

Эффективное самосогласованное поле и фазовые переходы в $t-J$ -модели

© Э.Е. Зубов

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина Национальной академии наук Украины, Донецк, Украина

E-mail: zubov@dyakon.fti.ac.donetsk.ua

(Поступила в Редакцию 22 ноября 2007 г.
В окончательной редакции 7 апреля 2008 г.)

В рамках диаграммного метода теории возмущения исследовано влияние кинематического взаимодействия и косвенного обмена электронов на магнитную структуру узкозонного хаббардовского магнетика. Суммирование бесконечного ряда однопных диаграмм позволило выделить эффективное самосогласованное поле. В отличие от ранее известных работ представленная теория содержит всего два параметра самосогласования: химпотенциал и средний спин. Полученная система уравнений для указанных параметров допускает аналитическое решение при нулевой температуре. На примере концентрационных зависимостей температуры Нееля наглядно показана конкуренция простейшего кинематического вклада и косвенного антиферромагнитного обмена. На основе численного анализа внутренней энергии определены границы существования однородных ферро-, антиферро- и парамагнитных фаз в зависимости от электронной концентрации и величины косвенного обмена.

Работа частично поддержана Polish Ministry of Education and Science as a Targeted Research Project, over the period 2005–2008 (Project PBZ-KBN-115/T08/01).

PACS: 71.27.+a, 75.30.Ds, 75.30.Kz

1. Введение

Исследование структуры основного состояния $t-J$ -модели представляет интерес уже на протяжении многих лет, начиная с открытия ВТСП. Детальный анализ динамики одной дырки в антиферромагнитной (АФМ) матрице [1–3] показал струнный характер ее движения. Это послужило веским доказательством в пользу фазовой сепарации, так как движение дырки в ограниченной области приводит к разрушению АФМ-порядка и образованию ферромагнитно- (ФМ) упорядоченной частицы — феррона [4]. К сожалению, термодинамическое обобщение полученных результатов представляет значительные трудности, так как вид многочастичной волновой функции в этом случае существенно усложняется.

В ряде работ [5,6] применялся метод Монте-Карло для расчета электронной плотности в решетках небольшого размера. Учет дальнедействующего сильного кулоновского отталкивания привел к выводу, что размеры зарядовых кластеров не должны превышать нескольких постоянных решетки [6].

Одним из наиболее эффективных методов в описании термодинамики сильно коррелированной электронной системы является диаграммный метод теории возмущения. Его основы довольно подробно изложены в монографиях [7,8]. В частности, для $t-J$ -модели было построено обобщенное приближение хаотических фаз и исследована динамическая восприимчивость.

Целью настоящей работы является анализ влияния вкладов простейших диаграмм, возникающих в первом приближении теории возмущения, на структуру основного состояния в $t-J$ -модели. Основные уравнения

для намагниченности и химпотенциала представлены в работах авторов [9–12], анализ решений которых из-за сложного характера в основном охватывал только ФМ- и парамагнитную (ПМ) структуры. Далее главное внимание уделяется решению наиболее интересной задачи о движении дырок на АФМ-фоне.

2. Диаграммный метод теории возмущения в $t-J$ -модели

Гамильтониан $t-J$ -модели в пространстве электронных состояний со спинами вверх и вниз, а также дырки может быть представлен в терминах операторов Хаббарда в следующем виде [8]:

$$\hat{H} = \sum_{l,m,\sigma} t_{lm} X_l^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + \kappa \sum_{l,m} t_{lm} (X_l^{-+} X_m^{+-} - X_l^{++} X_m^{--}) - \mu \sum_{l,\sigma} X_l^{\sigma\sigma}, \quad (1)$$

где t_{lm} — интеграл перескока между ближайшими соседями, κt_{lm} — параметр АФМ-обменного взаимодействия ($\kappa > 0$), μ — химический потенциал, $\sigma = \pm 1$ — спиновый индекс. В дальнейшем часть гамильтониана (1), связанная с косвенным обменом, будет рассматриваться в приближении молекулярного поля (МП). Для средней узельной намагниченности $\langle S_l^z \rangle = \langle X_l^{++} - X_l^{--} \rangle / 2$ можно использовать представление [13] для неколлинеарной магнитной структуры в плоскости с помощью волнового вектора \mathbf{k} . Тогда (1) представим в виде

