Письма в ЖЭТФ, том 112, вып. 11, с. 764 – 773 © 2020 г. 10 декабря

Новые полуметаллические состояния в системах с волнами спиновой и зарядовой плотности (Миниобзор)

А. В. Рожков[+*1)], *А. О. Сбойчаков*[+], *Д. А. Хохлов*[+], *А. Л. Рахманов*[+], *К. И. Кугель*[+]

[+]*Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, 125412 Москва, Россия*

[*]*Сколковский институт науки и технологии, Сколковский центр инноваций, 143026 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 27 октября 2020 г.
После переработки 29 октября 2020 г.
Принята к публикации 29 октября 2020 г.

В данном кратком обзоре рассматривается недавно предложенный механизм стабилизации полуметаллических состояний в легированных системах с нестингом листов поверхности Ферми. Описываются характерные особенности таких состояний. Кроме этого, обсуждается теоретически сформулированный метод обнаружения этих состояний с помощью неупругого нейтронного рассеяния.

DOI: 10.31857/S1234567820230093

1. Введение. Современные успехи кристаллохимии подталкивают исследователей к поиску новых необычных многочастичных электронных состояний. Хорошо известные примеры материалов, в которых проявляются такие состояния, это топологические диэлектрики и вейлевские полуметаллы. Ферромагнитные полуметаллические соединения (в англоязычной литературе “*half-metals*”) представляют собой еще один класс веществ, в котором реализуется необычная электронная фаза. Для таких материалов характерна идеальная спиновая поляризация носителей тока на поверхности Ферми: все одночастичные состояния, находящиеся на уровне Ферми, имеют одинаковые проекции спина. Состояния с противоположным значением проекции спина отделены от энергии Ферми конечной щелью. Приставка “полу-” в названии этой группы материалов указывает на то, что из двух возможных проекций спина, доступных электрону на уровне Ферми обычного металла, только одна реализуется в полуметаллическом соединении.

Возможность полуметалличности изначально была продемонстрирована с помощью численных методов в работе [1] де Гроота и др., где была рассчитана спин-зависимая плотность состояний для NiMnSb. Расчеты показали, что только одна компонента спина отвечает конечной плотности состояний на уровне Ферми.

С момента публикации первоначальной работы эта область исследований значительно выросла. Полуметаллические свойства были экспериментально подтверждены уже у нескольких материалов (например, NiMnSb [2], $La_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3$ [3], CrO_2 [4], Co_2MnSi [5] и др.). Развиваются и теоретические исследования [6–9]. Рассматриваются возможные приложения полуметаллов в спинтронике (спиновый вентиль [10], спиновая инжекция [11], гибридные сверхпроводящие устройства [12] и т.д.). Кроме этого, в последние годы появилось новое направление исследований. Его можно кратко описать как поиск “безметалличных полуметаллов”. Другими словами, это попытка найти полуметаллические системы, которые, в отличие от всех ныне известных “классических” полуметаллов, не содержали бы атомов переходных металлов. Поскольку переходные металлы экологически небезопасны и могут вызвать аллергию (например, никель является известным аллергеном), полуметалл, не содержащий таких химических элементов, мог бы применяться в областях, где требуется биосовместимость и экологичность.

Одна из хорошо известных теоретических моделей такого типа – это графеновая нанолента в поперечном электрическом поле [13]. Недавно были сформулированы и другие теоретические предложения [14–17]. Кроме этого, совершенно неожиданно оказалось, что полуметаллические состояния можно стабилизировать в моделях с неидеальным нестингом листов поверхности Ферми.

Нестинг листов поверхности Ферми – важная и популярная концепция. Она активно обсуждается в физике конденсированного состояния [18]. Существование двух фрагментов поверхности Ферми, совме-

[1)]e-mail: arozhkov@gmail.com

щающихся при параллельном переносе на некоторый вектор импульсного пространства **Q**, указывает на неустойчивость состояния ферми-жидкости. Эта неустойчивость приводит к возникновению волны плотности (либо спина, либо заряда), характеризующейся вектором пространственной модуляции **Q**. Гамильтонианы с нестингом широко используются для описания волны зарядовой плотности (ВЗП) [19, 20], волны спиновой плотности (ВСП) [21, 22], механизма высокотемпературной сверхпроводимости [23–25] и т.д. Возникновение неоднородного состояния электронной жидкости также неоднократно увязывалось с нестингом. Так, в работах [26–33] было теоретически продемонстрировано, что легирование системы с идеальным или почти идеальным нестингом может вызвать неустойчивость однородного состояния электронной жидкости.

Несмотря на годы исследований (а теоретические модели с нестингом изучались, как минимум, еще в 1970-х гг.) оказывается, что возможность стабилизации полуметаллических состояний в системах с нестингом до недавнего времени [34, 35] оставалась незамеченной. Механизм полуметалличности, предложенный в работах [34, 35], основан на слабом межэлектронном взаимодействии. Отсутствие требования на сильное взаимодействие означает, что такой механизм может работать в материалах, состоящих только из легких атомов, т.е., он может служить полезным ориентиром при поиске полуметаллических систем без переходных металлов. Ниже мы кратко рассмотрим теорию полуметаллических состояний в моделях с нестингом. Кроме этого, будет обсуждаться предложение [36] использовать неупругое рассеяние нейтронов в качестве инструмента для идентификации полуметаллических состояний в таких системах.

2. Модель. Сначала мы запишем гамильтониан нашей модели. Мы будем рассматривать двухзонную систему с кинетической энергией, которая задается следующим оператором:

$$H_{\rm e} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon^a(\mathbf{k})\psi^\dagger_{\mathbf{k}a\sigma}\psi_{\mathbf{k}a\sigma} + \varepsilon^b(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_0)\psi^\dagger_{\mathbf{k}b\sigma}\psi_{\mathbf{k}b\sigma}. \quad (1)$$

Зоны, которые мы будем также называть "долины", обозначаются символами a и b, индекс σ – проекция спина на ось Oz. Импульс в зоне a измеряется от начала координат, а в зоне b – от $\mathbf{Q}_0$, где $\mathbf{Q}_0$ – это вектор нестинга. Энергетические спектры электронной зоны a и дырочной зоны b имеют вид (см. также рис. 1a)

