

## Особенности разделения фаз в спин-псевдоспиновой модели

Х. Бенсегиер\* Ю. Д. Панов\*

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина,  
Институт естественных наук и математики,  
кафедра теоретической и математической физики  
Россия, 620075, Екатеринбург, Куйбышева, д. 48  
(Статья поступила 21.06.2019; Подписана в печать 22.09.2019)

Рассмотрена двумерная спин-псевдоспиновая система, которая моделирует плоскость  $\text{CuO}_2$  в купратах и учитывает спиновый обмен и зарядовые корреляции на узле и между узлами. Эта модель позволяет изучить конкуренцию зарядового и магнитного упорядочения в купратах. В работе мы исследовали термодинамическую устойчивость АФМ фазы для случаев сильного и слабого обмена. Для этого мы получили температурные зависимости химического потенциала и сжимаемости классическим методом Монте-Карло и сравнили результаты численных расчетов с аналитическими результатами в рамках среднего поля.

PACS: 74.72.-h, 75.90.+w, 64.75.+g, 05.10.Ln

УДК:538.935

Ключевые слова: купраты, магнитный и зарядовый порядок, спин-псевдоспиновая модель, метод Монте-Карло.

### ВВЕДЕНИЕ

Одна из основных проблем физики сверхпроводящих купратов — это сосуществование и конкуренция спинового, сверхпроводящего и зарядового упорядочения. Взаимному влиянию спинового и зарядового упорядочения в купратах посвящены работы [1–5]. Для рассмотрения конкуренции спинового и зарядового упорядочения в работах [6, 7] была предложена упрощенная статическая двумерная спин-псевдоспиновая модель для  $\text{CuO}_2$  плоскости купрата, в которой наряду с  $\text{CuO}_4^{6-}$  центрами, обладающими спином  $s = \frac{1}{2}$ , рассматриваются взаимодействующие  $\text{CuO}_4^{5-}$  и  $\text{CuO}_4^{7-}$  центры со нулевым спином в основном состоянии. Многоэлектронные состояния  $\text{CuO}_4^{7-;6-;5-}$  описываются как компоненты псевдоспинового триплета  $S = 1$  с  $M_S = -1, 0, +1$ , что позволяет использовать псевдоспиновый формализм [8, 9]. В рамках этого подхода гамильтониан статической спин-псевдоспиновой модели имеет вид

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

и учитывает зарядовые корреляции на узле ( $\Delta$ ), между узлами ( $V$ ), и спиновый обмен ( $J$ ) в форме взаимодействия Изинга. Суммирование идет по узлам двумерной квадратной решетки,  $\langle ij \rangle$  означает ближайших соседей. Здесь  $S_{zi}$  это  $z$ -компонента псевдоспина  $S = 1$  на узле,  $\sigma_{zi} = P_{0i} s_{zi} / s$  — нормированная  $z$ -компонента спина  $s = 1/2$ , умноженная на проектор  $P_{0i} = 1 - S_{iz}^2$  на состояние с  $M_S = 0$ . Химический потенциал  $\mu$  позволяет учесть условие постоянства заряда:  $nN = \sum \langle S_{zi} \rangle = \text{const}$ , где  $n$  — плотность заряда. Спин-псевдоспиновая модель обоб-

щает двумерную разбавленную антиферромагнитную (АФМ) модель Изинга с заряженными примесями. При  $\Delta > 0$  результаты можно сравнить с моделью Блюма-Капеля [10, 11] или с моделью Блюма-Эмери-Гриффитса [12]. Аналогичная псевдоспиновая модель для купратов рассмотрена в работе [13], в которой типичную для моделей типа Блюма-Эмери-Гриффитса фазовую диаграмму авторы напрямую соотносят с фазовой диаграммой купратов. Наша модель отличается выбором базисных состояний и нацелена на рассмотрение конкуренции спинового и зарядового порядка в области псевдощелевого поведения на фазовой диаграмме купратов.

