

Неоднородные электронные состояния в системах с неидеальным нестинггом листов поверхности Ферми

К.И. Кугель, А.Л. Рахманов,
А.В. Рожков, А.О. Сбойчаков

*Институт теоретической и прикладной
электродинамики РАН, Москва*

М.Ю. Каган

*Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН,
Москва*

План доклада

- ❖ Введение
- ❖ Модель Райса. Фазовое расслоение в сплавах хрома
- ❖ Влияние магнитного поля на фазовое расслоение
- ❖ Фазовое расслоение в сверхпроводящих пниктидах
- ❖ Фазовое расслоение в двухслойном AA графене
- ❖ Влияние давления на фазовое расслоение
- ❖ Выводы

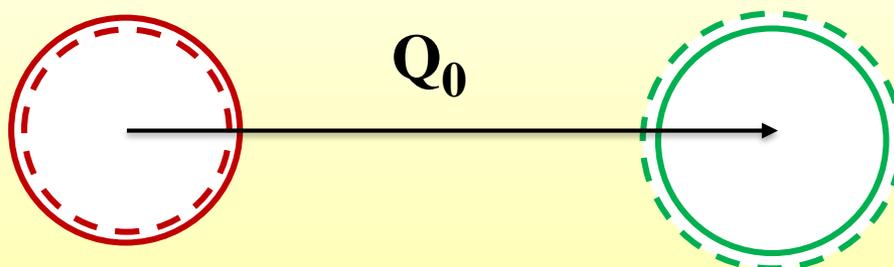
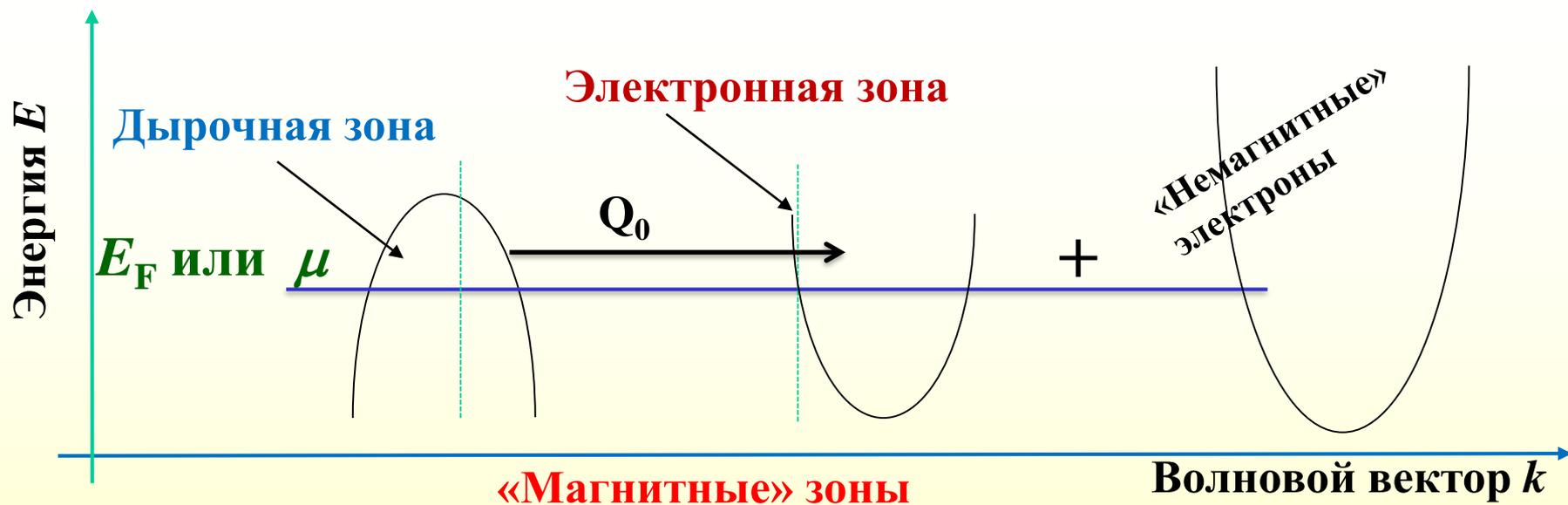
Введение

Среди многозонных материалов с тенденцией к электронному фазовому расслоению существует важное семейство систем с нестингом поверхности Ферми. Нестинг – очень популярная концепция в физике конденсированного состояния. Существование двух фрагментов поверхности Ферми, которые могут быть совмещены при переносе на некоторый вектор обратной решётки (Q_0), влечёт за собой неустойчивость ферми-жидкостного состояния, которая приводит к возникновению дополнительного параметра порядка. Понятие нестинга широко используется для анализа волн зарядовой плотности (ВЗП), волн спиновой плотности (ВСП), механизмов высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП), антиферромагнетизма (АФМ) хрома и его сплавов и т.д. Важно отметить, что нестинг может быть неидеальным, то есть, участки поверхности Ферми могут быть совмещены при переносе на вектор Q_0 только приблизительно.

Введение (продолжение)

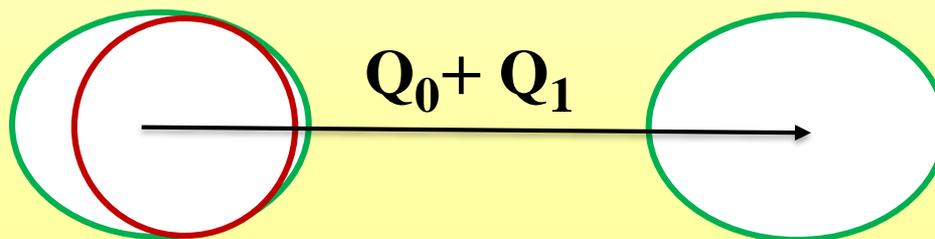
Недавно было показано, что неидеальный нестинг может приводить к фазовому расслоению в хроме и его сплавах, железосодержащих ВТСП и в двухслойном графене. Отметим также, что спиновые и зарядовые неоднородности, связанные с неидеальным нестингом, активно изучаются в низкоразмерных соединениях. Физическая причина возникновения неоднородного состояния в системах с нестингом состоит в следующем. Неустойчивость электронного спектра, связанная с нестингом, порождает новый параметр порядка. Соответственно, свободная энергия системы уменьшается. Чем совершеннее нестинг, тем больше выигрыш в свободной энергии. Тогда может быть выгодно, чтобы система распалась на две фазы с лучшим и худшим (или даже отсутствующим) нестингом, которые будут отличаться плотностью электронов.

Постановка задачи. Неидеальный нестинг



Ферми-поверхность
дырочной зоны

Ферми-поверхность
электронной зоны

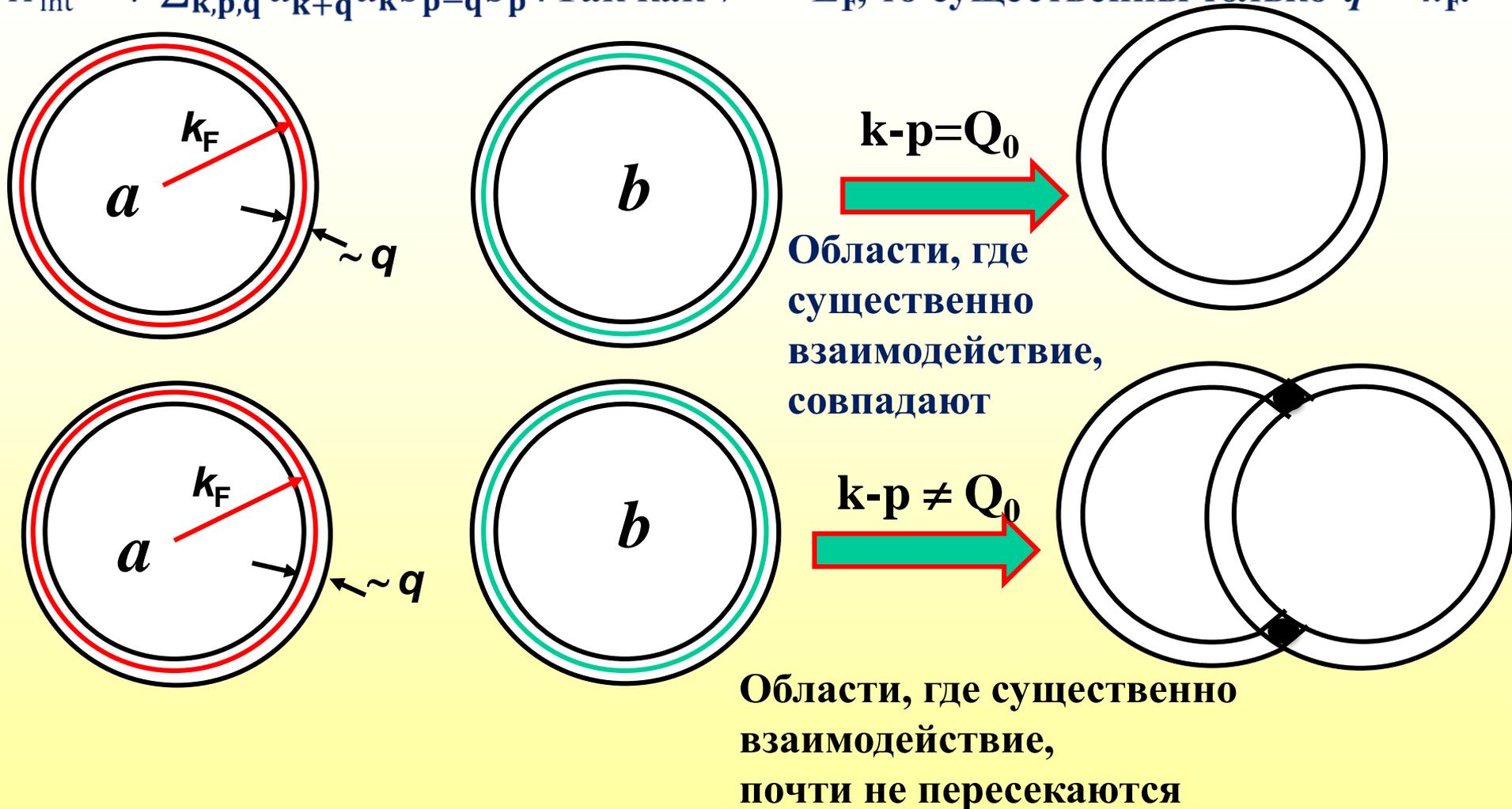


Новый масштаб $1/Q_1$
«Несоизмеримый АФМ»,
Состояние Фульде-Феррела-Ларкина-Овчинникова

Почему интересен нестинг?

Пусть у нас есть слабое взаимодействие между электронами $V \ll E_F$:

$H_{\text{int}} = V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{p}}$. Так как $V \ll E_F$, то существенны только $q \ll k_F$.



Следовательно, нестинг эффективно усиливает слабое взаимодействие.

Гамильтониан модели

T.M.Rice, PRB 2, 3619(1970)

$$\hat{H} = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \sigma \\ \alpha=a,b,c}} \epsilon^\alpha(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}\sigma}^\alpha + \frac{V}{\mathcal{V}} \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q} \\ \sigma\sigma'}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} b_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger b_{\mathbf{k}'\sigma'}$$

Мы работаем в приближении слабой связи

$$VN_m \ll 1, N_m = k_F^2/2p^2v_F, V > 0$$

поэтому можем воспользоваться обычным подходом БКШ

Преобразование $b_{\mathbf{k}} \rightarrow b_{\mathbf{k}}^\dagger, b_{\mathbf{k}}^\dagger \rightarrow b_{\mathbf{k}}$ меняет знак V

и мы фактически получаем две копии гамильтониана БКШ

Законы дисперсии для электронной и дырочной зон

$$\begin{aligned} \epsilon^a(\mathbf{k}) &= v_F(k - k_{Fa}) = v_F(k - k_F) - \mu, \\ \epsilon^b(\mathbf{k} + \mathbf{Q}_0) &= -v_F(k - k_{Fb}) = -v_F(k - k_F) - \mu, \end{aligned}$$

$$k_F = (k_{Fa} + k_{Fb})/2, \quad \mu = v_F(k_{Fa} - k_{Fb})/2$$

Параметры порядка

$\mu = 0$

AFM параметр порядка $\Delta_0 = \frac{V}{V} \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_0,-\sigma} \rangle$

Вычисление в рамках теории БКШ даёт

$$\Delta_0 = \epsilon_F \exp(-1/N_m V) \ll \epsilon_F \quad (\epsilon_F = v_F k_F)$$

Такой параметр порядка отвечает вращению вектора магнитного момента с периодом \mathbf{Q}_0^{-1} (соизмеримый AFM порядок)

$\mu \neq 0$

$$\Delta = \frac{V}{V} \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1,-\sigma} \rangle \quad \mathbf{Q}_1 = \mathbf{Q}_0 + \mathbf{Q}$$

$$|\mathbf{Q}| \sim |\Delta|/v_F \ll |\mathbf{Q}_0|$$

Такой параметр порядка отвечает вращению вектора магнитного момента с периодом \mathbf{Q}_1^{-1} (несоизмеримый AFM порядок)

Аналог состояния Фульде-Феррела-Ларкина-Овчинникова в сверхпроводниках

Большой термодинамический потенциал

Равновесные значения параметров порядка находятся путём минимизации термодинамического потенциала

$$\Omega = -T \ln[\text{Tr} e^{-(\hat{H} - \mu \hat{N})/T}] \quad \text{or}$$

$$\Omega = \frac{2\Delta^2}{V} \mathcal{V} - 2T \mathcal{V} \sum_{s=1,2} \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \ln(1 + e^{-E_s(\mathbf{k}, \mathbf{Q}, \Delta)/T}) - 2T N_r \mathcal{V} \int \ln(1 + e^{-(\epsilon - \mu)/T}) d\epsilon$$

N_r – плотность состояний электронов резервуара ("немагнитных" электронов)

Закон дисперсии в приближении БКШ

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = \frac{\epsilon^b(\mathbf{k} + \mathbf{Q}_1) + \epsilon^a(\mathbf{k})}{2} \pm \sqrt{\Delta^2 + \left[\frac{\epsilon^b(\mathbf{k} + \mathbf{Q}_1) - \epsilon^a(\mathbf{k})}{2} \right]^2}$$

Минимизация термодинамического потенциала

$$\partial\Omega/\partial\Delta = 0$$

$$\ln \frac{\Delta_0}{\Delta} = \int_0^\infty \frac{d\xi}{2\epsilon} \int_{-1}^1 d\eta [f(\epsilon + \mu - Q\eta) + f(\epsilon - \mu + Q\eta)].$$

$$\partial\Omega/\partial Q = 0$$

$$\frac{2Q}{3} = - \int_0^\infty d\xi \int_{-1}^1 \eta d\eta [f(\epsilon - \mu + Q\eta) + f(\epsilon + \mu - Q\eta)].$$

$$f(\epsilon) = 1/[1 + \exp(\epsilon/T)] \quad \text{и} \quad \epsilon = \sqrt{\Delta^2 + \xi^2},$$

Уровень допирования $x = n_m(\mu) - n_m(0) + n_r(\mu) - n_r(0)$

$$n_r(m) - n_r(0) = N_r \mu \quad (\mu \ll k_F v_F) \quad \text{и} \quad n_m(\mu) = 2v^{-1} \Sigma_{\mathbf{k}} [f(E_1(\mathbf{k})) + f(E_2(\mathbf{k}))]$$

