

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 537.622

ЭЛЕКТРОННОЕ ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ В МАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛАХ

© 2022 г. К. И. Кугель^{a, b, *}, А. Л. Рахманов^{a, c}, А. О. Сбойчаков^a

^aИнститут теоретической и прикладной электродинамики РАН, ул. Ижорская, 13, Москва, 125412 Россия

^bИнститут физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

^cМосковский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет),
Долгопрудный, Московская обл., 141700 Россия

*e-mail: klimkugel@gmail.com

Поступила в редакцию 11.03.2022 г.

После доработки 24.03.2022 г.

Принята к публикации 28.03.2022 г.

Дается обзор основных понятий и механизмов, связанных с электронным фазовым расслоением и формированием наноразмерных неоднородностей в магнитных материалах. Рассмотрение ведется на примерах таких систем с сильными электронными корреляциями, как манганиты, где фазовое расслоение возникает за счет конкуренции ферро- и антиферромагнитных состояний, а также кобальтитов, где важную роль играют переходы между различными спиновыми состояниями. Существенное внимание уделено механизму фазового расслоения, обусловленного неидеальным нестингом листов поверхности Ферми, который особенно важен для систем с волнами спиновой плотности, ярким примером которых являются железосодержащие пниктиды.

Ключевые слова: системы с сильными электронными корреляциями, электронное фазовое расслоение, нестинг листов поверхности Ферми, манганиты, кобальтиты, железосодержащие пниктиды

DOI: 10.31857/S0015323022070130

1. ВВЕДЕНИЕ

Исходно физика конденсированного состояния изучала системы, которые являлись либо пространственно однородными, либо имели неоднородности столь малых масштабов, что изучать их экспериментально было практически невозможно, и приходилось довольствоваться “самоусредненным” описанием. Однако в последние десятилетия появились экспериментальные средства контроля и изучения свойств твердых тел на чрезвычайно малых масштабах, что поставило перед исследователями новые вопросы о поведении пространственно-неоднородных многочастичных систем. В данной обзорной статье исследуется явление электронного фазового расслоения – возникновение состояний с неоднородной электронной плотностью в остальных отношениях однородных материалах. Электронное фазовое расслоение присуще системам с сильными электронными корреляциями – материалам, в которых потенциальная энергия взаимодействия электронов преобладает над их кинетической энергией. К ним относится весьма обширный класс соединений, включающий высокотемпературные сверхпроводники, манганиты, кобальтиты и др.

Ярким примером систем с сильными электронными корреляциями являются манганиты. Одним из интригующих свойств манганитов является эффект колоссального магнитосопротивления – резкого (на несколько порядков) изменения электросопротивления материала при приложении внешнего магнитного поля. В настоящее время практически не осталось сомнений в тесной связи эффекта колоссального магнитосопротивления и явления фазового расслоения. Манганиты обладают достаточно богатой фазовой диаграммой, включающей в себя различные магнитные фазы, а также фазы с зарядовым и орбитальным упорядочением. В манганитах наблюдаются различные типы неоднородных состояний. При малом допировании для манганитов характерно возникновение т.н. магнитных поляронов (или ферронов) – ферромагнитных капель нанометровых размеров, находящихся в антиферромагнитной матрице. Существуют и другие типы фазового расслоения в манганитах. Так, при уровне допирования вблизи половинного заполнения могут возникать ферроны, находящиеся в зарядово- и орбитально-упорядоченной диэлектрической матрице. В манганитах также возможно возникновение страйповых структур. Несмотря на то, что в настоящее время

манганиты достаточно хорошо изучены, остается ряд нерешенных вопросов, касающихся механизмов возникновения фазового расслоения в этих материалах. Например, до сих пор не было как следует учтено влияние орбитальных степеней свободы на формирование неоднородных состояний.

Дополнительные возможности для фазового расслоения возникают в системах со спиновыми переходами, таких как допированные кобальтиты типа $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$. Переходы между различными спиновыми состояниями становятся возможными, когда энергия расщепления d -уровня переходного металла в кристаллическом поле Δ сравнима с хундовской константой связи J_H . В дырочно-допированных кобальтитах ионы Co^{3+} и Co^{4+} могут находиться в низкоспиновом (LS), промежуточном (IS) и высокоспиновом (HS) состояниях. Конкуренция между этими состояниями обеспечивает наличие еще одной степени свободы при фазовом расслоении.

