

05,11

## Влияние атомного беспорядка и температуры на несоизмеримые спиральные спиновые волны в модели Андерсона–Хаббарда

© А.Г. Грошев, А.К. Аржников

Физико-технический институт УрО РАН,  
Ижевск, Россия

E-mail: groshev\_a.g@mail.ru

(Поступила в Редакцию 12 октября 2016 г.)

На основе однозонной  $t-t'$ -модели Андерсона–Хаббарда исследуется влияние беспорядка на параметры и области существования несоизмеримых спиральных спиновых волн. Задача решается в рамках теории функционального интегрирования в статическом приближении с учетом продольных флуктуаций магнитного момента. Получены магнитные фазовые диаграммы и параметры несоизмеримых спиральных спиновых волн в зависимости от температур и концентраций электронов и примесей. Показано, что беспорядок может приводить к переходу первого рода от антиферромагнитной фазы к  $(Q, \pi)$ -фазе и к переходу металл–диэлектрик от антиферромагнитного металла к антиферромагнитному диэлектрику вдали от половинного заполнения зоны. Полученные результаты используются для объяснения несоизмеримого магнитного порядка, наблюдаемого в купратах в передопированном режиме.

Работа частично поддержана грантом УрО РАН № 15-8-2-12, а также грантами РФФИ № 16-42-180516, № 16-02-00995 и программой финансирования АААА-А16-116021010082-8.

DOI: 10.21883/FTT.2017.05.44373.381

### 1. Введение

Слоистые системы привлекают внимание исследователей как с точки зрения формирования необычных магнитных свойств, так и с точки зрения возникновения новых механизмов спаривания электронов в „нетрадиционных“ сверхпроводниках (купратах, селенидах, церизитах, арсенидах, тяжелофермионных системах). При допировании либо в случае примесного замещения атомов в системообразующих плоскостях другими элементами возникает беспорядок, который необходимо учитывать наряду с электронными и магнитными взаимодействиями [1–3]. Имеется ряд эффектов, которые не удается объяснить без одновременного учета электронного взаимодействия и беспорядка. Среди них можно выделить аномальное поведение температур Кюри [4] и Нееля [5], которые при определенных условиях могут повышаться при увеличении уровня беспорядка, и переход металл–диэлектрик (МД) при дробных числах заполнения зоны [6]. Обычно при изучении указанных выше эффектов используется модель Андерсона–Хаббарда с беспорядком в виде бинарного сплава на решетке неограниченной размерности, которая рассматривается в рамках динамической теории среднего поля (DMFT). При этом учитываются лишь ферромагнитное (FM) и антиферромагнитное (AF) упорядочения [5]. Однако, как было показано в работах [7–11], в  $t-t'$ -модели Хаббарда в широкой области концентраций стабилизируются несоизмеримые магнитные структуры в виде несоизмеримых спиральных спиновых волн (НССВ). Кроме того, даже при половинном заполнении зоны существует область параметров, в которой реализуется магнито-

упорядоченное состояние, отличное от ферромагнитного и антиферромагнитного [7]. В связи с этим возникает вопрос: каким образом учет беспорядка может повлиять на магнитные фазы и параметры НССВ?

Кроме того, в настоящее время сложилась неопределенная ситуация с объяснением несоизмеримого магнитного порядка в высокотемпературных сверхпроводниках с лантаном  $\text{La}_{2-x-y}\text{Sr}_{x+y}\text{Cu}_{1-y}\text{O}_4$  (La214) [12] и висмутом  $\text{Bi}_{1.75}\text{Pb}_{0.35}\text{Sr}_{1.90}\text{Cu}_{1-y}\text{Fe}_y\text{O}_{6+z}$  (Bi2201) [13,14] в передопированной области. Теория, объясняющая несоизмеримый магнитный порядок в этих соединениях при низких и промежуточных уровнях допирования, сталкивается с трудностями при переходе в передопированную область, где каждый из предлагаемых сценариев не лишен противоречий. Эксперименты по упругому рассеянию нейтронов в лантановой системе [12] показывают, что при низком уровне допирования наблюдается хорошо известная линейная зависимость параметра несоизмеримости от концентрации дырок  $\delta \sim p$ , которая объясняется авторами поведением магнитных страйпов и локализованным характером спинов на ионах Cu. Следует отметить, что линейная зависимость получается и при учете несоизмеримых магнитных структур в виде НССВ [7]. Добавление примесей Fe или Nd не меняет линейной зависимости параметра несоизмеримости, а приводит лишь к стабилизации несоизмеримого магнитного порядка и подавлению сверхпроводимости. При переходе в передопированную область картина резко меняется. В системе без примесей (Fe, Nd и т.д.) интенсивность упругого рассеяния падает и статический магнитный порядок не наблюдается. Значения параметра несоизмеримости при неупругом рассеянии выходят

на насыщение:  $\delta \sim 0.125$ . Добавление 1% примеси Fe приводит к восстановлению статического магнитного порядка, но зависимость параметра несоизмеримости от концентрации дырок отличается от линейной. Предполагается, что в этой области магнитный порядок определяется скорее коллективизированными электронами, для которых характерна Ферми-жидкостная картина. В то же время эксперименты (упругое рассеяние нейтронов и магнитная восприимчивость [13], электросопротивление и дифракция электронов в магнитном поле [14]) на купратах с висмутом показали, что в передопированном режиме значение параметра несоизмеримости  $\delta \sim 0.2$  оказалось близким к значению, соответствующему линейной зависимости. Авторы указанных работ пришли к заключению, что наблюдаемое поведение системы в магнитном поле и логарифмическая зависимость сопротивления от температуры в области низких температур не могут быть объяснены на основе страйпов. Такое поведение сопротивления и магнитной восприимчивости скорее напоминает поведение, характерное для магнитных сплавов замещения. Отметим, что индуцированный примесями несоизмеримый магнитный порядок в сплавах замещения наблюдался и ранее [15].

