

Влияние термодинамических флюктуаций на магнитное фазовое расслоение и параметры спиральных спиновых волн

А. К. Аржников¹⁾, А. Г. Грошев

Физико-технический институт Уральского отд. РАН, 426001 Ижевск, Россия

Поступила в редакцию 11 сентября 2011 г.

После переработки 10 октября 2011 г.

В работе исследуется влияние температуры на магнитное фазовое расслоение и параметры несоизмеримых спиральных волн. Для этой цели используются двумерная однозонная модель Хаббарда и преобразование Стратоновича–Хаббарда. Рассматриваются как соизмеримые (антиферромагнитная, ферромагнитная), так и несоизмеримые (спиральные) магнитные фазы. Задача решается в статическом приближении с учетом поперечных флюктуаций магнитного момента. Показано, что температура существенно влияет на коллинеарные и спиральные магнитные фазы. При повышении температуры область фазового расслоения вблизи половинного заполнения существенно сжимается, замещаясь антиферромагнитной фазой. Полученные результаты используются для объяснения магнитных свойств купратов.

1. Введение. Исследование двумерных коррелированных электронных систем вызывает повышенный интерес, который стимулируется нерешенными проблемами, касающимися высокотемпературных сверхпроводящих купратов. Подавляющее большинство исследователей считает, что сверхпроводящие и магнитные свойства купратов тесно связаны. Магнитные свойства формируются в атомных слоях Cu. При этом между собой атомные слои связаны слабым магнитным взаимодействием. При стехиометрическом составе в купратах реализуется антиферромагнитный порядок. При допировании характер магнитного упорядочения кардинально меняется. Эксперименты по рассеянию нейтронов в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ при низких температурах показывают, что при допировании происходит переход от антиферромагнитного порядка к несоизмеримым магнитным структурам и фазовому расслоению. С ростом температуры фазовое расслоение исчезает, а несоизмеримые магнитные структуры переходят в антиферромагнитное упорядочение [1–4].

Недавно авторы работы [5] рассмотрели фазовую диаграмму основного состояния двумерной однозонной модели Хаббарда. Исследования были проведены в рамках приближения среднего поля. При этом рассматривались как соизмеримые (ферромагнитная и антиферромагнитная), так и несоизмеримые (спиральные спиновые волны) магнитные фазы. В результате были обнаружены области разрыва химического потенциала, свидетельствующие о наличии фазового перехода первого рода, и области пространственного расслоения магнитных фаз. Получ-

ченные данные позволили объяснить особенности поведения химического потенциала, линейную зависимость волнового вектора несоизмеримой спиральной спиновой волны от допирования и явление фазового расслоения. Необходимо отметить, что и ранее магнитное фазовое расслоение использовалось для объяснения свойств магнитных полупроводников и купратов [6, 7], однако несоизмеримые магнитные структуры пока не рассматривались.

В настоящей работе исследуются температурные зависимости области фазового расслоения и параметров спиновых спиральных структур. Вычисления проводятся в рамках двумерной однозонной модели Хаббарда. Для учета термодинамических флюктуаций используется преобразование Стратоновича–Хаббарда в двухполевом представлении.

Прежде всего необходимо отметить особенность рассматриваемой двумерной системы. В литературе существуют в некоторой степени прямые и точные доказательства невозможности спонтанного нарушения симметрии, возникновения магнитного порядка и фазового расслоения в двумерной модели Хаббарда [8–10]. Эти доказательства аналогичны теореме Мермина, связанной с двумерными кристаллами [11]. Обычно исследователи, использующие двумерную модель Хаббарда для описания купратов, неявно предполагают, что слабая магнитная связь между слоями Cu подавляет аномальный рост флюктуации и стабилизирует магнитный порядок. Это позволяет рассматривать флюктуации относительно магнитного упорядочения даже при конечных температурах. Вместе с тем неоднородное магнитное состояние и фазовое расслоение в двумерной модели Хаббарда были получены численными методами, куда вхо-

¹⁾ e-mail: arzhnikov@otf.pti.udm.ru

дили динамическая теория среднего поля и квантовый метод Монте-Карло [12–14]. Эти расчеты указывают на возможность существования неоднородного магнитного упорядочения в двумерном случае (аналогично существованию квазидвумерных кристаллов [15]). Проблемы двумерного кристалла и двумерной модели Хаббарда с неоднородными состояниями до сих пор не решены. Вместе с тем результаты численных расчетов на ограниченных кристаллах дают нам дополнительные аргументы в пользу рассмотрения двумерных систем в приближениях, которые обеспечивают стабильность магнитного порядка.

