

УДК 538.1

©1994

ОСОБЕННОСТИ АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО СОСТОЯНИЯ В ДВУХЗОННОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА

В. П. Лукин

Рассмотрены особенности антиферромагнитного состояния в двухзонной модели Хаббарда. Показано, что в данной модели важную роль играют зарядные флуктуации и имеется значительная асимметрия поведения при дырочном и электронном допировании.

1. В последнее время для описания электронных свойств высокотемпературных сверхпроводников на основе оксидов меди используется так называемая двухзонная модель Хаббарда [1]. Последняя обычно формулируется как обобщение известной модели Хаббарда [2] на случай купратного слоя и учитывает электронные зоны, генетически связанные с d -электронами меди и p -электронами кислорода. Естественно, область применения данной модели не ограничивается только оксидами меди. Ниже в рамках приближения среднего поля исследуются особенности антиферромагнитного состояния в двухзонной модели Хаббарда применительно к двумерной системе CuO_2 .

2. Гамильтониан модели имеет вид

$$H = H_d + H_p + H_{\text{int}}, \quad (1)$$

$$H_d = \sum_{i,\sigma} \left(\varepsilon_d d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} + \frac{U_d}{2} d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma} d_{i-\sigma}^+ d_{i-\sigma} \right), \quad (2a)$$

$$H_p = \sum_{j,p,\sigma} \left(\varepsilon_p c_{jp\sigma}^+ c_{jp\sigma} + \frac{U_p}{2} c_{jp\sigma}^+ c_{jp\sigma} c_{jp-\sigma}^+ c_{jp-\sigma} \right), \quad (2b)$$

$$H_{\text{int}} = \sum'_{i,j,p,\sigma} (t_{ij}^p d_{i\sigma}^+ c_{jp\sigma} + \text{h.c.}) \quad (2c)$$

В (2) индекс i нумерует узлы меди, а индекс j — узлы кислорода, суммирование по данным индексам идет по всей двумерной решетке CuO_2 ; $d_{i\sigma}^+$ ($d_{i\sigma}$) — операторы рождения (уничтожения) d -электронов со спином σ на узле i ; $c_{jp\sigma}^+$ ($c_{jp\sigma}$) — операторы рождения (уничтожения) электрона со спином σ в состоянии $p = p_x, p_y$ на узле j . Как обычно, для ионов кислорода, расположенных вдоль осей x или y , учитываем соответственно $2p_x$ - или $2p_y$ -орбитали; ε_d и ε_p — энергии одноэлектронных состояний; U_d и U_p — соответствующие параметры кулоновского

отталкивания; t_{ij}^p — интегралы перескока между ближайшими узлами меди и кислорода, расстояние между которыми вдоль осей x, y равно соответственно a_x, a_y . Подчеркнем, что электронные состояния на узлах i и j формально описываются как обычные s -состояния, поэтому термины d - и p -состояния используются только в контексте физической преимственности задачи. В отличие от [1] используем представление частиц.

Гамильтониан (1) дополним условием постоянства числа электронов в системе

$$N_{el} = N_0 n_0, \quad (3)$$

где N_0 — число элементарных ячеек, n_0 — число электронов на элементарную ячейку.

Примем, что параметры модели удовлетворяют следующим условиям:

$$\begin{aligned} \lambda_d = \varepsilon_d + U_d > \lambda_p = \varepsilon_p + U_p > \varepsilon_d > \varepsilon_p, \\ t_0^p/U_d \ll 1, \quad t_0^p/U_p \ll 1. \end{aligned} \quad (4)$$

В этом случае кулоновскую энергию необходимо включить в гамильтониан нулевого приближения, а энергию перескока рассматривать как возмущение. С этой целью удобно ввести операторы Хаббарда, свойства которых подробно изложены в [2]. В данной задаче необходимо ввести два типа операторов Хаббарда $X_i^{r,q}$ и $Y_{jp}^{r,q}$ соответственно для подсистем i и j . Исходные операторы $d_{i\sigma}^+$ и $c_{jp\sigma}^+$ связаны с последними соотношениями

$$\begin{aligned} d_{i\sigma}^+ &= X_i^{\sigma 0} + \eta X_i^{2-\sigma}, \\ c_{jp\sigma}^+ &= Y_{jp}^{\sigma 0} + \eta Y_{jp}^{2-\sigma}, \quad \eta = \begin{cases} 1, & \sigma = \uparrow, \\ -1, & \sigma = \downarrow. \end{cases} \end{aligned} \quad (5)$$

