

# ФЕРРОМАГНЕТИЗМ В МОДЕЛИ ХАББАРДА В ПРЕДСТАВЛЕНИИ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ ОПЕРАТОРОВ

А. В. Зарубин, В. Ю. Ирхин\*

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук  
620990, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 15 июля 2011 г.

Рассмотрена модель Хаббарда для металла с сильными корреляциями в представлении многоэлектронных  $X$ -операторов. Получены общие самосогласованные выражения для одночастичных функций Грина с учетом флуктуационных поправок. Найдены области устойчивости насыщенного и ненасыщенного ферромагнетизма в основном состоянии на плоскости  $n-U$  ( $n$  — концентрация электронов,  $U$  — параметр кулоновского взаимодействия) для различных затравочных плотностей состояний (полуэллиптическая зона, квадратная, кубическая и гиперкубическая решетки).

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Сильный ферромагнетизм коллективизированных электронов имеет место в ряде сильнокоррелированных  $d$ -соединений [1, 2], например, в полуметаллических ферромагнетиках [3]. Соответствующая многоэлектронная картина ферромагнетизма, учитывающая формирование локальных моментов, очень сложна и существенно отличается как от стонеровской (коллективизированные электроны в среднем поле), так и от гейзенберговской (локализованный магнетизм). Для ее анализа может быть использована простейшая модель Хаббарда [4].

В простейшем приближении Хаббард I [4] (см. ниже формулы (6)) магнитное упорядочение есть результат сужения и расширения спиновых подзон (а не постоянного спинового расщепления, как в теории Стонера). Однако оказалось, что это приближение, рассматривающее невзаимодействующие квазичастицы в хаббардовских подзонах, также не дает удовлетворительных результатов. В частности, Хаббард [4] не нашел магнитных решений для простых затравочных плотностей состояний (хотя ситуация может измениться в случае вырожденных  $d$ -зон [5]).

Метод многоэлектронных  $X$ -операторов Хаббарда [2, 6]

$$X_i^{\alpha\beta} = |i\alpha\rangle\langle i\beta|$$

( $\alpha = 0$  означает дырки,  $\alpha = 2$  — двойки, а  $\alpha = \pm(\uparrow, \downarrow)$  — однократно занятые состояния на узле)

проясняет причину этой неудачи: выражения для функций Грина Хаббард I нарушают кинематические соотношения для  $X$ -операторов. Действительно, в ферромагнитной фазе (при  $\langle S^z \rangle \neq 0$ ) в простом квазичастическом (полюсном) приближении невозможно одновременно для обеих проекций спина  $\sigma$  удовлетворить тождества

$$\sum_{\mathbf{k}} \langle X_{-\mathbf{k}}^{0\sigma} X_{\mathbf{k}}^{\sigma 0} \rangle = \langle X^{00} \rangle = n_0 \equiv \delta, \quad (1)$$

где  $X_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}$  — фурье-компоненты  $X$ -операторов,  $n_0$  — концентрация носителей тока (дырок), подробнее см. разд. 3.

Таким образом, необходим учет флуктуаций и некогерентных состояний, которые дают существенный вклад в электронный спектр.

Более успешным оказывается критерий неустойчивости насыщенного ферромагнетизма, учитывающий неполюсные вклады и связанный с появлением спин-поляронного полюса функции Грина со спином вниз ниже уровня Ферми [7]. Однако этот подход не позволяет описать ненасыщенное ферромагнитное состояние.

Рот [8] применила к модели Хаббарда специальное двухполюсное приближение и получила две критические концентрации носителей тока. Первая соответствует неустойчивости насыщенного ферромагнетизма и в пределе большого кулоновского взаимодействия  $U \rightarrow \infty$  составляет для различных решеток около 30% — значение, которое было затем получено различными методами. Вторая соответствует

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

переходу из ненасыщенного ферромагнетизма в парамагнитное состояние, причем результаты для нее гораздо менее устойчивы.

В ряде работ, начиная с пионерской работы Нагаока [9], исследовалась неустойчивость насыщенного состояния относительно переворота спина [10–13].

В предыдущих работах [14, 15] мы применили к модели Хаббарда с  $U = \infty$   $1/z$ -разложение для одночастичных функций Грина в многоэлектронном представлении с учетом продольных флуктуаций и получили интерполяционное описание насыщенного и ненасыщенного ферромагнетизма.

В настоящей работе мы обобщим это рассмотрение на случай конечных значений  $U$  и построим магнитную фазовую диаграмму с учетом насыщенного и ненасыщенного ферромагнетизма для различных решеток.

