

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

А. В. Рожков<sup>+,\*1)</sup>, А. О. Сбойчаков<sup>+</sup>, Д. А. Хохлов<sup>+</sup>, А. Л. Рахманов<sup>+</sup>, К. И. Кугель<sup>+</sup>

<sup>+</sup>Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, 125412 Москва, Россия

<sup>\*</sup>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 полуметаллическости 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. По-

луметаллические свойства были экспериментально подтверждены уже у нескольких материалов (например, NiMnSb [2], La<sub>0.7</sub>Sr<sub>0.3</sub>MnO<sub>3</sub> [3], CrO<sub>2</sub> [4], Co<sub>2</sub>MnSi [5] и др.). Развиваются и теоретические исследования [6–9]. Рассматриваются возможные приложения полуметаллов в спинтронике (спиновый вентилятор [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 “безметаллических полуметаллов”. Другими словами, это попытка найти полуметаллические системы, которые, в отличие от всех ныне известных “классических” полуметаллов, не содержат 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-

<sup>1)</sup>e-mail: arozhkov@gmail.com

щающихся при параллельном переносе на некоторый вектор импульсного пространства  $\mathbf{Q}$ , указывает на неустойчивость состояния ферми-жидкости. Эта неустойчивость приводит к возникновению волны плотности (либо спина, либо заряда), характеризующейся вектором пространственной модуляции  $\mathbf{Q}$ . 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 полуметаллическости, 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:

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon^a(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}a\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{k}a\sigma} + \varepsilon^b(\mathbf{k} + \mathbf{Q}_0) \psi_{\mathbf{k}b\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{k}b\sigma}. \quad (1)$$

Зоны, которые мы будем также называть “долины”, обозначаются символами  $a$  и  $b$ , индекс  $\sigma$  – 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)

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

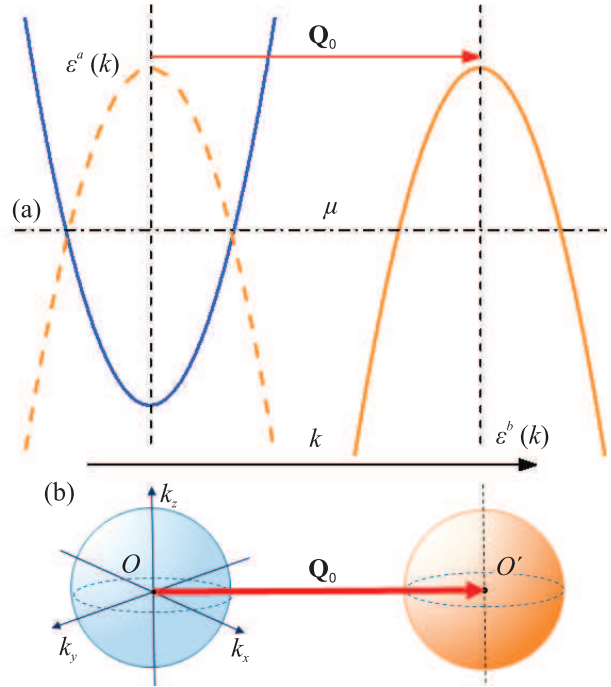


Рис. 1. (Цветной онлайн) Электронные зоны модели при нулевом электрон-электронном взаимодействии и нулевом легировании. (а) – Электронная зона  $\varepsilon^a(\mathbf{k})$  и дырочная зона  $\varepsilon^b(\mathbf{k})$  показаны сплошными кривыми. Штриховая парабола – это дырочная зона, сдвинутая на вектор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

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

Ниже для простоты мы будем предполагать идеальную электрон-дырочную симметрию  $m_a = m_b = m$  и  $\varepsilon_{\max}^b = -\varepsilon_{\min}^a = \varepsilon_F$ . Когда  $\mu = 0$ , листы поверхности Ферми для зон  $a$  и  $b$  представляют собой сферы (см. рис. 1a) с одинаковым импульсом Ферми  $k_F = \sqrt{2m\varepsilon_F}$  и одинаковой плотностью состояний (на одну проекцию спина)  $N_F = mk_F/(2\pi^2)$  на уровне Ферми. Это состояние удобно рассматривать как нелегированное. Чтобы учесть легирование, значение  $\mu$  должно отклониться от нуля. Ниже,  $\varepsilon_F$ ,  $k_F$ , а также  $N_F$  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