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}} + H_{\text{const}}$, где гамильтониан в нулевом приближении

$$\hat{H}_0 = 2\kappa \sum_l t(\mathbf{k}) \langle S^z \rangle (S_l \cos(\mathbf{k}\mathbf{r}_l) - S_l^\sigma \sin(\mathbf{k}\mathbf{r}_l)) - (\mu + \kappa t(0)n/2) \sum_{l,\sigma} X_l^{\sigma\sigma}, \quad (2)$$

$t(\mathbf{k}) = 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a))$ — Фурье-компонента интеграла перескока для простой кубической (ПК) решетки с параметром a в приближении ближайших соседей, когда $t_{lm} = t$. Гамильтониан возмущения записывается в виде $\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{l,m,\sigma} t_{lm} X_l^{\sigma 0} X_m^{0\sigma}$ и

H_{const} — неоператорная часть (1). Недиагональный гамильтониан (2) легко привести к диагональному виду с помощью локального унитарного преобразования $U_l = \exp(-i\psi_l S_l^y)$. Операторы Хаббарда в исходной системе преобразуются следующим образом: $X_l^{\sigma 0} = -\sigma \tilde{X}_l^{\sigma 0} \sim (\psi_l/2) + \tilde{X}_l^{\sigma 0} \cos(\psi_l/2)$. Тогда получаем

$$\hat{H}_0 = 2\kappa t(\mathbf{k}) \langle S^z \rangle \sum_l S_l^z - (\mu + \kappa t(0)n/2) \sum_{l,\sigma} \tilde{X}_l^{\sigma\sigma}, \quad (3)$$

и гамильтониан возмущения имеет следующий вид:

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{\langle lm \rangle \sigma} t_{lm} \left\{ \cos[\mathbf{k}(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)/2] \tilde{X}_l^{\sigma 0} \tilde{X}_m^{0\sigma} - \sigma \sin[\mathbf{k}(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m)/2] \tilde{X}_l^{\sigma 0} \tilde{X}_m^{0\sigma} \right\}. \quad (4)$$

Для простейших коллинеарных ФМ- и АФМ-структур с волновыми векторами $\mathbf{k}_F = (0, 0, 0)$ и $\mathbf{k}_{AF} = (\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ соответственно имеем уровни энергии в приближении МП $\varepsilon_\sigma^F = -\mu - \kappa t(0)[n/2 - \sigma \langle S^z \rangle]$ и $\varepsilon_\sigma = -\mu - \kappa t(0)[n/2 + \sigma \langle S^z \rangle]$ для ФМ- и АФМ-фаз соответственно. Здесь $t(0) = t(\mathbf{k}_F) = -t(\mathbf{k}_{AF}) = zt$, где $z = 6$ есть число ближайших соседей в ПК-решетке.

В АФМ-структуре в приближении МП запишем для комбинированных заселенностей $\langle F^{\sigma 0} \rangle = \langle X^{\sigma\sigma} + X^{00} \rangle = 1 - n/2 + \sigma \langle S^z \rangle$ следующую систему уравнений: $\langle F^{\sigma 0} \rangle_0 = (e^{-\beta\varepsilon_\sigma} + 1)/(1 + e^{-\beta\varepsilon_\sigma} + e^{-\beta\varepsilon_{-\sigma}})$, где $1/\beta = T$ — температура; символ $\langle \dots \rangle_0$ обозначает усреднение по гамильтониану (3) в приближении МП. Тогда средний спин определяется из самосогласованного уравнения

$$\langle S^z \rangle = \frac{n e^{\beta\kappa t(0)\langle S^z \rangle} - e^{-\beta\kappa t(0)\langle S^z \rangle}}{2 e^{\beta\kappa t(0)\langle S^z \rangle} + e^{-\beta\kappa t(0)\langle S^z \rangle}} \quad (5)$$

с химпотенциалом $\mu = T \ln[\sqrt{n^2/4 - \langle S^z \rangle^2}/(1 - n)] - \kappa t(0)n/2$. Из (5) следует, что при $T = 0$ имеем насыщенное АФМ-состояние с $\langle S^z \rangle = n/2$ и температурой Нееля $T_N = \kappa n t(0)/2$. Можно записать следующее выражение для „одетой“ эффективной линии взаимодействия [11,12] в случае ФМ-структуры:

$$\beta B_F^{\sigma 0,0\sigma}(\mathbf{q}, i\omega_p) = \beta t(\mathbf{q})(i\omega_p - \varepsilon_\sigma^F)/(i\omega_p - E_{q\sigma}^F),$$

