

Магнитные состояния и переход металл–изолятор в сильно коррелированных системах (Миниобзор)

В. Ю. Ирхин¹⁾, П. А. Игошев

Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения РАН, 620108 Екатеринбург, Россия

Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина, 620002 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 17 мая 2019 г.

После переработки 17 мая 2019 г.

Принята к публикации 23 мая 2019 г.

Анализируются различные подходы вспомогательных частиц для рассмотрения электронных корреляций в многоэлектронных моделях, в том числе в приложении к слоистым медно-оксидным системам. Рассматриваются магнитные фазовые диаграммы основного состояния в рамках $t-t'$ модели Хаббарда и $s-d$ обменной модели для квадратной и кубических решеток в зависимости от заполнения зоны и параметра взаимодействия с учетом коллинеарных ферро-, антиферромагнитных и несоизмеримых (спиральных) магнитных фаз, а также магнитного разделения фаз. Используется обобщенное приближение Хартри–Фока и подход вспомогательных бозонов, учитывающий корреляции. Последний дает корректный учет вклада в энергию числа дважды занятых узлов и адекватное описание парамагнитной фазы. В рамках численных расчетов и аналитического разложения по интегралу переноса между вторыми соседями t' и прямой антиферромагнитной щели Δ получен критерий перехода металл–изолятор. В случае квадратной решетки род перехода изменяется со второго на первый при увеличении t' при малом $t' \sim 0.05t$, что связано с наличием сингулярности ван Хова вблизи центра зоны. Для простой и объемноцентрированной кубических решеток переход из изоляторного антиферромагнитного состояния происходит в фазу антиферромагнитного металла и является переходом второго рода; за ним следует переход в парамагнитный металл. Эти результаты видоизменяются при учете межузельного гейзенберговского взаимодействия, которое может приводить к смене рода перехода на первый.

DOI: 10.1134/S0370274X19130071

1. Введение. Электронные и магнитные свойства сильно коррелированных соединений переходных металлов и их связь с легированием, геометрией решетки, зонной структурой и параметрами взаимодействия – перспективный раздел современной физики твердого тела. В последние десятилетия активно исследуется двумерный (2D) случай, тесно связанный с проблемой высокотемпературной сверхпроводимости в купратах [1, 2] и пниктидах железа [3]. Недавно интерес к этому случаю дополнительно вырос в связи с открытием крайне узкой коррелированной зоны в двухслойном графене [4] (см. также [5]).

Основное состояние сильно коррелированных систем характеризуется конкуренцией ферромагнитного (ФМ) и антиферромагнитного (АФМ) упорядочения, которая может приводить к возникновению спирального упорядочения [6] или магнитного фазового расслоения [6–8]. Особый

интерес представляет переход металл–изолятор в системах взаимодействующих электронов. Он может быть реализован в рамках двух сценариев [9, 10]: моттовский переход (для систем с сильными корреляциями при высоких температурах) и слэтеровский сценарий (реализуется для зонного антиферромагнетика при низких температурах). Присутствие сингулярностей ван Хова в плотности электронных состояний вблизи поверхности Ферми может существенно изменить физические свойства, в частности, термодинамику фазового перехода [6, 8, 11–13].

В последнее время интенсивно изучаются также необычные возбуждения и экзотические состояния в сильно коррелированных твердых телах и других конденсированных средах, например, различные типы спиновых жидкостей, состояния с топологическим и квантовым порядком [2, 14].

В данном обзоре мы рассмотрим соответствующие проблемы в рамках ряда многоэлектронных моделей.

¹⁾e-mail: valentin.irkhin@imp.uran.ru

2. Теоретические модели и представления вспомогательных частиц. Для описания свойств систем с сильными корреляциями используются многоэлектронные (МЭ) модели, такие, как модель Хаббарда, модель Эмери, $s-d$ обменная модель и решетка Андерсона. Они широко применяются, например, для купратов с высоким T_c и редкоземельных соединений. Существуют определенные соответствия между этими моделями в различных областях параметров. Предельным случаем ($U \rightarrow \infty$) модели Хаббарда является однозонная $t-J$ модель, где учитывается обменное взаимодействие между локализованными спинами. Хотя она позволяет рассмотреть ряд экзотических фаз и успешно применяется к физике купратов (базисных систем для высокотемпературных сверхпроводников, ВТСП) [2, 15], соответствующие приближения трудно контролировать из-за отсутствия малого параметра: простота модели часто не обеспечивает удобства теоретического исследования.

Гамильтониан модели Хаббарда [16] с учетом прямого обмена имеет вид

$$\mathcal{H}_H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad (1)$$

где $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) – операторы рождения (уничтожения) электронов, $t_{ij} = -t$ и t' для ближайших и следующих за ними соседей, U – матричный элемент кулоновского взаимодействия на узле, $\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma'}$.

Гамильтониан $s-d$ обменной модели содержит две подсистемы – коллективизированных и локализованных электронов:

$$\mathcal{H}_{s-d} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'} - I \sum_{i\sigma\sigma'} \mathbf{S}_i c_{i\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma'}, \quad (2)$$

где \mathbf{S}_i – оператор локализованного спина.

В пределе большого U и при заполнении полосы $n < 1$ (дырочное допирование) модель Хаббарда сводится к $t-J$ модели

$$\mathcal{H}_{t-J} = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} X_i(0\sigma) X_j(\sigma 0) + \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j. \quad (3)$$

где $X_i(\Gamma, \Gamma') = |\Gamma_i\rangle \langle \Gamma'_i|$ – X-операторы Хаббарда, действующие в локальном подпространстве [17], эффективное $J_{ij} = 4t_{ij}^2/U$.

При аналитических и численных расчетах удобно использовать представления вспомогательных слейв (*slave*) бозонов и фермионов. Андерсон [15], используя идею разделения спиновых и зарядовых степеней свободы электрона, ввел представление ($\sigma = \pm 1$):

$$c_{i\sigma}^\dagger = X_i(\sigma, 0) + \sigma X_i(2, -\sigma) \rightarrow f_{i\sigma}^\dagger e_i + \sigma d_i^\dagger f_{i-\sigma}, \quad (4)$$

$f_{i\sigma}$ – операторы рождения нейтральных фермионов (спинонов), а e_i^\dagger , d_i^\dagger – заряженных бесспиновых бозонов (голонов и дублонов). При больших U мы должны сохранить только голоны или дублоны для дырочного или электронного допирования соответственно.

Более сложное представление, предложенное Котляром и Рукенштайном [18], использует четыре бозонных оператора e_i , $p_{i\sigma}$, d_i , так что

$$c_{i\sigma}^\dagger \rightarrow f_{i\sigma}^\dagger z_{i\sigma}^\dagger \quad (5)$$

где $f_{i\sigma}$, $f_{i\sigma}^\dagger$ – фермиевские операторы

$$z_{i\sigma}^\dagger = (1 - e_i^\dagger e_i - p_{i-\sigma}^\dagger p_{i-\sigma})^{-1/2} (p_{i\sigma}^\dagger e_i + d_i^\dagger p_{i-\sigma}) \times (1 - d_i^\dagger d_i - p_{i\sigma}^\dagger p_{i\sigma})^{-1/2}. \quad (6)$$

Имеется также вращательно инвариантная версия [19]

$$c_{i\sigma}^\dagger = \sum_{\sigma'} f_{i\sigma'}^\dagger z_{i\sigma'\sigma}^\dagger, \quad \hat{z}_i = e_i^\dagger \hat{L}_i M_i \hat{R}_i \hat{p}_i + \hat{p}_i^\dagger \hat{L}_i M_i \hat{R}_i d_i, \quad (7)$$

где множители L, M, R аналогичны (6), скалярные и векторные бозоны p_{i0} и \mathbf{p}_i вводятся как $\hat{p}_i = \frac{1}{2}(p_{i0}\sigma_0 + \mathbf{p}_i \boldsymbol{\sigma})$ и \hat{p}_i – обращенный по времени оператор \hat{p}_i . Эта версия подходит для магнитоупорядоченных фаз, позволяя учесть поправки от спиновых флуктуаций. В частности, она может простым способом описывать неквазичастичные состояния вследствие электрон-магнонного рассеяния, которые ранее рассматривались в многоэлектронном представлении операторов Хаббарда (ср. [20, 21]). В случае магнитной фазы и малой концентрации носителей тока (дырок) можно приближенно записать

$$\tilde{c}_{i\sigma} = \sqrt{2} \sum_{\sigma'} \hat{p}_{i\sigma'\sigma} f_{i\sigma'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma'} f_{i\sigma'} [\delta_{\sigma\sigma'} p_{i0} + (\mathbf{p}_i \boldsymbol{\sigma}_{\sigma'\sigma})]. \quad (8)$$

Исходной моделью для описания купратов является трехзонная $p-d$ модель

$$\mathcal{H}_{pd} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[\varepsilon p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger p_{\mathbf{k}\sigma} + \Delta d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma} + V_{\mathbf{k}} (p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma} + d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger p_{\mathbf{k}\sigma}) \right] + U \sum_i d_{i\uparrow}^\dagger d_{i\uparrow} d_{i\downarrow}^\dagger d_{i\downarrow}, \quad (9)$$

где ε и Δ – положения p - и d -уровней для O- и Cu-ионов, $V_{\mathbf{k}} = 2V_{pd} (\sin^2 k_x + \sin^2 k_y)^{1/2}$ – матричные элементы $p-d$ гибридизации (ср. [22]). В пределе больших U мы можем использовать представление слейв-бозонов $d_{i\sigma}^\dagger \rightarrow X_i(\sigma 0) = f_{i\sigma}^\dagger e_i$.

При $|V_{pd}| \ll \varepsilon - \Delta$ (большая щель для переноса заряда) гамильтониан (9) снова сводится каноническим преобразованием к t - J модели с $t_{\text{eff}} = V_{pd}^2/(\varepsilon - \Delta)$. Интересно, что t - J модель, полученная из однозонной модели Хаббарда, также формально сводится к аналогичной структуре в представлении (6) со вспомогательными, а не физическими частицами p_i . Таким образом, модель Хаббарда и модель (9) могут рассматриваться параллельно [22].

