

О ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЕ ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА

Р. О. Зайцев*

*Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 9 июня 2019 г.,
после переработки 9 июня 2019 г.
Принята к публикации 25 июня 2019 г.

На основе изучения уравнения состояния исследуются условия появления неоднородных состояний. Предполагается, что энергия Хаббарда $U > t$, т.е. соответствует условию сильных электрон-электронных корреляций. Получена магнитная фазовая диаграмма в широкой области электронных концентраций, относящихся к нижней хаббардовской подзоне.

DOI: 10.1134/S0044451019120150

1. ВВЕДЕНИЕ

Настоящая статья является продолжением работы автора [1], в которой получена двумерная магнитная фазовая диаграмма, относящаяся к нижней подзоне Хаббарда, в которой имеется полный нэстинг. В разд. 2 будет получено уравнение состояния, в котором можно обнаружить структурную неустойчивость, а в разд. 3 получена магнитная фазовая диаграмма, которая содержит связь между электронной концентрацией и волновым вектором спиральности q . При этом при $q = 0$ мы получаем критическую концентрацию, соответствующую ферромагнитному упорядочению, а при $q = \pi$ имеем критическую антиферромагнитную концентрацию, соответствующую удвоению периода.

Уравнения для одномерной модели неидеального ферми-газа были впервые получены в работах Макгайра [2]. Они были записаны в «первичном» квантовании, а затем развиты в работах Годена [3], Либа и Ву [4], и др. Ограниченность такого подхода впервые отметил Галицкий [5], который показал, что в «первичном» квантовании не учитываются никакие обменные эффекты. В этом смысле следует понимать конечную область применимости линейных интегральных уравнений, полученных Годеном в его диссертации [3, 6].

* E-mail: zaitsev_rogdai@mail.ru

2. УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ

В настоящей работе предполагается, что энергия Хаббарда [7] является наибольшим энергетическим параметром. Поэтому гамильтониан записывается через X -операторы Хаббарда. Одноэлектронные операторы рождения и уничтожения представляются в виде суммы X -операторов перехода между пустым $|0\rangle$ и одночастичным $|\sigma\rangle$, а также между одночастичным $|\sigma\rangle$ и двухчастичными $|II\rangle$ состояниями:

$$\hat{a}_\sigma^+ = \hat{X}^{\sigma|0} + \sigma \hat{X}^{II|-\sigma}, \quad \hat{a}_\sigma = \hat{X}^{0|\sigma} + \sigma \hat{X}^{-\sigma|II}. \quad (1)$$

Здесь и ниже X_Γ^α — X -операторы ферми-типа, удовлетворяющие нефермижидкостным перестановочным соотношениям

$$\{\hat{X}_\Gamma^{nm}, \hat{X}_{\Gamma'}^{kp}\} = \delta_{\Gamma, \Gamma'} (\delta_{mk} \hat{X}^{np} + \delta_{pn} \hat{X}_\Gamma^{km}). \quad (2)$$

Уравнения для нахождения средних чисел заполнения n_m находим из определения температурной функции Грина для каждой пары сопряженных X -операторов:

$$D^{\alpha, \beta}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = -\Theta(\tau - \tau') \langle X_\Gamma^\alpha(\tau) X_{\Gamma'}^\beta(\tau') \rangle + \Theta(\tau' - \tau) \langle X_{\Gamma'}^\beta(\tau') X_\Gamma^\alpha(\tau) \rangle. \quad (3)$$

Для вычисления одночастичной функции Грина используем простейшее однопетлевое приближение самосогласованного поля. В этом приближении компоненты Фурье одночастичной функции Грина $D_\omega^{\alpha, \beta}(\mathbf{p})$ только множителями f_β отличаются от так

называемой виртуальной функции Грина $G_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p})$, которая, в свою очередь, удовлетворяет уравнению типа Дайсона:

$$D_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}) = G_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p})f_{\beta}; \quad \left\{ \hat{G}_{\omega}^{-1}(\mathbf{p}) \right\}_{\beta}^{\alpha} = \{i\omega - \epsilon_m + \epsilon_s\} \delta(\alpha + \beta) - \Sigma_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}). \quad (4)$$

Здесь $\epsilon_m - \epsilon_s$ — энергия перехода, отвечающая номеру перехода α , $\omega = T(2n + 1)\pi$.