## 2. ВЫЧИСЛЕНИЕ ОДНОЭЛЕКТРОННОЙ ФУНКЦИИ ГРИНА В ПРЕДСТАВЛЕНИИ X-ОПЕРАТОРОВ

Запишем гамильтониан модели Хаббарда в многоэлектронном представлении [6, 16]

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} t_{\mathbf{k}}(X_{-\mathbf{k}}^{0\sigma} + \sigma X_{-\mathbf{k}}^{2-\sigma})(X_{\mathbf{k}}^{0\sigma} + \sigma X_{\mathbf{k}}^{-\sigma 2}) + U \sum_i X_i^{22}, \quad (2)$$

где  $t_{\mathbf{k}}$  — зонный спектр, явные выражения для обобщенных проекционных операторов Хаббарда имеют вид

$$X_i^{\sigma 0} = c_{i\sigma}^\dagger(1 - n_{i-\sigma}), \quad X_i^{2-\sigma} = \sigma c_{i\sigma}^\dagger n_{i-\sigma}. \quad (3)$$

Рассмотрим запаздывающую функцию Грина

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E = \langle\langle X_{\mathbf{k}}^{0\sigma} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E + \sigma \langle\langle X_{\mathbf{k}}^{-\sigma 2} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E, \quad \text{Im } E > 0. \quad (4)$$

Записывая пару уравнений движения для функций Грина в правой части (4), мы находим формальное решение

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = G_{\mathbf{k}\sigma}^0(E)[1 + F_\sigma^0(E)\Gamma_{\mathbf{k}\sigma}(E)]. \quad (5)$$

Здесь функции Грина в приближении Хаббард I выражаются через нулевой локатор:

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^0(E) = \frac{1}{F_\sigma^0(E) - t_{\mathbf{k}}}, \quad (6)$$

$$F_\sigma^0(E) = \frac{E(E - U)}{E - U(n_0 + n_\sigma)},$$

где  $n_\alpha = \langle X_i^{\alpha\alpha} \rangle$ ,

$$\Gamma_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{1}{E} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} \langle\langle \delta(X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{00} + X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\sigma\sigma}) c_{\mathbf{q}\sigma} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E + \frac{1}{E - U} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} \langle\langle \delta(X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-\sigma-\sigma} + X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{22}) c_{\mathbf{q}\sigma} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E + \left( \frac{1}{E} - \frac{1}{E - U} \right) \times \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} \langle\langle X_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma} c_{\mathbf{q}-\sigma} + \sigma c_{\mathbf{q}-\sigma}^\dagger X_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{02} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E, \quad (7)$$

$\delta A = A - \langle A \rangle$  — флуктуирующая часть оператора. Составляя уравнения движения для функции Грина (7) и выполняя расщепления членов с тремя  $X$ -операторами, запишем электронную функцию Грина (5) через самосогласованный локатор

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{1}{F_{\mathbf{k}\sigma}(E) - t_{\mathbf{k}}}, \quad F_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{b_{\mathbf{k}\sigma}(E)}{a_{\mathbf{k}\sigma}(E)}, \quad (8)$$

$$a_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{n_0 + n_\sigma}{E} + \frac{n_{-\sigma} + n_2}{E - U} + \left( \frac{1}{E} - \frac{1}{E - U} \right) \times \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} \left( \frac{-En_{\mathbf{q}-\sigma} + U(\tilde{n}_{\mathbf{q}-\sigma} - \chi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma})}{E^2 - E(t_{\mathbf{q}} + U) + Ut_{\mathbf{q}}(n_0 + n_{-\sigma})} + \frac{En_{\mathbf{q}-\sigma} - U(n_{\mathbf{q}-\sigma} - \tilde{n}_{\mathbf{q}-\sigma} - \kappa_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma})}{E^2 + E(t_{\mathbf{q}} - U) - Ut_{\mathbf{q}}(n_\sigma + n_2)} \right) - U \left( \frac{1}{E} - \frac{1}{E - U} \right) \times \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} \frac{\lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^\sigma}{E^2 - E(t_{\mathbf{q}} + U) + Ut_{\mathbf{q}}(n_0 + n_\sigma)}, \quad (9)$$

$$b_{\mathbf{k}\sigma}(E) = 1 - \left( \frac{1}{E} - \frac{1}{E - U} \right) \times \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}}^2 \left( \frac{En_{\mathbf{q}-\sigma} - U\tilde{n}_{\mathbf{q}-\sigma}}{E^2 - E(t_{\mathbf{q}} + U) + Ut_{\mathbf{q}}(n_0 + n_{-\sigma})} + \frac{En_{\mathbf{q}-\sigma} - U(n_{\mathbf{q}-\sigma} - \tilde{n}_{\mathbf{q}-\sigma})}{E^2 + E(t_{\mathbf{q}} - U) - Ut_{\mathbf{q}}(n_\sigma + n_2)} \right), \quad (10)$$

где  $n_{\mathbf{k}\sigma} = \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$  — одночастичные числа заполнения,

$$\tilde{n}_{\mathbf{k}\sigma} = \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger X_{\mathbf{k}}^{0\sigma} \rangle, \quad n_{\mathbf{k}\sigma} - \tilde{n}_{\mathbf{k}\sigma} = \sigma \langle X_{-\mathbf{k}}^{2-\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \quad (11)$$

