

УДК 538.115

© 1992

## ВЛИЯНИЕ ФЛУКТУАЦИЙ НА ТЕМПЕРАТУРУ КЮРИ В МОДЕЛИ ХАББАРДА

А. В. Ведяев, А. В. Волков, Н. В. Рыжанова

Показано, что в случае малых концентраций вакансий флуктуационные процессы приводят к сильному снижению температуры Кюри в модели Хаббарда при  $U \rightarrow \infty$ .

Однозонный гамильтониан Хаббарда при  $U \rightarrow \infty$  [1]

$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} X_i^{\sigma 0} X_j^{0\sigma} - \mu \sum_i (X_i^{++} + X_i^{--}) \quad (1)$$

( $t_{ij}$  — интеграл перескока,  $X^{pq}$  — операторы Хаббарда,  $\mu$  — химический потенциал,  $\sigma = \{+, -\}$ ) задает весьма интересную модель, в которой могут быть исследованы свойства магнитоупорядоченных фаз систем с коллективизированными электронами. Хорошо известно, что учет спиновых флуктуаций важен для описания таких систем при конечных температурах [2]. Ранее исследовалось влияние флуктуационных процессов на электронные гриновские функции, причем авторы оставляли в стороне вопрос о перенормировке эффективного обменного взаимодействия [3, 4]. В дальнейшем изложении с помощью диаграммной техники для операторов Хаббарда [1] будет показано, что такая перенормировка важна и приводит к существенному изменению температуры Кюри в модели (1).

Для исследуемого случая спиновая корреляционная функция  $K^{zz} = \langle S_i^z S_j^z \rangle$  выражается через средние от операторов электронной и дырочной плотности

$$K^{zz} = \frac{1}{4} (K^{++} + K^{--} - K^{+-} - K^{-+}), \quad (2)$$

$$K^{\alpha\beta} = \langle X_i^{\alpha\alpha} + X_i^{00}, X_j^{\beta\beta} + X_j^{00} \rangle, \quad (3)$$

поскольку  $S_i^z = (x_i^+ - x_i^-)/2$ .

В парамагнитной фазе  $K^{++} = K^{--}$ ,  $K^{+-} = K^{-+}$ , и для вычисления этих функций без учета флуктуаций может быть выбрана система уравнений, предложенная в [1, 5],

$$K^{\alpha\beta} = \begin{array}{c} \alpha \quad \beta \\ \text{---} \text{---} \\ \circ \quad \circ \end{array} + \begin{array}{c} \alpha \quad \gamma \quad \gamma \quad \beta \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \circ \quad \circ \end{array} K^{\gamma\beta}. \quad (4)$$

Здесь и далее по повторяющимся индексам подразумевается суммирование.

Выбирая для блоков в (4) их точные значения

$$\begin{array}{c} + \quad + \\ \circ \quad \circ \\ \text{---} \end{array} = c - c^2, \quad \begin{array}{c} + \quad - \\ \circ \quad \circ \\ \text{---} \end{array} = c_0 - c^2, \quad (5)$$

где  $c_0$  — концентрация вакансий,  $c = c_0 + c_e/2$ ,  $c_e$  — концентрация электронов, находим выражение для  $K^{zz}$

$$K^{zz} = \frac{1}{2} \frac{c - c_0}{1 - (c - c_0) I_{\mathbf{k}}/T}, \quad (6)$$

$$I_{\mathbf{k}} = -T \sum_{i\omega, \mathbf{p}} t_{\mathbf{p}\mathbf{p}+\mathbf{k}} G_{\mathbf{p}}(i\omega) G_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}(i\omega), \quad (7)$$

где  $t_{\mathbf{k}}$  — Фурье-образ интеграла перескока,  $T$  — температура. Величина  $I_0$  определяет температуру Кюри, а функция  $I_{\mathbf{k}}$  может быть интерпретирована как Фурье-образ эффективного обменного взаимодействия. Если в (7) использовать наиболее простое приближение для электронной гриновской функции

$$G_{\mathbf{k}}(i\omega) = \frac{1}{i\omega + \mu - c t_{\mathbf{k}}}, \quad (8)$$

то непосредственный расчет с модельной полуэллиптической плотностью состояний для величин  $I_{\mathbf{k}}$  показывает, что  $T_C \sim t C_0^{1/3}$ . В дальнейшем все суммы по импульсам будут вычисляться при таких же предположениях относительно  $I_{\mathbf{k}}$ .