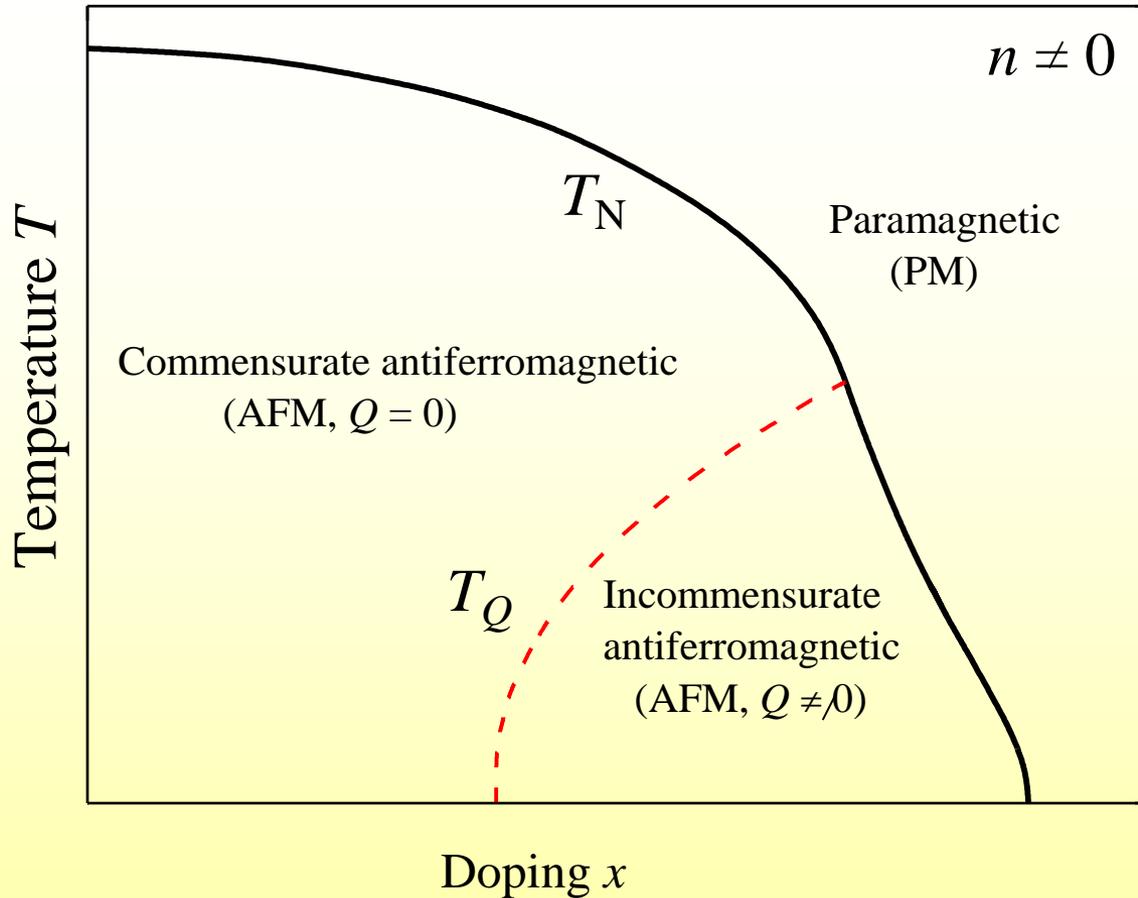
допирование

$$\frac{x}{x_0} = \frac{n\mu}{\Delta_0} + \int_0^\infty \frac{d\xi}{2\Delta_0} \int_{-1}^1 d\eta [f(\epsilon - \mu + Q\eta) - f(\epsilon + \mu - Q\eta)],$$

$$n = N_r/2N_m$$

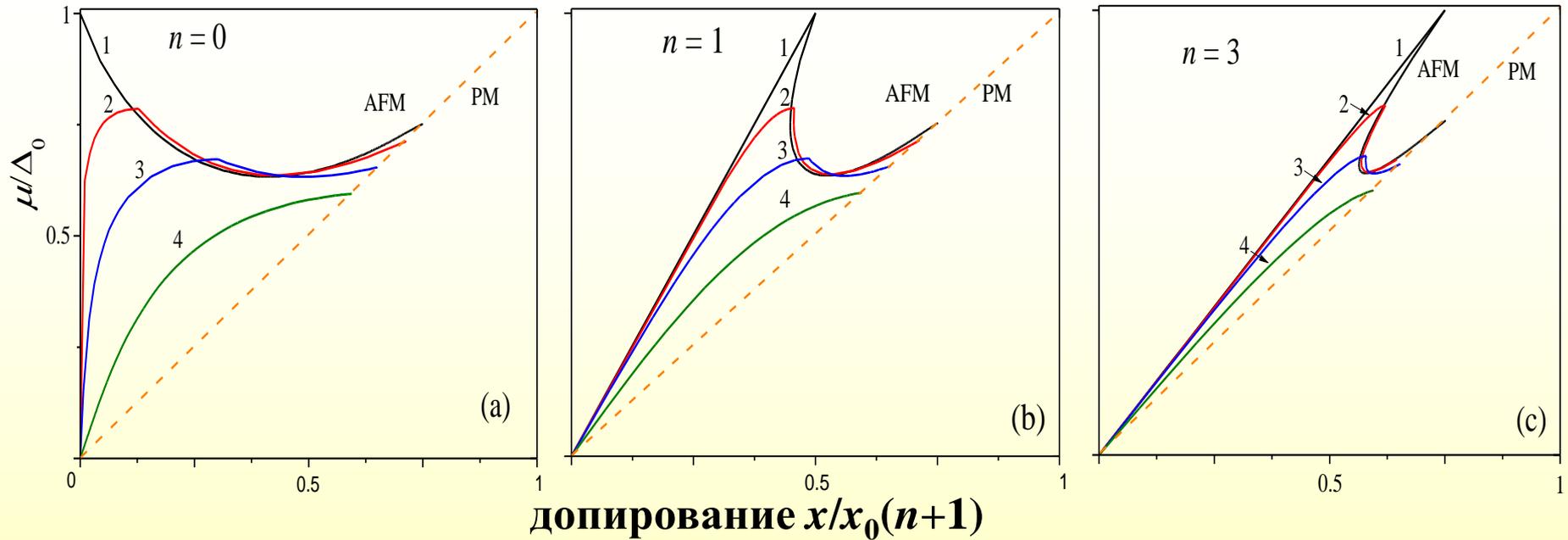
$$x_0 = 4\Delta_0 N_m$$

Фазовая диаграмма



ОДНАКО: постулируется наличие только однородных состояний

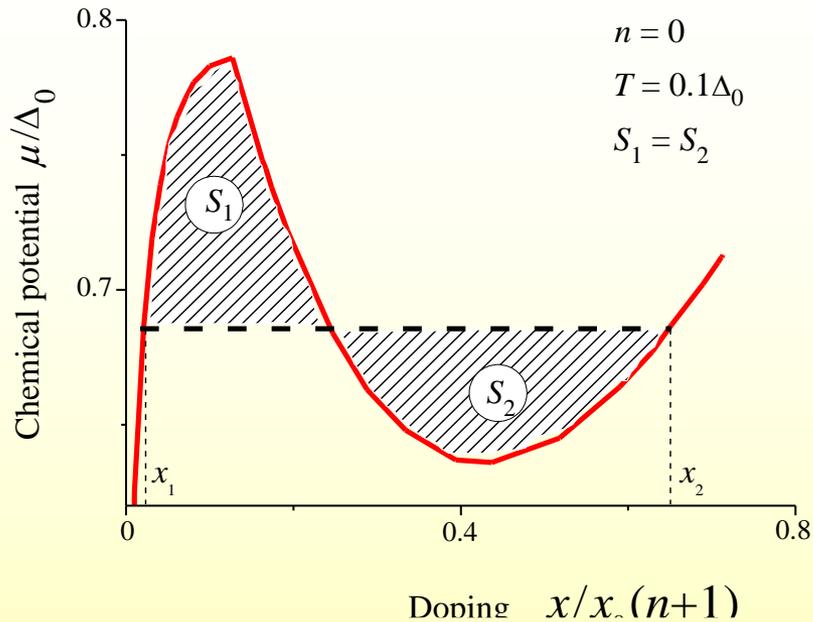
Химический потенциал как функция допирования



Химический потенциал как функция допирования при различной относительной доле "немагнитных электронов" $n = 0$ (a), $n = 1$ (b), $n = 3$ (c) и при различных температурах $T = 0$ (1), $T/\Delta_0 = 0.1$ (2), $T/\Delta_0 = 0.2$ (3) и $T/\Delta_0 = 0.35$ (4). Штриховая линия отвечает $\mu(x)$ в парамагнитной фазе.

$\partial\mu/\partial x < 0$ отвечает отрицательной сжимаемости и, следовательно, неустойчивости однородного состояния

Построение Максвелла



Горизонтальная штриховая линия отвечает построению Максвелла: заштрихованные площади равны $S_1 = S_2$.
 x_1 и x_2 – равновесные значения допирования в каждой фазе
Если p_1 и $1 - p_1$ – равновесные объёмные доли каждой фазы, то $x = p_1 x_1 + (1 - p_1) x_2$.

Фаза, отвечающая меньшему допированию x_1 ,

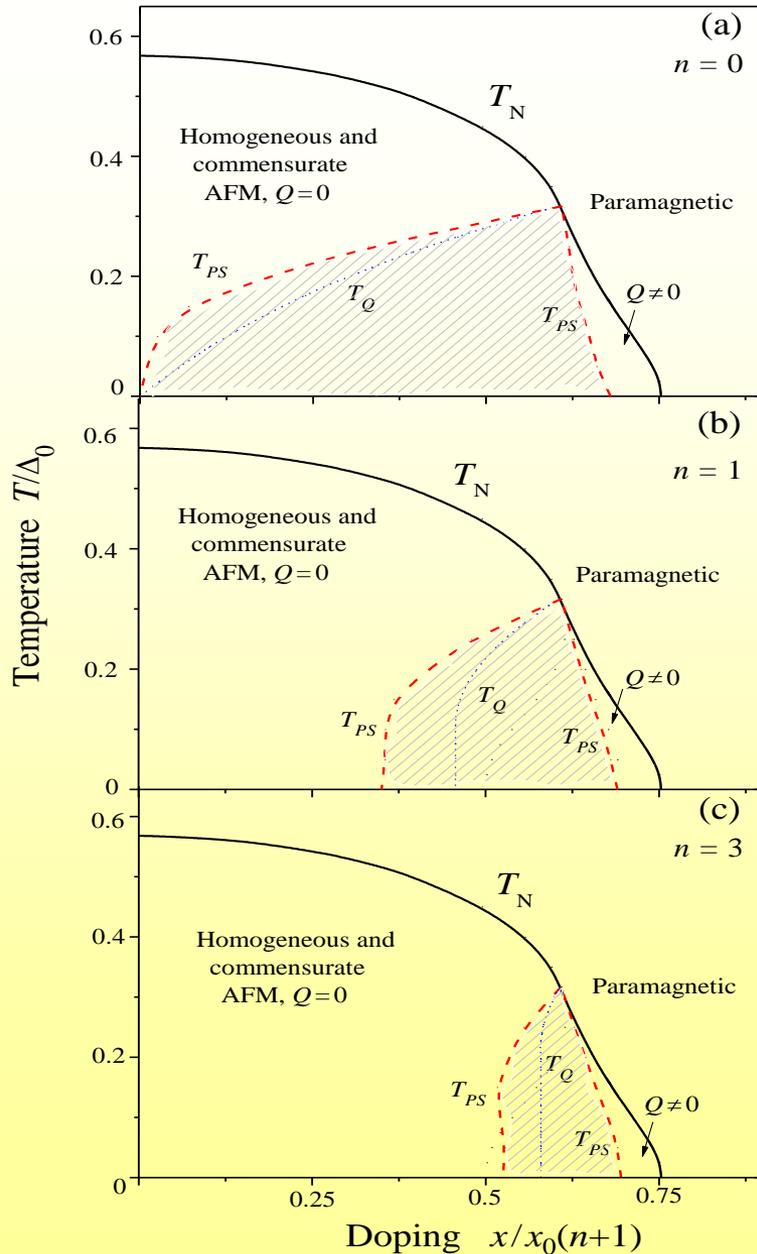
- соизмеримый АФМ ($Q = 0$), фаза с более высоким уровнем допирования x_2 - несоизмеримый АФМ ($Q \neq 0$).

Т.о., фазовое расслоение возникает за счёт конкуренции двух АФМ состояний с различной структурой.

Фазовая диаграмма при учёте фазового расслоения

Фазовая диаграмма модели Райса при $n = 0$ (a), $n = 1$ (b), и $n = 3$ (c). Красная штриховая линия – граница заштрихованной области фазово-расслоённого состояния.

Фазовое расслоение (PS) отсутствует, если $T > T^* \approx 0.3170\Delta_0$ и исчезает одновременно с несоизмеримой AFM фазой.



Промежуточные выводы. I

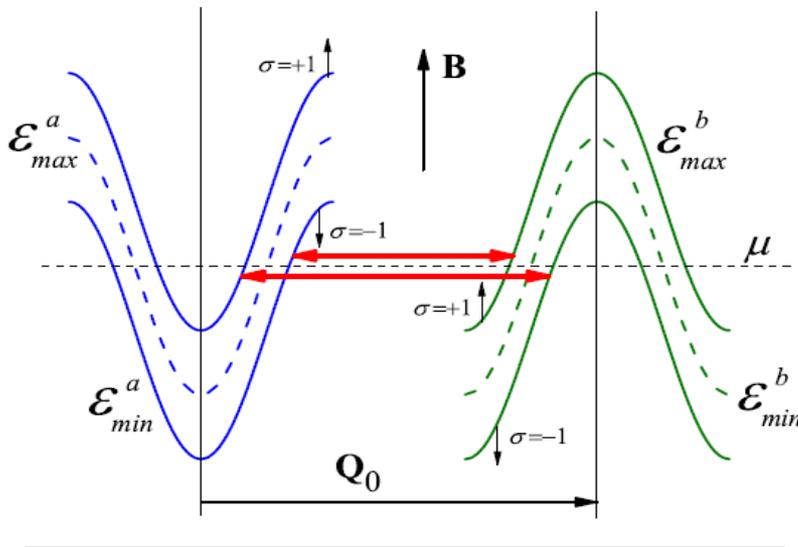
- ❖ Показано, что однородное основное состояние в модели Райса для зонного антиферромагнетика с неидеальным нестингом неустойчиво относительно электронного фазового расслоения в широком интервале уровней допирования и температур.
- ❖ В этом интервале однородная система расслаивается на две АФМ фазы, соизмеримую и несоизмеримую.
- ❖ Естественно, что такая неустойчивость может возникать и в других моделях с неидеальным нестингом.

Влияние магнитного поля

$$\varepsilon^a(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}^2}{2m_a} + \varepsilon_{\min}^a - \mu, \quad \varepsilon_{\min}^a < \varepsilon^a < \varepsilon_{\max}^a,$$

$$\varepsilon^b(\mathbf{k} + \mathbf{Q}_0) = -\frac{\mathbf{k}^2}{2m_b} + \varepsilon_{\max}^b - \mu, \quad \varepsilon_{\min}^b < \varepsilon^b < \varepsilon_{\max}^b.$$

$$k_F^2 = \frac{2m_a m_b}{m_a + m_b} (\varepsilon_{\max}^b - \varepsilon_{\min}^a), \quad \mu_0 = \frac{m_b \varepsilon_{\max}^b + m_a \varepsilon_{\min}^a}{m_a + m_b}.$$



Без магнитного поля зоны двукратно вырождены по спину. Идеальному нестингу соответствует $\mu = \mu_0$. Для простоты положим $\mu_a = \mu_b = \mu$ и $\varepsilon_{\max}^a = -\varepsilon_{\min}^b$. Тогда $\mu_0 = 0$.

Магнитное поле снимает вырождение по спину и вместо двух зон мы имеем теперь четыре.

