

СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ, ФЕРРОМАГНЕТИЗМ И АНТИФЕРРОМАГНЕТИЗМ В МОДЕЛИ ХАББАРДА

*Р. О. Зайцев**

*Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 18 июля 2016 г.,
после переработки 8 июля 2017 г.

В рамках простейшего однопетлевого приближения удается обнаружить как ферромагнитную, так и антиферромагнитную неперекрывающиеся части фазовой диаграммы, каждая из которых перекрывается с областью существования сверхпроводящего упорядочения.

DOI: 10.7868/S004445101711013X

1. ВВЕДЕНИЕ

Сразу после классических работ Хаббарда [1–3] появилась статья Нагаока [4], в которой обсуждалась возможность возникновения насыщенного ферромагнетизма в «узкой, почти наполовину заполненной s -зоне». Здесь фактически рассматривался идеальный газ с малым числом перевернутых спинов.

Последовательное изучение фазовой диаграммы было начато в статье И. Е. Дзялошинского [5]. В рамках теории паркетного приближения была обнаружена возможность перехода в состояние, «являющееся когерентной смесью сверхпроводимости, антиферромагнетизма и волны зарядовой плотности». Было показано, что возникновение таких состояний оказывается возможным при выполнении условия нестинга (nesting), что соответствует весьма узкой области электронных концентраций, для которой поверхность Ферми проходит через четыре седловых точки.

В работах [4, 5] авторы в качестве нулевого приближения использовали основное состояние идеального газа, а взаимодействие учитывали по теории возмущений. В теории Нагаока параметром возмущения считается отношение энергии перескока t к энергии Хаббарда U , а также плотность перевернутых спинов. В теории Дзялошинского используется малая затравочная вершинная часть Γ_0 , пропорциональная U .

В настоящей работе используется метод разложения операторов рождения и уничтожения по операторам Хаббарда, для которых была построена диаграммная техника [6]. При этом в качестве нулевого приближения используется парамагнитное решение «Хаббард I», а в качестве нулевой вершинной части — амплитуда кинематического взаимодействия [7]. Для установления вида фазовой диаграммы применяем метод аномальных функций Грина, впервые использованный Горьковым [8]. При этом для установления границы возникновения новой фазы достаточно ограничиться записью уравнения в первом порядке теории возмущений по величине соответствующей аномальной функции Грина.

2. УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ

Запишем операторы рождения и уничтожения через известные X -операторы Хаббарда:

$$\hat{a}_{\uparrow, \mathbf{r}} = \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|+)} + \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(-|II)}, \quad \hat{a}_{\downarrow, \mathbf{r}} = \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(0|-)} - \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(+|II)}, \quad (1a)$$

$$\hat{a}_{\uparrow, \mathbf{r}}^+ = \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(+|0)} + \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(II|-)}, \quad \hat{a}_{\downarrow, \mathbf{r}}^+ = \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(-|0)} - \hat{X}_{\mathbf{r}}^{(II|+)}. \quad (1b)$$

Для написания уравнения состояния запишем обратную функцию Грина, ограничиваясь простейшим нульпетлевым приближением.

При нулевом внешнем магнитном поле и для заданной проекции спина обратная функция Грина представляется следующей матрицей:

$$G_{\omega}^{-1}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} i\omega - \epsilon_1 - f_1 t_{\mathbf{p}} & -\sigma f_1 t_{\mathbf{p}} \\ -\sigma f_2 t_{\mathbf{p}} & i\omega - \epsilon_2 - f_2 t_{\mathbf{p}} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

* E-mail: Zaitsev_rogdai@mail.ru

Здесь $\epsilon_1 = -\mu$ и $\epsilon_2 = U - \mu$ — соответственно энергии перехода между пустым и одночастичным, а также между одночастичным и двухчастичным уровнями, которые различаются на энергию Хаббарда U ; $f_1 = 1 - n/2$, $f_2 = n/2$ — концевые множители, выраженные через электронную плотность n .

В рамках нульпетлевого приближения уравнение состояния записывается через сумму всевозможных произведений компонент одночастичной функции Грина на соответствующие концевые множители:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_r^\sigma \hat{a}_r^{\sigma,+} \rangle &= \left\langle \left(\hat{X}_r^{0,\sigma} + \sigma \hat{X}_r^{-\sigma,2} \right) \left(\hat{X}_r^{\sigma,0} + \sigma \hat{X}_r^{2,-\sigma} \right)_r \right\rangle = \\ &= T \sum_{\omega, \mathbf{p}} e^{i\omega\delta} \left\{ \left(G_\omega^{11}(\mathbf{p}) + \sigma G_\omega^{21}(\mathbf{p}) \right) f_1 + \right. \\ &\quad \left. + \left(G_\omega^{22}(\mathbf{p}) + \sigma G_\omega^{12}(\mathbf{p}) \right) f_2 \right\}. \end{aligned} \quad (3)$$

В результате вычисления и подстановки матричных элементов из (1a), (1b), а также суммирования по проекции спина, получаем уравнение

$$n = 2T \sum_{\omega, \mathbf{p}} e^{i\omega\delta} \left\{ \frac{(i\omega - \epsilon_2)f_1 + (i\omega - \epsilon_1)f_2}{(i\omega - \xi_{\mathbf{p}}^+)(i\omega - \xi_{\mathbf{p}}^-)} \right\}. \quad (4)$$

Здесь δ — бесконечно малая положительная добавка, $\omega = 2\pi(2n + 1)T$,

$$\xi_{\mathbf{p}}^\pm = \frac{U}{2} + \frac{t_{\mathbf{p}}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + t_{\mathbf{p}}^2 - 2U(1-n)t_{\mathbf{p}}} - \mu \quad (5)$$

— две ветви энергетического спектра одночастичных возбуждений.

Разложим выражение, стоящее под знаком суммы, на простые множители:

$$n = 2T \sum_{\mathbf{p}, \lambda=\pm} A^\lambda(\mathbf{p}) n_F(\xi_{\mathbf{p}}^\lambda),$$

$$A_{\mathbf{p}}^\pm = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{t_{\mathbf{p}} - U(1-n)}{\sqrt{U^2 + t_{\mathbf{p}}^2 - 2U(1-n)t_{\mathbf{p}}}} \right] = \frac{\delta \xi_{\mathbf{p}}^\lambda}{\delta t_{\mathbf{p}}}. \quad (6)$$

$$\left(\hat{G}_{-\omega}^{(0)}(-\mathbf{p}) \right)^{-1} = \left(\begin{array}{c|cc} \text{переходы} & (\downarrow \rightarrow 0) & (\Pi \rightarrow \uparrow) \\ \hline (\downarrow \rightarrow 0) & -i\omega - b_1^2 f_1 t_{\mathbf{p}} + \mu & -b_1 b_2 f_1 t_{\mathbf{p}} \\ (\Pi \rightarrow \uparrow) & -b_1 b_2 f_2 t_{\mathbf{p}} & -i\omega - b_2^2 f_2 t_{\mathbf{p}} + \mu \end{array} \right), \quad (10)$$

$$\check{\Sigma}_S^{an}(\mathbf{p}) = \left(\begin{array}{c|cc} \text{переходы} & (0 \rightarrow \uparrow) & (\downarrow \rightarrow \Pi) \\ \hline (\downarrow \rightarrow 0) & -\check{\Sigma}_{00} & -\check{\Sigma}_{01} \\ (\Pi \rightarrow \uparrow) & -\check{\Sigma}_{21} & -\check{\Sigma}_{22} \end{array} \right). \quad (11)$$

При заданной температуре полученное уравнение определяет связь между плотностью и химическим потенциалом.

3. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В ОБЛАСТИ $0 < n < 1$. ОБЩИЕ СООТНОШЕНИЯ

Для написания уравнений сверхпроводимости необходимо использовать обратную функцию Грина с удвоенным числом компонент. В изучаемой модели обратная функция Грина определяется через матрицу 4×4 ,

$$\hat{G}_\omega^{-1}(\mathbf{p}) = \left(\begin{array}{cc} \left(\hat{G}_\omega^{(0)}(\mathbf{p}) \right)^{-1} & \check{\Sigma}_F^{an} \\ \check{\Sigma}_F^{an} & \left(-\hat{G}_\omega^{(0)}(-\mathbf{p}) \right)^{-1} \end{array} \right), \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} \left(\hat{G}_\omega^{(0)}(\mathbf{p}) \right)^{-1} &= \\ &= \left(\begin{array}{c|cc} \text{переходы} & (0 \rightarrow \uparrow) & (\downarrow \rightarrow \Pi) \\ \hline (0 \rightarrow \uparrow) & i\omega - b_1^2 f_1 t_{\mathbf{p}} + \mu & -b_1 b_2 f_1 t_{\mathbf{p}} \\ (\downarrow \rightarrow \Pi) & -b_1 b_2 f_2 t_{\mathbf{p}} & i\omega - b_2^2 f_2 t_{\mathbf{p}} + \mu \end{array} \right) \end{aligned} \quad (8)$$

— обратная одночастичная функция Грина, совпадающая с (2);

$$\check{\Sigma}_S^{an}(\mathbf{p}) = \left(\begin{array}{c|cc} \text{переходы} & (\downarrow \rightarrow 0) & (\Pi \rightarrow \uparrow) \\ \hline (0 \rightarrow \uparrow) & -\Sigma_{00} & -\Sigma_{01} \\ (\downarrow \rightarrow \Pi) & -\Sigma_{10} & -\Sigma_{11} \end{array} \right) \quad (9)$$

— аномальная собственно-энергетическая часть [7, 8].

Матрицы $\left(\hat{G}_{-\omega}^{(0)}(\mathbf{p}) \right)^{-1}$ и $\check{\Sigma}^{an}$ соответствуют обращенным по времени переходам:

Здесь и ниже предполагается, что $t_{\mathbf{p}}$ являются четными функциями квазиимпульса, так что $t_{-\mathbf{p}} = t_{\mathbf{p}}$. В однопетлевом приближении имеем три пары аномальных собственно-энергетических частей, которые изображены на рис. 1.

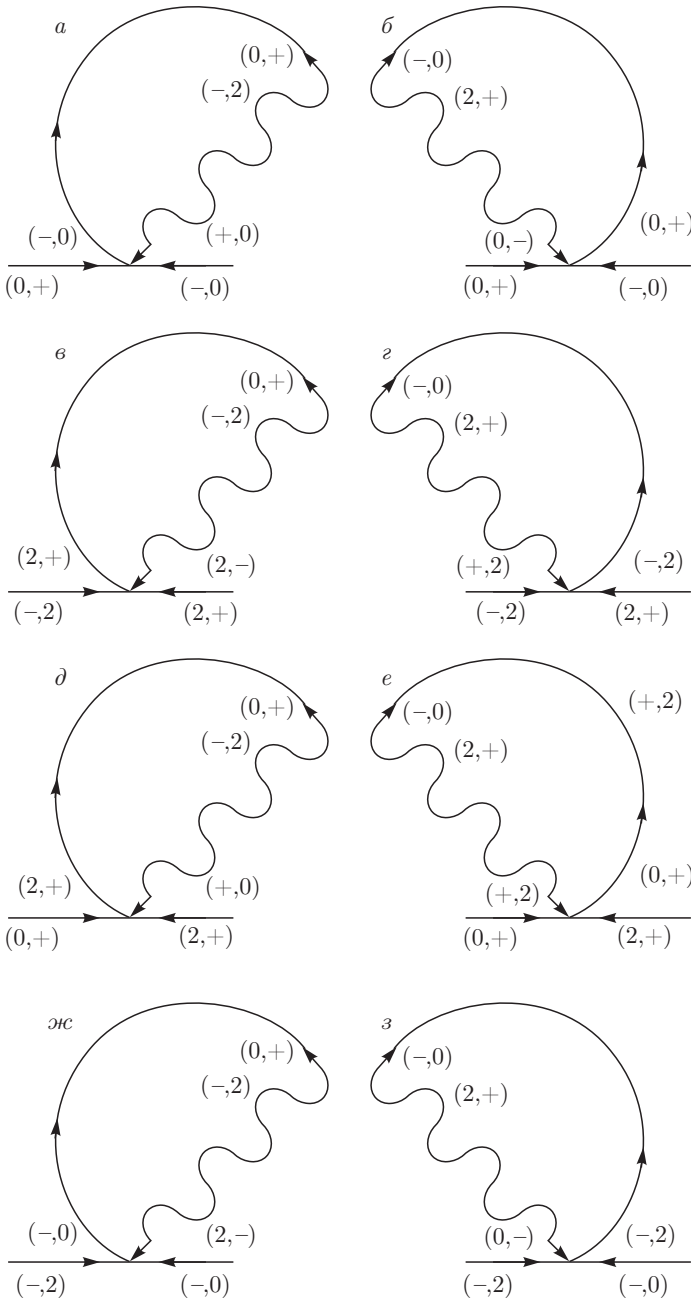


Рис. 1. Графическое изображение аномальных сверхпроводящих собственно-энергетических частей

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО ПЕРЕХОДА

Условия возникновения куперовской неустойчивости при конечной энергии Хаббарда содержат две пары уравнений для двух типов возбуждений $(0, \sigma)$ и $(-\sigma, 2)$, которые различаются направлением проекции спинов и знаком энергии переходов $\epsilon_1 = \epsilon_\sigma - \epsilon_0$ и $\epsilon_2 = \epsilon_2 - \epsilon_{-\sigma}$ (рис. 1).

Если также использовать двойные перестановочные соотношения между четырьмя X -операторами $\hat{X}^{0,\sigma}$, $\hat{X}^{-\sigma,2}$ и $\hat{X}^{\sigma,0}$, $\hat{X}^{2,-\sigma}$, то находим систему однородных уравнений для аномальных собственно-энергетических частей:

$$\begin{aligned} \Sigma_{11} &= \Sigma(0 + |0-), & \Sigma_{22} &= \Sigma(-2 | +2), \\ \Sigma_{11} &= A_{\alpha',\beta'} \Sigma_{\alpha',\beta'}, & \Sigma_{22} &= B_{\alpha',\beta'} \Sigma_{\alpha',\beta'}, \\ \Sigma_{12} &= \Sigma(0 + | +2), \\ \Sigma_{12} &= \frac{1}{2} (A_{\alpha',\beta'} - B_{\alpha',\beta'}) \Sigma_{\alpha',\beta'}, & (12) \\ \Sigma_{21} &= \Sigma(-2 | 0-), \\ \Sigma_{21} &= \frac{1}{2} (B_{\alpha',\beta'} - A_{\alpha',\beta'}) \Sigma_{\alpha',\beta'}. \end{aligned}$$