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{\text{int}}, \quad (4)$$

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:

$$\hat{H}_{\text{int}} = \hat{H}_{\text{dir}} + \hat{H}_{\text{ex}}, \quad (5)$$

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

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

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 ( $gN_F, g_\perp N_F \ll 1$ ) 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  $\sigma$  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  $\sigma$  равен

$$\Delta_\sigma = \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} \langle \psi_{\mathbf{k}a\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{k}b\bar{\sigma}} \rangle, \quad (8)$$

где  $V$  – объем системы, треугольные скобки  $\langle \dots \rangle$  обозначают взятие матричного элемента по отношению к основному состоянию. Поскольку центры электроннй и дырочной зон разделены в обратном пространстве вектором нестинга  $\mathbf{Q}_0$ , параметр порядка  $\Delta_\sigma$  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  $\psi_{a\sigma}^\dagger \psi_{b\bar{\sigma}}$ , 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:

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

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

$$E_{\mathbf{k}\sigma}^{(1,2)} = \mp \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_\sigma^2}, \quad (10)$$

где  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = k^2/2m - \varepsilon_F$ . 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:

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

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

$$\frac{\partial \Omega_\sigma}{\partial \Delta_\sigma} = 0. \quad (12)$$

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

$$\Delta_0 \approx \varepsilon_F \exp(-1/gN_F). \quad (13)$$

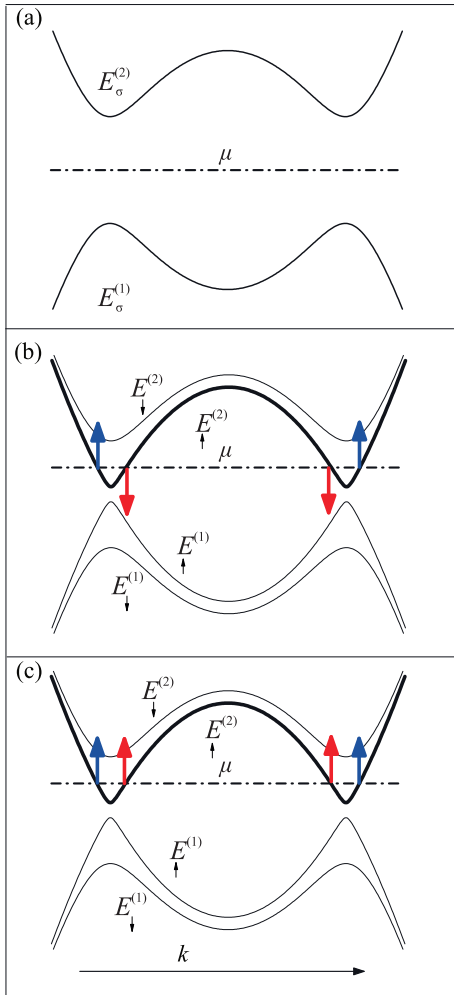


Рис. 2. (Цветной онлайн) Электронная зонная структура для диэлектрических и полуметаллических состояний. По вертикальной оси отложена энергия, а по горизонтальной оси – импульс. Уровень Ферми  $\mu$  показан горизонтальными штрихпунктирными линиями. (a) – Если легирование отсутствует ( $x = 0$ ), основным 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  $x > 0$ , сектора 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:

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

**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

$$x_{\sigma} = -\frac{\partial \Omega_{\sigma}}{\partial \mu}, \quad (15)$$

где  $x_{\sigma}$  – это количество заряда, аккумулированное в секторе  $\sigma$ . Парциальные уровни легирования удовлетворяют очевидному равенству

$$x_{\uparrow} + x_{\downarrow} = x. \quad (16)$$

Таким образом, при конечном  $x$  необходимо решить уравнения (12) и (15) при условии (16) для того, чтобы определить  $\mu$  и  $\Delta_{\sigma}$  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

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0 + \delta \mathbf{Q}. \quad (17)$$

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

$$\Delta_{\sigma} = \Delta_0 \sqrt{1 - \frac{x_{\sigma}}{N_F \Delta_0}}, \quad \mu = \Delta_0 - \frac{x_{\sigma}}{2N_F}. \quad (18)$$

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

$$x_0 = N_F \Delta_0. \quad (19)$$

Состояния, описываемые формулами (18), хорошо известны. В моделях со слабым дальнедействующим 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-несинга, 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.

