Физика низких температур, 1996, т. 22, № 11, с. 1281–1286

Парамагнетизм в модели Хаббарда с сильным отталкиванием

Р. О. Зайцев, Ю. В. Михайлова

Российский научный центр «Курчатовский институт», Россия, 123182, г. Москва, пл. И. В. Курчатова, 1

Спиновая магнитная восприимчивость определена в приближении самосогласованного поля. Показано, что для квадратной решетки, а также для треугольной решетки с отрицательным интегралом перескока система остается парамагнитной при всех концентрациях $n < 1$. В случае треугольной решетки с положительным интегралом перескока система переходит в ферромагнитное состояние для концентрации близкой к 0,4.

Спінову магнітну сприйнятливість одержано в наближенні самоузгодженого поля. Показано, що для квадратної гратки, а також для трикутної гратки з від'ємним інтегралом перескоку система залишається парамагнітною при усіх концентраціях $n < 1$. У випадку трикутної гратки з додатним інтегралом перескоку система переходить у феромагнітний стан для концентрації поблизу 0,4.

Существование короткодействующего отталкивания электронов с противоположно направленными спинами приводит к существенному усилению спинового парамагнетизма. Это явление изучалось в пределе малой концентрации электронов n для трехмерной изотропной системы. Было показано [1], что поведение восприимчивости определяется произведением амплитуды рассеяния на плотность состояний. В трехмерном случае плотность состояний быстро возрастает с увеличением концентрации, и был сделан вывод о возможности существования ферромагнетизма. Однако оказалось [2], что в анизотропной решетке амплитуда двухчастичного рассеяния, вычисленная на поверхности Ферми, есть убывающая функция энергии, так что возникновение ферромагнетизма можно ожидать только в случае аномально больших значений плотности состояний.

Настоящая работа посвящена изучению двумерной модели Хаббарда. В этом случае плотность состояний на краю зоны конечна, так что в качестве простейшей интерполяции в двух первых разделах вычисления проделаны для прямоугольной плотности состояний:

$$\rho_0(\varepsilon) = \sum \delta(\varepsilon - t_{\mathbf{p}}) = \theta(w^2 - \varepsilon^2)/2w. \qquad (1)$$

В первом разделе проведено сравнение энергии насыщенного ферромагнитного состояния с энергией парафазы. Решение этой задачи в приближении «Хаббард I» приводит к заключению о неустойчивости насыщенного ферромагнетизма.

В следующем разделе подробно исследуется парамагнитная фаза. Вычисляется спиновая восприимчивость, а также производная плотности частиц по химическому потенциалу, которая определяет обратный квадрат дебаевского радиуса экранирования.

В третьем разделе вычисляется магнитная восприимчивость квадратной и треугольной решеток в пределе $U \to \infty$ и при $T = 0$. Для квадратной решетки остаются справедливыми качественные выводы, основанные на вычислениях в модели плоской зоны (1). В случае треугольной решетки с положительным интегралом перескока, т.е. для дырочного заполнения система переходит в ферромагнитное состояние , так как плотность состояний обращается в бесконечность в той области энергией, для которых амплитуда рассеяния остается конечной и положительной. Для отрицательных интегралов перескока плотность состояний обращается в бесконечность в области энергий, где амплитуда рассеяния отрицательна, что соответствует возможности перехода в сверхпроводящее состояние.

1. Неустойчивость насыщенного ферромагнетизма

Согласно правилу Хунда, для системы эквивалентных электронов в качестве основного осуществляется состояние с наибольшим спином. Поэтому в случае $|n - 1| \ll 1$ можно было бы предположить существование сильного ферромаг-

© Р. О. Зайцев, Ю. В. Михайлова, 1996

нетизма, когда в системе вообще нет перевернутых спинов. Согласно Нагаока [3], дырочные состояния образуют идеальный газ с энергией возбуждений

$$\xi_{\mathbf{p}} = t_{\mathbf{p}} - \mu - H,$$

где H — эффективное магнитное поле, которое делает невозможным существование перевернутых спинов. Величина $\mu + H$ несколько ниже максимального значения $t_m = \max(t_{\mathbf{p}})$, так что в альтернантных решетках разложение функции $t_{\mathbf{p}}$ имеет вид $t_{\mathbf{p}} \approx t_m - (p^2/2m)$.