Для описания допированных купратов было предложено также представление фермиевских допонов $d_{i\sigma}^\dagger$ [23, 24],

$$\tilde{c}_{i-\sigma} = -\frac{\sigma}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma'} d_{i\sigma'}^\dagger (1 - n_{i-\sigma'}) [S\delta_{\sigma\sigma'} - (\mathbf{S}_i \sigma \sigma')], \quad (10)$$

где $\sigma = \pm 1$, $n_{i\sigma} = d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma}$, причем для подсистемы локализованных спинов $S = 1/2$ могут быть использованы как фермиевское спиновое представление, так и бозонное представление Швингера. Учет гибридизации между допонами и фермиевскими спинами дает описание в рамках эффективной двухзонной модели [23].

Перепишывая (10) как

$$\tilde{c}_{i\sigma} = (d_{i\downarrow}^\dagger f_{i\uparrow}^\dagger - d_{i\uparrow}^\dagger f_{i\downarrow}^\dagger) f_{i\sigma} \quad (11)$$

и вводя голонный оператор $e_i = f_{i\uparrow}^\dagger d_{i\downarrow} - f_{i\downarrow}^\dagger d_{i\uparrow}$, мы возвращаемся к представлению Андерсона (4). При этом, однако, возникает трудность с множителем $1/\sqrt{2}$, которая обсуждается в [21].

Слейв-бозонное представление $SU(2)$ теории [2], которое используется при описании спинжидкостных состояний, вводит фермиевские спиновые операторы и два бозевских голонных оператора:

$$\begin{aligned} \tilde{c}_{i\uparrow} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (b_{i1}^\dagger f_{i\uparrow}^\dagger + b_{i2}^\dagger f_{i\downarrow}^\dagger), \\ \tilde{c}_{i\downarrow} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (b_{i1}^\dagger f_{i\downarrow}^\dagger - b_{i2}^\dagger f_{i\uparrow}^\dagger). \end{aligned} \quad (12)$$

Соответствие с допонным представлением может быть установлено заменой голонных операторов $b_{i,1}$ спинон-допонной синглетной парой $f_{i,\uparrow}^\dagger d_{i,\downarrow} - f_{i,\downarrow}^\dagger d_{i,\uparrow}$, а операторов $b_{i,2}$ — парой $f_{i,\uparrow}^\dagger d_{i,\uparrow} + f_{i,\downarrow}^\dagger d_{i,\downarrow}$ [23].

3. Магнитные фазовые диаграммы. Рассмотрим магнитную структуру — спираль в плоскости x - y , определяемую волновым вектором \mathbf{Q} , для которой средняя узельная намагниченность $\mathbf{m}_i = 2\mathbf{S}_i$ имеет вид

$$\langle \mathbf{m}_i \rangle = m(\hat{\mathbf{x}} \cos(\mathbf{Q}\mathbf{R}_i) + \hat{\mathbf{y}} \sin(\mathbf{Q}\mathbf{R}_i)). \quad (13)$$

После локального поворота в спиновом пространстве на угол $\mathbf{Q}\mathbf{R}_i$ гамильтониан Хаббарда в приближении

Хартри-Фока (HFA — *Hartree-Fock approximation*) с точностью до постоянных вкладов принимает вид

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{HFA}} = \sum_{ij\sigma\sigma'} t_{ij}^{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'} + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} (Un - \sigma U_{\text{eff}}(\mathbf{Q})m) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}, \quad (14)$$

где n — электронная концентрация, $t_{ij}^{\sigma\sigma'} = \exp[i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)\sigma^x]_{\sigma\sigma'} t_{ij}$, $U_{\text{eff}}(\mathbf{Q}) = U - J_{\mathbf{Q}}/2$, $J_{\mathbf{Q}} = (1/N) \sum_{ij} J_{ij} \exp(i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i)$. Прямое обменное взаимодействие $J_{\mathbf{Q}}$ в HFA выступает исключительно через посредство эффективного параметра Хаббарда $U_{\text{eff}}(\mathbf{Q})$.

В представлении вспомогательных бозонов (SBA — *slave boson approach*) (6) имеем

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{SBA}} = \sum_{ij\sigma\sigma'} t_{ij}^{\sigma\sigma'} f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma'} z_{i\sigma}^\dagger z_{j\sigma'} + U \sum_i d_i^\dagger d_i, \quad (15)$$

причем бозонное фоковское подпространство ограничено условием когерентности описаний на языке фермионов и бозонов.

Эти выражения позволяют построить приближение среднего поля, учитывающее разделение однократно занятых узлов (p_i) и дырок/двоек (e/d). Мы имеем следующие уравнения порядка m для n и m

$$n = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}s} f_{\mathbf{k}s}, \quad (16)$$

$$m = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}s} \frac{(-1)^{s+1} \bar{\Delta}_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}s}}{\sqrt{\bar{\Delta}_{\mathbf{k}}^2 + z_{\uparrow}^2 z_{\downarrow}^2 e_{\pm}^2(\mathbf{k})}}, \quad (17)$$

где $\bar{\Delta}_{\mathbf{k}} = \Delta - (z_{\uparrow}^2 - z_{\downarrow}^2)e_{\pm}(\mathbf{k})/2$, $f_{\mathbf{k}s} = f(E_s(\mathbf{k}))$, где $f(E)$ — функция Ферми,

$$\begin{aligned} E_s(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2}(z_{\uparrow}^2 + z_{\downarrow}^2)e_{\pm}(\mathbf{k}) + \lambda + \\ &+ (-1)^s \sqrt{\bar{\Delta}_{\mathbf{k}}^2 + z_{\uparrow}^2 z_{\downarrow}^2 e_{\pm}^2(\mathbf{k})}, \end{aligned} \quad (18)$$

$e_{\pm}(\mathbf{k}) = (t_{\mathbf{k}} \pm t_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}})/2$, причем $t_{\mathbf{k}} = (1/N) \times \sum_{ij} t_{ij} \exp(i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j))$, так что $e_{\pm}(\mathbf{k}) \propto t'$, $e_{-}(\mathbf{k}) \propto t$. Бозонные амплитуды получаются при замене бозонных полей на числа и определяются уравнениями

$$2d^2 + p_{\uparrow}^2 + p_{\downarrow}^2 = n, \quad (19)$$

$$p_{\uparrow}^2 - p_{\downarrow}^2 = m, \quad (20)$$

$$e^2 + p_{\uparrow}^2 + p_{\downarrow}^2 + d^2 = 1, \quad (21)$$

$$\frac{\zeta}{edp_{\uparrow}p_{\downarrow}} \sum_{\sigma} \frac{(ep_{\uparrow} + p_{\downarrow}d)(ep_{\downarrow} + p_{\uparrow}d)}{(e^2 + p_{\sigma}^2)(p_{\sigma}^2 + d^2)} \Phi_{\sigma} = -U, \quad (22)$$

$$\zeta = p_{\uparrow}p_{\downarrow} - ed, \quad (23)$$

$$z_{\sigma}^2 = 1 - \frac{\zeta^2}{(e^2 + p_{\sigma}^2)(p_{\sigma}^2 + d^2)}, \quad (24)$$

$$\Phi_\sigma = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}s} e_+(\mathbf{k}) f_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}s} \frac{(-1)^s (-\sigma e_+(\mathbf{k}) \bar{\Delta}_{\mathbf{k}} + e_-^2(\mathbf{k}) z_\sigma^2) f_{\mathbf{k}s}}{\sqrt{\bar{\Delta}_{\mathbf{k}}^2 + z_\sigma^2 z_\sigma^2 e_-^2(\mathbf{k})}}. \quad (25)$$

Параметры спектра (18), λ, Δ – множители Лагранжа для уравнений, ограничивающих пространство Фока бозонов, – задаются уравнениями

$$\lambda = \frac{U}{2} + \frac{\zeta}{2ed} \sum_{\sigma} \frac{ep_\sigma + p_{\bar{\sigma}}d}{(e^2 + p_\sigma^2)(p_\sigma^2 + d^2)} \times \left(\frac{ep_\sigma}{p_\sigma^2 + d^2} - \frac{dp_{\bar{\sigma}}}{e^2 + p_\sigma^2} \right) \Phi_\sigma, \quad (26)$$

$$\Delta + \frac{J_{\mathbf{Q}}m}{4} = -\frac{\zeta}{2p_\uparrow p_\downarrow} \sum_{\sigma} \frac{\sigma(ep_\sigma + p_{\bar{\sigma}}d)}{(e^2 + p_\sigma^2)(p_\sigma^2 + d^2)} \times \left(\frac{ep_\sigma}{e^2 + p_\sigma^2} - \frac{p_{\bar{\sigma}}d}{p_\sigma^2 + d^2} \right) \Phi_\sigma. \quad (27)$$

Заметим, что НФА получается дальнейшим упрощением этих уравнений: (22) заменяется на $\zeta = 0$, (26) и (27) заменяются, соответственно, на $\lambda = Un/2$ и $\Delta = U_{\text{eff}}(\mathbf{Q})m/2$.

Из уравнения (24) видно, что малость параметра ζ по сравнению с $e^2 + p_\sigma^2$, $d^2 + p_\sigma^2$ означает несущественность различия между амплитудой дубок (дырок) и однократно занятых состояний. С другой стороны, из определения следует, что параметр ζ не превосходит $1/2$ и возможно разложение по его степеням.

Рассмотрим магнитные фазовые диаграммы для квадратной (рис. 1) и простой кубической (рис. 2) решеток в модели Хаббарда в НФА и SBA в версии среднего поля, а также в $s-d$ модели в НФА ($\mathbf{S}_i \rightarrow S$ после локального поворота) [8, 13, 25].