Далее будем исследовать случай почти полностью насыщенных p -состояний, поэтому в целях упрощения задачи сузим пространство p -состояний, исключая конфигурации $|jp0\rangle$. В результате гамильтониан модели (1) запишется в виде

$$H_d = \sum_i \left(\varepsilon_d \sum_{\sigma} X_i^{\sigma\sigma} + \varepsilon_{2d} X_i^{22} \right), \quad (6a)$$

$$H_p = \sum_{j,p} \left(\varepsilon_p \sum_{\sigma} Y_{jp}^{\sigma\sigma} + \varepsilon_{2p} Y_{jp}^{22} \right), \quad (6b)$$

$$H_{int} = \sum_{i,j,p,\sigma} [t_{ij}^p (X_i^{2-\sigma} + \eta X_i^{\sigma 0}) Y_{jp}^{-\sigma 2} + \text{h.c.}], \quad (6c)$$

где

$$\varepsilon_{2d} = 2\varepsilon_d + U_d, \quad \varepsilon_{2p} = 2\varepsilon_p + U_p.$$

3. Будем считать, что электроны подсистемы j не поляризованы, а спиновая поляризация электронов i соответствует двухподрешеточному антиферромагнетик. Для описания данного состояния разобьем подсистему i на две подрешетки f и g . Для каждой из подрешеток

среднее число электронов со спином σ на узле n_{df}^σ или n_{dg}^σ не зависит от номера узла. Средние значения операторов спина S_f и S_g равны

$$S_f = \frac{1}{2}(n_{df}^\sigma - n_{df}^{-\sigma}), \quad S_g = \frac{1}{2}(n_{dg}^\sigma - n_{dg}^{-\sigma}). \quad (7)$$

Среднее число электронов на узле для каждой из подрешеток равно

$$n_{df} = n_{df}^\sigma + n_{df}^{-\sigma}, \quad n_{dg} = n_{dg}^\sigma + n_{dg}^{-\sigma}. \quad (8)$$

Имеем следующие соотношения:

$$S_f = -S_g = S, \quad n_{df} = n_{dg} = n_d. \quad (9)$$

Для решения задачи используем метод функций Грина. В гейзенберговском представлении температурные функции Грина d - и p -электронов для нормального состояния имеют вид,

$$G_{dii'}^\sigma = \left\langle T \left\{ d_{i\sigma}(\tau) d_{i'\sigma}^+(\tau') \right\} \right\rangle, \\ G_{pp'jj'}^\sigma = \left\langle T \left\{ c_{jp\sigma}(\tau) c_{j'p'\sigma}(\tau') \right\} \right\rangle, \quad (10)$$

где

$$0 < \tau < \beta = 1/k_B T$$

— вещественная величина,

$$\langle \dots \rangle = \text{Sp}(\rho \dots),$$

$$\rho = e^{-\beta H} / \text{Sp} e^{-\beta H}.$$

Как следует из (5), (10), для решения задачи необходимо вычислить функции Грина вида

$$G_{dii'}^\sigma = \left\langle T \left\{ X_i^{r\sigma}(\tau) X_{i'}^{s,l}(\tau') \right\} \right\rangle.$$

Диаграммная техника для определения данных функций Грина в случае обычной модели Хаббарта достаточно подробно описана в [2]. Последняя легко обобщается на случай двух типов операторов Хаббарта. В рамках используемого ниже приближения среднего поля нет необходимости останавливаться на особенностях диаграммной техники, а можно сразу привести основные уравнения задачи, вывод которых достаточно прозрачен. Хотя приближение среднего поля, как известно [2], не является достаточно корректным, можно полагать, что в случае сильных внутриатомных корреляций оно дает качественно верную картину. В случае двухподрешеточного антиферромагнетика вместо функций $G_{dii'}^\sigma$ необходимо ввести функции $G_{dfj'}^\sigma$, G_{dfg}^σ , $G_{dgg'}^\sigma$ и $G_{dgg'}^\sigma$, описывающие корреляции между электронными состояниями внутри каждой из подрешеток и между различными подрешетками.

Используя разложение функций Грина в ряды Фурье по дискретным частотам $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$, в приближении среднего поля имеем следующую систему уравнений для определения функций Грина:

$$\begin{vmatrix} i\omega_n - \lambda_d - V_{ff'}^{(1)} & -V_{ff'}^{(1)} & -V_{fg'}^{(1)} & -V_{fg'}^{(1)} \\ -V_{ff'}^{(2)} & i\omega_n - \varepsilon_d - V_{ff'}^{(2)} & -V_{fg'}^{(2)} & -V_{fg'}^{(2)} \\ -V_{gf'}^{(1)} & -V_{gf'}^{(1)} & i\omega_n - \lambda_d - V_{gg'}^{(1)} & -V_{gg'}^{(1)} \\ -V_{df'}^{(2)} & -V_{df'}^{(2)} & -V_{gg'}^{(2)} & i\omega_n - \varepsilon_d - V_{gg'}^{(2)} \end{vmatrix} \times$$

$$\times \begin{vmatrix} G_{dff'}^{\sigma(1)} \\ G_{dff'}^{\sigma(2)} \\ G_{dgg'}^{\sigma(1)} \\ G_{dgg'}^{\sigma(2)} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} n_{df}^{-\sigma} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad (11)$$