Спин-псевдоспиновая система характеризуется богатой фазовой диаграммой основного состояния, которая была исследована в приближении среднего поля (СП) [14, 15]. Было показано, что в системе в основном состоянии возможны 5 фаз в двух различных пределах. В пределе слабого обмена, при  $J_{eff} < V$ , где  $J_{eff} = Js^2$ , реализуются различные типы зарядового порядка (ЗП) при средней плотности заряда  $n$ . При  $\Delta < 0$  фаза ЗП не содержит спиновых центров ( $\text{Cu}^{2+}$ ), при  $0 < \Delta < 2(V - J_{eff})$  ЗП разбавляется невзаимодействующими спиновыми центрами, распределенными только в одной подрешетке. При  $\Delta > 2(V - J_{eff})$  имеет место АФМ спиновое упорядочение, которое разбавляется невзаимодействующими зарядовыми центрами ( $\text{Cu}^{1+}$  или  $\text{Cu}^{3+}$ , в зависимости от знака  $n$ ), распределенными только в одной подрешетке. За счет этого формально имеет место ферромагнитное спиновое упорядочение. В пределе сильного обмена, при  $J_{eff} > V$ , реализуются только фазы ЗП, которая не содержит спиновых центров, и однородная АФМ фаза, разбавленная зарядовыми центрами. Граница между этими фазами на фазовой диаграмме определяется выражением  $\Delta = 2(1 - |n|)(V - J_{eff})$ .

Температурные фазовые диаграммы и термодинамические характеристики были исследованы с помощью метода Монте-Карло (МК) [15–18] и в приближении

\*E-mail: kyoutoch@gmail.com

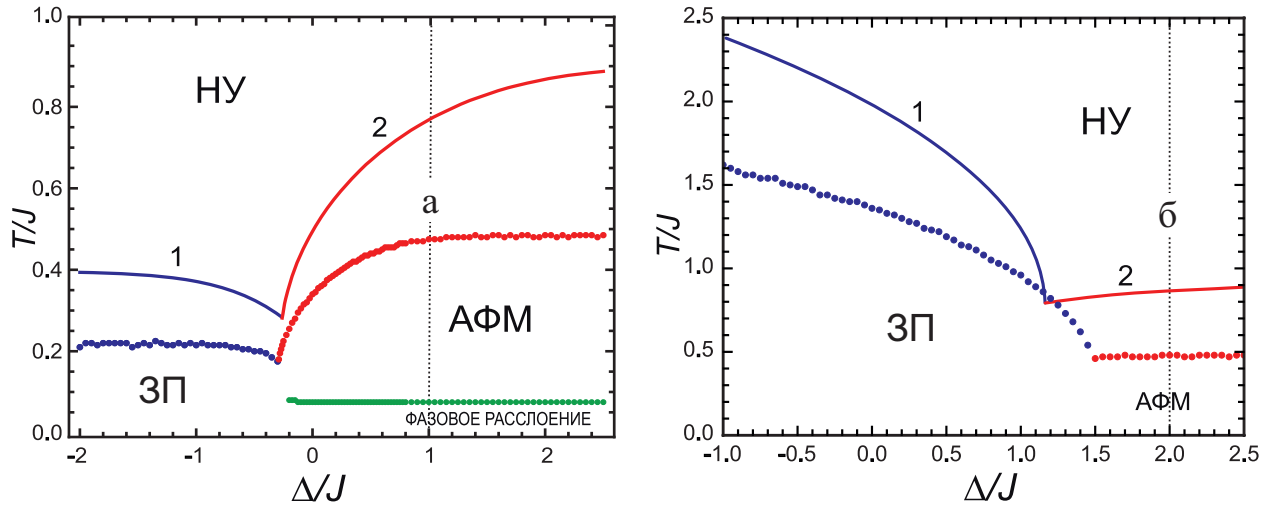


Рис. 1: Температурные фазовые диаграммы спин-псевдоспиновой системы при  $n = 0.1$ . Левая панель: случай сильного обмена,  $V/J = 0.1$ . Правая панель: случай слабого обмена,  $V/J = 1.0$ . Сплошные линии 1 и 2 показывают критическую температуру перехода из неупорядоченной (НУ) фазы в фазу ЗП или АФМ фазу в приближении СП. Точки показывают значение температуры перехода, определенной по максимуму теплоемкости в методе МК. Пунктирные линии  $a$  и  $b$  показывают сечения фазовой диаграммы, выбранные для исследования в настоящей работе