Выбор фазы для данных U, n на фазовой диаграмме определяется из условия минимума свободной энергии

$$F = Ud^2 + \sum_{\mathbf{k}s} \left(\frac{z_\uparrow^2 + z_\downarrow^2}{2} e_+(\mathbf{k}) + \frac{(-1)^s (z_\uparrow^2 z_\downarrow^2 e_-^2(\mathbf{k}) - r_z e_+(\mathbf{k}) \bar{\Delta}_{\mathbf{k}})}{\sqrt{\bar{\Delta}_{\mathbf{k}}^2 + z_\uparrow^2 z_\downarrow^2 e_-^2(\mathbf{k})}} \right) f_{\mathbf{k}s}, \quad (28)$$

причем зависимость от \mathbf{Q} неявно входит в эту формулу через $e_\pm(\mathbf{k})$.

При наличии перехода первого рода возникает скачок концентрации, что означает формирование фазового расслоения в межфазной области на фазовой диаграмме. Для исследования этого перехода

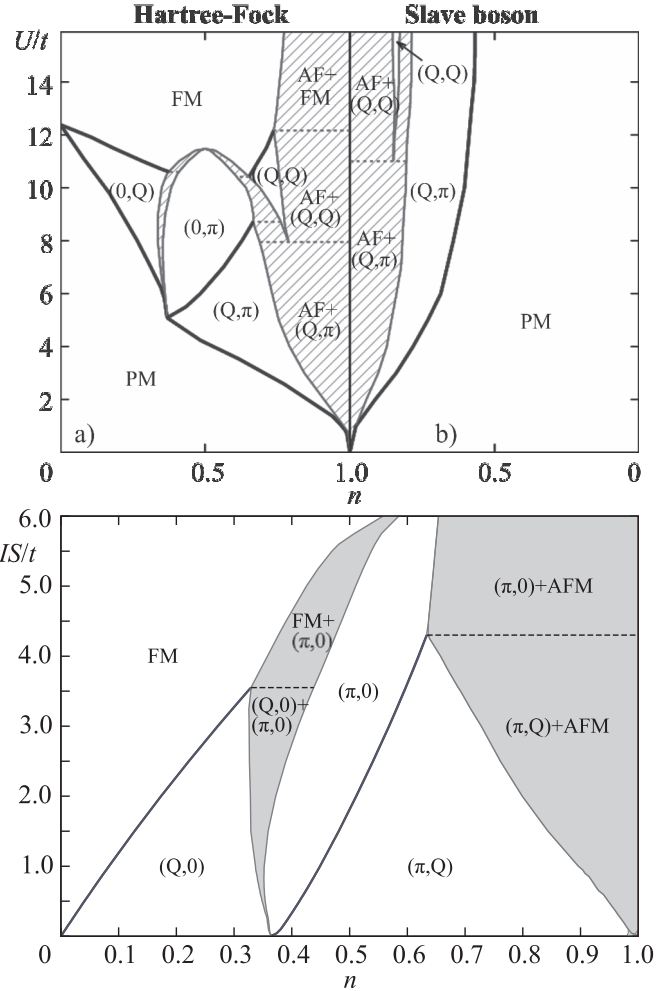


Рис. 1. (Цветной онлайн) Магнитная фазовая диаграмма основного состояния модели Хаббарда (верхняя панель, в рамках а) НФА и б) SBA) в переменных $n - U$ и $s - d$ модели (нижняя панель) для квадратной решетки при $n < 1$. Спиральные фазы обозначаются в соответствии с формой их волнового вектора. Заполнение показывает области разделения фаз, пунктирными (красными) линиями обозначены границы между различными фазовыми парами. Жирными (синими) линиями обозначены фазовые переходы второго рода. Сплошные (красные) линии соответствуют границам между однородной фазой и областью разделения фаз, $\mathbf{Q}_{\text{AFM}} = (\pi, \pi)$

удобно перейти от свободной энергии F к термодинамическому потенциалу Ω (см. подробное изложение методики [6]).

Из рисунков 1, 2 видно, что подход НФА дает множество магнитных фаз – спиральных, ФМ и АФМ. Учет корреляций в рамках SBA приводит к заметному подавлению магнитоупорядоченных состояний по сравнению с НФА: соответствующие интервалы на фазовой диаграмме сильно уменьшаются, а разнооб-

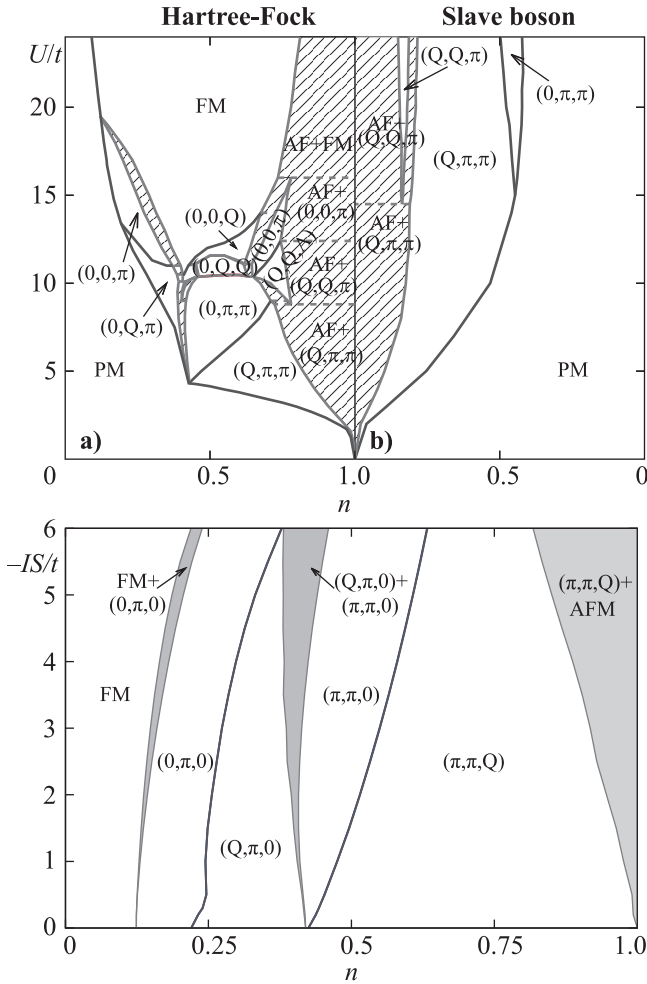


Рис. 2. (Цветной онлайн) Фазовые диаграммы для простой кубической решетки в рамках модели Хаббарда и $s-d$ модели. Обозначения линий и фаз аналогичны рис. 1

разие спиральных состояний исчезает. Кроме того, в SBA возникает широкая область парамагнитного (ПМ) состояния, что является следствием правильного учета энергии двоек.

Следует подчеркнуть, что только SBA обеспечивает правильное описание случая большого U при конечной плотности носителей тока $\delta = |1 - n|$, тогда как энергия основного состояния в HFA расходится при $U \rightarrow \infty$ из-за переоценки энергии кулоновского взаимодействия, как и в приближении случайных фаз (RPA) [31].

В приближении среднего поля по Хартри-Фоку гамильтонианы Хаббарда и $s-d$ модели имеют формально одинаковый вид, если положить $IS = Um/2$. Тем не менее, процедура сравнения энергий различных фаз и фазовые диаграммы в этих моделях существенно отличаются (в частности, в рамках $s-d$ моде-

ли ПМ фаза не существует; она может быть получена при учете кондовского спаривания, см. обзор [32]). Это приводит к невозможности прямого сравнения свободной энергии разных фаз. Результаты оказываются близкими лишь при больших U , когда локальный момент уже сформирован и намагниченность при данной концентрации носителей мало зависит от выбора фазы.

В случае бесконечно большого U [12] АФМ порядок формируется как результат квантового перемешивания электронных состояний со спином вверх и вниз в локальной системе координат. Эффективные зоны, спектр которых суть собственные значения (18) эффективного фермиевского гамильтониана

$$\mathcal{H}_f = \sum_{\sigma\sigma'} [z_\sigma z_{\sigma'} (e_+(\mathbf{k})\delta_{\sigma\sigma'} + e_-(\mathbf{k})\sigma_{\sigma\sigma'}^x) + \lambda\delta_{\sigma\sigma'} - \Delta\sigma_{\sigma\sigma'}^z] f_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}\sigma'}, \quad (29)$$

сужены с факторами z_\uparrow^2 и z_\downarrow^2 , соответственно. В то время как при половинном заполнении и в ПМ фазе $z_\uparrow^2 = z_\downarrow^2$, при малом дырочном допировании ($\delta = e^2$) эти факторы существенно отличаются, $z_\downarrow^2 \ll z_\uparrow^2$. В этом случае

$$E_1(\mathbf{k}) = \lambda - P(\mathbf{k}) + z_\uparrow^2 e_+(\mathbf{k}), \quad (30)$$

$$E_2(\mathbf{k}) = \lambda + P(\mathbf{k}), \quad (31)$$

$$P(\mathbf{k}) = \Delta + \frac{z_\downarrow^2}{2} \left(e_+(\mathbf{k}) + \frac{z_\uparrow^2 e_-(\mathbf{k})}{\Delta - z_\uparrow^2 e_+(\mathbf{k})/2} \right), \quad (32)$$

так что верхняя подзона оказывается гораздо уже, чем нижняя. При этом $z_\downarrow^2 \sim \delta$, а поведение z_\uparrow^2 зависит от решетки и параметров спектра, определяясь величиной решеточной суммы

$$C(\epsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e_-(\mathbf{k})}{(\epsilon - e_+(\mathbf{k}))^2}. \quad (33)$$

при $\epsilon > \bar{\epsilon} = \max_{\mathbf{k}} e_+(\mathbf{k})$ (это справедливо в случае, когда \mathbf{k} -точка потолка зоны совпадает с положением максимума $E_1(\mathbf{k})$).