и введены спиновые и зарядовые корреляционные функции

$$\chi_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} = \langle S_{\mathbf{q}}^\sigma S_{-\mathbf{q}}^{-\sigma} \rangle, \quad \kappa_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} = \langle \rho_{\mathbf{q}}^\sigma \rho_{-\mathbf{q}}^{-\sigma} \rangle,$$

$$\lambda_{\mathbf{q}}^{\sigma} = \langle \delta(\sigma S_{\mathbf{q}}^z - \rho_{\mathbf{q}}^z) \delta(\sigma S_{-\mathbf{q}}^z - \rho_{-\mathbf{q}}^z) \rangle, \quad (12)$$

$$S_{\mathbf{q}}^{\sigma} = X_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma}, \quad S_{\mathbf{q}}^z = \frac{1}{2}(X_{\mathbf{q}}^{++} - X_{\mathbf{q}}^{--}),$$

$$\rho_{\mathbf{q}}^{+} = X_{\mathbf{q}}^{20}, \quad \rho_{\mathbf{q}}^z = \frac{1}{2}(X_{\mathbf{q}}^{22} - X_{\mathbf{q}}^{00}). \quad (13)$$

Результат (8) соответствует первому порядку формального разложения по обратному координационному числу  $1/z$ . При этом приближение Хаббард I [4] (результат расщепления на разных узлах) выступает в качестве приближения среднего поля по электронному переносу. Знаменатели в (9) и (10) можно выразить через функции Грина Хаббард I (6) и сопряженные функции Грина

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^{0*}(E) = \frac{1}{F_{\sigma}^{0*}(E) + t_{\mathbf{k}}}, \quad (14)$$

$$F_{\sigma}^{0*}(E) = \frac{E(E-U)}{E-U(n_{\sigma} + n_2)}.$$

Заменяя функции Грина Хаббард I на точные, получаем

$$a_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{n_0 + n_{\sigma}}{E} + \frac{n_{-\sigma} + n_2}{E-U} + \left( \frac{1}{E} - \frac{1}{E-U} \right) \times$$

$$\times \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} \left( \frac{-En_{\mathbf{q}-\sigma} + U(\tilde{n}_{\mathbf{q}-\sigma} - \chi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma})}{E-U(n_0 + n_{-\sigma})} G_{\mathbf{q}-\sigma}(E) + \right.$$

$$\left. + \frac{En_{\mathbf{q}-\sigma} - U(n_{\mathbf{q}-\sigma} - \tilde{n}_{\mathbf{q}-\sigma} - \kappa_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma})}{E-U(n_{\sigma} + n_2)} G_{\mathbf{q}\sigma}^{*}(E) \right) -$$

$$- U \left( \frac{1}{E} - \frac{1}{E-U} \right) \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} \frac{\lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\sigma}}{E-U(n_0 + n_{\sigma})} G_{\mathbf{q}\sigma}(E), \quad (15)$$

$$b_{\mathbf{k}\sigma}(E) = 1 - \left( \frac{1}{E} - \frac{1}{E-U} \right) \times$$

$$\times \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}}^2 \left( \frac{En_{\mathbf{q}-\sigma} - U\tilde{n}_{\mathbf{q}-\sigma}}{E-U(n_0 + n_{-\sigma})} G_{\mathbf{q}-\sigma}(E) + \right.$$

$$\left. + \frac{En_{\mathbf{q}-\sigma} - U(n_{\mathbf{q}-\sigma} - \tilde{n}_{\mathbf{q}-\sigma})}{E-U(n_{\sigma} + n_2)} G_{\mathbf{q}\sigma}^{*}(E) \right). \quad (16)$$

В свою очередь, для самосогласованной функции Грина  $G_{\mathbf{k}\sigma}^{*}(E)$  необходимо записать свою систему уравнений. Разрешая ее, получаем

$$G_{\mathbf{k}\sigma}^{*}(E) = \frac{1}{F_{\mathbf{k}\sigma}^{*}(E) + t_{\mathbf{k}}}, \quad F_{\mathbf{k}\sigma}^{*}(E) = \frac{b_{\mathbf{k}\sigma}(E)}{a_{\mathbf{k}\sigma}^{*}(E)}, \quad (17)$$

$$a_{\mathbf{k}\sigma}^{*}(E) = \frac{n_0 + n_{-\sigma}}{E-U} + \frac{n_{\sigma} + n_2}{E} + \left( \frac{1}{E} - \frac{1}{E-U} \right) \times$$

$$\times \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} \left( \frac{-En_{\mathbf{q}-\sigma} + U(\tilde{n}_{\mathbf{q}-\sigma} - \chi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma})}{E-U(n_0 + n_{-\sigma})} G_{\mathbf{q}-\sigma}(E) + \right.$$

$$\left. + \frac{En_{\mathbf{q}-\sigma} - U(n_{\mathbf{q}-\sigma} - \tilde{n}_{\mathbf{q}-\sigma} - \kappa_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma})}{E-U(n_{\sigma} + n_2)} G_{\mathbf{q}\sigma}^{*}(E) \right) -$$

$$- U \left( \frac{1}{E} - \frac{1}{E-U} \right) \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} \frac{\lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\sigma}}{E-U(n_0 + n_{\sigma})} G_{\mathbf{q}\sigma}(E). \quad (18)$$