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

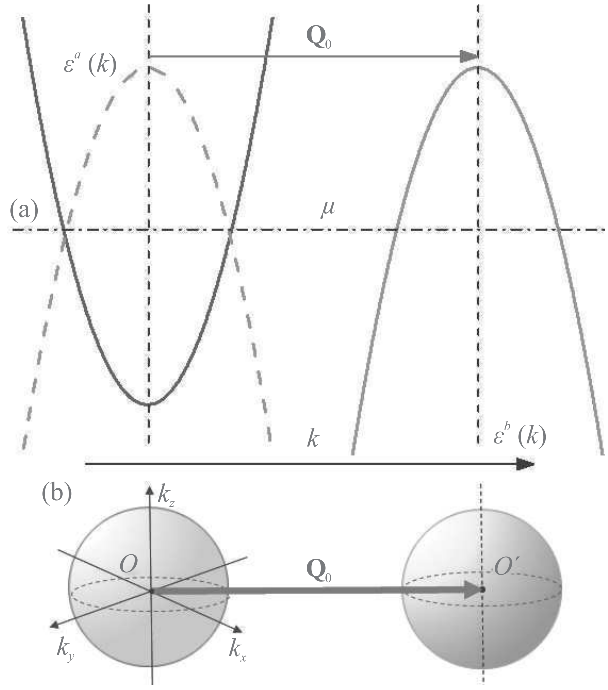

Рис. 1. (Цветной онлайн) Электронные зоны модели при нулевом электрон-электронном взаимодействии и нулевом легировании. (a) – Электронная зона $\varepsilon^a(\mathbf{k})$ и дырочная зона $\varepsilon^b(\mathbf{k})$ показаны сплошными кривыми. Штриховая парабола – это дырочная зона, сдвинутая на вектор нестинга $\mathbf{Q}_0$. По вертикальной оси отложена энергия, по горизонтальной оси – квазиимпульс. Уровень Ферми μ показан горизонтальной штрихпунктирной линией. (b) – Сферические поверхности Ферми электронной и дырочной зон. Сферы совпадают, если перевести одну из них на вектор нестинга

$$\varepsilon^b + \mu(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_0) = -\frac{\mathbf{k}^2}{2m_b} + \varepsilon^b_{\rm max} - \mu,\ \varepsilon^b_{\rm min} < \varepsilon^b < \varepsilon^b_{\rm max}. \quad (3)$$

Ниже для простоты мы будем предполагать идеальную электрон-дырочную симметрию $m_a = m_b = m$ и $\varepsilon^b_{\rm max} = -\varepsilon^a_{\rm min} = \varepsilon_{\rm F}$. Когда $\mu = 0$, листы поверхности Ферми для зон a и b представляют собой сферы (см. рис. 1a) с одинаковым импульсом Ферми $k_{\rm F} = \sqrt{2m\varepsilon_{\rm F}}$ и одинаковой плотностью состояний (на одну проекцию спина) $N_{\rm F} = mk_{\rm F}/(2\pi^2)$ на уровне Ферми. Это состояние удобно рассматривать как нелегированное. Чтобы учесть легирование, значение μ должно отклониться от нуля. Ниже, $\varepsilon_{\rm F}$, $k_{\rm F}$, а также $N_{\rm F}$ будет использоваться для обозначения энергии Ферми, импульса Ферми и плотности состояний для нелегированного образца. В качестве исторического замечания мы хотели бы упомянуть работу Райса [37], в которой гамильтониан (1) был использован для описания несоизмеримой ВСП в хроме.

Состояние с $\mu = 0$ (нулевое легирование) отвечает идеальному нестингу: после переноса электронной поверхности Ферми на вектор $\mathbf{Q}_0$, электронный лист полностью совпадает с дырочным, см. рис. 1.

Для учета электрон-электронного взаимодействия полный гамильтониан системы записывается как

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{\text{int}}, \tag{4}$$

где член $\hat{H}_{\text{int}}$ описывает взаимодействие между квазичастицами. В случае поверхности Ферми с нестингом, электронная жидкость становится неустойчивой по отношению к формированию состояния с волной плотности. Для описания данной неустойчивости достаточно рассмотреть только электрон-дырочное взаимодействие. При этом для простоты мы полагаем его локальным:

$$\hat{H}_{\text{int}} = \hat{H}_{\text{dir}} + \hat{H}_{\text{ex}}, \tag{5}$$

$$\hat{H}_{\text{dir}} = g \int d^3\mathbf{r} \sum_{\sigma\sigma'} \psi^\dagger_{a\sigma}(\mathbf{r})\, \psi_{a\sigma}(\mathbf{r})\, \psi^\dagger_{b\sigma'}(\mathbf{r})\, \psi_{b\sigma'}(\mathbf{r}), \tag{6}$$

$$\hat{H}_{\text{ex}} = g_\perp \int d^3\mathbf{r} \sum_{\sigma\sigma'} \psi^\dagger_{a\sigma}(\mathbf{r})\psi_{b\sigma}(\mathbf{r})\psi^\dagger_{b\sigma'}(\mathbf{r})\psi_{a\sigma'}(\mathbf{r}). \tag{7}$$

В этих выражениях $\psi_{\alpha\sigma}(\mathbf{r})$ обозначает обычный фермионный полевой оператор для зоны $\alpha\,(= a, b)$, а $\mathbf{r}$ обозначает пространственную координату. Слагаемое $\hat{H}_{\text{dir}}$ описывает прямое взаимодействие плотность–плотность, а $\hat{H}_{\text{ex}}$ – обменный вклад. Будем предполагать, что постоянные электрон-дырочного взаимодействия g и $g_\perp$ малы (gN_{F}, $g_\perp N_{\text{F}} \ll 1$) и соответствуют отталкиванию (g, $g_\perp > 0$).

3. Волна спиновой плотности. Гамильтониан (4) можно использовать для описания спонтанного образования низкотемпературного упорядоченного состояния с волной плотности в ситуации идеального нестинга (т.е., при $\mu = 0$). Начнем с ВСП. В рамках сформулированной модели свободная энергия ВСП всегда ниже, чем свободная энергия для ВЗП. (Для перехода в фазу ВЗП необходимо, например, добавить в гамильтониан (4) электрон-решеточное взаимодействие.) В режиме слабой связи упорядоченная фаза ВСП хорошо описывается теорией среднего поля типа БКШ.

