

К ТЕОРИИ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА В МОДЕЛИ ХАББАРДА С ВЫРОЖДЕНИЕМ

Р. О. Зайцев

Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия

Поступила в редакцию 14 июля 1997 г.

Изучается возможность ферромагнитного упорядочения в рамках обобщенной модели Хаббарда с учетом вырождения и для бесконечной энергии Хаббарда. Определена область существования ферромагнетизма для электронной концентрации, превышающей единицу. Показано, что для концентрации меньше единицы ферромагнетизм существует только в особых случаях, когда поверхность Ферми проходит вблизи особенностей Ван Хова.

1. ВВЕДЕНИЕ

Ферромагнитные свойства переходных металлов наилучшим образом описываются моделью Хаббарда [1] с сильным отталкиванием d -электронов, относящихся к одной и той же элементарной ячейке. Дальнодействующая часть кулоновского взаимодействия предполагается несущественной, поскольку ее роль компенсируется экранирующим влиянием s -электронов. Энергия Хаббарда считается самым большим энергетическим параметром [2] и с самого начала полагается равной бесконечности.

Если пренебречь s - d -гибридизацией, то магнитные свойства переходных элементов определяются в основном d -электронной подзоной, ширина которой выражается через интегралы перескока. Для простоты и наглядности в интересующем нас случае кубического кристалла будет использована модель с нулевыми недиагональными и одинаковыми диагональными интегралами перескока:

$$\hat{H} = - \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}', \sigma, \lambda; \mathbf{r} \neq \mathbf{r}'} t_{\lambda}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{a}_{\mathbf{r}, \sigma, \lambda}^+ \hat{a}_{\mathbf{r}', \sigma, \lambda} - \sum_{\mathbf{r}, \sigma, \lambda} (\mu + \sigma H) \hat{a}_{\mathbf{r}, \sigma, \lambda}^+ \hat{a}_{\mathbf{r}, \sigma, \lambda}. \quad (1)$$

Здесь μ — химический потенциал, $\sigma = \pm$ — спиновый индекс, H — внешнее магнитное поле; кристаллический индекс λ принимает три значения ($\lambda = xy, yz, zx$) при заполнении t_{2g} -оболочки или два ($\lambda = 3z^2 - r^2, x^2 - y^2$) значения в случае заполнения e_g -оболочки.

Будет показано, что для концентрации меньше единицы ферромагнетизм существует только в особых случаях, когда поверхность Ферми проходит вблизи особенностей Ван Хова. Таким способом удастся объяснить существование ферромагнетизма Ni (см., например, [3, 4]).

Настоящая работа посвящена изучению условий возникновения ферромагнетизма, не связанных с существованием ван-ховских особенностей. Расчеты проводятся в рамках однопетлевого приближения для концентраций электронов или дырок, превышающих единицу.

2. ОБЛАСТЬ КОНЦЕНТРАЦИЙ МЕНЬШЕ ЕДИНИЦЫ

В предельном случае бесконечной энергии Хаббарда операторы рождения и уничтожения удобно выразить через \hat{X} -операторы перехода между пустыми (0) и одночастичными $(|\sigma, \lambda\rangle)$ состояниями:

$$\hat{a}_{r,\sigma,\lambda} = \hat{X}_r^{(0|\sigma,\lambda)}, \quad \hat{a}_{r,\sigma,\lambda}^+ = \hat{X}_r^{(\sigma,\lambda|0)}. \quad (2)$$

Для нахождения средних чисел заполнения $n_{\sigma,\lambda}$ используем простейшее однопетлевое приближение, где собственно-энергетическая часть $\Sigma_{(\sigma)}$ не зависит от импульса \mathbf{p} :

$$n_{\lambda}^{(\sigma)} = f_{\lambda}^{(\sigma)} \sum_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}^{(\sigma,\lambda)}). \quad (3)$$

Здесь $n_F(\epsilon)$ — распределение Ферми, $\xi_{\mathbf{p}}^{(\sigma)} = f_{\lambda}^{(\sigma)} t_{\mathbf{p}} + \Sigma(\sigma) - \mu - \sigma H$ — энергия одночастичных возбуждений.

С учетом кубической симметрии конечной множитель может быть выражен через средние числа заполнения [5] и не зависит от номера одночастичного состояния λ :

$$f_{\lambda}^{(\sigma)} = 1 - \sum_s n_s^{(\bar{\sigma})} - \sum_{s \neq \lambda} n_s^{(\sigma)} = 1 - k n^{(\bar{\sigma})} - (k-1) n^{(\sigma)}, \quad \bar{\sigma} = -\sigma. \quad (4)$$

Это же соображение относится и к собственно-энергетической части

$$\Sigma(\sigma) = - \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}} [k n_F(\xi^{(\bar{\sigma})}(\mathbf{p})) + (k-1) n_F(\xi^{(\sigma)}(\mathbf{p}))], \quad (5)$$

где k — число кристаллических компонент.

Концевой множитель может быть выражен через среднее число частиц $n = \sum_{\lambda,\sigma} n_{\lambda}^{(\sigma)}$

и средний магнитный момент, приходящийся на одну ячейку: $M = \sum_{\lambda,\sigma} [n_{\lambda}^{(\sigma)} - n_{\lambda}^{(\bar{\sigma})}]$.

В нулевом поле все величины можно выразить через среднее число частиц, приходящихся на одну ячейку n :

$$n_1^{(\pm)} = \frac{n}{4k}, \quad f = 1 - n \left(1 - \frac{1}{2k}\right), \quad n = 2kf \sum_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}).$$

Спиновую восприимчивость получим дифференцированием уравнения (3). С помощью очевидного условия $\delta n^{(+)} = -\delta n^{(-)}$ находим производную

$$\chi = \frac{\delta M}{\delta H} = \frac{-2kfD_0}{(1-D_1)[(1-n)/f] - fD_1}, \quad (6)$$

где

$$D_m = \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}^m n'_{F}(\xi_{\mathbf{p}}). \quad (7)$$

В пределе $T = 0$ все моменты D_m выражаются через затравочную плотность состояний $\rho(\epsilon) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(t_{\mathbf{p}} - \epsilon)$.