Числа заполнения  $n_{\mathbf{k}\sigma}$  выражаются через функции Грина (8) с помощью спектрального представления (ср. ниже (24)). Для определения недиагональных чисел заполнения  $\tilde{n}_{\mathbf{k}\sigma}$  аналогичным образом вычислим функцию Грина

$$\tilde{G}_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \langle \langle X_{\mathbf{k}}^{0\sigma} | c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle_E = \frac{1}{\tilde{F}_{\mathbf{k}\sigma}(E) + t_{\mathbf{k}}}, \quad (19)$$

$$\tilde{F}_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{\tilde{b}_{\mathbf{k}\sigma}(E)}{\tilde{a}_{\mathbf{k}\sigma}(E)}.$$

В результате найдем

$$\tilde{a}_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{n_0 + n_{\sigma}}{E} +$$

$$+ \frac{1}{E} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} \left( \frac{-En_{\mathbf{q}-\sigma} + U(\tilde{n}_{\mathbf{q}-\sigma} - \chi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma})}{E-U(n_0 + n_{-\sigma})} G_{\mathbf{q}-\sigma}(E) + \right.$$

$$\left. + \frac{En_{\mathbf{q}-\sigma} - U(n_{\mathbf{q}-\sigma} - \tilde{n}_{\mathbf{q}-\sigma} - \kappa_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma})}{E-U(n_{\sigma} + n_2)} G_{\mathbf{q}\sigma}^{*}(E) \right) -$$

$$- \frac{U}{E} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}} \frac{\lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\sigma}}{E-U(n_0 + n_{\sigma})} G_{\mathbf{q}\sigma}(E), \quad (20)$$

$$\tilde{b}_{\mathbf{k}\sigma}(E) = 1 - \frac{1}{E} \sum_{\mathbf{q}} t_{\mathbf{q}}^2 \left( \frac{En_{\mathbf{q}-\sigma} - U\tilde{n}_{\mathbf{q}-\sigma}}{E-U(n_0 + n_{-\sigma})} G_{\mathbf{q}-\sigma}(E) + \right.$$

$$\left. + \frac{En_{\mathbf{q}-\sigma} - U(n_{\mathbf{q}-\sigma} - \tilde{n}_{\mathbf{q}-\sigma})}{E-U(n_{\sigma} + n_2)} G_{\mathbf{q}\sigma}^{*}(E) \right). \quad (21)$$

Таким образом, мы вывели замкнутую самосогласованную систему уравнений. Полученные выражения могут быть использованы для анализа электронного спектра и различных фазовых переходов в модели Хаббарда с сильными корреляциями. При этом корреляционные функции возбуждений бозевского типа, вообще говоря, также должны находиться самосогласованно — через соответствующие функции Грина. Кроме того, следует учесть динамику этих возбуждений. К сожалению, такая программа сталкивается со значительными вычислительными трудностями. Поэтому здесь мы используем для этих

корреляторов локальное приближение, заменяя их одноузельными значениями, определенными из правила сумм:

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} &= n_{\sigma}, \quad \kappa_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} = n_2, \\ \lambda_{\mathbf{q}}^{\sigma} &= (n_0 + n_{\sigma})(n_{-\sigma} + n_2). \end{aligned} \quad (22)$$

Тогда величины  $a_{\mathbf{k}\sigma}(E)$  и  $b_{\mathbf{k}\sigma}(E)$  не зависят от импульсов, а при численном решении уравнений мы можем перейти к однократному интегрированию с плотностью состояний. Отметим, что для поведения электронных спектральных функций (особенно в низкоразмерных системах) импульсная зависимость корреляторов важна и приближение (22) может оказаться недостаточным. Однако для интегральных термодинамических величин и фазовой диаграммы оно удовлетворительно. Подчеркнем, что в отличие от локального приближения Хаббард III [17] выражения (8)–(10) позволяют последовательно учесть эффект фермиевских возбуждений, причем без перехода к вспомогательной модели Андерсона, как это делается в динамической теории среднего поля (DMFT) [18].