Конструируя теорию среднего поля, удобно сгруппировать электронные операторы в два сектора, далее обозначаемых индексом $\sigma = \pm 1/2$ (или $\sigma = \uparrow, \downarrow$): сектор σ состоит из $\psi_{a\sigma}$ и $\psi_{b\bar{\sigma}}$ (где $\bar{\sigma}$ обозначает $-\sigma$). Важно отметить, что в приближении среднего поля при нулевой температуре гамильтониан приобретает блок-диагональную форму, идеально расщепляясь на два сектора, определенных выше. При этом параметр порядка в секторе σ равен

$$\Delta_\sigma = \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left\langle \psi^\dagger_{\mathbf{k}a\sigma}\, \psi_{\mathbf{k}b\bar{\sigma}} \right\rangle, \tag{8}$$

где V – объем системы, треугольные скобки $\langle \ldots \rangle$ обозначают взятие матричного элемента по отношению к основному состоянию. Поскольку центры электронной и дырочной зон разделены в обратном пространстве вектором нестинга $\mathbf{Q}_0$, параметр порядка Δ_σ осциллирует в пространстве с волновым вектором $\mathbf{Q}_0$.

В рамках подхода среднего поля только прямое взаимодействие (6) дает вклад в энергию ВСП. Обменный член (7) не может быть выражен в виде произведения двух билинейных комбинаций вида $\psi^\dagger_{a\sigma}\, \psi_{b\bar{\sigma}}$, которые входят в определение параметра порядка (8). Следовательно, в простейшем приближении обменным взаимодействием $\hat{H}_{\text{ex}}$ можно пренебречь. Таким образом, среднеполевой гамильтониан можно переписать в следующем виде:

$$\hat{H}_{\text{SDW}} = \sum_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \left[\varepsilon^\alpha(\mathbf{k}) \psi^\dagger_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \psi_{\mathbf{k}\alpha\sigma} - \Delta_\sigma \psi^\dagger_{\mathbf{k}\bar{\alpha}\bar{\sigma}} \psi_{\mathbf{k}\alpha\sigma} + \frac{\Delta_\sigma^2}{g} \right], \tag{9}$$

где $\alpha = a, b$, а $\bar{\alpha}$ означает "не α". Спектр гамильтониана $\hat{H}_{\text{SDW}}$ легко находится

$$E^{(1,2)}_{\mathbf{k}\sigma} = \mp \sqrt{\varepsilon^2_{\mathbf{k}} + \Delta^2_\sigma}, \tag{10}$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}} = k^2/2m - \varepsilon_{\text{F}}$. Этот спектр показан на рис. 2а.

Равновесные параметры системы могут быть получены путем минимизации большого термодинамического потенциала. Для гамильтониана среднего поля находим выражение для этого термодинамического потенциала в виде:

$$\Omega_\sigma = \frac{\Delta^2_\sigma V}{g} - \sum_{\mathbf{k}} \left[\mu - E^{(1)}_{\mathbf{k}\sigma} + \left(\mu - E^{(2)}_{\mathbf{k}\sigma} \right) \theta\left(\mu - E^{(2)}_{\mathbf{k}\sigma} \right) \right]. \tag{11}$$

Символ $\theta(z)$ обозначает функцию Хевисайда. В равновесии параметр порядка Δ_σ минимизирует $\Omega_\sigma(\Delta_\sigma)$:

$$\frac{\partial \Omega_\sigma}{\partial \Delta_\sigma} = 0. \tag{12}$$

Это уравнение можно использовать для вычисления Δ_σ. Прямые расчеты показывают, что при нулевом допировании $\Delta_\uparrow = \Delta_\downarrow = \Delta_0$, где

$$\Delta_0 \approx \varepsilon_{\text{F}} \exp\left(-1/gN_{\text{F}}\right). \tag{13}$$

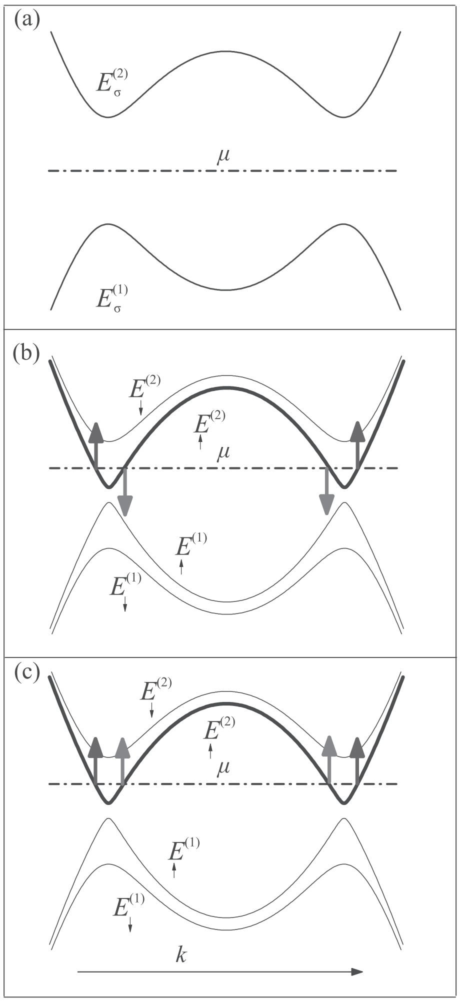

Рис. 2. (Цветной онлайн) Электронная зонная структура для диэлектрических и полуметаллических состояний. По вертикальной оси отложена энергия, а по горизонтальной оси – импульс. Уровень Ферми μ показан горизонтальными штрихпунктирными линиями. (a) – Если легирование отсутствует ($x = 0$), основным состоянием, в зависимости от параметров модели, является или диэлектрическая ВСП, или диэлектрическая ВЗП. Сектора при этом вырождены ($\Delta_\uparrow \equiv \Delta_\downarrow$). Энергии электронных и дырочных зон $E_\sigma^{(1,2)}$ даются формулой (10). (b) и (c) – если $x > 0$, секторы больше не вырождены ($\Delta_\uparrow < \mu < \Delta_\downarrow \equiv \Delta_0$), с накоплением заряда в секторе $\uparrow$, в нем появляется поверхность Ферми. Спиновая поляризация (синие и красные стрелки) листов поверхности Ферми на панели (b) соответствуют спин-долинному полуметаллу (возникает при легировании ВСП), а на панели (c) – обычному полуметаллу (возникает при легировании ВЗП)

Знакомая структура этого выражения является следствием того, что в каждом секторе процедура среднего поля математически эквивалентна расчетам в рамках теории БКШ.