Здесь для простоты мы не будем рассматривать

- (1) "несоизмеримые" АФМ фазы
- (2) "немагнитные" части поверхности Ферми.

Модельный гамильтониан

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{\text{int}},$$

Одноэлектронная часть гамильтониана

$$\hat{H}_e = \sum_{\alpha\sigma} \int d^3x \psi_{\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{H}_{\alpha\sigma} \psi_{\alpha\sigma}(\mathbf{x}),$$

$$\hat{H}_{a\sigma} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A})^2}{2m_a} + \sigma g_a \omega_a + \varepsilon_{\text{min}}^a - \mu,$$

$$\hat{H}_{b\sigma} = -\frac{(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A})^2}{2m_b} + \sigma g_b \omega_b + \varepsilon_{\text{max}}^b - \mu.$$

$$\omega_\alpha = eB/cm_\alpha$$

Взаимодействие электронов полагаем локальным и часть гамильтониана, которая описывает взаимодействие запишем в виде

$$\hat{H}_{\text{int}} = V \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3x \psi_{a\sigma}^\dagger(\mathbf{x}) \psi_{a\sigma}(\mathbf{x}) \psi_{b\sigma'}^\dagger(\mathbf{x}) \psi_{b\sigma'}(\mathbf{x}).$$

Электронный спектр

Если не учитывать взаимодействие, то волновые функции можно получить в виде разложения по полиномам Эрмита, а электронный спектр имеет обычный вид уровней Ландау:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\sigma}^a(p_z, n) &= \omega_a \left(n + \frac{1}{2} + \sigma g_a \right) + \frac{p_z^2}{2m_a} + \varepsilon_{\min}^a - \mu, \\ \varepsilon_{\sigma}^b(p_z, n) &= -\omega_b \left(n + \frac{1}{2} - \sigma g_b \right) - \frac{p_z^2}{2m_b} + \varepsilon_{\max}^b - \mu.\end{aligned}$$

При учете взаимодействия возникает АФМ порядок и щель в электронном спектре. В нулевом магнитном поле и нулевой температуре эта щель по величине совпадает со щелью в сверхпроводниках в теории БКШ:

$$\Delta_0 = v_F k_F \exp(-1/V N_F), \quad N_F = \frac{k_F^2}{2\pi^2 v_F}.$$

Таким образом, в нашей задаче возникают три естественных масштаба энергии: энергия Ферми E_F , энергия АФМ порядка Δ_0 (характеристика электрон-электронного взаимодействия) и характерное расстояние между уровнями Ландау $\hbar eB/mc = \hbar \omega_H$, которое характеризует величину магнитного поля. Всегда $E_F \gg \hbar \omega_H, \Delta_0$.

Магнитное поле можно считать слабым и не учитывать квантование Ландау, если $\hbar \omega_H \ll \Delta_0$. В обратном пределе $\hbar \omega_H \gg \Delta_0$ магнитное поле сильное и квантование Ландау играет существенную роль.

Слабые магнитные поля ($\hbar\omega_H \ll \Delta_0$)

Электронный спектр электронов без учета взаимодействия имеет простой вид (энергия отсчитана от уровня Ферми, химический потенциал от положения «идеального нестинга»)

$$\varepsilon_{\sigma}^a(\mathbf{k}) = \frac{k^2 - k_F^2}{2m_a} + \sigma g_a \omega_a - \delta\mu,$$

$$\varepsilon_{\sigma}^b(\mathbf{k}) = -\frac{k^2 - k_F^2}{2m_b} + \sigma g_b \omega_b - \delta\mu,$$

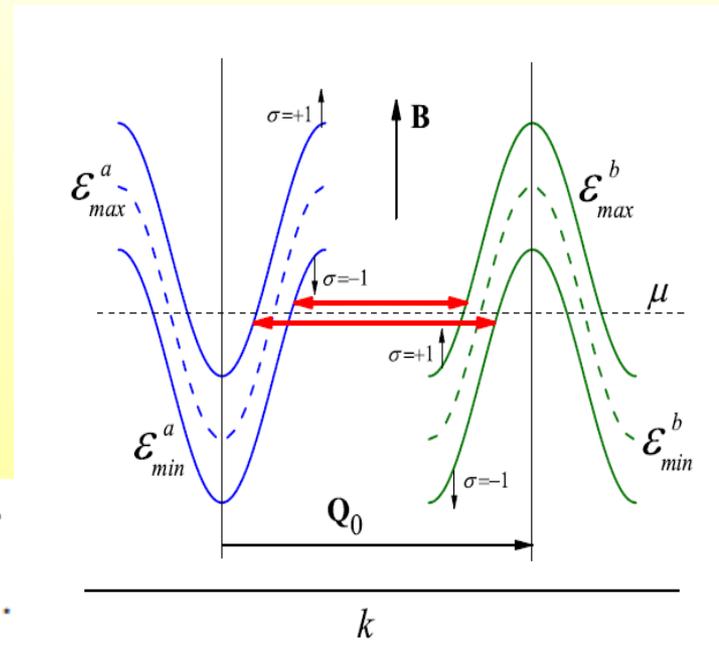
$$\delta\mu = \mu - \mu_0.$$

Определяем два параметра порядка (см. красные стрелки на рисунке):

$$\Delta_{\uparrow} = \frac{V}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \langle \psi_{\mathbf{k}a\uparrow}^{\dagger} \psi_{\mathbf{k}b\downarrow} \rangle, \quad \Delta_{\downarrow} = \frac{V}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}} \langle \psi_{\mathbf{k}a\downarrow}^{\dagger} \psi_{\mathbf{k}b\uparrow} \rangle$$

И в приближении аналогичном БКШ получаем спектр с учетом взаимодействия

$$E_{1,2}^{\sigma}(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon_{\sigma}^a(\mathbf{k}) + \varepsilon_{-\sigma}^b(\mathbf{k})}{2} \pm \sqrt{\Delta_{\sigma}^2 + \left(\frac{\varepsilon_{\sigma}^a(\mathbf{k}) - \varepsilon_{-\sigma}^b(\mathbf{k})}{2} \right)^2}.$$



Минимизация термодинамического потенциала

Зная спектр, можно найти термодинамический потенциал модели и связать число электронов и химический потенциал:

$$\frac{\Omega}{V} = \sum_{\sigma} \left[\frac{\Delta_{\sigma}^2}{V} - T \sum_{s=1,2} \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \ln \left(1 + e^{-E_s^{\sigma}(\mathbf{k})/T} \right) \right].$$

$$N = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} s \sigma} f_F[E_s^{\sigma}(\mathbf{k})].$$

$$g = \frac{g_a + g_b}{2}, \quad \Delta g = \frac{g_a - g_b}{2},$$

$$E_{F\sigma} = \frac{k_F^2}{2m} - \sigma g \omega_H, \quad \mu_{\sigma} = \delta\mu - \sigma \Delta g \omega_H.$$

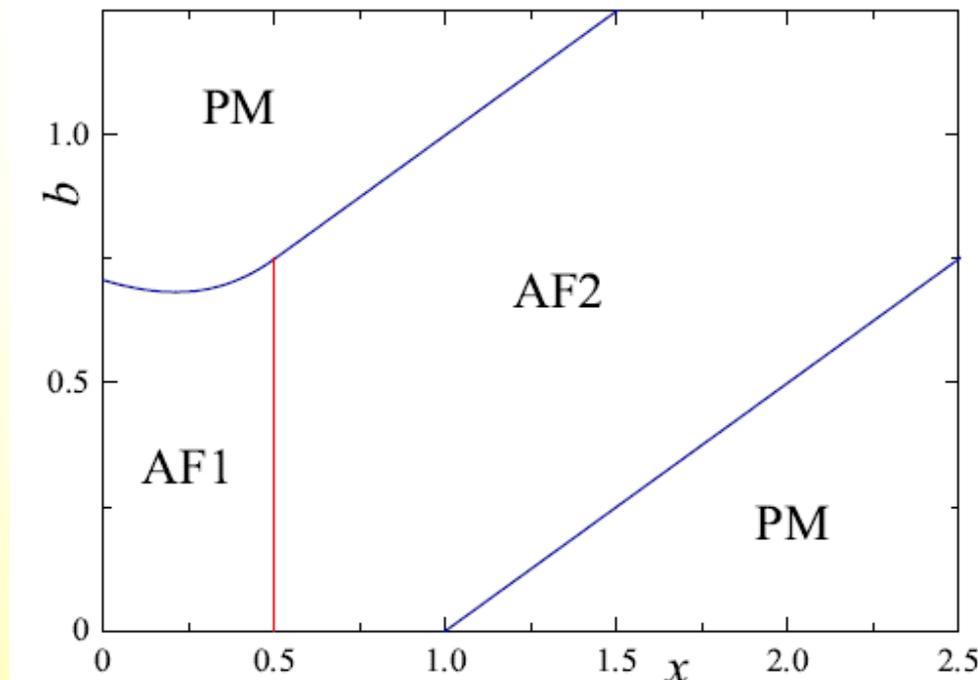
Минимум термодинамического потенциала определяет уравнения на параметры порядка

$$\ln \frac{\Delta_0}{\Delta_{\sigma}} = \int_0^{\infty} \frac{d\xi}{\epsilon_{\sigma}} [f_F(\epsilon_{\sigma} + \delta\mu - \sigma \Delta g \omega_H) + f_F(\epsilon_{\sigma} - \delta\mu + \sigma \Delta g \omega_H)]$$

$$\epsilon_{\sigma}(\xi) = \sqrt{\Delta_{\sigma}^2 + \xi^2}.$$

С помощью полученных уравнений строим фазовую диаграмму системы

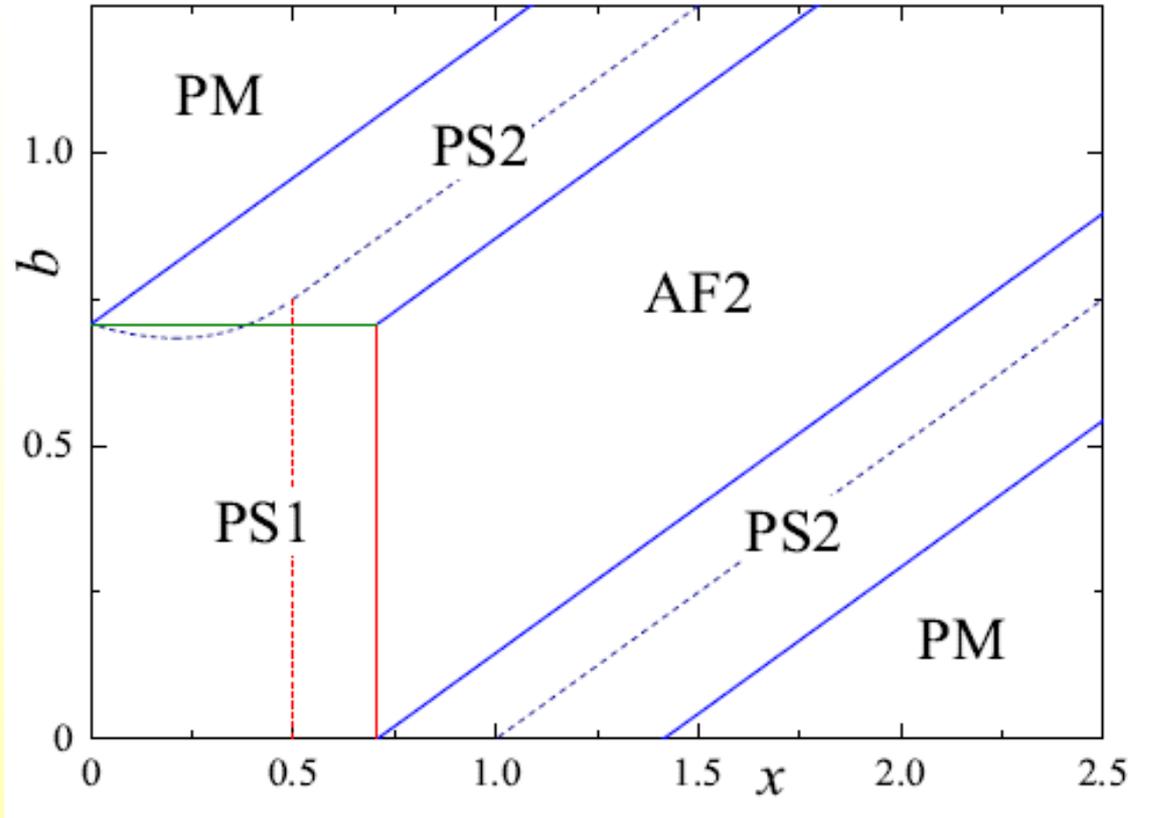
Фазовая диаграмма (однородные состояния)



Система имеет 9 однородных устойчивых состояний, 8 АФМ и одно парамагнитное (РМ). Однако основными состояниями при разных уровнях допирования и разным магнитных полях являются только три: 2 АФМ и РМ.

АФ1 – два АФМ параметра порядка, один максимальный,
АФ2 – только один параметр порядка.

Фазовая диаграмма (учёт фазового расслоения)

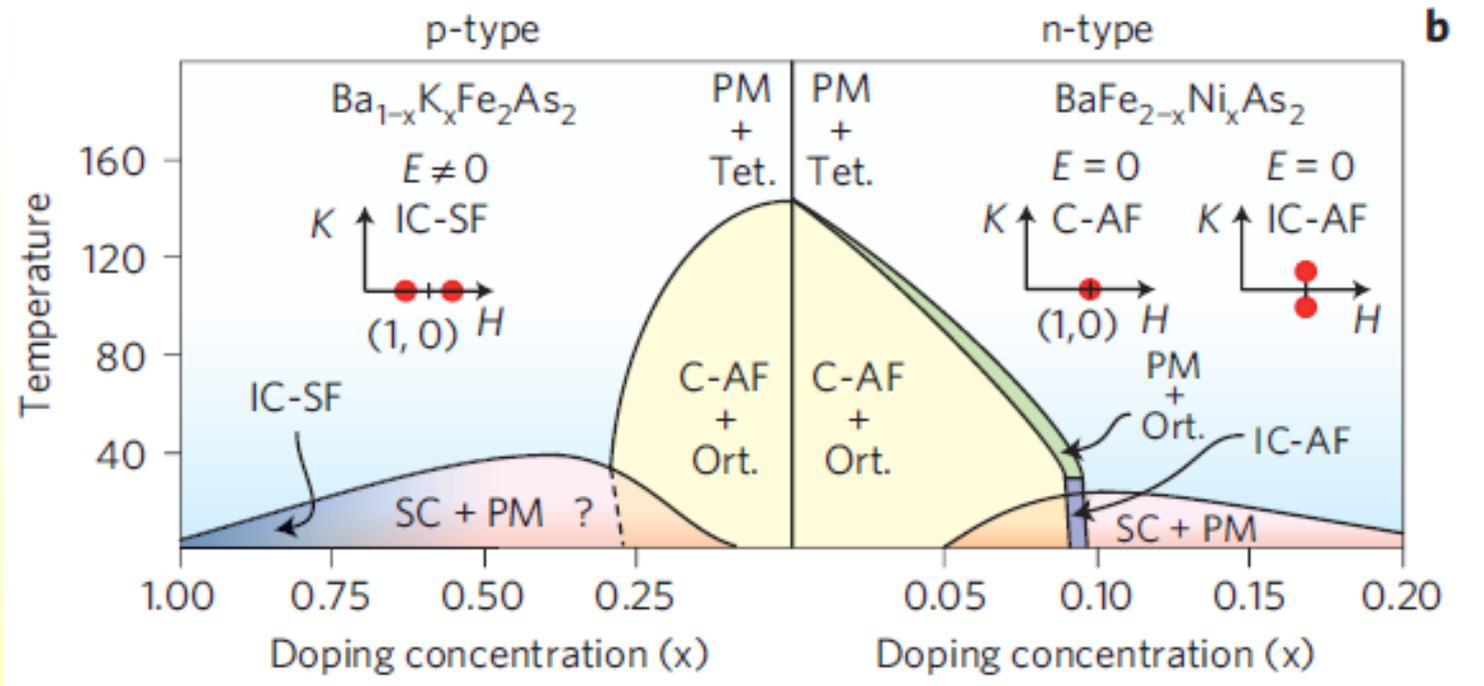


Оказывается, что неоднородные состояния (PS) имеют меньшую свободную энергию и окончательная фазовая диаграмма содержит области PM, AF2, PS1 = AF1+AF2, PS2 = PM+AF2

Промежуточные выводы. II

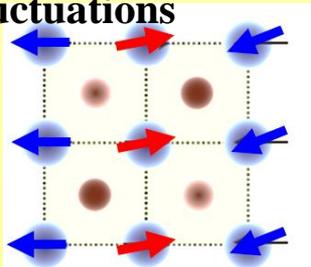
- ❖ Построена магнитная фазовая диаграмма систем с неидеальным нестингом.
- ❖ Показано, что в области сравнительно слабых магнитных полей возникают АФМ состояния с двумя различными параметрами порядка, а также довольно сложная картина переходов между различными АФМ фазами, в том числе, и пространственно-неоднородными.
- ❖ В области высоких магнитных полей, когда необходимо учитывать квантование Ландау, могут возникать осцилляции АФМ параметров порядка.