Другим классом систем, в которых возможно возникновение неоднородных состояний, являются системы со слабо неидеальным нестингом листов поверхности Ферми. Существование фрагментов поверхности Ферми, которые совпадают друг с другом при параллельном переносе на некоторый вектор (вектор нестинга), называется нестингом поверхности Ферми. Такое свойство поверхности Ферми приводит к неустойчивости ферми-жидкостного состояния и, как следствие, к возникновению сверхструктуры и параметра порядка в системе, такого как волна зарядовой или спиновой плотности. Важно подчеркнуть, что в реальных материалах нестинг чаще всего бывает неидеальным — фрагменты Ферми поверхности не полностью соответствуют друг другу. В случае идеального нестинга неустойчивость Ферми жидкости возникает при сколь угодно слабом межэлектронном взаимодействии. В противном случае параметр порядка в системе возникает при некотором критическом значении константы взаимодействия. Можно сказать, что нестинг поверхности Ферми увеличивает роль электрон–электронного взаимодействия в системе, что ставит материалы с нестингом в один ряд с сильно коррелированными электронными системами. В большинстве теоретических исследований предполагается однородность основного состояния систем с нестингом. В данном обзоре мы покажем, что в случае неидеального нестинга энергетически более выгодным может быть расслоение на фазы, характеризующиеся различной электронной плотностью и различными магнитными свойствами. Нестинг имеет место во множестве материалов. Это, например, хром и его сплавы, пниктиды железа, квазиодномерные соединения, различные модификации двухслойного графена.

Электронное фазовое расслоение проявляется, конечно, не только в указанных системах. Подробное и многостороннее описание фазового расслоения и соответствующих материалов можно найти в сравнительно давно вышедших книгах [1, 2] и обзорах [3–5], а современной состоянию данной проблемы посвящена недавно вышедшая обзорная статья [6]. В настоящей работе мы, не претендуя на всеобъемлющий анализ фазового расслоения, проиллюстрируем на наиболее характерных примерах (манганиты, кобальтиты, пниктиды) основные механизмы, отвечающие за это явление, фокусируясь в основном на магнитных характеристиках.

2. ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ В СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМАХ

2.1. Фазовое расслоение в манганитах

Ярким примером сильно коррелированных электронных систем, в которых наблюдается явление электронного фазового расслоения, являются манганиты — соединения на основе оксида марганца [1, 3, 7]. Манганиты обладают достаточно богатой фазовой диаграммой, включающей в себя различные магнитные фазы, а также фазы с зарядовым и орбитальным упорядочением.

В литературе рассматриваются различные типы неоднородных состояний, характерных для этих соединений. Недопированные манганиты являются антиферромагнитными диэлектриками с орбитальным упорядочением. При малом допировании для манганитов характерно возникновение т.н. магнитных поляронов (ферронов) — ферромагнитных капель нанометровых размеров, находящихся в антиферромагнитной матрице [8–12]. Такой тип фазового расслоения был впервые предложен Нагаевым [8]. В работах [13–17] были подробно исследованы электронные и магнитные свойства магнитных поляронов. Теоретически механизм возникновения магнитных поляронов объясняется самолокализацией носителей заряда: электрон “вырывает” себе потенциальную яму, образуя ферромагнитную область в антиферромагнитном окружении, и локализуется в ней. Характерные размеры магнитных поляронов составляют несколько периодов решетки.

Существуют и другие типы фазового расслоения в манганитах. Так, в некоторых случаях наблюдаются ферромагнитные капли с размерами порядка $100\text{--}1000 \text{ \AA}$ [18, 19]. Как уже указывали во введении, при уровне допирования вблизи половинного заполнения могут возникать ферроны, находящиеся в зарядовой- и орбитально упорядоченной диэлектрической матрице [20]. Взаимодействие спиновых, зарядовых и орбитальных степеней свободы может приводить также к фор-