где

$$V_{ff'}^{(1)} = n_{df}^{-\sigma} \sum_p \frac{n_p^{-\sigma}}{i\omega_n - \lambda_p} \sum_{j,j''} t_{f'j}^p \bar{t}_{j''j}^p,$$

$$V_{ff'}^{(2)} = (1 - n_{df}^{-\sigma}) \sum_p \frac{n_p^{-\sigma}}{i\omega_n - \lambda_p} \sum_{j,j''} t_{f'j}^p \bar{t}_{j''j}^p,$$

$$G_{dff'}^{\sigma(1)} = \langle T \{ X_f^{-\sigma} X_{f'}^{2-\sigma} \} \rangle,$$

$$G_{dff'}^{\sigma(2)} = \langle T \{ X_f^{0\sigma} X_{f'}^{2-\sigma} \} \rangle. \quad (12)$$

Выражения для остальных величин в (11) и (12) отличаются от $V_{ff'}^{(l)}$, $G_{dff'}^{\sigma(l)}$, $l = 1, 2$ заменой соответствующих индексов. Аналогичную структуру имеют уравнения для определения остальных функций Грина.

4. Рассмотрим случай $T = 0$ и ограничимся исследованием тетрагональной структуры

$$a_x = a_y = a, \quad \varepsilon_{p_x} = \varepsilon_{p_y} = \varepsilon_p, \quad \lambda_{p_x} = \lambda_{p_y} = \lambda_p.$$

Переходя к импульсному представлению из (11) и подобных систем уравнений, находим следующие выражения для интересующих нас функций Грина d - и p -электронов:

$$G_{dff}^{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = D_1/D, \quad G_{dfg}^{\sigma} = D_2/D. \quad (13)$$

Для тетрагональной структуры удобно определить функции Грина p -электронов как

$$G_p^{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = G_{p_x p_x}^{\sigma} + G_{p_y p_y}^{\sigma}. \quad (14)$$

Тогда

$$G_p^{\sigma} = \frac{n_p^{\sigma} D_3}{D} + \frac{n_p^{\sigma}}{\omega - \lambda_p} + \frac{2(1 - n_p^{\sigma})}{\omega - \varepsilon_p}. \quad (15)$$

$$D_1 = B_f^{-\sigma}(\omega - \lambda_p)v_{-\sigma}^{(1)},$$

$$D_2 = b_2(\omega - \lambda_p)B_f^\sigma B_f^{-\sigma},$$

$$D_3 = (\omega - \varepsilon_d)(\omega - \lambda_d)v^{(2)},$$

$$D = v_\sigma^{(1)}v_{-\sigma}^{(1)} - B_f^\sigma B_f^{-\sigma}b_2^2,$$

$$v_{-\sigma}^{(1)} = (\omega - \lambda_d)(\omega - \lambda_p)(\omega - \varepsilon_d) - B_f^\sigma b_1,$$

$$b_1 = 4t_0^2 n_p^\sigma,$$

$$v^{(2)} = (\omega - \lambda_d)(\omega - \lambda_p)(\omega - \varepsilon_d) - \frac{1}{2}(B_f^\sigma + B_f^{-\sigma})(b_1 + b_2),$$

$$b_2 = 2t_0^2 n_p^\sigma b_0,$$

$$b_0 = \cos 2k_x a + \cos 2k_y a,$$

$$B_f^\sigma = \omega - \varepsilon_d - \left(1 - \frac{n_d}{2} + S\right) U_d. \quad (16)$$

Функция Грина (15) инвариантна относительно изменения знака величины S , так что $n_p^\sigma = n_p^{-\sigma}$. В пределе $S \rightarrow 0$ формулы (13)-(16) переходят в соответствующие выражения для парамагнетика.