При заданных номерах одночастичного перехода $\beta(m, s)$ каждый концевой множитель f_{β} равен сумме средних чисел заполнения начального и конечного состояния. В нашем приближении собственно-энергетическая часть есть сумма произведений концевых множителя на обобщенную матрицу перескоков, а также однопетлевой поправки: $f_{\alpha(s,m)} = n_s + n_m$,

$$\Sigma_{\omega}^{\alpha,\beta}(\mathbf{p}) = f_{\alpha} t_{\beta}^{\alpha}(\mathbf{p}) + \Sigma^{\alpha,\beta}, \quad (5)$$

$$t_{\beta}^{\alpha}(\mathbf{p}) = g_{\alpha}^{k,\sigma} t_s^k(\mathbf{p}) g_{\beta}^{s,\sigma}.$$

В нуль-петлевом приближении и при нулевом внешнем магнитном поле $f_1 = 1 - n/2$, $f_2 = n/2$,

$$\left[\hat{G}_{\omega}^{\sigma}(\mathbf{p}) \right]^{-1} = \begin{pmatrix} i\omega - \epsilon + \mu - f_1 t_{\mathbf{p}} & -\sigma f_1 t_{\mathbf{p}} \\ -\sigma f_2 t_{\mathbf{p}} & i\omega - \epsilon - U + \mu - f_2 t_{\mathbf{p}} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где n — электронная плотность.

Для получения уравнения состояния вычисляем две независимых комбинации одночастичной функции Грина:

$$G_{-}^{\sigma}(\omega, \mathbf{p}) = (G_{\omega}^{\sigma}(\mathbf{p}))_{1,1} + \sigma (G_{\omega}^{\sigma}(\mathbf{p}))_{2,1}, \quad (7)$$

$$G_{+}^{\sigma}(\omega, \mathbf{p}) = \sigma (G_{\omega}^{\sigma}(\mathbf{p}))_{1,2} + (G_{\omega}^{\sigma}(\mathbf{p}))_{2,2}. \quad (8)$$

Тогда с помощью определения среднего числа частиц с заданной проекцией σ находим

$$n_{\sigma} = \langle \hat{a}_{\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\sigma} \rangle = n_{II} + n_I^{\sigma} = f_2^{-\sigma} = T \sum_{\mathbf{p}, \omega} (G_{-}^{\sigma}(\omega, \mathbf{p}) e^{i\omega\delta} f_1^{\sigma} + G_{+}^{\sigma}(\omega, \mathbf{p}) e^{i\omega\delta} f_2^{\sigma}). \quad (9)$$

Для того чтобы просуммировать по комплексным частотам $i\omega = i(2n + 1)\pi T$, подставим в правую сторону определения (9) явное выражение для одночастичной функции Грина из (6).

В результате после суммирования по проекциям спина получаем уравнение состояния

$$n = 2T \sum_{\mathbf{p}, \omega} \exp(i\omega\delta) \times \left[\frac{(i\omega - U + \mu)f_1 + (i\omega + \mu)f_2}{(i\omega - \xi_{\mathbf{p}}^{+})(i\omega - \xi_{\mathbf{p}}^{-})} \right], \quad (10)$$

где

$$\xi_{\mathbf{p}}^{\pm} = \frac{U}{2} + \frac{t_{\mathbf{p}}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + t_{\mathbf{p}}^2 - 2U(1-n)t_{\mathbf{p}}} - \mu \quad (11)$$

— две энергетические ветви спектра.

Проводя разложение в правой части (10) на простые энергетические множители, находим

$$n = 2 \sum_{\mathbf{p}, \lambda} A^{\lambda}(\mathbf{p}) n_F(\xi_{\mathbf{p}}^{\lambda}),$$

$$A^{\pm}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{t_{\mathbf{p}} - U(1-n)}{\sqrt{U^2 + t_{\mathbf{p}}^2 - 2U(1-n)t_{\mathbf{p}}}} \right]. \quad (12)$$

Поскольку в уравнении подынтегральное выражение зависит от импульса через функцию перескока $t_{\mathbf{p}}$, можно ввести функцию плотности состояний $\rho(\epsilon) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon - t_{\mathbf{p}})$.

3. УСЛОВИЯ СТРУКТУРНОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

Для одномерной системы, для двумерной квадратной решетки и трехмерной системы типа ГЦК плотности состояний записываются следующим образом:

$$\rho_1(\epsilon) = \frac{1}{\pi \sqrt{1 - \epsilon^2}}, \quad \rho_2(\epsilon) = \frac{2}{\pi^2} K(\sqrt{1 - \epsilon^2}), \quad (13)$$

$$\rho_3(\epsilon) = \frac{1}{2 \ln(e/2)} \ln \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \epsilon^2}} \right),$$

где $K(\sqrt{1 - \epsilon^2})$ — полный эллиптический интеграл первого рода, который имеет логарифмическую особенность при $|\epsilon| \rightarrow 0$, две другие плотности состояний $\rho_{1,2}$ имеют краевую плотность состояний на краю зоны (при $|\epsilon| \rightarrow 1$).