Рассмотрим высокотемпературную область, когда  $T \gg T_C$  и в вычислениях можно пренебречь пространственными корреляциями флуктуаций. Для неприводимой собственно-энергетической части  $M(i\omega)$   $I_{\mathbf{k}}$  электронной функции Грина выберем ряд диаграмм, учитывающих многократное рассеяние на одном узле

$$\text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots \quad (9)$$

В дальнейшем для упрощения рисунков мы будем опускать в диаграммах элемент  $\text{---}$ , соответствующий  $t_{\mathbf{k}}$ .

Выражение для полной гриновской функции имеет вид

$$G_{\mathbf{k}}(i\omega) = - \frac{M(i\omega)}{i\omega + \mu - M(i\omega) t_{\mathbf{k}}}. \quad (10)$$

Частичное суммирование ряда (9) может быть проведено с помощью метода, предложенного в [6] и широко используемого в теории неупорядоченных сплавов. В силу идентичности диаграмм (9) и вкладов, рассматриваемых в приближении когерентного потенциала [6], приведем окончательное уравнение для  $M(i\omega)$  без вкладов

$$\frac{c - M}{M(M - 1)} = P^0, \quad (11)$$

$$P_0 = \sum_k P_k,$$

$$P_k = \frac{t_k}{i\omega + \mu - M(i\omega) t_k}. \quad (12)$$

Вычисляя сумму по  $k$  и используя замену

$$M(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_1 - \Sigma(\varepsilon)}, \quad \varepsilon = \frac{\omega + \mu}{t}, \quad (13)$$

получаем решение уравнения (11)

$$\Sigma(\varepsilon + i0) = \frac{1 - c}{2c} (\varepsilon_1 + i\sqrt{c - \varepsilon^2}), \quad |\varepsilon| \leq \sqrt{c}. \quad (14)$$

Отметим, что в выбранном приближении электронная функция Грина точно удовлетворяет правилу сумм

$$\sum_k (G_k(\tau \rightarrow +0) - G_k(\tau \rightarrow -0)) = c. \quad (15)$$

Естественным обобщением уравнений (14), необходимым для корректного учета многократного рассеяния на пространственно нескоррелированных флуктуациях, является система

$$K^{\alpha\beta} = \begin{array}{c} \alpha \quad \beta \\ \circ \quad \circ \end{array} + \alpha \langle \gamma \gamma \rangle \beta + \alpha \langle \gamma \gamma \rangle \text{штрихованная} \langle \sigma \sigma \rangle \beta, \quad (16)$$

где четырехполюсник удовлетворяет уравнению

$$\alpha \text{штрихованная} \beta = \alpha \square \beta + \alpha \square \langle \gamma \gamma \rangle \text{штрихованная} \beta. \quad (17)$$

Треугольная вершина в (16) и нулевая вершина в (17) определяются суммами следующих диаграммных рядов

$$\triangleleft \equiv A^{\alpha\beta} = \alpha \begin{array}{c} \circ \quad \circ \end{array} \beta + \begin{array}{c} \circ \quad \circ \end{array} \beta + \begin{array}{c} \circ \quad \circ \end{array} \beta + \dots, \quad (18)$$

$$\square \equiv B^{\alpha\beta} = \alpha \begin{array}{c} \circ \quad \circ \end{array} \beta + \begin{array}{c} \circ \quad \circ \end{array} \beta + \begin{array}{c} \circ \quad \circ \end{array} \beta + \begin{array}{c} \circ \quad \circ \end{array} \beta + \dots \quad (19)$$