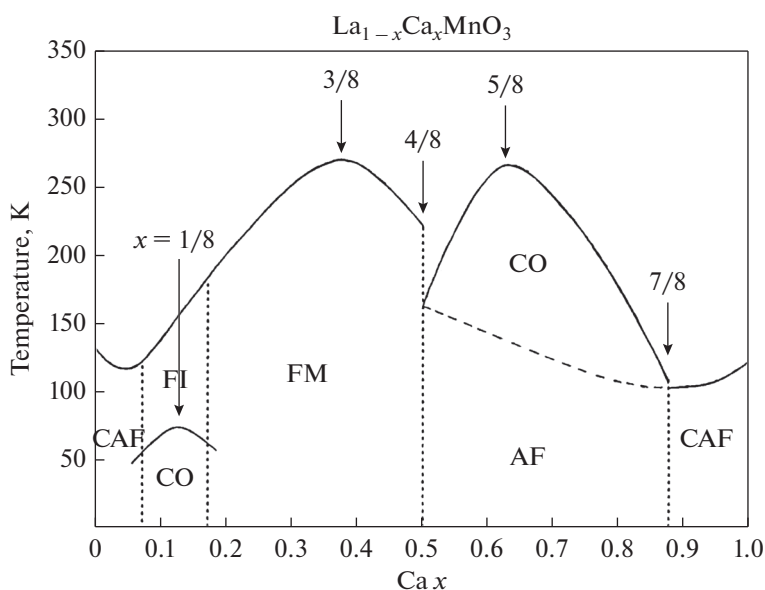


Рис. 1. Фазовая диаграмма манганита $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$, построенная, исходя из данных измерений сопротивления и магнитной восприимчивости. Обозначения: FM – ферромагнитный металл, FI – ферромагнитный диэлектрик, AF – антиферромагнетик, CAF – скошенный антиферромагнетик, CO – зарядовое упорядочение. Фазы FI и CAF могут быть пространственно неоднородны и представлять собой смесь AF- и FM-фаз [3].

мированию страйповых структур [21–23]. В манганитах такие структуры приводят к сильным искажениям решетки [24] и могут экспериментально наблюдаться с помощью электронной дифракции или малоуглового нейтронного рассеяния.

В данном разделе мы рассмотрим теоретическую модель манганитов, учитывающую ян-теллеровскую природу магнитных ионов Mn^{3+} , приводящую к локализации носителей заряда и искажению решетки. Мы вводим этот эффект в модель двойного обмена. Заметим, что в манганитах эффект Яна–Теллера широко обсуждается в литературе [1, 25, 26], он является существенным для понимания их фазовой диаграммы (см. рис. 1). Мы построим фазовую диаграмму манганитов в плоскости допирование–температура ($x - T$) с учетом фазового расслоения, а также рассмотрим эффекты, связанные с приложением постоянного магнитного поля.

2.1.1. Модельный гамильтониан манганитов

Рассмотрим допированные манганиты, имеющие химическую формулу $(\text{Re}_{1-x}^{3+}\text{Mn}_{1-x}^{3+})(\text{A}_x^{2+}\text{Mn}_x^{4+})\text{O}_3^{2-}$, где Re обозначает трехвалентный (редкоземельный) элемент, А – двухвалентный (щелочноземельный) элемент. Ионы марганца Mn^{3+} и Mn^{4+} обладают $3d^4$ - и $3d^3$ -электронными конфигурациями, соответственно. Рассматриваемые соединения имеют кристаллическую структуру перовскита, в которой ионы марганца находятся в окружении кислородных октаэдров. В случае идеального

неискаженного октаэдра кристаллическое поле расщепляет пятикратно вырожденный $3d$ -уровень ионов марганца на трехкратно вырожденный t_{2g} -уровень (d_{xy} , d_{yz} , d_{zx}) и на имеющий более высокую энергию двукратно вырожденный e_g -уровень ($d_{x^2-y^2}$, $d_{3z^2-r^2}$).

Ионы марганца характеризуются сильным внутриатомным (хундовским) обменным взаимодействием J_H , которое стремится выстроить спины d -электронов параллельно друг другу. В результате спины t_{2g} электронов формируют локальный спин $S = 3/2$. В случае идеального MnO_6 октаэдра ионы марганца Mn^{3+} имеют один электрон на двукратно вырожденном e_g -уровне. Согласно теореме Яна и Теллера такая конфигурация неустойчива, и вырождение e_g -уровня снимается путем искажения кислородного октаэдра. Ион Mn^{4+} не является ян-теллеровским ионом, и в нулевом приближении (без учета влияния со стороны соседних октаэдров) октаэдр Mn^{4+}O_6 остается неискаженным, а энергия e_g -уровня не меняется. В то же время искажение Mn^{3+}O_6 октаэдра приводит к понижению энергии e_g -электрона на величину ϵ_{JT} и его локализации. В то же время в допированных манганитах e_g -электрон может перескакивать с иона Mn^{3+} на ион Mn^{4+} , что приводит к выигрышу в кинетической энергии электрона. Следовательно, e_g -электрон может либо понизить свою энергию за счет искажений октаэдра (и при этом локализоваться), либо за счет

формирования энергетической зоны. Таким образом, в системе существует конкуренция между локализацией и делокализацией, и возможно существование двух типов e_g -электронов (зонных b и локальных l) [27–29]. Отметим также, что сильная хундовская константа связи J_H вынуждает делокализованный e_g -электрон двигаться только при параллельной ориентации локальных спинов ионов Mn^{3+} и Mn^{4+} . Это и есть широко известный механизм двойного обмена, обуславливающий ферромагнитное взаимодействие локальных спинов [30, 31].

