положительность спектра возбуждений статических парамагнетизма  $\omega_{\mathbf{q}}$  при  $T \rightarrow 0$ , которая обеспечивается при  $\chi(\mathbf{q}, 0) = \text{const}$  требованием максимальности статической неприводимой восприимчивости  $\chi_{(\mathbf{q}, 0)}^{el,ir}$  при  $\mathbf{q} = 0$ .

#### 2.4. Статические и квантовые вклады. Статическое приближение

Будем интересоваться поведением статической восприимчивости вблизи точки  $\mathbf{q} = 0$  в обратном пространстве в пределе  $T \rightarrow 0$ . При этом в предположении ферромагнитно-упорядоченного основного состояния рассмотренные выше выражения упрощаются аналогично ранее исследованному случаю антиферромагнитного упорядочения [13, 14].

Рассмотрим для примера вычисление одночастично-неприводимой спиновой восприимчивости  $\chi_q^{el,ir}$  в наинизшем (втором) порядке теории возмущений по  $I$ , в котором имеются две топологически

различные диаграммы (рис. 3). Соответствующее аналитическое выражение имеет вид (см. Приложение 1)

$$\chi_q^{el,ir(2)} = -\frac{3T^2I^2}{N^2} \sum_{kq'} \mathcal{G}_k^2 \mathcal{G}_{k+q} \mathcal{G}_{k+q'} \chi_{q'}^S + \frac{T^2I^2}{2N^2} \sum_{kq'} \mathcal{G}_k \mathcal{G}_{k+q} \mathcal{G}_{k+q'} \mathcal{G}_{k+q+q'} \chi_{q'}^S. \quad (13)$$

Выражение для парамагнитного пропагатора  $\chi_q^S$  для малых частот и импульсов и уровня Ферми вблизи СВХ выберем в виде [21]

$$\chi_{\mathbf{q},i\omega_n}^S = \frac{A}{\mathbf{q}^2 + \xi^{-2} + B|\omega_n|/\max(tq_+, |\omega_n|)} + \chi_{\mathbf{q},i\omega_n}^{S,r}, \quad (14)$$

где  $A, B > 0$  — некоторые постоянные,  $\xi$  — корреляционная длина спиновых флуктуаций,  $\chi_{\mathbf{q},i\omega_n}^{S,r}$  — регулярный при  $q \rightarrow 0$ ,  $\xi \rightarrow \infty$  вклад в спиновую восприимчивость, которым мы в дальнейшем пренебрегаем. Результат (14) может быть получен из общей формулы (7) в предположении, что разложение неприводимой восприимчивости  $\chi_q^{el,ir}$  по импульсу и частоте имеет тот же вид, что и для восприимчивости  $(\chi_q^{el})_{I=0}$  в отсутствие взаимодействия, эффект взаимодействия сводится лишь к изменению величины параметров  $A$  и  $B$ . При этом условие  $B > 0$  следует из аналитических свойств восприимчивости как функции частоты, положительность постоянной  $A$  анализируется ниже в п. 3.1.

Из выражения (14) следует, что основной вклад в сумму (13) происходит от области интегрирования с  $\mathbf{q} \sim \xi^{-1}$ . При выполнении условия

$$(t/T)^{1/2} \ll \xi \quad (15)$$

можно пренебречь вкладом ненулевых мацубаровских частот в сумме по  $\omega'$  в (13), а также  $\mathbf{q}$ -зависимостью электронных функций Грина. Условие (15) заведомо выполнено в двумерном случае при низких температурах  $T \ll t$  и упорядоченном основном состоянии, поскольку в этом случае корреляционная длина экспоненциально велика при малых  $T$  (см., например, [22, 23]),

$$\xi \propto \exp(T^*/T), \quad (16)$$

$T^* \sim t$  — некоторый температурный масштаб. Это отличает рассматриваемую теорию от ранее рассмотренного трехмерного случая [12], где указанные приближения, строго говоря, дают лишь качественно правильное описание магнитных свойств.

В указанных приближениях сумма (13) принимает вид

$$\chi_q^{el,ir(2)} = \frac{T^2I^2}{N^2} \times \left( -3 \sum_k \mathcal{G}_k^3 \mathcal{G}_{k+q} + \frac{1}{2} \sum_k \mathcal{G}_k^2 \mathcal{G}_{k+q}^2 \right) \sum_{q'} \frac{1}{\omega_{q'}}. \quad (17)$$

Аналогичные приближения применимы для диаграмм более высокого порядка. При этом результаты вычисления диаграмм формально совпадают с результатами для действия

$$\mathcal{Z}_{\xi \rightarrow \infty}[\eta, \eta^\dagger] = \int d^3S \exp \left[ -\frac{3I^2S^2}{2\Delta^2} - \beta \sum_k \eta_k^\dagger (i\nu_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} - I\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S})^{-1} \eta_k \right], \quad (18)$$

содержащего однородную статическую моду  $\mathbf{S}$  с пропагатором

$$\frac{1}{3} \left( \frac{\Delta}{I} \right)^2 \equiv \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} \sim \frac{T}{4\pi t} \ln \xi. \quad (19)$$

Величина  $\Delta$  конечна при  $T \rightarrow 0$  в силу экспоненциальной зависимости корреляционной длины  $\xi$  от температуры (см. (16)). Использование функционала (18) позволяет определить функции Грина спиновой и электронной подсистем в замкнутом аналитическом виде, ср. [13, 14]. Заметим, что это решение во многом аналогично решению модели Келдыша в теории неупорядоченных сред. В случае гладкой плотности состояний соответствующие результаты удается обобщить на случай конечных корреляционных длин, записывая их в виде цепочки рекуррентных алгебраических [13] или интегральных [14] соотношений. В присутствии СВХ, однако, такое обобщение не удастся провести, поскольку соответствующие интегралы по импульсам не имеют простого вида при конечных  $\xi$ .

Статическое приближение, а также пренебрежение  $\mathbf{q}$ -зависимостью электронных функций Грина приводят к тому, что парамагнитные линии во всех диаграммах переносят нулевой импульс и нулевую частоту; следовательно, матрица  $\mathbb{G}_{kk'}[\mathbf{S}]$  становится диагональной по импульсам:

$$\mathbb{G}_{kk'}[\mathbf{S}] \rightarrow G_k(\mathbf{S})\delta_{kk'}, \quad (20)$$

$$G_k(\mathbf{S}) = (i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} - I\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{S})^{-1}.$$

Тогда получим

$$\chi_q^{el,ir} = \frac{1}{2} \langle \Pi_q(\mathbf{S}) \rangle_{\xi \rightarrow \infty}, \quad (21)$$

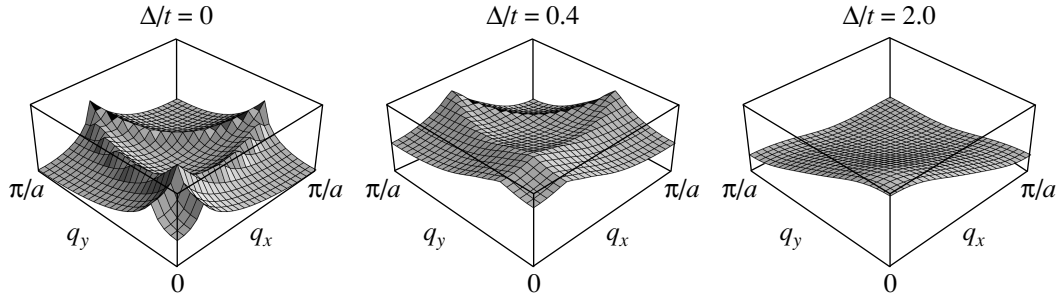


Рис. 4. Импульсная зависимость статической неприводимой электронной восприимчивости  $\chi_q^{el,irr}$  в первой четверти зоны Бриллюэна при  $t'/t = 0.45$ ,  $n = 0.583 > n_{VH} = 0.466$  при различных значениях  $\Delta$