Как видно из (13)-(16), квазичастичный спектр состоит из восьми ветвей: ветви $\omega = \lambda_p$ и $\omega = \varepsilon_p$ являются бездисперсионными в силу симметрии задачи и редукции p -состояний, шесть дисперсионных ветвей $\omega_l(\mathbf{k})$, $l = 1, \dots, 6$ находятся из уравнения

$$D(\mathbf{k}, \omega_l) = 0. \quad (17)$$

Для определения параметров задачи n_d , S , n_p^σ и μ имеем следующие уравнения:

$$n_d = \frac{1}{N_0} \sum_k \sum_{l=1} \left(A_{df}^{\sigma(l)} + A_{df}^{-\sigma(l)} \right) f(\omega_l - \mu), \quad (18)$$

$$S = \frac{1}{2N_0} \sum_k \sum_{l=1} \left(A_{df}^{\sigma(l)} - A_{df}^{-\sigma(l)} \right) f(\omega_l - \mu), \quad (19)$$

$$n_p^\sigma = \frac{1}{2N_0} \sum_k \left[n_p^\sigma \left(A_p^{\sigma(l)} f(\omega_l - \mu) + f(\lambda_p - \mu) \right) + 2(1 - n_p^\sigma) f(\varepsilon_p - \mu) \right], \quad (20)$$

где $f(x)$ — функция распределения Ферми. Уравнение для μ (3) (с учетом того, что в элементарной ячейке с векторами основных трансляций $a_1 = 2a(1, 1)$ и $a_2 = 2a(-1, 1)$ находятся один f -атом, один g -атом и четыре атома кислорода) можно записать в виде

$$n_d + 4n_p^\sigma = n_0. \quad (21)$$

$$A_{df}^{\sigma(l)} = \frac{D_1(\omega_l)}{\prod_{l=1} (\omega_l - \omega_m)}, \quad A_p^{\sigma(l)} = \frac{D_3(\omega_l)}{\prod_{l=1} (\omega_l - \omega_m)}, \quad (22)$$

где $l \neq m$.

5. Перейдем к решению полученных уравнений. В рассматриваемой модели в процессах гибридизации между d - и p -состояниями участвуют только двухэлектронные p -уровни. В этом случае кинетические эффекты характеризуются следующими безразмерными параметрами:

$$\beta = \frac{2t_0}{\gamma}, \quad \beta_1 = \frac{2t_0}{\gamma_1}, \quad (23)$$

где

$$\gamma = \lambda_d - \lambda_p, \quad \gamma_1 = \lambda_p - \varepsilon_d.$$

Далее ограничимся исследованием режима слабой гибридизации, полагая

$$\beta^2 \ll 1, \quad \beta_1^2 \ll 1. \quad (24)$$

В этом случае входящие в уравнение (18)-(20) величины можно найти путем разложения по параметрам β^2 , β_1^2 и $\beta\beta_1$. Из решения уравнения (17) находим

$$\begin{aligned} \omega_{1,2} &= \lambda_d + \gamma\beta^2 n_p^\sigma z_1 (1 + \beta^2 n_p^\sigma \kappa_1), \\ \omega_{3,4} &= \lambda_p + U_d \beta \beta_1 n_p^\sigma z_2 (1 - \beta \beta_1 n_p^\sigma \kappa_2), \\ \omega_{5,6} &= \varepsilon_d + \gamma_1 \beta_1^2 n_p^\sigma z_3 (1 - \beta_1^2 n_p^\sigma \kappa_3). \end{aligned} \quad (25)$$

Здесь

$$\begin{aligned} z_i &= w_i \pm B_i, \quad B_i = \left[S^2 + \frac{1}{4} \Phi_i b_0^2 \right]^{1/2}, \\ \Phi_i &= w_i^2 - S^2, \quad i = 1, 3, \\ w_1 &= \frac{1}{2} n_d, \quad w_2 = \tilde{\gamma} - \frac{1}{2} n_d, \quad w_3 = \frac{1}{2} n_d - 1, \\ \tilde{\gamma} &= \frac{\gamma}{U_d}, \quad \tilde{\gamma}_1 = \frac{\gamma_1}{U_d}, \\ \kappa_1 &= \tilde{\gamma} - (1 + \tilde{\gamma}) z_1 \pm \tilde{\gamma} w_1 b_0^2 / B_1, \\ \kappa_2 &= 1 + \frac{\gamma^2 - \gamma_1^2}{\gamma \gamma_1} z_2 \pm w_2 b_0^2 / B_2, \\ \kappa_3 &= \tilde{\gamma}_1 - (1 + \tilde{\gamma}_1) z_3 \pm \tilde{\gamma}_1 w_3 b_0^2 / B_3. \end{aligned}$$