Рассмотрим зависимость бозонных амплитуд от величины обменного интеграла J ($J_{\mathbf{Q}} = -ZJ$, Z – координационное число). При $\delta \rightarrow 0$ имеем вид $p_\downarrow^2 \sim \omega\delta$, где

$$\omega = \frac{C_*}{1 - C_*}, \quad (34)$$

где $C_* = C(\epsilon_*)$, а $\epsilon = \epsilon_*$ является решением уравнения

$$(1 - C(\epsilon))^2 (e - \bar{\epsilon}) = ZJ/2. \quad (35)$$

В этом случае амплитуды e^2 и p_{\downarrow}^2 сравнимы. Важное значение имеет величина $\mathcal{C}(\bar{\epsilon})$. Если $\mathcal{C}(\bar{\epsilon}) < 1$, величины бозонных амплитуд лишь слабо зависят от J . Тогда $z_{\uparrow}^2 \sim 1 - C_* > 0$, величина прямой АФМ щели $\Delta = e_*(1 - C_*)/2$. В этом случае доля носителей заряда с перевернутым спином при отклонении от половинного заполнения равна

$$\frac{1 - m}{\delta} \sim \frac{1 + C_*}{1 - C_*}, \quad (36)$$

причем эта доля не зависит от концентрации носителей.

Совершенно другая ситуация имеет место при $\mathcal{C}(\bar{\epsilon}) > 1$. Обозначим корень уравнения $\mathcal{C}(\epsilon) = 1$ как ϵ_{*0} . Тогда имеем кроссовер между зависимостями $z_{\uparrow}^2 \propto |J|^{1/3}$, когда $\epsilon_* - \epsilon_{*0} \gg \epsilon_{*0} - \bar{\epsilon}$ и $z_{\uparrow}^2 \propto |J|^{1/2}$, когда $\epsilon_* - \epsilon_{*0} \ll \epsilon_{*0} - \bar{\epsilon}$. Таким образом, в этом случае $e^2 \ll p_{\downarrow}^2$. Оба этих случая контрастируют с ситуацией при половинном заполнении и больших U , когда $e^2 \gg p_{\downarrow}^2$.

Если $J = 0$, то аккуратное разложение уравнений (19)–(22), (26), (27) дает расхожимость ω и имеет место другая асимптотика $p_{\downarrow}^2 \propto \sqrt{\delta}$, $(1 - m)/\delta \propto 1/\sqrt{\delta}$.

Описанная среднеполевая картина может измениться при учете флуктуаций. В частности, учет взаимодействия со спиновыми волнами для квадратной решетки дает широкий некогерентный фон и узкий квазичастичный пик с вычетом порядка J/t [26].

Диаграмма для квадратной решетки при бесконечном U содержит области ферро- и антиферромагнитного упорядочения, спиральных состояний и ПМ фазы, см. рис. 3. Для $t' = 0$ картина симметрична по отношению к линии половинного заполнения ($n = 1$) в силу электронно-дырочной симметрии. АФМ состояние при $n = 1$ сменяется насыщенным ферромагнетиком при малом допировании в согласии с теоремой Нагаока. При умеренном допировании $\delta \lesssim 0.3$ ФМ фаза переходит в спиральную (Q, π) структуру через фазовый переход первого рода с фазовым расщеплением. Эта фаза непрерывно трансформируется в структуру $(0, \pi)$, которая соответствует слоистому антиферромагнетизму. При большом допировании $\delta \sim 0.6$ магнитный порядок подавляется и происходит фазовый переход второго рода в ПМ фазу.

Конечные t' нарушают электронно-дырочную симметрию и диаграмма становится существенно асимметричной. В дырочно-допированной половине ($n < 1$) диаграммы ФМ фаза постепенно вытесняет все остальные фазы при увеличении t'/t . В электронно-допированной половине ($n > 1$) области спиральных магнитных фаз сужаются и при $t' \sim 0.17t$ заменяются АФМ состоянием.

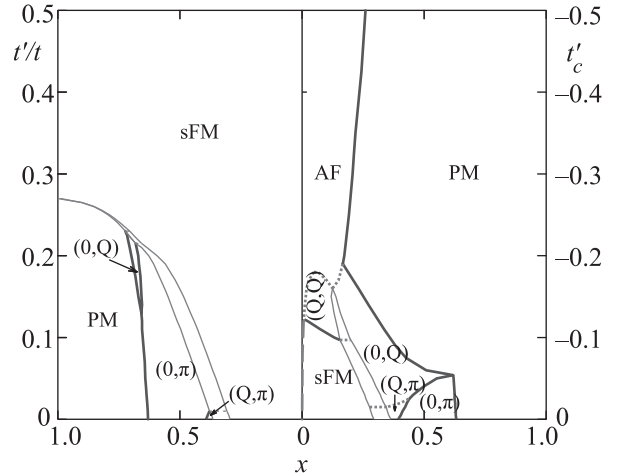


Рис. 3. (Цветной онлайн) Магнитная фазовая диаграмма основного состояния модели Хаббарда с $U = \infty$ для квадратной решетки в SBA в переменных $n - t'$ [12]. При $t' = t'_c$ происходит смена знака $\mathcal{C} - 1$ и типа АФМ состояния. Остальные обозначения аналогичны рис. 1. АФМ область между линией $n = 1$ и ФМ фазой очень узкая и ее граница показана схематически фиолетовым штрихом

В то время как для квадратной решетки ферромагнетизм всегда насыщен благодаря влиянию логарифмической особенности ван Хофа, магнитная фазовая диаграмма ПК решетки (рис. 4) содержит область ненасыщенного ферромагнетизма.

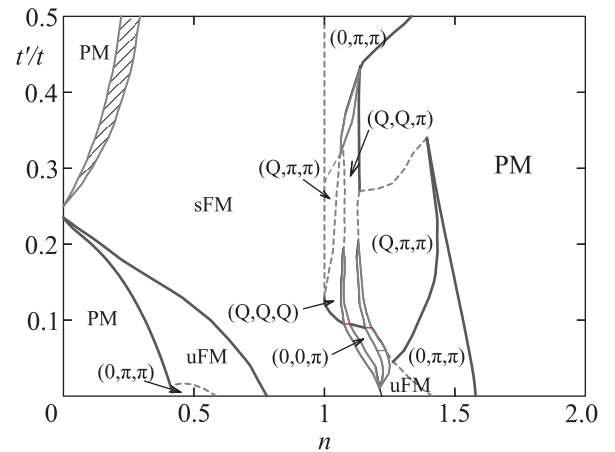


Рис. 4. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма для ПК решетки [12], обозначения линий такие же, как на рис. 3. uFM обозначает область ненасыщенного ФМ состояния, $\mathbf{Q}_{\text{AFM}} = (\pi, \pi, \pi)$

В пределе бесконечного U при явном введении в гамильтониан прямого антиферромагнитного обмена $J = 0.3t$ (что соответствует купратным сверхпроводникам) стабилизируется АФМ состояние, кото-

рое остается основным при малом допировании для $t' > 0$. При дальнейшем допировании происходит фазовый переход первого рода в ФМ или спиральное состояние, сопровождающийся широкой областью фазового расслоения, которая отсутствовала при $J = 0$. ФМ состояние оказывается сильно подавленным и частично замещается спиральными фазами. В отличие от обычной модели Хаббарда, при $t' = 0$ насыщенного ферромагнетизма не обнаруживается.

Сравнение с результатами для больших, но конечных значений U показывает, что в последнем случае появляется достаточно широкая область фазового расслоения вблизи половинного заполнения, см. рис. 5 [12]. Ферромагнитный порядок при $n > 1$

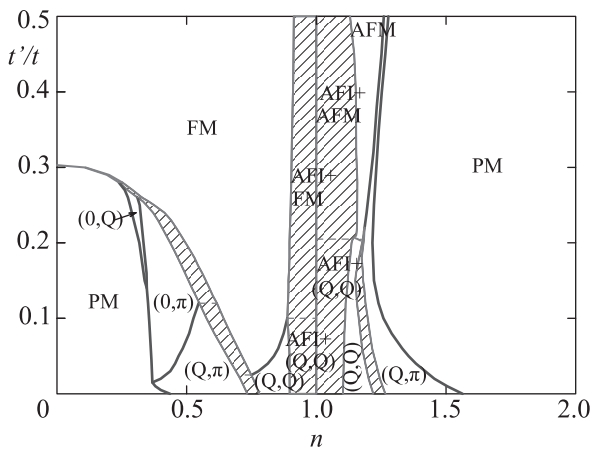


Рис. 5. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма для квадратной решетки, аналогичная рис. 3, но при $U = 50t$. AFI – состояние АФМ изолятора при $n = 1$

и малых t'/t , существующий в случае $U = \infty$, полностью уничтожается при большом, но конечном U , заменяясь длинноволновым спиральным порядком с волновым вектором вида (Q_x, Q_x) .