Полная поляризация ВСП в реальном пространстве направлена по оси x и равна:

$$\langle S^x(\mathbf{r})\rangle = \frac{2\Delta_0}{g}\cos(\mathbf{Q}_0\mathbf{r}). \tag{14}$$

4. Легирование ВСП. Легирование сдвигает химический потенциал от нуля и подавляет идеальный нестинг. Число низкоэнергетических состояний, конкурирующих друг с другом, увеличивается: например, несоизмеримая ВСП и неоднородные фазы рассматривались в работах [28–30, 37–42] как основные состояния гамильтониана (4) и его модификаций. Как будет показано ниже, к этому списку следует добавить и полуметаллические состояния.

Для описания состояния с ненулевым уровнем легирования x удобно ввести парциальные уровни легирования

$$x_\sigma = -\frac{\partial\Omega_\sigma}{\partial\mu}, \tag{15}$$

где x_σ – это количество заряда, аккумулированное в секторе σ. Парциальные уровни легирования удовлетворяют очевидному равенству

$$x_\uparrow + x_\downarrow = x. \tag{16}$$

Таким образом, при конечном x необходимо решить уравнения (12) и (15) при условии (16) для того, чтобы определить μ и Δ_σ как функции x.

Выражения (11) и (12) применимы при условии, что состояние системы остается однородным, а ВСП остается соизмеримой даже при наличии легирования. Заметим, что разные электронные карманы обычно расположены вблизи точек высокой симметрии зоны Бриллюэна. Таким образом, вектор $\mathbf{Q}_0$ связан с базовой структурой решетки, поэтому параметр порядка, даваемый выражением (14), можно назвать соизмеримым: он осциллирует в пространстве с волновым вектором, связанным с периодичностью кристалла. При ненулевом легировании мы можем попытаться добиться более глубокой оптимизации энергии, варьируя не только параметр порядка, но и вектор трансляции

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0 + \delta\mathbf{Q}. \tag{17}$$

Если вектор $\delta\mathbf{Q}$ конечен, то получившееся состояние ВСП мы будем называть несоизмеримым.

Пользуясь независимостью двух секторов, легко найти [27, 38, 41] для соизмеримой ВСП

$$\Delta_\sigma = \Delta_0\sqrt{1 - \frac{x_\sigma}{N_\mathrm{F}\Delta_0}}, \quad \mu = \Delta_0 - \frac{x_\sigma}{2N_\mathrm{F}}. \tag{18}$$

Иными словами, заряд, накапливающийся в секторе σ, подавляет параметр порядка в данном секторе. Более того, Δ_σ обращается в нуль, когда $x_\sigma \geq x_0$, где

$$x_0 = N_{\rm F}\Delta_0. \tag{19}$$

Состояния, описываемые формулами (18), хорошо известны. В моделях со слабым дальнодействующим кулоновским взаимодействием (или вообще без такового) рассматриваемые фазы неустойчивы по отношению к спонтанному образованию пространственно неоднородных структур. Это уже можно понять из того факта, что химический потенциал является убывающей функцией легирования. Неоднородные фазы, возникающие из-за слабого де-неснинга, изучаются как теоретически [26–33], так и экспериментально [43–48].

Если же предположить, что кулоновское взаимодействие не только присутствует, но и достаточно сильно, чтобы полностью предотвратить нарушение электронейтральности на мезоскопических масштабах, пространственная однородность вынужденно восстанавливается. Именно последний сценарий мы будем обсуждать ниже.

5. Спин-долинный полуметалл. Если предположить, как это часто делалось в литературе, что электроны, внесенные в систему при легировании, равномерно распределяются по обоим секторам, т.е.

$$x_\uparrow = x_\downarrow = \frac{x}{2}, \tag{20}$$

мы с неизбежностью получим, что

$$\Delta_\uparrow = \Delta_\downarrow. \tag{21}$$

Однако, как было объяснено в работах [34, 35], условие (20) не является оптимальным с точки зрения термодинамики. Для того, чтобы это продемонстрировать, мы перейдем от большого термодинамического потенциала к свободной энергии F, что упростит задачу поиска основного состояния при фиксированном x. В нашей ситуации полная свободная энергия равна сумме парциальных свободных энергий $F = \sum_\sigma F_\sigma$, где парциальная свободная энергия в секторе σ,

$$F_\sigma(x_\sigma) = \Omega_\sigma(\mu(x_\sigma)) + \mu(x_\sigma)x_\sigma, \tag{22}$$

равна

$$F_\sigma(x_\sigma) = -\frac{1}{2}N_{\rm F}\Delta_0^2 + \int\limits_0^{x_\sigma} dx'\mu(x'). \tag{23}$$

Тогда для полной свободной энергии системы получаем:

$$\frac{F}{V} = \sum_\sigma \frac{F_\sigma}{V} = -N_{\rm F}\Delta_0^2 + \Delta_0 x - \frac{x_\uparrow^2 + x_\downarrow^2}{4N_{\rm F}}. \tag{24}$$

Здесь лишь третий член чувствителен к распределению электронов по секторам. Минимизируя его, мы находим, что основное состояние при фиксированном уровне легирования x достигается, если $x_\sigma = x$ и $x_{\bar\sigma} = 0$. Другими словами, при фиксированном x в исследуемом классе пространственно-однородных состояний наиболее устойчивое соответствует случаю, когда весь внесенный за счет легирования заряд аккумулируется в одном секторе. Второй же сектор оказывается совершенно свободен от внесенных носителей.