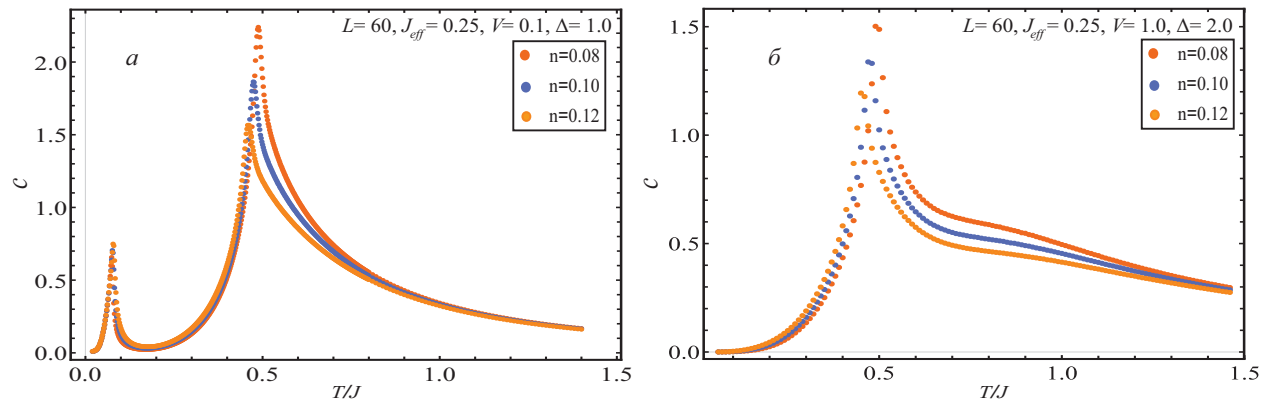


Рис. 2: Зависимости теплоемкости от температуры, полученные методом МК для системы  $60 \times 60$  при  $n = 0.08, 0.1, 0.12$ . Левая панель: случай сильного обмена,  $V/J = 0.1$ ,  $\Delta/J = 1$ . Правая панель: случай слабого обмена,  $V/J = 1.0$ ,  $\Delta/J = 2$

СП [19, 20] (рис. 1). Наиболее яркой особенностью, которую выявляет МК моделирование, является двухпиковая структура температурной зависимости теплоемкости в АФМ фазе при сильном обмене (рис. 2,а). Низкотемпературный пик теплоемкости связан с фазовым расслоением на псевдоспиновую (зарядовую) и магнитную (спиновую) подсистемы, при котором АФМ матрица выталкивает заряженные немагнитные примеси, минимизируя поверхностную энергию. Приближение СП, напротив, предполагает в качестве решения однородное состояние. В настоящей работе мы исследуем термодинамическую устойчивость АФМ фазы для случаев сильного и слабого обмена. Одним из критериев устойчивости термодинамической фазы является положительность коэффициента устойчивости

$$\kappa = \left( \frac{\partial \mu}{\partial n} \right)_T, \quad (2)$$

который мы будем называть сжимаемостью. Мы сравниваем результаты СП для химического потенциала и сжимаемости с результатами численного расчета методом МК.

### 1. МЕТОДИКА РАСЧЕТА

В работах [19, 20] была получена следующая оценка свободной энергии системы в расчете на один узел:

$$f = -\frac{T}{2} \ln Z_c + 2V(n^2 - a^2) + 2J_{eff}(m^2 - l^2) + h_z n + h_a a + g_z m + g_a l. \quad (3)$$

Здесь

$$Z_c = \ln \left[ 4 \left( e^{-\Delta/T} \operatorname{ch} \frac{h_z + h_a}{T} + \operatorname{ch} \frac{g_z + g_a}{T} \right) \times \right. \\ \left. \times \left( e^{-\Delta/T} \operatorname{ch} \frac{h_z - h_a}{T} + \operatorname{ch} \frac{g_z - g_a}{T} \right) \right] \quad (4)$$