Число дырок выражается через энергию возбуждений (1):

$$n = \sum n_F(\xi_{\mathbf{p}}) = 1 - \sum n_F(-\xi_{\mathbf{p}}), \tag{2}$$

так что число дырок $1 - n$ при $T = 0$ выражается через импульс Ферми p_0:

$$1 - n = \begin{cases} p_0^2/4\pi & \text{для квадратной,} \\ (4)p_0^3/6\pi^2 & \text{для ПК или ОЦК решеток.} \end{cases} \tag{3}$$

Здесь лишняя четверка в скобках относится к ОЦК решетке, а импульс Ферми вводится согласно соотношению $\mu + H = t_m - (p_0^2/2m)$. Энергия возбуждений также выражается через импульс Ферми:

$$E_0 = \sum t_{\mathbf{p}} n_F(\xi_{\mathbf{p}}) = -(1-n)t_m \begin{cases} [1 - (p_0^2/8)] & \text{для квадратной,} \\ [1 - (3p_0^2/10)] & \text{для ПК или ОЦК решеток.} \end{cases} \tag{4}$$

Таким образом, при $T = 0$ все термодинамические величины разлагаются по степеням газового параметра $1 - n$.

Сравним полученную энергию (4) с энергией парафазы. Для этой цели используем уравнение состояния в приближении «Хаббард I» [4]

$$n = (2 - n)\sum n_F(\xi_{\mathbf{p}}), \tag{5}$$

где теперь $\xi_{\mathbf{p}} = [1 - (n/2)]t_{\mathbf{p}} - \mu$.

Рассмотрим зависимость химического потенциала от n для модели плоской зоны:

$$\rho_0(\varepsilon) = \theta(w^2 - \varepsilon^2)/2w,$$

где $\varepsilon = t(\mathbf{p})$. В пределе $T = 0$ имеем линейную зависимость $\mu = w[(3n/2) - 1]$. Откуда с помощью общего соотношения $\partial E/\partial n = \mu$, $E(0) = 0$ находим

$$E_{\text{para}} = -w[1 - (3n/4)]n. \tag{6}$$

Аналогичные вычисления по общим соотношениям (3) и (4) дают

$$E_{\text{ferro}} = -w(1 - n)n. \tag{7}$$

Таким образом, энергия насыщенного ферромагнетизма всегда больше, чем энергия парафазы, вычисленной в приближении «Хаббард I» ($U = \infty$).

2. Восприимчивость в модели плоской зоны

Для вычисления спиновой восприимчивости при конечной температуре и энергии Хаббарда U запишем средние числа заполнения n_σ при заданной проекции спина σ и величине магнитного поля H:

$$n_\sigma = T \sum_{\mathbf{p}\alpha\beta\omega} e^{i\omega\delta} D_\omega^{\alpha\beta}(\mathbf{p}),$$

где $\delta \to 0+$; $\omega = \pi T(2n + 1)$; функция Грина в приближении «Хаббард I» выражается через обратную матрицу:

$$\hat{D}_\omega^{-1}(\mathbf{p}) = \begin{array}{c} \alpha \backslash \beta \\ (0,\sigma) \\ (\bar{\sigma},2) \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cc} (0,\sigma) & (\bar{\sigma},2) \end{array} \\ \begin{pmatrix} \dfrac{i\omega + \mu + \sigma H}{n_0 + n_\sigma} - t_{\mathbf{p}} & -\sigma t_{\mathbf{p}} \\ -\sigma t_{\mathbf{p}} & \dfrac{i\omega + \mu + \sigma H - U}{n_2 + n_{\bar{\sigma}}} - t_{\mathbf{p}} \end{pmatrix} \end{array}. \tag{8}$$

