Письма в ЖЭТФ, том 122, вып. 6, с. 374 – 378

Исследование квантовой спиновой модели с учетом фазовых переходов волн спиновой плотности и сверхпроводящей фазы

В. Н. Бородихин[1], *П. Н. Маляренко, В. В. Хитринцева*

Омский государственный университет, 644077 Омск, Россия

Поступила в редакцию 4 августа 2025 г.
После переработки 22 августа 2025 г.
Принята к публикации 22 августа 2025 г.

Рассматривалась двумерная модель антиферромагнитых систем вблизи фазовых переходов волн спиновой плотности. Данная модель также учитывает сверхпроводящую фазу. Особое внимание было уделено исследованию влияния нелинейных эффектов, в частности, константы взаимодействия флуктуаций параметра порядка, на возникающие в системе фазовые переходы.

DOI: 10.31857/S0370274X25090201, EDN: CFAMNW

1. Введение. Проблема антиферромагнитной квантовой критической точки в металлах, не смотря на усилия многих исследователей в последние несколько десятилетий [1–7], по-прежнему остается открытой. Большинство теоретических подходов содержат феноменологические приближения, обоснованность которых не всегда очевидна. И таким образом, даже основные общие характеристики металлических антиферромагнитных квантовых критических точек требуют обсуждения.

Квантовые фазовые переходы спиновой плотности (SDW) проявляются в сильно коррелированных материалах, таких как электронно-легированные купраты [8], сверхпроводники на основе Fe [9], системы с тяжелыми фермионами [10]. Обнаружено, что в данных системах вблизи SDW фазы возникает также сверхпроводящее состояние. Кроме того, окрестности SDW перехода характеризуются сильными отклонениями от теории ферми-жидкости. В данных системах критические флуктуации параметра порядка сильно взаимодействуют с низкоэнергетическими фермионными квазичастицами вблизи поверхности Ферми. Традиционные пертурбативные подходы оказываются недостаточными, в частности, из-за возникающих неаналитических параметров и ряда других проблем [1, 2]. Таким образом, корректное описание систем с коллективизированными электронами остается одной из важнейших задач в физике сильно коррелированных электронов.

Важную роль для описания таких систем играет компьютерное моделирование, в частности квантовые алгоритмы Монте-Карло [11, 12]. В работах [13, 14] рассматривалась двумерная модель антиферромагнитных систем вблизи SDW перехода. Данная модель также учитывает сверхпроводящую фазу. Кроме двух фермионных ароматов, модель включает бозонный параметр порядка.

В данной работе проводилось исследование вышеупомянутой модели с использованием алгоритма детерминантного квантового моделирования Монте-Карло DQMC, в котором отсутствует так называемая проблема со знаком [15]. Особое внимание было уделено исследованию влияния нелинейных эффектов, в частности, константы взаимодействия флуктуаций параметра порядка на возникающие в системе фазовые переходы типа Березинского–Костерлица–Таулеса (БКТ).

2. Модель. Модель включает два фермионных аромата полуцелого спина ψ_x, ψ_y, которые связаны с действительным бозонным векторным полем $\boldsymbol{\varphi}$, которое представляет собой флуктуации параметра порядка волн спиновой плотности SDW при значениях волнового вектора $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Данный параметр SDW порядка имеет характер поведения типа легкая плоскость и ограничен положением в плоскости XY. Каждый аромат – это независимая мода модуляции спиновой плотности электронов в пространстве. Два типа фермионов демонстрируют квазиодномерную дисперсию вдоль импульсов k_x и k_y соответственно, что при отсутствии взаимодействий приводит к образованию поверхностей Ферми, как показано на рис. 1. Присутствие двухароматовой структуры позволяет решить проблему знака фермиона в квантовом алгоритме Монте-Карло [15]. Предполагается $O(2)$ симметрия SDW параметра порядка $\boldsymbol{\varphi}$. Как было показано [13], в случае $O(2)$ симметрии параметра порядка наблюдается конечно-температурный SDW фазовый переход (БКТ).

