

05,11,12

Особенности конкуренции спиновой и псевдоспиновой подсистем в модельном купрате

© Ю.Д. Панов, В.А. Улитко, К.С. Будрин, Д.Н. Ясинская, А.А. Чиков

Уральский федеральный университет,
Екатеринбург, Россия

E-mail: yuri.panov@urfu.ru

Рассмотрена конкуренция магнитного и зарядового упорядочения в модельном купрате в рамках упрощенной статической двумерной спин-псевдоспиновой модели. Эта модель эквивалентна двумерной разбавленной антиферромагнитной (AFM) модели Изинга с заряженными примесями. Представлены результаты среднего поля для исследуемой системы и их краткое сравнение с классическими расчетами Монте-Карло (МК). Численное моделирование показывает, что случаи сильного обмена и сильной зарядовой корреляции качественно различаются. Для сильного обмена AFM-фаза неустойчива по отношению к фазовому расслоению (ФР) на псевдоспиновую (зарядовую) и магнитную (спиновую) подсистемы, которые ведут себя как несмешивающиеся квантовые жидкости. Получено аналитическое выражение для температуры ФР.

Работа выполнена при поддержке Программы 211 Правительства Российской Федерации, соглашение 02.A03.21.0006 и проектов № 2277 и № 5719 Министерства образования и науки Российской Федерации и гранта РФФИ № 18-32-00837\18.

DOI: 10.21883/FTT.2019.05.47574.03F

1. Введение

Одной из актуальных проблем в физике сверхпроводящих купратов является сосуществование и конкуренция спинового, сверхпроводящего и зарядового упорядочений. Изучение взаимосвязи магнетизма и сверхпроводимости в купратах имеет долгую историю [1,2]. За последние пятнадцать лет появилось множество экспериментальных результатов, указывающих на наличие зарядового упорядочения [3–8] и взаимное влияние спинового и зарядового упорядочения в купратах [9–14]. В работе [15] была предложена модель, в которой уникальные свойства купратов связывались с неустойчивостью к переносу заряда состояний центров CuO_4 в плоскостях CuO_2 . Для центров CuO_4 в плоскости CuO_2 это дает возможность рассматривать три многоэлектронных валентных состояния $\text{CuO}_4^{5-,6-,7-}$ (соответствующих, формально, состояниям ионов меди $\text{Cu}^{1+,2+,3+}$) как компоненты псевдоспинового триплета $S = 1$ с $M_S = -1, 0, +1$ соответственно и позволяет нам использовать псевдоспиновый формализм для псевдоспина $S = 1$ [15,16]. Для рассмотрения конкуренции спинового и зарядового упорядочений в купратах была предложена упрощенная статическая двумерная спин-псевдоспиновая модель [17–19], являющаяся предельным случаем общей псевдоспиновой модели.

Гамильтониан статической спин-псевдоспиновой модели имеет вид

$$\mathcal{H} = \Delta \sum_i S_{zi}^2 + V \sum_{\langle ij \rangle} S_{zi} S_{zj} + \tilde{J} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_{zi} \sigma_{zj} - \tilde{h} \sum_i \sigma_{zi} - \mu \sum_i S_{zi}, \quad (1)$$

где S_{zi} — z -компонента псевдоспина $S = 1$ на узле, $\sigma_{zi} = P_{0i} s_{zi} / s$ — нормированная z -компонента спи-

на $s = 1/2$, умноженная на оператор проектирования $P_{0i} = 1 - S_{iz}^2$. Параметры $\Delta = U/2$ и $V > 0$ определяют зарядовые корреляции на узле и между узлами решетки соответственно, $J = \tilde{J}/s^2 > 0$ — обменное взаимодействие Изинга между ионами Cu^{2+} , $h = \tilde{h}/s$ — внешнее магнитное поле, μ — химический потенциал, необходимый для учета условия постоянства допированного заряда, $nN = \sum \langle S_{zi} \rangle = \text{const}$, где n — плотность допированного заряда. Суммирование идет по узлам двумерной квадратной решетки, $\langle ij \rangle$ означает ближайших соседей. Эта спин-псевдоспиновая модель обобщает двумерную разбавленную антиферромагнитную (AFM) модель Изинга с заряженными примесями. В пределе $\Delta \rightarrow -\infty$ она сводится к модели Изинга для спина $S = 1/2$ с фиксированной намагниченностью. При $\Delta > 0$ результаты можно сравнить с моделью Блюма–Капеля [20,21] или с моделью Блюма–Эмери–Гриффитса [22]. Модель Изинга с подвижными заряженными примесями также была рассмотрена в работе [23]. Очевидно, что наиболее важным ограничением нашей модели для ее сравнения с реальными купратами является отсутствие в гамильтониане переноса заряда.