2. Метод. Рассмотрим гамильтониан модели Хаббарда на квадратной решетке, $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}$,

$$\hat{H}_0 = \sum_{ijs} t_{ij} \hat{c}_{is}^+ \hat{c}_{js}, \quad \hat{H}_{\text{int}} = U \sum_j \hat{c}_{j\uparrow}^+ \hat{c}_{j\uparrow} \hat{c}_{j\downarrow}^+ \hat{c}_{j\downarrow}, \quad (1)$$

где j – номер узла, s – проекция спина, матричные элементы перескока $t_{ij} = -t$ для ближайших узлов и $t_{ij} = 0$ для остальных, $\hat{c}_{js} (\hat{c}_{js}^+)$ – операторы рождения (уничтожения) электрона на узле j с проекцией спина s (\downarrow, \uparrow), U – величина кулоновского отталкивания на узле.

Для согласования дальнейших вычислений с результатами работы [5] нам необходимо использовать преобразование Стратоновича–Хаббарда в двухполевом представлении. Известно, что в этом представлении получаются результаты приближения Хартри–Фока при температуре, равной нулю [16]. Поэтому гамильтониан взаимодействия удобно представить в следующей форме:

$$\hat{H}_{\text{int}} = U \sum_j \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} = U \sum_j \left[\hat{n}_j^2 / 4 - (\hat{\mathbf{S}}_j \cdot \mathbf{e}_j)^2 \right]. \quad (2)$$

Здесь \mathbf{e}_j – единичный вектор фиксированного направления на узле j , $\hat{n}_j = \hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow}$ – оператор электронной плотности, $\hat{n}_{js} = \hat{c}_{js}^+ \hat{c}_{js}$, $\hat{\mathbf{S}}_j = 1/2 \sum_{ss'} \hat{c}_{js}^+ \sigma_{ss'} \hat{c}_{js}$ – оператор спина, $\sigma_{ss'}$ – элементы вектора $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, σ – матрицы Паули.

Термодинамические свойства системы определяются статистической суммой большого канонического ансамбля:

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta(\hat{H} - \mu \hat{n}) \right] \right\} = \\ &= \text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta(\hat{H}_0 - \mu \hat{n}) \right] \times \right. \\ &\quad \left. \times T_\tau \exp \left[- \int_0^\beta \hat{H}_{\text{int}}(\tau) d\tau \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь μ – химический потенциал, T_τ – оператор упорядочения по времени, Tr – суммирование по полному набору квантовомеханических состояний, $\hat{H}_{\text{int}}(\tau) = \exp(-\tau \hat{H}_0) \hat{H}_{\text{int}} \exp(\tau \hat{H}_0)$ – оператор в

представлении взаимодействия, $\beta = 1/k_B T$, T – температура.

Статистическую сумму (3) многочастичной задачи можно свести к одночастичной в расширенном пространстве, используя преобразование Стратоновича–Хаббарда [17]:

$$Z = \int \prod_i D\mathbf{v}_j(\tau) D\zeta_j(\tau) Z[\mathbf{v}, \zeta], \quad (4)$$

$$\begin{aligned} Z[\mathbf{v}, \zeta] &= \exp [-\beta F(\mathbf{v}, \zeta)] = \\ &= \exp \left\{ -U \sum_j \int_0^\beta d\tau [\mathbf{v}_j^2(\tau) + \zeta_j^2(\tau)] \right\} Z^*[\mathbf{v}, \zeta], \\ Z^*[\mathbf{v}, \zeta] &= \text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta(\hat{H}_0 - \mu \hat{n}) \right] \times \right. \\ &\quad \left. \times T_\tau \exp \left[- \sum_j \int_0^\beta d\tau \hat{V}_{jj}(\mathbf{v}, \zeta, \tau) \right] \right\}, \\ \hat{V}_{jj}(\mathbf{v}, \zeta, \tau) &= U \left[i \zeta_j(\tau) \hat{n}_j(\tau) - 2 \mathbf{v}_j(\tau) \cdot \hat{\mathbf{S}}_j(\tau) \right], \end{aligned}$$