Формулы (25), (26) позволяют найти величины $A_{df}^{\sigma(l)} \pm A_{df}^{-\sigma(l)}$, $A_p^{\sigma(l)}$ с точностью до членов порядка β^2 , β_1^2 , $\beta\beta_1$ включительно. Так, например, для членов с $l = 1$ находим

$$A_{df}^{\sigma(1)} + A_{df}^{-\sigma(1)} = \frac{1}{2} n_d + \frac{S^2}{B_1} - \beta^2 n_p^\sigma \left[\frac{1}{4} n_d^2 + S^2 + \frac{1}{2} n_d S^2 \frac{1}{B_1} + \frac{1}{2} n_d B_1 + O(\tilde{\gamma}) \right]$$

$$A_{df}^{\sigma(1)} - A_{df}^{-\sigma(1)} = S \left\{ 1 + \frac{n_d}{2B_1} - \beta^2 n_p^\sigma \left[n_d + \frac{1}{4} n_d^2 \frac{1}{B_1} + B_1 + O(\tilde{\gamma}) \right] \right\},$$

$$A_p^{\sigma(1)} = \frac{1}{2} \beta^2 n_p^\sigma \left(\frac{1}{2} n_d + B_1 \right), \quad (27)$$

где опустили поправки, пропорциональные $\tilde{\gamma}$.

Как следует из (25), (26), антиферромагнитное упорядочение приводит к дополнительному по сравнению с парамагнитной фазой расщеплению спектра квазичастиц. Антиферромагнитная щель образуется на границе зоны Бриллюэна (см. рисунок) и пропорциональна величине S .

Полезно привести выражение для плотности состояний d -электронов $g_d^{(1)}(\omega)$, например для ветви $\omega_1(k)$. Из (25) имеем

$$g_d^{(1)} = \frac{4(\omega - \omega_0) (1/2 \cdot n_d + S^2(\omega - \omega_0)/\beta^2 n_p^\sigma)}{[\Phi_1(\omega - \omega_0)^2 - \gamma^2 \beta^4 (n_p^\sigma)^2 S^2]^{1/2}} K \left(\sqrt{1 - \alpha_0^2} \right), \quad (28)$$

где

$$\omega_0 = \lambda_d + \frac{1}{2} \gamma \beta^2 n_d n_p^\sigma,$$

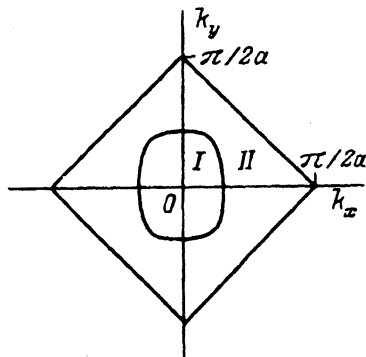
$$\alpha_0 = [(\omega - \omega_0)^2 \gamma^2 \beta^4 (n_p^\sigma)^2 S^2]^{1/2} / \gamma \beta^2 n_p^\sigma \sqrt{\Phi_1},$$

$K(x)$ — полный эллиптический интеграл первого рода. Вблизи антиферромагнитной щели $\omega = \omega_0 + \gamma \beta^2 n_p^\sigma S + \varepsilon$ функция $g_d^{(1)}$ ведет себя как

$$g_d^{(1)} \sim \varepsilon^{-1/2} \ln(1/\varepsilon).$$

Сингулярность типа $\varepsilon^{-1/2}$ обусловлена образованием щели, логарифмическая сингулярность обусловлена вкладом обобщенных критических точек или точек ветвления.

Физический интерес представляет случай наличия одной дырки на элементарную ячейку $\rho = 1$, что соответствует значению $n_0 = 5$. При выбранных параметрах задачи и в отсутствие при $n_0 = 5$ электрон-дырочной симметрии, которая имеет место в обычной модели Хаббарда при $\rho = 1$, можно ожидать, что химический потенциал μ будет лежать в области энергий, где расположены ветви ω_1 и ω_2 .



Зона Бриллюэна для антиферромагнитного состояния.

Уравнения задачи при выполнении условия $\Phi_1/S^2 \ll 1$ имеют вид

$$F = \frac{2}{n_d} \Gamma + 4\beta^2 n_p^\sigma,$$

$$n_d = 1 + \beta^2 n_p^\sigma \Phi_1 + \frac{1}{n_d} \Phi_1 (\Gamma - \beta^2 n_p^\sigma),$$

$$n_p^\sigma = 1 - \frac{1}{4} \beta^2 n_p^\sigma + \frac{1}{4} \beta^2 n_p^\sigma \left(\frac{1}{2} n_d \Gamma - E \right). \quad (29)$$