В работах [17,18] были рассмотрены фазовые диаграммы основного состояния в приближении среднего поля. Было показано, что всего реализуются пять фаз основного состояния в двух различных пределах. В пределе слабого обмена, при $J < V$, все фазы основного состояния (COI, COII, COIII, FIM) соответствуют зарядовому упорядочению (CO) типа шахматной доски при средней плотности заряда n . В то время, как в фазе COI нет спиновых центров (Cu^{2+}), фазы COII и COIII разбавляются не взаимодействующими спиновыми центрами, распределенными только в одной подрешетке. Такое ферримагнитное спиновое упорядочение является результатом приближения среднего поля, поэто-

му численные расчеты классическим методом Монте-Карло (МК) показывают в этих случаях парамагнитный отклик при низких температурах. Фаза ФИМ также формально ферромагнитна. В этом случае спиновое АФМ-упорядочение разбавляется невзаимодействующими зарядовыми центрами ($\text{Cu}^{1+,3+}$), распределенными только в одной подрешетке. В пределе сильного обмена, при $\tilde{J} > V$, реализуются только фазы СОИ и АФМ, в которых зарядовые центры равномерно распределены в обеих подрешетках.

Статья организована следующим образом. Мы представляем результаты расчета термодинамических свойств исследуемой системы в приближении среднего поля для и кратко сравниваем их с расчетами классическим методом МК в разд. 2. Расчеты МК показывают, что в пределе сильного обмена фаза АФМ неустойчива по отношению к фазовому расслоению (ФР) на подсистемы зарядовых и спиновых центров. В разд. 3 мы анализируем термодинамические свойства состояния ФР в рамках приближения сосуществования двух однородных фаз. Разд. 4 посвящен выводам.

2. Приближение среднего поля

В этом разделе кратко изложены результаты расчета термодинамических свойств в приближении среднего поля (СП). Мы используем неравенство Боголюбова для оценки большого потенциала $\Omega(\mathcal{H})$: $\Omega(\mathcal{H}) \leq \Omega = \Omega(\mathcal{H}_0) + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle$. Стандартным образом мы вводим на квадратной решетке две подрешетки, А и В, и выбираем

$$\beta \mathcal{H}_0 = \delta \sum_i S_{zi}^2 - \sum_{a,ia} \beta_a S_{zia} - \sum_{a,ia} \gamma_a \sigma_{zia}, \quad (2)$$

где $\beta = 1/T$, $\delta = \beta \Delta$, β_a и γ_a — молекулярные поля, $\alpha = A, B$. Для оценки $\omega = \Omega/N$ получим выражение

$$2\beta\omega = \sum_{\alpha} [(\beta_{\alpha} - \xi)S_{\alpha} + (\gamma_{\alpha} - \eta)\sigma_{\alpha} - \ln 2(e^{-\delta} \cosh \beta_{\alpha} + \cosh \gamma_{\alpha})] + z\nu S_A S_B + z i \sigma_A \sigma_B, \quad (3)$$

где $\xi = \beta\mu$, $\nu = \beta V$, $j = \beta\tilde{J}$, $\eta = \beta\tilde{h}$, $z = 4$ — число ближайших соседей, и средние (псевдо)намагниченности для подрешеток $\langle S_{zi} \rangle_{\alpha} = S_{\alpha}$ и $\langle \sigma_z \rangle_{\alpha} = \sigma_{\alpha}$ имеют вид

$$S_{\alpha} = \frac{\sinh \beta_{\alpha}}{\cosh \beta_{\alpha} + e^{\delta} \cosh \gamma_{\alpha}}, \quad \sigma_{\alpha} = \frac{\sinh \gamma_{\alpha}}{e^{-\delta} \cosh \beta_{\alpha} + \cosh \gamma_{\alpha}}. \quad (4)$$

Минимизируя ω по β_{α} и γ_{α} , получаем систему уравнений СП

$$\beta_{\alpha} - \xi = -z\nu S_{\bar{\alpha}}, \quad \gamma_{\alpha} - \eta = -zj\sigma_{\bar{\alpha}}, \quad (5)$$

где $\bar{A} = B$, $\bar{B} = A$.