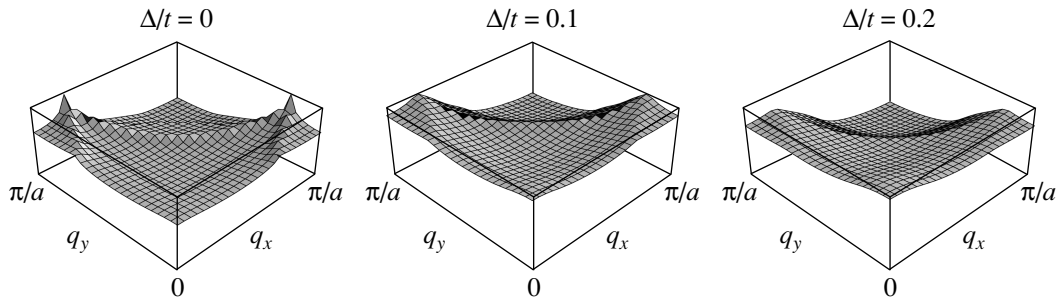


Рис. 5. То же, что и на рис. 4, для  $n = 0.338 < n_{VH}$

где

$$\Pi_q(\mathbf{S}) = -\frac{T}{2N} \sum_k \text{Tr}_\sigma [G_k(\mathbf{S}) \sigma^z G_{k+q}(\mathbf{S}) \sigma^z], \quad (22)$$

индекс  $\xi \rightarrow \infty$  означает усреднение, соответствующее функционалу (18),

$$\begin{aligned} \langle \Pi_q(\mathbf{S}) \rangle_{\xi \rightarrow \infty} &= \int d^3 S \left[ \frac{1}{3} \Pi_{\parallel}(\mathbf{q}|S \text{ sign } S^z) + \right. \\ &\left. + \frac{2}{3} \Pi_{\perp}(\mathbf{q}|S \text{ sign } S^z) \right] \exp\left(-\frac{3I^2 S^2}{2\Delta^2}\right), \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{\parallel,\perp}(\mathbf{q}|S) &= \\ &= -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\epsilon_{\mathbf{k}} - IS) - f(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \mp IS)}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - IS \pm IS}. \end{aligned}$$

Выражение (21) определяет импульсную зависимость неприводимой восприимчивости электронной подсистемы.

Аналогично неприводимой восприимчивости можно найти и электронную функцию Грина:

$$G_k = \frac{\delta^2 Z_{sf}[\eta, \eta^\dagger]}{\delta \bar{\eta}_k^\dagger \delta \eta_k} = \langle G_k(\mathbf{S}) \rangle_{\xi \rightarrow \infty}. \quad (24)$$

Явное выражение для  $G_k$  было получено в работе [14]. Соответствующая спектральная функция

$$\begin{aligned} A(\mathbf{k}, \omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\mathbf{k}}(\omega) = \\ &= \frac{9}{\sqrt{6\pi} \Delta^3} (\omega - \epsilon_{\mathbf{k}})^2 \exp\left[-\frac{3(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}})^2}{2\Delta^2}\right] \end{aligned} \quad (25)$$

имеет на ферми-поверхности двухпиковую (неквазичастичную) структуру, нарушающую фермижидкостные свойства из-за сильных ферромагнитных флуктуаций (см. ниже рис. 10). Как обсуждается в работе [23], это нарушение фермижидкостных свойств соответствует квазирасщеплению ферми-поверхности при низких температурах, связанному с перестройкой электронного спектра над магнитоупорядоченным основным состоянием.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЕЙ, ПАРАМАГНОННЫХ ВЕРШИН И СПЕКТРАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ

#### 3.1. Неприводимая восприимчивость

Для определения условий возникновения ферромагнетизма в основном состоянии рассмотрим импульсную зависимость неприводимой восприимчивости при  $T \rightarrow 0$ ; для вычислений выберем значение  $t' = 0.45t$ . Величина  $t' = 0.45t$  является типичным значением, при котором ожидается тенденция к ферромагнетизму в основном состоянии в некоторой области значения параметров  $(I, n)$  [15, 24, 25]. Химический потенциал  $\mu$  определяется условием постоянства электронной концентрации с ростом  $\Delta$ :

$$n = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon A(\mathbf{k}, \varepsilon).$$

Графики импульсной зависимости  $\chi_{\mathbf{q}}^{el,ir} \equiv \chi_{(\mathbf{q},0)}^{el,ir}$ , вычисленной по формуле (21) в первой четверти зоны Бриллюэна для  $t' = 0.45t$  и различных значений  $n, \Delta$ , приведены на рис. 4, 5. При  $\Delta = 0$  (соответствующем  $I = 0$ ) глобальный максимум статической восприимчивости находится в точке, отличной от  $\mathbf{q} = 0$ , так что при положении уровня Ферми как выше, так и ниже уровня СВХ условие положительности спектра возбуждений статических парамагнетонов (в предположении ферромагнетизма в основном состоянии) нарушено. С увеличением  $\Delta$  статическая неприводимая восприимчивость становится максимальной в точке  $\mathbf{q} = 0$ , при этом при  $n < n_{VH}$  локальный максимум восприимчивости становится глобальным, а при  $n > n_{VH}$  локальный максимум, имевшийся вблизи точки  $\mathbf{q} = 0$ , сдвигается в точку  $\mathbf{q} = 0$ . Таким образом, в обоих случаях взаимодействие электронов с парамагнонами приводит к появлению глобального максимума неприводимой восприимчивости электронной подсистемы при  $\mathbf{q} = 0$ , что указывает на возможность формирования ферромагнитного основного состояния.

Для определения критического значения  $\Delta$  (минимального значения  $\Delta$ , при котором возможен ферромагнетизм) рассмотрим вторую производную восприимчивости по  $q_x$  (или  $q_y$ ),  $\partial_{q_x}^2 \chi_{\mathbf{q}}^{el,ir} \equiv \partial^2 \chi_{\mathbf{q}}^{el,ir} / \partial q_x^2$ , в точке  $\mathbf{q} = 0$  (см. Приложение 2), результаты вычисления которой приведены на рис. 6. Изменение знака второй производной определяет критические значения  $\Delta_c \sim t$ , зависящие от электронной концентрации.

