Письма в ЖЭТФ, том 105, вып. 12, с. 768 – 779

Неоднородные электронные состояния в системах с неидеальным нестингом

А. Л. Рахманов[a,b,c], *К. И. Кугель*[1)a,e], *М. Ю. Каган*[d,e], *А. В. Рожков*[a,b], *А. О. Сбойчаков*[a]

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

[b] *Московский физико-технический институт (государственный университет), 141700 Долгопрудный, Россия*

[c] *Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова, 127055 Москва, Россия*

[d] *Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, 119334 Москва, Россия*

[e] *Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики", 101000 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 11 мая 2017 г.

Дан краткий обзор результатов теоретического исследования электронного фазового расслоения в системах с неидеальным нестингом листов поверхности Ферми. Такие системы включают в себя хром и его сплавы, сверхпроводящие железосодержащие пниктиды, двухслойный графен и ряд других материалов.

DOI: 10.7868/S0370274X17120128

1. 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 [1]. Существование двух фрагментов поверхности Ферми, которые могут быть совмещены при переносе на некоторый вектор обратной решетки ($\mathbf{Q}_0$), влечет за собой неустойчивость ферми-жидкостного состояния, которая приводит к возникновению дополнительного параметра порядка. Понятие нестинга широко используется для анализа волн зарядовой плотности (ВЗП) [2, 3], волн спиновой плотности (ВСП) [4, 5], механизмов высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) [6–8], антиферромагнетизма (АФМ) хрома и его сплавов [9–12] и т.д. Важно отметить, что нестинг может быть неидеальным, т.е. участки поверхности Ферми могут быть совмещены при переносе на вектор $\mathbf{Q}_0$ только приблизительно. Недавно было показано, что неидеальный нестинг может приводить к фазовому расслоению в хроме и его сплавах [13], железосодержащих ВТСП [14] и в двухслойном графене [15, 16]. Отметим также, что спиновые и зарядовые неоднородности, связанные с неидеальным нестингом, активно изучаются в низкоразмерных соединениях [17–19].

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.

2. Модель Райса. Фазовое расслоение в хроме и его сплавах. Начнем с модели, предложенной Райсом [12] для описания несоизмеримого АФМ порядка в хроме и его сплавах (см. также обзор [20]). С одной стороны, эта модель достаточно проста. С другой стороны, ее можно применять для описания реальных систем. Зонная структура, отвечающая данной модели, содержит два сферических кармана поверхности Ферми, из которых один – электронный, а другой – дырочный. Радиусы сферических карманов могут отличаться. Предполагается, что существует другая зона или зоны, которые не участвуют в магнитном упорядочении (немагнитные зоны). Игнорируются все взаимодействия, кроме отталкивания между электронами и дырками в карманах, поскольку даже малое взаимодействие в этом канале порождает неустойчивость и открывает щель в электронном спектре. Система, которую мы изучаем, является трехмерной. Гамильтониан модели имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma,\alpha} \epsilon^{\alpha}(\mathbf{k}) n^{\alpha}_{\mathbf{k}\sigma} + V \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q},\sigma,\sigma'} a^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma} b^{\dagger}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'} b_{\mathbf{k}'\sigma'}, \quad (1)$$

1) e-mail: kugel@orc.ru

где α равно a (электроны), b (дырки) и c ("немагнитные" носители), $a^\dagger$ и $b^\dagger$ – операторы рождения электронов и дырок соответственно, n – оператор числа частиц, V – кулоновское отталкивание, σ – проекция спина. "Немагнитные" носители имеют плотность состояний на поверхности Ферми, равную N_r. Энергетический спектр электронов и дырок вблизи поверхности Ферми запишем следующим образом:

$$\epsilon^a_{\mathbf{k}} = \hbar v_{\mathrm{F}}(k - k_{\mathrm{F}a}) = \hbar v_{\mathrm{F}}(k - k_{\mathrm{F}}) - \mu, \quad (2)$$
$$\epsilon^b_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_0} = -\hbar v_{\mathrm{F}}(k - k_{\mathrm{F}b}) = -\hbar v_{\mathrm{F}}(k - k_{\mathrm{F}}) - \mu,$$

где $k_{\mathrm{F}} = (k_{\mathrm{F}a}+k_{\mathrm{F}b})/2$, $\mu = \hbar v_{\mathrm{F}}(k_{\mathrm{F}a}-k_{\mathrm{F}b})/2$ – химический потенциал, вектор $\mathbf{Q}_0$ связывает центры электронной и дырочной зон в пространстве импульсов.

Рассматривается режим слабой связи: $VN_m \ll 1$, где $N_m = k_{\mathrm{F}}^2/2\pi^2\hbar v_{\mathrm{F}}$. Если радиусы электронного и дырочного карманов одинаковы (идеальный нестинг), то $\mu = 0$. Выполняя стандартные БКШ вычисления, получаем, что при $\mu = 0$ основным состоянием является АФМ упорядочение с параметром порядка $\Delta_0 = \epsilon_{\mathrm{F}} \exp(-1/N_m|V|) \ll \epsilon_{\mathrm{F}} = \hbar v_{\mathrm{F}} k_{\mathrm{F}}$. Параметр порядка Δ_0 связывает носители тока с неравными импульсами. Следовательно, в реальном пространстве параметр порядка Δ_0 соответствует вращению оси намагниченности, отвечающей волновому вектору $\mathbf{Q}_0$. Обычно электронный и дырочный карманы расположены в высокосимметричных точках зоны Бриллюэна, а $\mathbf{Q}_0$ является вектором обратной решетки. Возникающее таким образом АФМ упорядочение называют соизмеримым.

Если же $\mu \neq 0$, то электронная и дырочная ферми-сферы имеют разные радиусы и при смещении не совпадают. Однако если μ мало, то и различие между сферами остается малым, и можно определить новый вектор нестинга $\mathbf{Q}_1 = \mathbf{Q}_0+\mathbf{Q}$, который соответствует минимальной энергии волны спиновой плотности. При этом $\mathbf{Q}$ становится дополнительным параметром оптимизации. Параметр порядка ВСП можно записать как

$$\Delta = V\sum_{\mathbf{k}} \langle a^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} b_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1\, -\sigma}\rangle. \quad (3)$$

Вектор $\mathbf{Q}$ мал: $|\mathbf{Q}| \sim |\Delta|/\hbar v_{\mathrm{F}} \ll |\mathbf{Q}_0|$. Следовательно, параметр порядка Δ описывает АФМ упорядочение с медленно вращающейся осью намагничения. Период вращения оси не связан с симметрией решетки. Такой порядок называется несоизмеримым. Отметим, что рассматриваемое состояние аналогично состоянию Фульде–Феррелла–Ларкина–Овчинникова (ФФЛО) в сверхпроводниках [21, 22]. Мы могли бы ввести в рассмотрение параметр порядка с несколько иной структурой, чем (3). Однако основные результаты при этом не меняются [13, 22, 23]. Отличия свободной энергии и химического потенциала, рассчитанных для разных форм параметра порядка, малы, а в реальных системах баланс энергий может сдвигаться из-за факторов, неучтенных настоящей моделью (анизотропии, беспорядка) [13].

Равновесные параметры системы удобно вычислять путем минимизации термодинамического потенциала $\Omega = -T\ln\left[\mathrm{Tr}\,\exp\left(-\frac{\hat{H}-\mu\hat{N}}{T}\right)\right]$, где $\hat{N}$ – оператор полного числа частиц. В приближении среднего поля собственные энергии гамильтониана (1) равны

$$E_{1,2} = \frac{\epsilon^a_{\mathbf{k}} + \epsilon^b_{\mathbf{k}+\mathbf{Q_1}}}{2} \pm \sqrt{\Delta^2 + \left[\frac{\epsilon^a_{\mathbf{k}} - \epsilon^b_{\mathbf{k}+\mathbf{Q_1}}}{2}\right]^2}. \quad (4)$$

В том же приближении для термодинамического потенциала на единицу объема имеем

$$\Omega = \frac{2\Delta^2}{V} - 2T\sum_s \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \ln\left(1+e^{-E_s/T}\right) -$$
$$- 2TN_r \int \ln\left(1+e^{-(\epsilon-\mu)/T}\right) d\epsilon, \quad (5)$$

где первый и второй члены представляют собой вклады от "магнитных" электронов, а третий член соответствует "немагнитным" носителям. Чтобы выполнить интегрирование по $\mathbf{k}$, разложим энергии зон по степеням $|\mathbf{Q}|$ и $\delta k = |\mathbf{k}| - k_{\mathrm{F}}$:

$$\epsilon^b_{\mathbf{k}+\mathbf{Q_1}} + \epsilon^a_{\mathbf{k}} \approx 2\mu + 2Q\eta,\ \epsilon^b_{\mathbf{k}+\mathbf{Q_1}} - \epsilon^a_{\mathbf{k}} \approx 2v_{\mathrm{F}}\delta k + 2Q\eta, \quad (6)$$