Фазовое расслоение в сверхпроводящих пниктидах



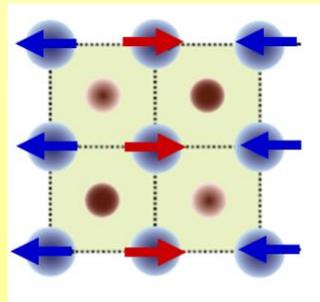
P. Dai, J. Hu, and E. Dagotto, *Nature Phys.* **8**, 709 (2012)

IC-Spin
fluctuations



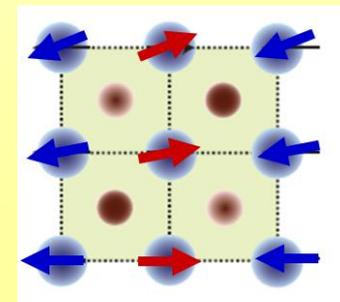
$$Q = Q_0 + q, q \parallel Q_0$$

C-AF structure



$$Q = Q_0 = (\pi, 0)$$

IC-AF structure



$$Q = Q_0 + q, q \perp Q_0$$

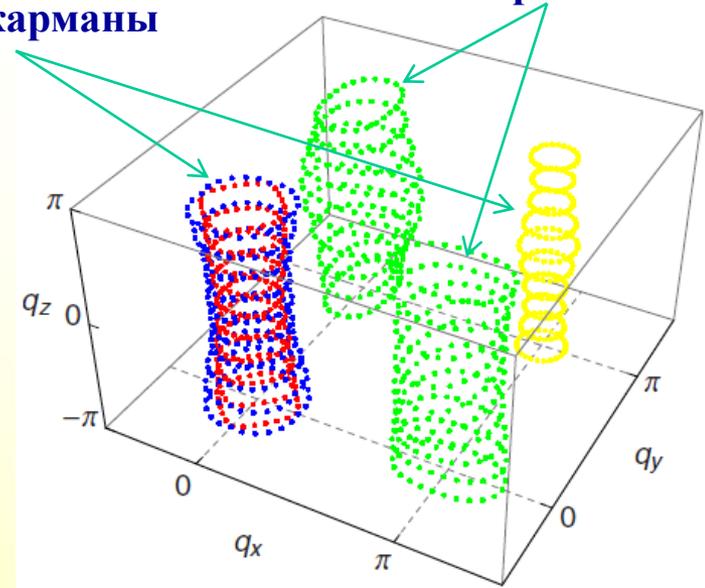
Модель электронной структуры

Упрощения

- 2D ферми-поверхности (пренебрегаем зависимостью от k_z)
- Не учитываем орбитальную структуру ферми-поверхности
- В формирование волн спиновой плотности (SDW) влечены одна электронная и одна дырочная зоны (“магнитные” зоны)

дырочные карманы

электронные карманы



S. Graser, et al., Phys. Rev B 81, 214503 (2011)

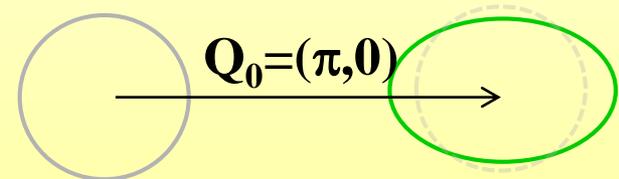
Параметры модели:

$$r = \frac{N_r}{N_m}$$

← “немагнитная” плотность состояний

← “магнитная” плотность состояний

α – эллиптичность электронной зоны



$$\varepsilon_{1\mathbf{k}}^h = -\frac{v_F^h k^2}{2k_F} + \frac{v_F^h k_F}{2} - \mu$$

$$\varepsilon_{1\mathbf{k}+\mathbf{Q}_0}^e = \frac{v_F^e k^2}{2k_F} - \frac{v_F^e k_F}{2} + \frac{\alpha v_F^e}{k_F} (k_y^2 - k_x^2) - \mu$$

Вычисление параметра порядка

$$\Delta = \frac{V_1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}1\uparrow}^\dagger b_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}1\downarrow} \rangle = \frac{V_1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}1\uparrow}^\dagger b_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_01\downarrow} \rangle, \quad \mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0 + \mathbf{q}$$

$$H = H_m + H_r,$$

$$H_m = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[\varepsilon_{1\mathbf{k}}^h a_{\mathbf{k}1\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}1\sigma} + \varepsilon_{1\mathbf{k}}^e b_{\mathbf{k}1\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}1\sigma} \right] + \frac{V_1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{K}\sigma\sigma'} a_{\mathbf{k}+\mathbf{K}1\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}1\sigma} b_{\mathbf{k}'-\mathbf{K}1\sigma'}^\dagger b_{\mathbf{k}'1\sigma'}$$

$$H_m^{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[\varepsilon_{1\mathbf{k}-\mathbf{q}}^h c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \varepsilon_{1\mathbf{k}+\mathbf{Q}_0}^e d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma} - \Delta \left(c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}-\sigma} + d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}-\sigma} \right) + \Delta^2/V_1 \right]$$

$$d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = b_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_01\sigma}^\dagger, \quad c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}1\sigma}^\dagger$$

$$\Omega_m = -2T \sum_s \int_{\text{BZ}} \frac{v_0 d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \ln \left[1 + e^{-E_{\mathbf{k}}^{(s)}/T} \right] + \frac{2\Delta^2}{V_1}$$

$$E_{\mathbf{k}}^{(1,2)} = \frac{\varepsilon_{1\mathbf{k}+\mathbf{Q}_0}^e + \varepsilon_{1\mathbf{k}-\mathbf{q}}^h}{2} \mp \sqrt{\Delta^2 + \frac{1}{4} \left(\varepsilon_{1\mathbf{k}+\mathbf{Q}_0}^e - \varepsilon_{1\mathbf{k}-\mathbf{q}}^h \right)^2}$$

$$\frac{\partial \Omega_m}{\partial \Delta} = 0, \quad \frac{\partial \Omega_m}{\partial \mathbf{q}} = 0, \quad x = n_m(\mu) - n_m(0) + N_r \mu, \quad n_m(\mu) = -\frac{\partial \Omega_m}{\partial \mu}$$

$$\Delta_0 \approx \varepsilon_F \exp\left(-\frac{2\pi\varepsilon_F}{v_0 k_F^2 V_1}\right)$$

$$\bar{\alpha} = \frac{\alpha \varkappa \varepsilon_F}{\Delta_0}$$

$$\varkappa = \frac{2\sqrt{v_F^e v_F^h}}{v_F^e + v_F^h}$$

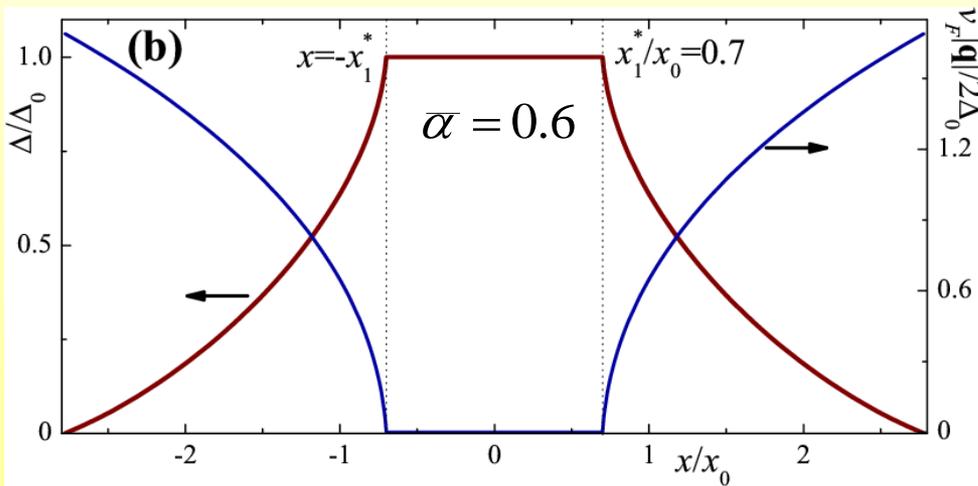
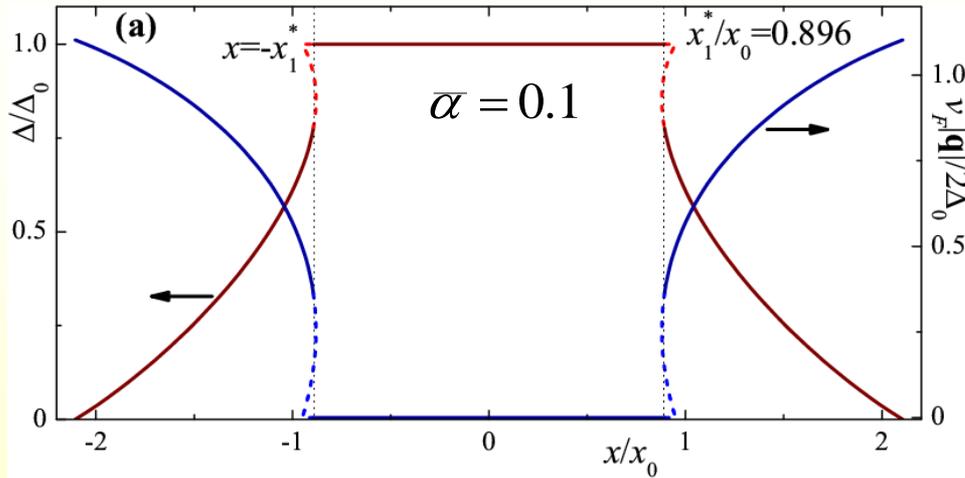
$$x_0 = \frac{2v_0 k_F^2}{\pi \varkappa} \frac{\Delta_0}{\varepsilon_F}$$

Решение отсутствует при любом уровне допирования, если

$$|\bar{\alpha}| > 2 \Rightarrow$$

$$V_c = \frac{2\pi\varepsilon_F}{v_0 k_F^2 \ln \frac{2}{|\alpha| \varkappa}}$$

Зависимость параметра порядка Δ и вектора нестинга \mathbf{q} от уровня допирования

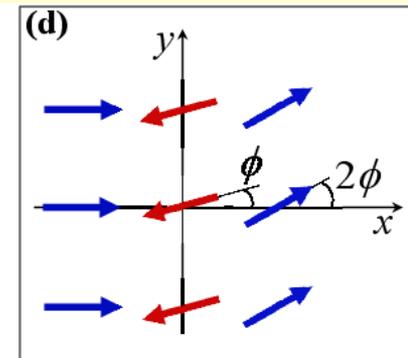
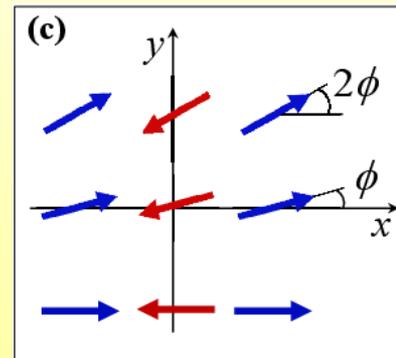


Магнитная структура

$$\mathbf{S}(\mathbf{n}) = \frac{\Delta}{V_1} (\cos[\mathbf{Qn}], \sin[\mathbf{Qn}]), \quad \mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0 + \mathbf{q}$$

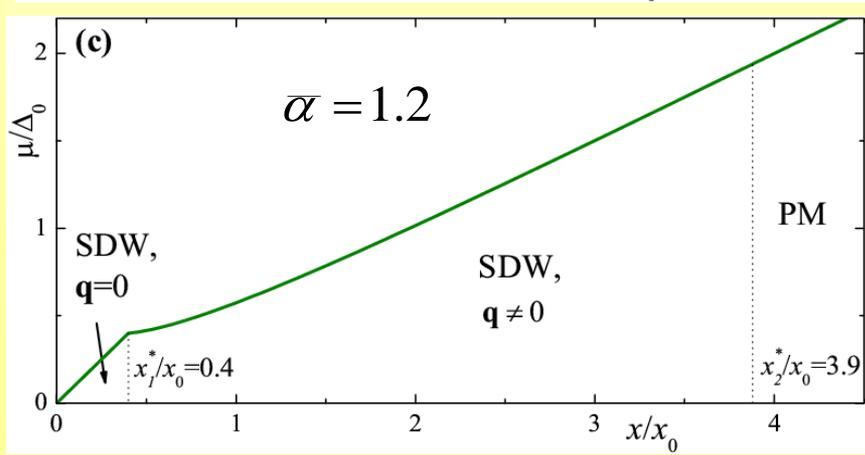
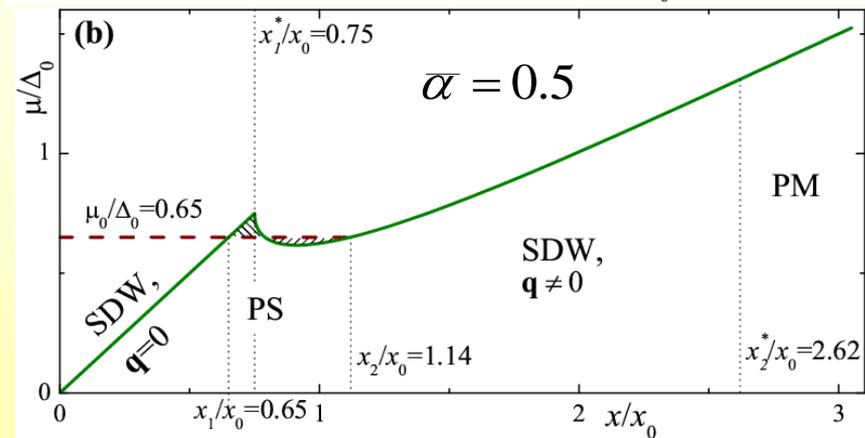
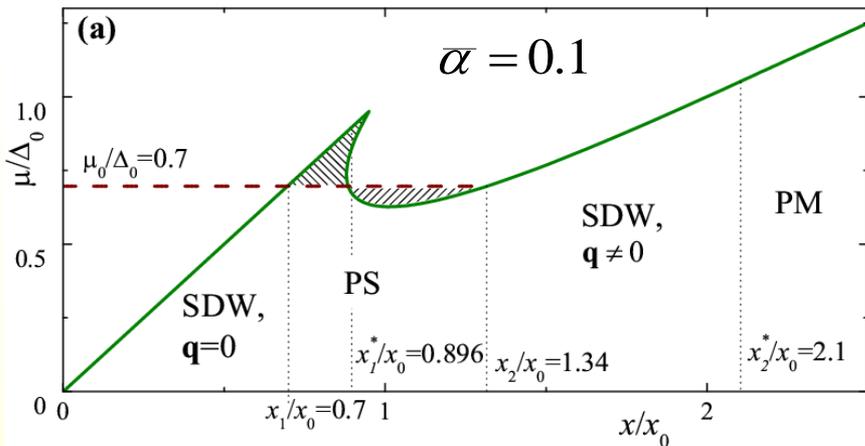
$$\alpha x < 0; \quad \mathbf{q} \perp \mathbf{Q}_0$$