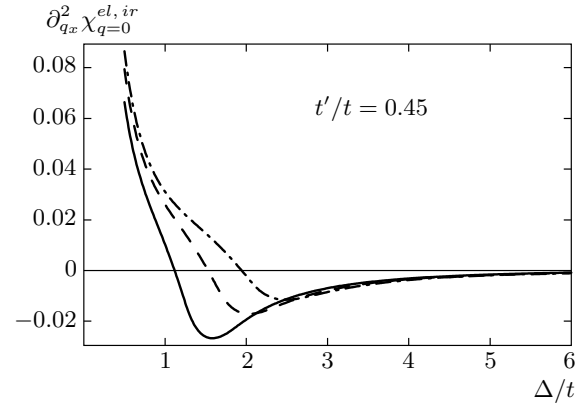


Рис. 6. График зависимости производной  $\partial_{q_x}^2 \chi_{q=0}^{el,ir}$  от  $\Delta$  при  $n = 0.533$  (сплошная линия),  $n = 0.583$  (штриховая линия),  $n = 0.626$  (штрих-пунктирная линия)

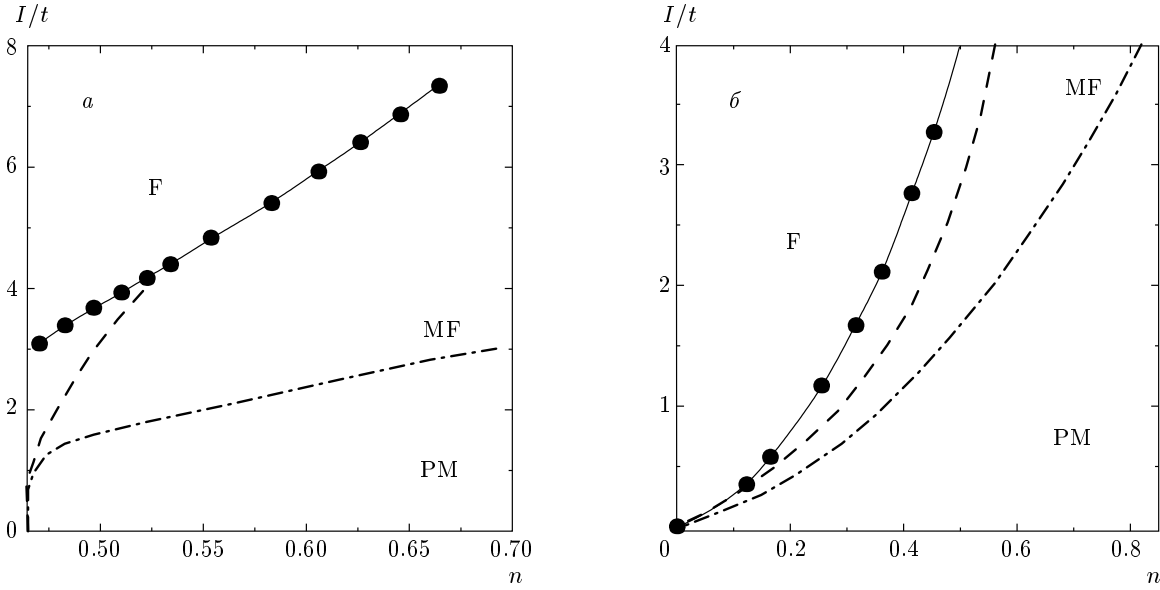
Для построения фазовых диаграмм на плоскости  $n-I$  необходимо установить связь между критической величиной параметра  $\Delta_c$  и спин-фермионным взаимодействием  $I$ , которую можно найти, используя обобщенный критерий Стонера (12). Полагая  $\chi_{\mathbf{q}}^{-1} = 2I$  в соответствии со связью спин-фермионной модели и модели Хаббарда (см. п. 2.2), находим  $I_c = 1/2 \chi_0^{el,ir}(\Delta_c)$ , где  $\chi_0^{el,ir}$  — однородная статическая неприводимая восприимчивость электронной подсистемы,

$$\chi_0^{el,ir} = \frac{1}{\Delta} \int_{-4+8t'}^{4+8t'} \rho(\varepsilon) \varphi\left(\frac{\varepsilon - \mu}{\Delta}\right) d\varepsilon, \quad (26)$$

$$\varphi(x) = (3x^2 + 2) \exp(-3x^2/2) / \sqrt{6\pi}.$$

Результирующая фазовая диаграмма для  $t'/t = 0.45$  и  $n > n_{VH}$  приведена на рис. 7а (случай  $n < n_{VH}$  в дальнейшем не рассматривается, поскольку несоизмеримые спиновые флуктуации, определяемые глобальным максимумом статической восприимчивости  $\chi_{(\mathbf{q},0)}^0$ , находящимся вдали от точки  $\mathbf{q} = 0$ , не учитываются в настоящем подходе). Критические значения  $I_c$  для  $n > n_{VH}$  намного превосходят значения  $I_c^{MF}$ , полученные в приближении среднего поля. Результаты для  $n$  вдали от  $n = n_{VH}$  находятся в качественном согласии с результатами ренормгруппового (РГ) метода для модели Хаббарда [15] с  $U = I$ . В отличие от результатов РГ, однако, критическое значение  $I_c$  при  $n = n_{VH}$  отлично от нуля, что связано с нарушением квазичастичной картины электронного спектра ферромагнитными флуктуациями. Таким





**Рис. 7.** Фазовая диаграмма в переменных  $n - I$ :  $a - t'/t = 0.45$ ;  $b - t'/t = 0.50$ . Сплошная линия — граница ферромагнитной фазы (F), определенная в данной работе; штриховая — результат метода ренормгруппы для модели Хаббарда [15] с  $U = I$ ; штрих-пунктирная линия — результат теории среднего поля (MF); PM соответствует парамагнитной фазе в теории среднего поля

образом, нефермижидкостные свойства электронного спектра в двумерных системах оказываются важными для правильного определения критерия ферромагнетизма вблизи СВХ. Аналогичные результаты ожидаются при других (не очень малых) значениях  $0.35 \lesssim t'/t < 0.5$ , при которых ферромагнитное упорядочение преобладает над другими неустойчивостями (при меньших значениях  $t'/t$  доминируют неустойчивости другого типа — антиферромагнитная или куперовская, которые не рассматриваются в данной работе).

Фазовая диаграмма для «плоской зоны» ( $t'/t = 0.50$ ) приведена на рис. 7б. В этом случае критические значения  $I_c$  также превосходят значения, полученные в приближении среднего поля  $I_c^{MF}$ , и при всех значениях электронной концентрации наблюдается качественное согласие с РГ-результатами [15].

### 3.2. Вершина парамагнетного взаимодействия

Рассмотрим вершину  $\Gamma^{jjj'j'}(q_1, q_2, q_3, q_4)$ , определяющую энергию взаимодействия парамагнетонов. Эта вершина определяется формулой (33) Приложения 1. Будем интересоваться компонентой вершины с  $j \neq j'$ . Для вычисления этой вершины выра-

зим ее через соответствующую 2-частично неприводимую вершину  $\Gamma_{irr}^{jjj'j'}(q_1, q_2, q_3, q_4)$ , не разрезаемую по двум парамагнетонным линиям. В общем случае связь этих вершин определяется паркетным классом диаграмм.