### 3. МАГНИТНАЯ ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА

Поскольку, как это подтверждается дальнейшими вычислениями, ферромагнитное состояние в модели Хаббарда возникает при достаточно больших  $U$ , мы можем пренебречь зарядовыми флуктуациями и (в случае электронных концентраций  $n < 1$ ) положить  $n_2 = 0$ . (Отметим, что в пределе больших  $U$  имеем  $n_2 \propto 1/U^2$ .) Это позволяет нам зафиксировать число дырок  $n_0 = \delta = 1 - n$  и решать самосогласованные уравнения только для намагниченности основного состояния  $m = \langle S^z \rangle = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})/2$  и химического потенциала

$$\begin{aligned} n_{\sigma} &= \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \langle X_{-\mathbf{k}}^{\sigma 0} X_{\mathbf{k}}^{0\sigma} \rangle = \\ &= -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im} G_{\mathbf{k}\sigma}(E)(1 - f(E)) dE, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \delta \equiv n_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \langle X_{\mathbf{k}}^{0\sigma} X_{-\mathbf{k}}^{\sigma 0} \rangle = \\ &= -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \int \text{Im} G_{\mathbf{k}\sigma}(E) f(E) dE, \end{aligned} \quad (24)$$

где  $f(E)$  — функция Ферми. С хорошей точностью решение уравнения для химического потенциала (24) не зависит от  $\sigma$ . Выполнение этих правил

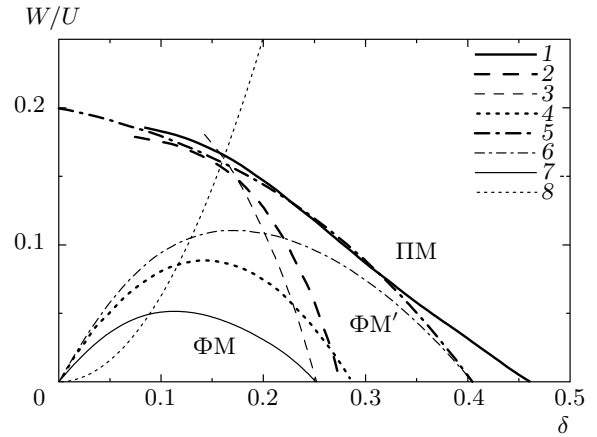


Рис. 1. Магнитная фазовая диаграмма для квадратной решетки. Линии 1 и 2 — границы между ненасыщенным ферромагнетизмом и парамагнитной фазой (ФМ'–ПМ) и между насыщенным и ненасыщенным ферромагнетизмом (ФМ–ФМ') в многоэлектронном подходе, 3 — граница между насыщенным и ненасыщенным ферромагнетизмом в приближении [7], 4 — результаты вариационного подхода [10], 5 и 6 — результаты вариационных приближений RES1 и RES3 [11], 7 — результат работы [20], 8 — граница области фазового расслоения по Виссеру [21]

сумм обеспечивается неполюсными (некогерентными) флуктуационными вкладами [2, 19].

Результаты численного исследования уравнений (23), (24) показаны на рисунках. На фазовых диаграммах в координатах  $W/U-\delta$  ( $W$  — ширина зоны) имеются два магнитных фазовых перехода: от насыщенного ферромагнетизма (ФМ) к ненасыщенному ферромагнетизму (ФМ') и от ненасыщенного ферромагнетизма к парамагнитному состоянию (ПМ).

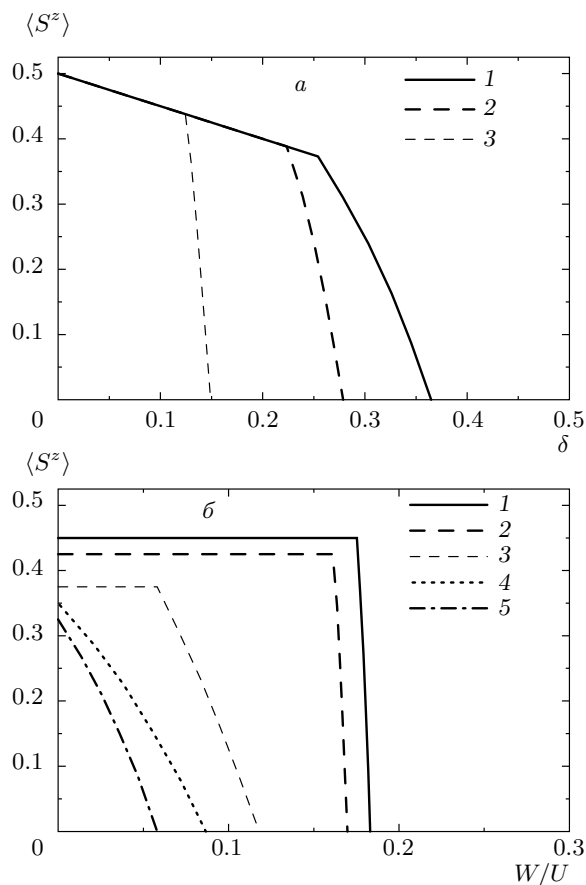
Для первого перехода приведены и результаты наших расчетов в одноэлектронном приближении Эдвардса–Герца [7] (хорошо описывающем насыщенное состояние):