$$\alpha x > 0; \quad \mathbf{q} \parallel \mathbf{Q}_0$$

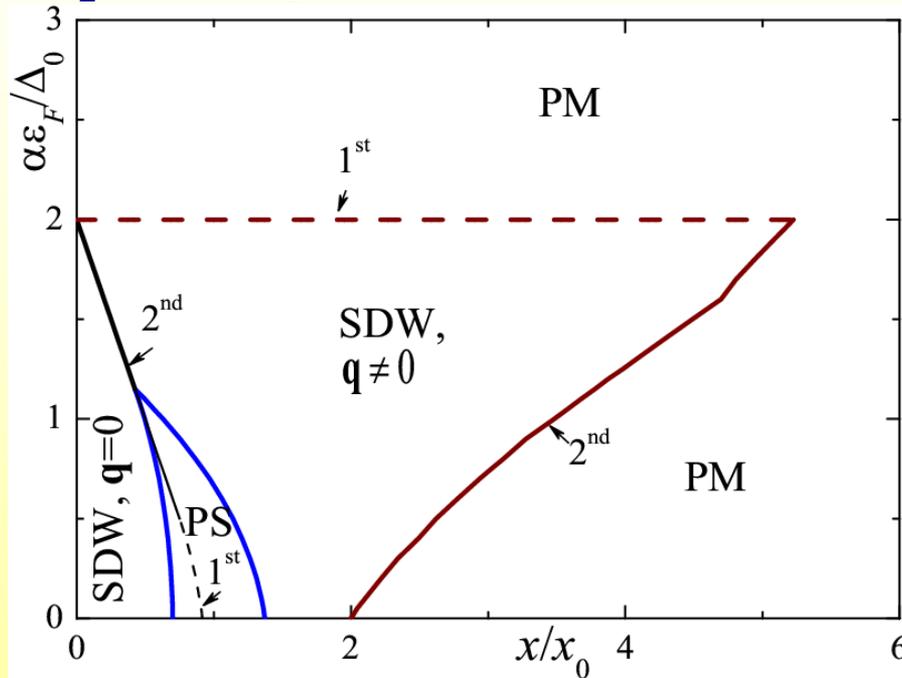


$$\phi = |\mathbf{q}| / a$$

Фазовое расслоение (PS)



При $x_1 < x < x_2$ однородное состояние типа волны спиновой плотности неустойчиво относительно расслоения на фазы с x_1 (SDW, $q=0$) и x_2 (SDW, $q \neq 0$)



- С ростом $\bar{\alpha}$ область PS сужается

$$\bar{\alpha} = \frac{\alpha \kappa \epsilon_F}{\Delta_0} \propto \alpha e^{\overline{N_m V_1}}$$

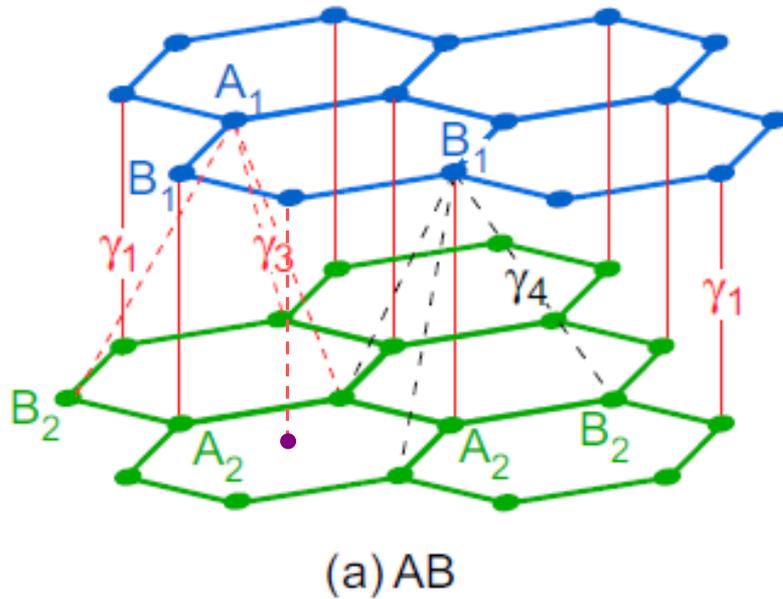
- С ростом V_1 область PS расширяется

Промежуточные выводы. III

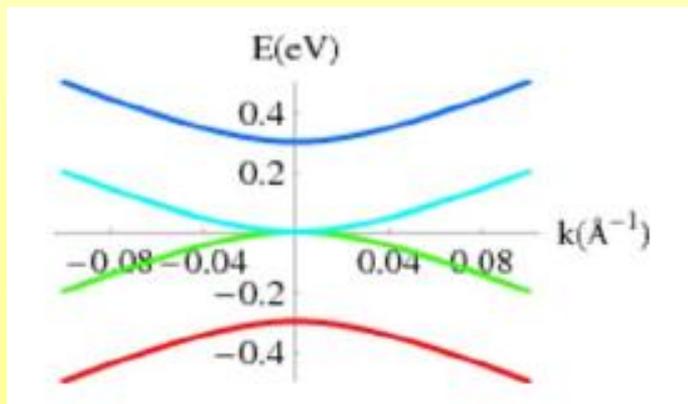
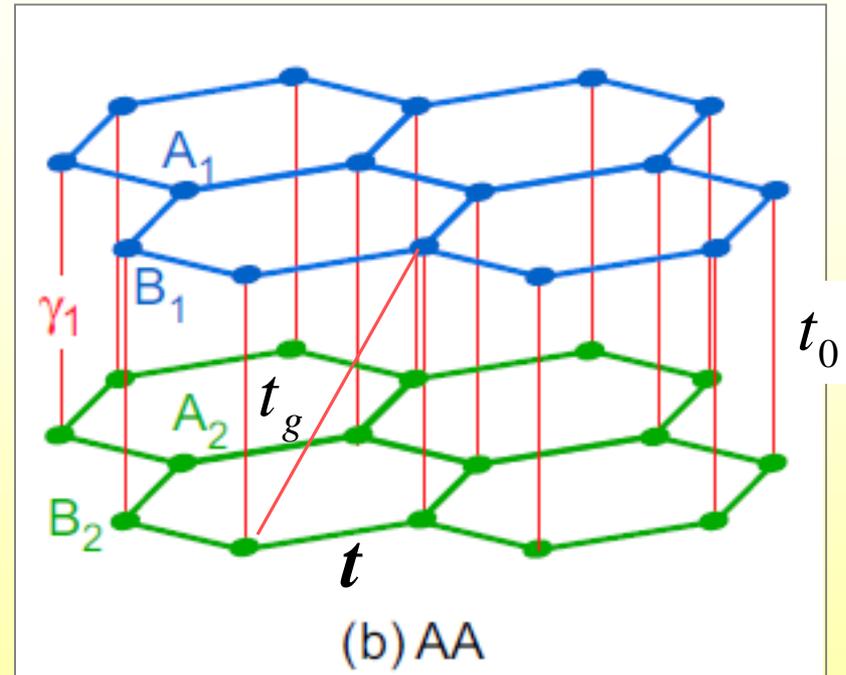
- ❖ Основываясь на механизме нестинга для образования волн спиновой плотности (SDW) в пниктидах, была изучена эволюция SDW параметра порядка при допировании.
- ❖ При допировании соизмеримая SDW переходит в несоизмеримую. В зависимости от параметров модели возможны два типа SDW структур.
- ❖ В некотором интервале уровней допирования однородное SDW состояние становится неустойчивым относительно фазового расслоения, которое становится более выгодным при усилении электрон–электронного взаимодействия.

Двухслойный графен

AB и AA упаковки



Z. Liu et al PRL 102, 015501 (2009)



Параметры: $a_0 \approx 1.4 \text{\AA}$, $c \approx 3.3 \text{\AA}$

J.-C. Charlier et al, $t \approx 2.57 \text{ eV}$
PRB 46, 4531 (1992)

$t_0 \approx 0.36 \text{ eV}$

$t_g \approx -0.03 \text{ eV}$

Гамильтониан двухсоедного АА-графена в приближении сильной связи

$$H_0 = -t \sum_{\langle nm \rangle i \sigma} (a_{ni\sigma}^+ b_{mi\sigma} + b_{ni\sigma}^+ a_{mi\sigma}) - t_0 \sum_{n\sigma} (a_{n1\sigma}^+ a_{n2\sigma} + b_{n1\sigma}^+ b_{n2\sigma} + \text{H.c.}) - t_g \sum_{\langle nm \rangle \sigma} (a_{n1\sigma}^+ b_{m2\sigma} + a_{n2\sigma}^+ b_{m1\sigma} + \text{H.c.})$$

Биспинор:

$$\psi_{\mathbf{k}\sigma} = \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{k}A\sigma} \\ \psi_{\mathbf{k}B\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}1\sigma} \\ a_{\mathbf{k}2\sigma} \\ e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} b_{\mathbf{k}1\sigma} \\ e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} b_{\mathbf{k}2\sigma} \end{pmatrix}, \quad \psi_{\mathbf{k}A\sigma} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}1\sigma} \\ a_{\mathbf{k}2\sigma} \end{pmatrix}, \quad \psi_{\mathbf{k}B\sigma} = e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}1\sigma} \\ a_{\mathbf{k}2\sigma} \end{pmatrix} \quad (f_{\mathbf{k}} = |f_{\mathbf{k}}| e^{i\varphi_{\mathbf{k}}})$$

Матрицы Паули: σ_{α} – (подрешётки) действуют на

$$\psi_{\mathbf{k}\sigma} = \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{k}A\sigma} \\ \psi_{\mathbf{k}B\sigma} \end{pmatrix}$$

($\alpha=x, y, z$)

τ_{α} – (плоскости действуют на

$\psi_{\mathbf{k}A\sigma}, \psi_{\mathbf{k}B\sigma}$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \psi_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{H}_{0\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \hat{H}_{0\mathbf{k}} = -[t_0 \hat{\tau}_x + (t + t_g \hat{\tau}_x) \hat{\sigma}_x |f_{\mathbf{k}}|] = - \begin{pmatrix} 0 & t_0 & t|f_{\mathbf{k}}| & t_g|f_{\mathbf{k}}| \\ t_0 & 0 & t_g|f_{\mathbf{k}}| & t|f_{\mathbf{k}}| \\ t|f_{\mathbf{k}}| & t_g|f_{\mathbf{k}}| & 0 & t_0 \\ t_g|f_{\mathbf{k}}| & t|f_{\mathbf{k}}| & t_0 & 0 \end{pmatrix}$$

Симметрии и электронный спектр

$$\hat{H}_{0\mathbf{k}} = -\left[t_0\hat{\tau}_x + (t+t_g\hat{\tau}_x)\hat{\sigma}_x\right]f_{\mathbf{k}}$$

$$f_{\mathbf{k}} = 1 + \exp\left(\frac{3ik_x a_0}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a_0}{2}\right)$$

$$\left[\hat{H}_{0\mathbf{k}}, \hat{\sigma}_x\right] = \left[\hat{H}_{0\mathbf{k}}, \hat{\tau}_x\right] = 0$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(1)} = -t_0 - (t+t_g)f_{\mathbf{k}}, \sigma=1, \tau=1$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(2)} = +t_0 - (t-t_g)f_{\mathbf{k}}, \sigma=1, \tau=-1$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(3)} = -t_0 + (t+t_g)f_{\mathbf{k}}, \sigma=-1, \tau=1$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(4)} = +t_0 + (t+t_g)f_{\mathbf{k}}, \sigma=-1, \tau=-1$$

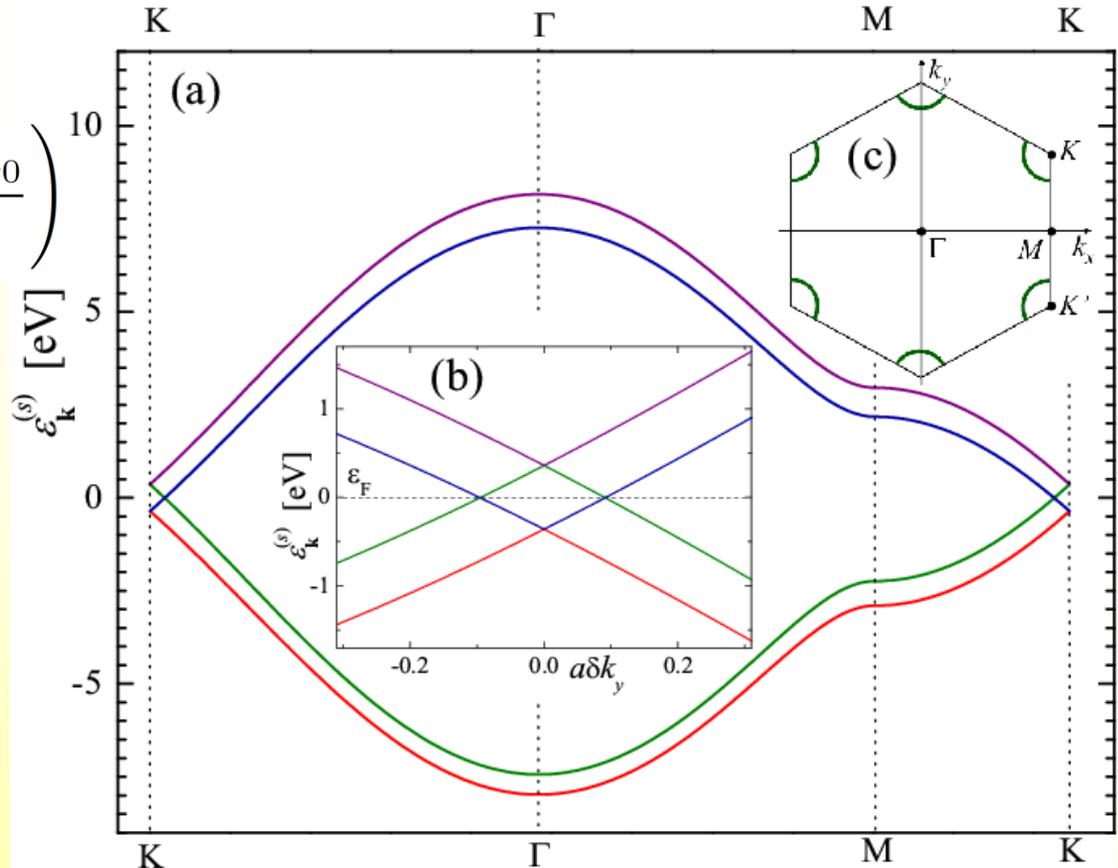
Уровень Ферми: $\varepsilon_F = t_0 t_g / t$

Поверхность Ферми: $|f_{\mathbf{k}}| = t_0 / t$,

$$k_F = 2t_0 / 3ta_0 \quad (t_0 \ll t)$$

$$\hat{U} = \frac{1}{2}(\hat{\tau}_x + \hat{\tau}_z)(\hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_z) = \hat{U}^{-1}$$