$$x_\uparrow = x_\downarrow = \frac{x}{2}, \quad (20)$$

мы с неизбежностью получим, что

$$\Delta_\uparrow = \Delta_\downarrow. \quad (21)$$

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  $\sigma$ ,

$$F_\sigma(x_\sigma) = \Omega_\sigma(\mu(x_\sigma)) + \mu(x_\sigma)x_\sigma, \quad (22)$$

равна

$$F_\sigma(x_\sigma) = -\frac{1}{2}N_F\Delta_0^2 + \int_0^{x_\sigma} dx' \mu(x'). \quad (23)$$

Тогда для полной свободной энергии системы получаем:

$$\frac{F}{V} = \sum_\sigma \frac{F_\sigma}{V} = -N_F\Delta_0^2 + \Delta_0 x - \frac{x_\uparrow^2 + x_\downarrow^2}{4N_F}. \quad (24)$$

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:

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

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

$$\mu = \Delta_0 - \frac{x}{2N_F} \quad (26)$$

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

$$\varepsilon_k^2 = [\mu(x)]^2 - [\Delta_\uparrow(x)]^2, \quad \text{или } k = k_F \sqrt{1 \pm \frac{\Delta_0}{2\varepsilon_F} \frac{x}{x_0}}. \quad (27)$$

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  $\hat{S}_v$  следующим образом:

$$\hat{S}_v = \sum_{\alpha\sigma} \sigma \nu_\alpha \hat{N}_{\alpha\sigma}, \quad (28)$$

где оператор

$$\hat{N}_{\alpha\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \quad (29)$$

описывает количество электронов со спином  $\sigma$  в долине  $\alpha$ . Числовой индекс  $\nu_\alpha$  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

$$\hat{S} = \sum_{\alpha\sigma} \sigma \hat{N}_{\alpha\sigma}, \quad (30)$$

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

Легко проверить, что

$$[\hat{S}, \psi_{\alpha\sigma}^\dagger] = \sigma \psi_{\alpha\sigma}^\dagger, \quad [\hat{S}_v, \psi_{\alpha\sigma}^\dagger] = \sigma \nu_\alpha \psi_{\alpha\sigma}^\dagger. \quad (31)$$

Иначе говоря, любой полевой оператор может быть охарактеризован не только спиновым квантовым числом  $\sigma$ , но и спин-долинным квантовым числом  $\sigma \nu_\alpha$ . Для введенных выше секторов легко проверить, что в рамках сектора  $\sigma$  оба поля  $\psi_{a\sigma}$  и  $\psi_{b\sigma}$  обладают одним и тем же значением спин-долинного числа. Поэтому поверхность Ферми, заданная уравнением (27), обладает идеальной поляризацией в смысле  $\hat{S}_v$ . 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  $x$

$$\hat{S}_v \propto x. \quad (32)$$

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 удастся 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

$$\psi_{b\uparrow} \rightarrow \psi_{b\downarrow}, \quad \psi_{b\downarrow} \rightarrow \psi_{b\uparrow}. \quad (33)$$

Действительно, в результате такой подстановки

$$\sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle \psi_{\mathbf{k}a\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{k}b\bar{\sigma}} \rangle \rightarrow \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle \psi_{\mathbf{k}a\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{k}b\sigma} \rangle, \quad (34)$$

что и приводит к указанной выше замене ВСП на ВЗП:

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

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  $\hat{S}_v$  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-долинного 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.