— статистическая сумма узла решетки в приближении СП,  $h_z$ ,  $h_a$ ,  $g_z$ ,  $g_a$  — молекулярные поля, которые связаны с плотностью заряда  $n$ , зарядовым параметром порядка  $a$ , спиновыми ферромагнитным и антиферромагнитным параметрами порядка,  $m$  и  $l$ , стандартными соотношениями

$$n = \frac{T}{2} \frac{\partial \ln Z_c}{\partial h_z}, \quad a = \frac{T}{2} \frac{\partial \ln Z_c}{\partial h_a}, \\ m = \frac{T}{2} \frac{\partial \ln Z_c}{\partial g_z}, \quad l = \frac{T}{2} \frac{\partial \ln Z_c}{\partial g_a}. \quad (5)$$

Минимизация  $f$  приводит к системе уравнений для поиска значений параметров порядка при заданных  $T$  и  $n$ :

$$4Va = h_a, \quad 4J_{eff}m = -g_z, \quad 4J_{eff}l = g_a. \quad (6)$$

Эти уравнения необходимо решать совместно с соотношениями (5). Найденные решения определяют значение свободной энергии  $f$  (3) при заданных  $T$  и  $n$  и позволяют найти химический потенциал и сжимаемость по формулам

$$\mu = \left( \frac{\partial f}{\partial n} \right)_T, \quad \kappa = \left( \frac{\partial \mu}{\partial n} \right)_T = \left( \frac{\partial^2 f}{\partial n^2} \right)_T. \quad (7)$$

Результаты для химического потенциала и сжимаемости, полученные в приближении СП, мы сравниваем с результатами численного моделирования этой системы классическим методом МК. Мы использовали алгоритм Метрополиса на плоской квадратной решетке  $60 \times 60$  с периодическими граничными условиями для системы с гамильтонианом (1) без последнего слагаемого, пропорционального химическому потенциалу  $\mu$ , т.к. условие постоянства заряда,  $\sum S_{zi} = const$ , в нашей программе соблюдалось точно: на каждом шаге мы изменяли состояние произвольно выбранной пары узлов решетки  $a$  и  $b$ , требуя сохранения величины  $S_{za} + S_{zb}$ . Мы реализовали высокопроизводительные параллельные вычисления на видеокарте NVIDIA, что позволило нам проводить расчет для 256 копий системы одновременно.

Численное моделирование методом МК позволяет найти среднюю энергию  $e(n, T)$  и теплоемкость  $c(n, T)$  при заданных  $n$  и  $T$  в расчете на один узел:

$$e(n, T) = \frac{\overline{E}(n, T)}{N}, \\ c(n, T) = \frac{1}{NT^2} \left( \overline{E^2}(n, T) - \overline{E}(n, T)^2 \right). \quad (8)$$

Здесь черта означает статистическое усреднение,  $E(n, T)$  — полная энергия системы.

С учетом количества копий системы и числа испытаний, равного  $8 \times 10^5$  для каждого значения температуры, относительная погрешность данных МК не превышает  $\varepsilon = 0.007\%$ .

Для расчета свободной энергии и ее производных по  $n$ , мы вычисляли энтропию системы в расчете на один узел по формуле

$$s(n, T) = s(n, T_0) + \int_{T_0}^T \frac{c(n, T')}{T'} dT', \quad (9)$$

где значение  $T_0/J$  в наших расчетах было равным 0.02. Интегрирование в (9) проводилось методом трапеций. С учетом этого, выражения для расчета химического потенциала и сжимаемости имеют вид:

$$\mu = \frac{\partial e(n, T)}{\partial n} - T \frac{\partial s(n, T)}{\partial n}, \\ \kappa = \frac{\partial^2 e(n, T)}{\partial n^2} - T \frac{\partial^2 s(n, T)}{\partial n^2}. \quad (10)$$