унитарное преобразование,
диагонализующее $\hat{H}_{0\mathbf{k}}$



Y-H. Ho et al., APL 97, 101905 (2010), P.L. de Andres et al., PRB 77, 045403 (2008), E. Prada et al., Solid State Commun. 151, 1075 (2011)

**В отсутствие допирования
имеется идеальный нестинг!**

Антиферромагнитное состояние

$$H_{\text{int}} = U \sum_{nia} n_{nia\uparrow} n_{nia\downarrow} ; a = A, B, i = 1, 2 - \text{одноцентровое кулоновское отталкивание}$$

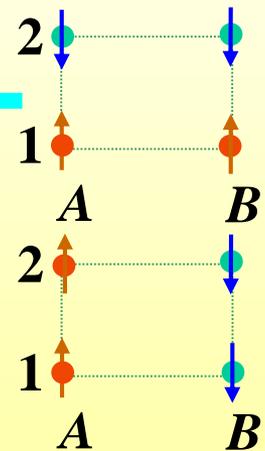
$U \sim 5-10$ эВ (например, 9 эВ, T. Wehling et al., PRL 106, 236805 (2011)).

$$n_{nia\sigma} = n_{ia\sigma} + \delta n_{nia\sigma}, \quad n_{ia\sigma} = \langle n_{nia\sigma} \rangle, \quad \delta n_{nia\sigma} = n_{nia\sigma} - n_{ia\sigma}$$

$$H_{\text{int}}^{MF} = U \sum_{nia\sigma} n_{ia-\sigma} \cdot n_{nia\sigma} - UN_c \sum_{ia} n_{ia\uparrow} n_{ia\downarrow}$$

АФМ типа А открывает щель (при больших U) в точке Γ

АФМ типа С открывает щель в точке Дирака (K)

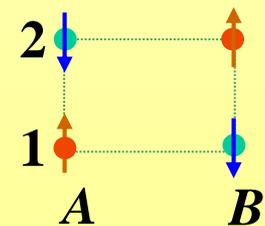


АФМ типа G открывает щель на уровне Ферми

$$\begin{cases} n_{1A\uparrow} = n_{2B\uparrow} = n_{2A\downarrow} = n_{1B\downarrow} = (1 + \Delta n)/2, \\ n_{1A\downarrow} = n_{2B\downarrow} = n_{2A\uparrow} = n_{1B\uparrow} = (1 - \Delta n)/2 \end{cases}$$

$$\Delta_{\mathbf{k}\downarrow}^{zz} = -\Delta_{\mathbf{k}\uparrow}^{zz} = \Delta,$$

$$\Delta = U\Delta n / 2$$



Эволюция АФМ щели

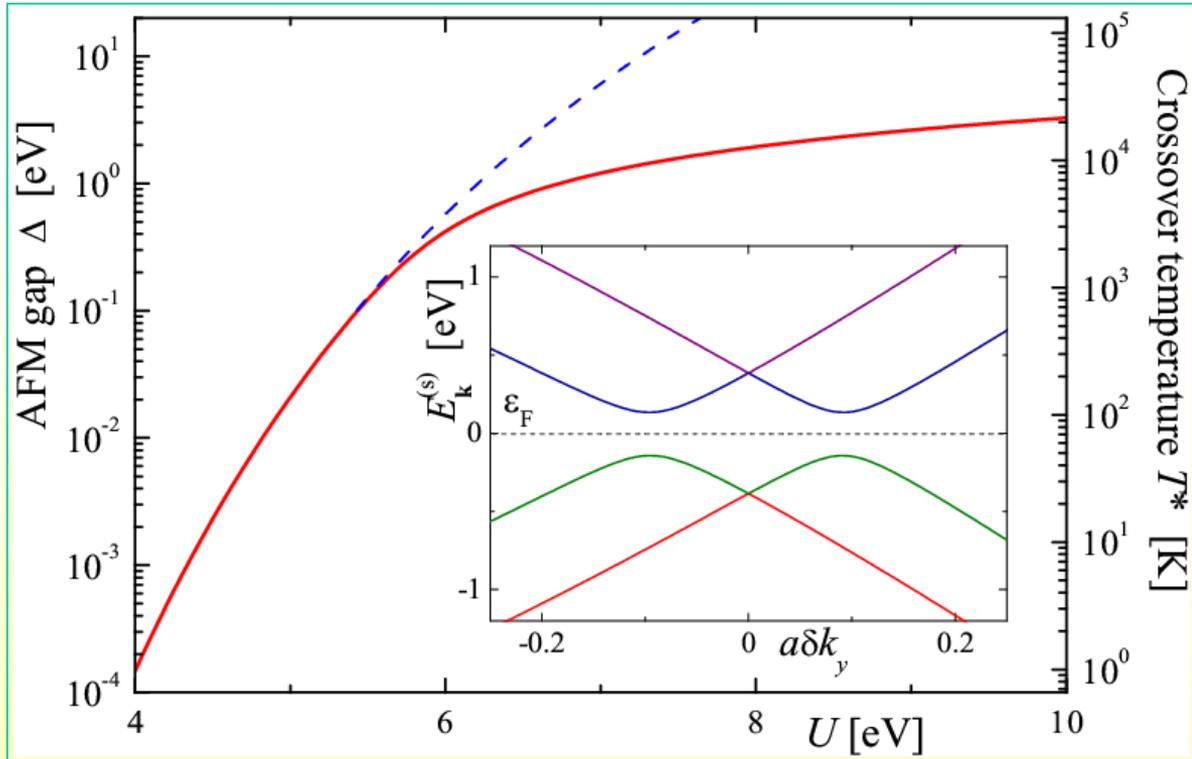
$$E_{\mathbf{k}\sigma}^{(1,4)} = -t_g |f_{\mathbf{k}}| \mp \sqrt{\Delta^2 + (t|f_{\mathbf{k}}| + t_0)^2},$$

$$E_{\mathbf{k}\sigma}^{(2,3)} = +t_g |f_{\mathbf{k}}| \mp \sqrt{\Delta^2 + (t|f_{\mathbf{k}}| - t_0)^2}$$

$$n_{1A\uparrow} = \frac{1}{2} + \frac{\Delta}{U} = \sum_{s=1,2} \int \frac{d\mathbf{k}}{V_{BZ}} |v_{1\mathbf{k}\uparrow}^{(s)}|^2,$$

$$\hat{H}_{\mathbf{k}\sigma} \vec{v}^{(s)} = E_{\mathbf{k}\sigma}^{(s)} \vec{v}^{(s)}$$

$$\rho_0(\xi) = \int \frac{d\mathbf{k}}{V_{BZ}} \delta(\xi - |f_{\mathbf{k}}|) \equiv t\rho_{gr}(t\xi)$$

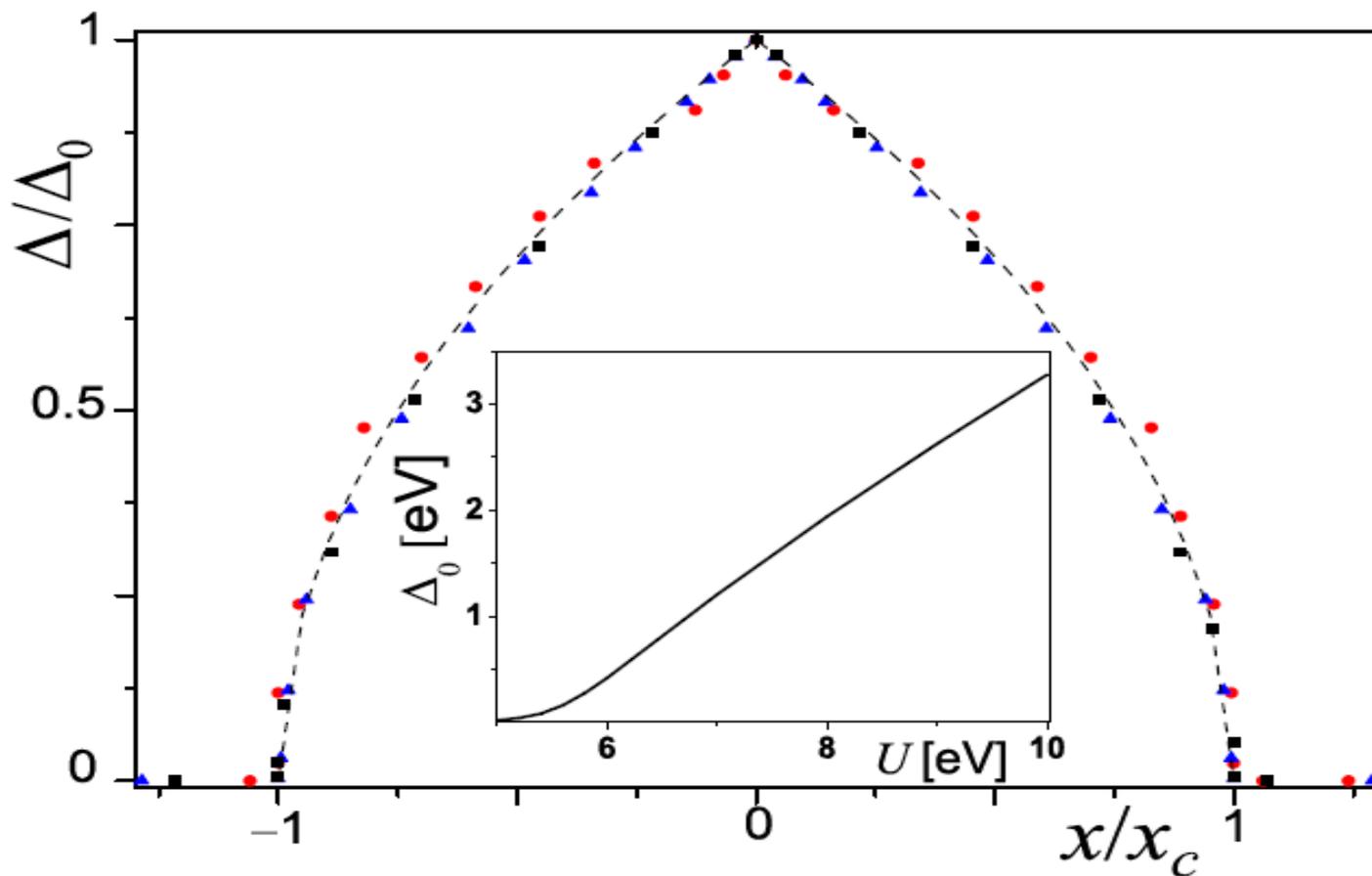


$$\int_0^3 d\xi \left[\frac{\rho_0(\xi)}{\sqrt{\delta^2 + (\xi + \xi_0)^2}} + \frac{\rho_0(\xi)}{\sqrt{\delta^2 + (\xi - \xi_0)^2}} \right] = \frac{4t}{U}, \quad \delta = \frac{\Delta}{t}, \quad \xi_0 = \frac{t_0}{t}$$

$$\Delta = 2\sqrt{t_0(3t - t_0)} \exp\left\{ -\frac{4t - U\eta(\xi_0)}{2U\rho_0(\xi_0)} \right\}, \quad \eta(\xi_0) = \int_0^3 d\xi \left[\frac{\rho_0(\xi)}{\xi + \xi_0} + \frac{\rho_0(\xi) - \rho_0(\xi_0)}{|\xi - \xi_0|} \right]$$

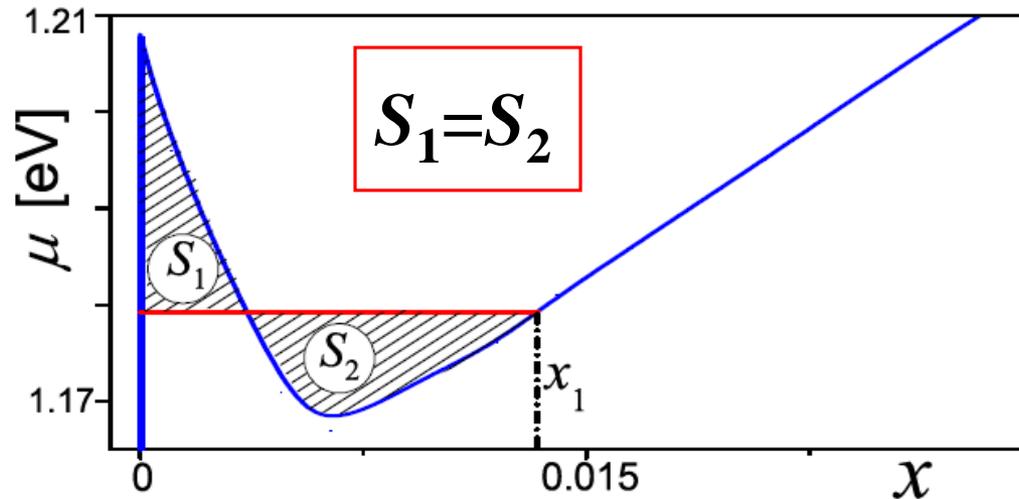
Температура перехода $T_N^{MF} = \frac{\sqrt{1 - (t_g/t)^2}}{C} \Delta, \quad C = \pi e^{-\gamma} \approx 1.764$

Зависимость AFM щели от допирования



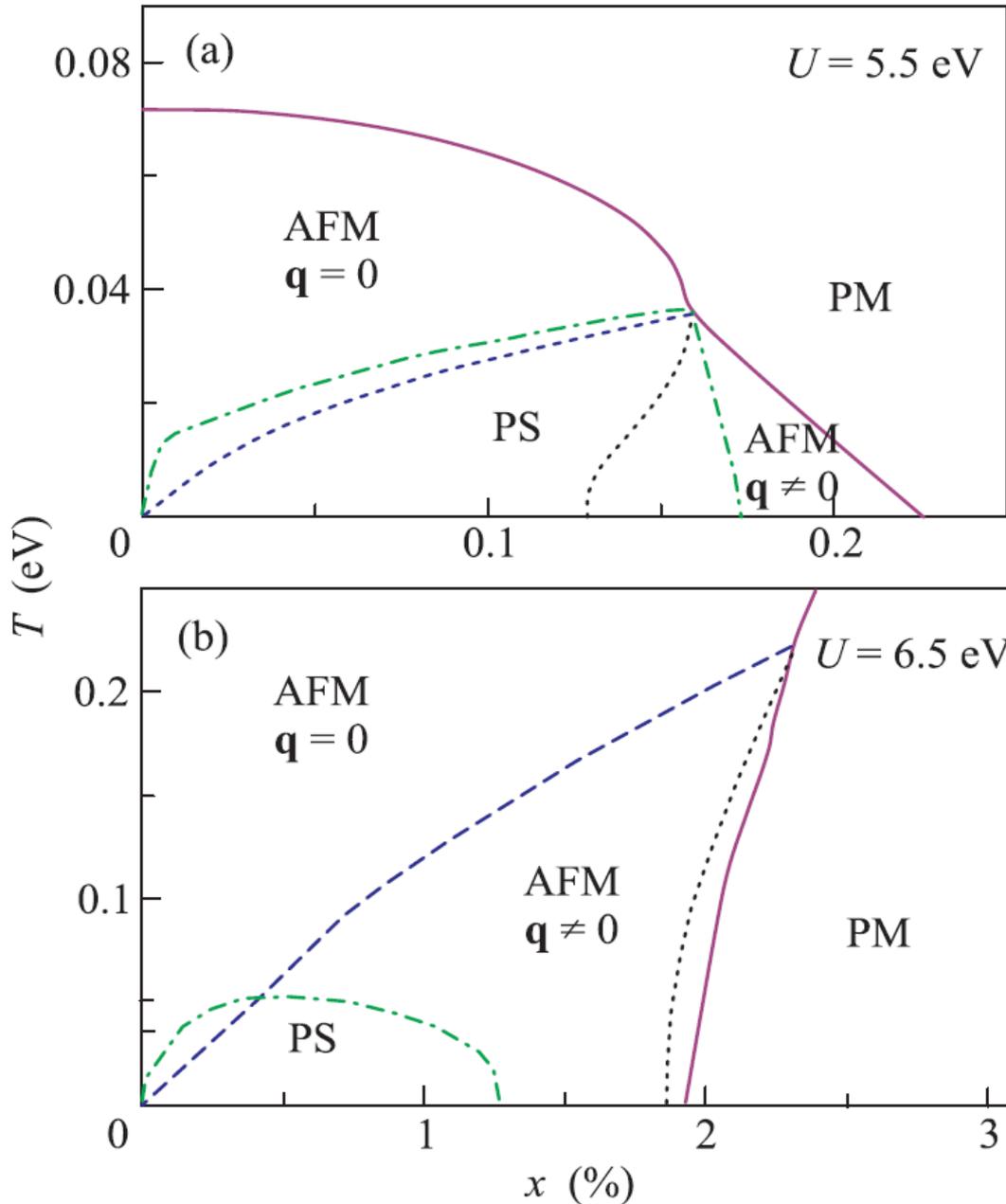
AFM щель уменьшается с ростом уровня допирования и обращается в нуль при $|x| > x_c$. Точки отвечают численным расчётам, а штриховая кривая – аналитической формуле.