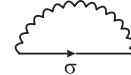
где $E_{q\sigma}^F = \varepsilon_\sigma^F + t(\mathbf{q})\langle F^{\sigma 0} \rangle$. Для АФМ-фазы имеем

$$\beta B_{AF}^{\sigma 0,0\sigma}(\mathbf{q}, i\omega_p) = \frac{\beta t^2(\mathbf{q})(i\omega_p - \varepsilon_\sigma)\langle F^{-\sigma 0} \rangle}{[(i\omega_p - \omega_{q\sigma})(i\omega_p - \omega_{q-\sigma})]},$$

где $\omega_p = (2p + 1)\pi T$ и резонансные частоты электронно-дырочных возбуждений

$$\omega_{q\sigma} = -\mu - \kappa t(0)n/2 - \sigma \sqrt{\kappa^2 t^2(0)\langle S^z \rangle^2 + t^2(\mathbf{q})\{(1 - n/2)^2 - \langle S^z \rangle^2\}}. \quad (6)$$

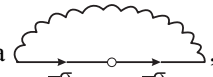
В первом неисчезающем приближении по обратному эффективному радиусу взаимодействия вклад в комбинированные электронно-дырочные заселенности

вносят диаграммы , в которых волнистая и прямая линии обозначают эффективное взаимодействие $\beta B_F^{\sigma 0,0\sigma}(\mathbf{q}, i\omega_p)$ или $\beta B_{AF}^{\sigma 0,0\sigma}(\mathbf{q}, i\omega_p)$ и нулевую гриновскую функцию $\beta G^{0\sigma}(i\omega_p) = 1/(i\omega_p - w_\sigma)$, где $w_\sigma = \varepsilon_\sigma^F$ или $w_\sigma = \varepsilon_\sigma$ соответственно. Указанные диаграммы $\delta\mu_\sigma$ аналитически представляются для ФМ-фазы в виде [11,12]

$$\begin{aligned} \delta\mu_\sigma^F &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\omega_p} \beta B_F^{\sigma 0,0\sigma}(\mathbf{q}, i\omega_p) G_{0\sigma}(i\omega_p) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} t(\mathbf{q}) f(E_{q\sigma}^F), \end{aligned} \quad (7)$$

где $\phi(x) = 1/(\exp(x) + 1)$. При АФМ-упорядочении имеем $\delta\mu_\sigma = \langle F^{\sigma 0} \rangle \delta\mu$, где

$$\delta\mu = \frac{1}{N} \sum_q \frac{t^2(\mathbf{q})}{\omega_{q+} - \omega_{q-}} \{f(\omega_{q+}) - f(\omega_{q-})\}. \quad (8)$$

Также в $\langle F^{\sigma 0} \rangle$ вносит вклад диаграмма , которую в общем случае обозначим через v_σ . Для ФМ-фазы v_σ имеет вид

$$\begin{aligned} v_\sigma^F \langle F^{\sigma 0} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}\omega_p} \beta B_F^{\sigma 0,0\sigma}(\mathbf{q}, i\omega_p) (G^{0\sigma}(i\omega_p))^2 \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} f(E_{q\sigma}^F) - f(\varepsilon_\sigma), \end{aligned} \quad (9)$$

аналогично для АФМ-фазы

$$\begin{aligned} v_\sigma \langle F^{\sigma 0} \rangle &= \frac{-\sigma \kappa t(0)\langle S^z \rangle}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{f(\omega_{q+}) - f(\omega_{q-})}{\omega_{q+} - \omega_{q-}} \\ &+ \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \{f(\omega_{q+}) + f(\omega_{q-})\} - f(\varepsilon_\sigma). \end{aligned} \quad (10)$$

Поскольку в качестве параметра самосогласования выступает средний спин $\langle S^z \rangle$, в формулах (6)–(10) мы осуществили естественную замену $\langle F^{\sigma 0} \rangle_0 \rightarrow \langle F^{\sigma 0} \rangle$.