Здесь n_σ — заселенности пустого ($\alpha = 0$), двух одночастичных ($\alpha = \sigma = \pm$) и двухчастичного ($\alpha = 2$) атомных уровней; $t_{\mathbf{p}}$ — интеграл перескока. После аналитического продолжения $i\omega \to E + i\delta$ находим две энергетические подзоны Хаббарда

$$\xi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = \frac{1}{2}\left[t_{\mathbf{p}} + U - 2\mu - 2\sigma H \pm \sqrt{t_{\mathbf{p}}^2 + U^2 - 2Ut_{\mathbf{p}}(1 - n + \sigma M)}\,\right], \tag{9}$$

где $n = n_+ + n_-$, $M = n_+ - n_-$ — среднее число частиц и средний магнитный момент, приходящийся на одну ячейку, $\sigma = \pm 1$.

После обращения матрицы (8) и суммирования всех четырех матричных элементов получаем

$$n_\sigma = T\sum_{\mathbf{p},\omega} e^{i\omega\delta}\,\frac{i\omega + \mu + \sigma H - U\{1 - [(n - \sigma M)/2]\}}{[i\omega - \xi_{\mathbf{p}}^{(+)}][i\omega - \xi_{\mathbf{p}}^{(-)}]}. \tag{10}$$

После суммирования по ω соотношение (10) удается привести к следующему виду:

$$n_\sigma = -T\sum_{\mathbf{p}}\frac{\delta}{\delta t_{\mathbf{p}}}\ln\left[\left(1 + e^{-\frac{\xi_{\mathbf{p}}^{(+)}}{T}}\right)\left(1 + e^{-\frac{\xi_{\mathbf{p}}^{(-)}}{T}}\right)\right]. \tag{11}$$

Отсюда находим выражение для магнитной проницаемости $\chi = \partial M/\partial H$, справедливое при всех температурах. В пределе $H \to 0$ получим

$$\chi(T) = -2\mathrm{St}\sum_{\mathbf{p}}\frac{\delta}{\delta t_{\mathbf{p}}}\left[n_F(\xi_{\mathbf{p}}^{(+)}) + n_F(\xi_{\mathbf{p}}^{(-)})\right]. \tag{12}$$

Символом St обозначен зависящий от температуры фактор Стонера

$$\mathrm{St}^{-1} = 1 - U\sum_{\mathbf{p}}\frac{\delta}{\delta t_{\mathbf{p}}}\left[t_{\mathbf{p}}\frac{n_F(\xi_{\mathbf{p}}^{(+)}) + n_F(\xi_{\mathbf{p}}^{(-)})}{\sqrt{(U - t_{\mathbf{p}})^2 + 2Unt_{\mathbf{p}}}}\right]. \tag{13}$$

В обоих соотношениях (12) и (13) $\xi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}$ — энергии электронов в верхней и нижней хаббардовских подзонах (9) при нулевом значении магнитного поля H и магнитного момента M.

Уравнение состояния в нулевом поле получаем суммированием (11)

$$n = \sum_\sigma n_\sigma = -2T\sum_{\mathbf{p}}\frac{\delta}{\delta t_{\mathbf{p}}}\ln\left[\left(1 + e^{-\frac{\xi_{\mathbf{p}}^{(+)}}{T}}\right)\left(1 + e^{-\frac{\xi_{\mathbf{p}}^{(-)}}{T}}\right)\right]. \tag{14}$$

Соотношения (12)–(14) полностью решают задачу о температурной и концентрационной зависимости спиновой восприимчивости.

В случае точно наполовину заполненной зоны, когда $n = 1$, $\mu = 1/2$, энергия возбуждений имеет следующий вид:

$$\xi_{\mathbf{p}}^{(+)} > 0,\ \xi_{\mathbf{p}}^{(-)} < 0,\ \xi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = \left\{t_{\mathbf{p}} \pm \sqrt{U^2 + t_{\mathbf{p}}^2}\right\}/2.$$