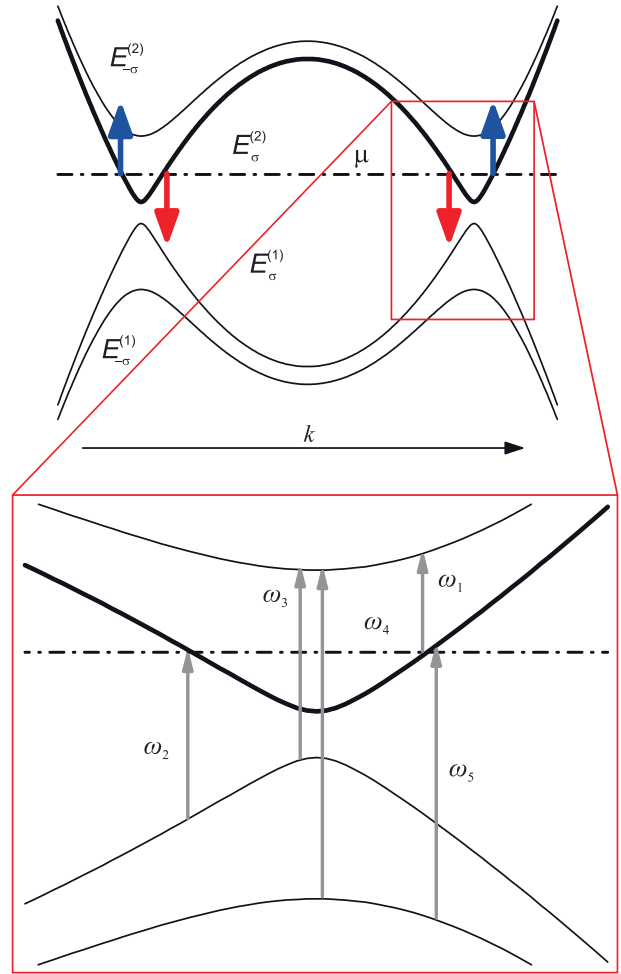


Рис. 3. (Цветной онлайн) На верхней панели представлен спектр спин-долинного полуметалла (совпадает с рис. 2b), а на нижней панели отмечены одноэлектронные каналы неупругого рассеяния (обозначены вертикальными стрелками и символами  $\omega_{1,\dots,5}$ )

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-

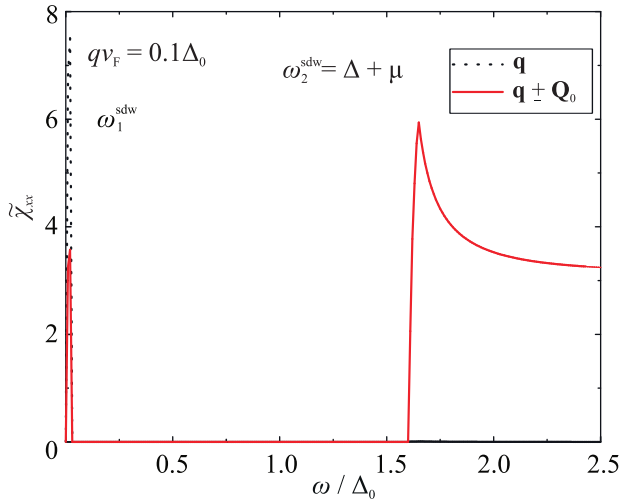


Рис. 4. (Цветной онлайн) Спектр неупругого нейтронного рассеяния на системе с легированной ВСП, при переданном импульсе  $\mathbf{q}$  (сплошная красная линия) и при переданном импульсе  $\mathbf{q} \pm \mathbf{Q}_0$  (пунктирная черная линия). Видны низкоэнергетические пики, связанные с внутризонным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

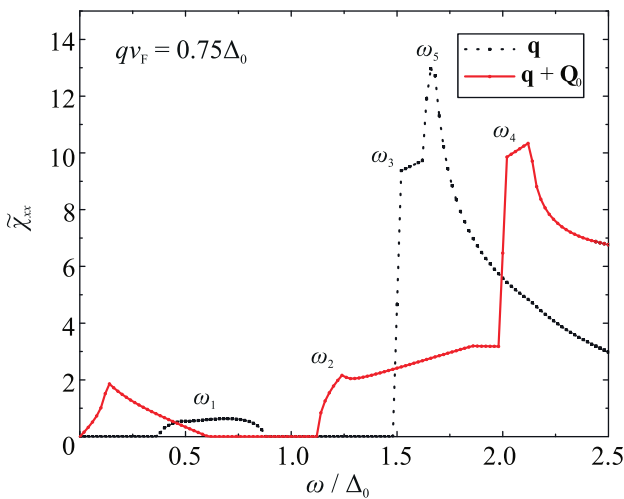


Рис. 5. (Цветной онлайн) Спектр неупругого нейтронного рассеяния на спин-долинном полуметалле, при переданном импульсе  $\mathbf{q}$  (сплошная красная линия) и при переданном импульсе  $\mathbf{q} \pm \mathbf{Q}_0$  (пунктирная черная линия). Детали спектра, связанные с открытием канала  $\omega_i$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

интересно, что для возникновения этих компонент требуется также отклонение от идеальной электрондырочной симметрии, которой обладает наша модель при  $m_a = m_b$ . Возникновение ненулевых недиа-

гональных 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 дальнедействующее 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 контроля 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 полуметаллическое состояние может оказаться не так уж и просто. В качестве возможного косвенного диагностического инструмента для идентификации полуметаллическости



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. Mijnders, 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).