Такое распределение зарядов снимает вырождение между секторами $\sigma = \uparrow$ и $\sigma = \downarrow$, и равенство (21) больше не верно. Предположим для определенности, что весь внесенный заряд сосредоточился в секторе $\sigma = \uparrow$. Тогда, если уровень легирования не слишком высок ($x < x_0$), получаем следующие соотношения:

$$\Delta_\uparrow(x) = \Delta_0\sqrt{1 - \frac{x}{N_{\rm F}\Delta_0}}, \quad \Delta_\downarrow(x) = \Delta_0. \tag{25}$$

Мы видим, что в секторе $\downarrow$ величина щели остается нечувствительной к уровню допирования, при этом химический потенциал

$$\mu = \Delta_0 - \frac{x}{2N_{\rm F}} \tag{26}$$

лежит внутри этой щели. Иными словами, сектор $\downarrow$ является диэлектрическим, тогда как в секторе $\uparrow$ появляется поверхность Ферми, задаваемая уравнением

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 = [\mu(x)]^2 - [\Delta_\uparrow(x)]^2, \text{ или } k = k_{\rm F}\sqrt{1 \pm \frac{\Delta_0}{2\varepsilon_{\rm F}}\frac{x}{x_0}}. \tag{27}$$

Схематически эта поверхность Ферми представлена на рис. 2b.

Собственно, наличие одного диэлектрического и одного проводящего сектора и отличает полуметалл от обычного металла. Однако предъявленное состояние не является “классическим” полуметаллом. Легко убедиться, что поверхность Ферми не обладает спиновой поляризацией. Действительно, в сектор $\uparrow$ входят электронные состояния с обеими проекциями спина. Однако можно ввести новое спин-долинное квантовое число (см. следующий раздел), по отношению к которому поверхность Ферми будет обладать идеальной поляризацией. Чтобы отличить рассматриваемое полуметаллическое состояние от “классического” полуметалла, мы будем называть исследуемый тип полуметалла “спин-долинным”.

6. Свойства полуметаллического состояния. Спин-долинный полуметалл, введенный в предыдущем разделе, обладает рядом необычных свойств, которые будут кратко рассмотрены ниже. Определим спин-долинный оператор $\hat{S}_{\rm v}$ следующим образом:

$$\hat{S}_{\rm v} = \sum_{\alpha\sigma} \sigma \nu_\alpha \hat{N}_{\alpha\sigma}, \tag{28}$$

где оператор

$$\hat{N}_{\alpha\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \psi^\dagger_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \psi_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \tag{29}$$

описывает количество электронов со спином σ в долине α. Числовой индекс ν_α определяется следующим правилом $\nu_a = 1$, $\nu_b = -1$. Обратим внимание, что определение (28) по структуре похоже на определение проекции спина на ось z, которое дается выражением

$$\hat{S} = \sum_{\alpha\sigma} \sigma \hat{N}_{\alpha\sigma}, \tag{30}$$

однако спины в разных долинах входят в сумму в уравнении (28) с разными знаками.

Легко проверить, что

$$[\hat{S}, \psi^\dagger_{\alpha\sigma}] = \sigma \psi^\dagger_{\alpha\sigma}, \qquad [\hat{S}_{\rm v}, \psi^\dagger_{\alpha\sigma}] = \sigma \nu_\alpha \psi^\dagger_{\alpha\sigma}. \tag{31}$$

Иначе говоря, любой полевой оператор может быть охарактеризован не только спиновым квантовым числом σ, но и спин-долинным квантовым числом $\sigma\nu_\alpha$. Для введенных выше секторов легко проверить, что в рамках сектора σ оба поля $\psi_{a\sigma}$ и $\psi_{b\bar{\sigma}}$ обладают одним и тем же значением спин-долинного числа. Поэтому поверхность Ферми, заданная уравнением (27), обладает идеальной поляризацией в смысле $\hat{S}_{\rm v}$. Последнее обстоятельство подразумевает, что электрический ток через исследуемую систему переносит не только электрический заряд, но и спин-долинный квант.

Также легко убедиться, что вследствие накопления заряда лишь в одном секторе, полное спин-долинное квантовое число всего образца растет пропорционально x

$$\hat{S}_{\rm v} \propto x. \tag{32}$$

Это означает, что, подобно “классическому” полуметаллу, являющемуся ферромагнетиком, спин-долинный полуметалл является “спин-долинным магнетиком”. При нарушении электрон-дырочной симметрии накопление “спин-долинного заряда” сопровождается также ростом ферромагнитной составляющей намагниченности.

7. Обобщения модели. В предыдущем разделе мы описали простейшую теоретическую конструкцию, позволяющую получить полуметаллическое состояние. Ниже мы обсудим некоторые обобщения и усложнения этого подхода.

В частности, мы предполагали, что уровень легирования не слишком высок, т.е., выполнено условие $x < x_0$. Что же происходит при нарушении данного неравенства? Этот вопрос изучался в работе [35]. В ней показано, что спин-долинный полуметалл существует и при более высоких уровнях легирования, вплоть до $2x_0$. Однако, при $x = x_0$ в системе происходит фазовый переход второго рода, вызванный занулением параметра порядка $\Delta_\uparrow$. Полуметаллическая фаза исчезает, когда уровень легирования превзойдет $2x_0$. При этом происходит фазовый переход первого рода. Если $x > 2x_0$, то в модели реализуется обычный парамагнитный металл.

Еще одно упрощение, использованное выше, сводилось к рассмотрению лишь соизмеримой ВСП. Это предположение принципиально упрощало выкладки, что позволило вывести соотношения (25) и (26). Однако в рамках рассматриваемой модели несоизмеримая фаза более выгодна, чем соизмеримая. Вектор $\mathbf{Q}$, определяемый уравнением (17), для несоизмеримой волны отличается от $\mathbf{Q}_0$. Это приводит к принципиальному возрастанию сложности уравнений самосогласования. Для них уже не удается найти аналитические решения, которые можно было бы проанализировать явным образом. Анализ же полученных численных решений показывает, что полуметаллическая фаза совместима с несоизмеримостью вектора нестинга. До тех пор, пока уровень легирования не превосходит $1.8x_0$, система находится в спин-долинной полуметаллической фазе с несоизмеримым параметром порядка. Если же $x > 1.8x_0$, происходит переход первого рода, при котором восстанавливается симметрия между секторами, и спин-долинная полуметаллическая фаза сменяется металлическим состоянием, существующим на фоне параметра порядка несоизмеримой ВСП.

Приведенные выше результаты показывают, что в рассматриваемой модели спин-долинный полуметалл достаточно устойчив, чтобы выдержать наиболее очевидные модификации модели. Конечно же, остаются вопросы об устойчивости по отношению к другим возмущениям и обобщениям гамильтониана и других параметров модели.