Величину  $s(n, T_0)$  в (9) можно приближенно считать равной энтропии основного состояния,  $Ns_0 = \ln \Gamma_0$ , где  $\Gamma_0$  — статистический вес основного состояния. Для АФМ фазы в случае сильного обмена для системы  $60 \times 60$   $s_0 \approx 0$ . В случае слабого обмена оценка энтропии основного состояния имеет вид

$$s_0 = \frac{1}{N} \ln \left[ C_N^{|n|N} p(|n|) \right]. \quad (11)$$

Здесь  $C_N^{|n|N}$  — биномиальный коэффициент,  $p(|n|)$  — доля конфигураций, соответствующих основному состоянию системы. В пределе  $N \rightarrow \infty$  получаем зависимость

$$s_0(n) = -|n| \ln |n| - (1 - |n|) \ln (1 - |n|). \quad (12)$$

Для расчета  $p(|n|)$  нами была написана программа, которая при заданной величине  $n$  генерировала случайное распределение зарядов соответствующее основному состоянию системы, затем производила случайные перестановки зарядов и подсчитывала долю перестановок, которые не приводили к повышению энергии системы. В результате были получены следующие значения:  $p(0.08) = 0.8870$ ,  $p(0.10) = 0.8666$ ,  $p(0.12) = 0.8468$ .

Дифференцирование в (10) проводилось по трехточечной схеме. Для низких температур можно воспользоваться выражением (12) для энтропии и выражением  $e_0(n) = |n|\Delta - 2J_{eff}(1 - |n|)^2 + 2n^2V$  для энергии [14, 15] при оценке ошибок аппроксимации в формулах (10). Относительная оценка ошибки аппроксимации для  $\mu$  составляет 0.3%, для  $\kappa$  — 0.6%. Значение  $\delta n = 0.02$  для шага дифференцирования по  $n$  было выбрано с целью уменьшения при вычислении второй производной ошибки округления, которая, как известно, пропорциональна  $(\delta n)^{-2}$ . С учетом величины относительной погрешности МК,  $\varepsilon = 0.007\%$ , относительная оценка ошибки округления для  $\mu$  дает 0.2%, а для

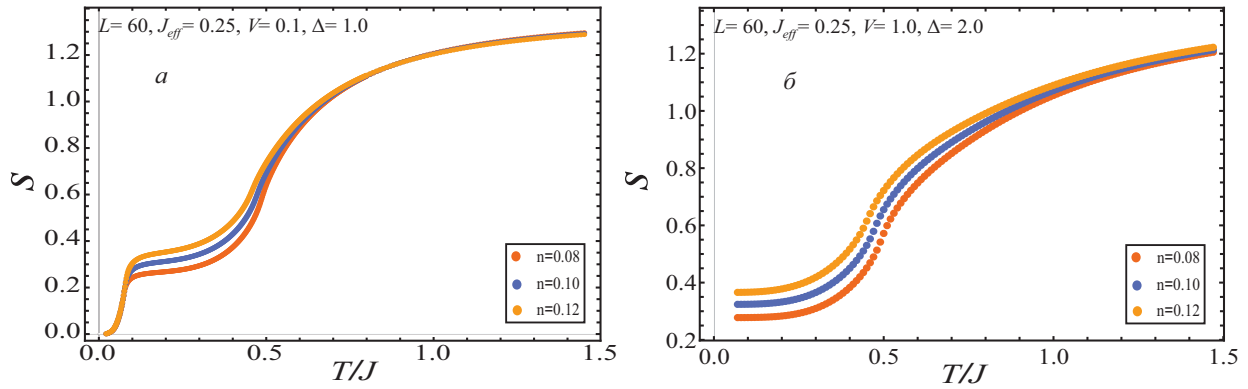


Рис. 3:

Зависимости энтропии от температуры при  $n = 0.08, 0.1, 0.12$ . Левая панель: случай сильного обмена,  $V/J = 0.1, \Delta/J = 1$ . Правая панель: случай слабого обмена,  $V/J = 1.0, \Delta/J = 2$