где ζ_j и \mathbf{v}_j – вспомогательные поля, сопряженные с зарядом и спином на узле j соответственно. Это выражение является формально точным, но достаточно сложным для конкретных вычислений. Поэтому для дальнейшего продвижения необходимо осуществить ряд аппроксимаций. При решении задачи мы учитываем магнитные структуры спирального типа, представляющие собой равномерно вращающийся в плоскости поляризации вектор намагниченности при переходе от узла к узлу. Такая магнитная структура характеризуется величиной и направлением волнового вектора $\mathbf{Q} = (Q_x, Q_y)$. В произвольном случае волновой вектор \mathbf{Q} не совпадает с вектором обратной решетки и поэтому является несоизмеримым. В силу симметрии задачи плоскость поляризации может иметь произвольное направление. Выберем единичный вектор, задающий данную структуру волны, в виде

$$\mathbf{e}_j = \mathbf{e}_x \cos(\mathbf{Q}\mathbf{R}_j) + \mathbf{e}_y \sin(\mathbf{Q}\mathbf{R}_j). \quad (5)$$

Как показано в работе [18], суперпозиция спиральной волны и ферромагнитной составляющей, перпендикулярной плоскости поляризации, имеет большую энергию. Поэтому в данной работе она не рассматривается. Учитывая явный вид \mathbf{e}_j (5), проведем тождественное преобразование:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{\mathbf{k}} (\mathcal{E}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} + \mathcal{E}_{\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}) - \\ &- UM \sum_{\mathbf{k}} (\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} + \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}), \end{aligned} \quad (6)$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = U \sum_j \left[(\hat{n}_j - n_e)^2 / 4 - (\hat{\mathbf{S}}_j \cdot \mathbf{e}_j - M)^2 \right],$$

где $\mathcal{E}_{\mathbf{k}\uparrow(\downarrow)} = Un_e/2 + \mathcal{E}_{\mathbf{k}}$, $\mathcal{E}_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$, n_e – плотность электронов на узле, M – намагниченность на узле. Введем функцию Грина $\hat{G}_0(z) = (z - \hat{\mathcal{H}}_0)^{-1}$ и, используя стандартные преобразования [19, 20], запишем

$$Z^*[\mathbf{v}, \zeta] = \exp[-\beta\Omega(\mathbf{v}, \zeta)], \quad (7)$$

$$\Omega(\mathbf{v}, \zeta) = \Omega_0 - \frac{1}{\beta} \sum_{nj} \text{Tr} \ln [1 - G_{jj}^0(i\omega_n)V_{jj}(\mathbf{v}, \zeta)].$$

Здесь $\Omega_0 = -1/\beta \ln \text{Tr} \exp[-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{n})]$ – термодинамический потенциал невзаимодействующих электронов, $\omega_n = \pi(2n+1)/\beta$ – мацубаровские частоты для фермиевских частиц, $n = 0, \pm 1, \dots$, V_{jj} и G_{jj}^0 являются матрицами 2×2 по спиновым переменным. Дальнейшие вычисления проводятся в рамках статической аппроксимации, которая предполагает, что \mathbf{v}_i и ζ_i не зависят от τ . Следующим приближением является замена переменного поля ζ_j его значением $\zeta_j^0(\mathbf{v}_j)$ в седловой точке, которая определяется уравнением

$$\frac{\partial F(\mathbf{v}, \zeta)}{\partial \zeta_j} = U[2\zeta_j - in_j(\mathbf{v}_j, \zeta_j)] = 0, \quad (8)$$

$$\zeta_j^0(\mathbf{v}_j) = in_j(\mathbf{v}_j, \zeta_j^0)/2,$$

$$n_j(\mathbf{v}_j, \zeta_j) = \frac{1}{\beta} \sum_n \text{Tr} \left\{ [1 - G_{jj}^0(i\omega_n)V_{jj}(\mathbf{v}, \zeta)]^{-1} \times \right.$$

$$\left. \times G_{jj}^0(i\omega_n) \right\}.$$

Используя $\zeta_j^0(\mathbf{v}_j)$, мы минимизируем термодинамический потенциал при фиксированной конфигурации \mathbf{v}_j , но пренебрегаем флуктуациями заряда. В данной работе мы учтем только поперечные спиновые флуктуации, фиксируя в (8) направление магнитного момента $\mathbf{v}_j = v\mathbf{e}_j$ на каждом узле. Наконец, заменим в (8) матричное выражение $(1 - G_{jj}^0 V_{jj})^{-1} G_{jj}^0$ усредненной функцией Грина $\tilde{G}(z)$ с собственно-энергетической частью $\Sigma(z)$ (усреднение проводится по переменному полю v , $\langle \dots \rangle_v$). Собственно-энергетическая часть $\Sigma(z)$ и $\tilde{G}(z)$ находятся из сомосогласованного уравнения приближения когерентного потенциала:

$$\tilde{G}_{jj}(z) = \langle [1 - G_{jj}^0(z)V_{jj}(v)]^{-1} G_{jj}^0(z) \rangle_v = \quad (9)$$

$$= G_{jj}^0[z - \Sigma(z)].$$

После сделанных приближений статистическую сумму можно представить в виде интеграла по полю v :

$$Z = \int dv \exp \{ -\beta U[v^2 + \zeta^2(v)] \} \exp[-\beta\Omega(v)], \quad (10)$$

$$\Omega(v) = \Omega_0 - \frac{1}{\beta} \sum_n \left(\ln \det \{1 - \tilde{G}(i\omega_n)[V(v) - \Sigma(i\omega_n)]\} - \right.$$

$$\left. - \ln \det [1 + \Sigma(i\omega_n)\tilde{G}(i\omega_n)] \right).$$

Для краткости индекс узла j в выражении (10) опущен. Как отмечалось выше, в этих приближениях основное состояние системы является состоянием Хартри–Фока, которое формально обосновывается в пределе малого параметра U/t . При отличной от нуля температуре в используемом теоретическом подходе анализ приближений по малому параметру является крайне сложной задачей, которая не решена до сих пор. Использование статического приближения оправдывается тем, что мы не исследуем в наших системах сверхпроводящие свойства, а сильные корреляции в выбранной нами области параметров при концентрациях электронов, близких к 1, не столь существенны. Это подтверждается проведенным ниже сравнением, наших результатов с результатами исследований, полученными с помощью динамических кластерных методов [21].

Несмотря на существенные приближения, сделанные выше, дальнейший анализ выражения (10) возможен только численными методами. Для этого необходимо самосогласованно решить уравнения (8), (9) и (10) при условии, что выбирается магнитное состояние с минимальным термодинамическим потенциалом.

3. Результаты. Гамильтониан (1) обладает электрон-дырочной симметрией ($n \leftrightarrow 2 - n$), что позволяет при решении ограничиться областью концентраций $0 \leq n \leq 1$. Здесь и далее мы используем приведенную температуру $T \rightarrow k_B T/t$. Свободный параметр U/t выбран равным 4, что соответствует значению, которое наиболее часто используется при описании купратов [5].

На рис. 1 пунктирной линией обозначены фазовые переходы между однородными состояниями. Видно, что при повышении температуры область (Q, Q) -фазы сужается за счет расширения AF-фазы. В то же время рис. 2 и 3 демонстрируют, что переход от (Q, Q) к (Q, π) является фазовым переходом I рода. Переход происходит при конечном, не равном π векторе Q , т.е. изменяется симметрия волнового вектора (рис. 2). Более того, химический потенциал μ имеет две области, которые характеризуются отрицательными производными по n ($n = 0.92 - 0.9, 0.87 - 0.86$), см. рис. 3. Следовательно, эти области должны состоять из смеси фаз. Границы фазового расслоения (ФР) и парциальное отношение фаз можно получить, используя правило Максвелла:

$$\int_{n_1}^{n_2} [\mu(n_1) - \mu(n)] dn = 0, \quad (11)$$

где n_1 и n_2 – границы области ФР, см. рис. 3. Пользуясь этим правилом, мы рассчитали диаграмму с уч-

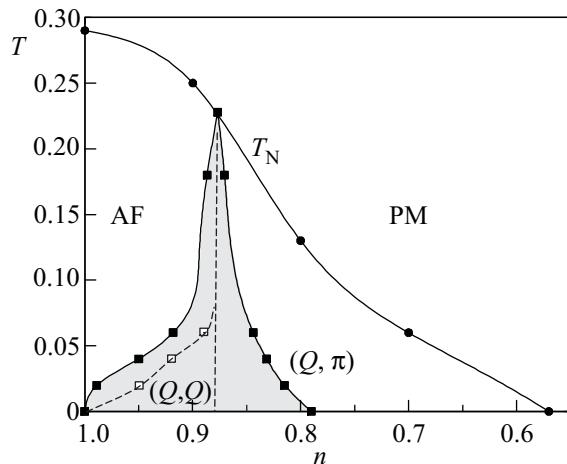


Рис. 1. Магнитная фазовая диаграмма, рассчитанная при $U/t = 4$ в переменных температура – число электронов n . Сплошная линия – температура Нееля (фазовый переход второго рода), пунктирная – фазовый переход первого рода, вычисленный без учета фазового расслоения, затемненная область – область фазового расслоения $AF + (Q, \pi)$