[1]e-mail: borodikhin@inbox.ru

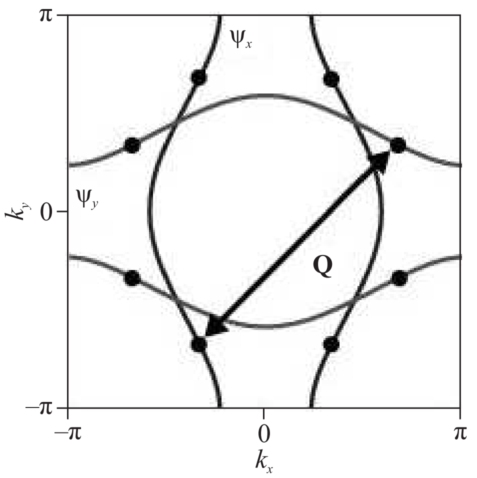

Рис. 1. Невзаимодействующие поверхности Ферми фермионов ψ_x и ψ_y. Обозначенные точки связаны вектором $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ с точками на другой моде

Исходная модель задается действием $S = \int_0^\beta d\tau (L_F + L_\varphi)$, где лагранжианы фермионов и бозонов определяются как:

$$L_F = \sum_{i,j,s;\alpha=x,y} \psi^\dagger_{i\alpha s}[(\partial_\tau - \mu)\delta_{ij} - t_{\alpha ij}]\psi_{j\alpha s} + \\ + \lambda \sum_{i,s,s'} [\mathbf{s}\boldsymbol{\varphi}_i]_{ss'} \psi^\dagger_{ixs}\psi_{iys'} + \text{H.c.}, \quad (1)$$

$$L_\varphi = \frac{1}{2c^2}\sum_i \Big(\frac{d\boldsymbol{\varphi}_i}{d\tau}\Big)^2 + \frac{1}{2}\sum_{<i,j>} (e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i}\boldsymbol{\varphi}_i - e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j}\boldsymbol{\varphi}_j)^2 + \\ + \sum_i \Big[\frac{r}{2}\boldsymbol{\varphi}_i^2 + \frac{u}{4}(\boldsymbol{\varphi}_i^2)^2\Big]. \quad (2)$$

Действие определено на квадратной решетке с узлами $i, j = 1, .., N_s$, где $<i, j>$ – ближайшие соседние узлы, а $N_s = L^2$ – общее количество узлов в решетке, L – линейный размер системы. Фермионые ароматы определяются $\alpha = x, y$; индексы s, s' задают направление поляризации спинов “вверх” и “вниз”; $\mathbf{s}$ – матрицы Паули. Здесь τ – мнимое время, $\beta = 1/T$ – обратная температура. Температура T измеряется в единицах обменного интеграла. Амплитуды прыжков для фермионов ψ_x задаются $t_{x,h} = 1$, $t_{x,v} = 0.5$, соответственно для ψ_y – $t_{y,h} = 0.5$, $t_{y,v} = 1$. Данная модель является C_4 симметричной с $\pi/2$ отображением вращения полосы ψ_x на ψ_y и наоборот. Химический потенциал задан $\mu = -0.5$. Значения констант затравочной скорости бозонов $c = 2$ и параметра связи Юкавы между фермионами и бозонами $\lambda = 3$. Параметр r в реальных системах может соответствовать давлению или легированию. Коэффициент u связан со спиновой жесткостью или сверхтекучей жесткостью. Влияние константы связи u на фазовые переходы практически не исследовано и является одним из основных объектов исследований в данной статье.

Как показали экспериментальные исследования [16–18], зависимость от данных параметров обычно имеет вид колоколообразной функции. В качестве конкретных примеров – квантовых фазовых переходов в сверхпроводящую фазу в антиферромагнетиках в зависимости от параметра легирования можно привести $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ [19] или электроннолегированный $PrFeAsO_{1-x}F_x$, $0 \le x \le 0.225$ [16], а в зависимости от давления LaOFeAs, $Na_{1-x}FeAs$ и ряд других [16]. Данная модель применима для описания этих и других подобных веществ, связанных с высокотемпературной сверхпроводимостью, по ряду причин. Модель учитывает сильные электронные корреляции через кулоновское отталкивание в узлах. В слоях данных веществ электроны на d-орбиталях взаимодействуют, создавая электронные корреляции, что важно, поскольку антиферромагнитные свойства данных материалов влияют на сверхпроводимость. В частности, при допировании происходит формирование дырок, которые взаимодействуют со спиновыми флуктуациями. Данная модель описывает такие взаимодействия, особенно в квазидвумерных системах. Как известно, спиновые флуктуации играют ключевую роль в формировании куперовских пар в рассматриваемых соединениях, что подтверждается экспериментами. Важно также отметить, что данная модель позволяет воспроизводить экспериментальные зависимости, например, куполообразную форму критической температуры от легирования или давления. Для квазидвумерных систем (где флуктуации особенно сильны согласно теореме Мермина–Вагнера [20]) с ростом давления или легирования увеличивается константа обменного взаимодействия. С увеличением данной константы усиливаются квантовые флуктуации спинов, что разрушает дальний SDW порядок. Одновременно сильное обменное взаимодействие способствует спариванию электронов за счет спиновых флуктуаций, что и приводит к возникновению сверхпроводящей (SC) фазы вещества. Этот переход является примером сложной конкуренции между различными спиновыми состояниями в сильно коррелированных системах.