В пределе $T = 0$ и при заполнении нижней хаббардовской подзоны получаем

$$n = n_{+} + n_{-} = \sum_{\mathbf{p}} \left[1 - \frac{t_{\mathbf{p}} - U(1-n)}{\sqrt{U^2 + t_{\mathbf{p}}^2 - 2Ut_{\mathbf{p}}(1-n)}} \right] \theta(-\xi_{\mathbf{p}}^{(-)}). \quad (14)$$

С помощью введения плотности состояний уравнение (14) переписывается следующим образом:

$$n = \int_{\min \epsilon}^{f(n)} \left[1 - \frac{\epsilon - U(1-n)}{\sqrt{U^2 + \epsilon^2 - 2U\epsilon(1-n)}} \right] \times \theta(-\xi^{(-)}(\epsilon)) \rho(\epsilon) d\epsilon, \quad (15a)$$

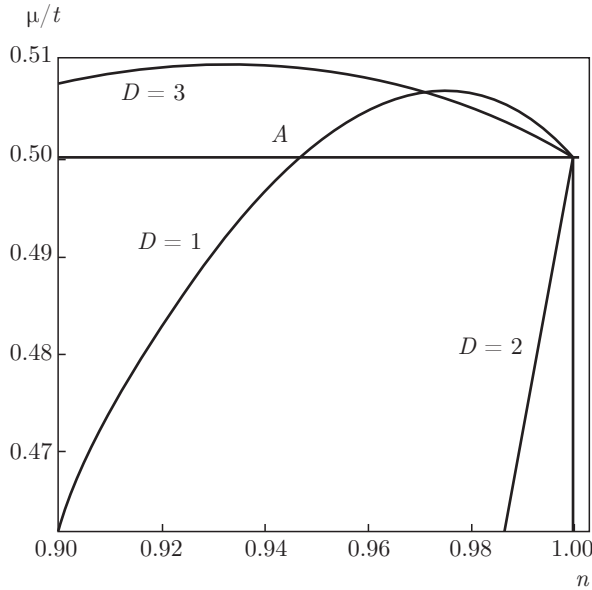


Рис. 1. Уравнение состояния $\mu(n)$ при значении энергии Хаббарда $U = \infty$, $T = 0$, $D = 1$ и $D = 2$; $A(n = 0.946, \mu = 0.5)$ — точка возникновения неоднородных состояний в одномерной системе

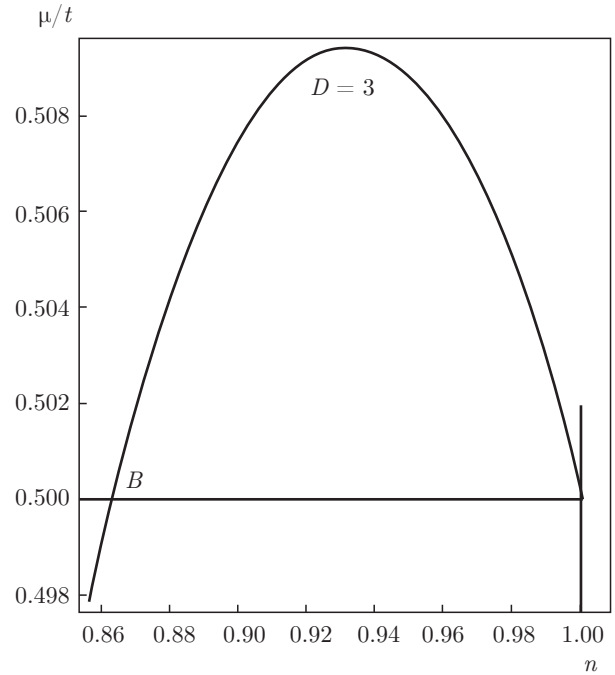


Рис. 2. Уравнение состояния $\mu(n)$ при значении энергии Хаббарда $U = \infty$, $T = 0$, $D = 3$; $B(n = 0.863, \mu = 0.5)$ — точка возникновения неоднородных состояний в трехмерной ГЦК-системе

где согласно (11)

$$\xi^\pm(\epsilon) = \frac{U}{2} + \frac{\epsilon}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{U^2 + \epsilon^2 - 2U(1-n)\epsilon} - \mu. \quad (15b)$$

Здесь интегрирование распространяется на области заполнения в нижней подзоне Хаббарда. Нижний предел интегрирования в согласии с (13) равен -1 , а верхний предел интегрирования в (15а) определяется из условия $\xi^{(-)}(\epsilon) = 0$, что соответствует

$$f(n) \equiv f(n, U, \mu) = \frac{2\mu(U - \mu)}{(2 - n)U - 2\mu}. \quad (16)$$

Рассмотрим уравнение состояния в пределе $U = \infty$:

$$n = (2 - n) \int_{-1}^{f(n, \infty)} \rho(x) dx, \quad f(n, \infty) = \frac{2\mu}{2 - n}, \quad (17)$$

где верхний предел интегрирования в (17) определяется из (16). Решение уравнения (17) находим после подстановки плотности состояния и дальнейшего интегрирования по параметру ϵ . В результате получаем уравнение состояния $\mu = \mu(n)$ для одномерного случая (см. рис. 1):

$$\mu = \frac{(2 - n)}{2} \sin \left[\frac{\pi(3n - 2)}{2(2 - n)} \right]. \quad (18)$$

Соответствующие кривые изображены на рис. 1, из которого следует, что расслоение невозможно для двумерной системы.