Здесь индексы α' и β' пробегает независимо по два значения: $(0, +)$, $(-, 2)$ и, соответственно, $(0, -)$, $(+, 2)$. Непосредственное вычисление матричных элементов $A_{\alpha,\beta}$ и $B_{\alpha,\beta}$ приводит к следующей системе соотношений:

$$\begin{aligned} A_{11} &= 2T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}} (i\omega_1 - \epsilon_2) (i\omega_2 - \epsilon_2 - f_2 t_{\mathbf{p}}), \\ A_{22} &= -T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}}^2 f_1 \{ (i\omega_1 - \epsilon_1) + (i\omega_2 - \epsilon_1) \}, \\ A_{12} &= -T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}} \{ (i\omega_1 - \epsilon_2) f_1 t_{\mathbf{p}} + & (13) \\ &+ (i\omega_1 - \epsilon_2 - f_2 t_{\mathbf{p}}) (i\omega_2 - \epsilon_1) \}, \\ A_{21} &= T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}} \{ (i\omega_1 - \epsilon_1) (i\omega_2 - \epsilon_2 - f_2 t_{\mathbf{p}}) + \\ &+ (i\omega_2 - \epsilon_2) f_1 t_{\mathbf{p}} \}; \\ B_{11} &= T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}}^2 f_2 \{ (i\omega_1 - \epsilon_2) + (i\omega_2 - \epsilon_2) \}, \\ B_{22} &= -2T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}} (i\omega_1 - \epsilon_1) (i\omega_2 - \epsilon_1 - f_1 t_{\mathbf{p}}), \\ B_{12} &= -T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}} \{ (i\omega_1 - \epsilon_2) (i\omega_2 - \epsilon_1 - f_1 t_{\mathbf{p}}) + & (14) \\ &+ (i\omega_2 - \epsilon_1) f_1 t_{\mathbf{p}} \}, \\ B_{21} &= T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \Phi t_{\mathbf{p}} \{ (i\omega_2 - \epsilon_2) (i\omega_1 - \epsilon_1 - f_1 t_{\mathbf{p}}) + \\ &+ (i\omega_2 - \epsilon_1) f_1 t_{\mathbf{p}} \}; \end{aligned}$$

$$\Phi = \left[\left(\omega_n^2 + \xi_{(+)}^2 \right) \left(\omega_n^2 + \xi_{(-)}^2 \right) \right]^{-1},$$

$$\xi_{\pm} = \frac{U}{2} + \frac{t_{\mathbf{p}}}{2} - \mu \pm \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + t_{\mathbf{p}}^2 - 2U(1-n)t_{\mathbf{p}}}.$$

Здесь

$$i\omega_1 = -i\omega_2 = i\omega_n = i\pi T(2n + 1),$$

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= -\mu, \quad \epsilon_2 = U - \mu, \\ f_1 &= f(\sigma, 0) = \left\langle \left(\hat{X}^{(\sigma, \sigma)} + \hat{X}^{(0,0)} \right) \right\rangle, \\ f_2 &= f(2, -\sigma) = \left\langle \left(\hat{X}^{(-\sigma, -\sigma)} + \hat{X}^{(2,2)} \right) \right\rangle. \end{aligned}$$

Коэффициенты обладают симметрией: при замене $\epsilon_1 \longleftrightarrow \epsilon_2, f_1 \longleftrightarrow f_2$ возникают преобразования

$$\begin{aligned} B_{22} &\longleftrightarrow -A_{11}, \quad B_{11} \longleftrightarrow -A_{22}, \\ B_{12} &\longleftrightarrow -A_{21}, \quad B_{21} \longleftrightarrow -A_{12}. \end{aligned}$$

После разделения переменных получаем следующие уравнения:

$$x_i = A_{ik}x_k, \quad y_i = B_{ik}x_k, \quad i, k = 1, 2, 3. \quad (15)$$

Первый индекс отвечает рассеянию $(0, +)$ на $(0, -)$ -возбуждению; второй индекс — рассеянию $(-, 2)$ на $(+, 2)$ -возбуждению, а третий индекс — рассеянию смешанного типа: $(0, +)$ на $(-, 2)$. Четвертый

индекс отсутствует, поскольку можно заметить, что $x_4 = -x_3, y_4 = -y_3$. При этом $x_3 = (x_1 - x_2)/2$. Это соотношение находим, исходя из явного вида матриц $A^{(\alpha)}$. После суммирования по частотам оказывается, что выражения, стоящие под знаком суммы, зависят от импульса только через функцию $t_{\mathbf{p}}$, так что удобно ввести затравочную функцию плотности состояний: $\rho_0(\epsilon) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon - t_{\mathbf{p}})$. Кроме того, при нахождении полюсной части сингулярных интегралов можно заметить, что интегрирование проводится вблизи поверхности Ферми, которая определяется с помощью соотношения $\xi_{\mathbf{p}}^- = 0$. Использование этого условия позволяет вместо химического потенциала μ фиксировать величину интеграла перескока $t_{\mathbf{p}} = t^*$, которую находим из условия

$$\mu = \frac{U}{2} + \frac{t^*}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + (t^*)^2 - 2U(1-n)t^*}. \quad (16)$$

В результате удается выразить все интегралы через $t^*, \epsilon_1 = -\mu$ и $\epsilon_2 = -\mu + U$:

$$\hat{A} = L \begin{pmatrix} -2t_*^2 f_1 \epsilon_2^2 \epsilon_1^{-1} & 2t_*^2 \epsilon_1 f_1 & 2t_*^2 \epsilon_2 f_1 \\ -2t_*^2 f_2 \epsilon_2 & 2t_*^2 \epsilon_1^2 f_2 \epsilon_2^{-1} & 2t_*^2 \epsilon_1 f_2 \\ -t_*^2 \epsilon_2 \epsilon_1^{-1} Q & t_*^2 \epsilon_1 \epsilon_2^{-1} Q & t_*^2 Q \end{pmatrix}. \quad (17a)$$

Матрица \hat{B} также имеет сильное вырождение:

$$\hat{B} = -L \begin{pmatrix} t_*^3 f_1^2 \epsilon_2^2 \epsilon_1^{-2} & -t_*^3 f_1^2 & -t_*^3 \epsilon_2 f_1^2 \epsilon_1^{-1} \\ t_*^3 f_2^2 & t_*^3 \epsilon_1^2 f_2^2 \epsilon_2^{-2} & t_*^3 \epsilon_1 f_2^2 \epsilon_2^{-1} \\ -t_*^3 f_1 f_2 \epsilon_2 \epsilon_1^{-1} & t_*^3 f_1 f_2 \epsilon_1 \epsilon_2^{-1} & t_*^3 f_1 f_2 \end{pmatrix}. \quad (17b)$$

В соотношениях (17a) и (17b) введены обозначения:

$$t_* = -\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{f_1 \epsilon_2 + f_2 \epsilon_1}, \quad L = T \sum_{\omega, \mathbf{p}} \frac{1}{(\omega_n^2 + \xi_{(+)}^2) (\omega_n^2 + \xi_{(-)}^2)}.$$

Переменные x_1, x_2 и y_1, y_2, y_3, y_4 выражаются друг через друга с помощью соотношений, которые следуют из явного вида матриц A и B :

$$\begin{aligned} x_1 &= x_2 \frac{f_1 \epsilon_2}{f_2 \epsilon_1}, \quad x_3 = -x_4 = \frac{x_1 - x_2}{2}, \\ y_1 &= -y_2 \frac{f_1^2 \epsilon_2^2}{f_2^2 \epsilon_1^2}, \quad y_3 = -y_4 = -y_1 \frac{f_2 \epsilon_1}{f_1 \epsilon_2}. \end{aligned}$$

В результате подстановки этих соотношений в уравнения (15) получаем следующие условия их разрешимости:

$$\begin{aligned} T_c &= \bar{\epsilon} \bar{\epsilon}^{-1/\Lambda}, \\ \Lambda &= - \left[\frac{2U \epsilon_1 \epsilon_2}{f_2 \epsilon_1^2 + f_1 \epsilon_2^2} \right] \rho_0(t_*) \left| \frac{\delta \xi_{(-)}}{\delta t_{\mathbf{p}}} \right|^{-1}. \end{aligned} \quad (18)$$

Здесь вычисления проведены для нижней подзоны Хаббарда, так что частная производная вычисляется при условии $\xi^{(-)}(\mathbf{p}) = 0$ или $t(\mathbf{p}) = t^*$.