Теория магнитных моментов в сплавах замещения разрабатывалась в 60-е годы на основе модели Андерсона [16] и модели Вольфа–Клогстона [17], представляющей собой однопримесный аналог модели Андерсона–Хаббарда. Ее суть сводится к тому, что появление локальных моментов в сплавах замещения связано с полюсами одночастичной функции Грина или матрицы рассеяния [17,18]. При этом указанные полюсы должны приводить к виртуальным уровням энергии в области затравочного спектра, а не к резонансным уровням с энергией вне затравочной плотности состояний. Кроме того, эти полюсы должны находиться не слишком далеко от уровня Ферми и быть достаточно узкими. Однако возникновение несоизмеримых магнитных структур в таком подходе до сих пор не исследовалось.

Таким образом, целью настоящей работы является исследование влияния беспорядка на магнитные фазы, параметры НССВ, а также определение условий, при которых в парамагнитной системе при учете беспорядка могут возникать несоизмеримые магнитные структуры. Наше внимание сосредоточено на квазидвумерной модели, которая, как полагает большинство исследователей, должна описывать формирование магнитного порядка в „нетрадиционных“ сверхпроводниках. Вычисления проводятся в рамках однозонной  $t-t'$ -модели Андерсона–Хаббарда с беспорядком в виде бинарного сплава на квадратной решетке. Задача решается в рамках теории функционального интегрирования в статическом приближении (см. Приложение).

Необходимо отметить особенность изучения магнетизма на основе двумерных моделей, связанную с хорошо известным результатом о невозможности магнитного

порядка в двумерных системах при конечной температуре (за исключением моделей изинговского типа). Как правило, при использовании двумерной модели Хаббарда для описания магнитных свойств предполагается наличие механизма подавления аномального роста поперечных магнитных флуктуаций, который и обеспечивает квазидвумерное поведение магнитных характеристик. В купратах таким механизмом может служить слабая магнитная связь между слоями CuO или другие механизмы, которые приводятся в [19]. В настоящей работе мы также предполагаем наличие подобного механизма и для стабилизации магнитного порядка в двумерной модели Хаббарда при конечной температуре пренебрегаем поперечными магнитными флуктуациями, считая систему квазидвумерной.

## 2. Несοизмеримые спиральные спиновые волны в системах с беспорядком

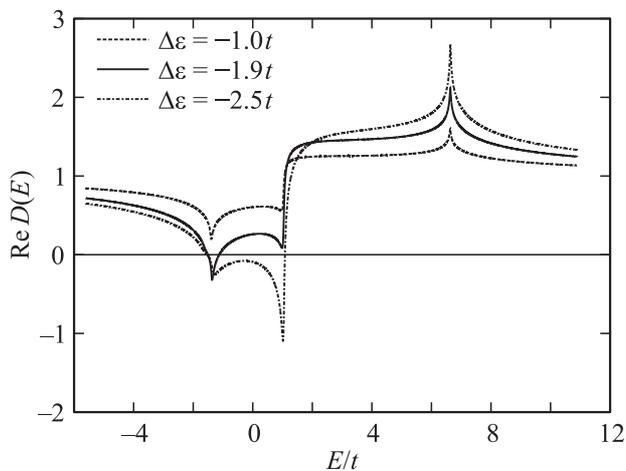
Как уже упоминалось выше, обычно при исследовании влияния беспорядка на магнитные фазы модели Андерсона–Хаббарда ограничиваются учетом лишь FM- и AF-фаз. При этом обнаруживается ряд эффектов, отсутствующих при учете только электронного взаимодействия или только беспорядка. Среди них отметим повышение температуры Нееля  $T_N$  и переход МД в парамагнитной (PM) фазе и от PM-металла к AF-диэлектрику, которые могут быть объяснены только при одновременном учете электронного взаимодействия и беспорядка. Эти эффекты были получены в работе [5] при исследовании в рамках DMFT модели Андерсона–Хаббарда на решетке Бете с неограниченным числом ближайших соседей при половинном заполнении зоны и различных моделях беспорядка. Особое внимание в [5] уделялось вопросу о возможности стабилизации фазы AF-металла при учете беспорядка, а также переходу МД от AF-металла к AF-диэлектрику. Исследование PM- и AF-фаз показало, что беспорядок действительно способствует образованию фазы AF-металла, близкой к точке перехода от PM-металла к AF-диэлектрику, но однозначного ответа в [5] получено не было. Узкая область AF-металла была обнаружена в работе [3] между фазами PM-металла и AF-диэлектрика на магнитной фазовой диаграмме основного состояния в рамках неупорядоченной модели Андерсона–Хаббарда на решетке Бете с бесконечным числом ближайших соседей при половинном заполнении зоны.

Кроме того, повышение температуры Кюри  $T_C$  при увеличении уровня беспорядка для модели бинарного сплава в области чисел заполнения, меньших концентрации примесей ( $n < y$ ), было получено в работах [4,6], в которых в рамках DMFT рассматривалась модель Андерсона–Хаббарда на гранецентрированной кубической решетке неограниченной размерности при различных значениях  $n$  и  $y$ . При дробных числах

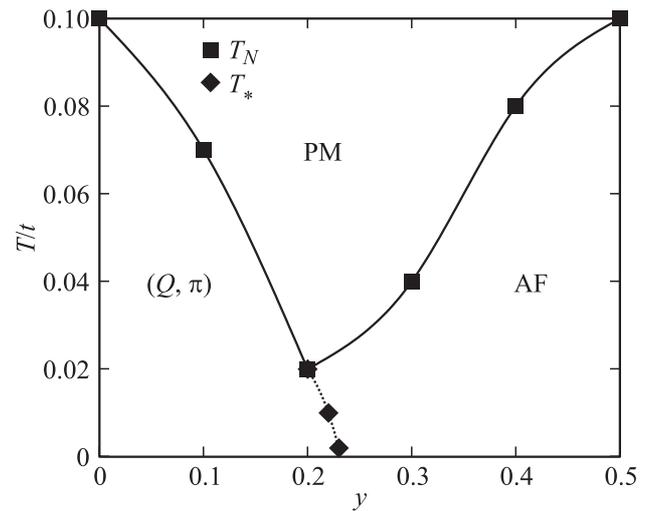
заполнения  $n = y$  ( $n = 1 + y$ ) для этой модели получен переход МД Мотта–Хаббарда от РМ-металла к РМ-диэлектрику.