Для случая трехмерной ГЦК-решетки расслоение также возникает при заполнении дырочной поверхности Ферми. При этом плотность состояний обращается в бесконечность по логарифмическому закону: $\rho \sim \ln(1 - \epsilon)$ [1]. Для наглядности рассмотрена следующая плотность состояний:

$$\rho_3(\epsilon) = \frac{1}{2 \ln(e/2)} \ln \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \epsilon^2}} \right), \quad (19)$$

которая при $\epsilon \approx \pm 1$ имеет логарифмическую особенность.

Проводя численные расчеты с помощью соотношения (17), получаем зависимость $\mu(n)$, которая имеет максимум шириной $\Delta\epsilon = 0.14$, как показано на рис. 2 — кривая $D = 3$.

Для нахождения точки расслоения в случае конечных U запишем уравнение состояния (2а) в следующем общем виде: $\varphi(n, \mu, U) = 0$, а затем вычислим производную μ'_n :

$$\frac{\partial \varphi(n, \mu, U)}{\partial n} dn + \frac{\partial \varphi(n, \mu, U)}{\partial \mu} d\mu = 0 \quad (20)$$

или

$$\frac{d\mu}{dn} = - \frac{\partial\varphi(n, \mu, U)}{\partial n} / \frac{\partial\varphi(n, \mu, U)}{\partial\mu}.$$

Таким образом, появление точки максимума на кривой возникновения точки расслоения совпадает с условием обращения в нуль производной $\varphi(n, \mu, U)$ по n :

$$1 = - \int_{-1}^{f(n)} \left\{ \frac{U^2 (U - x(1-n))}{[\sqrt{U^2 + x^2 - 2Ux(1-n)}]^3} \right\} \rho(x) dx +$$

$$+ f'(n) \left[1 - \frac{f(n) - U(1-n)}{\sqrt{U^2 + f(n)^2 - 2Uf(n)(1-n)}} \right] \times$$

$$\times \rho(f(n)), \quad (21a)$$

где

$$f'(n) \equiv \frac{\partial f(n, U, \mu)}{\partial n} = \frac{2\mu U(U - \mu)}{((2-n)U - 2\mu)^2}. \quad (21b)$$

Совместное решение уравнений (21a) и (21b) при заданном значении энергии Хаббарда U определяет максимальное значение кривой химического потенциала μ в зависимости от плотности n . Для одномерной плотности состояний имеем кривую¹⁾, изображенную на рис. 3.

Важно заметить, что возникновение максимума зависимости химического потенциала от плотности непосредственно связано с корневой сингулярностью плотностей состояний. Если же вместо одномерной плотности состояний использовать затравочную плотность состояний, соответствующую двумерной квадратной или трехмерной простой кубической и ОЦК-решеткам, то система уравнений (21a), (21b) не будет иметь решения. Расслоения на фазы нет!

Используя эту аналогию, можно предположить, что расслоение на фазы имеет место для ГЦК-решетки, поскольку ее плотность состояний на краю зоны имеет логарифмическую плотность состояний.

3.1. Магнитная фазовая диаграмма одномерной модели Хаббарда

Рассмотрим условие магнитного упорядочения при заданном передаваемом импульсе \mathbf{q} .

Будем искать магнитную аномальную функцию Грина в следующем виде:

$$\Sigma_{\mathbf{q}}^{(m)}(\mathbf{p}) = C + Dt_{\mathbf{p}+\mathbf{q}/2}.$$

¹⁾ Соответствующие интегралы сводятся к эллиптическим [8], однако получаемые таким образом выражения имеют весьма громоздкий вид [9].

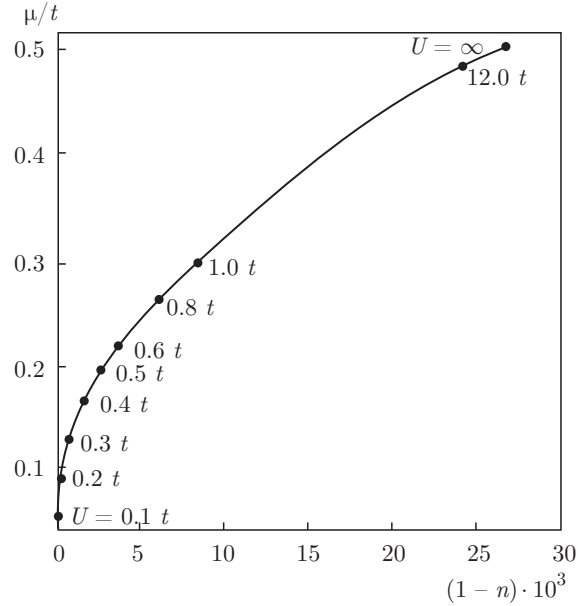


Рис. 3. Положения максимумов уравнения состояния $\mu(n)$ в зависимости от значения энергии Хаббарда (одномерная модель, $T = 0$), $U = \infty (n = 0.9735, \mu/t = 0.5065)$