где $Q = v_{\mathrm{F}}|\mathbf{Q}|/2$ и η – косинус угла между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{Q}$. После интегрирования получим [13]:

$$\delta\Omega = \Omega(\Delta, Q, \mu) - \Omega(0, Q, \mu) =$$
$$= \frac{k_{\mathrm{F}}^3}{\pi^2\epsilon_{\mathrm{F}}}\left\{\Delta^2\left(\ln\frac{\Delta}{\Delta_0} - \frac{1}{2}\right) + \frac{Q^2}{3} + \right.$$
$$\left. + \mu^2 + \frac{\pi^2T^2}{3} + T\int_0^\infty d\xi \int_{-1}^1 d\eta \ln\left[f(Q\eta-\mu-\epsilon)f(\mu-Q\eta-\epsilon)\right]\right\},$$

где $f(\epsilon) = 1/[1+\exp(\epsilon/T)]$ – распределение Ферми и $\epsilon = \sqrt{\Delta^2+\xi^2}$. Уравнения для равновесных значений Δ и Q определяются минимизацией $\delta\Omega$ [13]:

$$\ln\frac{\Delta_0}{\Delta} = \int_0^\infty \frac{d\xi}{2\epsilon} \int_{-1}^1 d\eta \left[f(\epsilon+\mu-Q\eta) + f(\epsilon-\mu+Q\eta)\right],$$
$$-\frac{2Q}{3} = \int_0^\infty d\xi \int_{-1}^1 \eta d\eta \left[f(\epsilon+\mu-Q\eta) + f(\epsilon-\mu+Q\eta)\right]. \quad (7)$$

Общее число электронов в единице объема $n(\mu)$ есть сумма магнитных $n_m(\mu)$ и немагнитных вкладов $n_r(\mu)$. Уровень допирования x равен $x = n(\mu) - n(0)$. Так как $T, \mu \ll \epsilon_{\rm F}$, мы можем записать $n_r(\mu) - n_r(0) = N_r\mu$. Для магнитных электронов $n_m(\mu) = 2\sum_{\mathbf{k},s} f(E_s(\mathbf{k}))$. После несложных вычислений получим

$$\frac{x}{x_0} = \frac{n\mu}{\Delta_0} + \int_0^\infty \frac{d\xi}{\Delta_0}\int_{-1}^{1} d\eta\,[f(\epsilon-\mu+Q\eta) - f(\epsilon+\mu-Q\eta)], \tag{8}$$

где $x_0 = 4\Delta_0 N_m$ и $n = N_r/2N_m$.

Фазовая диаграмма модели может быть построена с помощью численного решения уравнений (7) и (8). Сначала можно вычислить температуру Нееля $T_{\rm N}(x)$ для однородного АФМ состояния и температуру перехода T_Q между соизмеримым и несоизмеримым АФМ порядками. Затем мы можем определить область неоднородного состояния, анализируя зависимость термодинамического потенциала Ω и химического потенциала μ от уровня допирования x [13].

В качестве иллюстрации на рис. 1 показана типичная зависимость химического потенциала от допирования для рассматриваемой модели. Из рисунка видно, что функция $\mu(x)$ имеет нисходящую часть, что означает отрицательную сжимаемость и, следовательно, неустойчивость однородной АФМ-фазы. В неоднородном состоянии система состоит из двух фаз с разными уровнями допирования x_1 и x_2. Величины x_1 и x_2 могут быть найдены с помощью построения Максвелла: горизонтальная пунктирная линия на рис. 1 проведена так, чтобы площади заштрихованных областей S_1 и S_2 были равны.

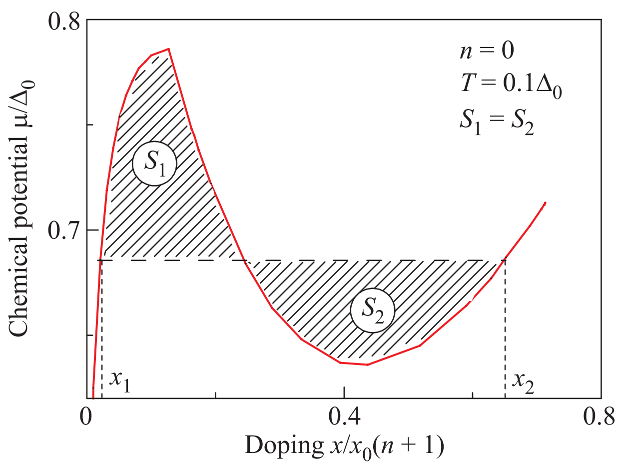

Рис. 1. (Цветной онлайн) Химический потенциал μ в однородной ВСП-фазе как функция допирования x при $T/\Delta_0 = 0.1$ и $n = 0$ (сплошная (красная) линия). Горизонтальный пунктир – построение Максвелла, при котором $S_1 = S_2$ (рис. 3 из [13])

На рис. 2 пунктирной (красной) линией показана кривая $T_{\rm PS}(x)$, разделяющая области однородной и неоднородной фаз на плоскости (x, T). Фаза с меньшим допированием x_1 является соизмеримой АФМ-фазой ($Q = 0$), тогда как фаза с более высоким уровнем допирования x_2 является несоизмеримой АФМ-фазой ($Q \neq 0$). Таким образом, фазовое расслоение происходит из-за конкуренции между двумя АФМ состояниями с различной структурой.

Выше мы упоминали подобие между моделью Райса и фазой ФФЛО в сверхпроводниках. В фазе ФФЛО фазовое расслоение не возникает. Действительно, зеемановское поле в ФФЛО соответствует допированию в модели Райса. Поле является интенсивной термодинамической величиной и не допускает разделения фаз. Однако для холодных атомов в оптической ловушке (где предсказан аналог ФФЛО) возможно управлять не полем, а поляризацией, которая является экстенсивной величиной. В этом случае фазовое расслоение возможно [24]. Отметим, что фаза ФФЛО чрезвычайно чувствительна к беспорядку [25]. Естественно предположить, что несоизмеримый АФМ порядок также будет чувствителен к дефектам.

3. Влияние магнитного поля на фазовое расслоение. Естественно, что рассматриваемая нами система с магнитным порядком чувствительна к магнитному полю. Чтобы учесть магнитное поле $\mathbf{B}$, мы должны, во-первых, заменить оператор импульса $\hat{\mathbf{p}}$ на калибровочно-инвариантный $\hat{\mathbf{p}} + (e/c)\mathbf{A}$, где $\mathbf{A}$ – векторный потенциал магнитного поля. Во-вторых, следует добавить зеемановское слагаемое $g_\alpha\sigma\hbar\omega_\alpha$ в одноэлектронный гамильтониан, где g_α – фактор Ланде и $\omega_\alpha = eB/cm_\alpha$ – циклотронная частота носителей заряда с массой m_α. Энергетический спектр модели теперь имеет два одночастичных энергетических масштаба: энергию Ферми $\epsilon_{\rm F}$ и расстояние между уровнями Ландау $\hbar\omega_\alpha$. Масштаб энергии, связанный с электрон–дырочным взаимодействием, характеризуется величиной АФМ щели Δ_0. Квантование Ландау важно в области больших полей $\hbar\omega_\alpha > \Delta_0$, тогда как в малых полях $\hbar\omega_\alpha < \Delta_0$ им можно пренебречь. Мы ограничимся случаем малых магнитных полей, пренебрегая поправками порядка $\hbar\omega_\alpha/\epsilon_{\rm F} \ll 1$.