В предельном случае полностью локализованных электронов, когда $\max |\, t_{\mathbf{p}} \,| \ll \min\{T, U\}$, из (12) и (14) получаем

$$\chi = \left\{T\left[1 + \exp(-U/2T)k\right]\right\}^{-1}. \tag{15}$$

При $U \gg T$ получаем восприимчивость идеального парамагнетика со спином 1/2. С повышением температуры возникает отличная от нуля вероятность немагнитных «пустых» и «двоечных» состояний, так что при $T \gg U$ восприимчивость оказывается в два раза меньшей, чем при $U = \infty$. Наиболее интересным оказывается случай не слишком больших температур, $\min |\, \xi_{\mathbf{p}}^{(-)} \,| > T$, так как в этих условиях восприимчивость есть возрастающая функция температуры:

$$\chi = (2/UT)\sum |\, \xi_{\mathbf{p}}^{(-)} \,| \exp(-|\, \xi_{\mathbf{p}}^{(-)} \,|/T). \tag{16}$$

Кривая восприимчивости имеет температурный максимум, а при температурах $T \geq \max |\, \xi_{\mathbf{p}} \,|$ она начинает убывать.

Падение восприимчивости по закону Кюри $(1/T)$ происходит только в области достаточно высоких температур $T \geq U$.

Все закономерности наглядно проявляются в модели плоской зоны, поскольку в правых частях уравнений (11)–(14) возникает полная производная. После интегрирования уравнения (14) удается исключить из рассмотрения химический потенциал и вычислить восприимчивости через $x = 1 - n$ — степень недозаполнения нижней хаббардовской подзоны:

$$\chi(T) = 2/\{w(S - R)\},\ \frac{\partial n}{\partial \mu} = 1/\{w(S + R)\}. \tag{17}$$

В безразмерных единицах $\tau = T/w$

$$S = \frac{1}{2}\left[\operatorname{cth}\frac{1-x}{2\tau} + \operatorname{cth}\frac{1+x}{2\tau}\right] + \frac{Q\operatorname{sh}(x/T)}{2\operatorname{sh}\left[\frac{1-x}{2\tau}\right]\operatorname{sh}\left[\frac{1+x}{2\tau}\right]\sqrt{Q^2 + 4\operatorname{sh}\left[\frac{1-x}{2\tau}\right]\operatorname{sh}\left[\frac{1+x}{2\tau}\right]}} +$$

$$+ \frac{\exp(x/2\tau)\operatorname{ch}\left[\frac{\sqrt{U^2 + w^2 + 2Uwx}}{2T}\right] + \exp(-x/2\tau)\operatorname{ch}\left[\frac{\sqrt{U^2 + w^2 - 2Uwx}}{2T}\right]}{\sqrt{Q^2 + 4\operatorname{sh}\left[\frac{1-x}{2\tau}\right]\operatorname{sh}\left[\frac{1+x}{2\tau}\right]}};$$

$$R = \frac{U}{F}\left(\frac{\exp(x/2\tau)\operatorname{sh}\left[\frac{\sqrt{U^2 + w^2 + 2Uwx}}{2T}\right]}{\sqrt{U^2 + w^2 + 2Uwx}} + \frac{\exp(-x/2\tau)\operatorname{sh}\left[\frac{\sqrt{U^2 + w^2 - 2Uwx}}{2T}\right]}{\sqrt{U^2 + w^2 - 2Uwx}}\right);$$

$$Q = \exp(x/2\tau)\operatorname{ch}\left[\frac{\sqrt{U^2 + w^2 + 2Uwx}}{2T}\right] - \exp(-x/2\tau)\operatorname{ch}\left[\frac{\sqrt{U^2 + w^2 - 2Uwx}}{2T}\right];$$

$$F = \sqrt{Q^2 + 4\operatorname{sh}\left[\frac{1-x}{2\tau}\right]\operatorname{sh}\left[\frac{1+x}{2\tau}\right]}. \qquad (18)$$

В случае наполовину заполненной зоны, т.е. при $x = 0$,

$$S = \frac{\left[\operatorname{ch}\left(\frac{w}{2T}\right) + \operatorname{ch}\left(\frac{\sqrt{U^2 + w^2}}{2T}\right)\right]}{\operatorname{sh}\left(\frac{w}{2T}\right)}; \quad R = \frac{U\operatorname{sh}\left(\frac{\sqrt{U^2 + w^2}}{2T}\right)}{\sqrt{U^2 + w^2}\operatorname{sh}\left(\frac{w}{2T}\right)}; \quad \chi = 2/[w/(S - R)]. \qquad (19)$$