Моделирование осуществлялось с помощью квантового алгоритма Монте-Карло с устраненной проблемой знака амплитуд (DQMC). Детали алгоритма рассмотрены в [13]. Часть моделирования проводилась в присутствии слабого фиктивного "магнитного" поля, не нарушающего симметрию обращения времени, присутствие которого позволяет значительно ускорить сходимость к термодинамическому пределу для металлических систем [21]. В термодинамическом пределе модель, описываемая (1), (2), не может показывать магнитный дальний порядок ни при каких $T > 0$, как следует из теоремы Мермина–Вагнера [20]. Определим локальную плотность спиновой намагниченности, связанной с усреднением операторов спинов $\boldsymbol{\varphi}_i$

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{\beta}\int_0^\beta d\tau \boldsymbol{\varphi}_i(\tau), \tag{3}$$

а также плотность намагниченности $\mathbf{m} = \frac{1}{L^2}\sum_i \mathbf{m}_i$. В даннном случае в термодинамическом пределе $\mathbf{m}$ будет стремиться к нулю даже ниже температуры перехода T_{SDW}, где только для конечных систем будет существовать квазидальний порядок с $<\mathbf{m}> \neq 0$.

Пространственная корреляционная функция локальной намагниченности имеет вид:

$$<\mathbf{m}_i\mathbf{m}_{i+x}> = \begin{cases} e^{-|x|/\xi}, & T > T_{SDW}, \\ |x|^{-\eta(T)}, & T \leq T_{SDW}, \end{cases} \tag{4}$$

где ξ – корреляционная длина, η – критический показатель, причем $\eta(T_{SDW}) = 1/4$. Также определим спиновую восприимчивость в фазе SDW:

$$\chi = \int_0^\beta d\tau \sum_i <\boldsymbol{\varphi}_i(\tau)\boldsymbol{\varphi}_0(0)> = \beta L^2 <\mathbf{m}^2>. \tag{5}$$

Скейлинговое конечно-размерное поведение (из (4)) имеет вид:

$$\chi \sim L^{2-\eta}, \tag{6}$$

и таким образом, при $\eta_c = 1/4$ можно определить критические точки на фазовой диаграмме (r, T). Кроме SDW фазы, в системе также возникает сверхпроводящее (SC) состояние. В соответствующей калибровке линейный отклик системы на статическое орбитальное магнитное поле $B(\boldsymbol{q})$ определяется выражением:

$$j_x(q) = -4K_{xx}(\mathbf{q})A_x(\mathbf{q}), \tag{7}$$

где $A_x(\mathbf{q}) = iB(\mathbf{q})/q_y$ – векторный потенциал,

$$K_{xx} = \frac{1}{4}[\Lambda_{xx}(q_x \to 0, q_y = 0) - \Lambda_{xx}(\mathbf{q})], \tag{8}$$

$$\Lambda_{xx}(\mathbf{q}) = \sum_i \int_0^\beta d\tau e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} <j_x(\mathbf{r}_i,\tau)j_x(0,0)> \tag{9}$$

– коррелятор ток–ток. Оператор плотности тока определяется как

$$j_x(\mathbf{r}_i) = \sum_{\alpha,s} it_{\alpha is}\psi^\dagger_{\alpha is}\psi_{\alpha js} + \text{H.c.}, \tag{10}$$

где $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j + \hat{x}$. Введем понятие плотности сверхтекучей жидкости [22]

$$\rho_s = \lim_{q_y\to 0}\lim_{L\to\infty} K_{xx}(q_x \to 0, q_y). \tag{11}$$

Обозначим $\rho_s(L) = K_{xx}(q_x = 0, q_y = 2\pi/L)$, соответственно в пределе $L \to \infty$ данное выражение перейдет в (11). При переходе БКТ плотность сверхтекучей жидкости изменяется скачком на универсальную величину $\Delta\rho_s = 2T/\pi$. SC-переход идентифицируется как точка, в которой плотность сверхтекучей жидкости достигает универсального значения БКТ $\rho_s = 2T/\pi$. При анализе сверхтекучей плотности не используется концепция сверхпроводящего параметра порядка. Для определения симметрии сверхпроводящего параметра порядка рассмотрим равномерную восприимчивость $P(\mathbf{q} = 0)$, где

$$P(\mathbf{q}) = \int d\tau <\Delta^+_\eta(\mathbf{q},\tau)\Delta_\eta(\mathbf{q},0)>, \tag{12}$$