Для упрощения соотношения между указанными вершинами рассмотрим обобщение модели (4) с  $M$ -компонентным спиновым полем  $\mathbf{S}$  (см., например, работы [26, 27]), при котором индекс  $j$  может принимать значения  $1, \dots, M$ . При этом в пределе  $M \rightarrow \infty$ , благодаря наличию в диаграммах внутренних суммирований по спиновым индексам, наибольший вклад в полную вершину происходит от лестничного набора диаграмм с одинаковым спиновым индексом внутренних парамагнетонных функций Грина (рис. 8), что позволяет получить простое соотношение между полной  $\Gamma^{jjj'j'}$  и неприводимой  $\Gamma_{irr}^{jjj'j'}$  вершинами. В первом порядке по  $1/M$  это соотношение имеет вид

$$\begin{aligned} \Gamma^{jjj'j'}(q_1, q_2, q_3, q_4) &= \Gamma_{irr}^{jjj'j'}(q_1, q_2, q_3, q_4) - \\ &- \frac{T}{2N} \sum_{j'', p_1, p'} \Gamma^{jjj''j''}(q_1, q_2, p, p') \chi_p^S \chi_{p'}^S \times \\ &\times \Gamma_{irr}^{j''j''j'j'}(-p, -p', q_3, q_4) \delta_{q_1+q_2, -p-p'}. \end{aligned} \quad (27)$$

При больших значениях корреляционной длины  $\xi$  основной вклад в сумму в (27) происходит от

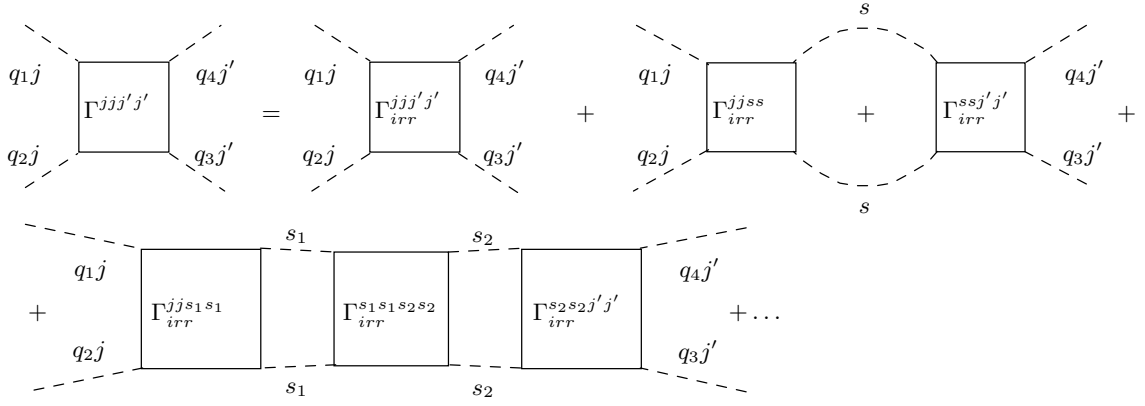


Рис. 8. Лестничные диаграммы для вершины парамагнетического рассеяния

области малых импульсов  $p, p'$ . Считая внешние импульсы  $q_1, q_2, q_3, q_4$  также малыми, а вершину  $\Gamma_{irr}^{jjj'j'}$  ( $q_1, q_2, q_3, q_4$ ) постоянной в окрестности точки  $q_1 = q_2 = q_3 = q_4 = 0$  (в дальнейшем обозначаем эту постоянную как  $\Gamma_{irr}$ ), в статическом приближении находим

$$\Gamma_{irr}^{jjj'j'}(q_1, q_2, q_3, q_4) = \frac{\Gamma_{irr}}{1 + \Gamma_{irr} M \zeta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2} / 2} \delta_{\omega_1, 0} \delta_{\omega_2, 0} \delta_{\omega_3, 0} \delta_{\omega_4, 0}, \quad (28)$$

где

$$\zeta_{\mathbf{q}} = \frac{T}{N} \sum_{\mathbf{p}} \chi_{\mathbf{p}}^S \chi_{\mathbf{q}-\mathbf{p}}^S = \frac{T A^2}{\pi |\mathbf{q}| \sqrt{\mathbf{q}^2 + 4\xi^{-2}}} \ln \frac{|\mathbf{q}| + \sqrt{\mathbf{q}^2 + 4\xi^{-2}}}{2\xi^{-1}}. \quad (29)$$

Отметим, что в рассматриваемом пределе  $\xi \rightarrow \infty$  величина

$$\zeta_{\mathbf{q}} = \frac{T A^2}{\pi |\mathbf{q}|^2} \ln(|\mathbf{q}| \xi)$$

расходится при  $|\mathbf{q}| \rightarrow 0$ , что приводит к обращению в нуль полной вершины взаимодействия парамагнетиков (28) при  $\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_2 = \mathbf{q}_3 = \mathbf{q}_4 = 0$  в соответствии с предположением о наличии дальнего магнитного порядка в основном состоянии<sup>1)</sup>.

Из формулы (28) видно, что важное значение имеет знак  $\Gamma_{irr}$  при малых входящих импульсах. Согласно выражению (28), при  $\Gamma_{irr} < 0$  парамагнеты

образуют связанное состояние, и поэтому ферромагнетизм невозможен. Исследуем знак  $\Gamma_{irr}$  в квазистатическом приближении в зависимости от взаимодействия электронов с парамагнонами. В общем виде вершина  $\Gamma_{irr}$  может быть представлена как сумма вкладов однопетлевых вершин  $\Gamma_{1-loop}$ , соединенных тремя и более парамагнетическими линиями. Вновь используя по аналогии со случаем  $r = 2$  приближение  $\Gamma_{irr} = \Gamma_{1-loop}$ , пренебрегающее вкладами в неприводимую вершину с количеством петель  $n > 1$ , и возвращаясь к случаю  $M = 3$ , находим

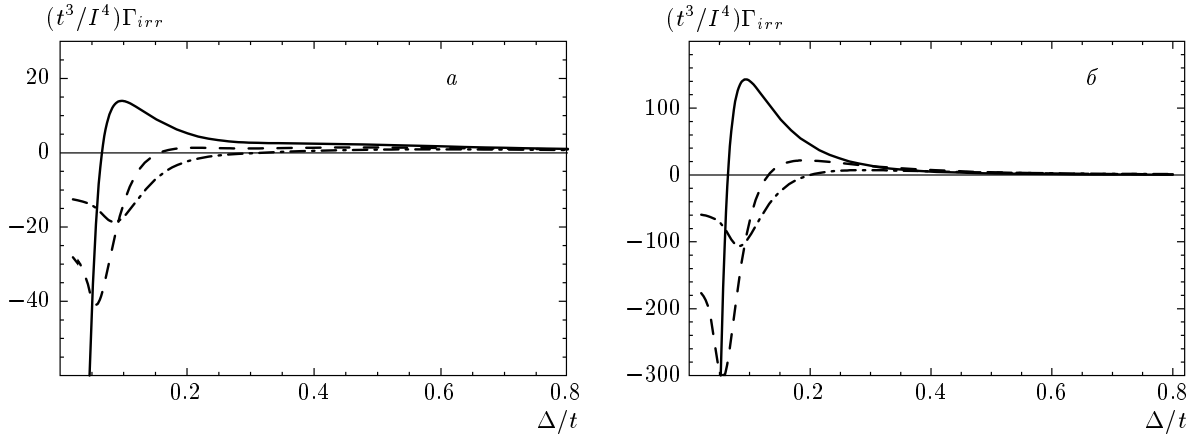
$$\Gamma_{irr} = \frac{T I^4}{4N} \times \text{Tr}_{\sigma} \left\langle \sum_k G_k(\mathbf{S}) \sigma^z G_k(\mathbf{S}) \sigma^x G_k(\mathbf{S}) \sigma^z G_k(\mathbf{S}) \sigma^x \right\rangle_{\xi \rightarrow \infty} = \frac{1}{\Delta^3} \int_{-4+8t'}^{4+8t'} \rho(\varepsilon) g\left(\frac{\varepsilon - \mu}{\Delta}\right) d\varepsilon, \quad (30)$$

$$g(x) = \frac{1}{15} (2 + 3x^2 - 9x^4) \exp\left(-\frac{3x^2}{2}\right).$$

Результаты численного расчета неприводимой вершины по формуле (30) при  $T \rightarrow 0$  приведены на рис. 9. Видно, что неприводимая вершина  $\Gamma_{irr}$  меняет знак при значениях  $\Delta$ , гораздо меньших значений  $\Delta_c$ , определенных в п. 3.1, и, таким образом, не приводит к дополнительным ограничениям на возможность существования ферромагнетизма.