Если добавить зеемановское слагаемое, то вместо уравнений (2) получим

$$\begin{aligned} \epsilon^a_\sigma(\mathbf{k}) &= \hbar v_{\rm F}(k - k_{\rm F}) - \mu + g_a\sigma\hbar\omega_a, \\ \epsilon^b_\sigma(\mathbf{k}+\mathbf{Q}_0) &= -\hbar v_{\rm F}(k - k_{\rm F}) - \mu + g_b\sigma\hbar\omega_b. \end{aligned} \tag{9}$$

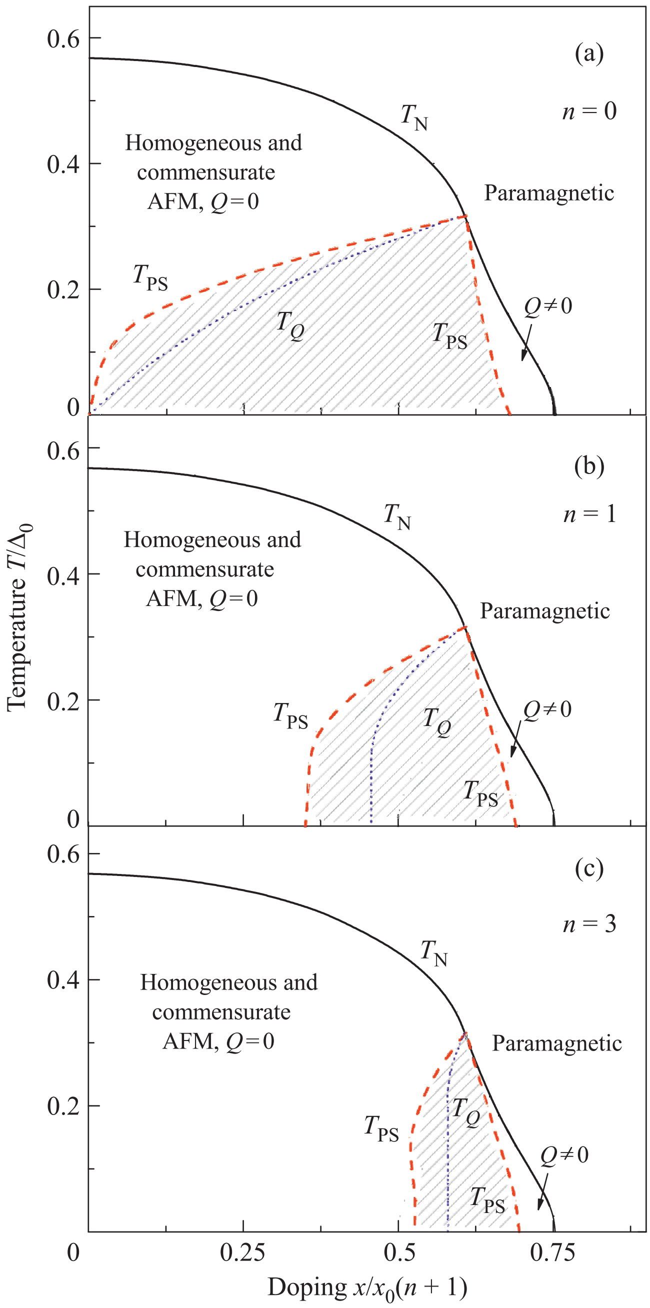

Рис. 2. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма модели на плоскости (x, T) (рис. 4 из работы [13]); (a) $n = 0$ (электронов в немагнитных карманах нет), (b) $n = 1$, и (c) $n = 3$. Сплошные (черные) кривые показывают температуру Нееля $T_{\mathrm{N}}(x)$, разделяющую парамагнитную и АФМ-фазы. Пунктирные (синие) кривые показывают границу между однородными соизмеримой и несоизмеримой АФМ-фазами $T_Q(x)$. Штриховая (красная) кривая $T_{\mathrm{PS}}(x)$ – граница между однородным и фазово-расслоенным (заштрихованные области) состояниями

Магнитное поле снимает вырождение зон по спину (рис. 3). Поэтому мы должны ввести двухкомпонентный параметр порядка, соответствующий векторам нестинга, которые показаны стрелками на рис. 3. Для простоты мы не будем рассматривать несоизмеримые ВСП. Тогда компоненты параметра порядка можно представить в виде [26]:

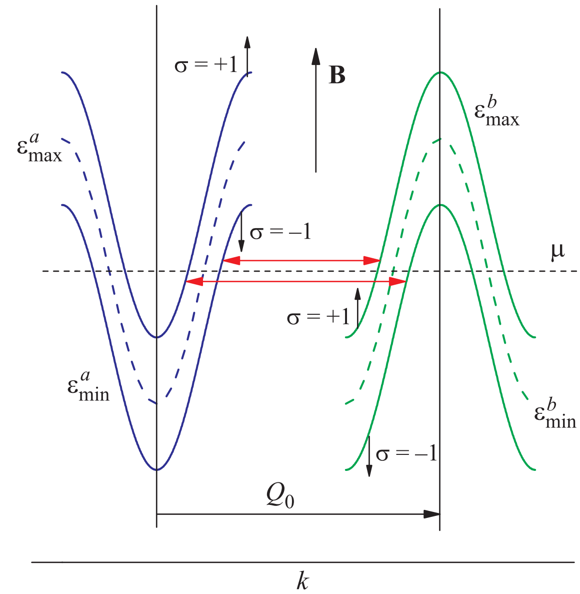

Рис. 3. (Цветной онлайн) Зонная структура системы, помещенной в магнитное поле. Поле снимает вырождение зон по спину. Красные стрелки указывают межзонное взаимодействие, которое приводит к появлению параметра порядка (рис. 1 из [26])

$$\Delta_\uparrow = V\sum_{\mathbf{k}}\langle a^\dagger_{\mathbf{k},\uparrow}b_{\mathbf{k},\downarrow}\rangle, \quad \Delta_\downarrow = V\sum_{\mathbf{k}}\langle a^\dagger_{\mathbf{k},\downarrow}b_{\mathbf{k},\uparrow}\rangle. \qquad (10)$$

Случай, когда электронная и дырочная зоны симметричны, является самым простым. Однако тогда магнитное поле не влияет на электронный спектр. Поэтому для получения нетривиального результата требуется электрон–дырочная асимметрия. Пусть, как и выше, эффективные массы электронов и дырок равны $m_a = m_b = m$, а следовательно, $\omega_a = \omega_b = \omega_H$, но $g_a \neq g_b$. Следуя процедуре, описанной в предыдущем подразделе, мы можем найти собственные энергии гамильтониана и вычислить термодинамический потенциал Ω. Минимизируя Ω, для щели Δ получим уравнение [26]

$$\ln\frac{\Delta_0}{\Delta_\sigma} = \int_0^\infty d\xi\,\frac{f(\sqrt{\Delta_\sigma^2+\xi^2}+\mu_\sigma)+f(\sqrt{\Delta_\sigma^2+\xi^2}-\mu_\sigma)}{\sqrt{\Delta_\sigma^2+\xi^2}}, \qquad (11)$$

где $\mu_\sigma = \mu - \sigma(g_a - g_b)\hbar\omega_H/2$. Пренебрегая наличием немагнитных частей поверхности Ферми, получим по аналогии с (8):

$$\frac{x}{x_0} = \sum_\sigma \int_0^\infty \frac{d\xi}{\Delta_0}\Big[f(\sqrt{\Delta_\sigma^2+\xi^2}-\mu_\sigma) - f(\sqrt{\Delta_\sigma^2+\xi^2}+\mu_\sigma)\Big]. \quad (12)$$

Фазовая диаграмма модели на плоскости (B, x) при $T = 0$ показана на рис. 4 [26], где $b = |g_a - g_b|\hbar\omega_H/2\Delta_0 \propto B$. Однородное парамагнитное состояние существует при высоком уровне допирования ($x > 2b - \sqrt{2}$) или в сильном магнитном поле ($b > 1/\sqrt{2} + x/2x_0$). В области низкого допирования и слабого магнитного поля основное состояние системы является фазово-расслоенным. Неоднородная фаза PS1 (см. рис. 4) – это смесь двух АФМ-фаз, первая из которых соответствует ВСП с нулевым допингом и $\Delta_\uparrow = \Delta_\downarrow = \Delta_0$. Вторая фаза с ненулевым допингом, $\Delta_\uparrow = \Delta_0$ и $\Delta_\downarrow = 0$, будет далее обозначаться как AF1. Фаза PS1 является основным состоянием модели, если $|b| < 1/\sqrt{2}$ и $|x/x_0| < 1/\sqrt{2}$. Однородная фаза AF1 устойчива в диапазоне промежуточных магнитных полей, $x/2x_0 - 2\sqrt{2} < b < x/2x_0 + 2\sqrt{2}$. Неоднородное состояние PS2 устойчиво в областях между однородными парамагнитной и AF1 фазами. Оно является смесью фаз AF1 и парамагнитной. Таким образом, мы видим, что магнитное поле снимает вырождение параметра порядка по спину. В результате число возможных однородных состояний возрастает, что, в свою очередь, кардинально влияет на картину электронного фазового расслоения.