Зависимость химического потенциала от допирования



Вначале химический потенциал резко возрастает поскольку в верхней зоне появляются носители тока. Затем $\mu(x)$ уменьшается за счёт сужения щели. Когда щель закрывается, $\mu(x)$ растёт благодаря повышению уровня Ферми. Немонотонное поведение $\mu(x)$ свидетельствует о неустойчивости однородного состояния и о возможности фазового расслоения. Построение Максвелла предсказывает наличие неоднородного состояния, включающего области с $x_0 = 0$ (AFM диэлектрик) и $x = x_1$ (металл).

Фазовая диаграмма двухслойного AA графена



Сплошная **красная линия** – температура перехода из AFM в парамагнитное (PM) состояние; **синяя штриховая линия** – температура, при которой происходит переход из соизмеримой в несоизмеримую AFM-фазу. Чёрный пунктир – температура AFM перехода, вычисленная без учёта существования несоизмеримой AFM фазы. **Зелёная штрихпунктирная линия** ограничивает область неоднородного состояния (PS).

Промежуточные выводы. IV

- ❖ Расчёты по методу сильной связи показывают, что двухслойный AA-графен имеет одну электронную и одну дырочную зоны и поверхности Ферми, отвечающие этим зонам совпадают.
- ❖ Такое вырождение приводит к неустойчивости основного состояния относительно целого набора состояний с нарушенной симметрией.
- ❖ В случае сильного одноцентрового кулоновского отталкивания, характерного для графена, наиболее устойчивым оказывается антиферромагнитное состояние.
- ❖ Допирование разрушает однородное антиферромагнитное состояние и приводит к фазовому расслоению и переходу диэлектрик металл.

Влияние давления

В нашей модели основной эффект, связанный с давлением P , состоит в относительном сдвиге зон. Пусть дно немагнитной зоны смещается на $\delta\epsilon$. Соответствующий сдвиг химпотенциала $\mu(P) - \mu(0)$. При этом полное число носителей тока в расчёте на элементарную ячейку не меняется, а изменение числа немагнитных носителей

$$\delta n_r = 2N_r \mathcal{V}_e [\mu(P) - \mu(0) - \delta\epsilon]$$

\mathcal{V}_e - объём элементарной ячейки

Предполагается линейная зависимость от давления (идеальный нестинг при $P = P_n$ и нулевом допировании $x = 0$)

$$\delta\epsilon(P) = \frac{\partial\epsilon_{\min}^c}{\partial P} (P - P_n)$$

Уравнение на химпотенциал при $x = 0$

$$rp = \frac{r\mu}{\Delta_0} + \frac{1}{\Delta_0} \int_0^{\infty} d\xi [f_F(\eta - \mu) - f_F(\eta + \mu)]$$

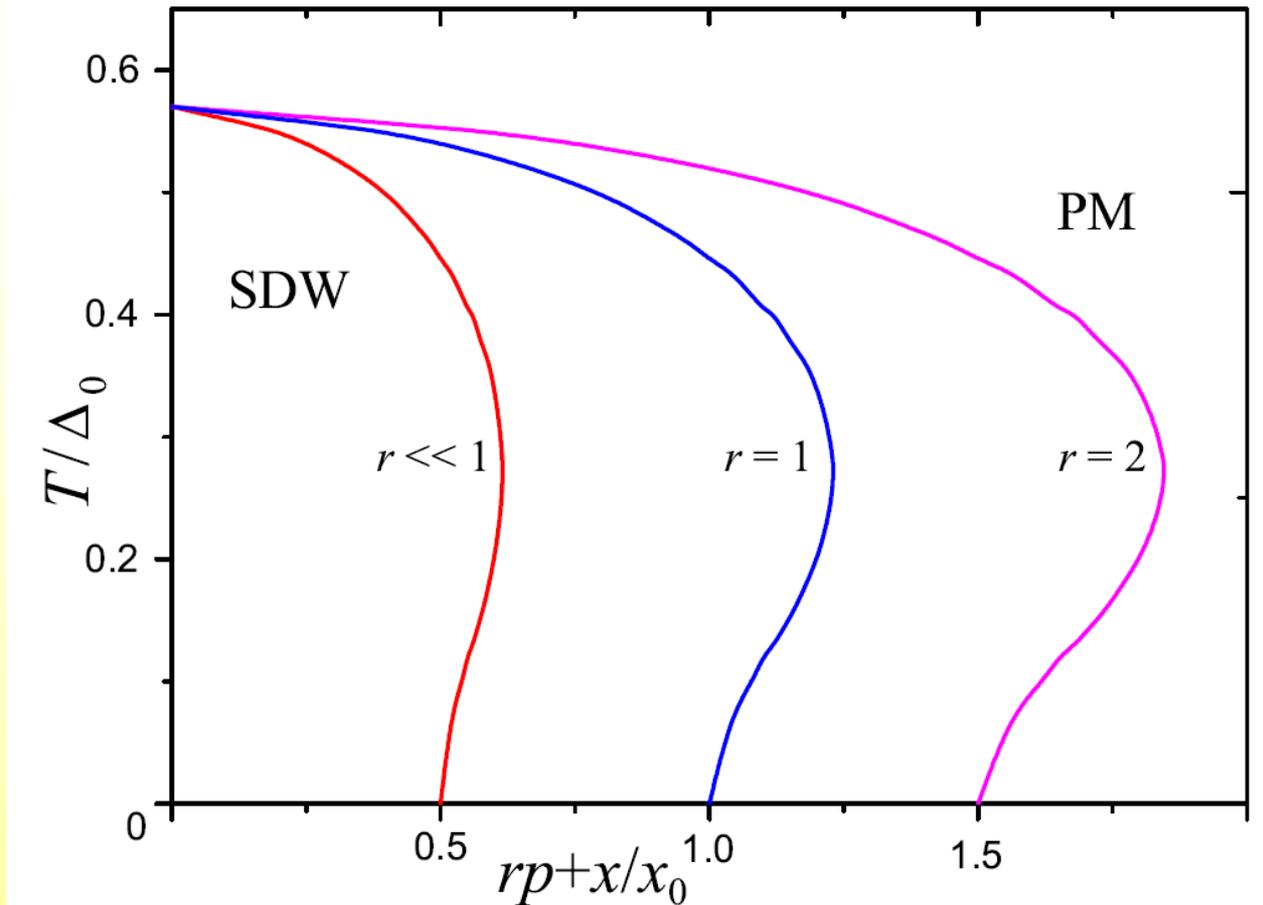
$$p = \frac{\partial\epsilon_{\min}^c}{\partial P} \frac{P - P_n}{\Delta_0}$$

безразмерное давление

$$r \equiv n = N_r / 2N_m$$

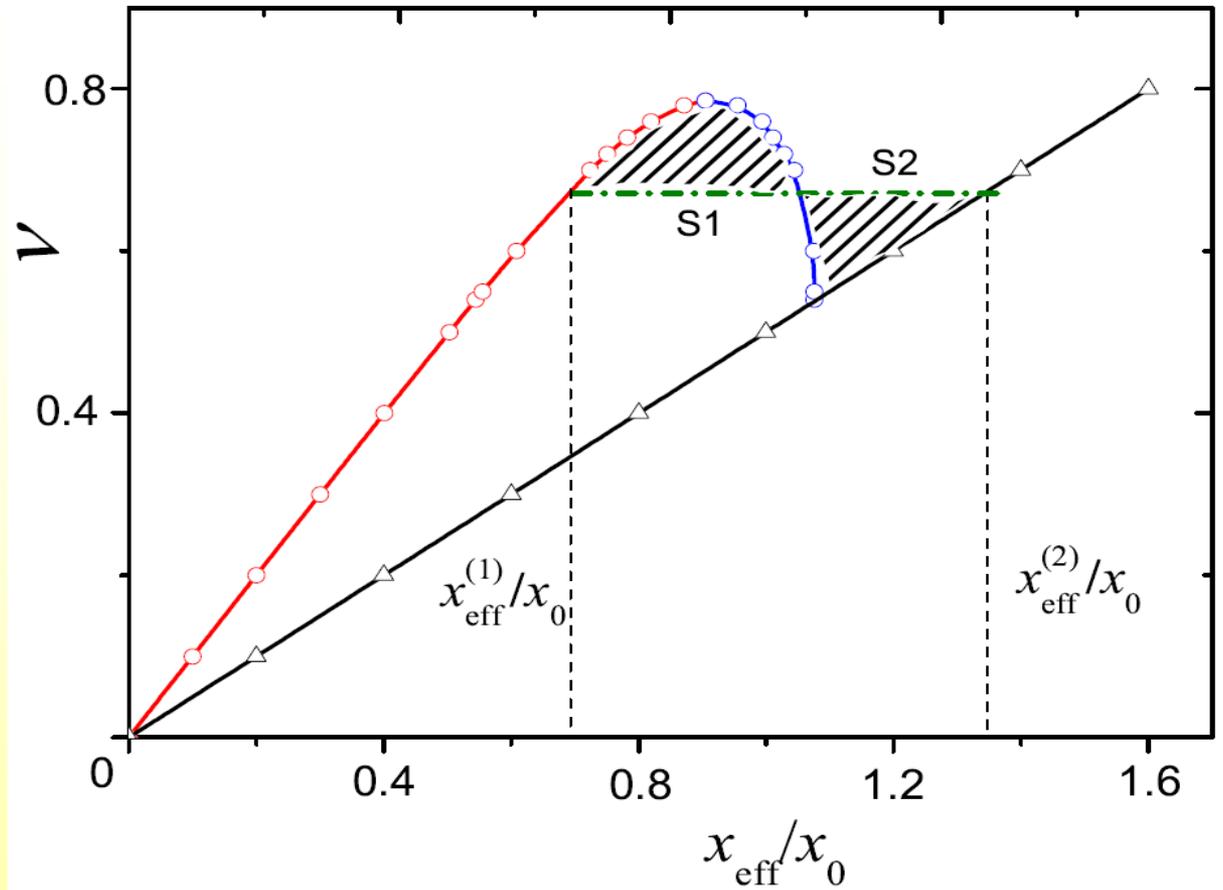
при $x \neq 0$ $rp \rightarrow x_{\text{eff}}/x_0 = rp + x/x_0$, $x_0 = 4\Delta_0 N_m$

Фазовая диаграмма при отсутствии фазового расслоения



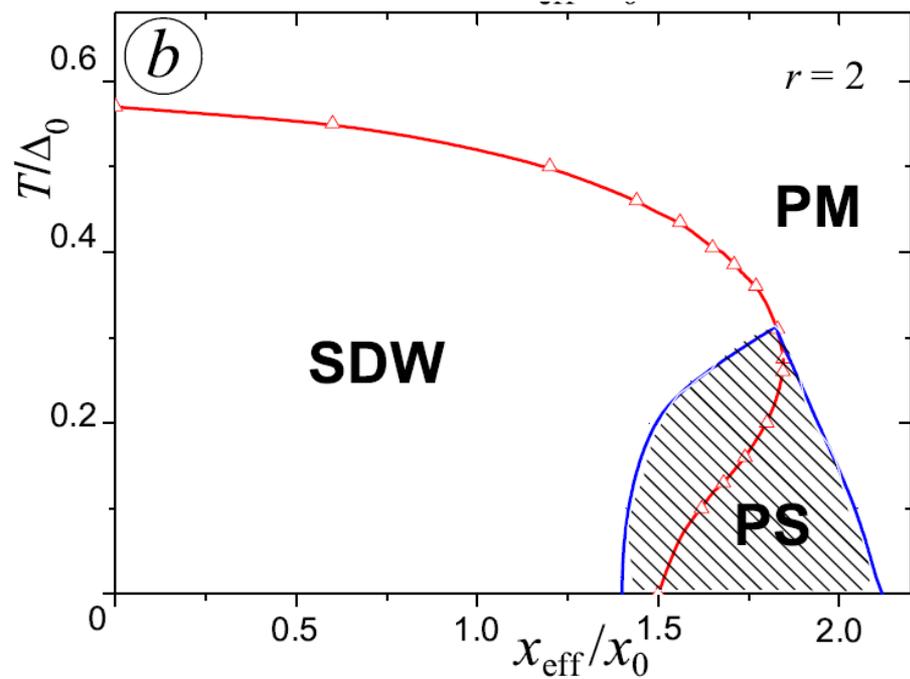
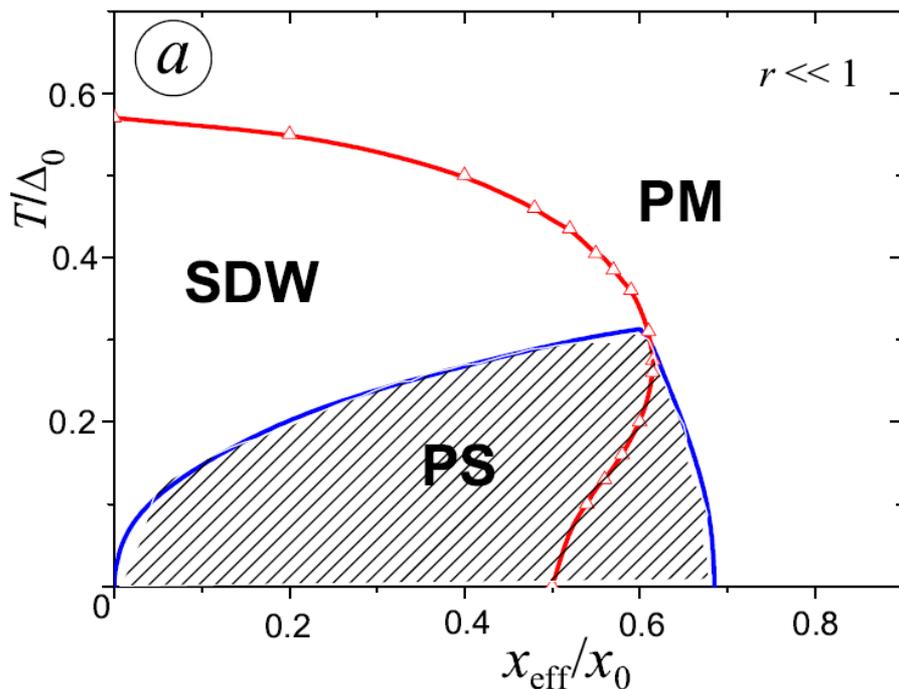
Фазовая диаграмма температура-давление при различных значениях отношения плотностей состояний немагнитных и магнитных носителей тока r , $x_{eff}/x_0 = rp + x/x_0$ - линейная функция давления P .