Выражения (5) должны быть дополнены зарядовым ограничением, $S_A + S_B = 2n$. Чтобы явно учесть это

условие, можно ввести параметр зарядового порядка $a = (S_A - S_B)/2$, и записать свободную энергию $f = \omega + \mu n$ как функцию n , a и σ_{α} используя обратные соотношения для выражений (4):

$$e^{2\beta_{\alpha}} = \frac{(S_{\alpha} e^{\delta} + G_{\alpha})^2 - \sigma_{\alpha}^2 e^{-2\delta}}{(1 - S_{\alpha})^2 - \sigma_{\alpha}^2},$$

$$e^{2\gamma_{\alpha}} = \frac{(\sigma_{\alpha} e^{-\delta} + G_{\alpha})^2 - S_{\alpha}^2 e^{2\delta}}{(1 - \sigma_{\alpha})^2 - S_{\alpha}^2}, \quad (6)$$

где

$$G_{\alpha} = (1 - S_{\alpha}^2 - \sigma_{\alpha}^2 + S_{\alpha}^2 e^{2\delta} + \sigma_{\alpha}^2 e^{-2\delta})^{1/2}.$$

Для неупорядоченного (НО) высокотемпературного решения при $h = 0$ имеем $a = 0$, $\sigma_{\alpha} = 0$, и свободная энергия в расчете на узел примет вид

$$f_{\text{NO}} = \frac{z}{2} V n^2 + \Delta |n| - \frac{1}{\beta} \ln \left(2 \frac{1 + g_0}{1 - n^2} \right) + \frac{|n|}{\beta} \ln \left(\frac{|n| + g_0}{1 - |n|} \right), \quad (7)$$

где $g_0 = ((1 - n^2)e^{-2\delta} + n^2)^{1/2}$. Это позволяет нам вычислить все термодинамические функции НО-фазы. Энтропия, внутренняя энергия и удельная теплоемкость в расчете на узел имеют вид

$$s_{\text{NO}} = \delta \frac{(1 - |n|)(g_0 - |n|)}{1 + g_0} + \ln \left(2 \frac{1 + g_0}{1 - n^2} \right) - |n| \ln \left(\frac{|n| + g_0}{1 - |n|} \right), \quad (8)$$

$$e_{\text{NO}} = \frac{z}{2} V n^2 + \Delta \frac{n^2 + g_0}{1 + g_0}, \quad (9)$$

$$c_{\text{NO}} = \delta^2 \frac{(1 - n^2)^2 e^{-2\delta}}{g_0(1 + g_0)^2}. \quad (10)$$

С точностью до независящего от температуры слагаемого $\frac{z}{2} V n^2$, выражения (7)–(10) соответствуют термодинамическим характеристикам идеальной системы невзаимодействующих псевдоспиновых (зарядовых) и спиновых дублетов, разделенных по энергии величиной Δ . При $\Delta = 0$, энтропия и внутренняя энергия становятся постоянными, поэтому теплоемкость равна нулю. Если $\Delta \neq 0$, теплоемкость имеет максимум при $T \propto |\Delta|$. В частности, если $n = 0$,

$$c_{\text{NO}} = \left(\frac{\delta}{2} \right)^2 \cosh^{-2} \frac{\delta}{2}, \quad (11)$$

и максимум находится в точке $T = |\Delta|/(2x)$, где x является корнем уравнения $x = \coth x$.

Также можно написать явный вид магнитной восприимчивости при $h = 0$ в НО-фазе. Полагая $S_A = S_B = n$ и $\sigma_A = \sigma_B = \sigma$ при $h \neq 0$, исключим ξ из системы (5) и получим уравнение

$$\sigma = \psi(\eta - xj\sigma, n), \quad (12)$$

где введены следующие обозначения

$$\psi(x, n) = \frac{(1 - n^2) \sinh x}{\cosh x + g(x, n)}, \quad (13)$$

$$g(x, n) = ((1 - n^2)e^{-2\delta} + n^2 \cosh^2 x)^{1/2},$$

$$g(0, n) = g_0. \quad (14)$$

После стандартных вычислений получим

$$\chi_{\text{NO}}|_{h=0} = \beta s^2 \frac{\partial \sigma}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} = s^2 \frac{\chi_0(n)}{1 + z\tilde{J}\chi_0(n)},$$