Система (29) дополняется уравнением (21). Первое уравнение в (29) служит для определения значения спина S . Величины F , E и Γ в (29) определяются следующими интегралами:

$$\Gamma = \frac{2}{\pi^2} \int \int_p dk_x dk_y,$$

$$F = \frac{2}{\pi^2} \int \int_p dk_x dk_y [B_1(k_x, k_y)]^{-1},$$

$$E = \frac{2}{\pi^2} \int \int_p dk_x dk_y B_1(k_x, k_y). \quad (30)$$

Интегрирование в (30) идет по области I (см. рисунок), границы которой в двумерном k -пространстве определяются условиями занятости состояний

$$k_x a \leq \arcsin \sqrt{\cos^2 k_y a - \alpha_2},$$

$$k_y a \leq \arcsin \sqrt{1 - \alpha_2}. \quad (31)$$

Параметр $\alpha_2 (0 \leq \alpha_2 \leq 1)$ равен

$$\alpha_2 = [|(\bar{\mu}^2 - S^2)| \Phi_1]^{1/2},$$

$$\bar{\mu} = (\omega_0 - \mu) / \gamma \beta^2 n_p^\sigma. \quad (32)$$

Как видно, величина Γ равна площади области I . Для ветви $\omega_2(\mathbf{k})$ заняты состояния в области I , а для ветви $\omega_1(\mathbf{k})$ — в области II . При $\alpha_2 = 0$ ветвь ω_2 полностью заполнена, а при $\alpha_2 = 1$ пуста. В Приложении приведены выражения для величин F , E и Γ в предельных случаях $\alpha_2 \ll 1$ и $1 - \alpha_2 \ll 1$.

Из решения (21) и (29) при $n_0 = 5$ ($\rho = 1$) находим

$$S = \frac{1}{2}(1 - \beta^2), \quad n_d = 1 + \beta^2, \quad n_p^\sigma = 1 - \frac{1}{4}\beta^2, \quad \alpha_2 = 0, \quad \mu = \omega_{2 \max}, \quad (33)$$

так что ветвь $\omega_2(k)$ полностью заполнена. Данное состояние отличается от обычного антиферромагнетика Мотта-Хаббарда при $\rho = 1$.

Вследствие гибридационных эффектов для него характерно присутствие зарядовых флуктуаций, т.е. имеются малое порядка β^2 количество двоек $|\uparrow\downarrow\rangle$ в f - или g -подсистемах и такое же малое количество дырок $|\rho\sigma\rangle$ в j' -подсистеме. Этот результат не является следствием приближения среднего поля, а носит более общий характер. Можно утверждать, что в выбранной модели при принятом положении атомных уровней и конечных значениях U_d и U_p при $n_0 = 5$ всегда должно быть $n_d > 1$, $n_p^\sigma < 1$.

6. Выясним особенности поведения системы при допировании, полагая, что влияние последнего можно моделировать изменением положения химического потенциала или уровня Ферми. Очевидно, приближение среднего поля позволяет достаточно корректно исследовать только случаи очень слабого допирования, так как оно не учитывает важные динамические эффекты, возникающие при допировании. Положим $n_0 = 5 - \delta$ или $\rho = 1 + \delta$, где δ — величина допирования, дырочному случаю отвечают значения $\delta > 0$, а электронному $\delta < 0$. Начнем со случая слабого дырочного допирования $\delta/\beta^2 \ll 1$. Здесь можно воспользоваться разложением величин F , E , Γ в (30) в ряды по степеням $\alpha_2 \ll 1$ (см. Приложение 1).

Оставляя ведущие члены при условии $\Phi_1/S^2 \ll 1$, находим

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{2} \left[1 - \beta^2 \left(1 + \frac{2}{\pi^2} \alpha_2 \ln(4/\alpha_2) \right) \right], \\ n_d &= 1 + \beta^2 \left(1 - \frac{2}{\pi^2} \alpha_2 \ln(4/\alpha_2) \right), \\ n_p^\sigma &= 1 - \frac{1}{4} \beta^2 + O(\alpha_2 \beta^2). \end{aligned} \quad (34)$$

Уравнение (21) для μ или E_F принимает вид

$$\delta/\beta^2 = \frac{2}{\pi^2} \alpha_2 \ln(4/\alpha_2),$$

откуда следует

$$\alpha_2 \simeq \frac{\pi^2 \delta / 2 \beta^2}{1 + \ln(8\beta^2 / \pi^2 \delta)} = \xi. \quad (35)$$

Окончательно имеем

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{2} (1 - \beta^2) - \delta, \\ n_d &= 1 + \beta^2 - \delta, \\ n_p^\sigma &= 1 - \frac{1}{4} \beta^2 + O(\delta \beta^2), \\ E_F &= \omega_0 - \gamma \beta^2 \sqrt{S^2 + \Phi_1 \xi^2}. \end{aligned} \quad (36)$$

Согласно (36), положение уровня Ферми очень слабо зависит от δ . Это объясняется тем, что при $\delta \rightarrow 0$ уровень Ферми лежит в окрестности сингулярной функции $g_d^{(2)}(\omega)$ (см. (28)). Наличие такой исключительной сингулярности приводит к логарифмической перенормировке

и очень медленно изменению положения уровня Ферми. Такая картина, можно считать, соответствует «пиннинггованию» урона Ферми.