8. Легирование ВЗП. Гамильтониан (4) допускает метастабильную фазу ВЗП в качестве одного из среднеполевых состояний (сделаем ремарку, что для перевода ВЗП из метастабильного в устойчивое состояние необходимо добавить в модель электрон-решеточное взаимодействие, чего мы в данной работе делать не будем). Чтобы описать ВЗП, достаточно заметить, что параметр порядка ВСП переходит в параметр порядка ВЗП при замене

$$\psi_{b\uparrow} \to \psi_{b\downarrow}, \quad \psi_{b\downarrow} \to \psi_{b\uparrow}. \tag{33}$$

Действительно, в результате такой подстановки

$$\sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle \psi^\dagger_{\mathbf{k}a\sigma} \psi_{\mathbf{k}b\bar{\sigma}} \rangle \to \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle \psi^\dagger_{\mathbf{k}a\sigma} \psi_{\mathbf{k}b\sigma} \rangle, \tag{34}$$

что и приводит к указанной выше замене ВСП на ВЗП:

$$2\langle \hat{S}^x(\mathbf{r}) \rangle \to \langle \hat{\rho}(\mathbf{r}) \rangle. \tag{35}$$

Строить отдельную теорию для легированной ВЗП нет необходимости: замена (33) позволяет с легкостью адаптировать результаты для ВСП к описанию ВЗП. В частности, это позволяет нам утверждать, что легирование ВЗП приводит к возникновению полуметаллического состояния. Поскольку замена (33) переводит $\hat{S}_{\rm v}$ в $\hat{S}$, и наоборот можно также догадаться, что спин-долинный полуметалл, возникающий при легировании ВСП, окажется "классическим" полуметаллом при легировании ВЗП, см. рис. 2с. Для такой полуметаллической фазы аналог уравнения (32) запишется как $\hat{S} \propto x$, т.е., ферромагнитная намагниченность растет пропорционально x.

9. Нейтронная спектроскопия спин-долинного полуметалла. Идентификация полуметаллического состояния – непростой экспериментальный вопрос. В работе [36] была рассмотрена возможность использования нейтронного рассеяния для выявления спин-долиного полуметалла в веществе-кандидате. Основная теоретическая идея предложенного метода основана на следующем наблюдении. Нелегированная ВСП обладает лишь одним каналом неупругого рассеяния – электрон из полностью заполненной зоны забрасывается в полностью пустую. После легирования возможны два варианта. Если легированная система не перешла в полуметаллическое состояние, и вырождение между секторами сохранилось, то появляется всего лишь один дополнительный канал, соответствующий рассеянию внутри частично заполненной зоны. В том случае, когда легированная система перешла полуметаллическую фазу, открываются пять каналов рассеяния (схематически показаны на рис. 3). Столь значительное увеличение возможностей для рассеяния в полуметаллическом состоянии может быть использовано для идентификации такого состояния в экспериментах по неупругому рассеянию.

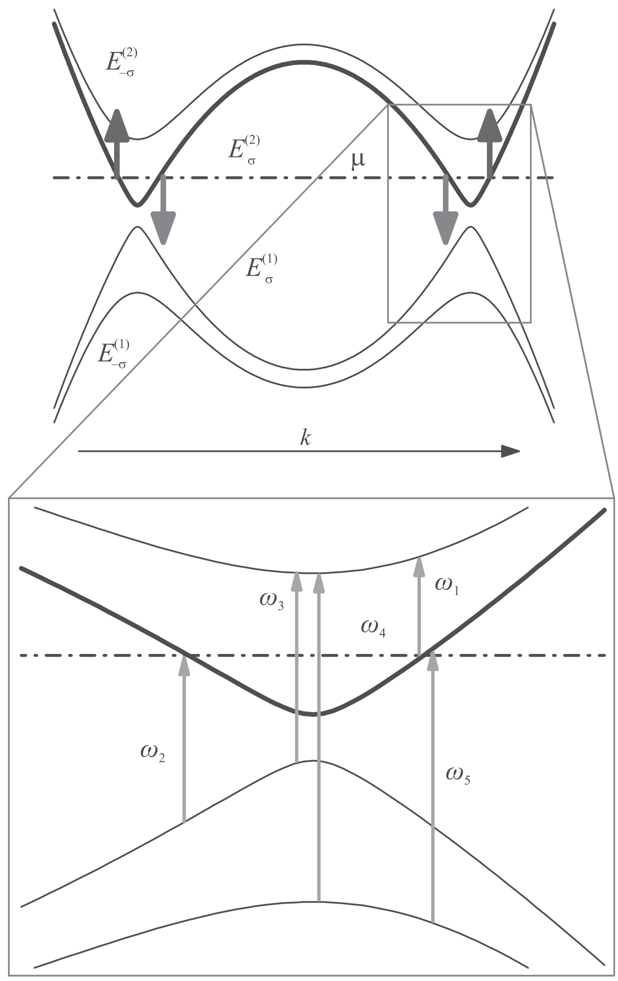

Рис. 3. (Цветной онлайн) На верхней панели представлен спектр спин-долинного полуметалла (совпадает с рис. 2b), а на нижней панели отмечены одноэлектронные каналы неупругого рассеяния (обозначены вертикальными стрелками и символами $\omega_{1,\ldots,5}$)

Чувствительность нейтронного рассеяния к спиновым матричным элементам, которые имеют свои особенности в ВСП и в спин-долинном полуметалле, является дополнительной привлекательной чертой.

Спектры нейтронного рассеяния были рассчитаны в рамках формализма Кубо. Спектр для легированной ВСП показан на рис. 4. Виден как низкочастотный внутризонный пик, так и высокочастотная полоса поглощения, начинающаяся при преодолении одноэлектронной щели. Спектр для полуметалла представлен на рис. 5. Он гораздо сложнее и содержит следы всех пяти каналов неупругого рассеяния.