В предельном случае большой энергии Хаббарда U по сравнению с затравочной шириной w обе восприимчивости в качестве множителя содержат экспоненциальный фактор $\exp(-U/2T)$, **соответствующий малому числу носителей в разрешенной зоне:**

$$\chi(T) \approx \frac{4U^2}{w^3}\operatorname{sh}\left(\frac{w}{2T}\right)\exp(-U/2T);$$
$$\frac{\partial n}{\partial \mu} \approx \frac{2}{w}\operatorname{sh}\left(\frac{w}{2T}\right)\exp(-U/2T). \qquad (20)$$

Большой предэкспоненциальный фактор магнитной восприимчивости по сравнению с флуктуацией электронной плотности $\partial n/\partial\mu$ обусловлен тенденцией к локализации спинов при заполнении нижней подзоны. В пределе бесконечной энергии Хаббарда имеем простые результаты:

$$\chi(T) = (2/w)\operatorname{th}[w(1-x)/2T]; \qquad (21)$$

$$\partial n/\partial\mu = w^{-1}\{\operatorname{cth}[w(1-x)/2T] + 2\operatorname{cth}[wx/2T]\}^{-1}. \qquad (22)$$

В газовом пределе $n = 1 - x << T/w$ получаем закон Кюри, однако при самых низких температурах $T << nw << w$ температурный рост восприимчивости ограничивается величиной $2/w$. В случае почти полного заполнения нижней хаббардовской подзоны $x << 1$ закон Кюри проявляется только в пределе достаточно высоких температур $T >> w$.

Обратный квадрат радиуса экранирования $(4\pi e^2/v_0)\partial n/\partial\mu$ обращается в нуль как при малой плотности $n << T/w$, так и при малом числе носителей $|1 - n| << T/w$. В этих условиях общее соот-

ношение (20) переходит в известную формулу Дебая–Хюккеля, в которой радиус экранирования зависит от температуры как $\sqrt{T}$ и обратно пропорционален $\sqrt{\min(n, x)}$.

Таким образом, в рамках сделанных простейших предположений о применимости нульпетлевого приближения самосогласованного поля, а также о представлении затравочной плотности состояний в виде плоской зоны удается показать, что при всех температурах и концентрациях система остается парамагнитной и в ней не происходит расслоение на фазы, т.е. и восприимчивость, и $\partial n/\partial\mu$ — положительные функции и нигде не обращаются в бесконечность.

3. Влияние особенностей Ван Хова

Это поведение следует сравнить с особенностями спиновой восприимчивости, происходящими от особенностей ванхововского типа. Ограничимся для простоты случаем предельно большой энергии Хаббарда. При заданном значении проекции спина σ и внешнего поля H имеем

$$n_\sigma = f_\sigma \sum n_F(\xi_{\mathrm{p}}^\sigma)\ ,\ f_\sigma = 1 - n_{-\sigma}\ , \qquad (23)$$
$$\xi_{\mathrm{p}}^\sigma = f_\sigma t_{\mathrm{p}} - \mu - \sigma H.$$

Здесь $\sigma = \pm 1$, а суммирование производится внутри первой зоны Бриллюэна. Дифференцируя эти уравнения и переходя к пределу $H \to 0$, находим

$$\chi(T) = \chi^{(0)}\mathrm{St} =$$
$$= -2f \sum n_F'(\xi_{\mathrm{p}}) \Big\{1 - \sum n_F(\xi_{\mathrm{p}}) - f \sum \varepsilon_{\mathrm{p}}\, n'(\xi_{\mathrm{p}})\Big\}^{-1}, \qquad (24)$$

где штрих обозначает дифференцирование по ξ_{p} — энергий возбуждений в отсутствие поля.