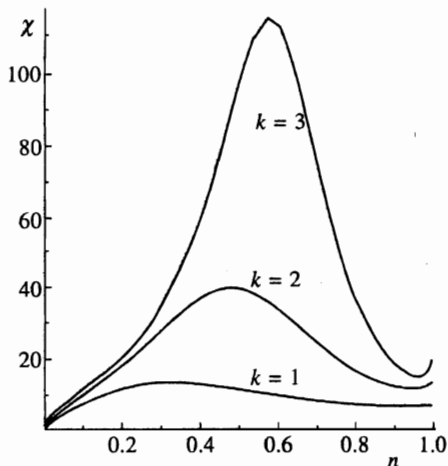


Рис. 1. Зависимость магнитной восприимчивости ($T = 0$) в зависимости от концентрации электронов для разной степени вырождения

Зонные расчеты, выполненные для ГЦК-решетки никеля, обнаруживают весьма резкий пик в плотности состояний для энергий, соответствующих заполнению вырожденных $(3z^2 - r^2)$ - и $(x^2 - y^2)$ -состояний дырочного типа ($k = 2$).

По этой причине можно ожидать обращения в нуль знаменателя восприимчивости (6) для некоторого конечного интервала $\mu < 0$, что при $T = 0$ соответствует дырочному интервалу $0 < n_h < 0.8$. Экспериментально наблюдаемая величина магнитного момента насыщения ферромагнитного никеля отвечает $n_h = 0.6$ (см. рис. 1).

Полученный таким образом результат применим для $n < 1$. В этой области восприимчивость отличается от восприимчивости идеального ферми-газа множителем, значительно превышающим единицу. В изучаемой трехмерной модели знаменатель обращается в нуль на границе области — при $n_e = 1$. Однако в этой точке обращается в нуль также и числитель, так что в результате восприимчивость вблизи этой концентрации приобретает существенную температурную зависимость [6, 7], что соответствует магнетизму локализованных одночастичных состояний.

3. E_g -ЭЛЕКТРОНЫ. ОБЛАСТЬ КОНЦЕНТРАЦИЙ ОТ ЕДИНИЦЫ ДО ДВУХ

Значительно более интересной оказывается ситуация в случае, когда система резонирует между одночастичными и двухчастичными состояниями. При этом удобно ввести новый химический потенциал $\mu - U \rightarrow \mu$ и считать, что пустые состояния вообще отсутствуют.

Одночастичные состояния $\hat{a}_\sigma^+|0\rangle, \hat{b}_\sigma^+|0\rangle$ имеют спин $1/2$. Низшие по энергии двухчастичные состояния 3A_2 имеют спин $S = 1$:

$$\hat{a}_\sigma^+ \hat{b}_\sigma^+ |0\rangle \quad (S_z = \sigma), \quad \frac{\hat{a}_\uparrow^+ \hat{b}_\downarrow^+ + \hat{a}_\downarrow^+ \hat{b}_\uparrow^+}{\sqrt{2}} |0\rangle \quad (S_z = 0). \quad (8)$$

Более высокие по энергии состояния 1E и 1A_1 для простоты не учитываются.

При конечном значении внешнего магнитного поля вариации концевых множителей зависят от вариации как одночастичных (n_1), так и двухчастичных (n_{11}) чисел

заполнения. Учитывая симметрию системы относительно перестановки состояний a и b , находим вариации концевых множителей:

$$f_1^{(\sigma)} = n_{II}^{(\sigma)} + n_1^{(\sigma)}, \quad \delta f_1^{(\sigma)} = \delta n_{II}^{(\sigma)} + \delta n_1^{(\sigma)}, \quad f_2^{(\sigma)} = n_{II}^{(0)} + n_1^{(\bar{\sigma})}, \quad \delta f_2^{(\sigma)} = \delta n_1^{(\bar{\sigma})} = -\delta n_1^{(\sigma)}. \quad (9)$$

Таким образом, в отличие от предыдущего «одночастичного» случая, теперь необходимо иметь два независимых уравнения для нахождения одночастичных и двухчастичных вариаций.

Для получения этих уравнений используем часть разложения оператора уничтожения, соответствующую переходам между одно- и двухчастичными состояниями:

$$\hat{a}_{r\sigma} = \hat{Z}_r = b_1 \hat{X}_r^{(0,\sigma|\sigma,\sigma)} + b_2 \hat{X}_r^{(0,\bar{\sigma}|A_0)}, \quad (10')$$

где $b_1 = 1$, $b_2 = 1/\sqrt{2}$.

Умножим ее на произвольную линейную комбинацию сопряженных X -операторов:

$$\hat{Y}_r = \beta_1 \hat{X}_r^{(\sigma,\sigma|0,\sigma)} + \beta_2 \hat{X}_r^{(A_0|0,\bar{\sigma})}. \quad (10a)$$

Усредняя отдельные T -произведения по состояниям с данной температурой и химическим потенциалом в однопетлевом приближении, находим соотношение, связывающее двухчастичные числа заполнения n_{II} , компоненты Фурье виртуальной одночастичной функции Грина $\hat{G}_\omega(\mathbf{p})$ и концевые множители f_k .

В свою очередь, обратная матрица одночастичной функции Грина выражается через концевые множители f_k , а также через матрицу собственнo-энергетических величин $\hat{\Sigma}$, которая в однопетлевом приближении не зависит ни от частоты, ни от импульса и в нашей модели сразу приводится к диагональному виду:

$$\hat{G}_\omega^{k,s}(\mathbf{p}) = [\delta_{k,s} (i\omega - \Sigma_s + \mu + \sigma H) - f_k b_k t_p b_s]^{-1}. \quad (11)$$

Проведем вычисление T -произведений в рамках однопетлевого приближения:

$$\begin{aligned} -\langle \hat{T} \left(\hat{Z}_r(\tau) \hat{Y}_r(\tau + 0) \right) \rangle &= b_1 \beta_1 \langle X^{(\sigma,\sigma|\sigma,\sigma)} \rangle + b_2 \beta_2 \langle X^{(A_0|A_0)} \rangle = \\ &= b_1 \beta_1 n_{II}^{(\sigma)} + b_2 \beta_2 n_{II}^{(0)} = T \sum_{\omega,k,s,p} b_k G_\omega^{(k,s)}(\mathbf{p}) \beta_s f_s e^{i\omega\delta}. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь δ — малая положительная добавка, f_s — концевой множитель.