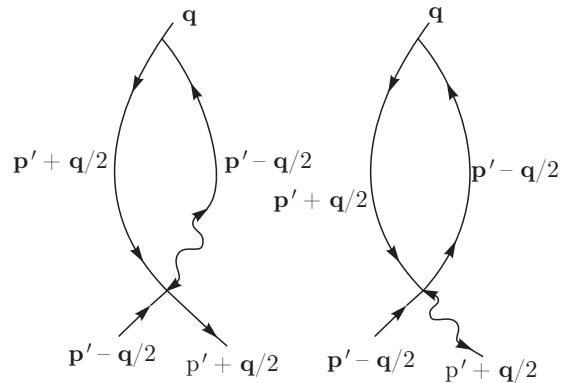


Рис. 4. Аномальные магнитные собственно-энергетические части, записанные в линейном приближении при $U = \infty$

Используя ее графическое представление, изображенное на рис. 4, получим уравнения для определения коэффициентов C и D :

$$C = -T \sum_{\omega, \mathbf{p}} G_{\omega}(\mathbf{p}' - \mathbf{q}/2) t_{\mathbf{p}' - \mathbf{q}/2} \{ C + Dt_{\mathbf{p}' + \mathbf{q}/2} \} \times$$

$$\times G_{\omega}(\mathbf{p}' + \mathbf{q}/2), \quad (22a)$$

$$D = -T \sum_{\omega, \mathbf{p}} G_{\omega}(\mathbf{p}' - \mathbf{q}/2) \{ C + Dt_{\mathbf{p}' + \mathbf{q}/2} \} \times$$

$$\times G_{\omega}(\mathbf{p}' + \mathbf{q}/2). \quad (22b)$$

Здесь $G_\omega(\mathbf{p}') = 1/(i\omega - ft_{\mathbf{p}} + \mu)$ — одночастичная функция Грина, $t_{\mathbf{p}}$ — интеграл перескока, $f = 1 - n/2$ — концевой множитель.

Требование разрешимости полученной системы уравнений дает условие возникновения магнитного упорядочения:

$$1 = W_1^{(+)}(\mathbf{q}) + W_1^{(-)}(\mathbf{q}) - W_2(\mathbf{q})W_0(\mathbf{q}) + W_1^{(+)}(\mathbf{q})W_1^{(-)}(\mathbf{q}), \quad (23)$$

где

$$W_0(\mathbf{q}) = -T \sum_{\omega, \mathbf{p}} G_\omega(\mathbf{p} + \mathbf{q}/2)G_\omega(\mathbf{p} - \mathbf{q}/2), \quad (24a)$$

$$W_1^\pm(\mathbf{q}) = -T \sum_{\omega, \mathbf{p}} t_{\mathbf{p} \pm \mathbf{q}/2} \times G_\omega(\mathbf{p} + \mathbf{q}/2)G_\omega(\mathbf{p} - \mathbf{q}/2), \quad (24b)$$

$$W_2(\mathbf{q}) = -T \sum_{\omega, \mathbf{p}} t_{\mathbf{p} + \mathbf{q}/2} t_{\mathbf{p} - \mathbf{q}/2} \times G_\omega(\mathbf{p} + \mathbf{q}/2)G_\omega(\mathbf{p} - \mathbf{q}/2). \quad (24c)$$

В общем случае поляризационный оператор $W_0(\mathbf{q})$ имеет вид

$$W_0(\mathbf{q}) = - \sum_{\mathbf{p}} \frac{n_F(\mathbf{p} + \mathbf{q}/2) - n_F(\mathbf{p} - \mathbf{q}/2)}{ft_{(\mathbf{p} + \mathbf{q}/2)} - ft_{(\mathbf{p} - \mathbf{q}/2)}}. \quad (25)$$

При нулевой температуре

$$W_0(\mathbf{q}) = - \sum_{\mathbf{p}} \frac{\theta(\mu - ft_{(\mathbf{p} + \mathbf{q}/2)}) - \theta(\mu - ft_{(\mathbf{p} - \mathbf{q}/2)})}{ft_{(\mathbf{p} + \mathbf{q}/2)} - ft_{(\mathbf{p} - \mathbf{q}/2)}}. \quad (26)$$

В одномерном случае $t_{\mathbf{p}} = t \cos(p)$

$$W_0(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi f \sin(q/2)} \int_{p=\bar{\mu}-q/2}^{p=\bar{\mu}+q/2} \frac{dp}{\sin(p)}. \quad (27a)$$