$\Delta_\eta(\mathbf{r}_i) = 2(\psi^+_{xi\uparrow}\psi^+_{xi\downarrow} + \eta\psi^+_{yi\uparrow}\psi^+_{yi\downarrow})$, где $\eta = \pm 1$. $P_-(\mathbf{q} = 0)$ имеет d-волновой характер, $P_+(\mathbf{q} = 0)$ имеет s-волновой характер. Восприимчивость $P_+(\mathbf{q} = 0)$ слабо зависит от размеров системы L. Вблизи БКТ перехода восприимчивость $P_-(\mathbf{q} = 0)$ имеет аналогичное вышеописанному скейлинговое конечно-размерное поведение $\sim L^{2-\eta}$, где $\eta = 0.25$ при T_c.

3. Результаты. При расчетах использовались линейные размеры $L = 6, 8, 10, 12, 14$. Рассмотрим влияние параметра константы связи u на характеристики системы. На рисунках 2 и 3 показана фазовая диаграмма при $u = 2$ и $u = 3$. Диаграмма для $u = 1$ приведена в [13]. Из данных рисунков видно, что с ростом u наблюдается смещение как SDW, так и SC фазы в сторону уменьшения параметра r. С ростом u объем сверхпроводящей фазы заметно уменьшается. Кроме этого, смешанная фаза, в которой одновременно проявляются признаки как SDW, так и SC фазы, заметная при $u = 1$, для $u = 2$ почти незаметна, а для $u = 3$ исчезает совсем.

На рисунке 4 показана трехмерная диаграмма SDW фазы без учета сверхпроводимости в координатах (r, T, u). Видно, что с ростом u фаза практически линейно смещается в сторону уменьшения параметра r.

На рисунке 5 отдельно показана область сверхпроводящей фазы при различных значениях пара-

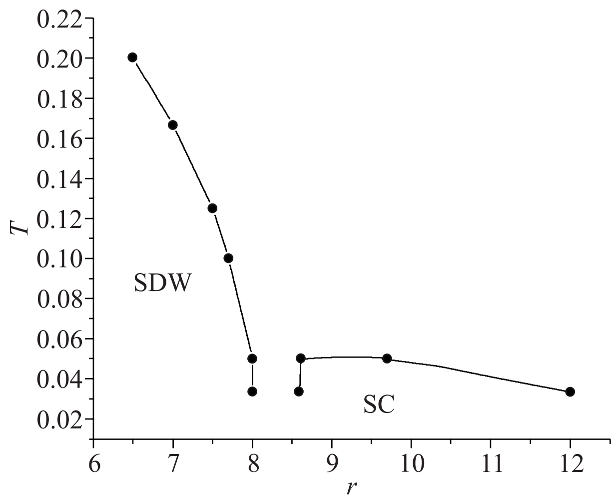

Рис. 2. Фазовая диаграмма модели, описываемой формулами (1), (2). Отражена зависимость температуры T от физического параметра настройки r. Показывает области существования SDW порядка и SC порядка при значении коэффициента $u = 2$

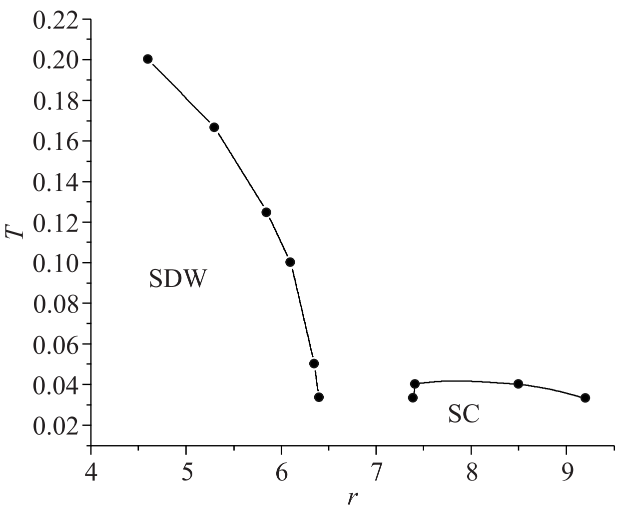

Рис. 3. Фазовая диаграмма (r, T), показывающая области существования SDW порядка и SC порядка при значении коэффициента $u = 3$