На рисунке 6 [12] представлено сравнение зависимости магнитных состояний от числа носителей при $U = 6t, t' = -0.2t$ и $U = \infty$ ($t' = 0.2t$ и $t' = 0.5t$). При конечных U формируется достаточно широкая область фазового расслоения в окрестности половинного заполнения, причем величины z_σ^2 лишь немного отличаются от единицы и имеют минимум вблизи половинного заполнения. Вблизи половинного заполнения АФМ зоны начинают разделяться щелью. При $U = \infty$ z_\downarrow^2 стремится к нулю линейно, совпадая с числом носителей тока, а z_\uparrow^2 стремится к нулю в случае $t' = 0.2t$, но остается конечным при $t' = 0.5t$. В случае $t' = 0.2t$ возникает щель между АФМ подзонами при приближении к половинному заполнению. Эта щель отсутствует при $t' = 0.5t$. Это иллюстрирует

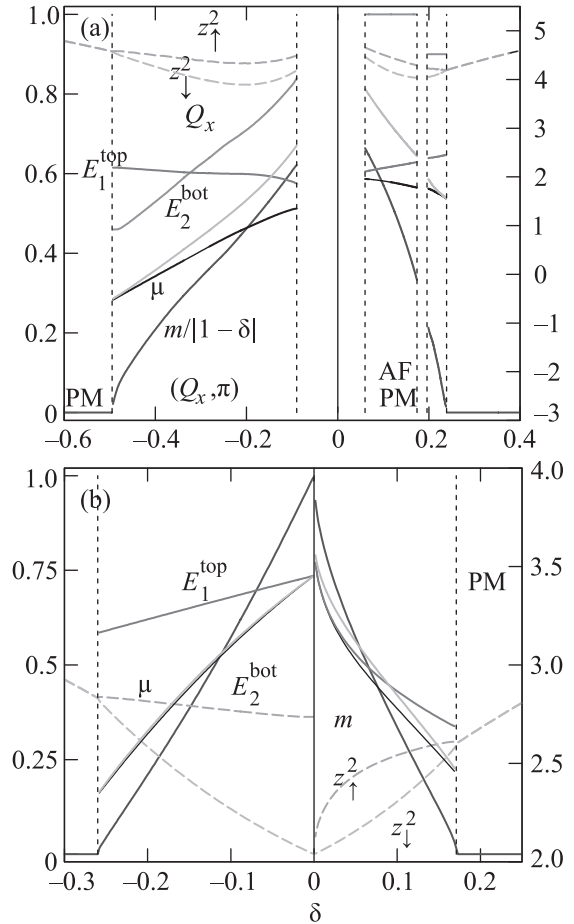


Рис. 6. (Цветной онлайн) Верхняя панель: концентрационная зависимость для Q_x (зеленая), μ (черная), относительная намагниченность $r = m/(1-\delta)$ (синяя), z_\uparrow^2 (штрихованная фиолетовая), z_\downarrow^2 (штрихованная оранжевая линия) – левая ось. E_1^{top} (красная), E_2^{bot} (голубая линия) – правая ось. $U = 6t, t' = -0.2t$. Нижняя панель: то же для $U = \infty$. (a) – $t' = 0.5t$, (b) – $t' = 0.2t$. Фазы отмечены в нижней части рисунков. Вертикальные штриховые линии отмечают место магнитного фазового перехода, разрыв линии означает фазовое расслоение. Отрицательное (положительное) δ означает дырочное (электронное) легирование

переход с изменением магнитных свойств, определяемый величиной решеточной суммы C_* .

Наши результаты для квадратной решетки дают широкую область фазового расслоения в окрестности половинного заполнения при конечных U , что согласуется с экспериментальными данными для сверхпроводящих купратов и вычислениями в рамках обобщенного приближения случайных фаз (GW приближение), см. обзор [11]. Кроме того, экспериментальные результаты для квазичастичного вычета (рис. 33 в работе [11]) демонстрируют заметную пе-

ренормировку и концентрационную зависимость при промежуточных значениях U , что качественно согласуется с нашими расчетами.

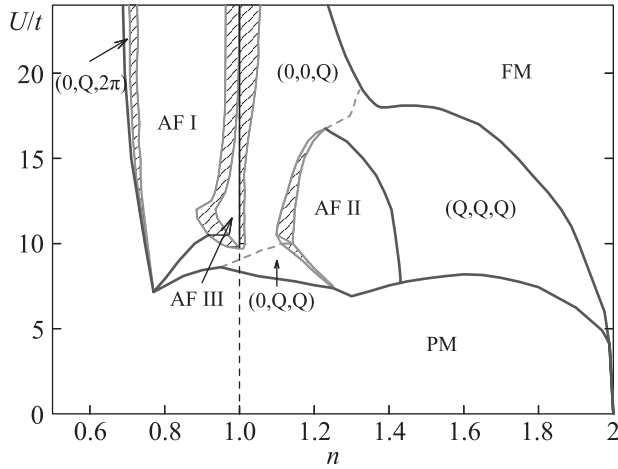


Рис. 7. (Цветной онлайн) Магнитная фазовая диаграмма основного состояния модели Хаббарда для ГЦК-решетки с $t' = 0$ в рамках SBA

В работе [29] в рамках SBA были построены магнитные фазовые диаграммы модели Хаббарда для ГЦК решетки при различных значениях интеграла электронного переноса для ближайших и следующих соседей (рис. 7). Сравнение с аналогичными диаграммами в НФА демонстрирует сильное подавление магнетизма электронными корреляциями. Факторами, препятствующими подавлению, являются близость системы к половинному заполнению зоны либо к концентрациям, соответствующим особенностям ван Хова.

В то время как АФМ структуры I и II типов являются частными случаями спирального магнитного упорядочения, АФМ порядок III типа (удвоенная элементарная ячейка) не может быть представлен в виде спирали и требует особого подхода, который был также разработан в [29]. Сравнение с неколлинеарным спиральным порядком, имеющим аналогичный волновой вектор, показало, что коллинеарный АФМ порядок III типа более выгоден при половинном заполнении зоны и вблизи него; это согласуется с экспериментальными нейтронографическими результатами для MnS_2 [33]. Таким образом, учет зонных эффектов приводит к снятию вырождения различных магнитных структур, характерного для моделей локализованного магнетизма типа Гейзенберга и обусловленного геометрической фрустрацией, присущей ГЦК решетке.

4. Переход металл–изолятор. При половинном заполнении зоны в приближении ближайших со-

седей, когда $t_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -t_{\mathbf{k}}$, АФМ щель в электронном спектре, а, следовательно, изоляторное состояние возникает при сколь угодно малых значениях U . Однако при наличии переноса между вторыми соседями с характерной энергией D' неустойчивость парамагнитного металлического состояния возникает при конечном значении U . В ведущем логарифмическом приближении имеем для критического значения перехода металл–изолятор (ПМИ, МИТ)

$$1/U_{\text{МИТ}} = \begin{cases} \rho(0) \ln(D/D'), & \rho(E) \sim \rho(0), \\ (a/2) \ln^2(D/D'), & \rho(E) \sim a \ln(D/|E|), \\ (a'/3) \ln^3(D/D'), & \rho(E) \sim a' \ln^2(D/|E|) \end{cases} \quad (37)$$

соответственно, для трех решеток: простой кубической (ПК), квадратной и объемноцентрированной (ОЦК). Здесь D – полуширина зоны, $\rho(E)$ – затравочная плотность состояний вблизи уровня Ферми для электронного спектра в приближении ближайших соседей, a, a' – положительные коэффициенты при сингулярных вкладах в $\rho(E)$. Таким образом, сингулярности ван Хова приводят к существенному изменению зависимости $U_{\text{МИТ}}$ от t' . В этом разделе удобно ввести безразмерный параметр $\tau = t'/t$.

Конкуренция изоляторного АФМ состояния с парамагнитным дает фазовую границу ПМИ первого рода [27]. Однако учет переноса между вторыми соседями приводит к появлению фазы АФМ металла, которая может быть более энергетически выгодной, чем ПМ металл. С другой стороны, наличие сингулярностей ван Хова внутри зоны может привести к неаналитической зависимости энергии системы в парамагнитном (антиферромагнитном) состоянии от D' и величины АФМ щели, соответственно. Как показывают численные расчеты для квадратной решетки [28, 35–38], вследствие этого для нее, действительно, возможен переход первого рода.

Изоляторное АФМ состояние может быть неустойчиво по отношению к переходу как в АФМ металлическое, так и в ПМ состояние. Для первой неустойчивости можно получить уравнение фазовой границы в переменных τ – Δ путем исследования спектра [34].

При половинном заполнении ($n = 1$) уравнения метода вспомогательных бозонов (19)–(21), (25)–(27) существенно упрощаются в силу дополнительной симметрии между дырками и двойками: $e = d$. В предположении, что нижняя и верхняя АФМ подзоны разделены щелью, имеем уравнения, определяющие $m, \Delta_* = \Delta/z_{\text{АФМ}}^2$ (сужение спектра уже не зависит от направления локальной проекции спина:

$z_{\text{AFM}}^2 \equiv z_{\uparrow}^2 = z_{\downarrow}^2 = 1 - 4\zeta_{\text{AFM}}^2/(1 - m^2)$ и $\zeta = \zeta_{\text{AFM}}$ (см. определение (23)):

$$m = \Delta_* \Phi_1(\Delta_*), \quad (38)$$

$$\Delta_* - \bar{J}m \frac{1 - m^2}{1 - m^2 - 4\zeta_{\text{AFM}}^2} = \frac{Um}{2} \frac{1 + \zeta_{\text{AFM}}}{(1 + 2\zeta_{\text{AFM}})^2}, \quad (39)$$

$$\frac{16\zeta_{\text{AFM}}(1 + 2\zeta_{\text{AFM}})^2}{(1 - m^2)((1 + 2\zeta_{\text{AFM}})^2 - m^2)} \Phi_2(\Delta_*) = U, \quad (40)$$

где $\bar{J} = ZJ/8$

$$\Phi_1(\Delta) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + e_-^2(\mathbf{k})}}, \quad (41)$$

$$\Phi_2(\Delta) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e_-^2(\mathbf{k})}{\sqrt{\Delta^2 + e_-^2(\mathbf{k})}}, \quad (42)$$

$$F_{\text{AFM}} = -\bar{J}m^2 + z_{\text{AFM}}^2 \left(\frac{U}{4} \frac{1 - m^2}{1 + 2\zeta} - \Phi_2(\Delta_*) \right). \quad (43)$$

Это выражение, а также уравнения (38), (39) переходят в соответствующие выражения в НФА, если заменить уравнение (40), определяющее ζ , на $\zeta = 0$.

Выражение (43) содержит вклады как кулоновского взаимодействия, так и межузельного обменного взаимодействия. При этом, в отличие от НФА, эти вклады входят различным образом: кулоновский вклад в F_{AFM} содержит дополнительный “корреляционный” множитель, зависящий от ζ , – таким образом, выделяется вклад двоек; обменный член при этом лишь квадратичен по намагниченности, т.е. не содержит корреляционных поправок.