При выводе эффективного гамильтониана для манганитов мы стартуем со следующей модели, учитывающей все обсуждаемые свойства системы [32]:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= H_{el} + H_{AF} + H_{JT} + H_{el-el}; \\ H_{el} &= -\sum_{\langle nm \rangle} \sum_{ab\sigma} (t_{nm}^{ab} a_{na\sigma}^\dagger a_{n\sigma} + h.c.) - \\ &- J_H/2 \sum_n \sum_{a\sigma\sigma'} a_{na\sigma}^\dagger (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{S}_n)_{\sigma\sigma'} a_{n\sigma\sigma'}; \\ H_{AF} &= J' \sum_{\langle nm \rangle} \mathbf{S}_n \mathbf{S}_m; \\ H_{JT} &= -g \sum_n \sum_{ab\sigma} |a_{na\sigma}^\dagger| Q_{2n}(\sigma^x)_{ab} + \\ &+ Q_{3n}(\sigma^z)_{ab} |a_{nb\sigma} + \frac{K}{2} \sum_n (Q_{2n}^2 + Q_{3n}^2); \\ H_{el-el} &= \frac{U_1}{2} \sum_{na\sigma} n_{na\sigma} n_{na\bar{\sigma}} + \frac{U_1}{2} \sum_{na\sigma\sigma'} n_{na\sigma} n_{n\bar{\sigma}\sigma'}. \end{aligned} \quad (1)$$

В этих выражениях $a_{na\sigma}^\dagger$ и $a_{na\sigma}$ – операторы рождения и уничтожения e_g -электронов на узле \mathbf{n} с орбитальным индексом a ($3z^2-r^2$ или x^2-y^2) и проекцией спина σ , $n_{na\sigma} = a_{na\sigma}^\dagger a_{na\sigma}$, \mathbf{S}_n – локальный спин t_{2g} -электронов на узле \mathbf{n} , который мы будем рассматривать как классический вектор. Далее, $\boldsymbol{\sigma}$ – матрицы Паули, Q_{2n} , Q_{3n} – нормальные моды тетрагональных искажений MnO_6 октаэдра, приводящих к расщеплению e_g -уровня. Член H_{el} в гамильтониане (1) включает в себя кинетическую энергию e_g -электронов, а также слагаемое, описывающее обменное (хундовское) взаимодействие между e_g - и t_{2g} -электронами. Слагаемое H_{AF} описывает антиферромагнитное сверхобменное взаимодействие ($J' > 0$) между локальными спинами. Слагаемое H_{JT} определяет взаимодействие между e_g -состояниями и колебательными модами MnO_6 октаэдров, где K – упругая константа, соответствующая Q_{2n} и Q_{3n} модам, g – константа электрон–решеточного взаимодействия. Наконец, последнее слагаемое в (1), H_{el-el} , описывает электрон–электронное взаимодействие e_g -электро-

нов, где черта над a или σ значит, соответственно, не a или не σ .

Далее мы рассмотрим предел $J_H \rightarrow \infty$. В этом случае спин e_g -электрона на узле \mathbf{n} всегда параллелен локальному спину \mathbf{S}_n , и в результате мы можем перейти от операторов $a_{na\sigma}$ к операторам c_{na} , описывающим e_g -электроны с проекцией спина $+1/2$ на направление \mathbf{S}_n . Такое преобразование приводит к преобразованию амплитуд перескока вида [33]: $t_{nm}^{ab} \rightarrow t_{nm}^{ab} \cos(v_{nm}/2)$, где $\cos v_{nm} = \mathbf{S}_n \mathbf{S}_m / S^2$.

Кроме того, мы будем считать, что $t_{nm}^{(l)} \rightarrow 0$ для “локализованных” e_g -электронов (l -электронов), которые создают максимальные искажения кислородных октаэдров, приводя к выигрышу в энергии $\epsilon_{JT}^{(0)} = -g^2/2K$, в то время как “зонные” e_g -электроны (b -электроны) имеют ненулевую амплитуду перескока, но создают значительно меньшие искажения кислородных октаэдров. Величина $\epsilon_{JT}^{(0)}$ получается путем минимизации гамильтониана H_{JT} по Q_{2n} и Q_{3n} при равном единиче числе e_g -электронов, приходящихся на один узел решетки. В результате эффективный гамильтониан модели можно записать в виде:

$$\begin{aligned} H_{eff} &= -t \sum_{\langle mn \rangle} b_n^\dagger b_n \sqrt{\frac{S^2 + \mathbf{S}_n \mathbf{S}_m}{2S^2}} - \epsilon_{JT} \sum_n n_{ln} + \\ &+ U \sum_n n_{ln} n_{bn} + J' \sum_{\langle mn \rangle} \mathbf{S}_n \mathbf{S}_m, \end{aligned} \quad (2)$$