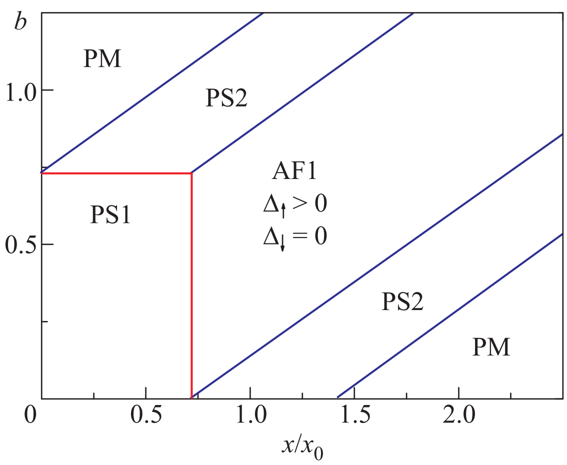

Рис. 4. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма системы при $T = 0$. На диаграмме имеется однородная ВСП фаза AF1 (определение дано в тексте), две области с однородной парамагнитной фазой и неоднородные состояния PS1 (смесь двух фаз ВСП, см. текст) и PS2 (смесь AF1 и парамагнитной фаз) (рис. 3b из [26])

4. Фазовое расслоение в сверхпроводящих пниктидах. Сверхпроводящие железосодержащие пниктиды являются еще одной системой с неидеальным нестингом. Фазовая диаграмма этих соединений весьма богата. В частности, на ней имеются области неоднородности по спину и заряду [27–32]. Отметим, что электрон-электронное взаимодействие в пниктидах обычно полагают слабым (см., например, раздел III A в обзоре [33]). Фазовое расслоение наблюдается и в железосодержащих ВТСП халькогенидах [34, 35]. Однако в этих соединениях оно, по-видимому, обусловлено иным механизмом, поскольку считается, что нестинг поверхности Ферми в халькогенидах отсутствует.

Поверхность Ферми пниктидов обычно описывается в рамках двух представлений. На рис. 5a показана поверхность Ферми для так называемой развернутой зоны Бриллюэна, которая соответствует квадратной решетке атомов железа с одним атомом Fe на элементарную ячейку (постоянная решетки a). В этом представлении два квазидвумерных по-

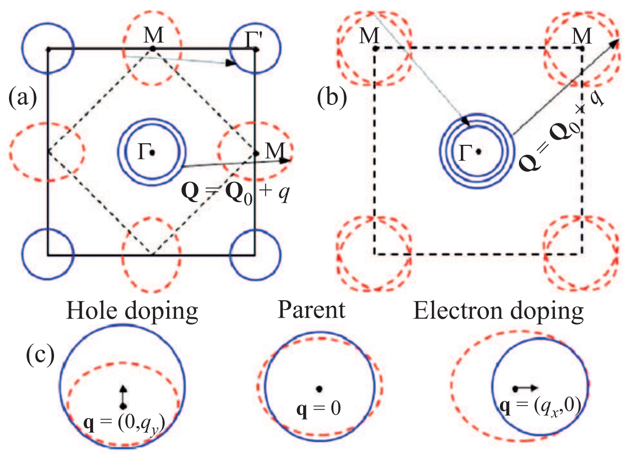

Рис. 5. (Цветной онлайн) Схематическое изображение поверхности Ферми пниктидов для развернутой (a) и сложенной (b) зон Бриллюэна. Имеются три дырочных кармана вблизи центра сложенной зоны Бриллюэна (показаны (голубыми) сплошными линиями). В случае развернутой зоны Бриллюэна один из дырочных карманов перемещается в угол зоны Бриллюэна. Для развернутой зоны Бриллюэна электронные карманы имеют форму эллипсов ((красный) пунктир), они расположены около точек $(0, \pi/a)$ и $(\pi/a, 0)$. В сложенной зоне Бриллюэна электронные карманы показаны перекрывающимися эллипсами в углах зоны Бриллюэна. Стрелки показывают возможные вектора нестинга между электронными и дырочными карманами поверхности Ферми. (c) – Схематический вид нестинга при различном допировании (рис. 1 из [14])

чти круглых дырочных кармана располагаются по центру зоны Бриллюэна в точке $\Gamma(0,0)$, еще один круговой дырочный карман расположен около точки $\Gamma'(\pi,\pi)$. Два эллипсоидальных электронных кармана центрированы в точках $M(0,\pi/a)$ и $M(\pi/a,0)$. Реальная элементарная ячейка пниктида содержит два атома Fe, расположенных в неэквивалентных положениях. Сложенная зона Бриллюэна, соответствующая этой элементарной ячейке, получается путем сложения развернутой зоны Бриллюэна, показанной пунктиром на рис. 5a, и последующим вращением на угол $\pi/4$. Поверхность Ферми для сложенной зоны Бриллюэна показана на рис. 5b. На этом рисунке все три дырочных кармана расположены около точки $\Gamma(0,0)$, а электронные карманы, представленные перекрывающимися эллипсами, расположены около точек $M(\pm\pi/\bar{a},\pi/\bar{a})$ с $\bar{a}=a/\sqrt{2}$. Здесь мы сделаем несколько упрощений. Во-первых, мы пренебрегаем эффектами, связанными с неэквивалентными положениями атомов Fe. Следовательно, использование развернутой зоны Бриллюэна является достаточным. Во-вторых, мы будем пренебрегать трехмерной структурой материала и изучать только двумерную модель.

Следуя работе [14], запишем гамильтониан системы в виде $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_{\rm int}$, где

$$\hat{H}_0=\sum_{\mathbf{k}\lambda\sigma}\epsilon^h_{\lambda\mathbf{k}}a^\dagger_{\mathbf{k}\lambda\sigma}a_{\mathbf{k}\lambda\sigma}+\sum_{\mathbf{k}s\sigma}\epsilon^e_{s\mathbf{k}}b^\dagger_{\mathbf{k}s\sigma}b_{\mathbf{k}s\sigma}, \qquad (13)$$

где $a^\dagger_{\mathbf{k}\lambda\sigma},a_{\mathbf{k}\lambda\sigma}$ $(b^\dagger_{\mathbf{k}s\sigma},b_{\mathbf{k}s\sigma})$ – операторы рождения и уничтожения для дырочных (электронных) зон $\lambda = 1,2,3$ $(s=1,2)$ с энергиями $\epsilon^h_{\lambda\mathbf{k}}$ $(\epsilon^e_{s\mathbf{k}})$. Полагая, что зоны имеют квадратичную дисперсию, для дырочных зон с цилиндрической поверхностью Ферми имеем

$$\begin{aligned}\epsilon^h_{1\mathbf{k}}&=-\frac{\hbar v^h_{\rm F}(k^2-k^2_{\rm F})}{2k_{\rm F}}-\mu,\\ \epsilon^h_{2\mathbf{k}}&=-\frac{\hbar v^h_{2\rm F}(k^2-k^2_{\rm F})}{2k_{\rm F}}-\Delta_2-\mu,\\ \epsilon^h_{3\mathbf{k}+\bar{\mathbf{Q}}}&=-\frac{\hbar v^h_{3\rm F}(k^2-k^2_{\rm F})}{2k_{\rm F}}-\Delta_3-\mu,\end{aligned} \qquad (14)$$

где $\hbar v_{\rm F}$ и $\hbar v_{2,3\rm F}$ – скорости Ферми, $\bar{\mathbf{Q}}=(\pi/a,\pi/a)$, а величины $\Delta_{2,3}$ определяют различие радиусов дырочных карманов.

Эллиптические электронные компоненты поверхности Ферми можно представить в виде [14]

$$\epsilon^e_{1\mathbf{k}+\mathbf{Q_0}}=\epsilon^e_{1\mathbf{k}+\mathbf{Q}'_0}=\frac{\hbar v^e_{\rm F}(k^2-k^2_{\rm F})}{2k_{\rm F}}+\frac{\alpha\hbar v^e_{\rm F}}{k_{\rm F}}(k^2_x-k^2_y)-\mu, \qquad (15)$$

где $\mathbf{Q}_0=(\pi/a,0)$ и $\mathbf{Q}'_0=(0,\pi/a)$, $v^e_{\rm F}$ – скорость Ферми в электронных зонах. Параметр α определяет эллиптичность электронных карманов. Главные оси эллипсов направлены к точке Γ при $\alpha>0$ и перпендикулярно этому направлению, если $\alpha<0$.

Гамильтониан взаимодействия $\hat{H}_{\rm int}$ включает целый ряд вкладов. Однако, поскольку нас интересуют АФМ упорядочение и фазовое расслоение, можно пренебречь электрон-электронным и дырочно-дырочным взаимодействиями. Как известно [27], величина локального магнитного момента в пниктидах осциллирует около одной из осей кристалла. Чтобы воспроизвести такую магнитную структуру, достаточно рассмотреть взаимодействие носителей из одной электронной и одной дырочной зоны. Для определенности предположим, что это зоны ϵ^h_1 и ϵ^e_1. Тогда

$$\hat{H}_{\rm int}=V\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{K},\sigma,\sigma'}a^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{K}1\sigma}a_{\mathbf{k}1\sigma}b^\dagger_{\mathbf{k}'-\mathbf{K}1\sigma'}b_{\mathbf{k}'1\sigma'}. \qquad (16)$$

Описанная модель для пниктидов является обобщением модели Райса. В магнитном переходе участвуют две зоны, и имеется "резервуар" (немагнитные зоны). Однако идеальный нестинг в данном случае невозможен, так как форма электронных и дырочных карманов поверхности Ферми различна.