Рассмотрим влияние беспорядка на несоизмеримые магнитные структуры в виде НССВ и их параметры на основе однозонной модели Андерсона–Хаббарда с беспорядком в виде бинарного сплава на квадратной решетке (см. Приложение). Параметры  $U = 3.7t$  и  $t' = 0.2t$  выбраны исходя из значений, соответствующих купратам в области дырочного допирования. При этих значениях на фазовой диаграмме основного состояния в области  $0.4 < n < 1$  наблюдается параллельная несоизмеримая фаза  $(Q, \pi)$  [7]. Учет электронных корреляций (например, в рамках метода вспомогательных бозонов) не приводит к качественным изменениям фазовой диаграммы в области дырочного допирования. Это служит некоторым оправданием для выбора статического приближения в рамках теории функционального интегрирования, которое при температуре, равной нулю, воспроизводит результаты Хартри–Фока.

Согласно теории магнитных моментов, в сплавах замещения появление магнитных моментов связано с полюсами одночастичной функции Грина, которые определяются исходя из условия  $\text{Re}D(E) = \text{Re}(\det|1 - G_0(E)\Delta U^{\text{imp}}|) = 0$  [18], где  $G_0(E)$  — функция Грина в отсутствие электронного взаимодействия,  $\langle \dots \rangle$  — усреднение по переменному полю  $\nu$  с примесной функцией распределения (см. Приложение). Зависимость  $\text{Re}D(E)$  при нескольких значениях  $\Delta\epsilon$  представлена на рис. 1, из которого видно, что полюсы действительно имеются при  $\Delta\epsilon = -1.9t$  и  $-2.5t$ , но отсутствуют при  $\Delta\epsilon = -1t$ . Только в первом случае они приводят к виртуальным уровням энергии в области затравочного спектра с максимальным значением локального магнитного момента, а во втором — лишь к ре-



**Рис. 1.** Зависимость действительной части  $D(E)$  от энергии, рассчитанная при температуре  $T = 0.002t$ , концентрации примесей  $y = 0.01$  и различных значениях разности энергетических уровней  $\Delta\epsilon$ . Для всех кривых уровень Ферми находится в начале координат.



**Рис. 2.** Магнитная фазовая диаграмма, рассчитанная при концентрации электронов  $n = 0.8$  и  $\Delta\epsilon = -2t$  в переменных температура–концентрация примесей  $y$ .

зонансным уровням энергии вне затравочной плотности состояний. Эксперименты на неупорядоченных сплавах замещения обычно проводятся при изменении состава соединения из определенных элементов. Поэтому в дальнейшем рассматривается зависимость физических свойств от концентрации примесей  $y$ , определяющей состав соединения, с постоянным значением  $\Delta\epsilon$ , которое связано с выбором элементов, входящих в состав соединения. В настоящей работе рассматриваются примеси с  $\Delta\epsilon = -2t$ , которые дают максимальное значение локального магнитного момента для  $n = 0.4$  и  $y = 0.01$ . Кроме того, мы ограничимся рассмотрением изоэлектронных примесей, не меняющих среднюю концентрацию электронов на узле.

Для дальнейшего исследования влияния беспорядка на НССВ и их параметры выберем  $n = 0.8$ . Магнитная фазовая диаграмма в области  $y < 0.5$  представлена на рис. 2, из которого видно, что при низких температурах в области  $y < 0.2$  остается стабильной  $(Q, \pi)$ -фаза, волновой вектор  $Q$  которой почти не меняется при изменении концентрации примесей  $y$  (рис. 3), а в области  $y > 0.2$  стабилизируется AF-фаза. С повышением температуры обе области постепенно сужаются и переходят в парамагнитную область. Кроме того, рис. 2 демонстрирует, что температура магнитного фазового перехода из  $(Q, \pi)$ -фазы в РМ-фазу при увеличении концентрации примесей до  $y \sim 0.2$  резко падает, после чего происходит переход от  $(Q, \pi)$ -фазы к AF-фазе. На рис. 3 и 4 показано, что при низких температурах этот переход является переходом первого рода и происходит, когда концентрация примесей становится близкой к концентрации дырок:  $y \approx 1 - n$ .

Функция распределения бинарного сплава обладает симметрией ( $\epsilon_i \leftrightarrow \epsilon_i - \Delta\epsilon$ ,  $y \leftrightarrow 1 - y$ ) (см. Приложение), которая позволяет при представлении резуль-

татов ограничиться областью концентраций примесей  $y < 0.5$ . Поэтому магнитная фазовая диаграмма для примесей с  $\Delta\epsilon = -2t$  в области  $y > 0.5$  аналогична фазовой диаграмме с  $\Delta\epsilon = -2t$  в области  $y < 0.5$ , которая представлена на рис. 5. Видно, что, так же как и в случае с  $\Delta\epsilon = -2t$ , при низких температурах в области  $y < 0.2$  стабилизируется  $(Q, \pi)$ -фаза, которая при  $y > 0.2$  заменяется АФ-фазой. Но в отличие от случая с  $\Delta\epsilon = -2t$  с повышением температуры область  $(Q, \pi)$ -фазы постепенно сужается, и она переходит сначала в АФ-фазу, и уже затем в парамагнетик. Кроме того, рис. 5 демонстрирует, что температура магнитного фазового перехода из  $(Q, \pi)$ -фазы в АФ-фазу  $T_*$  при