При  $\Gamma_{irr} > 0$  в пределе  $M \rightarrow \infty$  и малых импульсов  $q_1, \dots, q_4$  можно пренебречь единицей в знаме-

<sup>1)</sup> Фактически указанное обращение в нуль вершины является обобщением принципа Адлера [28] на систему электронов, взаимодействующих с парамагнонами; аналогичное исчезновение магн-магнетонной вершины при  $q_i = 0$  в гейзенберговских магнетиках обсуждалось ранее [29].



**Рис. 9.** График зависимости неприводимой вершины  $(t^3/I^4)\Gamma_{irr}$  от  $\Delta$ : *a* —  $t' = 0.45t$ ,  $n = 0.533$  (сплошная линия),  $n = 0.583$  (штриховая линия),  $n = 0.626$  (штрих-пунктирная линия); *б* —  $t' = 0.5t$ ,  $n = 0.316$  (сплошная линия),  $n = 0.415$  (штриховая линия),  $n = 0.486$  (штрих-пунктирная линия)

нателе выражения (28), при этом получим

$$\Gamma^{jj'j'}(q_1, q_2, q_3, q_4) = \frac{2}{M\zeta_{q_1+q_2}}\delta_{\omega_1,0}\delta_{\omega_2,0}\delta_{\omega_3,0}\delta_{\omega_4,0}. \quad (31)$$

Отметим, что при  $\Gamma_{irr} \ll 1$  (т.е. в режиме слабой связи и/или для достаточно гладкой плотности состояний) формула (31) справедлива лишь в рассматриваемом пределе низких температур ( $\xi \rightarrow \infty$ ). При более высоких температурах единица в знаменателе выражения (28) должна быть сохранена также в пределе больших  $M$ , поскольку  $\Gamma_{irr}\zeta_0 \ll 1$ .

### 3.3. Собственная энергия электронов и спектральные функции с учетом взаимодействия парамагнетиков

Выражение (31) для вершины взаимодействия парамагнетиков в первом порядке по  $1/M$  можно использовать для исследования влияния взаимодействия парамагнетиков на собственную энергию  $\Sigma$  электронов и других характеристик электронной системы. В рамках метода  $1/M$ -разложения было показано [27], что в первом порядке по  $1/M$  электронные свойства модели (4) определяются системой уравнений для собственно-энергетической части  $\Sigma_k$  и односторонне неприводимых вершин рассеяния электрона на парамагнетиках  $\gamma_k \equiv \gamma_k^z, \gamma_k^{zz}, \gamma_k^{zz\perp}$ . В пределе  $\xi \rightarrow \infty$  эти уравнения принимают алгебраический

вид:

$$\begin{aligned} \Sigma_k &= \Delta^2 \gamma_k G_k, \\ \gamma_k &= 1 + (\gamma_k^{zz} G_k - \gamma_k^2 G_k^2) \Delta^2 / 3, \\ \gamma_k^{zz} &= \Delta^2 (2\gamma_k^3 G_k^3 + \gamma_k \gamma_k^{zz} G_k^2 + \gamma_k^{zz\perp} G_k) + \alpha \gamma_k G_k, \\ \gamma_k^{zz\perp} &= -2\Delta^2 (\gamma_k^4 G_k^4 + \gamma_k^2 \gamma_k^{zz} G_k^3 + \gamma_k \gamma_k^{zz\perp} G_k^2) - \alpha \gamma_k^2 G_k^2, \end{aligned} \quad (32)$$

где  $\alpha = M\Gamma^{jj'j'}(0, 0, 0, 0)\zeta_0$ . Результаты решения этих уравнений с учетом взаимодействия парамагнетиков ( $\alpha = 2$  согласно формуле (31)) и без него ( $\alpha = 0$ ) приведены на рис. 6–8.

Как и в отсутствие взаимодействия парамагнетиков [14], вещественная часть собственной энергии имеет (бесконечную) положительную производную на уровне Ферми, а мнимая часть имеет  $\delta$ -функциональный пик. Как отмечалось выше, эти аномалии возникают в результате взаимодействия электронов с парамагнетиками и нарушают квази-частичную картину вблизи уровня Ферми. Физически это связано с тем, что вследствие сильных ферромагнитных флуктуаций образуются квази-ферми-поверхности с энергиями, отстоящими от уровня Ферми на  $\pm\Delta$  [23]. Отметим, что наличие области с нулевым спектральным весом является артефактом  $1/M$ -разложения: как показывает сравнение с результатами квазистатического приближения (рис. 10), спектральный вес в этой области конечен, но мал. По сравнению с результатами в отсутствие взаимодействия парамагнетиков ( $\alpha = 0$  на рис. 10–12) электронный спектр становится менее когерентным

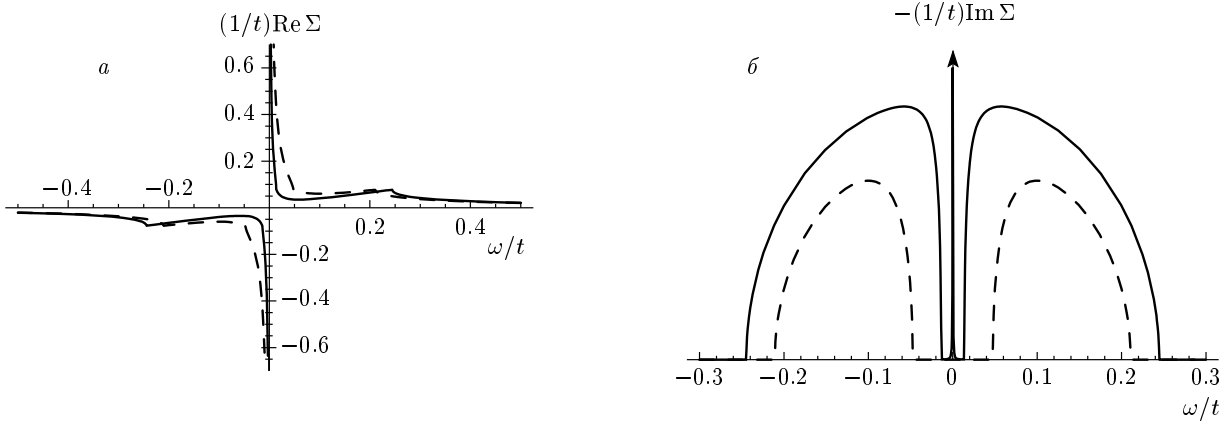


Рис. 11. Вещественная (а) и мнимая (б) части электронной собственной энергии  $\Sigma(\omega)$ ; обозначения и параметры те же, что и на рис. 10