Исследуем другой предельный случай почти пустой подзоны $\omega_2(\mathbf{k})$. В области $(\beta^2 - \delta)/\beta^2 \ll 1$ можно воспользоваться разложением величин F , E и Γ по степеням $1 - \alpha_2 \ll 1$ (см. Приложение 2) и из уравнений (29) находим

$$S = \frac{1}{2} - (\beta^2 - \delta)/\beta^2, \quad n_d = 1 + \beta^2 - \delta,$$

$$n_p^\sigma = 1 - \frac{1}{4}\beta^2 + O(\delta\beta^2),$$

$$E_F = \omega_0 - \gamma\beta^2 \sqrt{\frac{1}{4} - (\beta^2 - \delta)}. \quad (37)$$

Согласно (37), при $\beta^2 = \delta$ ($\rho = 1 + \beta^2$) имеем $n_d = 1$, $S = 1/2$ и перескоки электронов между узлами i и j носят виртуальный характер. Данный результат, а также вывод о монотонной зависимости величины S от δ , который следует из (36), (37), нуждается в уточнении, так как приближение среднего поля, как уже отмечалось, не учитывает важные динамические эффекты, в первую очередь процессы с переворотом спина.

Рассмотрим теперь случай $\delta > \beta^2$. Уравнение для спина с точностью до членов порядка β^2 , β_1^2 принимает вид

$$S \left\{ n_d - 2\tilde{\gamma}(1 - n_d) + \frac{1}{2\tilde{\gamma}_1} [2w_2\Gamma + w_2^2 F_1 + E_1] \right\} = 0, \quad (38)$$

где величины F_1 и E_1 определяются интегралами типа (30) с заменой B_1 на B_2 (см. (26)). Интегрирование в соответствующих выражениях идет по области II, если $|w_2| > S$, и по области I, если $|w_2| < S$. Видно, что по сравнению с аналогичным уравнением (29) величины F_1 , а также E_1 в (38) имеют обратный знак и во всех случаях уравнение (38) имеет только тривиальное решение $S = 0$. Последнее означает, что при данных уровнях допирования рассматриваемое антиферромагнитное состояние не реализуется. Естественно, данный результат нуждается в уточнении в рамках более корректного приближения, однако, на наш взгляд, в режиме слабой гибридизации имеются определенные аргументы в пользу такого вывода. При $\delta > \beta^2$ по сравнению со случаем $\delta < \beta^2$ имеем качественно иную ситуацию. В силу наличия кулоновской щели в спектре квазичастиц уровень Ферми теперь лежит вдали от области локализованных d -состояний и в окрестности уровня Ферми велика плотность неполяризованных p -состояний и, наоборот, мала плотность d -состояний. В этих условиях трудно ожидать возникновения магнитноупорядоченного состояния.

7. Рассмотрим случай электронного допирования $\delta < 0$. уровень Ферми теперь лежит в подзоне $\omega_1(\mathbf{k})$. Уравнения задачи (18)–(20) при условии $\Phi_1/S^2 \ll 1$ и $1 - n_d \ll 1$ принимают вид

$$F = \frac{2}{n_d}(2 - \Gamma) + 4\beta^2 n_p^\sigma,$$

$$n_d = 2 - 4S^2/n_d - 2\Phi_1\Gamma/n_d,$$

$$n_p^\sigma = 1 - \frac{1}{4}\beta^2 n_p^\sigma \left(\frac{1}{2}\Gamma + E \right). \quad (39)$$

В случае слабого допирования $|\delta|/\beta^2 \ll 1$ из (39) получаем уравнения, отличающиеся от (34) изменением знака перед членом $\alpha_2 \ln(4/\alpha_2)$ в уравнении для n_d . При $|\delta| \rightarrow 0$ в рассматриваемом случае также происходит «пиннингование» уровня Ферми. Анализ уравнений приводит к выводу о монотонном уменьшении спина S с ростом $|\delta|$.