Из уравнений (38), (39), (43) видно, что для щелевого АФМ состояния $e_+(\mathbf{k})$ фактически не участвует в определении параметров состояния. Следовательно, зависимость от t' полностью исчезает.

Изоляторная АФМ фаза конкурирует с металлическими фазами – парамагнитной и антиферромагнитной. Поскольку при половинном заполнении корреляционное сужение спектра происходит равномерно – в z_{AFM}^2 раз, щель, соответствующая границе перехода в состояние АФМ металла, имеет вид $\Delta = z_{\text{AFM}}^2 \Delta_{\text{MIT}}(\tau)$ ($\tau = t'/t$), причем для квадратной решетки

$$\Delta_{\text{MIT}}^{\text{sq}}(\tau) = \begin{cases} 2\tau, & \tau < 1/\sqrt{2}, \\ 4\tau - \tau^{-1}, & \tau > 1/\sqrt{2}; \end{cases} \quad (44)$$

для ПК решетки

$$\Delta_{\text{MIT}}^{\text{sc}}(\tau) = \begin{cases} 2\tau, & \tau < \sqrt{3}/4, \\ 8\tau - 9\tau^{-1}/8, & \tau > \sqrt{3}/4; \end{cases} \quad (45)$$

и для ОЦК решетки

$$\Delta_{\text{MIT}}^{\text{bcc}}(\tau) = \begin{cases} 4\tau, & \tau < 2/\sqrt{3}, \\ 6\tau - 8\tau^{-1}/3, & \tau > 2/\sqrt{3}. \end{cases} \quad (46)$$

Параметры ПМ фазы описываются уравнениями

$$z_{\text{PM}}^2 = 1 - 4\zeta_{\text{PM}}^2, \quad (47)$$

$$U = -16\zeta_{\text{PM}} \mathcal{E}(\tau), \quad (48)$$

$$\mathcal{E}(\tau) = \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}}(\tau) f(z_{\text{PM}}^2 t_{\mathbf{k}}(\tau)). \quad (49)$$

В отличие от свободной энергии АФМ изоляторной фазы свободная энергия ПМ фазы существенно зависит от τ :

$$F_{\text{PM}} = \frac{U}{4}(1 - \zeta_{\text{PM}}) + \mathcal{E}(\tau). \quad (50)$$

Для определения рода ПМИ удобно рассмотреть разницу энергий фаз АФМ изолятора и ПМ металла ΔF_{MIT} на границе АФМ металл – АФМ изолятор (см. уравнения (44)–(46)). Величина $\Delta_* = \Delta_{\text{MIT}}(\tau)$, а значит и решеточные суммы $\Phi_2(\Delta_*)$ и $\mathcal{E}(\tau)$, будут одни и те же и НФА, и в СВА. Если окажется, что свободная энергия F_{PM} ниже (выше), чем (43), то ПМИ первого (второго) рода. Введем

$$\delta\Phi_2(\Delta_*) = \Phi_2(\Delta_*) - \Phi_2(0), \quad (51)$$

$$\delta\mathcal{E}(\tau) = \mathcal{E}(\tau) + \Phi_2(0). \quad (52)$$

Тогда

$$\Delta F_{\text{MIT}} = \frac{U(\zeta_{\text{PM}} - \zeta_{\text{AFM}})}{4} + \frac{Um^2\zeta_{\text{AFM}}(1 + 4\zeta_{\text{AFM}})}{4(1 + 2\zeta_{\text{AFM}})^2} + \Delta F_{\text{MIT}}^{\text{HFA}}, \quad (53)$$

где явно выделен вклад в разность свободной энергии АФМ и ПМ фаз на границе ПМИ в НФА с $J = 0$

$$\Delta F_{\text{MIT}}^{\text{HFA}} = -\bar{J}m^2 - \frac{Um^2}{4} - \delta\mathcal{E}(\tau) - \delta\Phi_2(\Delta_*). \quad (54)$$

После разложения по Δ_* и ζ (53) принимает вид

$$\Delta F_{\text{MIT}} = \frac{U\zeta_0(3 - 4\zeta_0)m^2}{4} + (1 - 48\zeta_0^2) \Delta F_{\text{MIT}}^{\text{HFA}}, \quad (55)$$

где

$$\zeta_0 = \frac{\Phi_1^{-1}(\Delta_*) - \bar{J}}{U_{\text{BR}}}, \quad (56)$$

$U_{\text{BR}} = 8\Phi_2(0)$ – критическое значение перехода ПМИ в парафазе [30]. Критическое значение $U = U_{\text{MIT}}$ на границе ПМИ имеет вид

$$U_{\text{MIT}} = 2(\Phi_1^{-1}(\Delta_*) - \bar{J})(1 + 3\zeta_0). \quad (57)$$

Из выражения (55) видно, что корреляционная поправка, пропорциональная ζ_0 , приводит к большему увеличению энергии АФМ изоляторной фазы, чем ПМ фазы. Это означает, что корреляционные вклады расширяют область перехода первого рода либо могут превратить переход второго рода в переход первого рода.

Перепишем разложение (55), используя уравнения (38) и (57), и оставляя члены ведущего порядка по ζ и Δ :

$$\Delta F_{\text{MIT}} = \delta\mathcal{F} - \delta\mathcal{E}(\tau) - \bar{J}\Phi_1^2(\Delta_*)\Delta_*^2 + \frac{3\Delta_*^2}{2U_{\text{BR}}}(1 - \bar{J}\Phi_1(\Delta_*))^2, \quad (58)$$

где $\delta\mathcal{F} = \Delta_*^3 G'(\Delta_*)/2$ – ведущий вклад в изменение энергии АФМ изоляторной фазы без учета корреляционных и обменных поправок, G определено ниже в (61). Третий член в (58) – ведущий вклад в изменение энергии от обменного взаимодействия, четвертый член – корреляционная поправка.

Учет прямого обменного взаимодействия в рамках приближения Хартри–Фока приведет лишь к замене U на $U_{\text{eff}}(\mathbf{Q})$, см. (14), что не может изменить род перехода. Корректный учет обменного взаимодействия должен по-разному учитывать вклады однократно занятых состояний (p_σ) и двоек (d) и может изменить род перехода, см. рис. 8.

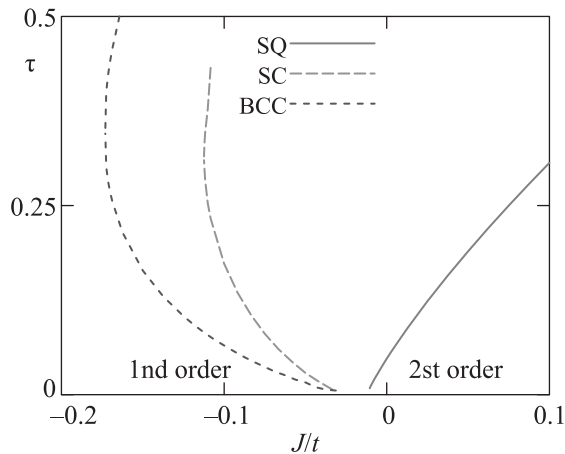


Рис. 8. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма, определяющая род ПМИ в переменных $J - \tau$ для квадратной (SQ), ПК (SC) и ОЦК (BCC) решеток, J – обменный интеграл между ближайшими соседями. Слева от кривых имеет место переход второго рода, справа – первого рода

Роль обменной поправки зависит от знака J : $J > 0$ расширяет область перехода второго рода, а ФМ обмен $J < 0$ – область перехода первого рода.

Для исследования асимптотики зависимости решеточных сумм от Δ_* они могут быть выражены как

$$\Phi_1(\Delta) = 2G(\Delta) + \Delta G'(\Delta), \quad (59)$$

$$\delta\Phi_2(\Delta) = -\Delta^2(G(\Delta) + \Delta G'(\Delta)), \quad (60)$$

через одну вспомогательную сумму

$$G(\Delta) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + e_-^2(\mathbf{k}) + |e_-(\mathbf{k})|}}. \quad (61)$$

В общем случае логарифмические поправки происходят от электронных состояний с малыми $|e_-(\mathbf{k})|$

$$G(\Delta) = D^{-1} \left(a_0 + a_1 \ln \frac{2D}{\Delta} + a_2 \ln^2 \frac{2D}{\Delta} \right), \quad (62)$$

причем максимальная степень логарифма на единицу выше, чем степень логарифмического вклада ($\rho(\epsilon, \tau) \sim \ln^l(D/|\epsilon|)$) в плотность состояний. Разложение (62) позволяет получить разложение для (59), (60), а коэффициенты разложения (62) получаются из анализа логарифмических вкладов в плотность состояний в окрестности центра зоны.