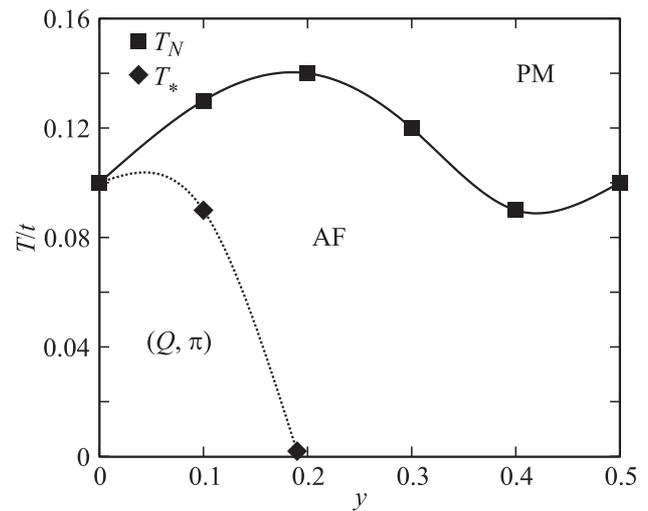


Рис. 5. Магнитная фазовая диаграмма, рассчитанная при концентрации электронов  $n = 0.8$  для примесей с  $\Delta\epsilon = 2t$  в переменных температура–концентрация примесей  $y$ .

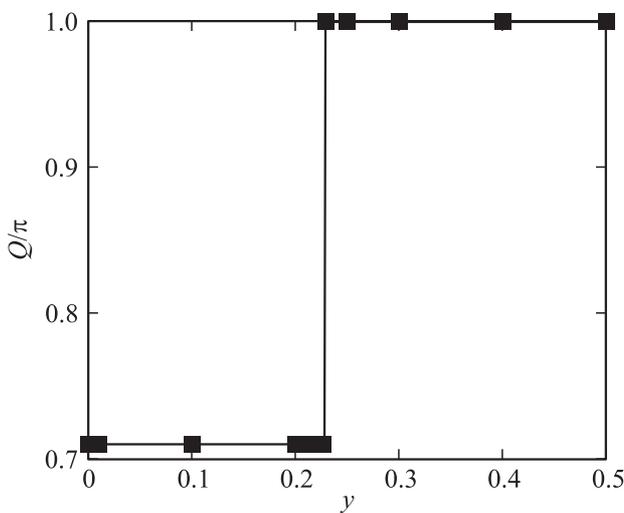


Рис. 3. Зависимость волнового вектора  $Q$  от концентрации примесей  $y$  с  $\Delta\epsilon = -2t$  при концентрации электронов  $n = 0.8$  и температуре  $T = 0.002t$ .

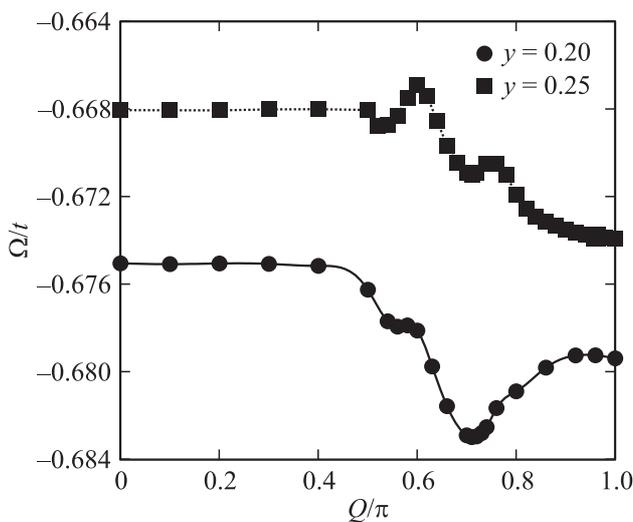


Рис. 4. Зависимость термодинамического потенциала от волнового вектора  $Q$  для концентраций примесей  $y$ , близких к точке перехода первого рода, при концентрации электронов  $n = 0.8$  и температуре  $T = 0.002t$ .

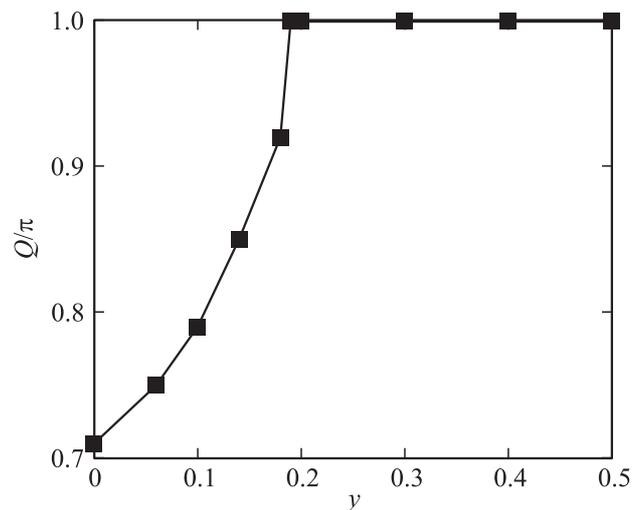
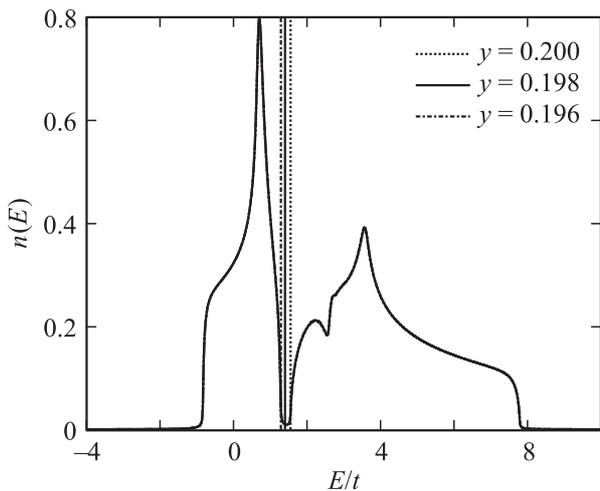


Рис. 6. Зависимость волнового вектора  $Q$  от концентрации примесей  $y$  с  $\Delta\epsilon = 2t$  при концентрации электронов  $n = 0.8$  и температуре  $T = 0.002t$ .