$$\chi_0(n) = \beta \frac{1 - n^2}{1 + g_0}, \quad (15)$$

где $\chi_0(n)$ — нормированная восприимчивость в нулевом внешнем поле для идеальной системы невзаимодействующих псевдоспиновых и спиновых дублетов. Система уравнений (5) имеет ферромагнитные решения с $\sigma_A + \sigma_B \neq 0$ при $h = 0$ [17], которые являются следствием приближения СП и не возникают в МК-расчетах. Из-за ограничения радиуса обменного взаимодействия в нашей модели ближайшими соседями, эти решения могут проявляться при численном моделировании как смесь антиферромагнитной и парамагнитной фаз. Недооценка парамагнитного отклика является в этих случаях систематической ошибкой метода СП. В дальнейшем мы будем рассматривать только AFM-типы решений с $\sigma_A = -\sigma_B = \sigma$ при $h = 0$. В этом случае, согласно уравнениям (5), выполняется соотношение $\gamma_A = -\gamma_B$. Намагниченности подрешеток σ_α являются монотонными функциями молекулярных полей γ_α в соответствии с уравнениями (4), следовательно, возможен только случай $\beta_A = \pm\beta_B$ для $\sigma \neq 0$. Это означает, что если $n \neq 0$, то существуют только AFM-решения с $a = 0$, $\sigma \neq 0$ и СО-решения с $a \neq 0$, $\sigma = 0$. Случай $n = 0$ следует рассматривать отдельно, поскольку он дает возможность для фрустрированных состояний, когда решения типа СО- и AFM-становятся вырожденными.

Термодинамические свойства фаз AFM- и СО-предполагают знание корней для уравнений (5) и могут быть рассчитаны численно. Кроме того, аналитически можно найти уравнения для температур фазовых переходов второго рода типа беспорядок–порядок и критических точек.

Для фазы AFM воспользуемся условием $\partial^2 f / \partial \sigma^2 = 0$ при $\sigma = 0$ что дает

$$\frac{\partial \gamma_\alpha}{\partial \sigma_\alpha} \Big|_{\sigma_\alpha=0} = zj. \quad (16)$$

С учетом уравнений (6), получаем уравнение для температуры перехода NO–AFM

$$(1 - n^2)zj = 1 + g_0. \quad (17)$$

В частности, для $\Delta \rightarrow +\infty$ мы получим

$$T_{\text{AFM}} = (1 - |n|)z\tilde{J}, \quad (18)$$

что совпадает с результатами работы [22]. Подставляя выражение (17) в (15) мы находим восприимчивость в точке перехода, $\chi_{\text{NO}} = s^2 / (2z\tilde{J})$.

Для нахождения критической точки, которая разделяет переходы первого и второго рода, мы используем уравнение $\partial^4 f / \partial \sigma^4 = 0$ на кривой сосуществования. После некоторых манипуляций получим

$$g_0^2 - 2g_0 - 3n^2 = 0. \quad (19)$$

С учетом уравнения (17) мы получаем положение критической точки

$$T_{c1} = z\tilde{J} \frac{1 - n^2}{2 + \sqrt{1 + 3n^2}},$$

$$\frac{\Delta_{c1}}{T_{c1}} = \frac{1}{2} \ln \frac{1 - n^2}{1(1 + n^2 + \sqrt{1 + 3n^2})}. \quad (20)$$

В частности, для $n = 0$, $T_{c1} = z\tilde{J}/3$, $\Delta_{c1}/T_{c1} = -\ln 2$, что согласуется с результатами работы [22].

Восприимчивость в нулевом поле в AFM-фазе имеет вид

$$\chi_{\text{AFM}}|_{h=0} = s^2 \frac{\beta\psi'(zj\sigma, n)}{1 + zj\psi'(zj\sigma, n)}, \quad (21)$$

где

$$\psi'(x, n) = \frac{(1 - n^2)(g(x, n) + g_0^2 \cosh x)}{g(x, n)(\cosh x + g(x, n))^2}. \quad (22)$$

Параметр порядка AFM-фазы σ при $h = 0$ можно найти из уравнения

$$\sigma = \psi(zj\sigma, n). \quad (23)$$

Аналогично, для фазы СО условие $\partial^2 f / \partial a^2 = 0$ при $a = 0$ дает

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \gamma_A}{\partial a} - \frac{\partial \gamma_B}{\partial a} \right) \Big|_{\sigma_\alpha=0} = zv, \quad (24)$$

и для температуры перехода NO–СО получаем уравнение

$$(1 - n^2)zv = 1 + g_0^{-1}. \quad (25)$$

В частности, для $\Delta \rightarrow -\infty$ получим

$$T_{\text{CO}} = (1 - n^2)zV. \quad (26)$$

Уравнение для критической точки в фазе СО является более сложным

$$2(1 + 3n^2)g_0^3 - g_0^2 - 6n^2g_0 + 3n^2 = 0, \quad (27)$$

но при $n = 0$ это дает $T_{c2} = zV/3$, $\Delta_{c2}/T_{c2} = \ln 2$.