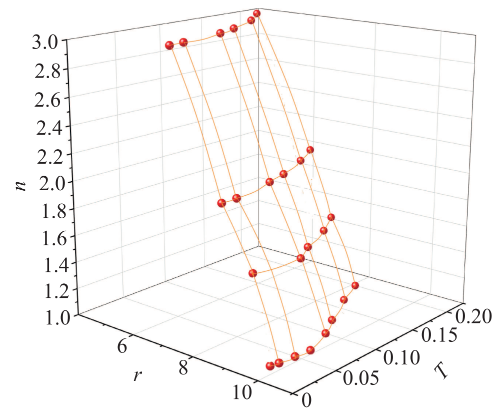

Рис. 4. (Цветной онлайн) Трехмерная фазовая диаграмма (r, T, u) SDW фазы с учетом изменения параметра u

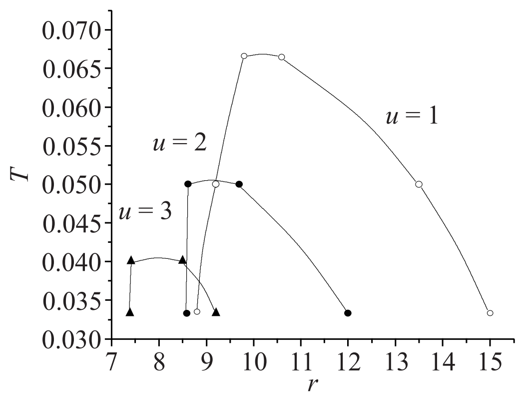

Рис. 5. Диаграмма (r, T) сверхпроводящей фазы (SC) для различных значений параметра $u = 1, 2, 3$

метра u. Видно, что с ростом параметра u наблюдается сдвиг фазовой диаграммы в сторону уменьшения параметра r, а также уменьшение объема соответствующей фазы.

Из рисунков 2, 3, а также с учетом диаграммы для $u = 1$ [13] видно, что с ростом параметра u спиновой жесткости увеличивается металлическая промежуточная область между фазами SDW и SC. В то же время в случае $u = 1$ данные области перекрываются, образуя смешанную фазу.

По результатам данных изменения SDW фазы в зависимости от параметра u, показанных на рис. 4, можно построить аппроксимационные зависимости. Линейную зависимость можно представить в виде:

$$u(r, T) = u_1(T) + u_2(T)r, \tag{13}$$

коэффициенты u_1 и u_2 с погрешностями для различных T приведены в табл. 1.

Таблица 1. Коэффициенты и погрешности линейной зависимости параметра $u(r, T)$ для различных температур

T	u_1	Δu_1	u_2	Δu_2
0.05	6.71	0.49	-0.593	0.059
0.1	6.53	0.14	-0.582	0.017
0.125	6.6	0.029	-0.615	0.004
0.1667	6.3	0.13	-0.6195	0.018

По данным значениям также можно провести аппроксимацию. В итоге получим выражения: $u_1(T) = 6.89 - 3.16T$, $u_2(T) = -0.57 - 0.27T$. Тогда:

$$u = 6.89 - 3.16T - 0.57r - 0.27rT. \quad (14)$$

Для аппроксимации зависимости критической температуры SDW перехода от параметров r и u получим выражение:

$$T_c = \frac{6.89 - 0.57r - u}{3.16 + 0.27r}. \quad (15)$$

Данная зависимость совпадает с зависимостью параметров, показанной на рис. 4, и соответствует поведению реальных систем на заданном отрезке параметров.

4. Заключение. В работе рассматривалась двумерная модель антиферромагнитных систем вблизи SDW перехода с учетом сверхпроводящей фазы. Данная модель содержит два фермионных аромата, что позволяет исключить так называемую проблему со знаком в квантовом алгоритме Монте-Карло. Исследовалось влияние нелинейных эффектов, в частности константы взаимодействия флуктуаций параметра порядка, на возникающие в системе фазовые переходы типа БКТ.