В результате дифференцирования (12) по величине магнитного поля получаем два уравнения.

При условии $b_1 \beta_1 + b_2 \beta_2 = 0$ находим уравнение, не зависящее от величины приложенного внешнего поля:

$$\delta n_{II}^{(\sigma)} (1 - K_0) - 2K_0 \delta n_1^{(\sigma)} = \delta f_1^{(\sigma)} (1 - K_0) + \delta f_2^{(\sigma)} (1 + K_0) = A(\mu) [\delta \Sigma_1(\sigma) - \delta \Sigma_2(\sigma)], \quad (13)$$

где электронная (или дырочная) плотность заключена в интервале $1 < n_e < 2$,

$$\begin{aligned} K_0 &= \sum_p n_F(\xi_p) = 4 \frac{n_e - 1}{2 + n_e}, \quad \xi_p = b^2 f t_p - \mu, \\ f &= \frac{2 + n_e}{12}, \quad A(\mu) = \sum_p \frac{n_F(\xi_p) - n_F(-\mu)}{b^2 t_p}. \end{aligned} \quad (14)$$

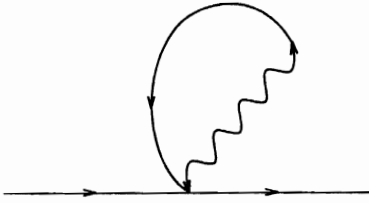


Рис. 2. Однопетлевая собственно-энергетическая часть. Ровной линией изображаются отдельные компоненты виртуальной функции Грина, волнистой — компоненты Фурье интегралов перескока

При условии $\beta_k = b_k$ получаем уравнение для восприимчивости:

$$\begin{aligned} \delta n_{\Pi}^{(\sigma)} &= \delta f_2^{(\sigma)} + \delta f_1^{(\sigma)} = \\ &= K_0 \sum_k b_k^2 \delta f_k^{(\sigma)} + f D_0 \sum_k b_k^2 \delta \Sigma_k(\sigma) + f b^2 D_1 \sum_k b_k^2 \delta f_k^{(\sigma)} - b^2 f D_0 \sigma \delta H, \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$D_n = \sum_p t_p^n n'_F(\xi_p), \quad b_1^2 = 1, \quad b_2^2 = 1/2, \quad b^2 = 3/2.$$

При рассмотрении однопетлевых собственно-энергетических диаграмм $\Sigma_{1,2}$ достаточно вычислить отдельные петли, а затем провести их суммирование с учетом правил коммутации, определяющих отличные от нуля вершинные части кинематического взаимодействия (см. [8, 9], а также рис. 2).

В простейшей модели без гибридизации имеем только диагональные собственно-энергетические части:

$$\begin{aligned} \Sigma_1^{(a,\sigma)} &= -A_2^{(\bar{\sigma})} + B_1^{(\sigma)}, & \Sigma_2^{(a,\sigma)} &= -A_1^{(\bar{\sigma})} + B_2^{(\bar{\sigma})} + A_2^{(\bar{\sigma})} + B_2^{(\sigma)}, \\ \Sigma_1^{(b,\sigma)} &= -B_2^{(\bar{\sigma})} + A_1^{(\sigma)}, & \Sigma_2^{(b,\sigma)} &= -B_1^{(\bar{\sigma})} + A_2^{(\bar{\sigma})} + B_2^{(\bar{\sigma})} + A_2^{(\sigma)}. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь

$$A_s^{(\sigma)} = T \sum_{n,\omega,p} t_p^{s,n} G_\omega^{n,s}(\mathbf{p})$$

— сумма произведений матричных элементов перескока $\hat{t}(\mathbf{p})$ на элементы матрицы виртуальной функции Грина (11), относящейся к заданной проекции спина и заданному a -состоянию.

Можно заметить, что в кубическом кристалле вариация собственно-энергетической части не зависит от номера атомного (a или b) состояния, но изменяет свой знак при изменении знака проекции спина.

Непосредственные вычисления показывают, что величина вариации собственно-энергетической части зависит только от номера перехода, $\delta \Sigma_1^{(a,\sigma)} = \delta \Sigma_1^{(b,\sigma)} = \delta \Sigma_1(\sigma)$, $\delta \Sigma_2^{(a,\sigma)} = \delta \Sigma_2^{(b,\sigma)} = \delta \Sigma_2(\sigma)$.

Два уравнения для $\delta \Sigma_k$ получаем непосредственно из их определения через интегралы от функции Грина (11) — так называемое однопетлевое приближение:

$$\delta \Sigma_k^{(\sigma)} = -\delta \Sigma_k^{(-\sigma)} = - (QW_{k,n} - D_1 U_{k,n}) \delta \Sigma_n^{(\sigma)} + b^2 D_2 U_{k,n} \delta f_n^{(\sigma)} - \sigma D_1 R_k \delta H. \quad (17)$$

Числовые матрицы \hat{U}, \hat{W} , а также вектор \mathbf{R} выражаются через матрицу \hat{S} , построенную в согласии с уравнениями (16).

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} b_1^2 = 1 & b_2^2 = 1/2 \\ b_1^2 = 1 & -b_2^2 = -1/2 \end{pmatrix}, \tag{18}$$

$$R_k = \sum_n S_{k,n}, \quad U_{k,n} = \frac{R_k b_n^2}{b^2}, \quad W_{k,n} = U_{k,n} - S_{k,n}.$$

В данном случае $R_k = \sum_n S_{k,n} = (3/2, 1/2)$. Матрица \hat{W} имеет нулевые элементы первой строки, $W_{1,1} = W_{1,2} = 0$, и нулевую сумму элементов второй строки, $W_{2,1} = -W_{2,2} = -2/3$,

$$U_{1,1} = 1, \quad U_{1,2} = \frac{1}{2}, \quad U_{2,1} = \frac{1}{3}, \quad U_{2,2} = \frac{1}{6}. \tag{19}$$

Неоднородное слагаемое оказывается пропорциональным векторной величине $\mathbf{R} = (3/2, 1/2)$.