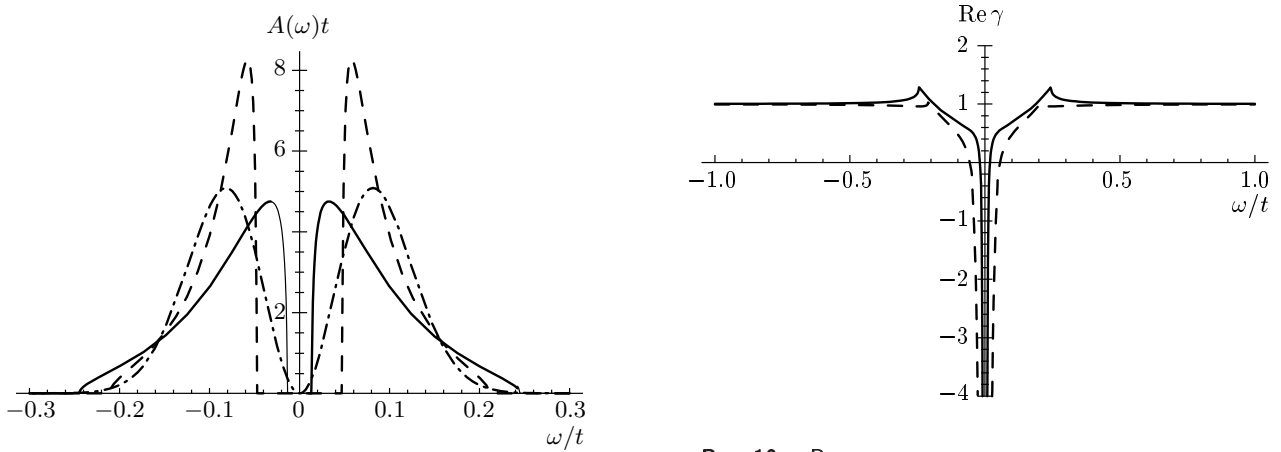


Рис. 10. Спектральная плотность  $A = -(1/\pi) \text{Im} G$ , вычисленная из уравнений (32) без учета ( $\alpha = 0$ , штриховая линия) и с учетом ( $\alpha = 2$ , сплошная линия) взаимодействия парамагнетиков как функция  $\omega \equiv \nu - \epsilon_k + \mu$ ; штрихпунктирная линия — спектральная плотность в квазистатическом приближении (формула (25)),  $\Delta = 0.1t$

Рис. 12. Вещественная часть вершины электрон-парамагнетонного рассеяния  $\gamma(\omega)$ ; обозначения и параметры те же, что и на рис. 10, 11

( $\text{Im} \Sigma$  возрастает,  $A(\omega)$  размывается), а расстояние между пиками спектральной плотности  $A$  уменьшается. Таким образом, учет взаимодействия парамагнетиков важен для вычисления характеристик электронного спектра.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрены необходимые условия существования ферромагнетизма в двумерных систе-

мах с СВХ — максимальность неприводимой восприимчивости в точке  $\mathbf{q} = 0$ , обеспечивающая положительность спектра спиновых возбуждений, а также отсутствие притяжения между парамагнетиками (невозможность образования парамагнетиками связанного состояния).

При отсутствии взаимодействия электронов с парамагнетиками и положении уровня Ферми вблизи СВХ указанные условия оказываются нарушенными — импульсная зависимость спиновой восприимчивости имеет максимум на волновом векторе  $\mathbf{q} \neq 0$ , соответствующий основному состоянию с волной спиновой плотности. С увеличением взаимодействия, однако, статическая спиновая восприимчивость приобретает максимум при  $\mathbf{q} = 0$ , энергия взаимодействия парамагнетиков становится поло-

жительной, что обеспечивает возможность их существования как независимых квазичастиц. Критические значения электрон-парамагнетного взаимодействия  $I_c$ , при которых становится возможным существование ферромагнитного состояния, значительно превосходят их значения  $I_c^{MF}$  в теории Стонера и качественно согласуются с численными РГ-исследованиями модели Хаббарда с  $I = U$  при электронных концентрациях, не слишком близких к ван-хововской. Критическое значение  $I_c$  оказывается, однако, конечным при ван-хововской электронной концентрации и  $t' < 0.5t$ . Это связано с неквазичастичной картиной электронного спектра (квазирасщепление поверхности Ферми), приводящей к сильной перенормировке химического потенциала.

В отличие от теории Мория, в которой отклонения от критерия Стонера обусловлены квантовыми вкладами в однородную неприводимую восприимчивость, в рассмотренном подходе они возникают главным образом благодаря изменению импульсной зависимости восприимчивости классическими спиновыми флуктуациями. Изменение однородной неприводимой восприимчивости взаимодействием, описываемое теорией Мория, также учитывается в рамках рассмотренного подхода, но является менее существенным. Вопрос о способе перехода из ферромагнитной фазы в парамагнитную остается открытым. Один из возможных вариантов — наличие промежуточной фазы с сильным ближним порядком, характеризующимся волновым вектором  $\mathbf{Q} \neq 0$  — требует дальнейшего исследования. Для аналитического описания магнитных свойств этой фазы необходимо включение в теорию возбуждений с несоизмеримым волновым вектором  $\mathbf{Q}$ , а также учет квантовых флуктуаций, что представляет собой задачу для дальнейших исследований. Также остается открытым вопрос о формировании ферромагнитного состояния при  $n < n_{UH}$  (в частности, когда перенормированный химический потенциал находится вблизи особенности Ван Хофа).

Помимо рассмотренных причин отклонения от критерия Стонера, в более реалистичной модели Хаббарда может быть важно частично-частичное рассеяние [30], не учитываемое в спин-фермионной модели. Согласие полученных результатов с результатами РГ-расчетов для этой модели при заполнениях, не слишком близких к ван-хововским, показывает, однако, что изменение импульсной зависимости восприимчивости, по-видимому, играет наиболее существенную роль. С другой стороны, роль неквазичастичной картины спектра возбуждений вблизи ферромагнитной неустойчивости, продемонстриро-

ванная в рамках нашего подхода и не учитываемая предыдущими РГ-рассмотрениями, требует также дальнейшего исследования в рамках модели Хаббарда.

Полученные результаты могут служить основой дальнейшего исследования систем с ферромагнитной неустойчивостью и особенностями Ван Хофа в электронном спектре. Представляют интерес более детальное исследование окрестности квантовых фазовых переходов и изучение роли неаналитических поправок в системах с СВХ. Также представляется важным изучение возможности триплетного сверхпроводящего спаривания в системах с СВХ в электронном спектре.

Авторы работы благодарны М. И. Кацнельсону за ценные обсуждения. Работа частично поддержана проектом научных школ РФФИ (№ 4640.2006.2) и проектом РФФИ (№ 07-02-01264-а).