Для квадратной решетки ($D_{\text{sq}} = 4t$, $U_{\text{BR}}^{\text{sq}} = 13.0t$) плотность состояний в окрестности центра зоны содержит логарифмический вклад: $a_0^{\text{sq}} = \left(\frac{3+\pi^2}{6} + 2 \ln 2 \right) / \pi^2 + \delta g_{\text{sq}}$, $a_1^{\text{sq}} = (1 + 4 \ln 2) / \pi^2$, $a_2^{\text{sq}} = \pi^{-2}$, где $\delta g_{\text{sq}} = 0.02805$. Сингулярность ван Хофа приводит к дополнительному сингулярному (логарифмическому) вкладу в энергию АФМ и ПМ состояний и вкладу порядка $\ln^2(t/\Delta)$ в обратное критическое значение U . Зависимость $U_{\text{MIT}}^{\text{sq}}$ и $\delta\mathcal{F}_{\text{sq}}$ от τ на границе ПМИ и влияние обменных и корреляционных поправок можно получить из формул (56), (57), и (62) с учетом результата

$$\Phi_1^{\text{sq}}(\Delta_{\text{MIT}}(\tau)) = \frac{1}{2\pi^2 t} \ln^2 \frac{16}{\tau}, \quad (63)$$

$$\delta\mathcal{F}_{\text{sq}}(\Delta_{\text{MIT}}(\tau)) = -B_{\text{sq}}(\tau)\tau^2 t, \quad (64)$$

где $B_{\text{sq}}(\tau) = (1 + 2 \ln \frac{16}{\tau}) / (2\pi^2)$. Нелинейное соотношение между Δ и τ на границе перехода АФМ изолятор – ПМ металл, обусловленное сингулярностью, приводит к изменению рода перехода со второго на первый при конечном $\tau \simeq 0.05$ (в рамках НФА 0.08), численно этот результат был получен ранее [28, 36]. На границе металл–изолятор в АФМ состоянии энергия АФМ изоляторной фазы очень близка к энергии ПМ металлической фазы. Результаты по изменению рода перехода с изменением t' (в частности, возникновение перехода первого рода при $\tau \lesssim 0.2$) подтверждается расчетами по методу Монте-Карло [35]. Зависимость энергии ПМ фазы от τ содержит неанализируемые члены

тические вклады, происходящие от имеющейся при любом τ сингулярности внутри зоны.

$$\delta\mathcal{E}_{\text{sq}}(\tau) = -A_{\text{sq}}(\omega_{\text{F}})\tau^2 t, \quad (65)$$

где

$$A_{\text{sq}}(\omega) = \bar{A}_{\text{sq}} - \frac{32/\pi^2}{1 + \ln(16/\omega)} + \frac{16/\pi^2}{(1 + \ln(16/\omega))^2}, \quad (66)$$

$\bar{A}_{\text{sq}} = 1.08$, $\omega_{\text{F}} = E_{\text{F}}/t + 4\tau$ – энергия Ферми, отсчитанная от положения сингулярности ван Хова.

На рисунке 9 видно, что $B_{\text{sq}}(\tau) > A_{\text{sq}}(\tau)$, за исключением малого интервала. При малых τ изо-

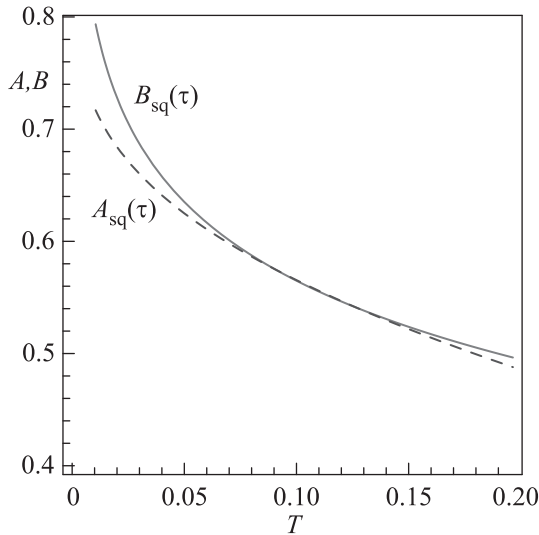


Рис. 9. (Цветной онлайн) Зависимость коэффициентов разложения $A_{\text{sq}}(\tau)$, $B_{\text{sq}}(\tau)$ на границе перехода металл-изолятор в АФМ фазе для квадратной решетки

ляторная фаза выигрывает у парамагнитной из-за логарифмического вклада в энергию, однако при увеличении Δ энергии фаз пересекаются в двух точках $\tau_{1,2}$. Пересечение при $\tau = \tau_2$ является артефактом разложения и отсутствует при численном решении уравнений: при $\tau > \tau_1$ ПМИ становится переходом первого рода (рис. 10). Близость коэффициентов $A_{\text{sq}}(\tau)$ и $B_{\text{sq}}(\tau)$ является указанием на существование лишь узкой области АФМ металла между областями АФМ изолятора и ПМ металла на фазовой диаграмме. Таким образом, для $J = 0$ мы имеем очень тонкую конкуренцию АФМ и ПМ состояний при малых значениях τ . Однако этот баланс нарушается даже при малых $|J|$ – АФМ состояние выигрывает для АФМ обмена, а ПМ состояние – для ферромагнитного, см. рис. 8.

Для ПК решетки ($D_{\text{sc}} = 6t$, $U_{\text{BR}}^{\text{sc}} = 16.0t$) $a_0^{\text{sc}} = D_{\text{sc}}\rho_{\text{sc}}(0)/2 + \delta g_{\text{sc}}$, $a_1^{\text{sc}} = D_{\text{sc}}\rho_{\text{sc}}(0)$, где $\rho_{\text{sc}}(0) =$

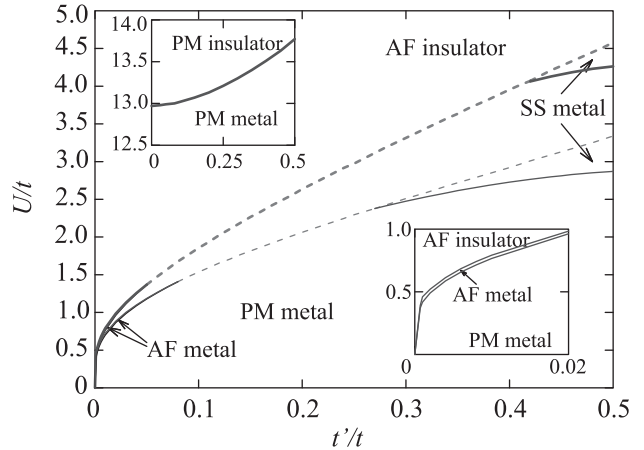


Рис. 10. (Цветной онлайн) Магнитная фазовая диаграмма основного состояния модели Хаббарда при половинном заполнении в плоскости τ - U/t для квадратной решетки. Толстые (тонкие) линии представляют результат SBA (HFA). Сплошные (пунктирные) линии – линии перехода второго (первого) рода. Нижняя вставка показывает фазовую диаграмму, полученную в SBA, в частности, при малых t' . Верхняя вставка – результат сценария Бринкмана-Райса [30] (переход в ПМ фазе)

$= 0.143t^{-1}$ – плотность состояний в центре зоны при $\tau = 0$, $\delta g_{\text{sc}} = -0.346$.

$$\Phi_1^{\text{sc}}(\Delta_{\text{MIT}}(\tau)) = (3t)^{-1}(D_{\text{sc}}\rho_{\text{sc}}(0) \ln(6/\tau) + \delta g_{\text{sc}}), \quad (67)$$

$$\delta\mathcal{F}_{\text{sc}}(\Delta_{\text{MIT}}(\tau)) = -B_{\text{sc}}\tau^2 t, \quad (68)$$

где $B_{\text{sc}} = D_{\text{sc}}\rho_{\text{sc}}(0)/3 = 0.285$. Мы находим $\delta\mathcal{E}_{\text{sc}}(\tau) = -A_{\text{sc}}\tau^2 t$, $A_{\text{sc}} = 0.145$, так что $\delta\mathcal{F}_{\text{sc}}(\tau) - \delta\mathcal{E}_{\text{sc}}(\tau) < 0$. Таким образом, в рамках HFA мы имеем устойчивую кривую перехода второго рода при любых $\tau \lesssim 0.5$ и область АФМ металла между областями АФМ изолятора и ПМ металла на фазовой диаграмме достаточно широка (см. рис. 11а, 12).

Как видно из рис. 10, 12, моттовский сценарий ПМИ в ПМ фазе [30] не реализуется – такой переход возможен лишь при больших U .

Для ОЦК решетки, несмотря на наличие сингулярностей ван Хова, ситуация оказывается похожей: всегда реализуется переход второго рода. Граница устойчивости изоляторной АФМ фазы по отношению к ПМ фазе в переменных τ - Δ , хотя и нелинейна (как и для квадратной решетки), не пересекается с линией перехода в АФМ металл [34].

Учет прямого обмена в рамках SBA существенно меняет фазовую диаграмму (рис. 8).

Наиболее важным результатом для ГЦК решетки является то, что здесь ПМИ первого рода в широкой области параметров, – соответствующий магнитный

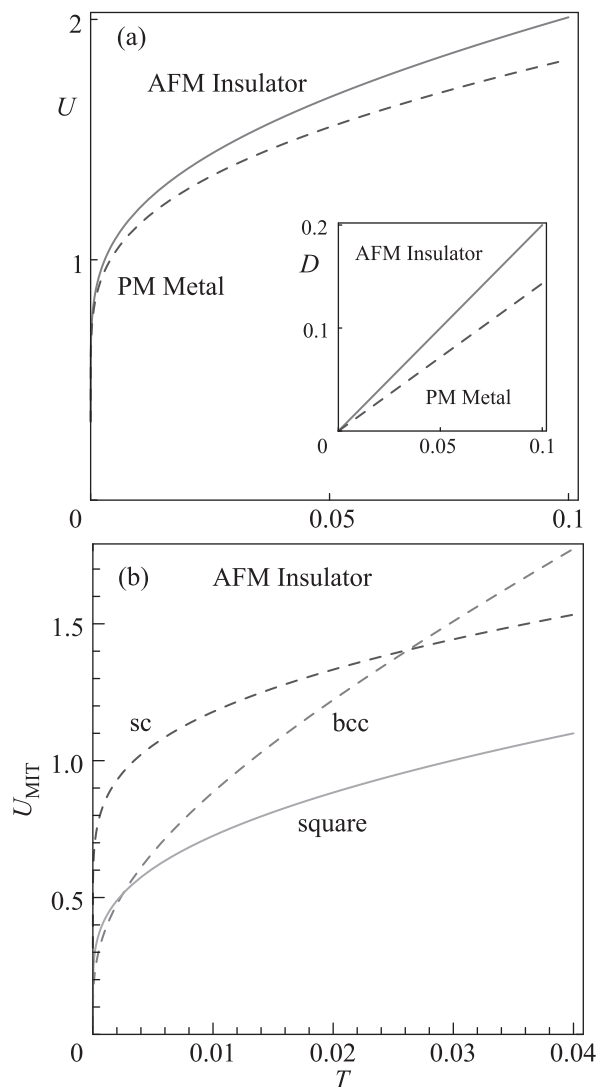


Рис. 11. (Цветной онлайн) (а) – Фазовая диаграмма основного состояния модели Хаббарда для ПК решетки в переменных $\tau - U$. Пунктирная кривая показывает неустойчивость АФМ изоляторной фазы относительно АФМ металлической, сплошная кривая – относительно ПМ металлической фазы (последняя неустойчивость не реализуется). На вставке показана фазовая диаграмма в переменных $\tau - \Delta$. (б) – Граница перехода АФМ металл–АФМ изолятор для различных решеток, см. формулу (57) для $U_{\text{MIT}}(\tau)$ в рамках НФА ($J = \zeta_0 = 0$)

переход демонстрирует прерывистое изменение магнитного состояния (см. рис. 13).