Вычислим энергию системы E в расчете на элементарную ячейку

$$E = \frac{1}{N_0} \left(\langle H_d + H_p \rangle + \langle H_{int} \rangle \right) = E_0 + E_1. \quad (40)$$

Здесь

$$E_0 = 2\varepsilon_{2d}\Phi_1 + 2\varepsilon_d(n_d - 2\Phi_1) + 4\varepsilon_p n_p^\sigma (1 - 2n_p^\sigma) + 4\varepsilon_{2p}(n_p^\sigma)^2. \quad (41)$$

При $\delta > 0$, $\delta \leq \beta^2$ для величины E_1 с учетом уравнения для спина S (29) получаем следующее выражение:

$$E_1 = -4\gamma\beta^2 n_d + 2\gamma\beta^4 - 2(\gamma - \gamma_1)\beta^2 \beta_1^2 + 8\gamma\tilde{\gamma}_1\beta_1^4 + \\ + 8\gamma\beta^2(\Phi_1\Gamma - 2S^2\beta^2). \quad (42)$$

Из (40)–(42) следует, что антиферромагнитное состояние энергетически более выгодно, чем парамагнитное. Сравнение с гамильтонианом Гейзенберга позволяет косвенно определить константу обменного взаимодействия

$$J \simeq -16t_0^4/\gamma^3.$$

В случае слабого электронного допирования выражение для E_1 отличается от (42) заменой последнего члена на $8\gamma\beta^2(\Phi_1(2 - \Gamma) - 2S^2\beta^2)$.

8. В заключение обсудим полученные результаты. Проведенный анализ позволил выявить некоторые качественные особенности антиферромагнитного состояния в двухзонной модели Хаббарда. В первую очередь необходимо указать на важную роль зарядовых флуктуаций и значительную асимметрию поведения при электронном и дырочном допировании. К настоящему времени исследованы особенности антиферромагнитного состояния в купратных соединениях $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+y}$, которые относятся к дырочному p -типу, и $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+y}$, которые относятся к электронному n -типу. Хотя для описания антиферромагнетизма в последнем случае необходимо несколько модифицировать выбранную модель, можно полагать, что качественные выводы не претерпят особых изменений. Согласно полученным результатам, реперная точка на фазовой диаграмме, отвечающая максимальному значению спина S и соответственно температуры Нееля T_N , не обязательно должна соответствовать значению $\rho = 1$. Эксперимент [3,4] не позволяет однозначно определить положение данной точки, так как в указанных соединениях даже при $x = 0$ практически всегда имеется некоторая нестехиометрия по кислороду. Зато эксперимент [3–5] однозначно свидетельствует о существенной асимметрии поведения при допировании

соединений p - и n -типов, при этом последние более стабильны. В дырочных соединениях происходит очень быстрое подавление антиферромагнетизма [5]. Естественно, анализ поведения антиферромагнитного состояния в данной модели при $\rho > 1$ нуждается, как уже отмечалось, в более корректном исследовании и при менее жестких ограничениях на параметры системы. Эффект «пиннигования» уровня Ферми наблюдается в соединениях p - и n -типов при $x \rightarrow 0$ [3,6]. Одной из причин этого явления может служить отмеченная выше роль ванхововских особенностей спектра квазичастиц.

Приложение

Приведем разложения для величин F , E и Γ в предельных случаях.
1. $\alpha_2 \ll 1$

$$\Gamma = 1 - \frac{2}{\pi^2} \chi + O(\alpha_2^2),$$

$$F = \frac{1}{S} \left[{}_3F_2 \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, 1; -\frac{\Phi_1}{S^2} \right) - \frac{2}{\pi^2} \chi + O(\alpha_2^2) \right],$$

$$E = S \left[{}_3F_2 \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, 1; -\frac{\Phi_1}{S^2} \right) - \frac{2}{\pi^2} \chi + O(\alpha_2^2) \right],$$

где ${}_3F_2(a, b, c; d, e, x)$ — обобщенная гипергеометрическая функция и $\chi = \alpha_2 (\ln(4/\alpha_2) - 1)$.

2. $1 - \alpha_2 \ll 1$

$$\Gamma = (1 - \alpha_2) + O(1 - \alpha_2)^{3/2},$$

$$F = 4(1 - \alpha_2)/n_d + O(1 - \alpha_2)^{3/2},$$

$$E = n_d(1 - \alpha_2) + O(1 - \alpha_2)^{3/2}.$$

Список литературы

- [1] Emery V.J. // Phys.Rev. Letts. 1987. V. 58. P. 2794–2797.
- [2] Изюмов Ю.А., Скрябин Ю.Н. Статистическая механика магнитноупорядоченных систем. М.: Наука, 1987. 264 с.
- [3] Элиашберг Г.М. // Сб. «Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников» / Под редакцией Д.М. Гинзберга. М.: Мир, 1990. 544 с.
- [4] Luke G.M. et al. // Phys. Rev. 1990. V. 42. N 13. P. 7981–7988.
- [5] Cho J.H., Chou F.C., Johnston D.C. // Phys. Rev. Letts. 1993. V. 70. N 2. P. 222–225.
- [6] Susuki T. et al. // Phys. Rev. 1990. V. 42. N 7. P. 4263–4271.

Санкт-Петербургский
государственный университет

Поступило в Редакцию
1 сентября 1993 г.