Сверхпроводимость осуществляется для положительных значений величины Λ , которая имеет смысл эффективной константы БКШ. Коэффициенты, входящие в уравнение (18), выражаются через степень недозаполнения $x = 1 - n$ и химический потенциал $\bar{\mu} = \mu - U/2$. В результате имеем

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= -\bar{\mu} - \frac{U}{2}, & \epsilon_2 &= -\bar{\mu} + \frac{U}{2}, \\ f_1 &= \frac{1+x}{2}, & f_2 &= \frac{1-x}{2}, \\ t_* &= \frac{U^2 - 4\bar{\mu}^2}{2(Ux - 2\bar{\mu})}, \\ -\frac{2U\epsilon_1\epsilon_2}{f_2\epsilon_1^2 + f_1\epsilon_2^2} &= (U^2 - 4\bar{\mu}^2) \left\{ \frac{2U}{U^2 + 4\bar{\mu}^2 + 4xU\bar{\mu}} \right\}. \end{aligned} \quad (19)$$

После подстановки этих выражений в (18) становится ясно, что фазовая диаграмма оказывается симметричной относительно одновременной замены $\bar{\mu} \rightarrow -\bar{\mu}$, $x \rightarrow -x$. Удаётся показать, что в случае четной затравочной плотности состояний $\rho_0(\epsilon) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon - t_{\mathbf{p}})$ зависимость $\bar{\mu}(x)$ является антисимметричной. По этой причине фазовая диаграмма существования сверхпроводящего состояния в

переменных $(x, t/U)$ является симметричной относительно частично-дырочного преобразования $x \rightarrow -x$.

Для иллюстрации дальнейшие вычисления проведем с единичной полушириной для постоянной затравочной плотности состояний. В этом случае уравнение состояний (6) удаётся представить в виде полной производной, так что при $T = 0$ получаем явную зависимость $t^*(n)$:

$$\begin{aligned} n &= 2 \sum_{\mathbf{p}} \frac{\delta\xi^-(t_{\mathbf{p}})}{\delta t_{\mathbf{p}}} \theta(-\xi^-(t_{\mathbf{p}})) = \\ &= \xi^-(t^*) - \xi^-(-1). \end{aligned} \quad (20)$$

Отсюда находим

$$\begin{aligned} t^* &= \frac{u + 2n^2 + u(1-n) - 2n + 1 + (1-2n)\sqrt{(1+u)^2 - 2nu}}{-u(1-n) - 1 - \sqrt{(1+u)^2 - 2nu}}, \\ \epsilon_{1,2} &= \mp \frac{u}{2} - n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{(1+u)^2 - 2nu}, \quad u = \frac{U}{t}. \end{aligned} \quad (21)$$

Вместе с определением эффективной константы БКШ эти соотношения дают возможность построить фазовую диаграмму существования сверхпроводящего состояния при всех значениях безразмерной энергии Хаббарда U/t , а также электронной концентрации n .

В модели плоской зоны критическое значение электронной плотности находим из условия $\epsilon_1(n, U/t) = 0$:

$$n_{c1} = \frac{1}{2} - \frac{3u}{4} + \frac{1}{4}\sqrt{9u^2 + 4u + 4}, \quad u = \frac{U}{t}. \quad (22)$$

Зависимость U/t от n представлена на рис. 2. Для $U = \infty$ предельное значение $n_c = 2/3$.

5. ФЕРРОМАГНИТНАЯ ЧАСТЬ ДИАГРАММЫ ($0 < n < 1$)

В случае $0 < n < 1$ необходимо рассмотреть переходы между пустыми и одночастичными состояниями со спином $\pm 1/2$.

Для получения области существования ферромагнетизма рассмотрим возможность возникновения «обменных» собственно-энергетических частей, связанных с возможностью изменения проекции электронного спина.

При этом обратная функция Грина определяется через матрицу 4×4 :

$$\hat{G}_{\omega}^{-1}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} (\hat{G}_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p}))^{-1} & \hat{\Sigma}_F^{an}(\mathbf{p}) \\ \check{\Sigma}_F^{an}(\mathbf{p}) & (\hat{G}_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p}))^{-1} \end{pmatrix}, \quad (23)$$

где

$$\left(\hat{G}_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p}) \right)^{-1} = \left(\begin{array}{c|cc} \text{переходы} & (0 \rightarrow \uparrow) & (\downarrow \rightarrow \text{II}) \\ \hline (0 \rightarrow \uparrow) & i\omega - b_1^2 f_1 t_{\mathbf{p}} + \mu & -b_1 b_2 f_1 t_{\mathbf{p}} \\ (\downarrow \rightarrow \text{II}) & -b_1 b_2 f_2 t_{\mathbf{p}} & i\omega - b_2^2 f_2 t_{\mathbf{p}} + \mu \end{array} \right). \quad (24)$$

Здесь $b_1 = 1$, $b_2 = \sigma$, а матрица аномальных собственно-энергетических функций строится в соответствии с рис. 3 и 4:

$$\hat{\Sigma}_F^{an} = \left(\begin{array}{c|cc} \text{переходы} & (0 \rightarrow \downarrow) & (\uparrow \rightarrow \text{II}) \\ \hline (0 \rightarrow \uparrow) & A_1 + A_3 t_{\mathbf{p}} & A_2 - A_3 t_{\mathbf{p}} \\ (\downarrow \rightarrow \text{II}) & -A_1 - A_3 t_{\mathbf{p}} & -A_2 + A_3 t_{\mathbf{p}} \end{array} \right). \quad (25a)$$

Сопряженная часть аномальной функции Грина имеет вид

$$\check{\Sigma}_F^{an} = \left(\begin{array}{c|cc} \text{переходы} & (0 \rightarrow \uparrow) & (\downarrow \rightarrow \text{II}) \\ \hline (0 \rightarrow \downarrow) & B_1 + B_3 t_{\mathbf{p}} & B_2 + B_3 t_{\mathbf{p}} \\ (\uparrow \rightarrow \text{II}) & -B_1 + B_3 t_{\mathbf{p}} & -B_2 + B_3 t_{\mathbf{p}} \end{array} \right). \quad (25b)$$

Величины A_1 и A_2 выражаются через аномальные функции Грина в соответствии с рис. 3:

$$\begin{aligned} A_1 &= T \sum_{\omega, \mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} [G_{\omega}^{1,3}(\mathbf{p}) + G_{\omega}^{2,3}(\mathbf{p})], \\ A_2 &= T \sum_{\omega, \mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} [G_{\omega}^{1,4}(\mathbf{p}) + G_{\omega}^{2,4}(\mathbf{p})]. \end{aligned} \quad (26)$$

Величину A_3 находим с помощью рис. 4:

$$A_3 = T \sum_{\omega, \mathbf{p}} [G_{\omega}^{1,3}(\mathbf{p}) - G_{\omega}^{2,4}(\mathbf{p})]. \quad (27)$$

Для нахождения условий возникновения ферромагнетизма достаточно вычислить правые части (26) и (27) в линейном по A_1 , A_2 и A_3 виде. В результате получаем

$$A_1 = U \langle t_{\mathbf{p}} (i\omega + \mu - U - f_2 t_{\mathbf{p}}) \rangle A_1 - U \langle t_{\mathbf{p}}^2 f_2 \rangle A_2 + U \langle t_{\mathbf{p}}^2 (i\omega + \mu - U) \rangle A_3, \quad (28a)$$

$$A_2 = -U \langle t_{\mathbf{p}}^2 f_1 \rangle A_1 + U \langle t_{\mathbf{p}} (i\omega + \mu - f_1 t_{\mathbf{p}}) \rangle A_2 - U \langle t_{\mathbf{p}}^2 (i\omega + \mu) \rangle A_3, \quad (28b)$$

$$A_3 = \langle [- (i\omega + \mu - U)^2 - t_{\mathbf{p}}^2 + 2t_{\mathbf{p}}(i\omega + \mu - U) + f_1 U t_{\mathbf{p}}] \rangle A_1 + \langle [- (i\omega + \mu)^2 - t_{\mathbf{p}}^2 + 2(i\omega + \mu)t_{\mathbf{p}} - f_2 U t_{\mathbf{p}}] \rangle A_2 + U \langle t_{\mathbf{p}} (2(i\omega + \mu) - U - t_{\mathbf{p}}) \rangle A_3. \quad (28c)$$

Здесь угловые скобки означают деление на множитель $(i\omega - \xi_{\mathbf{p}}^+)^2 (i\omega - \xi_{\mathbf{p}}^-)^2$ и дальнейшее суммирование по ω и \mathbf{p} с множителем T , где $\xi_{\mathbf{p}}^{\pm} = E_{\mathbf{p}}^{\pm} - \mu$,

$$E_{\mathbf{p}}^{\pm} = \frac{1}{2} \left[U + t_{\mathbf{p}} \pm \sqrt{U^2 + t_{\mathbf{p}}^2 - 2U t_{\mathbf{p}}(1-n)} \right] \quad (29)$$

— энергии электрона в нижней и верхней хаббардовских зонах.