Нами также было показано, что в полуметаллической фазе у тензора рассеяния возникают компоненты, недиагональные по спиновым индексам. Ин-

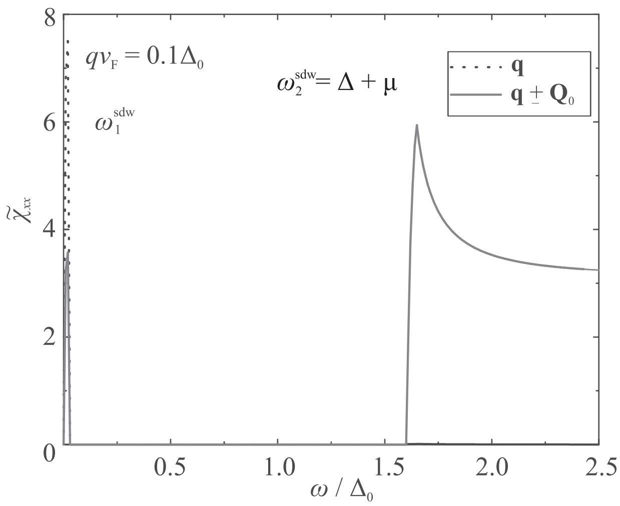

Рис. 4. (Цветной онлайн) Спектр неупругого нейтронного рассеяния на системе с легированной ВСП, при переданном импульсе **q** (сплошная красная линия) и при переданном импульсе $\mathbf{q} \pm \mathbf{Q}_0$ (пунктирная черная линия). Видны низкоэнергетические пики, связанные с внутризонным рассеянием (отмечены символом $\omega_1^{\rm sdw}$). При преодолении пороговой энергии, равной $\omega_2^{\rm sdw} = \Delta + \mu$, открывается межзонный канал рассеяния, дающий широкую спектральную полосу

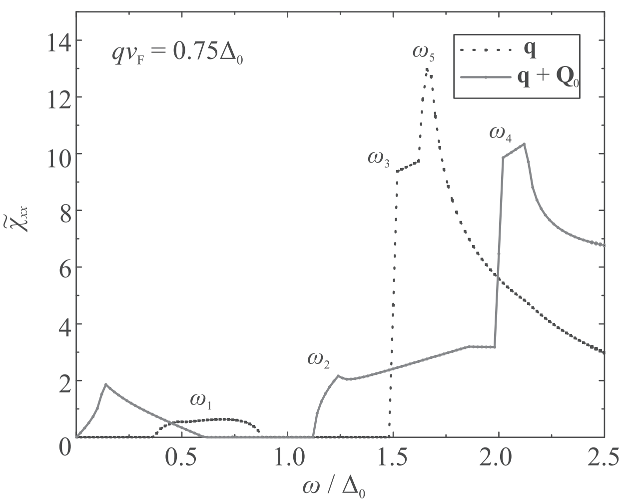

Рис. 5. (Цветной онлайн) Спектр неупругого нейтронного рассеяния на спин-долинном полуметалле, при переданном импульсе **q** (сплошная красная линия) и при переданном импульсе $\mathbf{q} \pm \mathbf{Q}_0$ (пунктирная черная линия). Детали спектра, связанные с открытием канала ω_i, где $i = 1, ..., 5$ (см. также рис. 3), отмечены соответствующими символами

тересно, что для возникновения этих компонент требуется также отклонение от идеальной электрон-дырочной симметрии, которой обладает наша модель при $m_a = m_b$. Возникновение ненулевых недиагональных элементов в нейтронном рассеянии может служить еще одной "визитной карточкой" спин-долинного полуметалла.

10. Обсуждение и заключение. Несмотря на то, что гамильтонианы с нестингом не являются новыми объектами в теоретической физике, наши недавние исследования показывают, что вопрос о свойствах описываемых ими систем далеко не закрыт. Как оказалось, такие гамильтонианы допускают существование состояний с экзотическим нарушением симметрии по спиновым и орбитальным (долинным) индексам. Возникающее полуметаллическое состояние демонстрирует необычную поляризацию по отношению к спин-долинному оператору, причем по мере того, как растет уровень легирования, эта поляризация также увеличивается. Кроме этого, текущий по образцу ток переносит не только электрический заряд, но также и спин-долинный квант. Возможность переносить экзотические квантовые числа привлекает внимание исследователей, так что спин-долинный полуметалл может представлять интерес для широкой аудитории физиков, как теоретиков, так и экспериментаторов.

Достаточно сильное дальнодействующее кулоновское отталкивание – это принципиальное требование для стабилизации полуметаллических состояний в моделях с нестингом. Его роль – предотвратить возникновение пространственно-неоднородных фаз, в которые система пытается "свалиться" при легировании. Можно сказать, что при запрете на фазовое расслоение в реальном пространстве, электронная жидкость организует расслоение в пространстве дискретных индексов, спиновом и долинном. Вследствие такого "расслоения" изначальная симметрия между секторами пропадает.

Наши рассуждения показывают, что материал, в котором можно было бы реализовать спин-долинный полуметалл, должен удовлетворять ряду условий: достаточно сильное кулоновское взаимодействие, наличие нестинга, а также возможность котроля качества нестинга с помощью внешнего воздействия. В наших моделях качество нестинга управлялось легированием. В экспериментах для этого часто используется также давление [47, 48] или магнитное поле [43–45]. Поиск подходящих веществ потребует согласованных усилий как теоретиков, так и экспериментаторов. Но даже в том случае, когда вещество-кандидат идентифицировано, исчерпывающе продемонстрировать полуметалличность электронного состояния может оказаться не так уж и просто. В качестве возможного косвенного диагностического инструмента для идентификации полуметалличности мы предложили использовать неупругое нейтронное рассеяние.

В заключение, в данном обзоре мы представляли недавние результаты, полученные нами в рамках исследований гамильтонианов с нестингом. В этих работах было показано, что при выполнении некоторых условий в ферми-системах с нестингом возможна реализация полуметаллических фаз. Кроме заряда, электрический ток через такие фазы переносит еще и дискретный квант. В зависимости от деталей системы, таким квантом может быть спин или спин-долинный индекс. Нейтронное рассеяние может послужить инструментом идентификации таких полуметаллических состояний.