Аналогичным образом

$$W_1^\pm(\mathbf{q}) = \frac{\text{ctg}(q/2)}{4\pi f} \int_{p=\bar{\mu}-q/2}^{p=\bar{\mu}+q/2} \text{ctg}(p) dp \mp \frac{\bar{\mu}}{2\pi f}, \quad (27b)$$

$$W_1^+(\mathbf{q}) + W_1^-(\mathbf{q}) = \frac{\text{ctg}(q/2)}{2\pi f} \int_{p=\bar{\mu}-q/2}^{p=\bar{\mu}+q/2} \text{ctg}(p) dp, \quad (27c)$$

$$W_2(\mathbf{q}) = \int_{p=\bar{\mu}-q/2}^{p=\bar{\mu}+q/2} \frac{(\cos(p) \cos(q/2))^2 - (\sin(p) \sin(q/2))^2}{4\pi f \sin(p) \sin(q/2)} dp = \frac{(\cos(q/2))^2}{\sin(q/2)4\pi f} \int_{p=\bar{\mu}-q/2}^{p=\bar{\mu}+q/2} \frac{1}{\sin(p)} dp - \frac{1}{\sin(q/2)4\pi f} \times \int_{p=\bar{\mu}-q/2}^{p=\bar{\mu}+q/2} \sin(p) dp. \quad (28)$$

Здесь и ниже $\bar{\mu} = \arccos(\mu/f)$,

$$\int_{p=\bar{\mu}-q/2}^{p=\bar{\mu}+q/2} \text{ctg}(p) dp = \ln \left\{ \left| \frac{\sin(\bar{\mu} + q/2)}{\sin(\bar{\mu} - q/2)} \right| \right\},$$

$$\int_{p=\bar{\mu}-q/2}^{p=\bar{\mu}+q/2} \frac{dp}{\sin(p)} = \frac{1}{2} \ln \left\{ \left| \frac{[1 - \cos(\bar{\mu} + q/2)] [1 + \cos(\bar{\mu} - q/2)]}{[1 - \cos(\bar{\mu} - q/2)] [1 + \cos(\bar{\mu} + q/2)]} \right| \right\}. \quad (29)$$

3.2. Точка возникновения ферромагнетизма в одномерной модели Хаббарда $q = 0$

Рассмотрим сначала область решений, когда $q = 0$, т.е. ферромагнитную область. При этом $W_2 W_0 = W_1^2$.

Таким образом, условие возникновения фазового перехода:

$$1 = \frac{\text{ctg}(q/2)}{2\pi f} \int_{p=\bar{\mu}-q/2}^{p=\bar{\mu}+q/2} \text{ctg}(p) dp = \frac{\text{ctg}(q/2)}{2\pi f} \ln \left\{ \left| \frac{\sin(\bar{\mu} + q/2)}{\sin(\bar{\mu} - q/2)} \right| \right\} = \frac{\text{ctg}(q/2)}{2\pi f} \ln \left\{ \left| \frac{\sin(\bar{\mu}) \cos(q/2) + \cos(\bar{\mu}) \sin(q/2)}{\sin(\bar{\mu}) \cos(q/2) - \cos(\bar{\mu}) \sin(q/2)} \right| \right\} \approx \frac{1}{\pi f} \text{ctg}(\bar{\mu}) = \frac{1}{\pi f} \frac{z}{\sqrt{1 - (z)^2}}, \quad (30)$$

где $z = \mu/f$.

Решая это уравнение совместно с уравнением состояния

$$n = (2 - n) \frac{1}{2\pi} (2\arcsin(z) + \pi), \quad (31)$$

находим критическое значение химического потенциала μ , а также критическую концентрацию: $z = 0.864$, $\mu = 0.528$, $n = 0.908$.

3.3. Точка возникновения антиферромагнетизма в одномерной модели Хаббарда $q = \pi$

При $q = \pi$ имеем

$$W_0(\pi) = \frac{1}{4\pi f} \ln \left| \frac{1 + \sin(\bar{\mu})}{1 - \sin(\bar{\mu})} \right| = \frac{1}{4\pi f} \ln \left| \frac{1 + \sqrt{1 - z^2}}{1 - \sqrt{1 - z^2}} \right|, \quad (32)$$

$$W_2(\pi) = \frac{1}{2\pi f} \sin(\bar{\mu}) = \frac{1}{2\pi f} \sqrt{1 - z^2},$$

где $z = \mu/f$ — безразмерный параметр, который связан с плотностью с помощью уравнения состояния (31).