Выделим в правой части сингулярные слагаемые, происходящие от сближения полюсов в нижней подзоне Хаббарда, а затем просуммируем по частотам $i\omega = i\pi T(2n + 1)$. В результате уравнения (28a)–(28c) преобразуются к системе уравнений $A_i = A_{i,k} A_k$, где матричные элементы $A_{i,k}$ имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} A_{11} &= -U \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} \frac{K_{\mathbf{p}} + U - t_{\mathbf{p}}(1-n)}{2K_{\mathbf{p}}^2} n'_F(\xi_{\mathbf{p}}^-), \\ A_{12} &= -U \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}^2 \frac{n}{2K_{\mathbf{p}}^2} n'_F(\xi_{\mathbf{p}}^-), \\ A_{13} &= -U \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}^2 \frac{K_{\mathbf{p}} + U - t_{\mathbf{p}}}{2K_{\mathbf{p}}^2} n'_F(\xi_{\mathbf{p}}^-); \\ A_{21} &= -U \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}^2 \frac{2-n}{2K_{\mathbf{p}}^2} n'_F(\xi_{\mathbf{p}}^-), \\ A_{22} &= -U \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} \frac{K_{\mathbf{p}} - U + t_{\mathbf{p}}(1-n)}{2K_{\mathbf{p}}^2} n'_F(\xi_{\mathbf{p}}^-), \\ A_{23} &= -U \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}^2 \frac{-K_{\mathbf{p}} + U + t_{\mathbf{p}}}{2K_{\mathbf{p}}^2} n'_F(\xi_{\mathbf{p}}^-); \\ A_{31} &= \\ &= - \sum_{\mathbf{p}} \frac{(K_{\mathbf{p}} + U)^2 + t_{\mathbf{p}}^2 + 2t_{\mathbf{p}} [K_{\mathbf{p}} - U(1-n)]}{2K_{\mathbf{p}}^2} \times \\ &\quad \times n'_F(\xi_{\mathbf{p}}^-), \\ A_{32} &= \\ &= - \sum_{\mathbf{p}} \frac{(K_{\mathbf{p}} - U)^2 + t_{\mathbf{p}}^2 + 2t_{\mathbf{p}} [K_{\mathbf{p}} - U(1-n)]}{2K_{\mathbf{p}}^2} \times \\ &\quad \times n'_F(\xi_{\mathbf{p}}^-), \\ A_{33} &= -U \sum_{\mathbf{p}} \frac{t_{\mathbf{p}}}{K_{\mathbf{p}}} n'_F(\xi_{\mathbf{p}}^-), \\ K_{\mathbf{p}} &= \sqrt{U^2 + t_{\mathbf{p}}^2 - 2U(1-n)t_{\mathbf{p}}}. \end{aligned} \quad (30)$$

В пределе низких температур, когда $n'_F(\xi_{\mathbf{p}}^-) = -\delta(\xi_{\mathbf{p}}^-)$, удобно перейти к интегрированию по переменной $t_{\mathbf{p}}$ с помощью заданной плотности состояний $\rho_0(\epsilon) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon - t_{\mathbf{p}})$. Таким образом, в правой части соотношений (30) необходимо провести замену $t_{\mathbf{p}} \rightarrow \epsilon$, а также

$$n'_F(\xi_{\mathbf{p}}^-) \rightarrow 2K_{\mathbf{p}} \frac{K_{\mathbf{p}} - U(1-n) + t_{\mathbf{p}}}{nU^2(2-n)} \rho_0(\epsilon). \quad (31)$$

Интегрирование не проводится из-за δ -функции, а параметр ϵ определяется через уравнение состояния:

$$n = \sum_{\mathbf{p}} \left[1 - \frac{t_{\mathbf{p}} - U(1-n)}{K_{\mathbf{p}}} \right] n_F(\xi_{\mathbf{p}}^-) \rightarrow 2 \int_{-1}^{\epsilon_0} \frac{\partial \xi_{\epsilon}^-}{\partial \epsilon} \rho_0(\epsilon) d\epsilon. \quad (32)$$

Особенно простые соотношения получаем для модели плоской зоны, когда $\rho_0(\epsilon) = \theta(1 - \epsilon^2)/2$. При этом уравнение (32) разрешимо относительно параметра ϵ_0 :

$$\epsilon_0 = \frac{-1 + 2n(1-n) - u(1-n) - (1-2n)\sqrt{(1+u)^2 - 2un}}{1 - 2n + u(1-n) + \sqrt{(1+u)^2 - 2un}}. \quad (33)$$

Здесь $u = U/t$ — энергия Хаббарда, приведенная к безразмерному виду с помощью полуширины затравочной плотности состояний, ϵ_0 — значение параметра ϵ , соответствующее уровню Ферми.

В этих обозначениях можно записать условие разрешимости линейной системы уравнений $A_i = A_{i,k}A_k$ для величин A_k :

$$2\epsilon_0 [2n(n-2) - \epsilon_0(1-n)] \tilde{K}^3 u + n(n-2) \times \{2n(n-2) + \epsilon_0 [\epsilon_0 - 4(1-n)]\} u^2 \tilde{K}^2 + \tilde{K}^4 \epsilon_0^2 + \epsilon_0^2(2-n)u^3 \tilde{K} - \epsilon_0^2(1-n)^2 u^4 - 4n\epsilon_0^2(2-n)u \tilde{K}^2 + 2\epsilon_0^3 \tilde{K}^3 - 2\epsilon_0^3(2n^2 - 4n + 3)u^2 \tilde{K} + 2\epsilon_0^3(n^2 - 2n + 2) \times (1-n)u^3 - \epsilon_0^4(5n^2 - 10n + 6)u^2 + 6\epsilon_0^4(1-n)u \tilde{K} + 4\epsilon_0^5(1-n)u - 2\epsilon_0^5 \tilde{K} - \epsilon_0^6. \quad (34)$$

Связь параметра ϵ_0 с U и n определена в (33), а величина \tilde{K} равна

$$\tilde{K} = \sqrt{u^2 + \epsilon_0^2 - 2u(1-n)\epsilon_0} = \frac{u^2 + 2(1-2n+n^2)u + 2n^2 - 2n + 1 + [1-2n+u(1-n)]\sqrt{(1+u)^2 - 2un}}{1-2n+u(1-n) + \sqrt{(1+u)^2 - 2un}}. \quad (35)$$

Из соотношений (33)–(35) определяем зависимость величины n от параметра $u = U/t$, которая отделяет ферромагнитную область от парамагнитной (см. рис. 5).

6. АНТИФЕРРОМАГНИТНАЯ ЧАСТЬ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ

Для изучения возможности антиферромагнитного упорядочения необходимо рассмотреть амплитуды с конечным передаваемым импульсом \mathbf{Q} и с переворотом электронного спина [9, 10]. При этом предполагается, что для всех значений квазиимпульсов \mathbf{p} , принадлежащих первой зоне Бриллюэна, выполняется условие полного нестинга:

$$t_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} = -t_{\mathbf{p}}, \quad (36)$$

где \mathbf{Q} равна некоторой доле вектора обратной решетки.