увеличении концентрации примесей до  $y \sim 0.2$  резко падает, после чего происходит переход от  $(Q, \pi)$ -фазы к АФ-фазе. На рис. 6 показано, что в отличие от случая с  $\Delta\epsilon = -2t$  при низких температурах этот переход является переходом второго рода. Так же как для  $\Delta\epsilon = -2t$ , он происходит, когда концентрация примесей становится близкой к концентрации дырок:  $y \sim 1 - n$ . Температура Нееля  $T_N$  является немонотонной функцией  $y$  (рис. 5) и достигает максимума при  $y \sim 0.2$  с ростом на  $\sim 40\%$ . Увеличение  $T_N$  соответствует области  $n < y$ , в которой и наблюдался рост  $T_N$  и  $T_C$  в работах [4,6]. Рис. 7 демонстрирует, что, так же как в [4,6], при  $y \sim n$  происходит переход МД, который в нашем случае в отличие от указанных работ происходит



**Рис. 7.** Плотность состояний для концентраций примесей  $y$  с  $\Delta\varepsilon = -2t$ , близких к точке перехода МД, при концентрации электронов  $n = 0.8$  и температуре  $T = 0.002t$ . Вертикальные штриховая и штрихпунктирная линии показывают положение уровня Ферми.

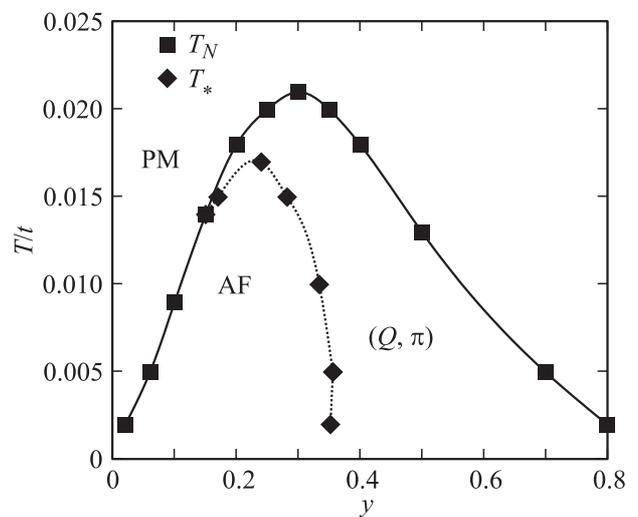
от АF-металла к АF-диэлектрику при  $n = 0.8$ , причем без учета сильных корреляций. Напомним, что переход от АF-металла к АF-диэлектрику был получен в [3], но на решетке Бете с бесконечным числом соседей и  $n = 1$ , в то время как мы проводим исследование на квадратной решетке.

### 3. Переход парамагнитной системы в магнитоупорядоченную

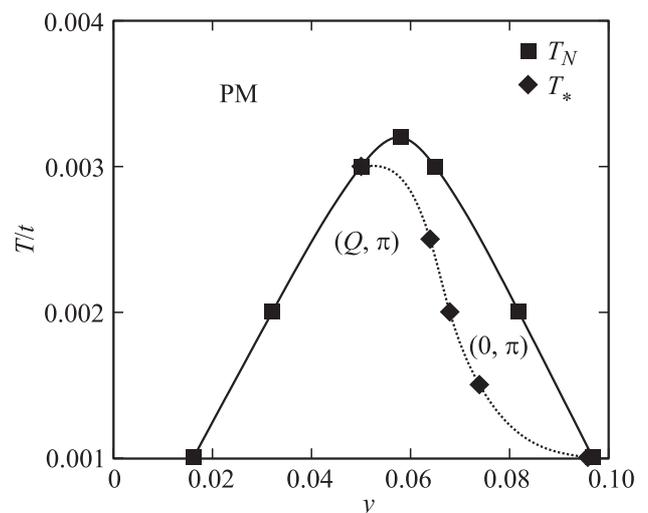
Рассмотрим возможность возникновения НССВ в исходной парамагнитной системе при введении в нее неупорядоченных примесей. Рассматриваемая модель (см. Приложение) содержит в себе возможность возникновения локальных магнитных моментов, которые взаимодействуют с эффективной средой (эффективное обменное поле). Вклад в эффективную среду вносят как магнитные моменты примесей, так и магнитные моменты самой системы. Таким образом, через эффективную среду устанавливается их взаимодействие. Какой именно магнитный порядок — в виде спиральной спиновой волны соизмеримого или несоизмеримого (НССВ) типа — установится в результате этого взаимодействия, определяется минимумом термодинамического потенциала.