Можно заметить, что следствием уравнений (13), (17) является соотношение, не зависящее ни от внешнего поля, ни от концевых множителей f_k :

$$b_2^2(\delta\Sigma_1 + \delta\Sigma_2) = [b_1^2 + Q(\mu)](\delta\Sigma_1 - \delta\Sigma_2). \tag{20}$$

Здесь $\xi_p = \Sigma_0 + t_p b^2 f - \mu$, $Q(\mu) = [K_0 - n_F(-\mu)] / f b^2$, $b^2 = 3/2$, $b_1^2 = 1$, $b_2^2 = 1/2$.

К этому уравнению необходимо добавить два соотношения (9), связывающие вариации чисел заполнения и концевых множителей.

Таким образом, нашей задачей является решение системы четырех уравнений (13), (15), (17) и (20).

Условие разрешимости этой системы — ненулевое значение определителя следующей матрицы:

$$\begin{pmatrix} 1 - b_1^2(K_0 + f b^2 D_1) & 1 - b_2^2(K_0 + f b^2 D_1) & -f D_0 b_1^2 & -f D_0 b_2^2 \\ 1 - K_0 & 1 + K_0 & -A(\mu) & A(\mu) \\ -D_2 b^2 b_1^2 & -D_2 b^2 b_2^2 & 1 - D_1 b_1^2 & -D_1 b_2^2 \\ 0 & 0 & b_2^2 - b_1^2 - Q & b_1^2 + b_2^2 + Q \end{pmatrix}.$$

Равенство нулю определителя этой матрицы означает возникновение ферромагнитной неустойчивости.

Непосредственные вычисления при $T = 0$ приводят к следующему уравнению:

$$K_0(1 - K_0)(Q + b^2) = -A(\mu)D_2 b_2^2 + D_1 [f(Q + b^2)(b_1^2 - b_2^2 + b^2 K_0) + K_0(1 - K_0)(Q b^2 + b_1^4 + 2b_1^2 b_2^2 - b_2^4)]. \tag{21}$$

Все коэффициенты зависят от величины химического потенциала. Для модели полуэллиптической зоны результаты выражаются через угловой параметр α , который меняется от нуля до 2π . В пределе $T = 0$ имеем

$$D_0 = -\frac{2 \sin(\alpha/2)}{f \pi b^2}, \quad D_1 = \frac{\sin \alpha}{f \pi b^2}, \quad D_2 D_0 = D_1^2, \quad b^2 = \frac{3}{2},$$

$$A(\mu) = \frac{2}{\pi b^2} \left\{ \ln \left| \operatorname{tg} \left(\frac{\pi - \alpha}{4} \right) \right| + \sin \alpha / 2 \right\}, \quad K_0 = \frac{\alpha - \sin \alpha}{2\pi}, \quad (22)$$

$$Q(\mu) = \frac{K_0 - \theta(\alpha - \pi)}{fb^2}, \quad n_e = 2 \frac{2 + K_0}{4 - K_0}, \quad f = \frac{n_e + 2}{12}, \quad K_0 = \frac{n_e - 1}{3f}.$$

Возникающая в коэффициенте $A(\mu)$ логарифмическая расходимость, при $\mu \rightarrow 0$ в уравнении (21) компенсируется обращением в нуль множителя D_2 в пределе $\alpha \rightarrow \pi$. Численное решение уравнения (21) приводит к единственному решению $\alpha_0 = 2.56$, $n_e = 1.26$, что соответствует возникновению ферромагнитной неустойчивости в области $1 < n_e < 1.26$.

4. t_{2g} -ЭЛЕКТРОНЫ. ОБЛАСТЬ КОНЦЕНТРАЦИЙ ОТ ЕДИНИЦЫ ДО ДВУХ

В этом случае система резонирует между шестью одночастичными $\hat{a}_\sigma^+|0\rangle$, $\hat{b}_\sigma^+|0\rangle$, $\hat{c}_\sigma^+|0\rangle$ и девятью низшими по энергии двухчастичными состояниями 3A_2 :

$$\hat{a}_\sigma^+ \hat{b}_\sigma^+ |0\rangle \quad (S_z = \sigma), \quad \frac{\hat{a}_\uparrow^+ \hat{b}_\downarrow^+ + \hat{a}_\downarrow^+ \hat{b}_\uparrow^+}{\sqrt{2}} |0\rangle \quad (S_z = 0), \quad (23a)$$

$$\hat{b}_\sigma^+ \hat{c}_\sigma^+ |0\rangle \quad (S_z = \sigma), \quad \frac{\hat{b}_\uparrow^+ \hat{c}_\downarrow^+ + \hat{b}_\downarrow^+ \hat{c}_\uparrow^+}{\sqrt{2}} |0\rangle \quad (S_z = 0), \quad (23b)$$

$$\hat{c}_\sigma^+ \hat{a}_\sigma^+ |0\rangle \quad (S_z = \sigma), \quad \frac{\hat{c}_\uparrow^+ \hat{a}_\downarrow^+ + \hat{c}_\downarrow^+ \hat{a}_\uparrow^+}{\sqrt{2}} |0\rangle \quad (S_z = 0). \quad (23v)$$

Эти три группы соотношений связаны между собой операцией циклической перестановки $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow A$.