Суммирование в (18) и (19) проводится в соответствии с правилами, использованными при расчете  $M(i\omega)$ . Затравочные и компенсирующие диаграммы для ряда (19) изображены в таблице, в соответствии с которой уравнение для нулевого четырехполюсника как функционала от внутренних гриновских функций имеет вид

Затравочные диаграммы	Компенсирующие диаграммы	
	нерасщепленные	расщепленные
⋮	⋮	⋮

Сумма  $(B^{\alpha\beta} [P_1^0, P_2^0] = \dots)$

$$y^{\alpha\beta} \frac{1}{1 - P_1^0} \frac{1}{1 - P_2^0} \left| -B^{\alpha\beta} [\gamma_1, \gamma_2] \left( \frac{1}{1 - P_1^0 M_1} \right)^2 \left( \frac{1}{1 - P_2^0 M_2} \right)^2 + B^{\alpha\beta} [P_1^0, P_2^0] \right| - \frac{M_1}{1 - M_1 P_1^0} \frac{M_2}{1 - M_2 P_2^0}$$

$$B^{\alpha\beta}[\gamma_1, \gamma_2] = (1 - P_1^0 M_1)^2 (1 - P_2^0 M_2)^2 \times \\ \times \left\{ y^{\alpha\beta} \frac{1}{1 - P_1^0} \frac{1}{1 - P_2^0} - \frac{M_1}{1 - M_1 P_1^0} - \frac{M_2}{1 - M_2 P_2^0} \right\}, \quad (20)$$

$$\gamma_n = \frac{P_n^0}{1 - M_n P_n^0}, \quad n = 1, 2, \quad (21)$$

$$y^{\alpha\beta} = \begin{cases} c_0, & \alpha \neq \beta, \\ c, & \alpha = \beta. \end{cases} \quad (22)$$

Нижние индексы в формулах (20) и (21) соответствуют переменным  $\varepsilon_1$  или  $\varepsilon_2$ .

Выражая  $P_1^0$  и  $P_2^0$  через  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$ , из (21) нетрудно получить решение функционального уравнения (20). Если в качестве аргументов  $B[\gamma_1, \gamma_2]$  взять функции  $P_2^0$ ,  $P_2^0$  и использовать следующее из (11) равенство

$$1 + (M - 1) P^0 = \frac{c}{M}, \quad (23)$$

то окончательное выражение для  $B(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$  будет иметь вид

$$B^{\alpha\beta}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \frac{M_1(M_1 - 1) M_2(M_2 - 1)}{c^2(1 - c)^2} \{y^{\alpha\beta} - c^2\}. \quad (24)$$

Аналогично может быть вычислена треугольная вершина

$$A^{\alpha\beta}(\varepsilon) = \frac{M(M - 1)}{c(c - 1)} \{y^{\alpha\beta} - c^2\}. \quad (25)$$

Отметим, что числовые выражения, стоящие в фигурных скобках формул (24) и (25), совпадают с рассмотренными ранее двухточечными блоками (5). Учитывая это и принимая во внимание факторизуемость нулевого четырехплюсника (24) по энергетическим переменным, можно показать, что система (16) сводится к уравнениям (4), однако теперь  $I_k$  определяется следующим выражением:

$$I_k = -T \sum_{i\omega, p} \left( \frac{M(M - 1)}{c(c - 1)} \right)^2 P_p P_{p+k}. \quad (26)$$

Положим в (26)  $k = 0$  и перейдем от суммирования по  $i\omega$  к интегрированию вдоль вещественной оси комплексной переменной  $\varepsilon$  по формуле Пуассона

$$I_0 = -\frac{1}{\pi} \sum_k \int \text{Im} \left( \frac{M(M - 1) P_k}{c(c - 1)} \right)^2 n_F(\mu - \varepsilon) d\varepsilon \quad (27)$$

( $I_0$  и  $\mu$  взяты в единицах интеграла перескока  $t$ ).