При этом оказывается, что критическое значение химического потенциала $\bar{\mu}$ близко к нулю. По этой причине можно положить, что $W_1 = 0$, а уравнение для нахождения антиферромагнитной фазы имеет вид $1 = W_0(\pi)W_2(\pi)$. Таким образом, имеем уравнение для нахождения критических значений z и n :

$$f^2 = \left(1 - \frac{n}{2}\right)^2 = \frac{1}{8\pi^2} \sqrt{1 - z^2} \ln \left| \frac{1 + \sqrt{1 - z^2}}{1 - \sqrt{1 - z^2}} \right|, \quad (33)$$

$$n = (2 - n) \frac{1}{2\pi} (2\arcsin(z) + \pi).$$

Отсюда находим две критических точки, между которыми появляется антиферромагнитное упорядочение: ($n = 0.65925$, $z = -0.02607$, $\mu = -0.01748$) и ($n = 0.67400$, $z = 0.02607$, $\mu = 0.01729$).

3.4. Условия возникновения спиральной структуры $q \neq 0$

Удобно выразить переменную $\bar{\mu} = \arccos z$ через плотность. Для этой цели находим z через n с помощью уравнения состояния:

$$z = \sin \left(\frac{\pi(3n - 2)}{2(2 - n)} \right), \quad (34)$$

$$\bar{\mu} = \arccos \left[\sin \left(\frac{\pi(3n - 2)}{2(2 - n)} \right) \right] = 2\pi \frac{(1 - n)}{(2 - n)}.$$

В результате все три функции $W_k(q)$ оказываются выраженными через плотность и q :

$$W_0(\mathbf{q}) = \frac{1}{8\pi f \sin(q/2)} \times \ln \left\{ \frac{(|1 - \cos(\bar{\mu} + q/2)|)(|1 + \cos(\bar{\mu} - q/2)|)}{(|1 - \cos(\bar{\mu} - q/2)|)(|1 + \cos(\bar{\mu} + q/2)|)} \right\}, \quad (34a)$$

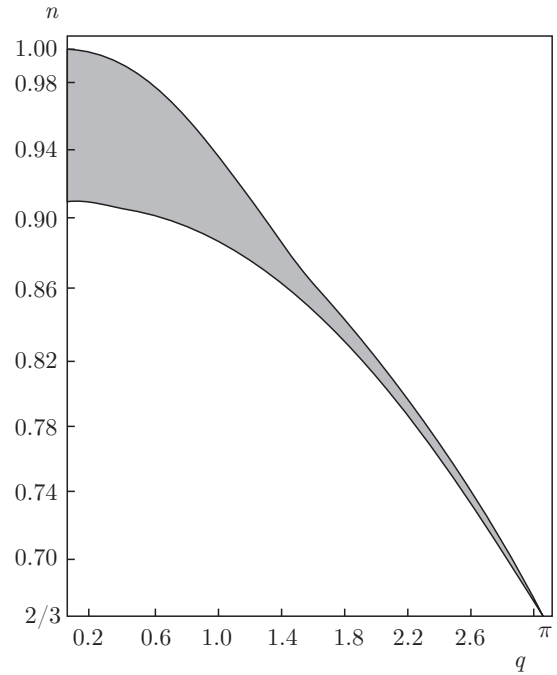


Рис. 5. Область существования спиральной структуры, которая заключена между двумя кривыми

$$W_1^\pm(\mathbf{q}) = -\frac{\text{ctg}(q/2)}{4\pi f} \times \ln \left\{ \left| \frac{\sin(\bar{\mu} + q/2)}{\sin(\bar{\mu} - q/2)} \right| \right\} \mp \frac{\bar{\mu}}{2\pi f}, \quad (34b)$$

$$W_2(\mathbf{q}) = \frac{(\cos(q/2))^2}{\sin(q/2)8\pi f} \times \ln \left\{ \frac{(|1 - \cos(\bar{\mu} + q/2)|)(|1 + \cos(\bar{\mu} - q/2)|)}{(|1 - \cos(\bar{\mu} - q/2)|)(|1 + \cos(\bar{\mu} + q/2)|)} \right\} + \frac{\sin(\bar{\mu})}{2\pi f}, \quad (34c)$$

где $\sin(\bar{\mu}) = \sin(2\pi(1 - n)/(2 - n))$, $f = 1 - n/2$.

Далее находим соотношение между q и n из условия возникновения точки перехода:

$$1 = W_1^{(+)}(\mathbf{q}) + W_1^{(-)}(\mathbf{q}) - W_0(\mathbf{q})W_2(\mathbf{q}) + W_1^{(+)}(\mathbf{q})W_1^{(-)}(\mathbf{q}). \quad (35)$$

Как следует из рис. 5, спиральная антиферромагнитная структура может существовать в достаточно широкой области волновых векторов (от нуля до $q = \pi$). При этом с уменьшением длины волны происходит понижение концентрационной области существования вплоть до величины $q = 2.88$, начиная с которой эта область становится экспоненциально малой, и, наконец, исчезает при $q = \pi$.