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}\uparrow}^{EH}(E) &= \frac{1}{E - t_{\mathbf{k}}}, \\ G_{\mathbf{k}\downarrow}^{EH}(E) &= \frac{1}{E - t_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\downarrow}(E)}, \end{aligned} \quad (25)$$

где

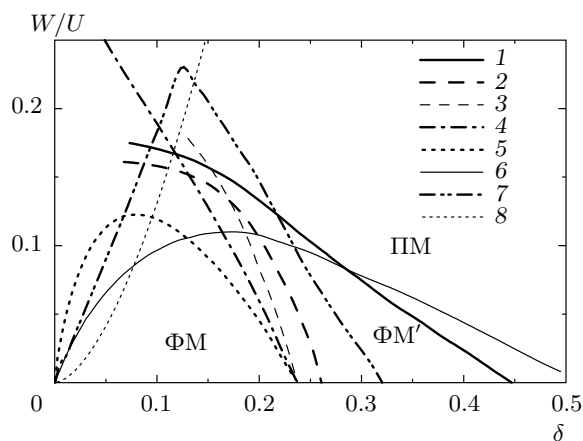
$$\Sigma_{\mathbf{k}\downarrow} = \frac{Un_{\downarrow}}{1 - UR_{\mathbf{k}}(E)},$$

$$R_{\mathbf{k}}(E) = \sum_{\mathbf{q}} f(t_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\uparrow}^{EH}(E + \omega_{\mathbf{q}}).$$



**Рис. 2.** Зависимости намагниченности основного состояния  $\langle S^z \rangle$  для квадратной решетки: *a* — от концентрации дырок  $\delta$  для различных параметров  $W/U = 0.05$  (линия 1),  $0.10$  (линия 2),  $0.17$  (линия 3) и *b* — от обратного параметра кулоновского взаимодействия на узле  $W/U$  для различных концентраций носителей тока  $\delta = 0.10$  (линия 1),  $0.15$  (линия 2),  $0.25$  (линия 3),  $0.30$  (линия 4),  $0.35$  (линия 5)

Результаты по переходу ФМ–ФМ' для квадратной и кубической решеток сравниваются с результатами спин-волновых и вариационных приближений (в отличие от наших расчетов, они показаны более тонкими линиями). В частности, на рис. 1 приведены результаты вариационного метода [10], который дает точную верхнюю границу насыщенного ферромагнетизма для квадратной решетки. Имеются, однако, приближения, которые дают еще более узкую область существования насыщенного ферромагнетизма [11, 20]. Для кубической решетки мы также приводим результаты работы [12], основанные на двух критериях: обращения в нуль спин-волновой жесткости  $D$  и магной частоты на волновом векторе  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$ .



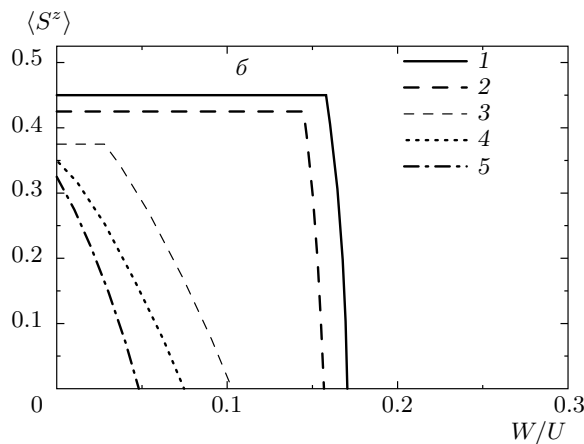
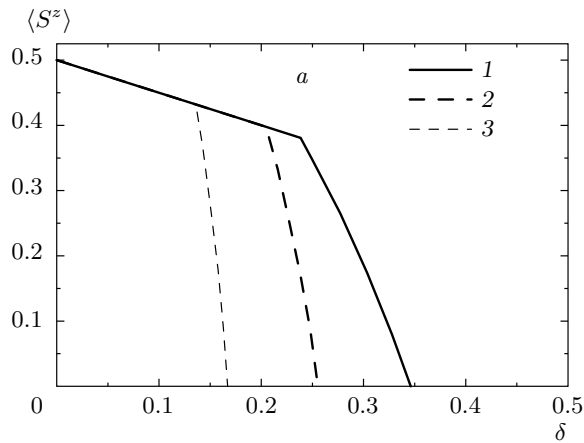
**Рис. 3.** Магнитная фазовая диаграмма для простой кубической решетки. Линии 1, 2, 3 — как на рис. 1; 4, 5 — приближения RES1 и RES3 [11]; 6, 7 — границы насыщенного ферромагнетизма из критериев  $D = 0$  и  $\omega_{\mathbf{Q}} = 0$  [12]; 8 — граница области фазового расслоения по Вишеру [21]

Таким образом, наш подход согласуется со спин-волновыми приближениями при описании неустойчивости насыщенного ферромагнетизма, а также описывает переход в парамагнитную фазу.