Поведение химпотенциала и фазовое расслоение



Зависимость эффективного химпотенциала $\nu = \mu/\Delta_0$ от эффективного уровня допирования, характеризующего отклонение от идеального нестинга; $T/\Delta_0 = 0.1$, $r = 1$. Линии с кружками отвечают SDW фазе, а с треугольниками – парамагнитной фазе. Штриховка иллюстрирует построение Максвелла.

Фазовая диаграмма при учёте фазового расслоения



Фазовая диаграмма модели на плоскости (x_{eff}, T) при $r \ll 1$ (a) and $r = 2$ (b). Красная линия с треугольниками - граница устойчивости однородной SDW фазы. Заштрихованные области отвечают фазовому расслоению (PS).

Структура неоднородного состояния

Конкретные размеры R и форма неоднородностей находятся путём совместной минимизации энергии дальнегодействующего кулоновского взаимодействия, обусловленной зарядовой неоднородностью ($\sim 1/R$), и поверхностной энергии ($\sim R^2$).

Используется приближение Вигнера-Зейца система разбивается на электронейтральные ячейки, где сердцевина одной фазы окружена оболочкой из другой фазы.

Рассматриваются три возможных конфигурации: капли ($D = 3$), цилиндры ($D = 2$) и слои ($D = 1$).

Характерные размеры неоднородностей

$$R_s = \left[\frac{\sigma \varepsilon}{2e^2 x_0^2} \cdot \frac{cD}{(x_1 - x_2)^2 u_D(c)} \right]^{1/3},$$

R_s – радиус капли ($D = 3$), радиус цилиндра ($D = 2$) и полуширина слоя ($D = 1$). ε средняя диэлектрическая проницаемость, σ – поверхностное натяжение на границе фаз, c – относительная доля парамагнитной металлической фазы.

$$u_3(c) = \frac{4\pi c}{5} \left(2 - 3c^{1/3} + c \right) \quad \text{капли}$$

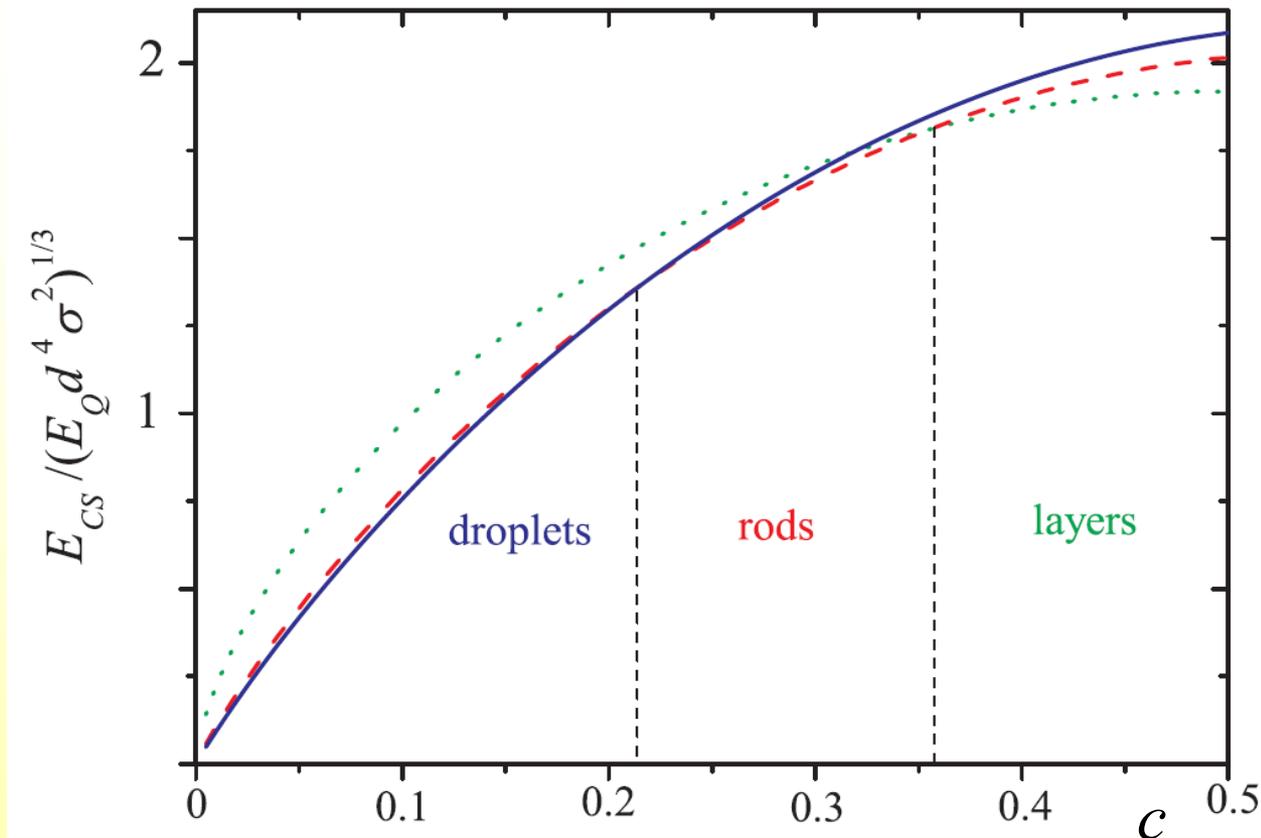
$$u_2(c) = \pi c (-\ln c + c - 1) \quad \text{цилиндры}$$

$$u_1(c) = \frac{4\pi}{3} (1 - c)^2 \quad \text{слои}$$

Связь c с давлением p

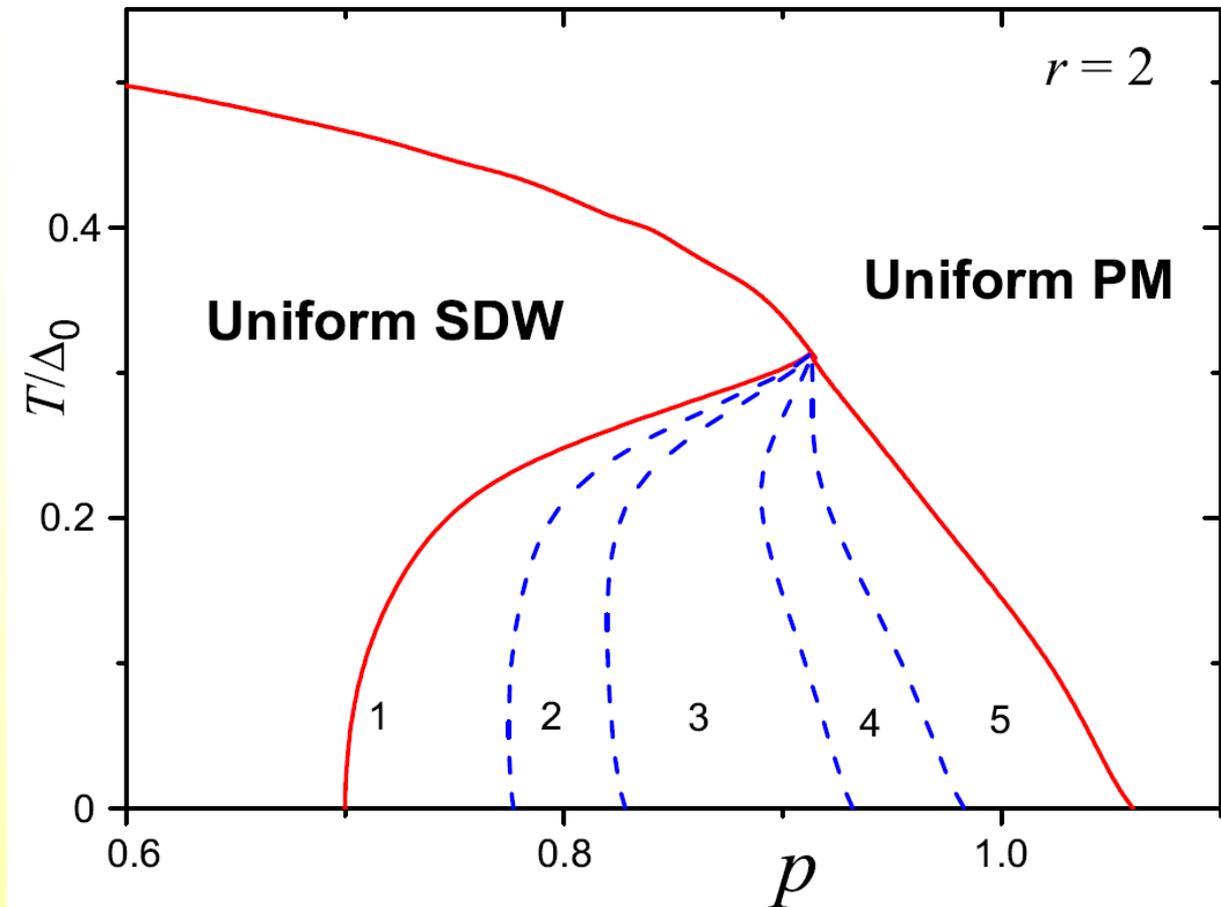
$$c = \frac{rx_0 p - x_{\text{eff}}^{(1)}}{x_{\text{eff}}^{(2)} - x_{\text{eff}}^{(1)}}$$

Энергии неоднородностей различной формы



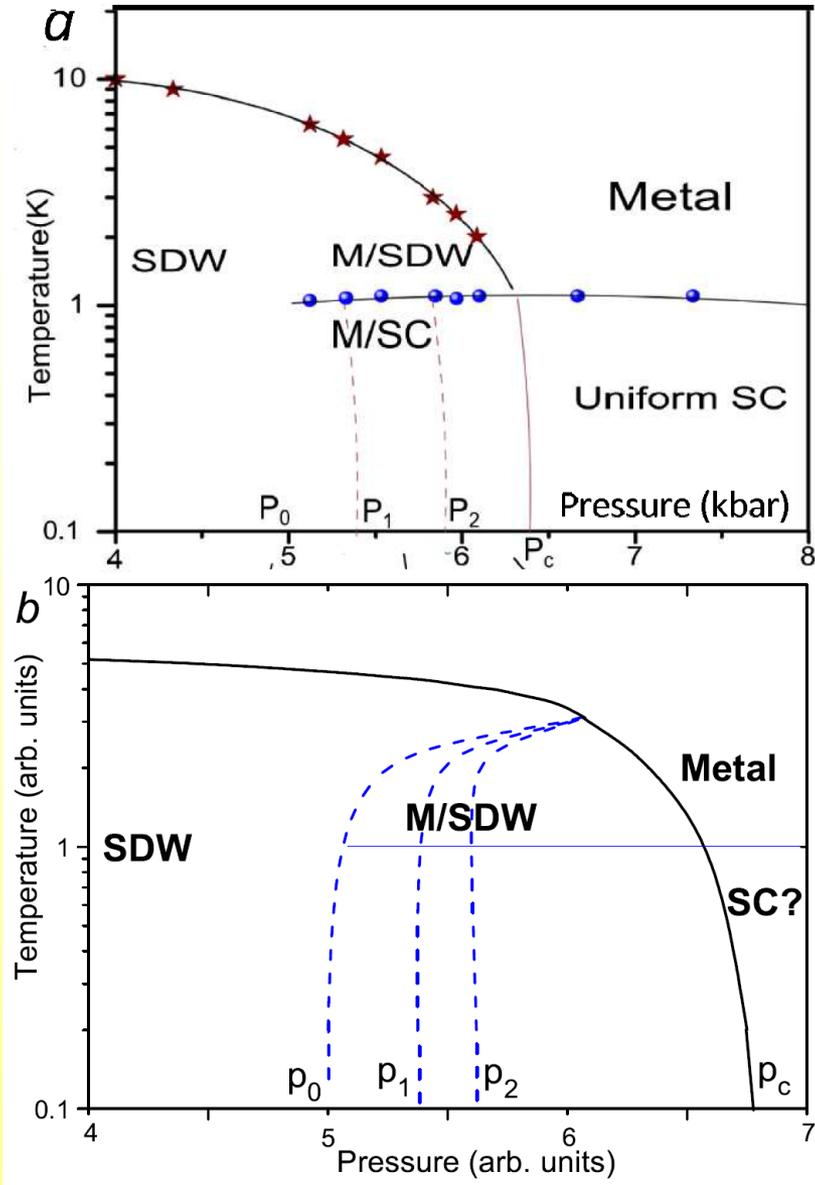
Нормированные энергии неоднородностей различной формы в зависимости от относительной доли c парамагнитной металлической фазы при $c < 0.5$. Синяя сплошная, красная штриховая и синяя пунктирная линии, отвечают неоднородностям в форме капель, цилиндров и слоёв, соответственно. Графики для $c > 0.5$ получаются зеркальным отражением относительно вертикали $c = 0.5$.

Фазы с различной структурой неоднородностей



(P, T) фазовая диаграмма при $x = 0$ и $r = 2$. Сплошные красные линии отвечают границам однородных SDW и парамагнитной (PM) фаз. Синие штриховые линии – границы неоднородных фаз с различными типами неоднородностей: 1 – PM капли и 2 – PM цилиндры в SDW матрице; 3 – чередующиеся PM и SDW слои; 4 – SDW цилиндры и 5 – SDW капли в PM матрице.

Фазовые диаграммы: теория и эксперимент



(а) Экспериментальная фазовая диаграмма из А. Narayanan et al., PRL 112, 146402 (2014) для соли Бехгарда $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$. Однородная SDW фаза существует при $P < P_0$, а фазовое расслоение (PS) при $P_0 < P < P_c$. При $P_0 < P < P_1$ PS состояние – металлические капли в SDW матрице, при $P_1 < P < P_2$ капли превращаются в цилиндры, а при $P_2 < P < P_c$ – в слои. При $P > P_c$ образец переходит в металлическое состояние. Металл становится сверхпроводником при $T < T_c$, синяя кривая с кружками - $T_c(P)$.

(б) Соответствующая теоретическая фазовая диаграмма.

Промежуточные выводы. V

- ❖ Проанализировано влияние давления на электронные характеристики и фазовое расслоение в системах с неидеальным нестингом листов поверхности Ферми.
- ❖ Взаимодействие электронов, отвечающих листам поверхности Ферми с нестингом, приводит к формированию состояния с волной зарядовой плотности (SDW).
- ❖ Под действием давления изменяется относительное расположение электронных зон, что приводит к уменьшению SDW параметра порядка и к фазовому расслоению на области SDW диэлектрика и парамагнитного металла.
- ❖ Конкретная геометрия фазовых неоднородностей зависит от объёмной концентрации парамагнитного металла и соответственно от давления. Полученные результаты дают возможность выявить физические механизмы наблюдаемых на эксперименте особенностей фазового расслоения, в частности, в солях Бехгарда.

Заключительные замечания

Возникновение неоднородных электронных состояний (электронное фазовое расслоение) является довольно общей чертой систем с неидеальным нестингом.

Нестинг эффективно усиливает взаимодействие между носителями заряда, и электронное фазовое расслоение, которое обычно считается характерной чертой систем с сильными электронными корреляциями, проявляется при наличии нестинга даже в пределе слабой связи.

Среди материалов, которые могут быть отнесены к рассматриваемому классу, находятся хром и его сплавы, сверхпроводящие железосодержащие пниктиды, системы на основе графена, а также не рассматриваемые в данном докладе гексабориды, органические металлы и другие интересные и интенсивно изучаемые вещества.

Подробности в миниобзоре:

«Неоднородные электронные состояния в системах с неидеальным нестингом»,

**А.Л.Рахманов, К.И.Кугель, М.Ю.Каган, А.В.Рожков, А.О.Сбойчаков,
Письма в ЖЭТФ 105, 768-779 (2017)**