В простейшей модели без гибридизации имеем только диагональные собственно-энергетические части:

$$\begin{aligned} \Sigma_1^{(a,\sigma)} &= -A_2^{(\bar{\sigma})} + B_1^{(\sigma)} - C_1^{(\sigma)} - C_2^{(\bar{\sigma})}, \\ \Sigma_2^{(a,\sigma)} &= -A_1^{(\bar{\sigma})} + B_2^{(\bar{\sigma})} + B_2^{(\sigma)} + A_2^{(\bar{\sigma})} - C_1^{(\bar{\sigma})} - C_2^{(\sigma)}, \\ \Sigma_3^{(a,\sigma)} &= -A_4^{(\bar{\sigma})} + C_1^{(\sigma)} - B_1^{(\sigma)} - B_2^{(\bar{\sigma})}, \\ \Sigma_4^{(a,\sigma)} &= -A_3^{(\bar{\sigma})} + C_2^{(\bar{\sigma})} + C_2^{(\sigma)} + A_4^{(\bar{\sigma})} - B_1^{(\bar{\sigma})} - B_2^{(\sigma)}, \end{aligned} \quad (24)$$

Здесь

$$A_s^{(\sigma)} = T \sum_{n,\omega,\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}^{s,n} G_{\omega}^{n,s}(\mathbf{p})$$

— сумма произведений матричных элементов матрицы перехода $\hat{t}(\mathbf{p})$ на элементы матрицы виртуальной функции Грина $\hat{G}_{\omega}(\mathbf{p})$, относящейся к заданной проекции спина и заданному a -состоянию. Шесть других уравнений получаем с помощью операции циклической перестановки $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow A$, $a \rightarrow b \rightarrow c \rightarrow a$.

Можно заметить, что в кубическом кристалле вариация собственно-энергетической части не зависит от номера атомного A -, B - или C -состояния, но изменяет свой знак при изменении знака проекции спина: $\delta\Sigma_s^{(n,\sigma)} = \delta\Sigma_s(\sigma)$. Можно заметить также, что каждое слагаемое, относящееся к правой части, оказывается пропорциональным квадрату генеалогического коэффициента: $A_k^{(\sigma)} = B_k^{(\sigma)} = C_k^{(\sigma)} = g_k^2 Q$, где $g_k^2 = (1, 1/2, 1, 1/2)$.

Подстановка этих чисел в правую часть уравнений (24) дает одинаковый результат для всех трех собственно-энергетических частей, вычисленных при нулевом внешнем магнитном поле.

Для нахождения первой поправки по величине магнитного поля используем общие уравнения (17). Входящая в эти уравнения числовая S -матрица может быть построена на основе уравнений (24):

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} 0 & 2g_2^2 = 1 & 0 & 0 \\ 2g_1^2 = 2 & -2g_2^2 = -1 & 0 & 0 \\ 0 & g_2^2 = 1/2 & 0 & g_4^2 = 1/2 \\ g_1^2 = 1 & -g_2^2 = -1/2 & g_3^2 = 1 & -g_4^2 = -1/2 \end{pmatrix}, \quad R_k = (1, 1, 1, 1). \quad (25)$$

Таким образом, матрица $U_{k,i} = R_k g_i^2 / g^2$ имеет элементы, не зависящие от номера строки. По этой причине уравнения (17) имеют частное решение, не зависящее от номера перехода:

$$\delta\Sigma_k^{(a,\sigma)} = \delta\Sigma_l^{(b,\sigma)} = \delta\Sigma_m^{(c,\sigma)} = \delta\Sigma(\sigma) = -\delta\Sigma(-\sigma).$$

Используя эти соотношения, а также явное выражение для одночастичной функции Грина, находим уравнение для $\delta\Sigma$:

$$\delta\Sigma(\sigma) = D_1 \delta\Sigma(\sigma) + D_2 \sum_{k=1}^4 g_k^2 \delta f_k^{(\sigma)} - \sigma \delta H D_1. \quad (26)$$

Здесь использованы те же обозначения, что и в (15), однако в данном случае

$$g^2 = \sum_{k=1}^4 g_k^2 = 3.$$

Уравнение состояния, продифференцированное по внешнему полю, имеет тот же общий вид, что и (15):

$$2\delta n_{II}^{(\sigma)} = (K_0 + f g^2 D_1) \sum_{k=1}^4 g_k^2 \delta f_k^{(\sigma)} + f g^2 \delta\Sigma(\sigma) D_0 - f g^2 \sigma \delta H D_0. \quad (27)$$

Однако в этом уравнении

$$f = \frac{4 - n_t}{18}, \quad K_0 = \sum_p n_F(\xi_p) = \frac{n_t - 1}{9f}.$$

Система уравнений становится замкнутой, если установить связь между вариациями одночастичного и двухчастичного состояний. В нашем случае это уравнение не зависит ни от вариации внешнего поля, ни от вариации собственно-энергетической части:

$$(1 - K_0) \delta n_{II}^{(\sigma)} = 2K_0 \delta n_I(\sigma). \quad (28)$$

К этому уравнению необходимо добавить два соотношения (9), связывающие вариации чисел заполнения и концевых множителей:

$$\delta n_{11}^{(\sigma)} = \delta f_1^{(\sigma)} + \delta f_2^{(\sigma)}, \quad \delta f_2^{(\sigma)} = -\delta n_1^{(\sigma)}. \quad (29)$$

И наша задача — решение системы трех уравнений (26), (27), (28) с дополнительными условиями (29).

Условием разрешимости этой системы является неравенство нулю определителя следующей матрицы:

$$\begin{pmatrix} 1 - g_1^2(K_0 + fg^2D_1) & 1 - g_2^2(K_0 + fg^2D_1) & -fD_0g^2/2 \\ 1 - K_0 & 1 + K_0 & 0 \\ -2D_2g_1^2 & -2D_2g_2^2 & 1 - D_1 \end{pmatrix}. \quad (30)$$

Обращение в нуль определителя этой матрицы означает возникновение ферромагнитной неустойчивости.

При $T = 0$ получим следующее соотношение

$$K_0(1 - K_0) = D_1 [f(1 + 3K_0) + K_0(1 - K_0)]. \quad (31)$$

Все коэффициенты зависят от величины химического потенциала. Для модели полуэллиптической зоны интегралы выражаются через угловой параметр α . В пределе $T = 0$ снова имеем соотношения (22), но с другим уравнением состояния:

$$K_0 = \frac{\alpha - \sin \alpha}{2\pi}, \quad n_t = 2 \frac{2K_0 + 1}{2 + K_0}, \quad f = \frac{4 - n_t}{18}, \quad g^2 = 3. \quad (32)$$

Уравнение (31) имеет только одно решение при $\alpha = 2.51$. Таким образом, ферромагнитная неустойчивость имеет место для всех $0 < \alpha < 2.51$, что соответствует области концентраций $1 < n_t < 1.4$.