При ранее выбранных параметрах  $U$  и  $t'$  парамагнитная фаза на фазовой диаграмме [7] основного состояния, вычисленной в приближении Хартри–Фока, занимает область концентраций электронов  $0 < n < 0.4$ . Магнитные фазовые диаграммы, рассчитанные для значений  $n = 0.4$  и  $0.06$ , близких к границам парамагнитной фазы, при выбранных параметрах представлены на рис. 8 и 9. Из рис. 8 видно, что при  $n = 0.4$  примеси сначала ста-

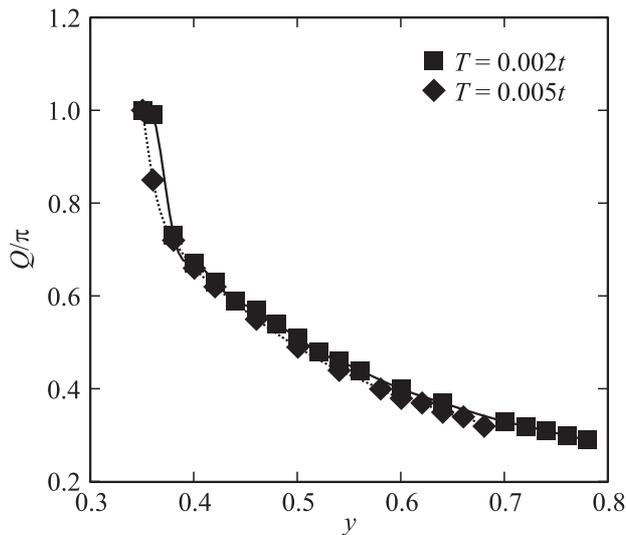
билизируют АF-фазу, которая при  $y > 0.35$  заменяется параллельной спиральной спиновой фазой  $(Q, \pi)$ . В то же время рис. 10 демонстрирует, что переход от АF-фазы к фазе  $(Q, \pi)$  является переходом второго рода. Переход происходит при непрерывном изменении вектора  $Q$ , т.е. симметрия волнового вектора не изменяется. С повышением температуры область АF-фазы постепенно сужается, и она переходит в фазу  $(Q, \pi)$ , а затем в парамагнетик. На рис. 9 показано, что при  $n = 0.06$  примеси сначала стабилизируют  $(Q, \pi)$ -фазу, которая при  $T < 0.001t$  занимает всю область фазовой диаграммы. С повышением температуры область  $(Q, \pi)$ -фазы постепенно сужается, и она переходит в фазу  $(0, \pi)$ ,



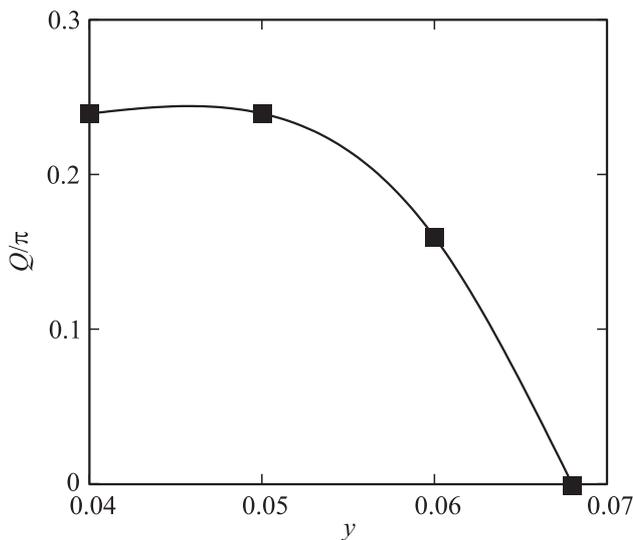
**Рис. 8.** Магнитная фазовая диаграмма, рассчитанная при концентрации электронов  $n = 0.4$  для примесей с  $\Delta\varepsilon = -2t$  в переменных температура–концентрация примесей  $y$ .



**Рис. 9.** Магнитная фазовая диаграмма, рассчитанная при концентрации электронов  $n = 0.06$  для примесей с  $\Delta\varepsilon = -2t$  в переменных температура–концентрация примесей  $y$ .  $T_*$  — температура магнитного фазового перехода из  $(Q, \pi)$ -фазы в  $(0, \pi)$ -фазу.



**Рис. 10.** Зависимость волнового вектора  $Q$  от концентрации примесей  $y$  с  $\Delta\varepsilon = -2t$  при концентрации электронов  $n = 0.4$  и температурах  $T = 0.002t$  и  $0.005t$ .



**Рис. 11.** Зависимость волнового вектора  $Q$  от концентрации примесей  $y$  при концентрации электронов  $n = 0.06$  и температуре  $T = 0.002t$ .

а затем в парамагнетик. Переход от  $(Q, \pi)$ - к  $(0, \pi)$ -фазе является фазовым переходом второго рода (рис. 11). Таким образом, при увеличении концентрации дырок происходит постепенная стабилизация  $(Q, \pi)$ -фазы. В то же время максимальное значение температуры магнитного фазового перехода в парамагнитную фазу понижается и при  $n = 0.06$  становится почти на порядок меньше соответствующего  $n = 0.4$  значения. Кроме того, из рис. 10 и 11 видно, что при увеличении концентрации примесей волновой вектор уменьшается (параметр несоизмеримости растет), причем для  $n = 0.4$  почти линейно.

## 4. Заключение

Таким образом, беспорядок существенно влияет на НССВ и их параметры. При увеличении концентрации примесей  $(Q, \pi)$ -фаза, стабильная в рассматриваемой области параметров беспримесной модели, переходит в АФ-фазу. Этот переход является переходом первого рода для примесей с  $\Delta\varepsilon = -2t$  и переходом второго рода для  $\Delta\varepsilon = 2t$ . Полученные фазовые диаграммы в переменных  $T$  и  $y$  демонстрируют, что увеличение концентрации примесей ведет к резкому понижению температур магнитных фазовых переходов из  $(Q, \pi)$ - в АФ-фазу и из  $(Q, \pi)$ - в РМ-фазу. Так же как в работе [5], при  $n < y$  мы получили увеличение температуры Нееля (на 40% при выбранных параметрах). Однако в отличие от данных [4,6] учет беспорядка в нашей работе приводит к переходу МД от АФ-металла к АФ-диэлектрику вдали от половинного заполнения  $y \approx n$  даже без учета сильных корреляций.