Комбинируя определение восприимчивости (24) с уравнением состояния при $H = 0$, получаем выражение для фактора Стонера:

$$\mathrm{St} = \Big\{[(1-n)/f\,] - f \sum \varepsilon_{\mathrm{p}}\, n'(\xi_{\mathrm{p}})\Big\}^{-1},$$
$$\chi^{(0)} = -2f \sum n_F'(\xi_{\mathrm{p}})\ . \qquad (25)$$

В предельном случае $T = 0$ суммы по импульсам выражаются через плотность состояний $\rho(\mu) = \sum \delta(\xi_{\mathrm{p}})$:

$$\chi^{(0)} = -2f\rho(\mu);$$
$$\mathrm{St} = \Big\{[(1-n)/f\,] + \mu\rho(\mu)\Big\}^{-1}. \qquad (26)$$

Таким образом, в нашем приближении вся концентрационная зависимость магнитной проницаемости определяется исключительно поведением плотности состояний на поверхности Ферми $\rho(\mu)$, которая выражается через безразмерную плотность состояний $\rho_0(\varepsilon)$ с помощью следующего соотношения:

$$\rho(\mu) = (1/2|t|f)\,\rho_0(\mu/2f|t|). \qquad (27)$$

Для квадратной решетки

$$\rho_0(\varepsilon) = \pi^{-2} K\Big(\sqrt{1 - (\varepsilon/2)^2}\ \theta\ [1 - (\varepsilon/2)^2]\Big). \qquad (28)$$

При малых значениях ε плотность состояний имеет логарифмическую особенность $\rho_0(\varepsilon \ll 1) \approx \approx (1/2\pi^2)\ln(1/|\varepsilon|)$.

Для треугольной решетки функция $\rho_0(\varepsilon)$ также выражается через эллиптический интеграл первого рода $K(k)$: $\rho_0(\varepsilon) = K(k)$, где для малых энергий $(-3/2 < \varepsilon < -1)$

$$k^2 = \frac{4\sqrt{3+2\varepsilon}}{3 - \varepsilon^2 + 2\sqrt{3+2\varepsilon}}\ ,$$
$$g = \frac{2}{\pi^2\{3 - \varepsilon^2 + 2\sqrt{3+2\varepsilon}\}^{1/2}}\ ; \qquad (29а)$$

в области $-1 < \varepsilon < 3$

$$k^2 = \frac{3 - \varepsilon^2 + 2\sqrt{3+2\varepsilon}}{4\sqrt{3+2\varepsilon}}\ ,$$
$$g = \frac{1}{\pi^2(3+2\varepsilon)^{1/4}}\ . \qquad (29б)$$

При $\varepsilon \to -1$ плотность состояний имеет логарифмическую особенность

$$\rho_0(\varepsilon) \approx (1/2\pi^2)\ln(1/|1+\varepsilon|). \qquad (30)$$

Для ОЦК решетки можно определить предельные значения функции $\rho_0(\varepsilon)$. При $\varepsilon \to 0$

$$\rho_0(\varepsilon) \approx (4/\pi^3)\ln^2(1/|\varepsilon|); \qquad (31)$$

при $\varepsilon \to \pm 1$ плотность состояний обращается в нуль по корневому закону.

Согласно соотношению (26), для альтернантных решеток (квадратной и ОЦК) стонеровский фактор является непрерывной функцией химического потенциала, так как особенность плотности состояний при $\varepsilon \to 0$ компенсируется множителем ε. По этой причине вблизи особой точки $n \approx n_0 = 2/3$ спиновая часть магнитной проницаемости имеет ту же логарифмическую особенность, что и плотность состояний со стонеровским фактором 2.

В треугольной решетке положение особой энергетической поверхности не совпадает с нулевым значением энергии Ферми. Поэтому энергетический рост поляризационного оператора $\chi^{(0)}$ компенсируется соответствующим уменьшением стонеровского фактора. Такая ситуация имеет место в случае отрицательного интеграла перескока, когда особенность плотности состояний достигается при $n \approx n_- = 6/7$. При этой концентрации имеем $\chi(0) = 1/|t|$.

В случае положительного интеграла перескока, когда энергетический уровень, соответствующий особой поверхности Ферми, имеет отрицательный знак, с повышением концентрации происходит быстрое возрастание стонеровского фактора. При концентрации близкой к 2/5 стонеровский фактор проходит через $+\infty$ и становится отрицательным.