---

1. R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen, and K. H. J. Buschow, Phys. Rev. Lett. **50**, 2024 (1983).
2. K. E. H. M. Hanssen, P. E. Mijnarends, L. P. L. M. Rabou, and K. H. J. Buschow, Phys. Rev. B **42**, 1533 (1990).
3. J.-H. Park, E. Vescovo, H.-J. Kim, C. Kwon, R. Ramesh, and T. Venkatesan, Nature **392**, 794 (1998).
4. Y. Ji, G. J. Strijkers, F. Y. Yang, C. L. Chien, J. M. Byers, A. Anguelouch, G. Xiao, and A. Gupta, Phys. Rev. Lett. **86**, 5585 (2001).
5. M. Jourdan, J. Minár, J. Braun, A. Kronenberg, S. Chadov, B. Balke, A. Gloskovskii, M. Kolbe, H. Elmers, G. Schönhense, H. Ebert, C. Felser, and M. Kläui, Nat. Commun. **5**, 3974 (2014).
6. M. G. Kostenko, A. V. Lukoyanov, and E. I. Shreder, JETP Lett. **107**, 126 (2018).
7. M. I. Katsnelson, V. Yu. Irkhin, L. Chioncel, A. I. Lichtenstein, and R. A. de Groot, Rev. Mod. Phys. **80**, 315 (2008).
8. E. T. Kulatov, V. N. Men'shov, V. V. Tugushev, and Yu. A. Uspenskii, JETP Lett. **109**, 102 (2019).
9. S. Benatmane and S. Cherid, JETP Lett. **111**, 694 (2020).
10. D. Tripathy and A. O. Adeyeye, J. Appl. Phys. **101**, 09J505 (2007).
11. S. G. Bhat and P. S. Anil Kumar, AIP Adv. **6**, 056308 (2016).
12. M. Eschrig, Rep. Prog. Phys. **78**, 104501 (2015).
13. Y.-W. Son, M. L. Cohen, and S. G. Louie, Nature **444**, 347 (2006).
14. A. Du, S. Sanvito, and S. C. Smith, Phys. Rev. Lett. **108**, 197207 (2012).
15. A. Hashmi and J. Hong, Sci. Rep. **4**, 4374 (2014).
16. E. Kan, W. Hu, C. Xiao, R. Lu, K. Deng, J. Yang, and H. Su, J. Am. Chem. Soc. **134**, 5718 (2012).
17. B. Huang, C. Si, H. Lee, L. Zhao, J. Wu, B.-L. Gu, and W. Duan, Appl. Phys. Lett. **97**, 043115 (2010).
18. D. Khomskii, *Basic Aspects of the Quantum Theory of Solids*, Cambridge University Press, Cambridge (2010).
19. G. Grüner, Rev. Mod. Phys. **60**, 1129 (1988).
20. P. Monceau, Adv. Phys. **61**, 325 (2012).
21. A. Overhauser, Phys. Rev. **128**, 1437 (1962).
22. G. Grüner, Rev. Mod. Phys. **66**, 1 (1994).
23. J. Ruvalds, C. Rieck, S. Tewari, J. Thoma, and A. Virosztek, Phys. Rev. B **51**, 3797 (1995).
24. A. Gabovich, A. Voitenko, J. Annett, and M. Ausloos, Supercond. Sci. Technol. **14**, R1 (2001).
25. K. Terashima, Y. Sekiba, J. H. Bowen, K. Nakayama, T. Kawahara, T. Sato, P. Richard, Y.-M. Xu, L. J. Li, G. H. Cao, Z.-A. Xu, H. Ding, and T. Takahashi, PNAS **106**, 7330 (2009).
26. P. A. Igoshev, M. A. Timirgazin, A. A. Katanin, A. K. Arzhnikov, and V. Y. Irkhin, Phys. Rev. B **81**, 094407 (2010).
27. A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, A. O. Sboychakov, and F. Nori, Phys. Rev. B **87**, 075128 (2013).
28. A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, and F. Nori, Phys. Rev. B **87**, 121401 (2013).
29. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, K. I. Kugel, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rev. B **88**, 195142 (2013).
30. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rev. B **88**, 045409 (2013).
31. A. L. Rakhmanov, K. I. Kugel, M. Y. Kagan, A. V. Rozhkov, and A. O. Sboychakov, JETP Lett. **105**, 806 (2017).
32. S. Kokanova, P. Maksimov, A. Rozhkov, and A. Sboychakov, arXiv:2010.01865 (2020).
33. A. L. Rakhmanov, K. Kugel, and A. O. Sboychakov, J. Supercond. Nov. Magn. **33**, 2405 (2020).
34. A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, A. O. Sboychakov, K. I. Kugel, and F. Nori, Phys. Rev. Lett. **119**, 107601 (2017).
35. A. L. Rakhmanov, A. O. Sboychakov, K. I. Kugel, A. V. Rozhkov, and F. Nori, Phys. Rev. B **98**, 155141 (2018).
36. D. A. Khokhlov, A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, and A. O. Sboychakov, Phys. Rev. B **101**, 235141 (2020).
37. T. M. Rice, Phys. Rev. B **2**, 3619 (1970).
38. A. Gorbatsevich, Y. Kopaev, and I. Tokatly, ZhETF **101**, 971 (1992) [Sov. Phys. JETP **74**, 521 (1992)].
39. I. Eremin and A. V. Chubukov, Phys. Rev. B **81**, 024511 (2010).
40. A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, A. O. Sboychakov, and F. Nori, Phys. Rev. Lett. **109**, 206801 (2012).
41. A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, K. I. Kugel, A. V. Rozhkov, and F. Nori, Phys. Rev. B **95**, 014203 (2017).
42. R. S. Akzyanov, A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rev. B **90**, 155415 (2014).

43. A. V. Kornilov, V. M. Pudalov, A.-K. Klehe, A. Ardavan, and J. S. Qualls, JETP Lett. **84**, 628 (2006).
44. A. V. Kornilov, V. M. Pudalov, A.-K. Klehe, A. Ardavan, J. S. Qualls, and J. Singleton, Phys. Rev. B **76**, 045109 (2007).
45. Ya. A. Gerasimenko, V. A. Prudkoglyad, A. V. Kornilov, V. M. Pudalov, V. N. Zverev, A. K. Klehe, and J. S. Qualls, Phys. Rev. B **80**, 184417 (2009).
46. Ya. A. Gerasimenko, S. V. Sanduleanu, V. A. Prudkoglyad, A. V. Kornilov, J. Yamada, J. S. Qualls, and V. M. Pudalov, Phys. Rev. B **89**, 054518 (2014).
47. A. V. Kornilov, V. M. Pudalov, Y. Kitaoka, K. Ishida, G.-q. Zheng, T. Mito, and J. S. Qualls, Phys. Rev. B **69**, 224404 (2004).
48. A. Narayanan, A. Kiswandhi, D. Graf, J. Brooks, and P. Chaikin, Phys. Rev. Lett. **112**, 146402 (2014).