На рис. 2, 4 приведены соответствующие семейства зависимостей намагниченности основного состояния  $\langle S^z \rangle$  от концентрации носителей тока (дырок) и обратного параметра кулоновского взаимодействия на узле  $W/U$  для различных концентраций носителей тока  $\delta$ . При этом начальные линейные участки соответствуют насыщенному ферромагнетизму. Для больших  $\delta$  (между двумя критическими концентрациями) зависимости  $\langle S^z \rangle(1/U)$  сразу начинаются с ненасыщенной фазы.

На рис. 1–4 видно, что с уменьшением  $U$  картина магнетизма становится ближе к стонеровской (раздвижка подзон с различной проекцией спина). При этом область ненасыщенного ферромагнетизма быстро уменьшается (особенно для квадратной решетки, где затравочная плотность состояний сингулярна), так что магнитный фазовый переход в основном состоянии близок к переходу первого рода.

На рис. 5, 6 показаны фазовые диаграммы для гауссовой плотности состояний, которая соответствует динамической теории среднего поля (предел больших размерностей пространства, гиперкубическая решетка) с гауссовой затравочной плотностью состояний



**Рис. 4.** То же, что на рис. 2, для простой кубической решетки: *a* —  $W/U = 0.05$  (линия 1), 0.10 (линия 2), 0.15 (линия 3); *b* —  $\delta = 0.10$  (линия 1), 0.15 (линия 2), 0.25 (линия 3), 0.30 (линия 4), 0.35 (линия 5)

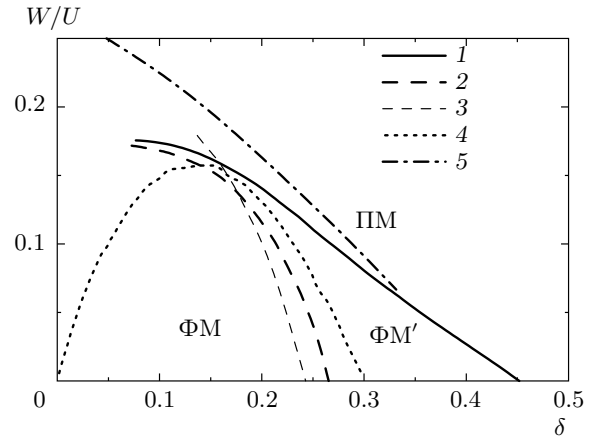
$$N_0(E) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}W} \exp \left[ -2 \left( \frac{E}{W} \right)^2 \right], \quad (26)$$

и полуэллиптической зоны (решетка Бете, соответствующая пределу больших координационных чисел), где

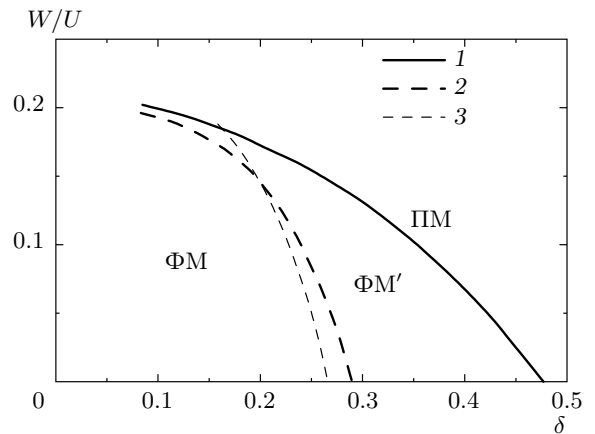
$$N_0(E) = \frac{2}{\pi W} \sqrt{1 - \left( \frac{E}{W} \right)^2}. \quad (27)$$

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, мы получили области существования насыщенного и ненасыщенного ферромагнетизма в основном состоянии модели Хаббарда с большими  $U$ , причем результаты согласуются с ранее рассмотренными частными случаями. Более



**Рис. 5.** Магнитная фазовая диаграмма для гиперкубической решетки. Линии 1, 2, 3 — как на рис. 1; 4, 5 — границы между ферромагнитным и парамагнитным состояниями в работе [22] и вариационном методе [23]



**Рис. 6.** Магнитная фазовая диаграмма для полуэллиптической плотности состояний. Обозначения как на рис. 1

полная диаграмма должна включать дополнительные фазы, в частности, антиферромагнитного типа. Обычный неелевский антиферромагнетизм существует только при  $\delta = 0$ : при наличии носителей тока он неустойчив относительно образования пространственно-неоднородных состояний (расслоение на ферро- и антиферромагнитную фазы [21]). Граница области фазового расслоения и ферромагнетизма показана на рис. 1, 3 (линия 8); она определяется уравнениями  $t/U = \pi\delta^2/2$  для квадратной решетки ( $W = 4t$ ) и  $t/U = 1.013\delta^{5/3}$  для простой кубической решетки ( $W = 6t$ ), см. [21, 24]. Другой возмож-

ный тип неустойчивости связан с формированием спиральных магнитных структур, которые, однако, возникают при существенно меньших  $U$  (см. соответствующие результаты теории среднего поля [24]). Скошенные антиферромагнитные структуры оказываются энергетически невыгодными [24].