5. Заключение. В данном обзоре мы представили картину магнитных фазовых переходов в основном состоянии сильно коррелированной модели Хаббарда и $s-d$ модели. Приближение Хартри–Фока не позволяет получить разумных результатов для

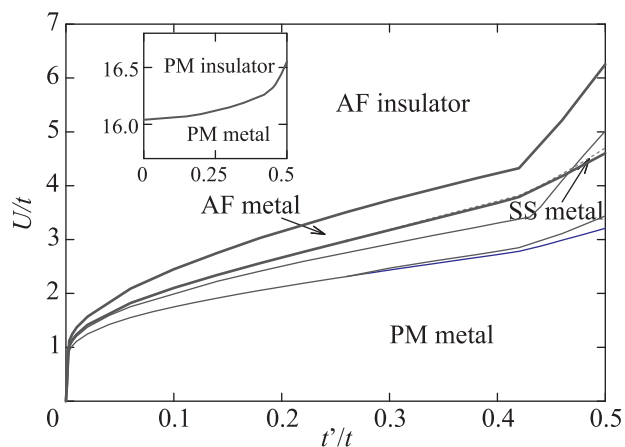


Рис. 12. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма, аналогичная рис. 10, для простой кубической решетки; метки фаз относятся только к результатам SBA

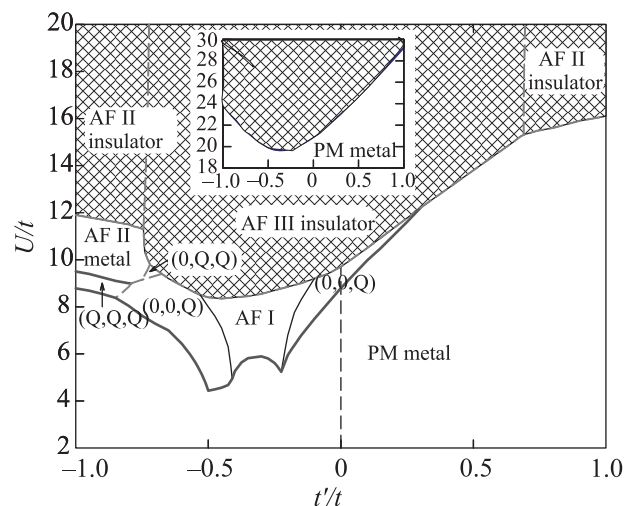


Рис. 13. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма для ГЦК решетки при половинном заполнении в переменных U/t и t'/t в SBA [29]. Заштрихованная (пустая) область обозначает состояние изолятора (металла). На вставке показан результат сценария Бринкмана–Райса $U = U_{\text{BR}}$

свойств системы при больших U/t и переоценивает роль магнитных фаз. В то же время подход вспомогательных бозонов (SBA) дает успешное описание парамагнитного состояния и предоставляет подробную информацию, включающую z -факторы, которые дают существенную перенормировку электронного спектра. Их концентрационная зависимость оказывается весьма нетривиальной, особенно в пределе больших U и при включении межузельных обменных взаимодействий. Учет корреляционных эффектов в рамках SBA может существенно изме-

нить картину перехода металл–изолятор, благоприятствуя переходу первого рода.

Таким образом, SBA позволяет учесть корреляционные эффекты и является более простым, чем метод расщепления уравнений движения для Х-операторов Хаббарда [20, 39–41]: нулевое приближение среднего поля здесь оказывается существенно лучше, чем приближение Хаббард-I [16]. В то же время последовательный учет флуктуаций (в частности, учет некогерентных состояний) требует дальнейшей теоретической разработки.

Дальнейшие исследования могут также касаться фрустрированных систем (например, треугольной решетки) и описания возникающего состояния спиновой жидкости. При этом, по-видимому, полезными окажутся все упомянутые представления вспомогательных частиц.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (тема “Квант” # АААА-А18-118020190095-4) и при поддержке Программы 211 Правительства Российской Федерации, соглашение 02.А03.21.0006.

Авторы благодарны участникам проекта Российского Фонда Фундаментальных Исследований # 16-02-00995 – своим соавторам М. А. Тимиргазину и А. К. Аржникову.

1. M. Ogata and H. Fukuyama, Rep. Prog. Phys. **71**, 036501 (2008).
2. P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, Rev. Mod. Phys. **78**, 17 (2006).
3. М. В. Садовский, УФН **178**, 1243 (2008).
4. Y. Cao, V. Fatemi, A. Demir, S. Fang, S. L. Tomarken, J. Y. Luo, J. D. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, R. C. Ashoori, and P. Jarillo-Herrero, Nature **556**, 80 (2018).
5. В. Ю. Ирхин, Ю. Н. Скрябин, Письма в ЖЭТФ **107**, 684 (2018).
6. P. A. Igoshev, M. A. Timirgazin, A. A. Katanin, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, Phys. Rev. B **81**, 094407 (2010).
7. P. V. Visscher, Phys. Rev. B **10**, 943 (1973).
8. M. A. Timirgazin, P. A. Igoshev, V. F. Gilmudinov, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, J. Phys.: Condens. Matter **27**, 446002 (2015).
9. Н. Ф. Мотт, *Переходы металл-изолятор*, Наука, М. (1979).
10. M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998).
11. T. Das, R. S. Markiewicz, and A. Bansil, Adv. Phys. **63**, 151 (2014).
12. M. A. Timirgazin, P. A. Igoshev, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, J. Magn. Magn. Mater. **459**, 311 (2018).
13. P. A. Igoshev, M. A. Timirgazin, A. K. Arzhnikov, T. V. Antipin, and V. Yu. Irkhin, J. Magn. Magn. Mater. **440**, 66 (2017).
14. В. Ю. Ирхин, Ю. Н. Скрябин, ФММ **120**, 563 (2019).
15. P. W. Anderson, Int. J. Mod. Phys. B **4**, 181 (1990).
16. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963).
17. V. Yu. Irkhin and Yu. P. Irkhin, Phys. Stat. Sol. (b) **183**, 9 (1994).
18. G. Kotliar and A. E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **57**, 1362 (1986).
19. R. Fresard and P. Wölfle, Int. J. Mod. Phys. B **6**, 685 (1992).
20. V. Yu. Irkhin and M. I. Katsnelson, J. Phys.: Condens. Matter. **2**, 7151 (1990).
21. V. Yu. Irkhin, Phys. Lett. A **383**, 1506 (2019).
22. C. Castellani, G. Kotliar, R. Raimondi, M. Grilli, Z. Wang, and M. Rozenberg, Phys. Rev. Lett. **69**, 2009 (1992).
23. T. C. Ribeiro and X.-G. Wen, Phys. Rev. B **74**, 155113 (2006).
24. В. Ю. Ирхин, Ю. Н. Скрябин, Письма ЖЭТФ **106**, 161 (2017).
25. П. А. Игошев, М. А. Тимиргазин, А. К. Аржников, В. Ю. Ирхин, Письма ЖЭТФ **98**, 172 (2013).
26. C. L. Kane, P. A. Lee, and N. Read, Phys. Rev. B **39**, 6880 (1989).
27. M. I. Katsnelson and V. Yu. Irkhin, J. Phys. C **17**, 4291 (1984).
28. M. A. Timirgazin, P. A. Igoshev, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, J. Low. Temp. Phys. **185**, 651 (2016).
29. M. A. Timirgazin, P. A. Igoshev, A. K. Arzhnikov, and V. Yu. Irkhin, J. Phys.: Condens. Matter **28**, 505601 (2016).
30. W. F. Brinkman and T. M. Rice, Phys. Rev. B **2**, 4302 (1970).
31. M. I. Auslender, V. Yu. Irkhin, and M. I. Katsnelson, J. Phys. C: Solid State Phys. **21**, 5521 (1988).
32. В. Ю. Ирхин, УФН **187**, 801 (2017).
33. T. Chattopadhyay, P. Burlert, and P. J. Brown, J. Phys.: Condens. Matter **3**, 5555 (1991).
34. П. А. Игошев, В. Ю. Ирхин, ЖЭТФ **155**, 1072 (2019).
35. D. Duffy and A. Moreo, Phys. Rev. B **55**, R676 (1997).
36. Z.-Q. Yu and L. Yin, Phys. Rev. B **81**, 195122 (2010).
37. I. Yang, E. Lange, and G. Kotliar, Phys. Rev. B **61**, 2521 (2000).
38. М. А. Тимиргазин, А. К. Аржников, В. Ю. Ирхин, Письма в ЖЭТФ **98**, 184 (2012).
39. В. Ю. Ирхин, А. В. Зарубин, ЖЭТФ **141**, 975 (2012); **143**, 971 (2013).
40. В. Ю. Ирхин, А. В. Зарубин, ЖЭТФ **143**, 971 (2013).
41. Е. И. Шнейдер, С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов, С. В. Николаев, Письма ЖЭТФ **96**, 381 (2012).