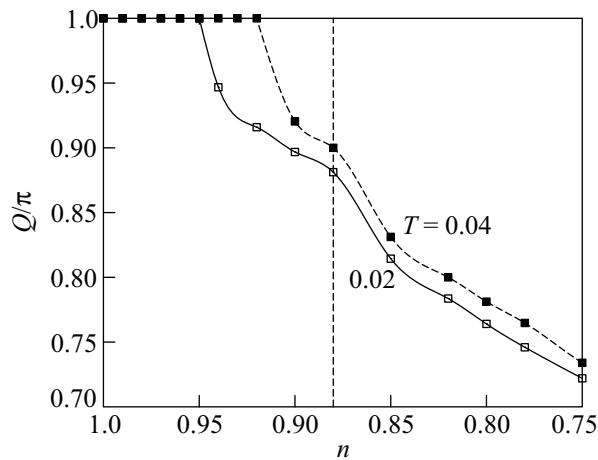


Рис. 2. Зависимость вектора Q от концентрации электронов n при $U/t = 4$ для двух температур (0.02 и 0.04). Вертикальная пунктирная линия указывает концентрации, при которых происходит фазовый переход от (Q, Q) -к (Q, π) -фазе

том ФР (затемненная область на рис. 1). При $T = 0$ существует широкая по концентрации область фазового расслоения, а антиферромагнитная фаза (AF) реализуется только при $n = 1$. Это полностью совпадает с результатами работ [5, 18]. С повышением температуры область ФР быстро сужается, переходит в AF, а затем в парамагнетик. Это обычный порядок температурных магнитных фазовых переходов, который реализуется в купратах при малом додировании, если полагать, что область фазового расслоения в т-

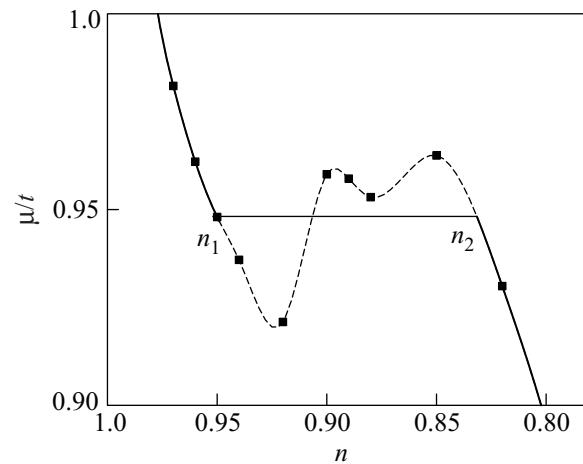


Рис. 3. Зависимость химического потенциала от концентрации электронов n при $U/t = 4$, $T = 0.04$

ории соответствует в эксперименте области, называемой спиновым стеклом. Завышенные по сравнению с экспериментальными значения расчетных температур фазовых переходов обусловливаются несколькими факторами. Температуры переходов снижаются при учете в гамильтониане интегралов перескока на вторые соседи²⁾. Снижения температуры перехода можно ожидать при последовательном учете динамических флюктуаций. Как показывают расчеты, выполненные в приближении динамического кластерного метода (DCA) [21], $T_N = 0.304t$ для $N_c = 1$ и $T_N = 0.208t$ для $N_c = 4$, где N_c – число узлов в кластере. Следует отметить количественное согласие величин, полученных в наших расчетах ($T_N = 0.28t$) и в DCA-методе, вблизи половинного заполнения. Кроме того, несмотря на завышенные значения температур переходов, мы наблюдаем неплохое согласие экспериментального отношения $T_N/T_f \approx 10$, где T_f – температура перехода от AF к ФР (см., например, [2]), и теоретического ($n = 0.99$). На рис. 4 приведены температурные зависимости волнового вектора (Q, π) -фазы, локального магнитного момента и его модуля в области ФР. Видно, что модуль магнитного момента претерпевает небольшие изменения, в то время как локальный магнитный момент достаточно быстро уменьшается. Это стандартное температурное поведение магнитного момента, которое обычно наблюдается в системах с коллективизированными электронами. Волновой вектор изменяется от 0.74π при

²⁾ Мы провели предварительные расчеты температуры Нееля T_N в модели с интегралом перескока на вторые соседи $t' = 0.2t$ и получили снижение температуры перехода приблизительно на 15%.