Восприимчивость в нулевом поле в СО-фазе имеет вид

$$\chi_{\text{CO}}|_{h=0} = s^2 \frac{\frac{1}{2}(\chi_0(n+a) + \chi_0(n-a))}{1 + \frac{1}{2}z\tilde{J}(\chi_0(m+a) + \chi_0(n-a))}, \quad (28)$$

где параметр порядка СО-фазы удовлетворяет уравнению

$$a = \frac{1}{2zv} \ln \left(\frac{(n+a+g(0, n+a))(1-n+a)}{(n-a+g(0, n-a))(1-n-a)} \right). \quad (29)$$

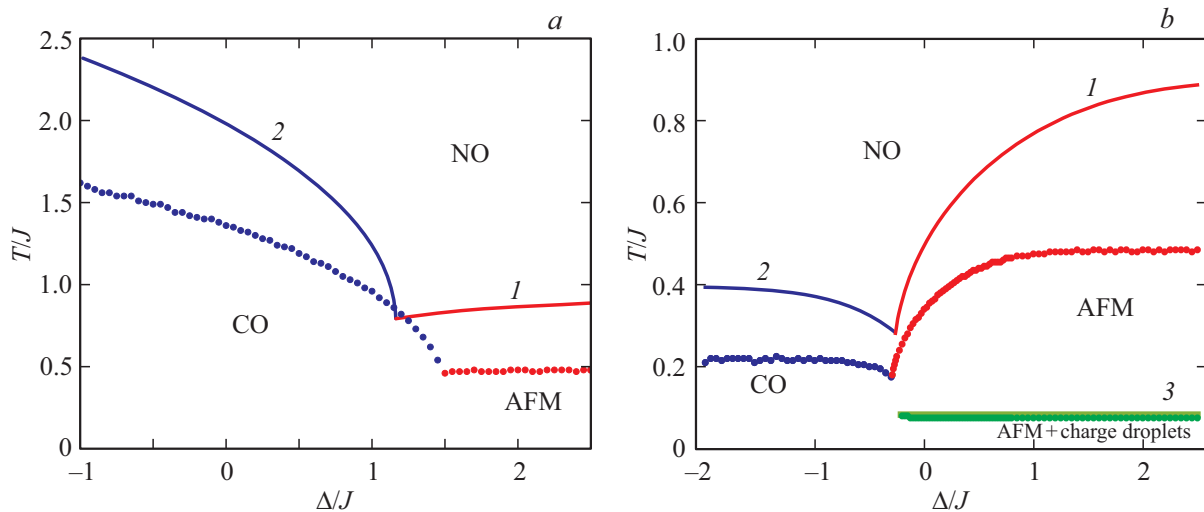


Рис. 1. Левая панель: случай слабого обмена: $n = 0.1, \tilde{J} = 0.25, V = 1$; b — случай сильного обмена: $n = 0.1, \tilde{J} = 0.25, V = 0.1$. Точки соответствуют критическим температурам МК. На линиях 1–3 показаны значения критической температуры СП, заданной выражениями (17), (25) и (34).