5. t_{2g} -ЭЛЕКТРОНЫ. ОБЛАСТЬ КОНЦЕНТРАЦИЙ ОТ ДВУХ ДО ТРЕХ

Пренебрегая гибридизацией между $3d$ - и $4sp$ -состояниями, рассмотрим случай почти наполовину заполненной t -подзоны, когда электронные состояния резонируют между двух- и трехчастичными состояниями. Нижнее трехчастичное состояние имеет $S = 3/2$ и четырехкратное вырождение по проекции спина:

$$\hat{a}_\sigma^+ \hat{b}_\sigma^+ \hat{c}_\sigma^+ |0\rangle, \quad S_z = 3\sigma/2, \quad (33)$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}} (\hat{a}_\sigma^+ \hat{b}_\sigma^+ \hat{c}_\sigma^+ |0\rangle + \hat{a}_\sigma^+ \hat{b}_\sigma^+ \hat{c}_\sigma^+ |0\rangle + \hat{a}_\sigma^+ \hat{b}_\sigma^+ \hat{c}_\sigma^+ |0\rangle), \quad S_z = \sigma/2.$$

Три низших триплетных состояния со спином 1 построены из трех различных произведений пар операторов рождения (см. (23)).

Разложение по X -операторам перехода между двух- и трехчастичными низшими по энергии состояниями определяется тремя генеалогическими коэффициентами:

$$\hat{a}_{\sigma\sigma} = \hat{X}_r^{(0,\sigma,\sigma|3\sigma/2)} + \sqrt{\frac{2}{3}} \hat{X}_r^{(A(yz,xz)|\sigma/2)} + \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{X}_r^{(0,\bar{\sigma},\bar{\sigma}|\bar{\sigma}/2)}. \quad (34)$$

Разложение двух других операторов уничтожения получаем из (34) с помощью операции циклической перестановки.

В отсутствие поля все средние числа заполнения и концевые множители удается выразить через n_t — среднее число электронов на одну ячейку. С учетом кратности вырождения имеем

$$3n_{II} + 4n_{III} = 1, \quad 18n_{II} + 12n_{III} = n_t. \quad (35)$$

Для нахождения уравнения состояния выразим числа заполнения трехчастичных состояний через одночастичную функцию Грина в совпадающих точках:

$$n_t = 18n_{II} + b^2 f \sum_{\sigma, k, p} n_F(b^2 f \epsilon_p^{(k)} - \mu). \quad (36)$$

Здесь $b^2 = 2$ — сумма квадратов всех генеалогических коэффициентов, входящих в разложение (34). Спектр возбуждений определяем через полюсы одночастичной функции Грина, а величину n_{II} выражаем через n_t с помощью соотношений (36). После суммирования по спиновому индексу получим уравнение состояния:

$$n_t = 2 + 4fK_0, \quad f = \frac{5n_t - 6}{36}, \quad K_0 = \frac{1}{3} \sum_{p, k=1,2,3} n_F(\xi_p^{(k)}), \quad \xi_p^{(k)} = b^2 f \epsilon_p^{(k)} - \mu. \quad (37)$$

Уравнения для вариаций трехчастичных чисел заполнения $\delta n_{III}^{(3\sigma/2)}$, $\delta n_{III}^{(\sigma/2)} = -\delta n_{III}^{(-\sigma/2)}$ можно получить из общего уравнения для среднего значения T -произведений оператора уничтожения (34) на линейную комбинацию трех сопряженных операторов с произвольными коэффициентами β_s :

$$b_1 \beta_1 n_{III}^{(3\sigma/2)} + b_2 \beta_2 n_{III}^{(\sigma/2)} + b_3 \beta_3 n_{III}^{(-\sigma/2)} = T \sum_{1 \leq k, n \leq 3} \sum_{\omega, p} b_k G_{\omega}^{k, n}(p) \beta_n f_n. \quad (38)$$

В однопетлевом приближении матричные элементы функции Грина выражаются через обратную матрицу (11).

Вариация этого соотношения приводит к следующему соотношению:

$$\begin{aligned} & b_1 \beta_1 \delta n_{III}^{(3/2)} + b_2 \beta_2 \delta n_{III}^{(1/2)} + b_3 \beta_3 \delta n_{III}^{(-1/2)} = \\ & = K_0 [b_1 \beta_1 \delta f_1 + b_2 \beta_2 \delta f_2 + b_3 \beta_3 \delta f_3] + (\mathbf{b}\beta) f \delta G. \end{aligned} \quad (38')$$

Если считать вектор β ортогональным вектору \mathbf{b} , то $(\mathbf{b}\beta) = 0$, и можно получить два соотношения, не зависящие явно от вариации магнитного поля. Уравнение, связывающее между собой вариации чисел заполнения, содержит также вариации собственно-энергетических частей $\delta \Sigma_k$. Первое уравнение находим при условии $b_3 \beta_3 = b_1 \beta_1$; $b_2 \beta_2 = -2b_1 \beta_1$:

$$(1 - K_0)(\delta n_{III}^{(3/2)} - 3\delta n_{III}^{(1/2)}) = A(\mu)(\delta \Sigma_1 - 2\delta \Sigma_2 + \delta \Sigma_3). \quad (39)$$

Если же положить $\beta_2 = 0$, $b_3 \beta_3 = -b_1 \beta_1$, то имеем второе уравнение:

$$(1 - K_0)(\delta n_{III}^{(3/2)} + \delta n_{III}^{(1/2)}) - 2K_0 \delta n_{II} = A(\mu)(\delta \Sigma_1 - \delta \Sigma_3). \quad (40)$$

Здесь

$$A(\mu) = \sum_{\mathbf{p}} \frac{n_F(\xi_{\mathbf{p}}) - n_F(-\mu)}{b^2 t_{\mathbf{p}}}.$$

Вариации конечных множителей выражаются через вариации чисел заполнения:

$$\delta f_1 = \delta n_{\text{III}}^{(3/2)} + \delta n_{\text{II}}, \quad \delta f_2 = \delta n_{\text{III}}^{(1/2)}, \quad \delta f_3 = \delta n_{\text{III}}^{(-1/2)} - \delta n_{\text{II}}.$$