Нестабильность парамагнитного состояния в этой области приводит к возникновению ферромагнитного упорядочения.

Рассмотрим влияние поправочных членов, обусловленных остаточным электрон-электронным взаимодействием. В газовой фазе необходимо вычислить стонеровский фактор, который выражается через амплитуду рассеяния в «пустой» решетке. Учет эффектов рассеяния в однопетлевом приближении и при $T = 0$ дает следующее:

$$\mathrm{St} = \left\{ [(1 - n)(1 + R_1)/f\,] + fR_1 \right\}^{-1}, \qquad (32)$$

где $R_1 = (\mu/f)\rho(\mu), f = 1 - (n/2), \rho(\mu) = \sum \delta(\xi_{\mathbf{p}})$.

Сравнение выражений (26) и (32) показывает, что все качественные выводы о слабой концентрационной зависимости стонеровскаго фактора для альтернантных решеток, а также о возможности возникновения ферромагнетизма при $t > 0$ остаются в силе. Для треугольной решетки с отрицательным интегралом перескока магнитная восприимчивость конечна. Удается показать [2], что для положительных энергий система имеет куперовскую неустойчивость. Поэтому электронная подсистема с плоской треугольной решеткой имеет конечную магнитную восприимчивость, но при достаточно низкой температуре, начиная с некоторой концентрации, она переходит в сверхпроводящее состояние.

Дырочная подсистема с плоской треугольной решеткой, для которой всегда $t > 0$, при концентрации близкой к 2/5 переходит в ферромагнитное состояние.

Для квадратной решетки стонеровский фактор — всегда конечная и положительная величина. В широком интервале концентраций и температур термодинамические свойства определяются в модели плоской зоны согласно (17)–(22).

Таким образом, простейшее приближение «Хаббард I» определяет температурную и концентрационную зависимости спиновой и зарядовой восприимчивостей. Для половинного заполнения $n = 1$, $\mu = U/2$ спиновая восприимчивость, согласно (19), пропорциональна множителю $\mathrm{sh}\,(w/2T)$, который уменьшается с повышением температуры. Однако при низких температурах это уменьшение компенсируется температурной зависимостью фактора Стонера, который возрастает в области $T \leq w$.

Такие зависимости наблюдались в соединении Ti_2O_3. Это соединение — хаббардовский диэлектрик с одним электроном в a_{1g}-оболочке трехвалентного Ti^{3+}. Согласно [5], его магнитная восприимчивость возрастает во всей области температур, где отсутствует какое-либо магнитное упорядочение.

При переходе в металлическую фазу, где $n \neq 1$, температурная зависимость магнитной проницаемости проявляется для $T \geq w$, поскольку при $T \leq w$ в широком интервале температур проницаемость определяется произведением плотности состояний на уровне Ферми на стонеровский фактор, который при $T \leq w$ слабо зависит от температуры. Зарядовая восприимчивость приобретает температурную зависимость $\approx n^*/T$ при малом числе носителей $n^* = n$ или $|1 - n|$ при $T \geq wn^*$.

Работа выполнена при поддержке Международного научного фонда, гранты MSA000, MSA300.

1. К. Хуанг, *Статистическая механика*, Мир, Москва (1966).
2. R. O. Zaitsev, *Phys. Lett.* A134, 199 (1988).
3. Y. Nagaoka, *Phys. Rev.* 147, 392 (1966).
4. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.* A277, 237 (1964).
5. Н. Ф. Мотт, *Переходы металл—изолятор*, Наука, Москва (1979).

Paramagnetism in the Hubbard model with strong repulsion

R. O. Zaitsev and Yu. V. Mikhailova

The spin magnetic susceptibility is defined in a self-consistent field approximation. It is shown that for both the square lattice and the triangle lattice with a negative hopping integral the system has paramagnetic properties at all concentrations $n < 1$. In the case of the triangle lattice with a positive hopping integral the system turns into ferromagnetic state at the hole concentration close to 0.4.