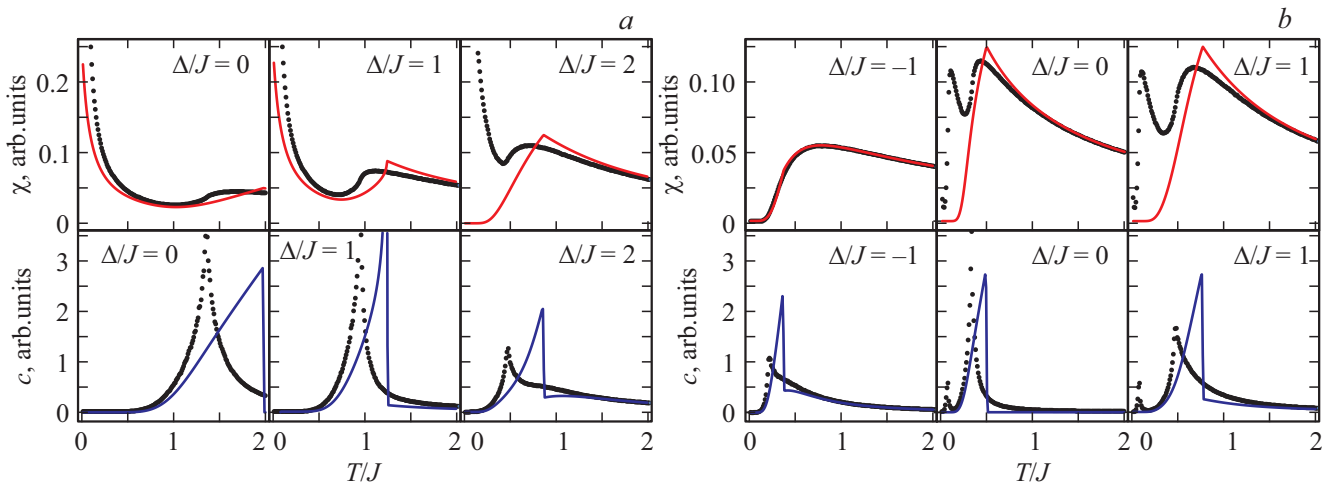


Рис. 2. Восприимчивость и удельная теплоемкость, полученные в приближении СП (сплошные линии) и методом МК (точки). a — случай слабого обмена: $n = 0.1, \tilde{J} = 0.25, V = 1$; b — случай сильного обмена: $n = 0.1, \tilde{J} = 0.25, V = 0.1$.

Общая формула для восприимчивости в нулевом поле, объединяющая случаи фаз NO, AFM и CO, дается формулой

$$\chi = s^2 \frac{\frac{1}{2} \beta (\psi'(z j \sigma, n + a) + \psi'(z j \sigma, n - a))}{1 + \frac{1}{2} z j (\psi'(z j \sigma, n + a) + \psi'(z j \sigma, n - a))}, \quad (30)$$

где σ — параметр порядка AFM-фазы, a — параметр порядка CO-фазы.

Для численного моделирования был реализован высокопроизводительный алгоритм параллельных вычислений с использованием классического метода МК. Результаты расчетов методом МК показаны на рис. 1. Положение пика на температурной зависимости теплоемкости приблизительно (из-за конечного размера системы) соответствует температуре перехода беспорядок–порядок. Эти значения показаны точками. Температуры перехода

в приближении СП (17) и (25) показаны сплошными линиями. Рис. 1 наглядно демонстрирует типичную, чуть менее чем в два раза, переоценку значения критической температуры в приближении СП. Зависимость от n критической температуры AFM-перехода в приближении СП показана ниже на рис. 3. Качественно ее вид согласуется результатами, полученными в приближении Бете в работе [23].

На рис. 2 мы сравниваем результаты для восприимчивости и теплоемкости, полученные в приближении СП и методом МК. Аналитические СП-зависимости показывают качественное согласие с результатами численного моделирования, и, в некоторых случаях, даже количественное совпадение результатов для области высоких температур. Основные расхождения вызваны различием в критической температуре и систематическими неточностями приближения СП для описания

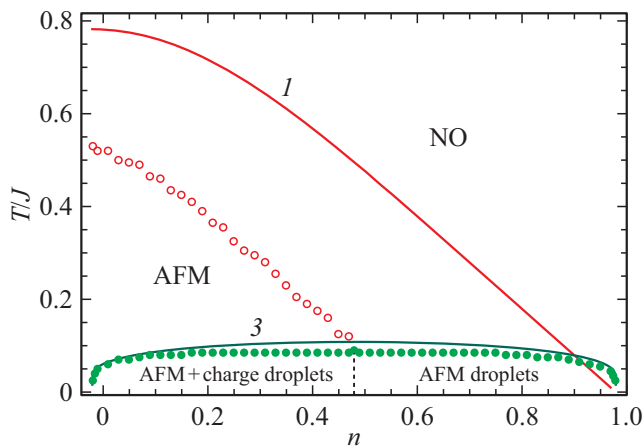


Рис. 3. Светлые кружки соответствуют максимумам восприимчивости при AFM-упорядочении, темные кружки — максимумам удельной теплоемкости при ФР, полученным методом МК. Значения параметров модели: $\Delta = 1$, $\tilde{J} = 0.25$, $V = 0.14$. Линии 1 и 3 показывают значения критической температуры, заданные выражениями (17) и (34).

критических флуктуаций и парамагнитного отклика при низких температурах.

3. Критическая температура фазового расслоения

Согласно результатам численного моделирования классическим методом МК, температурные зависимости теплоемкости в пределе сильного обмена при положительном Δ демонстрируют два последовательных перехода. Непосредственное исследование состояния системы показывает, что первым переходом является AFM-упорядочение. При дальнейшем понижении температуры, в спиновой подсистеме, представляющей собой AFM-матрицу, разбавленную случайно распределенными заряженными примесями, происходит конденсация примесей в зарядовые капли. Другими словами, разбавленная AFM-фаза в пределе сильного обмена неустойчива по отношению к макроскопическому фазовому расслоению (ФР) на псевдоспиновую (зарядовую) и магнитную (спиновую) подсистемы. На этом этапе AFM-матрица выталкивает заряженные немагнитные примеси для минимизации поверхностной энергии. Отметим, что в пределе слабого обмена заряженные примеси распределены случайным образом по матрице AFM вплоть до $T = 0$, и также, заряженные примеси беспорядочно распределяются в CO-фазе, так как в приближении взаимодействия только ближайших соседей энергии всех возможных распределений дополнительных зарядов по CO-матрице равны. Результаты нашего численного моделирования аналогичны результатам, полученным для бинарных сплавов в работах [24,25].