Поскольку взаимодействие в пниктидах слабое, $V/\epsilon_{\rm F}\ll 1$, где энергия Ферми $\epsilon_{\rm F}=(v^e_{\rm F}+v^h_{\rm F})k_{\rm F}/2$, то задачу можно решать в приближении среднего поля [14]. Параметр порядка будем искать в виде (3). Намагниченность, соответствующая выбранному АФМ порядку, лежит в плоскости xy. Для соизмеримой ВСП направление намагничивания остается постоянным при движении вдоль нормали к $\mathbf{Q}_0$. При движении, параллельном $\mathbf{Q}_0$, намагниченность меняет свое направление при смещении от одного атома железа к другому. В случае несоизмеримого порядка такая "полосчатая" картина медленно вращается в плоскости xy [14].

В рассматриваемом приближении энергетический спектр гамильтониана (16) подобен спектру (4), а термодинамический потенциал имеет вид (5), где энергии $\epsilon^{a,b}$ в выражении (4) для E_s следует заменить на $\epsilon^{e,h}$. Минимизация Ω дает уравнения для Δ и $\mathbf{Q}$, аналогичные уравнениям (7) [14]. В приближении слабого взаимодействия ВСП возникает только в случае, если неидеальность нестинга мала, т.е. $\alpha\ll 1$. Также предполагается, что $\Delta/\epsilon_{\rm F},|\mathbf{q}|/k_{\rm F}\ll 1$. Тогда при $T=0$ уравнение для параметра порядка можно представить в виде [14]:

$$\ln\frac{1}{\delta}=\int\limits_0^{2\pi}\frac{d\varphi}{2\pi}{\rm Re}\left\{\cosh^{-1}\left[\frac{\nu_0(\mathbf{p},\varphi)-\nu}{\delta}\right]\right\}, \qquad (17)$$

где

$$\nu_0(\mathbf{p},\varphi) = p_x\cos\varphi + p_y\sin\varphi - \frac{\bar{\alpha}}{2}\cos 2\varphi,\ \ \bar{\alpha} = \frac{\alpha\kappa\epsilon_{\rm F}}{\Delta_0},$$

$$\kappa = \frac{2\sqrt{v_{\rm F}^e v_{\rm F}^h}}{v_{\rm F}^e + v_{\rm F}^h},\ \ \delta = \frac{\Delta}{\Delta_0},\ \ \nu = \frac{\mu}{\kappa\Delta_0},\ \ \mathbf{p} = \frac{\kappa v_{\rm F}}{2\Delta_0}\mathbf{q}. \qquad (18)$$

Аналогично для вектора нестинга имеем $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0 + 2\Delta_0\mathbf{p}/v_{\rm F}\kappa$, где

$$\begin{pmatrix} p_x \\ p_y \end{pmatrix} = \int\limits_0^{2\pi}\frac{d\varphi}{2\pi}\begin{pmatrix}\sin\varphi \\ \cos\varphi\end{pmatrix}\mathrm{sgn}[\nu_0(\mathbf{p},\varphi)-\nu]\times$$
$$\times\,\mathrm{Re}\sqrt{[\nu_0(\mathbf{p},\varphi)-\nu]^2-\delta^2}. \qquad (19)$$

Связь между химическим потенциалом и плотностью электронов можно найти тем же способом, что и ранее (см. уравнение (8) и текст перед ним). В результате получим [14]:

$$\frac{x}{x_0} = \tilde{n}\nu - \int\limits_0^{2\pi}\frac{d\varphi}{2\pi}\mathrm{sgn}[\nu_0(\mathbf{p},\varphi)-\nu]\mathrm{Re}\sqrt{[\nu_0(\mathbf{p},\varphi)-\nu]^2-\delta^2},$$

где

$$x_0 = \frac{2v_0k_{\rm F}^2\Delta_0}{\pi\kappa\epsilon_{\rm F}},\ \ \tilde{n} = \frac{(v_{2\rm F}^h)^{-1}+(v_{3\rm F}^h)^{-1}+(v_{\rm F}^e)^{-1}}{(v_{\rm F}^h)^{-1}+(v_{2\rm F}^e)^{-1}}, \qquad (20)$$

v_0 – объем элементарной ячейки и $\tilde{n}$ – плотность электронов в немагнитных зонах. Поскольку $x_0 \sim \Delta_0/\epsilon_{\rm F} \ll 1$, то возникающие в системе фазы при $x \sim x_0$ соответствуют режиму малого допирования.

Функции $\Delta(x)$ и $q(x)$ показаны на рис. 6a, b для $\tilde{n} = \kappa = 1$ и двух разных значений α. Численный анализ показывает, что ВСП возникает, если $|\bar{\alpha}| < 2$. Если $|x| < x_1^*$, то допированные носители попадают в немагнитные зоны. В результате параметр порядка не зависит от x, а $q(x) = 0$. При $|x| > x_1^*$ в зоне E_2 (E_1) появляются электроны (дырки). Порядок ВСП становится несоизмеримым, $q \neq 0$. Конфигурации спинов для несоизмеримой ВСП показаны на рис. 6c, d.

Функция $\mu(x)$, рассчитанная в работе [14], показана на рис. 7 при $\tilde{n} = \kappa = 1$ и трех различных $\bar{\alpha}$. Если $\bar{\alpha}$ не велико, то $\mu(x)$ немонотонна и многозначна вблизи $x = x_1^*$ (см. рис. 7a). С увеличением эллиптичности исчезает многозначность $\mu(x)$ (см. рис. 7b), при еще бóльших $\bar{\alpha}$ пропадает и немонотонность (см. рис. 7c). Следовательно, если эллиптичность невелика, то существуют области допирования, где $\partial\mu(x)/\partial x < 0$, и однородное состояние неустойчиво по отношению к разделению на две фазы. Область фазового расслоения $x_1 < x < x_2$ уменьшается с увеличением эллиптичности и исчезает при критическом значении $\bar{\alpha}_c = 1.15$.

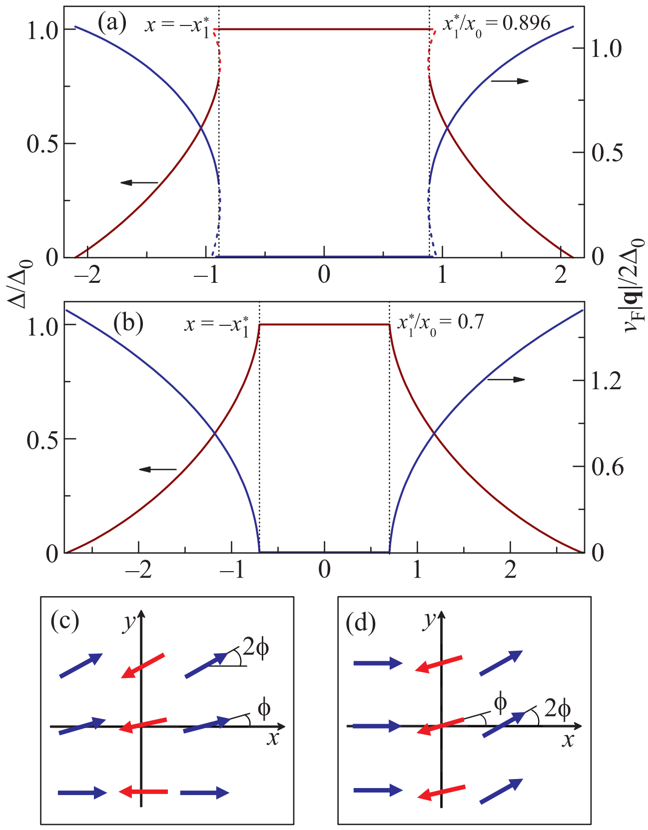

Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимость Δ и $|\mathbf{q}|$ от x при $\tilde{n} = \kappa = 1$. (a) – $\bar{\alpha} = 0.1$. Переход от соизмеримого ВСП порядка к несоизмеримому является переходом первого рода. Пунктиры показывают зависимости $\Delta(x)$ и $|\mathbf{q}(x)|$, которые соответствуют метастабильным состояниям. (b) – $\bar{\alpha} = 0.6$. Переход от соизмеримого ВСП порядка к несоизмеримому является переходом второго рода. (c) и (d) – Схематическое изображение спиновой структуры несоизмеримой ВСП. Если $\alpha > 0$, то структура (c) соответствует дырочному допированию ($x < 0$), а (d) электронному ($x > 0$). Если $\alpha < 0$, то (c) соответствует электронному допированию, а (d) – дырочному (рис. 2 из [14])

Неоднородное состояние состоит из соизмеримой ВСП фазы 1 с меньшей концентрацией носителей и несоизмеримой ВСП фазы 2 с большей плотностью носителей. Фазовая диграмма системы может быть построена по аналогии с тем, как это делалось в предыдущих разделах. Полученный результат для плоскости (x,α) показан на рис. 8 [14]. Фазовая диаграмма построена для $\tilde{n} = \kappa = 1$. Результат качественно не изменяется, если $\tilde{n} \neq 0$. Если же немагнитные зоны отсутствуют, то однородная соизмеримая ВСП-фаза существует только при $x = 0$.