Из полученных результатов ясно, что ферромагнетизм возникает только при весьма больших значениях  $U$ . Ситуация может существенно меняться при наличии особенностей плотности состояний вблизи уровня Ферми (которая имеется в слоистых рутенатах, см. [25]). Такая сильная логарифмическая особенность наблюдается в модельной плотности состояний для квадратной решетки, но в приближении ближайших соседей она находится в центре затравочной зоны и не оказывает существенного влияния на ферромагнетизм, поскольку доминируют антиферромагнитные флуктуации. При введении переноса между вторыми соседями  $t'$  сингулярность смещается из центра зоны и фазовая диаграмма становится асимметричной относительно электронов и дырок. При этом для одного из знаков носителей заряда критические значения  $U$  существенно падают, как и в теории среднего поля [24].

Представляет интерес также исследование ферромагнетизма в рамках нашего подхода для более реалистического электронного спектра трехмерных магнетиков — с учетом вырождения зон и особенностей ван Хова.

Авторы благодарны А. О. Анохину, А. А. Катанину и П. А. Игошеву за обсуждения. Работа частично выполнена в рамках программы Президиума РАН «Квантовая физика конденсированного состояния», программы поддержки научных школ (грант № 4711.2010.2) и РФФИ (гранты №№ 11-02-00931-а, 11-02-00937-а).

## ЛИТЕРАТУРА

1. M. I. Auslender, V. Yu. Irkhin, and M. I. Katsnelson, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **21**, 5521 (1988).
2. В. Ю. Ирхин, Ю. П. Ирхин, *Электронная структура, физические свойства и корреляционные эффекты в d- и f-металлах и их соединениях*, УрО РАН, Екатеринбург (2004).
3. M. I. Katsnelson, V. Yu. Irkhin, L. Chioncel et al., *Rev. Mod. Phys.* **80**, 315 (2008).
4. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A* **276**, 238 (1963); **281**, 401 (1964).
5. Л. А. Максимов, К. А. Кикоин, *ФММ* **28**, 43 (1969).
6. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A* **285**, 542 (1965).
7. J. A. Hertz and D. M. Edwards, *J. Phys. F* **3**, 2174 (1973); D. M. Edwards and J. A. Hertz, *J. Phys. F* **3**, 2191 (1973).
8. L. M. Roth, *Phys. Rev.* **184**, 451 (1969); *Phys. Rev.* **186**, 428 (1969).
9. Y. Nagaoka, *Phys. Rev.* **147**, 392 (1966).
10. W. von der Linden and D. M. Edwards, *J. Phys.: Condens. Matter* **3**, 4917 (1991).
11. T. Hanisch, G. S. Uhring, and E. Müller-Hartmann, *Phys. Rev. B* **56**, 13960 (1997).
12. T. Okabe, *Phys. Rev. B* **57**, 403 (1998).
13. J. Igarashi, M. Takahashi, and T. Nagao, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 3682 (1999).
14. А. В. Зарубин, В. Ю. Ирхин, *ФТТ* **41**, 1057 (1999).
15. V. Yu. Irkhin and A. V. Zarubin, *Phys. Rev. B* **70**, 035116 (2004); *J. Magn. Magn. Mater.* **300**, 246 (2006); in *Progress in Ferromagnetism Research*, ed. by V. N. Murray, Nova Science Publishers, New York (2006), p. 199.
16. V. Yu. Irkhin and Yu. P. Irkhin, *Phys. Stat. Sol. (b)* **183**, 9 (1994).
17. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A* **281**, 401 (1964).
18. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
19. В. Ю. Ирхин, М. И. Кацнельсон, *ФТТ* **25**, 1947 (1983); V. Yu. Irkhin and M. I. Katsnelson, *J. Phys. C* **18**, 4173 (1985); *J. Phys.: Cond. Mat.* **2**, 7151 (1990).
20. P. Wurth, G. Uhrig, and E. Müller-Hartmann, *Ann. Phys.* **5**, 148 (1996).
21. P. B. Visscher, *Phys. Rev. B* **10**, 943 (1973).
22. R. Zitzler, Th. Pruschke, and R. Bulla, *Eur. Phys. J. B* **27**, 473 (2002).
23. P. Fazekas, B. Menge, and E. Müller-Hartmann, *Z. Phys. B* **78**, 69 (1990).
24. P. A. Igoshev, M. A. Timirgazin, A. A. Katanin, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, *Phys. Rev. B* **81**, 094407 (2010).
25. P. A. Igoshev, V. Yu. Irkhin, and A. A. Katanin, *Phys. Rev. B* **83**, 245118 (2011).