Вклады диаграмм $\delta\mu_\sigma$ порождают тейлоровский ряд для комбинированной заселенности $\langle F^{\sigma 0} \rangle_1$, который легко суммируется [7,11,12], т.е. $\langle F^{\sigma 0} \rangle_1 = (e^{\beta E_\sigma} + 1)/(1 + e^{\beta E_\sigma} + e^{\beta E_{-\sigma}})$, где $E_\sigma = -\varepsilon_\sigma + \delta\mu_{-\sigma}$. Теперь с учетом диаграммы ν_σ запишем систему самосогласованных уравнений для химпотенциала и намагниченности

$$1 - n/2 + \sigma \langle S^z \rangle = \langle F^{\sigma 0} \rangle_1 - \nu_{-\sigma} \langle F^{\sigma 0} \rangle. \quad (11)$$

Произведение двух частот (6) дает выражение

$$\omega_{q^+} \omega_{q^-} = \varepsilon_+ \varepsilon_- - t^2(\mathbf{q}) \{ (1 - n/2)^2 - \langle S^z \rangle^2 \}. \quad (12)$$

Если $\varepsilon_\sigma > 0$, то и $\omega_{q\sigma} > 0$ при $\langle S^z \rangle > -n/2$. Из системы уравнений (11) получаем, что в этом случае все вклады от диаграмм исчезают при $T = 0$ и реализуется АФМ локализованных спинов, который описывается в приближении МП. В используемом приближении мы не исключаем наличие решений $n/2 < \langle S^z \rangle \leq 1 - n/2$. Эту область сверхнасыщения назовем областью сильных квантовых флуктуаций. Очевидно, что в этой области для корректного описания насыщенного состояния необходимо учитывать вклады диаграмм более высокого порядка.

Будем решать систему (11) для АФМ-структуры в простейшем случае $\nu_\sigma \langle F^{\sigma 0} \rangle = 0$, когда $\omega_{q\sigma} = \varepsilon_\sigma$. Самосогласованное уравнение для среднего спина имеет такой же вид, как и (5); в нем вместо параметра $\kappa t(0)$ фигурирует новый обменный параметр $\tilde{\kappa} t(0) = \kappa t(0) + \delta\mu$, где

$$\delta\mu = -t(0)(f(\varepsilon_+) - f(\varepsilon_-))/(12\kappa \langle S^z \rangle), \quad (13)$$

выражающий конкуренцию положительного АФМ-косвенного обмена и отрицательного ФМ-кинематического вклада. Таким образом, АФМ-упорядочение существует только при $\tilde{\kappa} > 0$.

Химпотенциал определяется выражением

$$\mu = T \ln \left[\sqrt{n^2/4 - \langle S^z \rangle^2} / (1 - n) \right] - (1 - n/2)\delta\mu - \kappa n t(0)/2. \quad (14)$$

Из самосогласованного уравнения для $\langle S^z \rangle$ типа (5) с $\tilde{\kappa}$ флуктуационный вклад $\delta\mu$ выражается только через средний спин

$$\delta\mu = -\kappa t(0) + T \ln \left[(n + 2\langle S^z \rangle) / (n - 2\langle S^z \rangle) \right] / (2\langle S^z \rangle). \quad (15)$$

Используя равенства (13)–(15), легко записать самосогласованное уравнение для $\langle S^z \rangle$, не содержащее химпотенциал μ . Решая его численно, можно из (14) найти и химпотенциал. В случае низких температур $T \ll T_N$ в линейном приближении химпотенциал $\mu = T \ln(1/(6\kappa^2 n^2) - 1)$, а электронные уровни энергии $\varepsilon_- = -T \ln(1/(6\kappa^2 n^2) - 1)$, $\varepsilon_+ = \varepsilon_- - \kappa t(0)n$.

На рис. 1 представлены температурные зависимости среднего спина в АФМ-подрешетке при $\kappa = 0.1$ и

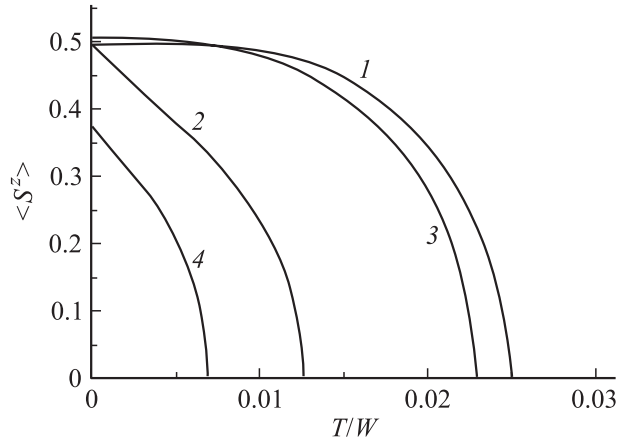


Рис. 1. Температурные зависимости (в единицах ширины зоны W) среднего спина при значениях параметров $\kappa = 0.1$ и $n = 0.99$ в приближении молекулярного поля (1), с учетом простейшего кинематического вклада (2), а также с учетом всех вкладов в первом неисчезающем порядке теории возмущения (3) и при $n = 0.9$ (4).