Фазовое расслоение в сверхпроводниках на основе железа наблюдалось в экспериментах [28–31]. Напри-

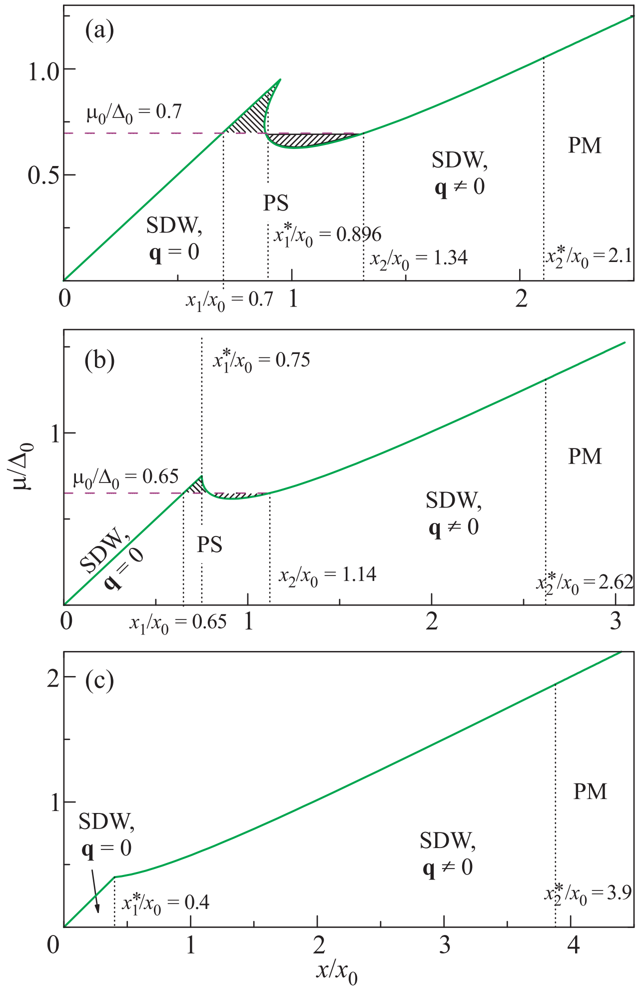

Рис. 7. (Цветной онлайн) Химический потенциал $\mu(x)$ при $\bar{\alpha} = 0.1$ (a), $\bar{\alpha} = 0.5$ (b) и $\bar{\alpha} = 1.2$ (c). Здесь $\tilde{n} = \kappa = 1$. (a) и (b) – однородные состояния неустойчивы если $x_1 < x < x_2$. Пунктирная (красная) кривая показывает величину μ_0, найденную с помощью построения Максвелла. Заштрихованные площади ниже линии μ_0 равны. На панели (c) химический потенциал монотонно растет с x, фазовое расслоение не возникает. Области существования разных фаз показаны вертикальными штриховыми линиями; PM – парамагнитная фаза, SDW – ВСП-фаза, PS – область с фазовым расслоением (рис. 3 из [14])

мер, неоднородное состояние с соизмеримым АФМ порядком и немагнитными областями с характерным масштабом около 65 нм наблюдалось в дырочно-легированном $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ [28]. Описанная выше модель предсказывает, что одна из фаз представляет собой несоизмеримую ВСП. Однако термодинамические потенциалы несоизмеримой ВСП и парамагнитной фаз очень близки друг к другу. Несоизмеримая фаза ВСП может быть разрушена, например, беспо-

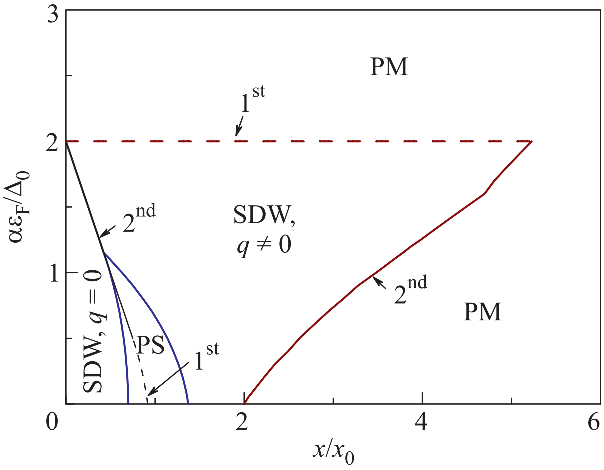

Рис. 8. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма модели для пниктидов в плоскости $(x, \bar{\alpha})$ для $\tilde{n} = \kappa = 1$ и $\alpha, x > 0$. Диаграмма симметрична относительно замены $x \to -x$ и/или $\alpha \to -\alpha$. Граница между несоизмеримым ВСП и парамагнитным состояниями, показанная пунктирной (красной) кривой (фазовый переход первого рода) и сплошной (красной) кривой (фазовый переход второго рода). Сплошные (синие) линии указывают границы фазового расслоения (PS). Сплошная (черная) кривая (переход второго рода) и пунктирная (черная) кривая (переход первого рода) показывают границы между соизмеримой и несоизмеримой однородными фазами ВСП (рис. 4 из [14])

рядком. В этом случае неоднородное состояние будет смесью соизмеримой ВСП и парамагнитной фаз.

Мы использовали параметр порядка ВСП в виде (3). Как упоминалось ранее, в литературе обсуждаются другие виды параметра порядка (см., например, [23]). Однако различие в свободной энергии системы при различных видах параметра порядка мало. Поэтому его конкретный вид зависит от детальных свойств изучаемой системы.

Приведенные вычисления показывают, что существуют только два равновесных направления вектора $\mathbf{q}$. Этот вектор может быть параллельным либо перпендикулярным вектору нестинга $\mathbf{Q}_0$ в зависимости от типа допирования и знака параметра эллиптичности α. Ясно, что размер и направление $\mathbf{q}$ чувствительны к форме поверхности Ферми. В реальных пниктидах форма всех Ферми-карманов отклоняется от идеальных кругов, а зонный спектр зависит от поперечного импульса k_z. Тем не менее, несоизмеримая ВСП фаза с $\mathbf{q}$, перпендикулярным $\mathbf{Q}_0$, наблюдалась в допированном электронами $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ [36–38], а спиновые флуктуации, соответствующие $\mathbf{q}$, параллельному $\mathbf{Q}_0$, были обнаружены в допированном дырками $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$.

Эти наблюдения согласуются с предсказанием модели.

Итак, рассмотренная модель с простой аппроксимацией поверхности Ферми предсказывает существование электронного фазового расслоения в пниктидах в режиме слабой связи. Это важный вывод для интерпретации экспериментальных данных: чисто электронная модель с умеренным взаимодействием достаточна для объяснения наблюдаемых неоднородных фаз.

5. Фазовое расслоение в двухслойном АА графене. Графен – это полупроводник с нулевой щелью, обладающий множеством необычных электронных свойств [39]. Помимо однослойного, активно изучается также двухслойный графен [40], существующий в трех модификациях. Наиболее распространенным является так называемый АВ графен или фаза Бернала. В АВ упаковке половина атомов углерода в верхнем слое расположена над центрами кристаллических ячеек в нижнем слое, а остальные атомы находятся над атомами в нижнем слое. Схема расположения слоев, в которой атомы углерода в верхнем слое расположены над эквивалентными атомами нижнего слоя, называется двухслойным графеном с АА-структурой. Третья модификация – это двухслойный графен с подкруткой слоев, в котором верхний лист повернут на некоторый угол относительно нижнего слоя. Если угол поворота невелик, то двухслойный графен с подкруткой в некотором приближении можно рассматривать как смесь упаковок АВ и АА.

Элементарная ячейка двухслойного графена состоит из четырех атомов углерода, которые образуют подрешетки $A1$ и $B1$ в нижнем слое и $A2$ и $B2$ в верхнем слое. В приближении сильной связи двухслойный АА имеет четыре зоны (две дырочные и две электронные) [40]:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}^{1,2} = -t_0 \pm t|f_{\mathbf{k}}|, \quad \varepsilon_{\mathbf{k}}^{3,4} = t_0 \pm t|f_{\mathbf{k}}|, \tag{21}$$
$$f_{\mathbf{k}} = 1 + \exp\left(\frac{3\mathrm{i}k_x a_0}{2}\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a_0}{2}\right),$$

где t_0 и t – амплитуды перескока электронов между ближайшими атомами углерода в разных слоях и внутри одного слоя соответственно, а a_0 – постоянная решетки.