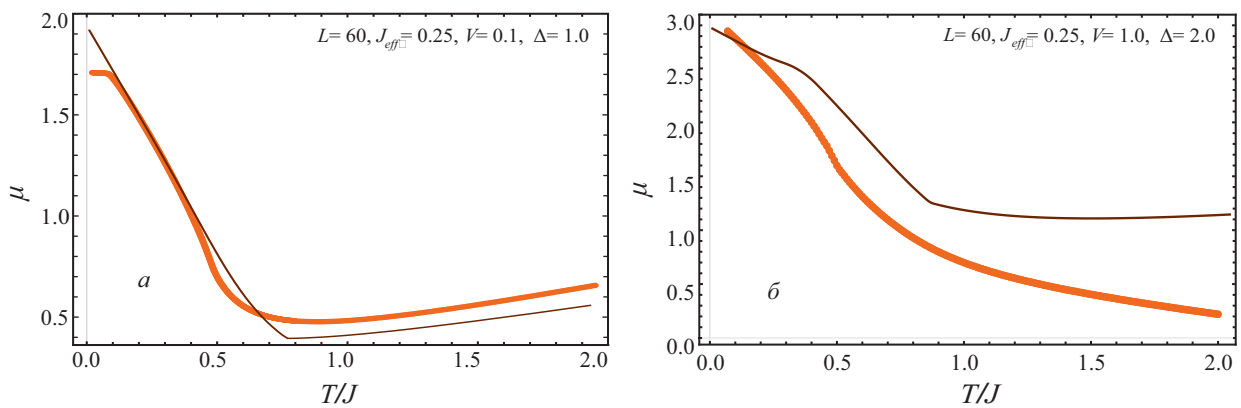


Рис. 4: Зависимости химического потенциала от температуры при  $n = 0.1$ . Левая панель: случай сильного обмена,  $V/J = 0.1, \Delta/J = 1$ . Правая панель: случай слабого обмена,  $V/J = 1.0, \Delta/J = 2$ . Сплошные линии показывают результаты приближения СП, точки показывают результаты метода МК

$\varkappa$  относительная оценка ошибки округления составляет 5%. Поскольку выражения (10) очень чувствительны к значениям  $s(n, T_0)$ , в расчетах мы использовали точное выражение (11) для  $s_0$ . Использование вместо (11) формулы (12) дает для  $\varkappa$  относительную ошибку округления более 100%.

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 3 приведены температурные зависимости энтропии, вычисленные из значений теплоемкости (рис. 2) по формуле (9). В случае слабого обмена (рис. 3,б) была учтена энтропия основного состояния, которую мы вычисляли по формуле (11). Отметим, что при высоких температурах зависимости энтропии для разных  $n$  (в наших расчетах  $n = 0.08, 0.1, 0.12$ ) сближаются как в случае сильного, так и в случае слабого обмена. Это служит косвенным признаком, подтверждающим корректность учета поправок к энтропии при  $T = T_0$  в случае слабого обмена.

Температурные зависимости химического потенциала и сжимаемости при  $n = 0.1$  показаны на рисунках 4 и 5. Сплошные линии соответствуют результатам, полученным с помощью численного решения уравнений СП (5,6). Точками показаны результаты, полученные из данных МК по формулам (9,10). Из приведенных зависимостей видно, что в высокотемпературной области аналитические и численные результаты как для химического потенциала, так и для сжимаемости лучше согласуются в случае сильного обмена, чем в случае слабого обмена. Мы полагаем, что это связано с сильной чувствительностью результатов в случае слабого обмена к учету  $s(n, T_0)$ .

Основной интерес представляет сравнение результатов СП и метода МК в низкотемпературной области. В приближении СП сжимаемость при  $T \rightarrow 0$  становится отрицательной, как в случае сильного, так и в случае слабого обмена (рис. 5). Таким образом, приближение СП предсказывает неустойчивость однородного состояния АФМ фазы, разбавленной подвижными заряженными примесями, при любой силе взаимодействия между примесями. Результаты, получен-