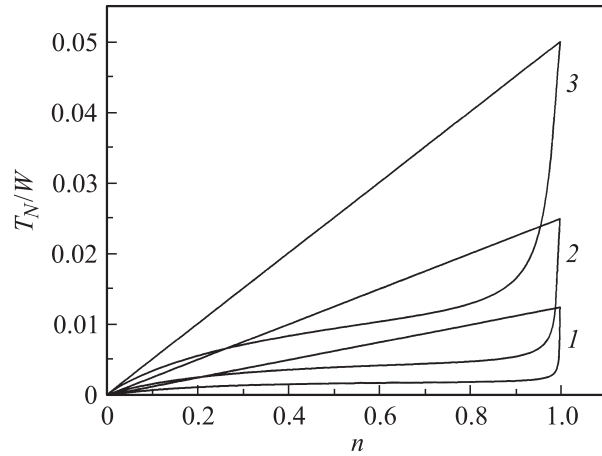


Рис. 2. Концентрационные зависимости температуры Нееля T_N при значениях АФМ-косвенного обмена $\kappa = 0.05$ (1), 0.1 (2) и 0.2 (3) с учетом кинематического вклада. Прямые линии, примыкающие к концам указанных кривых, рассчитаны в приближении молекулярного поля для данных выше величин κ соответственно.

$n = 0.99$ в приближении МП (кривая 1) и в рамках рассматриваемого приближения (кривая 2) на основе решения полученного самосогласованного уравнения для $\langle S^z \rangle$. Температура измеряется в единицах ширины зоны $W = 2t(0)$. Из рисунка видно, что АФМ-порядок сильно разрушается под воздействием электронных прыжков. На рис. 2 изображены концентрационные зависимости температуры Нееля T_N при различных значениях параметра обмена (кривые линии 1–3 для $\kappa = 0.05, 0.1$ и 0.2 соответственно). Прямые линии, замыкающие их в петли, соответствуют T_N в приближении МП. Из рисунка хорошо видно достаточно резкое уменьшение критической температуры при отклонении n от поло-

винного заполнения зоны. Также видно, что данное приближение не предсказывает полного разрушения АФМ-порядка вплоть до $n = 0$.

3. Фазовая диаграмма в t - J -модели

Для построения фазовой диаграммы будем теперь решать систему уравнений (11) с учетом вклада диаграммы v_σ для АФМ-, ФМ- и МП-структур.

Для АФМ-упорядоченного состояния на рис. 1 показаны температурные зависимости среднего спина АФМ-подрешетки, полученные численным решением системы (11) при $\kappa = 0.1$, $n = 0.9$ и 0.9 (кривые 3 и 4 соответственно). Из рисунка видно, что при $T/W < 0.006$ средний спин при $n = 0.99$ немного превышает его среднее значение $n/2$ для насыщения. Можно считать, что ниже указанной температуры квантовые флуктуации преобладают над тепловыми, и необходимо, по-видимому, учитывать более высокие порядки теории возмущения, чтобы получить корректные величины насыщения. С другой стороны, при $n = 0.9$ (кривая 4) видим, что величина насыщения спина меньше значения $n/2$. Это является отражением разрушительного воздействия электронных прыжков на АФМ-порядок.