Зонная структура (21) показана на рис. 9. Низкоэнергетическая дисперсия в АА графене линейна, как и в монослое графена. Однако двухслойный АА графен имеет поверхность Ферми, состоящую из двух долин, расположенных около точек Дирака. Важной особенностью АА графена

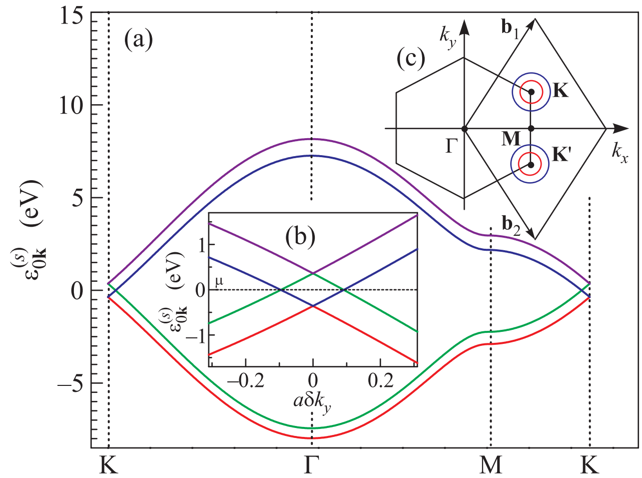

Рис. 9. (Цветной онлайн) Одночастичный спектр двухслойного АА графена (a) и спектр $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{s}$ около точек Дирака $\mathbf{K}$ (b). Здесь $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \delta k_y \mathbf{e}_y$. Зоны $s = 2$ и 3 пересекаются при нулевой энергии, что соответствует уровню Ферми недопированной системы. (c) – Первая зона Бриллюэна двухслойного АА графена (шестиугольник) и элементарная ячейка в обратном пространстве (ромб). Круги около точек $\mathbf{K}$ и $\mathbf{K}'$ показывают поверхность Ферми допированного материала (рис. 1 из [16])

является то, что дырочная и электронная поверхности Ферми совпадают в недопированном материале, т.е. существует идеальный нестинг, который становится неидеальным при допировании. Тогда даже малое электрон-электронное взаимодействие приводит к неустойчивости и формированию соизмеримого и несоизмеримого АФМ порядка, а также и к фазовому расслоению [16, 40, 41]. Отметим, что эти свойства у структур с упаковкой АА типа весьма устойчивы. Они выживают и при учете дальних перескоков, и для систем с неэквивалентными слоями [41].

Итак, существование двух зон с одинаковыми поверхностями Ферми делает двухслойный АА графен неустойчивым по отношению к спонтанному нарушению симметрии. Эта неустойчивость может привести к открытию щели в электронном спектре, уменьшая, таким образом, свободную энергию системы при произвольно малом электрон-электронном взаимодействии. Исследования [15, 16, 41] показали, что при значениях параметров, характерных для графеновых систем, основным состоянием является так называемый АФМ порядок G-типа (все ближайшие соседние спины в решетке антипараллельны друг другу). При этом АФМ-фаза контролируется в основном короткодействующим кулоновским отталкиванием. Исследуем данную задачу в рамках модели Хаббарда с гамильтонианом электрон-электронного взаимодействия в виде

$$\hat{H}_{\rm int} = \frac{U_0}{2} \sum_{\mathbf{m},i,\alpha,\sigma} \left(n_{\mathbf{m}i\alpha\sigma} - \frac{1}{2}\right)\left(n_{\mathbf{m}i\alpha\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}\right), \quad (22)$$

где $n_{\mathbf{m}i\alpha\sigma}$ – оператор числа частиц на узле $\mathbf{m}$, $\alpha = A, B$ – индекс подрешетки, $i = 1, 2$ – номер слоя графена, $\overline{\sigma}$ означает "не σ". Межузельное кулоновское взаимодействие не учитывается. В этом случае обычно полагают, что для адекватного описания ситуации для U_0 следует брать величину несколько меньшую, чем та, что предсказывается расчетами *ab initio*. Оценка дает $U_0 = 5{-}7$ эВ [40].

Параметр соизмеримого АФМ порядка можно записать как

$$\Delta_{iA} = U_0 \left\langle a^\dagger_{\mathbf{m}i\uparrow} a_{\mathbf{m}i\downarrow} \right\rangle, \quad \Delta_{iB} = U_0 \left\langle b^\dagger_{\mathbf{m}i\uparrow} b_{\mathbf{m}i\downarrow} \right\rangle,$$
$$\Delta_{1A} = \Delta_{2B} = -\Delta_{2A} = -\Delta_{1B} = \Delta, \quad (23)$$

Δ – действительная величина.

В приближении среднего поля зонные спектры имеют вид

$$\varepsilon^{1,4}_{\mathbf{k}} = \mp\sqrt{\Delta^2 + (t|f_{\mathbf{k}}| + t_0)^2},$$
$$\varepsilon^{2,3}_{\mathbf{k}} = \mp\sqrt{\Delta^2 + (t|f_{\mathbf{k}}| - t_0)^2}. \quad (24)$$

Чтобы найти Δ надо минимизировать соответствующий термодинамический потенциал

$$\Omega = \frac{4\Delta^2}{U_0} - U_0(n^2-1) - 2T\sum_{s=1}^{4}\int\frac{d\mathbf{k}}{V_{\rm BZ}} \ln\left[1 + \exp\frac{\mu' - \varepsilon^s_{\mathbf{k}}}{T}\right], \quad (25)$$

где n – число электронов на один узел, $x = n - 1$ – уровень допирования, $V_{\rm BZ}$ – объем зоны Бриллюэна и $\mu' = \mu - U_0 x/2$. Вычисленная таким образом АФМ-щель монотонно убывает с увеличением допинга x и обращается в нуль при $x = x_c(T)$ [40].

Состояние АФМ G-типа имеет наименьшее значение свободной энергии среди состояний с соизмеримым магнитным порядком. Дальнейшая оптимизация Ω может быть достигнута, если принять во внимание несоизмеримое упорядочение. Следуя [40], представим комплексный параметр порядка для несоизмеримой фазы в виде

$$\Delta_{\mathbf{n}iA} = e^{i\mathbf{qn}}\Delta_{iA}, \qquad \Delta_{\mathbf{n}iB} = e^{i\mathbf{qn}}\Delta_{iB}, \quad (26)$$

где $\mathbf{q}$ описывает пространственное изменение АФМ оси намагничивания, $\mathbf{S}_{\mathbf{n}i\alpha}$ – средний спин на одну ячейку $\mathbf{n}$ в слое i на подрешетке α, он лежит в плоскости (x, y) и связан с параметром порядка соотношением $\mathbf{S}_{\mathbf{n}i\alpha} = \Delta_{i\alpha}[\cos\mathbf{qn}, \sin\mathbf{qn}]/U_0$.

Теперь Ω надо минимизировать по вектору $\mathbf{q}$. Соответствующие вычисления приведены в работе [16]. Несоизмеримое АФМ упорядочение существует в несколько более широкой области, чем соизмеримая фаза.

Образование неоднородных состояний является неотъемлемым свойством многозонных систем и, в частности, систем с нестингом. В работах [15, 16] предсказано, что при ненулевом допировании двухслойный АА графен может перейти в фазово-расслоенное состояние с фазами, отличающимися плотностью носителей заряда $n_{1,2} = 1 + x_{1,2}$. Было показано, что типичная зависимость химического потенциала двухслойного АА графена от допирования имеет вид, показанный на рис. 1, как для соизмеримой, так и несоизмеримой АФМ-фаз, если кулоновское взаимодействие не слишком велико: $U_0 < \pi\sqrt{3}t^2/t_0$. Следовательно, однородная система нестабильна и может распасться на соизмеримую ($\mathbf{q} = 0$, $x_1 < x$) и несоизмеримую ($\mathbf{q} \neq 0$, $x_2 > x$) фазы. Фазовая диаграмма на плоскости (x, T) для двухслойного АА графена показана на рис. 10 для двух разных значений U_0. Область фазового расслоения ограничена (зелеными) штрих-пунктирными кривыми. Поскольку несоизмеримый порядок чувствителен к беспорядку, а разность термодинамических потенциалов для несоизмеримой и соизмеримой фаз невелика, то весьма вероятно, что произойдет расслоение на соизмеримый АФМ изолятор ($x_1 = 0$) и парамагнитный (если $U_0 > 6$ эВ), или АФМ (если $U_0 < 6$ эВ) металлы. Отметим еще, что дальнодействующее кулоновское отталкивание препятствует фазовому расслоению, так как в неоднородном состоянии нарушается локальная электронейтральность. Температура, при которой возможно фазовое расслоение, тем выше, чем больше электрон-электронное отталкивание U_0. Напротив, область допирования, в которой возможно фазовое расслоение, сжимается с увеличением U_0. Однако следует помнить, что теория среднего поля не является хорошим приближением в случае больших U_0.