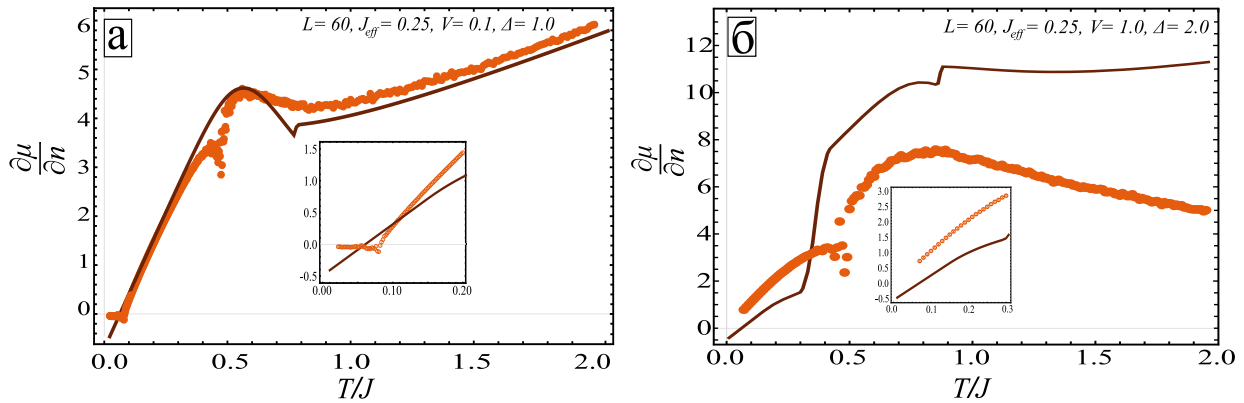


Рис. 5: Зависимости сжимаемости от температуры при  $n = 0.1$ . Левая панель: случай сильного обмена,  $V/J = 0.1$ ,  $\Delta/J = 1$ . Правая панель: случай слабого обмена,  $V/J = 1.0$ ,  $\Delta/J = 2$ . Сплошные линии показывают результаты приближения СП, точки показывают результаты метода МК. На вставках в увеличенном масштабе показана низкотемпературная область

ные методом МК, показывают, что разбавленная АФМ фаза является неустойчивой только в случае сильного обмена: в этом случае сжимаемость обращается в ноль при конечной температуре, а в случае слабого обмена сжимаемость остается положительной при  $T > 0$ . Наш предварительный анализ показывает, что возможная причина качественного несоответствия результатов СП и метода МК в случае слабого обмена состоит в переоценке в рамках СП обращения в ноль коррелятора типа заряд-заряд для ближайших соседей. В приближении СП это воспринимается как зарядовой упорядочение, однако при малых плотностях,  $|n| < 0.3$ , заряженные примеси распределяются по подрешеткам равномерно.

Отметим также заметную разницу в значениях химического потенциала при  $T \rightarrow 0$ , полученных методами СП и МК при сильном обмене (рис. 4,а). Эта разница является следствием фазового расслоения: согласно [15], в приближении СП  $\mu = \Delta + J + 4(V - J_{eff})n = 1.94$ , тогда как с учетом фазового расслоения получается значение,  $\mu = (1 - |n|)(\Delta + J) = 1.8$ , более близкое к результатам МК. При слабом обмене значение  $\mu = \Delta + J = 3.0$ , полученное в приближении СП при  $T \rightarrow 0$ , хорошо согласуется с результатами МК (рис. 4,б).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой работе мы рассмотрели термодинамическую устойчивость АФМ фазы двумерной спин-

псевдоспиновой системы для случаев сильного и слабого обмена. Мы получили значения коэффициента устойчивости, сжимаемости, используя численные решения уравнений среднего поля и с помощью моделирования методом Монте-Карло. Мы показали, что приближение среднего поля предсказывает неустойчивость однородного состояния АФМ фазы, разбавленной подвижными заряженными примесями, при любой силе взаимодействия между примесями: сжимаемость системы при  $T \rightarrow 0$  становится отрицательной. Численное моделирование показывает, что АФМ фаза неустойчива только в случае сильного обмена, а при слабом обмене сжимаемость системы при  $T \rightarrow 0$  остается положительной.

## Благодарности

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.

- [1] Abbamonte P., Ruydi A., Smadici S., Gu G. D., Sawatzky G. A., Feng D. L.// Nature Physics. 2005. **1**. P. 155.  
 [2] Berg E., Fradkin E., Kivelson S.A., Tranquada J.M.// New J. of Physics. 2009. **11**. P. 115004.