Для описания термодинамических свойств неоднородного состояния мы используем модель, разработанную

в работах [26–28] для макроскопического ФР в электронных системах. Эта модель основана на построении Максвелла. Предполагая сосуществование двух макроскопических однородных фаз, обозначенных как 1 и 2, запишем свободную энергию ФР-состояния в расчете на узел в виде

$$f_{\text{PS}} = m f_1(n_1) + (1 - m) f_2(n_2), \quad (31)$$

где m — доля системы с плотностью n_1 , $1 - m$ — доля системы с плотностью n_2 , так, что $m n_1 + (1 - m) n_2 = n$. В нашем случае одна фаза состоит из зарядовых центров (С), а другой — спиновая AFM-фаза без примесей, следовательно $n_1 = \text{sgn} n$, $n_2 = 0$ и $m = |n|$. Точка перехода определяется уравнением

$$|n| f_C(1) + (1 - |n|) f_{\text{AFM}}(0) = f_{\text{AFM}}(n). \quad (32)$$

Свободная энергия зарядовых центров $f_C(1) = 2V + \Delta$. Свободную энергию AFM-фазы можно записать в виде

$$f_{\text{AFM}}(n) = \frac{z}{2} (V n^2 + \tilde{J} \sigma^2) + |n| \Delta - \frac{1}{\beta} \ln \left(2 \frac{\cosh(z j \sigma) + g(z j \sigma, n)}{1 - n^2} \right) + \frac{|n|}{\beta} \ln \left(\frac{|n| \cosh(z j \sigma) + g(z j \sigma, n)}{1 - |n|} \right). \quad (33)$$

Мы предполагаем, что $\Delta > 0$ и рассматриваем случай низких температур, так $\delta \gg 1$ и $j \gg 1$. В этом приближении, с учетом уравнения (23), мы получим $|\sigma| = 1 - |n|$. Окончательно, уравнение (32) дает следующее выражение для температуры ФР

$$T_{\text{PS}} = \frac{|n|(1 - |n|)}{|n| \ln |n| + (1 - |n|) \ln(1 - |n|)} \frac{z(V - \tilde{J})}{2}. \quad (34)$$

Это выражение не зависит от Δ что согласуется с результатами МК для T_{PS} на рис. 1.

Концентрационные зависимости критических температур для AFM-перехода и ФР показаны на рис. 3. Кружки обозначают результаты МК для максимумов восприимчивости при AFM-упорядочении, а точки показывают максимумы теплоемкости при ФР. Сплошная линия 3 показывает температуру ФР, определяемую формулой (34). Эта температура согласуется с результатами МК неожиданно хорошо, тогда как зависимость в приближении СП (линия 2) для критической температуры AFM-упорядочения, определяемая формулой (17), становится качественно неверной при $|n| > 0.5$. Отметим также, что выражение (34) для температуры ФР, основанное на построении Максвелла, дает более низкие значения по сравнению с найденными в работе [22].

4. Заключение

Мы рассмотрели статическую двумерную спин-псевдоспиновую модель на квадратной решетке, которая обобщает разбавленную антиферромагнитную модель Изинга. Мы сравнили аналитические результаты

в приближении СП с результатами численного моделирования классическим методом МК. Анализ удельной теплоемкости и восприимчивости, полученных методом МК, показал, что критические температуры СП как для СО, так и для AFM-упорядочения качественно воспроизводят численные результаты, но систематически дают более высокие значения. Расчеты методом МК показывают, что случаи сильного и слабого обмена качественно различаются. В случае слабого обмена возникает фрустрация в зарядово-упорядоченном основном состоянии системы. Однородная AFM-фаза в пределе сильного обмена неустойчива по отношению к ФР псевдоспиновой и спиновой подсистем. Получено аналитическое выражение для температуры ФР, и мы обнаружили, что оно хорошо согласуется с результатами численного моделирования классическим методом МК.