6. Заключение. Таким образом, возникновение неоднородных электронных состояний (электронное фазовое расслоение) является довольно общей чертой систем с неидеальным нестингом поверхности Ферми. 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 обзоре гексабориды, органические металлы и другие интересные и интенсивно изучаемые вещества.

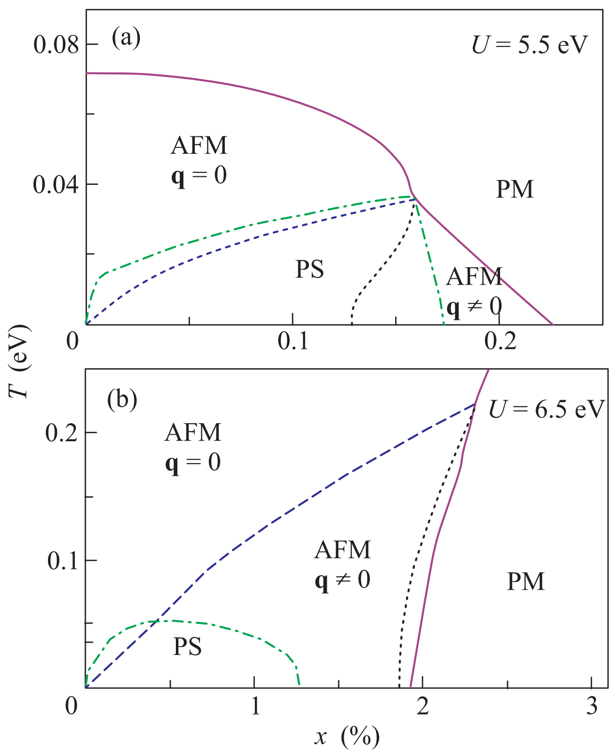

Рис. 10. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма двухслойного АА графена при $U_0 = 5.5$ эВ (a) и $U_0 = 6.5$ эВ (b). Сплошная (красная) линия – температура перехода $T_{MF}(x)$ из АФМ в парамагнитное состояние; (синий) пунктир – температура $T^q(x)$, при которой происходит переход из соизмеримой в несоизмеримую АФМ-фазу. Штриховая (красная) линия – температура $T_{MF}(x)$, вычисленная без учета существования несоизмеримой ВСП фазы. Штрих-пунктирная (зеленая) линия ограничивает область неоднородного состояния (рис. 32 из обзора [40])

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проекты # 14-02-00276, 17-02-00135 и 17-02-00323. М.Ю.К. благодарит за поддержку Программу фундаментальных исследований Национального исследовательского университета “Высшая школа экономики”.

---

1. D. Khomskii, *Basic Aspects of the Quantum Theory of Solids*, Cambridge University Press (2010).
2. G. Grüner, Rev. Mod. Phys. **60**, 1129 (1988).
3. P. Monceau, Adv. Phys. **60**, 325 (2012).
4. A. W. Overhauser, Phys. Rev. **128**, 1437 (1962).
5. G. Grüner, Rev. Mod. Phys. **66**, 1 (1994).
6. J. Ruvalds, C. T. Rieck, S. Tewari, J. Thoma, and A. Virosztek, Phys. Rev. B **51**, 3797(1995).
7. A. Gabovich, A. Voitenko, J. Annett, and M. Ausloos, Supercond. Sci. Technol. **14**, R1 (2001).
8. K. Terashima, Y. Sekiba, J. 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).
9. A. Shibatani, J. Phys. Soc. Jpn. **26**, 299 (1969).
10. A. Shibatani, K. Motizuki, and T. Nagamiya, Phys. Rev. **177**, 984 (1969).
11. A. Shibatani, J. Phys. Soc. Jpn. **29**, 93 (1970).
12. T. M. Rice, Phys. Rev. B **2**, 3619 (1970).
13. A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, A. O. Sboychakov, and F. Nori, Phys. Rev. B **87**, 075128 (2013).
14. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, K. I. Kugel, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rev. B **88**, 195142 (2013).
15. A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, and F. Nori, Phys. Rev. B **87**, 121401 (2013).
16. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rev. B **88**, 045409 (2013).
17. A. Narayanan, A. Kiswandhi, D. Graf, J. Brooks, and P. Chaikin, Phys. Rev. Lett. **112**, 146402 (2014).
18. G. Campi, A. Bianconi, N. Poccia, G. Bianconi, L. Barba, G. Arrighetti, D. Innocenti, J. Karpinski, N. D. Zhigadlo, S. M. Kazakov, M. Burghammer, M. V. Zimmermann, M. Sprung, and A. Ricci, Nature **525**, 359 (2015).
19. R. Chen, B. Hu, T. Dong, and N. L. Wang, Phys. Rev. B **89**, 075114 (2014).
20. E. Fawcett, Rev. Mod. Phys. **60**, 209 (1988).
21. P. Fulde and R. A. Ferrell, Phys. Rev. **135**, A550 (1964).
22. А. И. Ларкин, Ю. Н. Овчинников, ЖЭТФ **47**, 1136 (1964); А. И. Ларкин, *Собрание трудов*, т. 1, с. 181, МЦНМО М. (2014).
23. L. P. Gor’kov and G. B. Teitel’baum, Phys. Rev. B **82**, 020510 (2010).
24. D. E. Sheehy and L. Radzihovsky, Ann. Phys. **322**, 1790 (2007).
25. S. Takada, Progr. Theor. Phys. **43**, 27 (1970).
26. A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, K. I. Kugel, A. V. Rozhkov, and F. Nori, Phys. Rev. B **95**, 014203 (2017).
27. P. Dai, J. Hu, and E. Dagotto, Nat. Phys. **8**, 709 (2012).
28. J. T. Park, D. Inosov, C. Niedermayer, G. L. Sun, D. Haug, N. B. Christensen, R. Dinnebier, A. V. Boris, A. J. Drew, L. Schulz, T. Shapoval, U. Wolff, V. Neu, X. Yang, C. T. Lin, B. Keimer, and V. Hinkov, Phys. Rev. Lett. **102**, 117006 (2009).
29. D. Inosov, A. Leineweber, X. Yang, J. T. Park, N. B. Christensen, R. Dinnebier, G. L. Sun, Ch. Niedermayer, D. Haug, P. W. Stephens, J. Stahn, C. T. Lin, O. K. Andersen, B. Keimer, and V. Hinkov, Phys. Rev. B **79**, 224503 (2009).
30. G. Lang, H.-J. Grafe, D. Paar, F. Hammerath, K. Manthey, G. Behr, J. Werner, and B. Büchner, Phys. Rev. Lett. **104**, 097001 (2010).
31. B. Shen, B. Zeng, G. Chen, J. B. He, D. M. Wang, H. Yang, and H. H. Wen, EPL (Europhys. Lett.) **96**, 37010 (2011).

32. Q. Luo, G. Martins, D.-X. Yao, M. Daghofer, R. Yu, A. Moreo, and E. Dagotto, Phys. Rev. B **82**, 104508 (2010).
33. G. Stewart, Rev. Mod. Phys. **83**, 1589 (2011).
34. A. Ricci, N. Poccia, G. Campi, B. Joseph, G. Arrighetti, L. Barba, M. Reynolds, M. Burghammer, H. Takeya, Y. Mizuguchi, Y. Takano, M. Colapietro, N. L. Saini, and A. Bianconi, Phys. Rev. B **84**, 060511 (2011).
35. A. Ricci, N. Poccia, B. Joseph, G. Arrighetti, L. Barba, J. Plaisier, G. Campi, Y. Mizuguchi, H. Takeya, Y. Takano, N. L. Saini, and A. Bianconi, Supercond. Sci. Technol. **24**, 082002 (2011).
36. P. Bonville, F. Rullier-Albenque, D. Colson, and A. Forget, EPL (Europhys. Lett.) **89**, 67008 (2010).
37. Y. Laplace, J. Bobroff, F. Rullier-Albenque, D. Colson, and A. Forget, Phys. Rev. B **80**, 140501 (2009).
38. D. Pratt, M. Kim, A. Kreyssig, Y. B. Lee, G. S. Tucker, A. Thaler, W. Tian, J. L. Zarestky, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, B. N. Harmon, A. I. Goldman, and R. J. McQueeney, Phys. Rev. Lett. **106**, 257001 (2011).
39. A. C. Neto, F. Guinea, N. M. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
40. A. Rozhkov, A. Sboychakov, A. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rep. **648**, 1 (2016).
41. A. Rakhmanov, A. Rozhkov, A. Sboychakov, and F. Nori, Phys. Rev. Lett. **109**, 206801 (2012).