## ПРИЛОЖЕНИЕ 1

### Правила диаграммной техники для парамагнитных вершин в спин-фермионной модели

Для рассмотрения спиновых флуктуаций в модели (5) удобно ввести  $r$ -вершину парамагнитного рассеяния, которую определим как

$$\Gamma^{j_1 \dots j_r}(q_1, \dots, q_r) = -T \left( \prod_{i=1}^r \chi_{q_i}^{-1} \right) \times \\ \times \int_0^\beta d\tau_1 \dots d\tau_r \exp(i\omega_1 \tau_1 + \dots + i\omega_r \tau_r) \times \\ \times \langle T_\tau [S_{\mathbf{q}_1}^{j_1}(\tau_1) \dots S_{\mathbf{q}_r}^{j_r}(\tau_r)] \rangle_c, \quad (33)$$

$$q_1 + \dots + q_r = 0,$$

где  $q_1, \dots, q_r$  — импульсы рассеяния,  $j_1, \dots, j_r$  — спиновые индексы, а  $T_\tau$  — упорядочение по мацу-баровскому времени. Произведение в круглых скобках удаляет внешние функции Грина поля  $\mathbf{S}$ ; при этом для  $r > 2$  будем полагать  $\chi_{q_i} \rightarrow \chi_{q_i}^S$ , что сводится к удалению полных пропагаторов поля  $\mathbf{S}$ , усреднение со значком «с» обозначает учет только таких диаграмм, в которых внешние спиновые операторы (33) связаны друг с другом через линии, соответствующие электронным функциям Грина (см. ниже). В то время как 2-вершина описывает собственно-энергетические поправки к парамагнитному пропагатору, более старшие вершины соответ-

ствуют взаимодействию перенормированных (физических) парамагнетиков.

Вычисление корреляционных функций спиновых операторов проводится с помощью разложения  $\exp(-\beta S_{int})$  в функционале (5) по величине электрон-парамагнетического взаимодействия. При этом по теореме Вика среднее в формуле (33) разбивается на всевозможные комбинации средних пар операторов

$$\begin{aligned} \langle S_q^j S_{q'}^{j'} \rangle &\equiv T \int_0^\beta d\tau d\tau' \exp(i\omega_n \tau + i\omega_{n'} \tau') \times \\ &\times \langle T_\tau [S_q^j(\tau) S_{q'}^{j'}(\tau')] \rangle = \chi_q^S \delta_{q,-q'} \delta_{jj'}, \end{aligned}$$

где  $\chi_q^S$  — точная спиновая восприимчивость. Соответствующие вклады в вершину могут быть изображены диаграммами, при этом произвольная диаграмма для  $r$ -вершины (33) порядка  $n$  содержит следующие компоненты.

1)  $n$  внутренних ( $\sigma^\pm, \sigma^z$ ) и  $r$  внешних ( $S^\pm, S^z$ ) вершин взаимодействия, а также  $n$  направленных сплошных линий, соответствующих электронным функциям Грина. При этом в каждую внутреннюю вершину входит одна электронная линия и из каждой внутренней вершины исходит одна электронная линия.

2) Продольные вершины ( $\sigma^z, S^z$ ) соединяются между собой штриховой линией, поперечные ( $\sigma^\pm, S^\pm$ ) — волнистой. При этом внешняя  $S^+$ -вершина соединяется с внутренней  $\sigma^+$ -вершиной,  $S^-$ -вершина — с  $\sigma^-$ , а  $S^z$ -вершина — с  $\sigma^z$ ; внутренние волнистые линии соединяют  $\sigma^+$ - и  $\sigma^-$ -вершины, штриховые —  $\sigma^z$ -вершины.

3) Каждой внутренней штриховой или волнистой линии, несущей 4-импульс  $q$ , соответствует множитель  $\chi_q^S$ , каждой сплошной линии, несущей 4-импульс  $k$ , — множитель  $\mathcal{G}_k$ ; сумма импульсов, входящих в каждую затравочную вершину, равна сумме выходящих, по независимым внутренним импульсам ведется суммирование.

4) Число внутренних поперечных вершин в каждой петле должно быть четным и  $\sigma^+$ - и  $\sigma^-$ -вершины должны чередоваться. Используя тип внешних вершин, необходимо определить тип всех поперечных вершин в диаграмме, у которых это возможно сделать однозначно.

5) Коэффициент, соответствующий диаграмме, равен

$$I^n (T/N)^{(n-r)/2+1} \cdot (-1)^{c+f+1} \cdot 2^{n_\perp+n_K},$$

где  $c$  — полное число продольных вершин, находящихся на электронной петле между соседними по-

перечными  $\sigma^-$ - и  $\sigma^+$ -вершинами вдоль направления электронной линии,  $f$  — число электронных петель,  $n_K$  — число независимых внутренних поперечных вершин, тип которых определен неоднозначно,  $n_\perp$  — число волнистых линий.

Диаграмма наимизшего порядка для вершины с любым числом спиновых операторов — электронная петля (8). Перенормировка вершины происходит двумя способами. С одной стороны, в электронной петле могут появиться внутренние парамагнетические линии. С другой стороны, диаграмма для вершины может содержать несколько таких электронных петель, соединенных между собой парамагнетическими линиями.

Для классификации диаграмм удобно определить однопетлевую вершину  $\Gamma_{1-loop}^{j_1 \dots j_r}(q_1, \dots, q_r)$  как сумму всех диаграмм для вершины, содержащих только одну петлю электронных функций Грина (см. рис. 2б). Каждая диаграмма для вершины содержит одну или несколько однопетлевых вершин, соединенных между собой и с внешними спиновыми операторами парамагнетическими линиями. Сравнивая коэффициенты разложения по степеням  $I$  (33) и (34), можно показать, что

$$\begin{aligned} \Gamma_{1-loop}^{j_1 \dots j_r}(q_1, \dots, q_r) &= \frac{TI^r}{rN} \times \\ &\times \sum_{\mathcal{P}_q} \text{Tr}_\sigma \sum_{k_1 \dots k_r} \langle \mathbb{G}_{k_1, k_2}[\mathbf{S}] \sigma^{j_1} \mathbb{G}_{k_2+q_1, k_3+q_1}[\mathbf{S}] \sigma^{j_2} \dots \\ &\dots \mathbb{G}_{k_r+q_1+\dots+q_{r-1}, k_1+q_1+\dots+q_{r-1}}[\mathbf{S}] \sigma^{j_r} \rangle_S, \end{aligned} \quad (34)$$

значок  $\mathcal{P}_q$  у суммы указывает на то, что сумма берется по всем перестановкам номеров  $i$  импульсов  $q_i$  и одновременно спиновых индексов  $j_i$ . Явные выражения для однопетлевой 2- и 4-вершин даются формулами (23) и (30) основного текста.

## ПРИЛОЖЕНИЕ 2

### Вторая производная импульсной зависимости восприимчивости

Вторая производная импульсной зависимости восприимчивости при  $T = 0$  имеет вид

$$\begin{aligned} \partial_{q_x}^2 \chi_{\mathbf{q}=0}^{el,ir}(\omega = 0) &= \frac{1}{\Delta^2} \sqrt{\frac{3}{32\pi}} \times \\ &\times \int_{(w_1-\mu)/\Delta}^{(w_2-\mu)/\Delta} d\xi \rho_p(\mu + \xi \Delta) \left[ \left( -3\xi^4 + 5\xi^2 - \frac{8}{3} \right) \times \right. \\ &\left. \times \exp\left(-\frac{3\xi^2}{2}\right) - \text{Ei}\left(-\frac{3\xi^2}{2}\right) \right], \end{aligned} \quad (35)$$