Список литературы

- [1] R.J. Birgeneau, C. Stock, J.M. Tranquada, K. Yamada. *J. Phys. Soc. Jpn* **75**, 111003 (2006).
- [2] J.M. Tranquada, G. Xu, I.A. Zaliznyak. *J. Magn. Magn. Mater.* **350**, 148 (2014).
- [3] T. Wu, H. Mayaffre, S. Krämer, M. Horvatić, C. Berthier, W.N. Hardy, R. Liang, D.A. Bonn, M.-H. Julien. *Nature* **477**, 191 (2011).
- [4] G. Ghiringhelli, M. Le Tacon, M. Minola, S. Blanco-Canosa, C. Mazzoli, N.B. Brookes, G.M. De Luca, A. Frano, D.G. Hawthorn, F. He, T. Loew, M. Moretti Sala, D.C. Peets, M. Salluzzo, E. Schierle, R. Sutarto, G.A. Sawatzky, E. Weschke, B. Keimer, L. Braicovich. *Science* **337**, 821 (2012).
- [5] J. Chang, E. Blackburn, A.T. Holmes, N.B. Christensen, J. Larsen, J. Mesot, R. Liang, D.A. Bonn, W.N. Hardy, A. Watenphul, M.V. Zimmermann, E.M. Forgan, S.M. Hayden. *Nature Phys.* **8**, 871 (2012).
- [6] E.H. da Silva Neto, P. Aynajian, A. Frano, R. Comin, E. Schierle, E. Weschke, A. Gyenis, J. Wen, J. Schneeloch, Z. Xu, S. Ono, G. Gu, M. Le Tacon, A. Yazdani. *Science* **343**, 393 (2014).
- [7] R. Comin, A. Damascelli. *Ann. Rev. Condens. Matter Phys.* **7**, 369 (2016).
- [8] F. Laliberté, M. Frachet, S. Benhabib, B. Borgnic, T. Loew, J. Porras, M. Le Tacon, B. Keimer, S. Wiedmann, C. Proust, D. LeBoeuf. *npj Quantum Mater.* **3**, 11 (2018).
- [9] P. Abbamonte, A. Ruydi, S. Smadici, G.D. Gu, G.A. Sawatzky, D.L. Feng. *Nature Phys.* **1**, 155 (2005).
- [10] E. Berg, E. Fradkin, S.A. Kivelson, J.M. Tranquada. *New J. Phys.* **11**, 115004 (2009).
- [11] M. Fujita, H. Hiraka, M. Matsuda, M. Matsuura, J.M. Tranquada, S. Wakimoto, G. Xu, K. Yamada. *J. Phys. Soc. Jpn* **81**, 011007 (2012).
- [12] E. Fradkin, S.A. Kivelson. *Nature Phys.* **8**, 864 (2012).
- [13] G. Drachuck, E. Razzoli, G. Bazalitski, A. Kanigel, C. Niedermayer, M. Shi, A. Keren. *Nature Commun.* **5**, 3390 (2014).
- [14] O. Cyr-Choinière, G. Grissonnanche, S. Badoux, J. Day, D.A. Bonn, W.N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud, L. Taillefer. *Phys. Rev. B* **92**, 224502 (2015).
- [15] A.S. Moskvina. *Phys. Rev. B* **84**, 075116 (2011).
- [16] A.S. Moskvina. *J. Phys.: Condens. Matter* **25**, 085601 (2013).
- [17] Yu.D. Panov, A.S. Moskvina, A.A. Chikov, I.L. Avvakumov. *J. Superconductiv. Nov. Magn.* **29**, 1077 (2016).
- [18] Yu.D. Panov, A.S. Moskvina, A.A. Chikov, K.S. Budrin. *J. Low Temp. Phys.* **187**, 646 (2017).
- [19] Yu.D. Panov, K.S. Budrin, A.A. Chikov, A.S. Moskvina. *Письма в ЖЭТФ* **106**, 242 (2017).
- [20] M. Blume. *Phys. Rev.* **141**, 517 (1966).
- [21] H.W. Capel. *Physica* **32**, 966 (1966).
- [22] M. Blume, V.J. Emery, R.B. Griffiths. *Phys. Rev. A* **4**, 1071 (1971).
- [23] С.В. Сёмкин, В.П. Смагин. *ФТТ* **57**, 926 (2015).
- [24] K. Yaldram, G.K. Khalil, A. Sadiq. *Solid State Commun.* **87**, 1045 (1993).
- [25] G.K. Khalil, K. Yaldram, A. Sadiq. *Int. J. Mod. Phys. C* **08**, 139 (1997).
- [26] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, R. Micnas. *J. Phys. Condens. Matter* **24**, 215601 (2012).
- [27] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz. *J. Phys. Condens. Matter* **25**, 065603 (2013).
- [28] K.J. Kapcia, S. Murawski, W. Klobus, S. Robaszkiewicz. *Physica A*: **437**, 218 (2015).

Редактор Ю.Э. Кумаев