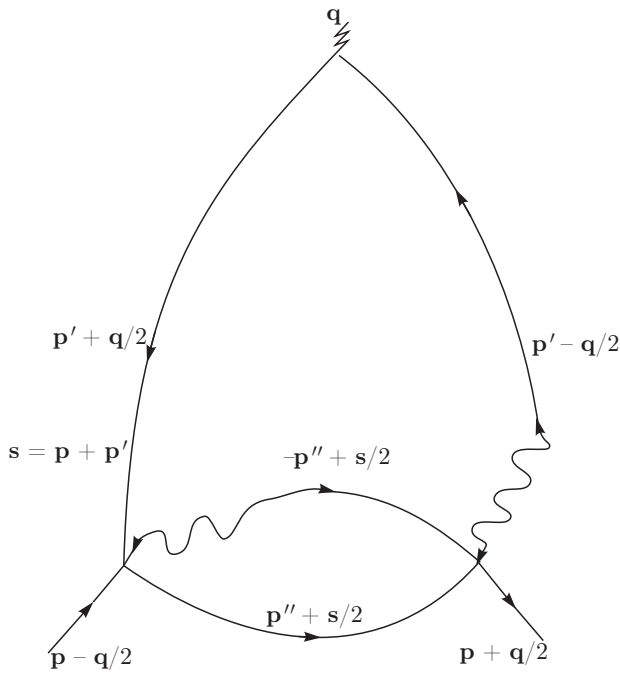


Рис. 6. Простейшая паркетная поправка к антиферромагнитной вершинной части

Аналогичные результаты, относящиеся к одномерной модели, были получены в работе Дзялошинского – Ларкина [10]. Авторы получили достаточно общий результат, относящийся к модели Хаббарда: при отрицательном знаке затравочной константы взаимодействия система является сверхпроводящей, а при положительном знаке, она оказывается антиферромагнитной. Нетрудно проследить, что этот результат справедлив при малой энергии Хаббарда U , в то время как наши результаты относятся к бесконечно большой, положительной энергии U .

Полученная фазовая диаграмма обусловлена наличием амплитуды так называемого кинематического взаимодействия [11], которое определяет также куперовскую петлю $\Pi_s^{(c)}(p)$, которая перенормирует вклад логарифмической антиферромагнитной поправки (см. рис. 6). В одномерном случае и при $T = 0$ имеем

$$\begin{aligned} \Pi_s^{(c)}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{2|f \cos(p'' - s/2) + f \cos(p + s/2) - \mu|} = \\ &= \frac{1}{2|f \cos p \cos(s/2) - \mu|}. \end{aligned}$$

Дальнейшее вычисление суммы по импульсу p' связано с условием $s = p' + p$. Запишем поэтому оставшуюся сумму по p' и p'' в следующем виде, содержащем сингулярную сумму по p' :

$$\begin{aligned} & - \text{ctg} \frac{q}{2} \sum_{p', p''} \Pi_{p'+p}^{(c)}(p'') \cos(p') \times \\ & \times \left[\frac{\theta(\mu - ft_{p'+q/2}) - \theta(\mu - ft_{p'-q/2})}{2 \sin(p')} \right] = \\ & = \text{ctg} \frac{q}{2} \frac{1}{16\pi^2} \int_{\bar{\mu}-q/2}^{\bar{\mu}+q/2} dp' \frac{\cos(p')}{\sin(p')} \times \\ & \times \int_0^\pi \frac{dp''}{|\cos(p'') \cos((p+p')/2) - \mu/f|}. \end{aligned}$$

Можно заметить, что результат интегрирования приводит к логарифмически расходящемуся интегралу, но не дает дважды логарифмической расходимости по причине существенной анизотропии двух пересекающихся поверхностей Ферми.

Таким образом, можно утверждать, что в реальной, анизотропной, модели Хаббарда влияние паркетных диаграмм на магнитную фазовую диаграмму не является существенным, а фазовая диаграмма определяется с помощью рис. 5 соответствующим однопетлевым приближением.

Аналогичным образом, можно предположить, что зависимость химического потенциала от концентрации (18), содержащая структурную неустойчивость в одномерной модели, качественно определяется с помощью нуль-петлевого приближения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **152**, 975 (2017).
2. J. V. McGuire, J. Math. Phys. **6**, 432 (1965); **7**, 123 (1966).
3. М. Годен, *Волновая функция Бете*, Мир, Москва (1987).
4. E. Lieb and T. T. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
5. В. М. Галицкий, ЖЭТФ **34**, 151 (1958).
6. M. Gaudin, Thèse Univ. de Paris, Rapport CEA. Saclay.: N5, 3569 (1968).
7. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. **281**, 1386 (1964).
8. И. С. Градштейн, Н. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, рядов, сумм и произведений*, Изд. 5-е, Наука, Москва (1977).
9. G. Iwata, Natural Science Rep., Ochanomizu Univ. **20**, 13 (1969).
10. И. Е. Дзялошинский, А. И. Ларкин, ЖЭТФ **61**, 61 (1971).
11. R. O. Zaitsev, Phys. Lett. A **134**, 199 (1988).