Из системы (11) легко получить уравнения для T_N и химпотенциала в критической точке, разлагая в ряд указанные выражения по малому параметру $\langle S^z \rangle$. На рис. 3 изображены концентрационные зависимости температуры Нееля при значениях параметра обмена $\kappa = 0.1$ и 0.2 , полученные численным решением системы уравнений (11). Из рисунка видно, что при слабом косвенном обмене существует критическая концентрация, при которой температура Нееля обращается в нуль. С ростом параметра обмена влияние электронной динамики на антиферромагнетизм ослабевает. При $\kappa = 0.2$ T_N отлична от нуля при любой дырочной концентрации. Из условия $T_N \rightarrow 0$ в (11) легко найти критическое значение величины $\kappa_{cr}(n)$, при котором АФМ-порядок

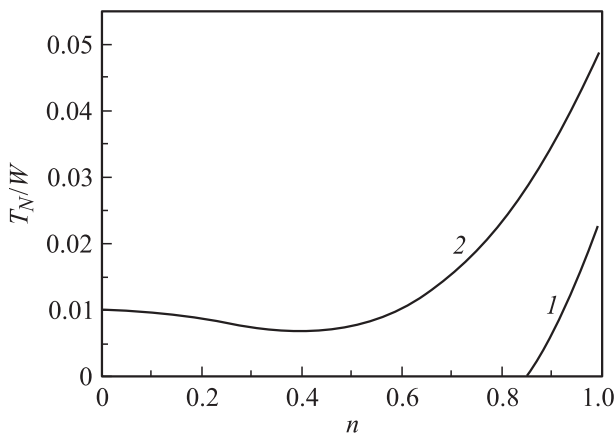


Рис. 3. Концентрационные зависимости температуры Нееля при значениях параметра обмена $\kappa = 0.1$ (1) и 0.2 (2), полученные численным решением системы уравнений (11).

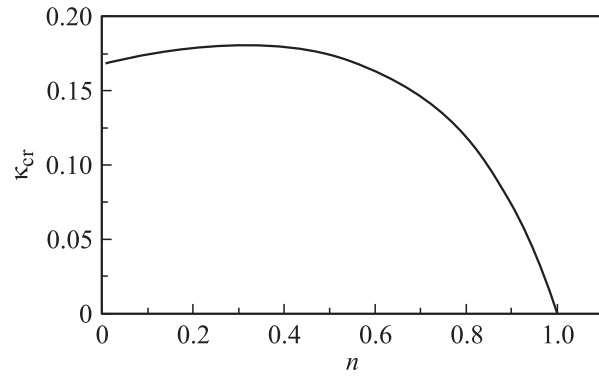


Рис. 4. Критическое значение величины косвенного обмена $\kappa_{cr}(n)$, ниже которого АФМ-порядок разрушается.

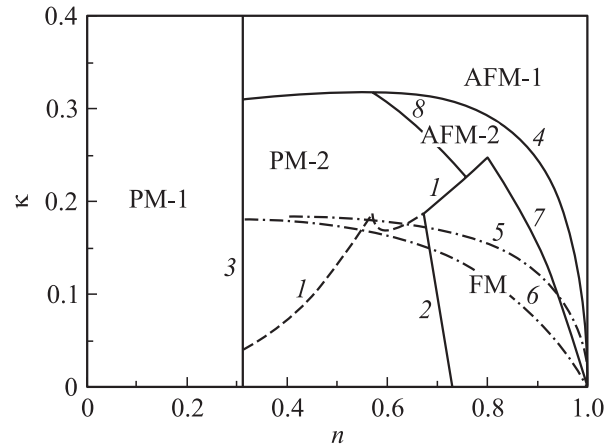


Рис. 5. Магнитная фазовая диаграмма в t - J -модели. Номера линий обозначены в соответствии с данными по тексту объяснениями.

разрушается. На рис. 4 представлена зависимость $\kappa_{cr}(n)$. Во всей области ниже кривой АФМ-порядок разрушен.

Рассмотрим теперь ФМ-структуру. Численный анализ (11) с $\delta\mu = \delta\mu_\sigma^F$ и $v_\sigma = v_\sigma^F$ показывает, что с увеличением параметра κ область существования ФМ-фазы по температуре сужается. В полной аналогии с исследованием АФМ-фазы вблизи фазового перехода не составляет труда записать выражение для температуры Кюри T_C . В частности, в низкотемпературном приближении, когда фермиевские функции заменяются ступенчатой функцией Хэвисайда, легко найти критическое значение обмена $\kappa_{crF}(n)$, когда происходит полное разрушение ФМ-порядка, т.е. $T_C = 0$ при $\kappa = \kappa_{crF}(n)$. На рис. 5 представлена фазовая диаграмма при $T = 0$, на которой зависимость $\kappa_{crF}(n)$ обозначена сплошной и штриховой линией 1. Обозначение части кривой 1 в виде штриховой линии связано с тем, что в области под этой линией, а также между линиями 2 и 3 квантовые флуктуации являются достаточно сильными из-за большого количества дырок. В результате имеем решение для $\langle S^z \rangle > n/2$, т.е. нефизичное сверхнасыщение. В этой области, по-видимому, нужно учитывать следующие поряд-