Кроме того, введение в парамагнитную систему примесей может приводить к образованию как соизмеримых (АФ- и  $(0, \pi)$ -фазы), так и несоизмеримых магнитных структур в виде НССВ  $((Q, \pi)$ -фаза). Это может объяснить упругий несоизмеримый магнитный отклик, недавно наблюдаемый в передопированных материалах Bi2201 при малых концентрациях примесей Fe. Полученные фазовые диаграммы в переменных  $T$  и  $y$  показывают, что НССВ стабилизируются только в ограниченной области концентраций примесей. С ростом концентрации дырок сначала стабилизируется АФ-фаза, а уже потом  $(Q, \pi)$ -фаза. В то же время температура магнитного фазового перехода в парамагнитную фазу понижается почти на порядок. При увеличении концентрации примесей волновой вектор НССВ уменьшается, что должно приводить к росту параметра несоизмеримости.

Несомненно влияние поперечных магнитных флуктуаций — как температурных, так и квантовых [20] — может существенно сказываться на значениях параметров фазовых диаграмм, однако качественное поведение, как показывает практика расчетов, воспроизводится. То же самое можно сказать и про сильные электронные корреляции, которые существенны в перечисленных выше системах, но, как показывают расчеты с их учетом, поведение НССВ в области рассматриваемых нами параметров качественно не меняется [21]. Наконец, известно, что данные системы в некоторых областях изменения параметров являются неустойчивыми по отношению к куперовскому спариванию [22]. Проблема конкуренции НССВ и сверхпроводимости [23] с одновременным учетом атомного беспорядка и термодинамических флуктуаций является сложной задачей, которая по нашим сведениям до сих пор не решена и в данной работе не исследуется. Модельные и численные упрощения, выбранные нами, позволяют выполнить последовательные и самосогласованные расчеты поведения НССВ в зависимости от температуры и беспорядка и, на наш

взгляд, могут быть полезны при рассмотрении более общих задач.

## Приложение. Модель Андерсона–Хаббарда в методе функционального интегрирования

Рассматривается гамильтониан  $t-t'$ -модели Андерсона–Хаббарда на квадратной решетке

$$\hat{H} = \sum_{ijs} t_{ij} \hat{c}_{is}^+ \hat{c}_{js} + \sum_j U n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} + \sum_j \varepsilon_j n_j, \quad (\text{П1})$$

где  $t_{ij} = -t$  — матричные элементы перескока электронов на ближайшие узлы,  $t_{ij} = t'$  — на вторые за ближайшими узлы,  $\hat{c}_{js}^+$  ( $\hat{c}_{js}$ ) — операторы рождения (уничтожения) на узле  $j$  с проекцией спина  $s$ ,  $n_{js} = \hat{c}_{js}^+ \hat{c}_{js}$ ,  $n_j$  — оператор электронной плотности,  $U$  — параметр кулоновского отталкивания электронов на узле. Беспорядок создается случайным выбором значений локальных энергий  $\varepsilon_j$  на узлах. В настоящей работе рассматривается модель бинарного сплава с функцией распределения локальных энергий

$$P(\varepsilon_j) = y \delta(\varepsilon_j - \Delta\varepsilon) + (1-y) \delta(\varepsilon_j), \quad (\text{П2})$$

где  $\Delta\varepsilon$  — разность энергетических уровней,  $y$  — концентрация примесей. Вычисления проводятся с учетом магнитных структур в виде спиральных спиновых волн, представляющих собой равномерно вращающийся в плоскости поляризации вектор намагниченности  $\mathbf{m}_j = m\mathbf{e}_j$  при переходе от узла к узлу

$$\mathbf{e}_j = \mathbf{e}_x \cos(\mathbf{Q}\mathbf{R}_j) + \mathbf{e}_y \sin(\mathbf{Q}\mathbf{R}_j). \quad (\text{П3})$$

Эти магнитные структуры характеризуются величиной и направлением волнового вектора  $\mathbf{Q} = [Q_x, Q_y]$ . В общем случае вектор  $\mathbf{Q}$  не совпадает с вектором обратной решетки и поэтому является несоизмеримым [7,19,24].

Для решения задачи используется метод функционального интегрирования с преобразованием Хаббарда–Стратоновича в двухполюсном представлении [19,25]. В этом методе многочастичная задача вычисления статистической суммы большого канонического ансамбля сводится к одночастичной в расширенном пространстве с не зависящими от времени (в статическом приближении) спиновым  $\nu_j$  и зарядовым  $\xi_j$  фиктивными полями. Вычисления проводятся в приближении седловой точки для зарядового поля  $\xi_j$ , в котором переменное поле  $\xi_j$  заменяется его значением в седловой точке  $\xi_j(\nu_j)$ . Кроме того, как уже упоминалось во Введении, мы пренебрегаем поперечными флуктуациями, выбирая направление спинового фиктивного поля  $\nu_j$  параллельным вектору намагниченности  $\mathbf{m}_j$  на каждом узле  $\nu_j = \nu\mathbf{e}_j$ .