- [3] Fradkin E., Kivelson S.A.// Nature Physics. 2012. **8**. P. 864.  
 [4] Drachuck G., Razzoli E., Bazalitski G., Kanigel A., Niedermayer C., Shi M., Keren A.// Nature Commun. 2014. **5**. P. 3390.

- [5] *Cyr-Choinière O., Grissonnanche G., Badoux S., Day J., Bonn D. A., Hardy W. N., Liang R., Doiron-Leyraud N., Taillefer L.*// Phys. Rev. B. 2015. **92**. P. 224502.
- [6] *Panov Yu. D., Moskvina A. S., Chikov A. A., Avvakumov I. L.*// Phys. Procedia. 2015. **75**. P. 332.
- [7] *Panov Yu. D., Moskvina A. S., Chikov A. A., Avvakumov I. L.*// J. of Low Temperature Physics. 2016. **185**. P. 409.
- [8] *Moskvina A. S.*// Journal of Physics: Condensed Matter. 2013. **25**. P. 085601.
- [9] *Moskvina A. S.*// Phys. Rev. B. 2011. **84**. P. 075116.
- [10] *Blume M.*// Phys. Rev. 1966. **141**. P. 517.
- [11] *Capel H. W.*// Physica. 1966. **32**. P. 966.
- [12] *Blume M., Emery V. J., Griffiths R. B.*// Phys. Rev. A. 1971. **4**. P. 1071.
- [13] *Cannas S. A., Stariolo D. A.*// Phys. Rev. E. **99**. 2019. P. 042137.
- [14] *Panov Yu. D., Moskvina A. S., Chikov A. A., Avvakumov I. L.*// J. of Superconductivity and Novel Magnetism. 2016. **29**. P. 1077.
- [15] *Panov Yu. D., Moskvina A. S., Chikov A. A., Budrin K. S.*// J. of Low Temperature Physics. 2017. **187**. P. 646.
- [16] *Panov Yu. D., Budrin K. S., Chikov A. A., Moskvina A. S.*// Письма в ЖЭТФ. 2017. **106**. P. 424.
- [17] *Chikov A., Panov Y., Moskvina A., Budrin K.*// Acta Physica Polonica A. 2018. **133**. P. 432.
- [18] *Budrin K. S., Panov Y. D., Moskvina A. S., Chikov A. A.*// EPJ Web of Conferences. 2018. **185**. P. 11006.
- [19] *Panov Y. D., Ulitko V. A., Budrin K. S., Chikov A. A., Moskvina A. S.*// J. Magn. Magn. Mater. 2019. **477**. P. 162.
- [20] *Панов Ю. Д., Улитко В. А., Будрин К. С., Ясинская Д. Н., Чиков А. А.*// ФТТ. 2019. **61**. P. 822.

## Features of phase separation in the spin-pseudospin model

H. Benseghier<sup>a</sup>, Yu. D. Panov<sup>b</sup>

Ural Federal University, Institute of Natural Sciences and Mathematics  
Ekaterinburg 620075, Russia

E-mail: <sup>a</sup>kyoutoch@gmail.com, <sup>b</sup>yuri.panov@urfu.ru

Reviewed model spin-pseudospin, which simulate the plane CuO<sub>2</sub> in cuprates and take into consideration spin exchange and charge correlations on the site and between sites. Model spin-pseudospin allows us to study the competition of charge and magnetic ordering on plane CuO<sub>2</sub> in cuprate. In this paper, we evaluated the effect of this competition exploring the stability of the thermodynamic system for reasonable parameters of the model. For this study, we calculated such values as we call it the compressibility of our system and chemical potential, then we compared results of a numerical calculation using classical method Monte-Carlo with analytical results within the mean-field approximation.

PACS: 74.72.-h, 75.90.+w, 64.75.+g, 05.10.Ln

Keywords: cuprates, magnetic and charge order, spin-pseudospin model, Monte-Carlo method.

Received 21 June 2019.

### Сведения об авторах

1. Бенсегьер Хусейн — бакалавр; e-mail: kyoutoch@gmail.com.
2. Панов Юрий Демьявич — канд. физ.-мат. наук, доцент; e-mail: yuri.panov@urfu.ru.