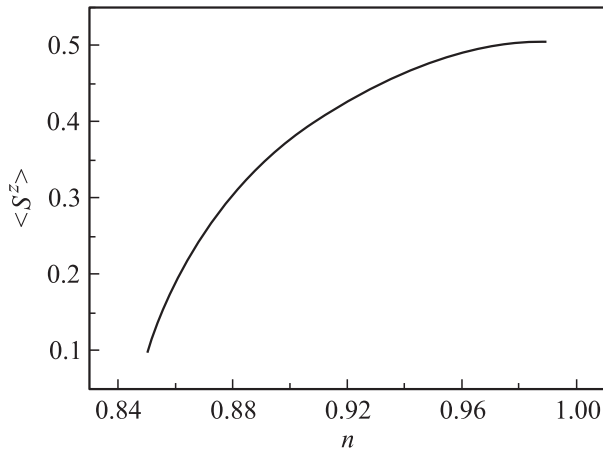


Рис. 6. Концентрационная зависимость среднего спина антиферромагнитной подрешетки при $T = 0$ и $\kappa = 0.1$.

ки теории возмущения. Чтобы определить границы указанной области, рассмотрим решения системы (11) при $T = 0$ для ФМ- и ПМ-структур. Так, для ФМ-структуры при выполнении условий $-6\epsilon_-/\langle F^{-0} \rangle \geq 3$ и $\langle F^{+0} \rangle_1 = 1$, $\langle F^{-0} \rangle_1 = 0$ имеем решение $\langle S^z \rangle = n/2$, соответствующее насыщенному ФМ с химпотенциалом $\mu_F/W = I^{-1}(n)/6$, где $I(x) = \int_{-3}^x D_c(x) dx$, а $I^{-1}(x)$ — обратная функция, $D_c(x) = \frac{1}{N} \sum_q \delta(x - t(q)/(2t))$, $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака. Легко проверить, что данное решение удовлетворяет всем поставленным выше условиям при $\kappa \geq \kappa_0(n)$, где $\kappa_0(n) = (1 - n)/n - I^{-1}(n)/(3n)$. Функция $\kappa_0(n)$ обозначена на рис. 5 линией 2.

В ПМ-фазе существуют два решения для химпотенциала, что соответствует газовым пределам по электронной (фаза ПМ-1) и дырочной (фаза ПМ-2) концентрациям. Переход из фазы ПМ-2 в фазу ПМ-1 происходит при критической концентрации $n = n_{\text{срПМ}} \approx 0.31055$, когда химпотенциал скачком изменяет знак с положительного на отрицательный. На фазовой диаграмме (рис. 5) это значение критической концентрации показано вертикальной линией 3.

Наиболее сложным является рассмотрение предельного перехода $T \rightarrow 0$ для АФМ-структуры при $v_\sigma \neq 0$. Будем предполагать, что $\tilde{\kappa}/2 = CT$, где C — неизвестный параметр, который не зависит от температуры. Уравнение для среднего спина $\langle S^z \rangle$ при $T = 0$ получаем из условия $\tilde{\kappa} = 0$

$$\int_{I^{-1}((1+n)/2)}^3 dx D_c(x) \frac{x^2}{G(\kappa, n, \langle S^z \rangle, x)} = 3\kappa, \quad (16)$$

где

$$G(\kappa, n, \langle S^z \rangle, x) = \sqrt{9\kappa^2 \langle S^z \rangle^2 + [(1 - n/2)^2 - \langle S^z \rangle^2] x^2}.$$

На рис. 6 изображена концентрационная зависимость среднего спина при $T = 0$ и $\kappa = 0.1$, полученная чис-

ленным решением уравнения (16). Из рисунка видно, что с ростом дырочной концентрации намагниченность насыщения подрешетки уменьшается.