Используя дополнительное условие: $\delta n_{\text{III}}^{(-1/2)} = -\delta n_{\text{III}}^{(1/2)}$, находим обратные соотношения:

$$\delta n_{\text{III}}^{(3/2)} = \delta f_1 + \delta f_2 + \delta f_3, \quad \delta n_{\text{III}}^{(1/2)} = \delta f_2, \quad \delta n_{\text{II}} = -\delta f_2 - \delta f_3. \quad (41)$$

Вариация виртуальной функции Грина δG содержит три типа слагаемых:

$$\begin{aligned} b_1^2 \delta n_{\text{III}}^{(3\sigma/2)} + b_2^2 \delta n_{\text{III}}^{(\sigma/2)} + b_3^2 \delta n_{\text{III}}^{(-\sigma/2)} = K_0 \sum_{k=1,2,3} b_k^2 \delta f_k^{(\sigma)} + \\ + f \sum_{k=1,2,3} b_k^2 \delta \Sigma_k^{(\sigma)} D_0 + b^2 f \sum_{k=1,2,3} b_k^2 \delta f_k^{(\sigma)} D_1 - b^2 f \sigma \delta H D_0. \end{aligned} \quad (42)$$

Здесь

$$D_k = \sum_{\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}^k n'_F(\xi_{\mathbf{p}}).$$

При рассмотрении однопетлевых собственно-энергетических диаграмм достаточно вычислить отдельные петли, а затем провести их суммирование с учетом правил коммутации, определяющих отличные от нуля вершинные части кинематического происхождения (см. рис. 2).

В нашей простейшей модели без гибридизации имеем только диагональные собственно-энергетические части:

$$\begin{aligned} \Sigma_1^{(a,\sigma)} &= -A_3^{(\bar{\sigma})} + B_1^{(\sigma)} + C_1^{(\sigma)}, \\ \Sigma_2^{(a,\sigma)} &= -A_2^{(\bar{\sigma})} + B_2^{(\sigma)} + C_2^{(\sigma)} + A_3^{(\bar{\sigma})} + B_3^{(\bar{\sigma})} + C_3^{(\bar{\sigma})}, \\ \Sigma_3^{(a,\sigma)} &= -A_1^{(\bar{\sigma})} + A_2^{(\bar{\sigma})} + B_2^{(\bar{\sigma})} + C_2^{(\bar{\sigma})} + B_3^{(\sigma)} + C_3^{(\sigma)}. \end{aligned} \quad (43)$$

Здесь

$$A_s^{(\sigma)} = T \sum_{n,\omega,\mathbf{p}} t_{\mathbf{p}}^{s,n} G_{\omega}^{n,s}(\mathbf{p})$$

— сумма произведений матричных элементов матрицы перехода $\hat{t}(\mathbf{p})$ на элементы матрицы виртуальной функции Грина $\hat{G}_{\omega}(\mathbf{p})$, относящейся к заданной проекции спина и заданному a -состоянию. Остальные шесть уравнений находим с помощью операции циклической перестановки $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow A$.

Можно заметить, что в отсутствие поля интегралы A, B, C отличаются только концевыми множителями: $A_k = B_k = C_k = b_k^2 \nu$, где ν — поправка к химическому потенциалу, так что при $H = 0$ все собственно-энергетические части (43) оказываются равными $5\nu/3$.

Три уравнения для $\delta\Sigma$ получаем непосредственно из (43) через интегралы от функции Грина (11) — так называемое однопетлевое приближение:

$$\delta\Sigma_k^{(\sigma)} = -\delta\Sigma_k^{(-\sigma)} = -\left(F_{k,n}^{(0)} - D_{k,n}^{(1)}\right) \delta\Sigma_n^{(\sigma)} + b^2 D_{k,n}^{(2)} \delta f_n^{(\sigma)} - \sigma \delta H R_k D_1. \quad (44)$$

При наличии поля уравнения для вариаций записываются в виде совокупности трех уравнений общего вида (12) с коэффициентами, выражающимися через элементы числовой матрицы \hat{S} :

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} 2b_1^2 = 2 & 0 & b_3^2 = 1/3 \\ 0 & 3b_2^2 = 2 & -3b_3^2 = -1 \\ b_1^2 = 1 & -3b_2^2 = -2 & 2b_3^2 = 2/3 \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} 7/3 & 1 & -1/3 \end{pmatrix}. \quad (45)$$

Матрицы

$$\hat{D}^{(n)} = \sum_p t_p^n n'_F(\xi_p) \hat{U}$$

различаются температурными множителями и пропорциональны одной и той же матрице $\hat{U}_{n,m} = R_n b_m^2 / b^2$:

$$\left(\begin{array}{ccc} \frac{(2b_1^2+b_3^2)b_1^2}{b^2} = \frac{7}{6} & \frac{(2b_1^2+b_3^2)b_2^2}{b^2} = \frac{7}{9} & \frac{(2b_1^2+b_3^2)b_3^2}{b^2} = \frac{7}{18} \\ \frac{3(b_2^2-b_3^2)b_1^2}{b^2} = \frac{1}{2} & \frac{3(b_2^2-b_3^2)b_2^2}{b^2} = \frac{1}{3} & \frac{3(b_2^2-b_3^2)b_3^2}{b^2} = \frac{1}{6} \\ \frac{(b_1^2-3b_2^2+2b_3^2)b_1^2}{b^2} = -\frac{1}{6} & \frac{(b_1^2-3b_2^2+2b_3^2)b_2^2}{b^2} = -\frac{1}{9} & \frac{(b_1^2-3b_2^2+2b_3^2)b_3^2}{b^2} = -\frac{1}{18} \end{array} \right). \quad (46)$$

Здесь использованы обозначения квадратов генеалогических коэффициентов: $b_1^2 = 1$, $b_2^2 = 2/3$, $b_3^2 = 1/3$, $b^2 = \sum_k b_k^2 = 2$.