Суммирование по импульсам в (27) проводится с помощью очевидного тождества

$$\sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{1}{F - t_{\mathbf{k}}} \right)^2 = \frac{d}{d\bar{a}} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{1}{F - \bar{a} - t_{\mathbf{k}}} \right) \Big|_{\bar{a} \rightarrow 0}, \quad (28)$$

причем результат может быть выражен только через известную функцию  $\Sigma(\varepsilon)$

$$I_0 = -\frac{1}{\pi(c-c^2)^2} \int \text{Im} \left( \left( \frac{\Sigma}{\varepsilon - \Sigma} \right)^2 + 2(1-c) \frac{\Sigma}{\varepsilon - \Sigma} - \frac{2(1-c)\Sigma^2}{2\Sigma(\varepsilon - \Sigma) + 1 - c} \right) n_F(\mu - \varepsilon) d\varepsilon. \quad (29)$$

Предположим теперь, что  $T \ll c - \mu$ , тогда при вычислении интеграла по  $\varepsilon$  в (29)  $n_F(\mu - \varepsilon)$  может быть заменена на фермиевскую «ступеньку»

$$n_F(\mu - \varepsilon) = \begin{cases} 1, & \varepsilon > \mu, \\ 0, & \varepsilon < \mu. \end{cases} \quad (30)$$

Оценка показывает, что  $I_0 \sim (c - \mu)^{3/2}$  и концентрация вакансий, определяемая по формуле

$$c_0 = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \int \text{Im} \left( \frac{M}{\varepsilon - Mt_{\mathbf{k}}} \right) n_F(\varepsilon - \mu) d\varepsilon, \quad (31)$$

также пропорциональна  $(c - \mu)^{3/2}$ , т. е.  $T_c \sim c_0$  в отличие от полученного ранее соотношения  $T_c \propto c_0^{1/3}$ . Таким образом, при малой концентрации вакансий ( $c_0 \ll 1$ ) учет флуктуационных процессов приводит к сильному понижению температуры Кюри, причем этот эффект наиболее существен в той области концентраций, где для модели (1) может ожидать переход в ферромагнитное состояние.

Полученный результат позволяет установить зависимость магнитной восприимчивости от температуры в некотором интервале изменения последней. В предыдущих вычислениях мы пользовались неравенством

$$T_c < T < c - \mu, \quad (32)$$

вторая часть которого вводилась в качестве предположения и давала возможность применить соотношение (30), в результате чего  $T_c$  оказывалась не зависящей от температуры. При полученной оценке на  $I_0$  и  $c_0 \ll 1$  неравенство (32) заведомо может быть выполнено в некотором диапазоне значений  $T$ , это означает, что существует достаточно широкая область, где справедлив закон Кюри—Вейсса.

Проведенные выше вычисления указывают на то, что использованные приближения для электронной гриновской функции и спиновой корреляционной функции имеют смысл только в том случае, когда выполнено сильное неравенство  $C_0 \ll 1$ . Известно, что при увеличении концентрации вакансий до некоторого критического значения ферромагнитное состояние оказывается неустойчивым за счет процессов, сходных с эффектом Кондо [1]. Исследованию этой ситуации на границе перехода парамагнитная фаза—скоррелированная фаза с возможным антиферромагнитным ближним порядком будут посвящены следующие публикации.

Список литературы

- [1] Ведяев А. В., Котельникова О. А., Николаев М. Ю., Стефанович А. В. Фазовые переходы и электронная структура сплавов. М., 1986. 166 с.
- [2] Мория Т. Спиновые флуктуации в магнетиках с коллективизированными электронами: Пер. с англ. М., 1988. 283 с.
- [3] Ирхин В. Ю., Кацнельсон М. И., Трефилов А. В. // Письма в ЖЭТФ. 1991. Т. 53. № 7. С. 351—354.
- [4] Повзнер А. А., Волков А. Г. // ФММ. 1988. Т. 66. № 6. С. 1073—1082.
- [5] Изюмов Ю. А., Летфулов Б. М. // Препринт 90/2. Свердловск; УРО АН СССР ИФМ, 1990.
- [6] Эллиот Р., Крамхансл Дж., Лис П. Теория и свойства неупорядоченных материалов: Пер. с англ. М., 1977. С. 11—248.

Московский  
государственный университет

Поступило в Редакцию  
22 октября 1991 г.