Легко проверить, что решения (16) удовлетворяют всем поставленным заранее условиям, когда $\langle S^z \rangle \leq 1 - n/2$. Это неравенство определяет на фазовой диаграмме верхнюю границу делокации дырок (линия 4 на рис. 5), ниже которой нарушается АФМ-структура локализованных спинов и которая выражается в виде

$$\kappa_{\text{loc}} = \frac{1}{3} \sqrt{\int_{I^{-1}((1+n)/2)}^3 dx D_c(x) x^2 / (1 + n/2)}.$$

На фазовой диаграмме (рис. 5) фаза АФМ-1 является АФМ-фазой с локализованными спинами, в которой все кинематические вклады от \tilde{H}_{int} в намагниченность системы отсутствуют. В области фазы АФМ-2 имеем достаточно сильные квантовые флуктуации, и точности теории недостаточно, что дает несколько завышенное значение намагниченности насыщения. На рис. 5 в области ниже штрихпунктирной линии 5 средний спин $\langle S^z \rangle \leq n/2$. На линии 6 намагниченность АФМ-подрешетки обращается в нуль. Линии 7 и 8, которые определяют границы раздела между АФМ-фазой, с одной стороны, и структурами ФМ и ПМ-2, с другой стороны, соответственно, рассчитывались на основе сравнения внутренних энергий $E = \Omega + \mu n$ (где $\Omega = \langle \tilde{H}_0 + \tilde{H}_{\text{int}} + H_{\text{const}} \rangle$) фаз ФМ, ПМ-1 и ПМ-2 при $T = 0$.

4. Заключение

В представленной теории эффективного самосоглазованного поля для t - J -модели в термодинамическом пределе показано, что реализация различных однородных магнитных структур обусловлена сложным характером конкурирующих обменных и кинематических взаимодействий электронов. Анализ вкладов диаграмм простейшего вида в уравнения для намагниченности, химпотенциала, а также в выражения для внутренней энергии позволил построить фазовую диаграмму в координатах косвенный обмен-электронная концентрация при нулевой температуре. Исследовано влияние температуры на параметр порядка ФМ- и АФМ-структур и предсказан концентрационный срыв температуры Нееля, наблюдаемый экспериментально в ВТСП-системах. Следует отметить, что полученные нами концентрационные зависимости температур Кюри и Нееля согласуются с аналогичными результатами работы [14].

На фазовой диаграмме установлена область сильных квантовых флуктуаций, в которой намагниченность насыщения АФМ-подрешетки достигает нефизического сверхнасыщения. Данный результат указывает на необходимость учета диаграмм более высокого порядка и требует отдельного рассмотрения

Авторы выражают благодарность В.П. Дьяконову за ряд важных замечаний, сделанных в процессе обсуждения статьи.

Список литературы

- [1] Л.Н. Булаевский, Э.Л. Нагаев, Д.И. Хомский. ЖЭТФ. **54**, 1562 (1968).
- [2] W.F. Brinkman, T.M. Rice. Phys. Rev. B **2**, 1324 (1970).
- [3] C.L. Kane, P.A. Lee, N. Read. Phys. Rev. B **39**, 6880 (1989).
- [4] E.L. Nagaev. Phys. Rep. **346**, 387 (2001).
- [5] S. Yunoki, J. Hu, A.L. Malvezzi, A. Moreo, N. Furukawa, E. Dagotto. Phys. Rev. Lett. **80**, 845 (1998).
- [6] E. Dagotto, T. Hotta, A. Moreo. Phys. Rep. **344**, 1 (2001).
- [7] Ю.А. Изюмов, Ю.Н. Скрябин. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. Наука, М. (1987). 264 с.
- [8] Ю.А. Изюмов, М.И. Кацнельсон, Ю.Н. Скрябин. Магнетизм коллективизированных электронов. Физматлит, М. (1994). С. 93.
- [9] E. Zubov, V. Dyakonov, H. Szymczak. J. Phys.: Cond. Matter **18**, 6699 (2006).
- [10] Э.Е. Зубов, В.П. Дьяконов, Г. Шимчак. ЖЭТФ **122**, 6 (12), 1 (2002).
- [11] Э.Е. Зубов. ТМФ **105**, 311 (1995).
- [12] Э.Е. Зубов. ФНТ **19**, 274 (1993).
- [13] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. Наука, М. (1982). 253 с.
- [14] Yu.A. Izyumov, B.M. Letfulov, E.V. Shipitsyn. J. Phys.: Cond. Matter **6**, 5137 (1994).