При этом обратная функция Грина определяется через матрицу 4×4 :

$$\hat{G}_{\omega}^{-1}(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} (\hat{G}_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p}))^{-1} & \hat{\Sigma}_A^{an}(\mathbf{p}) \\ \hat{\Sigma}_A^{an}(\mathbf{p}) & (\hat{G}_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p}+\mathbf{Q}))^{-1} \end{pmatrix}, \quad (37)$$

где

$$\left(\hat{G}_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p}) \right)^{-1} = \left(\begin{array}{c|cc} \text{переходы} & (0 \rightarrow \uparrow) & (\downarrow \rightarrow \Pi) \\ \hline (0 \rightarrow \uparrow) & i\omega - b_1^2 f_{dt_{\mathbf{p}}} + \mu & -b_1 b_2 f_{dt_{\mathbf{p}}} \\ (\downarrow \rightarrow \Pi) & -b_1 b_2 f_{dt_{\mathbf{p}}} & i\omega - b_2^2 f_{dt_{\mathbf{p}}} + \mu \end{array} \right) \quad (38)$$

— обратная одночастичная функция Грина.

Используя условие нестинга (36), получаем

$$\left(\hat{G}_\omega^{(0)}(\mathbf{p} + \mathbf{Q})\right)^{-1} = \left(\begin{array}{c|cc} \text{переходы} & (0 \rightarrow \uparrow) & (\downarrow \rightarrow \Pi) \\ \hline (0 \rightarrow \uparrow) & i\omega + b_1^2 f_a t_{\mathbf{p}} + \mu & b_1 b_2 f_a t_{\mathbf{p}} \\ (\downarrow \rightarrow \Pi) & b_1 b_2 f_a t_{\mathbf{p}} & i\omega + b_2^2 f_a t_{\mathbf{p}} + \mu \end{array} \right). \quad (39)$$

Вычисленная в однопетлевом приближении антиферромагнитная аномальная часть первого рода не зависит от внешнего импульса и формально имеет то же диаграммное представление, изображенное на рис. 3. Что касается антиферромагнитной аномальной части второго рода, то она пропорциональна $t_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} = -t_{\mathbf{p}}$ и по этой причине отличается знаком соответствующих ферромагнитных слагаемых, изображенных на рис. 4. В результате можно написать по аналогии с (25a) и (25b):

$$\hat{\Sigma}_A^{an}(\mathbf{p}) = \left(\begin{array}{c|cc} \text{переходы} & (0 \rightarrow \downarrow) & (\uparrow \rightarrow \Pi) \\ \hline (0 \rightarrow \uparrow) & C_1 - C_3 t_{\mathbf{p}} & C_2 + C_3 t_{\mathbf{p}} \\ (\downarrow \rightarrow \Pi) & -C_1 + C_3 t_{\mathbf{p}} & -C_2 - C_3 t_{\mathbf{p}} \end{array} \right), \quad (40a)$$

$$\check{\Sigma}_A^{an}(\mathbf{p}) = \left(\begin{array}{c|cc} \text{переходы} & (0 \rightarrow \uparrow) & (\downarrow \rightarrow \Pi) \\ \hline (0 \rightarrow \downarrow) & D_1 - D_3 t_{\mathbf{p}} & D_2 - D_3 t_{\mathbf{p}} \\ (\uparrow \rightarrow \Pi) & -D_1 - D_3 t_{\mathbf{p}} & -D_2 - D_3 t_{\mathbf{p}} \end{array} \right). \quad (40b)$$

Величины C_1 и C_2 выражаются через аномальные функции Грина в соответствии с рис. 4. Аналогично соотношениям (27) и (28) имеем

$$C_1 = T \sum_{\omega, \mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} [G_\omega^{1,3}(\mathbf{p}) + G_\omega^{2,3}(\mathbf{p})], \quad (41)$$

$$C_2 = T \sum_{\omega, \mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} [G_\omega^{1,4}(\mathbf{p}) + G_\omega^{2,4}(\mathbf{p})].$$

Величину C_3 находим с помощью рис. 5:

$$C_3 = T \sum_{\omega, \mathbf{p}} [G_\omega^{1,3}(\mathbf{p}) - G_\omega^{2,4}(\mathbf{p})]. \quad (42)$$

Запишем правые части (41) и (42) в приближении, линейном по C_1 , C_2 и C_3 . В результате получаем

$$C_1 = U \langle t_{\mathbf{p}} (i\omega + \mu - U + f_2 t_{\mathbf{p}}) \rangle C_1 + U \langle t_{\mathbf{p}}^2 f_2 \rangle C_2 - U \langle t_{\mathbf{p}}^2 (i\omega + \mu - U) \rangle C_3, \quad (43a)$$

$$C_2 = U \langle t_{\mathbf{p}}^2 f_1 \rangle C_1 + U \langle t_{\mathbf{p}} (i\omega + \mu + f_1 t_{\mathbf{p}}) \rangle C_2 + U \langle t_{\mathbf{p}}^2 (i\omega + \mu) \rangle A_3, \quad (43b)$$

$$C_3 = \langle (i\omega + \mu - U)^2 - t_{\mathbf{p}}^2 + f_1 U t_{\mathbf{p}} \rangle C_1 + \langle [(i\omega + \mu)^2 - t_{\mathbf{p}}^2 - f_2 U t_{\mathbf{p}}] \rangle C_2 + U \langle t_{\mathbf{p}} (2(i\omega + \mu) - U - t_{\mathbf{p}}) \rangle C_3. \quad (43c)$$

Здесь угловые скобки означают деление на произведение множителей

$$(i\omega - \xi_{\mathbf{p}}^+)(i\omega - \xi_{\mathbf{p}}^-)(i\omega - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^+)(i\omega - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^-) \quad (44)$$

и дальнейшее суммирование по ω и \mathbf{p} с множителем T , где $\xi_{\mathbf{p}}^\pm = E_{\mathbf{p}}^\pm - \mu$,

$$E_{\mathbf{p}}^\pm = \frac{1}{2} \left[U + t_{\mathbf{p}} \pm \sqrt{U^2 + t_{\mathbf{p}}^2 - 2U t_{\mathbf{p}}(1-n)} \right] \quad (45)$$

— энергии электрона в нижней и верхней хаббардовских зонах.

При вычислении матричных элементов мы разлагаем слагаемые на простые множители, а затем объединяем слагаемые, относящиеся к нижней подзоне Хаббарда, с помощью преобразований

$$\mathbf{p} + \mathbf{Q} \rightarrow \mathbf{p}, \quad t_{\mathbf{p}-\mathbf{Q}} = -t_{\mathbf{p}}. \quad (46)$$

В результате получаем условие возникновения антиферромагнетизма из равенства нулю определителя следующей матрицы:

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} 1 - G_{00}/f_1 & -G_{00}/f_1 & G_{13} \\ -G_{00}/f_2 & 1 - G_{00}/f_2 & G_{23} \\ G_{31} & -G_{32} & 1 + G_{00}/f_1 f_2 \end{pmatrix}. \quad (47)$$

Вычисляя правую часть (47), получим

$$\det M = G_{00}^2 + \frac{n(2-n)}{8} (-G_{31} + G_{32}) \times \\ \times [nG_{23} - (2-n)G_{13}] G_{00} + \\ + \frac{n^2(2-n)^2}{16} (1 + G_{23}G_{32} - G_{13}G_{31}) = 0. \quad (48)$$

Для области низких температур, когда можно пренебречь вкладом от верхней зоны Хаббарда, имеем