Построены диаграммы состояния вещества с учетом SDW и сверхпроводящей фазы в зависимости от величины константы взаимодействия флуктуаций параметра порядка u. Из рисунков 2, 3, 5 видно, что с ростом u наблюдается смещение как SDW, так и SC фазы в сторону уменьшения параметра r, а также объем сверхпроводящей фазы заметно уменьшается. Кроме этого, смешанная фаза, в которой одновременно проявляются признаки как SDW, так и SC фазы, заметная при $u = 1$, для $u = 2$ почти незаметна, а для $u = 3$ исчезает совсем. Из трехмерной диаграммы SDW-фазы в координатах (r, T, u) видно, что с ростом u фаза практически линейно смещается в сторону уменьшения параметра r. Из приведенных рис. 2, 3 для случая $u = 2$, $u = 3$, а также с учетом диаграммы для $u = 1$ [13], видно, что с ростом параметра u увеличивается металлическая промежуточная область между фазами SDW и SC. В случае $u = 1$ данные области перекрываются, образуя смешанную фазу. Данные изменения SDW фазы в зависимости от параметра u с малой погрешностью аппроксимируются линейными функциями.

Таким образом, параметр взаимодействия флуктуаций или спиновой жесткости оказывает существенное влияние как на SC, так и на SDW фазы вещества. Чем меньше значение данного параметра, тем большего значения может достигать критическая температура SC фазы. При этом с ростом спиновой жесткости SC фаза может проявляться при меньших значениях параметра, связанного с давлением или легированием. Такое же влияние спиновая жесткость оказывает на SDW фазу.

Финансирование работы. Исследование выполнено за счет регионального гранта Российского научного фонда (проект # 25-22-20016) 50 % финансирования, и 50 % финансирования Правительства Омской области.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. J. A. Hertz, Phys. Rev. B **14**, 1165 (1976).
2. A. J. Millis, Phys. Rev. B **48**, 7183 (1993).
3. A. Abanov and A. Chubukov, Phys. Rev. Lett. **84**, 5608 (2000).
4. H. V. Lohneysen, A. Rosch, M. Vojta, and P. Wolfle, Rev. Mod. Phys. **79**, 1015 (2007).
5. M. Varma, L. Zhu, and A. Schröder, Phys. Rev. B **92**, 155150 (2015).
6. P. Lunts, M. S. Albergo, and M. Lindsey, Nat. Commun. **14**, 2547 (2023).
7. F. Borges, A. Borissov, A. Singh, A. Schlief, and S. S. Lee, Ann. Phys. **450**, 169221 (2023).
8. N. P. Armitage, P. Fournier, and R. L. Greene, Rev. Mod. Phys. **82**, 2421 (2010).
9. J. Paglione and R. L. Greene, Nat. Phys. **6**, 645 (2010).
10. P. Gegenwart, Q. Si, and F. Steglich, Nat. Phys. **4**, 186 (2008).
11. F. Assaad and H. Evertz, F. Assaad, and H. Evertz, *World-line and determinantal quantum Monte Carlo methods for spins, phonons and electrons*, in *Computational Many-Particle Physics*, ed. by H. Fehske, R. Schneider, and A. Weiße, Lecture Notes in Physics, Springer, Berlin, (2008), v. 739, p. 277.
12. J. Gubernatis, N. Kawashima, and P. Werner, *Quantum Monte Carlo Methods: Algorithms for Lattice Models*, Cambridge University Press, Cambridge, UK (2016).
13. Y. Schattner, M. H. Gerlach, S. Trebst, and E. Berg, Phys. Rev. Lett. **117**, 097002 (2016).
14. M. H. Gerlach, Y. Schattner, E. Berg, and S. Trebst, Phys. Rev. B **95**, 035124 (2017).
15. E. Berg, M. A. Metlitski, and S. Sachdev, Science **338**, 1606 (2012).
16. G. R. Stewart, Rev. Mod. Phys. **83**, 1589 (2011).
17. P. J. Hirschfeld, M. M. Korshunov, and I. I. Mazin, Rep. Prog. Phys. **74**, 124508 (2011).
18. M. R. Norman, D. Pines, and C. Kallin, Adv. Phys. **54**, 715 (2005).
19. K. Hashimoto, K. Cho, T. Shibauchi et al. (Collaboration), Science **336**, 1554 (2012).
20. N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
21. F. F. Assaad, Phys. Rev. B **65**, 115104 (2002).
22. D. J. Scalapino, S. R. White, and S. Zhang, Phys. Rev. B **47**, 7995 (1993).