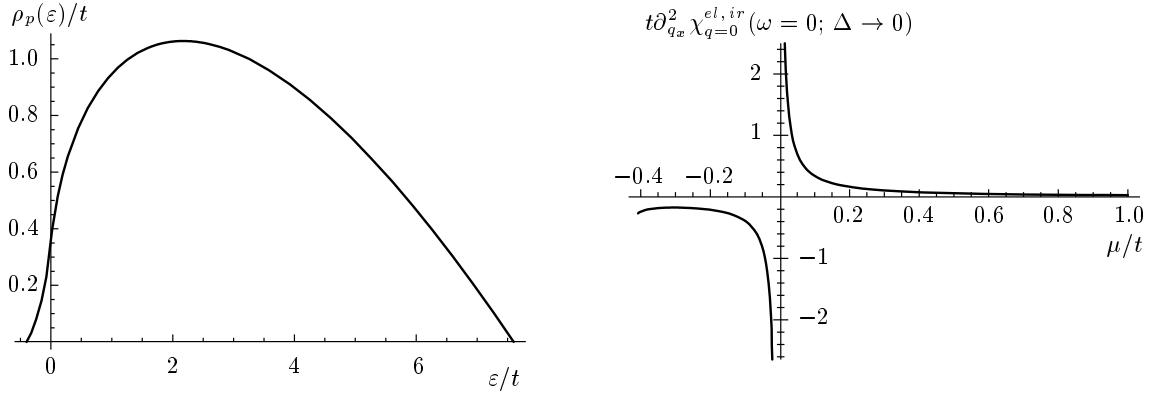


Рис. 13. Графики функций  $\rho_p(\varepsilon)$  и  $\partial_{q_x}^2 \chi_{\mathbf{q}=0}^{el,ir}(\omega = 0; \Delta \rightarrow 0)$

где  $w_{1,2} = \pm 4 + 8t'$  (здесь и в дальнейшем полагаем  $t = 1$ ),

$$\text{Ei}(x) = \int_{-x}^{+\infty} dt \frac{e^{-t}}{t},$$

$\rho_p(\varepsilon)$  — среднее значение квадрата электронной скорости на изоэнергетической поверхности  $\varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu = \varepsilon$ ,

$$\rho_p(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}}) v_{\mathbf{k}}^2 = \oint_{\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon + \mu} \frac{d\sigma}{(2\pi)^2} v_{\mathbf{k}}. \quad (36)$$

Вычисление интеграла в последнем выражении приводит к результату

$$\rho_p(\varepsilon) = \frac{1}{\pi^2 (1 + \varepsilon t' - 4t'^2)^{1/2}} \times \\ \times \left[ (-2|\varepsilon| + 4t'\varepsilon - \varepsilon^2) F(k^2) + 8(1 + \varepsilon t' - 4t'^2) E(k^2) + \right. \\ \left. + \frac{\varepsilon^2}{1 + 2t'\text{sign}\varepsilon} \Pi \left( 1 - \frac{|\varepsilon|}{4 + 8t'\text{sign}\varepsilon}, k^2 \right) \right],$$

где

$$k^2(\varepsilon) = -\frac{(-4 + \varepsilon - 8t')(4 + \varepsilon - 8t')}{16(1 + \varepsilon t' - 4t'^2)},$$

а  $F$ ,  $E$ ,  $\Pi$  — эллиптические интегралы соответственно первого, второго и третьего рода. Согласно (35),  $\partial_{q_x}^2 \chi_{\mathbf{q}=0}^{el,ir}(\omega = 0; \Delta \rightarrow 0) = -1/12 \rho_p''(\mu)$ .

Графики функции  $\rho_p(\varepsilon)$  и второй производной восприимчивости по импульсу  $\partial_{q_x}^2 \chi_{\mathbf{q}=0}^{el,ir}(\omega = 0; \Delta \rightarrow 0)$  в зависимости от  $\mu$  приведены на рис. 13. Знак  $\partial_{q_x}^2 \chi_{\mathbf{q}=0}^{el,ir}(\omega = 0; \Delta \rightarrow 0)$  совпадает со знаком  $\mu$ . Следовательно, восприимчивость невзаимодействующих электронов имеет локальный максимум в точке  $\mathbf{q} = 0$  при электронной концентрации  $n < n_{VH}$  и минимум при  $n > n_{VH}$ , при этом вторая производная восприимчивости по

импульсу стремится к плюс (минус) бесконечности при приближении к ван-хововскому заполнению сверху (снизу).

## ЛИТЕРАТУРА

1. J. Bednorz and K. F. Muller, Z. Phys. B **64**, 189 (1986).
2. I. I. Mazin and D. J. Singh, Phys. Rev. Lett. **79**, 773 (1997).
3. N. Kikugawa and Y. Maeno, Phys. Rev. B **70**, 134520 (2004).
4. F. Nakamura, T. Goko, M. Ito et al., Phys. Rev. B **65**, 220402 (2002).
5. K. K. Murata and S. Doniach, Phys. Rev. Lett. **29**, 285 (1972).
6. И. Е. Дзялошинский, П. С. Кондратенко, ЖЭТФ **70**, 1987 (1976).
7. T. Moria, J. Phys. Soc. Jpn. **40**, 933 (1976).
8. J. A. Hertz, Phys. Rev. B **14**, 1165 (1976).
9. A. J. Millis, Phys. Rev. B **48**, 7183 (1993).
10. D. Belitz, T. Kirkpatrick, and T. Vojta, Phys. Rev. B **55**, 9452 (1997); A. V. Chubukov, C. Pepin, and J. Rech, Phys. Rev. Lett. **92**, 147003 (2004), E-print archives, cond-mat/0605306.
11. F. Onufrieva, P. Pfeuty, and M. Kiselev, Phys. Rev. Lett. **82**, 2370 (1999); F. Onufrieva and P. Pfeuty, Phys. Rev. B **61**, 799 (2000).
12. J. A. Hertz and M. A. Klenin, Phys. Rev. B **10**, 1084 (1974).

13. J. Schmalian, D. Pines, and B. Stojcovic, Phys. Rev. B **60**, 667 (1999); Э. З. Кучинский, М. В. Садовский, ЖЭТФ **88**, 968 (1999); М. В. Садовский, УФН **171**, **539** (2001).
14. А. А. Катанин, Phys. Rev. B **72**, 035111 (2005).
15. А. А. Катанин and А. Р. Kampf, Phys. Rev. B **68**, 195101 (2003).
16. Н. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **69**, 1608 (1992); A. Mielke and Н. Tasaki, Comm. Math. Phys. **158**, 341 (1993).
17. С. В. Вонсовский, М. И. Кацнельсон, А. В. Трефилов, ФММ **76** (3), 3; **76** (4), 3 (1993).
18. P. Monthoux and D. Pines, Phys. Rev. B **47**, 6069 (1993).
19. A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer-Verlag, New York (1994).
20. N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966); Т. Кома and Н. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **68**, 3248 (1992).
21. F. Guinea, Nucl. Phys. B **642**, 407 (2002).
22. J. Vilk and A.-M. S. Tremblay, J. Phys. I **7**, 1309 (1997).
23. А. А. Катанин, А. Р. Kampf, and V. Yu. Irkhin, Phys. Rev. B **71**, 085105 (2005).
24. R. Hlubina, Phys. Rev. B **59**, 184516 (1998).
25. C. Honerkamp and M. Salmhofer, Phys. Rev. B **64**, 184516 (2001).
26. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений*, Мир, Москва (1980).
27. А. А. Катанин and V. Yu. Irkhin, E-print archives, cond-mat/0602657.
28. S. L. Adler, Phys. Rev. B **137**, 1022 (1965).
29. В. Г. Барьяхтар, В. Н. Криворучко, Д. А. Яблонский, *Функции Грина в теории магнетизма*, Киев, Наукова думка (1984).
30. J. Kanamori, Progr. Theor. Phys. **30**, 275 (1963).