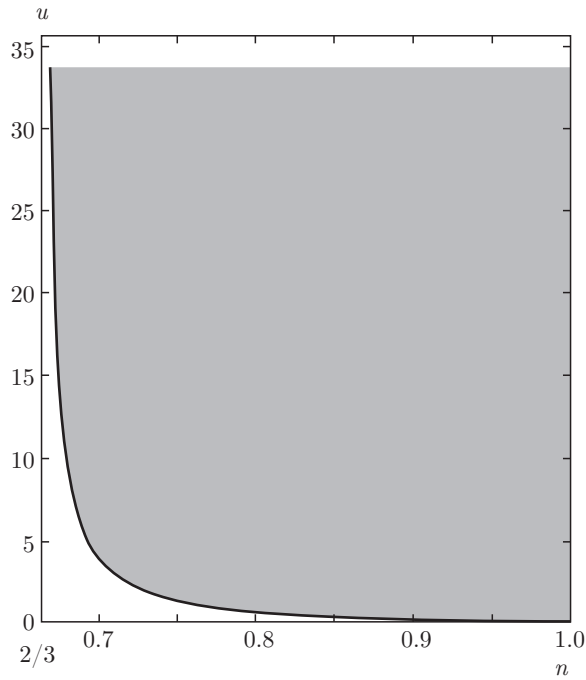


Рис. 2. Область существования сверхпроводящей фазы при $T = 0$ в переменных u, n

$$\begin{aligned}
 G_{00} &= \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} \frac{K_{\mathbf{p}} + t_{\mathbf{p}} - U(1-n)}{2UK_{\mathbf{p}}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^-), \\
 G_{13} &= - \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} (U + K_{\mathbf{p}} - t_{\mathbf{p}}) \times \\
 &\quad \times \frac{K_{\mathbf{p}} + t_{\mathbf{p}} - U(1-n)}{4UK_{\mathbf{p}}f_1f_2} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^-), \\
 G_{23} &= - \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} (U - K_{\mathbf{p}} + t_{\mathbf{p}}) \times \\
 &\quad \times \frac{K_{\mathbf{p}} + t_{\mathbf{p}} - U(1-n)}{4UK_{\mathbf{p}}f_1f_2} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^-), \quad (49) \\
 G_{31} &= - \sum_{\mathbf{p}} (U + K_{\mathbf{p}} + t_{\mathbf{p}}) (U + K_{\mathbf{p}} - 3t_{\mathbf{p}}) \times \\
 &\quad \times \frac{K_{\mathbf{p}} + t_{\mathbf{p}} - U(1-n)}{8U^2t_{\mathbf{p}}K_{\mathbf{p}}f_1f_2} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^-), \\
 G_{32} &= - \sum_{\mathbf{p}} (U - K_{\mathbf{p}} - t_{\mathbf{p}}) (U - K_{\mathbf{p}} + 3t_{\mathbf{p}}) \times \\
 &\quad \times \frac{K_{\mathbf{p}} + t_{\mathbf{p}} - U(1-n)}{8U^2t_{\mathbf{p}}K_{\mathbf{p}}f_1f_2} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^-).
 \end{aligned}$$

Рассмотрим наиболее важный случай предельно больших значений энергии Хаббарда. После предельного перехода $U \rightarrow \infty$ вместо (49) имеем

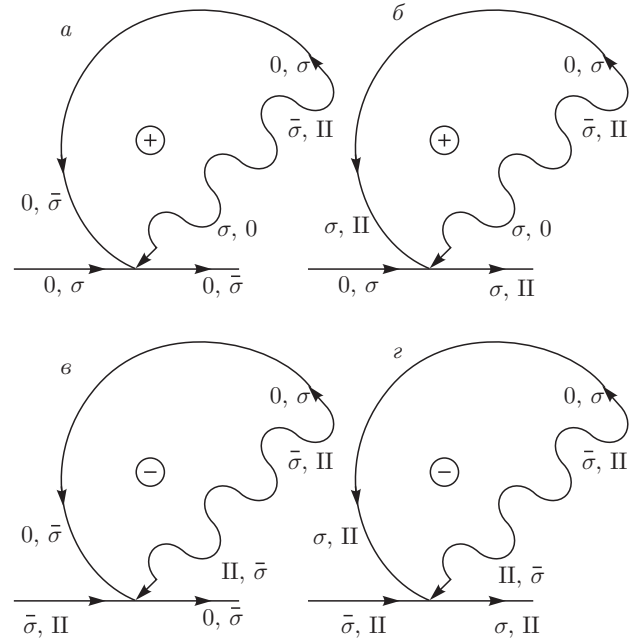


Рис. 3. Графическое изображение аномальной собственной энергетической части первого типа

$$\begin{aligned}
 G_{00} &= G_{23} = G_{32} = 0, \\
 G_{13} &= -\frac{1}{f_1} \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^-), \quad (50) \\
 G_{31} &= -\frac{1}{f_1} \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}^{-1} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^-).
 \end{aligned}$$

Таким образом, условие возникновения антиферромагнетизма при $U = \infty$ имеет вид

$$f_1^2 = \left(\sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^-) \right) \left(\sum_{\mathbf{p}} (t_{\mathbf{p}})^{-1} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^-) \right), \quad (51a)$$

к нему следует добавить уравнение состояния:

$$n = 2f_1 \left(\sum_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}) \right), \quad f_1 = 1 - \frac{n}{2}, \quad (51b)$$

$$\xi_{\mathbf{p}} = f_1 t_{\mathbf{p}} - \mu.$$

Для модели плоской зоны $\rho_0 = (1/2)\theta(1 - \epsilon^2)$ решение системы уравнений (51a), (51b) представлено на рис. 6. Из этого рисунка следует, что максимальное значение температуры антиферромагнитного перехода достигается при $n \approx 0.669$ и соответствует $T_{AF} \approx 0.0213t$.

В пределе $T = 0$ вместо (51a) и (51b) получаем

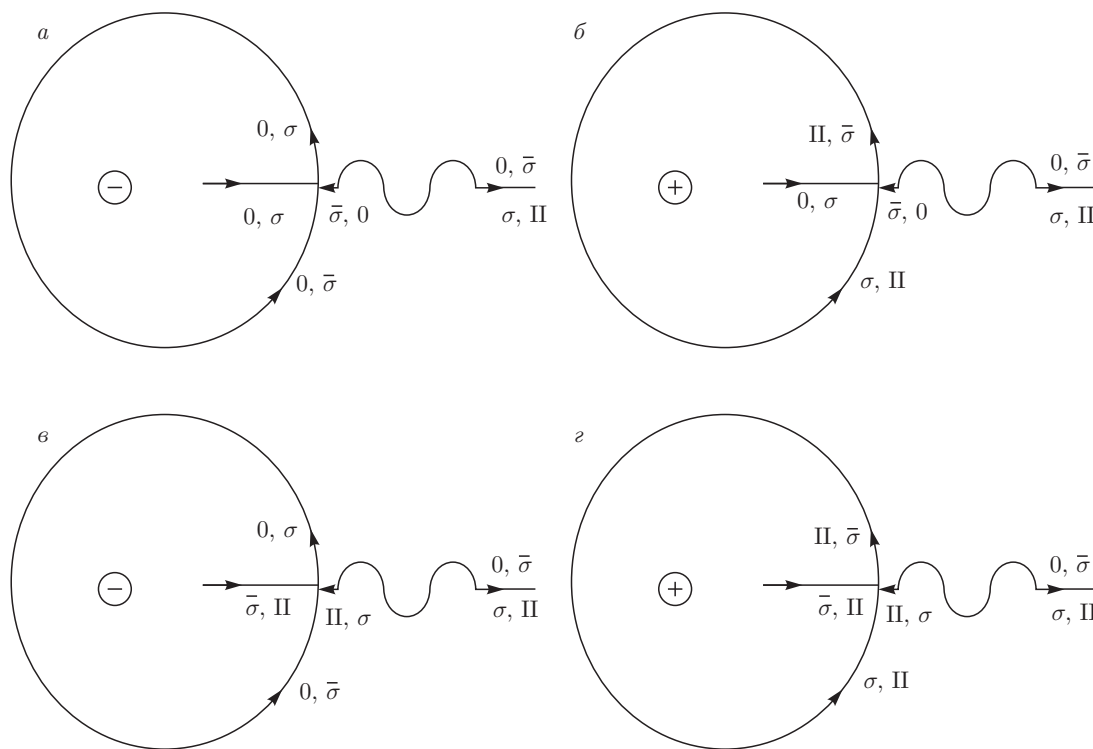


Рис. 4. Графическое изображение аномальной собственно-энергетической части второго типа