Оператор $\hat{F}^{(0)}$ имеет вид $\hat{F}^{(0)} = Q(\mu)\hat{W}$, где

$$Q(\mu) = \frac{1}{fb^2} \sum_p [n_F(\xi_p) - n_F(-\mu)] = \frac{1}{fb^2} [K_0 - n_F(-\mu)].$$

Матрица \hat{W} имеет нулевую сумму элементов каждой строки:

$$\left(\begin{array}{ccc} U_{1,1} - 2b_1^2 = -\frac{5}{6} & U_{1,2} = \frac{7}{9} & U_{1,3} - b_3^2 = \frac{1}{18} \\ U_{2,1} = \frac{1}{2} & U_{2,2} - 3b_2^2 = -\frac{5}{3} & U_{2,3} + 3b_3^2 = \frac{7}{6} \\ U_{3,1} - b_1^2 = -\frac{7}{6} & U_{3,2} + 3b_2^2 = \frac{17}{9} & U_{3,3} - 2b_3^2 = -\frac{13}{18} \end{array} \right). \quad (47)$$

Неоднородное слагаемое оказывается пропорциональным трехкомпонентной величине $\mathbf{R} = (7/3, 1, -1/3)$. Здесь введены обозначения квадратов генеалогических коэффициентов: $b_1^2 = 1$, $b_2^2 = 2/3$, $b_3^2 = 1/3$, $b^2 = \sum_k b_k^2 = 2$.

Поскольку влияние внешнего поля, а также связь с вариацией концевых множителей определяется вектором \mathbf{R} , можно получить общие соотношения только для вариаций $\delta\Sigma_k$. Для достижения этой цели умножим обе части уравнений (44) на компоненты векторов $\mathbf{N}^{(\pm)}$ ортогональных вектору \mathbf{R} (т. е. $(\mathbf{R}\mathbf{N}^{(\pm)}) = 0$):

$$\delta\Sigma_k^{(\sigma)} N_k^{(\pm)} = Q(\mu) N_k^{(\pm)} W_n^k \delta\Sigma_n^{(\sigma)}. \quad (48)$$

Здесь $\lambda = \pm$, а третье уравнение можно получить с помощью умножения на вектор \mathbf{M} , компоненты которого удовлетворяют условию ортогональности результату действия оператора \hat{W} . Иными словами, для произвольного вектора \mathbf{H} выполняется условие $M_n W_n^k H_k = 0$. Такая возможность появляется из-за того, что определитель матрицы \hat{W} оказывается равным нулю, в то время как ни один из ее главных миноров в нуль не обращается. В результате получаем

$$\delta\Sigma_k^{(\sigma)} M_k - S_n D_1 \delta\Sigma_n^{(\sigma)} = b^2 S_n D_2 \delta f_n^{(\sigma)} - \sigma \delta H (M_k R_k) D_1. \quad (49)$$

Здесь введено обозначение $S_n = M_k U_n^k$.

Ниже используются следующие три вспомогательных вектора:

$$\mathbf{N}^{(+)} = (10, -21, 7), \quad \mathbf{N}^{(-)} = (0, 1, 3), \quad \mathbf{M} = (1, -2/3, -1), \quad \mathbf{S} = (1, 2/3, 1/3) = b_k^2.$$

Возникновение ферромагнитной неустойчивости определяется условием невозможности решить систему полученных уравнений. В результате несложных вычислений получаем следующее условие возникновения ферромагнитной неустойчивости:

$$\begin{aligned} & [3K_0(1 - K_0) - 2fD_1(2 + 3K_0)] \{18 + 52Q + 9Q^2 - D_1 [26 + 68Q - 35Q^2]\} = \\ & = 2D_2 \{fD_0(2 + 3K_0) [14 + 40Q - 11Q^2] - 2A(\mu) [14 + 40Q + 9Q^2]\}. \end{aligned} \quad (50)$$

При нулевой температуре, когда $D_0 D_2 = D_1^2$, уравнение (50) преобразуется к следующему виду:

$$\begin{aligned} & [3K_0(1 - K_0) - b^2 f_t D_1 (2 + 3K_0)] [18 + 52Q + 9Q^2 + 4D_1 (3 + 7Q - 6Q^2)] = \\ & = -4D_2 A(\mu) (14 + 40Q + 9Q^2). \end{aligned} \quad (51)$$

Вычисление коэффициентов уравнения (51) для модели полуэллиптической зоны и при $T = 0$ позволяет утверждать, что ферромагнитная неустойчивость существует в достаточно узком интервале концентраций $2 < n_t < 2.141$.

6. ВЫВОДЫ

Таким образом, в предельном случае бесконечно большой энергии Хаббарда ферромагнитное упорядочение возникает в достаточно узких интервалах концентрации электронов или дырок, каждый из которых превышает единицу. Эта особенность связана с тем обстоятельством, что при концентрации меньше единицы система резонирует

между пустыми и одночастичными состояниями, причем система имеет максимальное стремление к ферромагнитному упорядочению для предельно малого числа электронов. Амплитуда рассеяния, вычисленная для противоположных значений проекции спина, оказывается положительной, что приводит к большим значениям парамагнитной восприимчивости без появления ферромагнитного упорядочения [10].

Для числа частиц (или дырок), превышающего единицу, система резонирует между N - и $(N \pm 1)$ -частичными (хундовскими) состояниями, имеющими максимально возможное значение спина. Существование конечной спиновой поляризации при дополнительном условии, что амплитуда рассеяния возбуждений с противоположными спинами имеет положительный знак, является причиной возникновения ферромагнитной неустойчивости.

Экспериментальные данные указывают на то, что в чистом железе (Fe) электронные состояния находятся между конфигурациями $3d^24(sp)^6$ и $3d^34(sp)^5$. При этом магнитный момент насыщения оказывается равным $2.2\mu_B$, что качественно согласуется с результатами разд. 5.

Литература

1. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **296**, 82, 100 (1967).
2. J. Goodenough, Phys. Rev. **120**, 67 (1960).
3. E. C. Stoner, Phil. Mag. **22**, 81 (1936).
4. J. Hubbard, Proc. Phys. Soc. Lond. **84**, 455 (1964).
5. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
6. Y. Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 392 (1966).
7. A. Suto, Phys. Rev. B **43**, 8779 (1991).
8. F. Dyson, Phys. Rev. **102**, 1217, 1230 (1956).
9. Р. О. Зайцев, Phys. Lett. A **134**, 199 (1988).
10. J. Hubbard and K. P. Jain, J. Phys. C **2**, 1650 (1968).