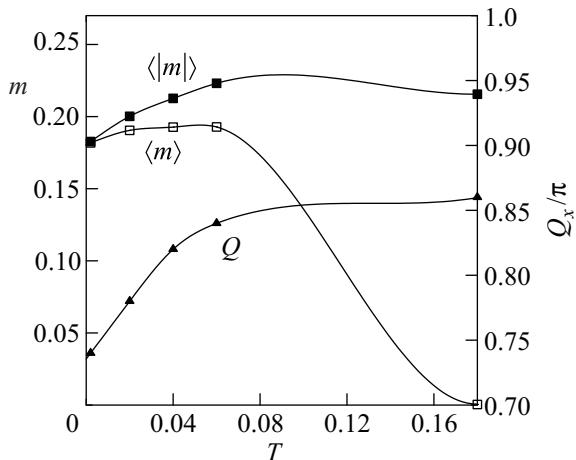


Рис. 4. Зависимости волнового вектора (Q, π) -фазы, среднего магнитного момента на узле m и его модуля $|m|$ от температуры при $U/t = 4$ в области фазового расслоения

$T = 0$ до π при $T = 0.228$, переходя полностью к АФ-фазе.

4. Заключение. Температура существенно влияет на область фазового расслоения и параметры несоизмеримых спиральных спиновых структур. При повышении температуры область ФР резко сужается, а волновой вектор спиральной структуры стремится к значению, соответствующему АФ-фазе. Полученная фазовая диаграмма в переменных T и n качественно согласуется с фазовой диаграммой магнитных состояний купратов. Однако в эксперименте наблюдаются и другие состояния в области ФР, в частности $(Q, Q) + (Q, \pi)$, см., например, [4]. Наличие областей нестабильности системы, в которых химический потенциал имеет отрицательные производные (рис. 3), указывает на высокую вероятность существования двух областей ФР: АФ $+(Q, Q)$ и $(Q, Q) + (Q, \pi)$. Как показано в [5], для более детального описания эксперимента с точки зрения фазового расслоения в гамiltonиане (1) необходимо учитывать перескоки на следующие за ближайшими соседями узлы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант # 09-02-00461) и РАН (грант # 09-2-2001).

1. C. H. Lee, K. Kurahashi, J. Wada et al., Phys. Rev. **57**, 6165 (1998).
2. M. Matsuda, M. Fujita, K. Yamada et al., Phys. Rev. **62**, 9148 (2000).
3. M. Fujita, K. Yamada, H. Hiraka et al., Phys. Rev. **65**, 064505 (2002).
4. M. Matsuda, M. Fujita, K. Yamada et al., Phys. Rev. B **65**, 134515 (2002).
5. P. A. Igoshev, M. A. Timirgazin, A. A. Katanin et al., Phys. Rev. B **81**, 094407 (2010).
6. Э. Л. Нагаев, УФН **165**, 529 (1995).
7. R. Suzuki, T. Watanabe, and S. Ishihara, Phys. Rev. B **80**, 054410 (2009).
8. D. K. Ghosh, Phys. Rev. Lett. **27**, 1584 (1971).
9. G. Su, Phys. Rev. B **54**, R8281 (1996).
10. M. S. Laad, arXiv0810.4416v1 (2008).
11. N. D. Mermin, Phys. Rev. **176**, 250 (1968).
12. E. Langmann and M. Wallin, Phys. Rev. Lett. **127**, 825 (2007).
13. A. Macridin, M. Jarrell, and Th. Maier, Phys. Rev. B **74**, 085104 (2006).
14. C. Chang and S. Zhang, Phys. Rev. B **78**, 165101 (2008).
15. A. Fasolino, J. H. Los, and M. I. Katsnelson, Nature mat. **78**, 2011 (2007).
16. R. F. Hassing and D. M. Esterling, Phys. Rev. B **7**, 432 (1973).
17. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем*, М.: Наука, 1987.
18. M. A. Timirgazin and A. K. Arzhnikov, Solid State Phenom. **559**, 152 (2009).
19. S. Q. Wang, W. E. Evenson, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. Lett. **23**, 92 (1969).
20. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, М.: ГИФМЛ, 1962.
21. T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, and M. H. Hettler, Rev. Mod. Phys. **77**, 1027 (2005).