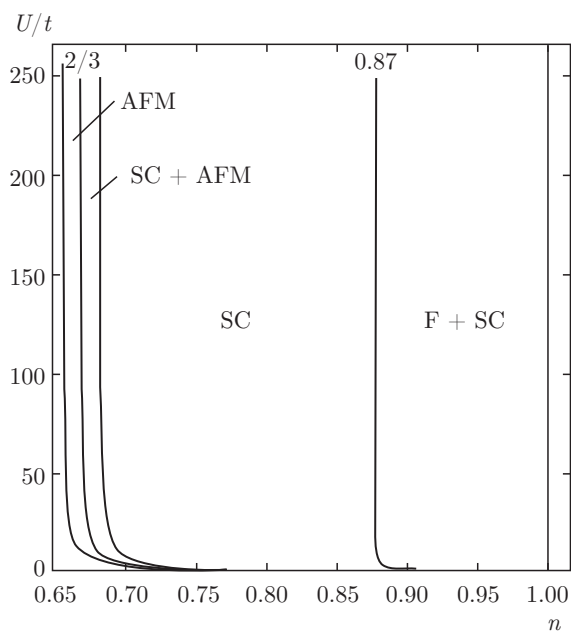


Рис. 5. Фазовая диаграмма в области, где перекрываются ферромагнитная (F), сверхпроводящая (SC) и антиферромагнитная (AFM) фазы; $T = 0$

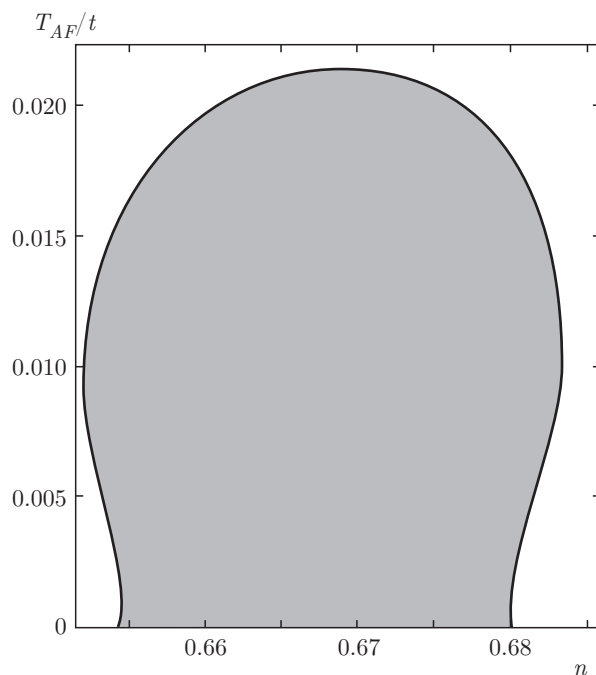


Рис. 6. Антиферромагнитная фазовая диаграмма, относящаяся к бесконечной энергии Хаббарда

$$\left(1 - \frac{n}{2}\right)^2 = \int_{-1}^{\epsilon_0} \epsilon \rho_0(\epsilon) d\epsilon \int_{-1}^{\epsilon_0} \epsilon^{-1} \rho_0(\epsilon) d\epsilon, \tag{52}$$

$$n = (2 - n) \int_{-1}^{\epsilon_0} \rho_0(\epsilon) d\epsilon.$$

Для модели плоской зоны система уравнений (52) имеет два решения: ($n = 0.65468$, $\epsilon_0 = -0.024534$), ($n = 0.68012$, $\epsilon_0 = 0.034649$). Таким образом, в этой модели антиферромагнетизм существует в узкой области концентраций $0.65468 < n < 0.68012$.

Для логарифмической модели, $\rho_0 = -(1/2) \times \theta(1 - \epsilon^2) \ln |\epsilon|$, система уравнений (52) дает несколько более широкую область существования антиферромагнетизма: $0.6213 < n < 0.7189$.

С уменьшением энергии Хаббарда происходит уменьшение и без того узкой области существования антиферромагнитной фазы. Для модели плоской зоны это можно обнаружить после вычисления средних G_{ik} в пределе $T = 0$:

$$G_{00} = \int_{-1}^{\epsilon_0} \epsilon \frac{\bar{K}_\epsilon + \epsilon - u(1 - n)}{4u\bar{K}_\epsilon} d\epsilon,$$

$$G_{13} = - \int_{-1}^{\epsilon_0} \epsilon (u + \bar{K}_\epsilon - \epsilon) \frac{\bar{K}_\epsilon + \epsilon - u(1 - n)}{8u\bar{K}_\epsilon f_1 f_2} d\epsilon,$$

$$G_{23} = - \int_{-1}^{\epsilon_0} \epsilon (u - \bar{K}_\epsilon + \epsilon) \frac{\bar{K}_\epsilon + \epsilon - u(1 - n)}{8u\bar{K}_\epsilon f_1 f_2} d\epsilon, \tag{53}$$

$$G_{31} = - \int_{-1}^{\epsilon_0} (u + \bar{K}_\epsilon + \epsilon) (u + \bar{K}_\epsilon - 3\epsilon) \times$$

$$\times \frac{\bar{K}_\epsilon + \epsilon - u(1 - n)}{16u^2 \epsilon \bar{K}_\epsilon f_1 f_2} d\epsilon,$$

$$G_{32} = - \int_{-1}^{\epsilon_0} (u - \bar{K}_\epsilon - \epsilon) (u - \bar{K}_\epsilon + 3\epsilon) \times$$

$$\times \frac{\bar{K}_\epsilon + \epsilon - u(1 - n)}{16u^2 \epsilon \bar{K}_\epsilon f_1 f_2} d\epsilon,$$

где $u = U/t$, $\bar{K}_\epsilon = \sqrt{u^2 + \epsilon^2 - 2u(1 - n)\epsilon}$, $f_1 = 1 - n/2$, $f_2 = n/2$, а зависимость ϵ_0 от n и u определяется с помощью соотношения (33).

Вычисляя интегралы в правых частях (53) и подставляя результаты в (48), находим две границы области существования антиферромагнитной фазы в виде $u_c = u(n)$. (См. левую часть рис. 5.)

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, метод введения аномальных функций Грина и вычисление амплитуды кинематического взаимодействия позволяют установить границы отдельных фаз — сверхпроводящей, ферромагнитной и антиферромагнитной. Что же касается областей перекрытия сверхпроводящей и ферромагнитной [11] или сверхпроводящей и антиферромагнитной фаз, то для них необходимо писать совместные системы уравнений. При этом можно ожидать возникновения коллективных возбуждений: магнонов и антиферромагнонов, которые будут сильно взаимодействовать с электронными возбуждениями, что может приводить с сверхпроводящим состоянием со спином, равным единице [12]. Однако этот механизм не имеет отношения к рассмотренному выше кинематическому механизму сверхпроводимости.

Вблизи от диэлектрической фазы, когда исчезает экранирование, начинает проявляться прямое обменное взаимодействие, так что сверхпроводимость исчезает, а система переходит в антиферродиэлектрическое состояние. Учет этих явлений требует специального рассмотрения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Китайско-российского фонда фундаментальных исследований (грант № 17-52-53014).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1964).
2. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **277**, 237 (1964).
3. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **281**, 401 (1964).
4. Y. Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 392 (1966).
5. И. Е. Дзялошинский, Письма в ЖЭТФ, Приложение **46**, 110 (1987).
6. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
7. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **98**, 780 (2004).
8. Л. П. Горьков, ЖЭТФ **34**, 735 (1958).
9. В. П. Силин, ЖЭТФ **27**, 269 (1954).
10. П. С. Кондратенко, ЖЭТФ **46**, 1438 (1964).
11. Р. О. Зайцев, Письма в ЖЭТФ **102**, 520 (2015).
12. P. Werner, Phys. Rev. Lett. **115**, 247001 (2015).