После проведения преобразований, которые по существу не отличаются от проведенных в задаче без

примесей, статистическая сумма представляется в виде интеграла по амплитуде спинового поля  $\nu$

$$Z = \exp[-\beta(\Omega_{\text{HF}} + \Omega[\Sigma] + \Delta\Omega)],$$

$$\Omega[\Sigma] = -1/\pi \int dE f(E) \ln(\det[1 + \Sigma(E)G(E)]),$$

$$\Delta\Omega = y\Delta\Omega^{\text{imp}} + (1-y)\Delta\Omega^{\text{sys}},$$

$$\Delta\Omega^\alpha = -1/\beta \ln \int d\nu \exp[-\beta\Delta\Omega^\alpha(\nu)],$$

$$\Delta\Omega^\alpha(\nu) = U[\nu^2 + \xi_\alpha^2(\nu)] + 1/\pi \int dE f(E) \times \ln(\det[1 - G(E)(\Delta U^\alpha(\nu) - \Sigma(E))]). \quad (\text{П4})$$

Здесь  $\Omega[\Sigma]$  — термодинамический потенциал эффективной среды,  $\Delta\Omega^{\text{imp}}$  — флуктуационная часть термодинамического потенциала примесей,  $\Delta\Omega^{\text{sys}}$  — флуктуационная часть термодинамического потенциала системы,  $\Omega_{\text{HF}} = -1/\beta \ln(\text{Sp} \exp[-\beta(\hat{H}_{\text{HF}} - \mu n)])$  — термодинамический потенциал в приближении Хартри–Фока,  $f(E)$  — функция распределения Ферми,  $\beta = 1/k_B T$ . В отличие от беспримесной задачи переменные поля  $\xi_\alpha$  в (П4) на узлах системы и примесей имеют разные седловые точки и функции распределения соответственно. Поэтому вычисление средних значений термодинамических величин и средней матрицы рассеяния в самосогласованных уравнениях одноузельного приближения когерентного потенциала для эффективной собственно энергетической части  $\Sigma(E)$  в данном случае проводится в следующем виде:

$$\langle A \rangle = y \langle A^{\text{imp}} \rangle + (1-y) \langle A^{\text{sys}} \rangle,$$

$$\langle A^\alpha \rangle = \int d\nu A^\alpha(\nu) P^\alpha(\nu),$$

$$P^\alpha(\nu) = \exp[-\beta\Delta\Omega^\alpha(\nu) + \beta\Delta\Omega^\alpha]. \quad (\text{П5})$$

Здесь  $A$  — усредняемая величина. Численное решение этих самосогласованных уравнений позволяет определить все магнитные свойства рассматриваемой системы при условии, что выбирается магнитное состояние с минимальным значением термодинамического потенциала.

## Список литературы

- [1] P.A. Lee, T.V. Ramakrishnan. Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985).
- [2] D. Belitz, T.R. Kirkpatrick. Rev. Mod. Phys. **66**, 261 (1994).
- [3] K. Byczuk, W. Hofstetter, U. Yu, D. Vollhardt. Eur. Phys. J. Special Topics **180**, 135 (2010).
- [4] K. Byczuk, M. Ulmke. Eur. Phys. J. B **45**, 449 (2005).
- [5] M. Ulmke V. Janiš, D. Vollhardt. Phys. Rev. B **51**, 10411 (1995).
- [6] K. Byczuk, M. Ulmke, D. Vollhardt. Phys. Rev. Lett. **90**, 196403 (2003).
- [7] P.A. Igoshev, M.A. Timirgazin, A.A. Katanin, A.K. Arzhnikov, V.Yu. Irkhin. Phys. Rev. B **81**, 094407 (2010).

- [8] E. Arrigoni, G.C. Strinati. *Phys. Rev. B* **44**, 7455 (1991).
- [9] A.V. Chubukov, K.A. Musesian. *Phys. Rev. B* **51**, 12605 (1995).
- [10] M. Raczkowski, R. Frésard, A.M. Oleś. *Europhys. Lett.* **76**, 128 (2006).
- [11] G. Seibold, R.S. Markiewicz, J. Lorenzana. *Phys. Rev. B* **83**, 205108 (2011).
- [12] R.-H. He, M. Fujita, M. Enoki, M. Hashimoto, S. Iikubo, S.-K. Mo, H. Yao, T. Adachi, Y. Koike, Z. Hussain, Z.-X. Shen, K. Yamada. *Phys. Rev. Lett.* **107**, 127002 (2011).
- [13] H. Hiraka, Y. Hayashi, S. Wakimoto, M. Takeda, K. Kakurai, T. Adachi, Y. Koike, I. Yamada, M. Miyazaki, M. Hiraishi, S. Takeshita, A. Kohda, R. Kadono, J.M. Tranquada, K. Yamada. *Phys. Rev. B* **81**, 144501 (2010).
- [14] S. Wakimoto, H. Hiraka, K. Kudo, D. Okamoto, T. Nishizaki, K. Kakurai, T. Hong, A. Zheludev, J.M. Tranquada, N. Kobayashi, K. Yamada. *Phys. Rev. B* **82**, 064507 (2010).
- [15] F.J. Lamelas, S.A. Werner, S.M. Shapiro, J.A. Mydosh. *Phys. Rev. B* **51**, 621 (1995).
- [16] P.W. Anderson. *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [17] P.A. Wolff. *Phys. Rev.* **124**, 1030 (1961).
- [18] Yu.A. Izyumov. *Adv. Phys.* **14**, 569 (1965).
- [19] A.K. Arzhnikov, A.G. Groshev. *Europhys. Lett.* **102**, 57005 (2013).
- [20] S. Sachdev. *Nature Physics* **4**, 173 (2008).
- [21] P.A. Igoshev, M.A. Timirgazin, V.F. Gilmutdinov, A.K. Arzhnikov, V.Yu. Irkhin. *J. Phys.: Condens. Matter* **27**, 446002 (2015).
- [22] D.J. Scalapino, E. Loh, jr., J.E. Hirsch. *Phys. Rev. B* **34**, 8190(R) (1986).
- [23] B. Keimer, S.A. Kivelson, M.R. Norman, S. Uchida, J. Zaanen. *Nature* **518**, 179 (2015).
- [24] A.K. Аржников, А.Г. Грошев. *Письма в ЖЭТФ* **94**, 762, (2012).
- [25] Yu.A. Izyumov, Yu.N. Skryabin. *Statistical mechanics of magnetically ordered systems*. Springer-Verlag, N.Y. (1988). 295 p.