где $n_{bn} = b_n^\dagger b_n$ и $n_{ln} = l_n^\dagger l_n$ – операторы числа b и l электронов на узле \mathbf{n} , b_n^\dagger , b_n и l_n^\dagger , l_n – соответствующие операторы рождения и уничтожения электронов. Первые три слагаемых в H_{eff} описывают, соответственно, кинетическую энергию b -электронов, выигрыш в энергии локализованных электронов с энергией $\epsilon_{JT} \sim -g^2/2K$, и, наконец, член, описывающий отталкивание b и l электронов на одном узле. Легко заметить, что эта часть эффективного гамильтониана соответствует модели Фаликова–Кимбалла [34]. Эта модель, сформулированная первоначально для соединений с тяжелыми фермионами, описывает взаимодействие между электронами в сравнительно широкой зоне проводимости и электронами, локализованными на некотором энергетическом уровне. Здесь, в отличие от стандартной модели Фаликова–Кимбалла, амплитуда перескока зонных электронов между узлами \mathbf{n} и \mathbf{m} зависит от взаимной ориентации локальных спинов в этих узлах. Последнее слагаемое в H_{eff} описывает сверхобменное (через ионы кислорода) антиферромагнитное взаимодействие локальных спинов. Характерные значения энер-

гетических параметров эффективной модели равны [1]:

$$U \sim 5 \text{ эВ}, t \sim 0.2 \text{ эВ}, \epsilon_{JT} \sim 0.2 \text{ эВ}, J' \sim 0.01 \text{ эВ}. \quad (3)$$

Таким образом, рассматриваемая эффективная модель манганитов представляет собой расширенную модель Фаликова–Кимбалла, в которой введены дополнительные степени свободы — локальные спины магнитных ионов. Известно, что модель Фаликова–Кимбалла неустойчива к расслоению на фазы в некоторой области параметров [35]. Уже одно это обстоятельство указывает на то, что рассматриваемая модель манганитов может быть неустойчива по отношению к фазовому расслоению. Мы покажем ниже, что это действительно так, причем безотносительно неустойчивости непосредственно самой модели Фаликова–Кимбалла.

В качестве исходных соединений мы будем рассматривать соединения типа ReMnO_3 . В таких манганитах электронная конфигурация ионов марганца соответствует одному e_g -электрону на узле. При замещении редкоземельного элемента Re щелочноземельным элементом A на e_g -уровне образуется дырка. Таким образом, связь между средним числом локализованных и зонных электронов с уровнем допирования x имеет вид: $n_b + n_l = 1 - x$. Надо отметить, что параметры эффективной модели (2), такие как t и ϵ_{JT} , могут зависеть, вообще говоря, от температуры, например, за счет уменьшения амплитуды перескока t с ростом температуры из-за эффекта поляронного сужения зоны [36, 37], который может быть достаточно сильным для манганитов.

При исследовании эффективного гамильтониана (2) мы воспользуемся приближением типа среднего поля, которое позволит расцепить магнитные (связанные с локальными спинами) и электронные степени свободы. Процедура расщепления выглядит следующим образом. В (2) величины $b_n^\dagger b_m$ и $\vartheta_{nm} \equiv \sqrt{(S^2 + \mathbf{S}_n \mathbf{S}_m)} / 2S^2 = \sqrt{(1 + \mathbf{e}_n \mathbf{e}_m)} / 2$ могут быть записаны в виде:

$$\begin{aligned} b_n^\dagger b_m &= \langle b_n^\dagger b_m \rangle + \delta(b_n^\dagger b_m), \\ \vartheta_{nm} &= \langle \vartheta_{nm} \rangle + \delta\vartheta_{nm}, \end{aligned} \quad (4)$$

где угловые скобки означают усреднение по температуре, $\mathbf{S}_n = S\mathbf{e}_n$, \mathbf{e}_n — единичный вектор, описывающий направление локального спина на узле \mathbf{n} (напомним, что мы рассматриваем локальный спин $S = 3/2$ как классический вектор). Пренебрегая слабыми, пропорциональными $\delta(b_n^\dagger b_m) \delta\vartheta_{nm}$, мож-

но записать эффективный гамильтониан в виде суммы “электронной” и “магнитной” частей:

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}}^{\text{MF}} &= H_{\text{el}} + H_m - \mu(n_{ln} + n_{bn}), \\ H_{\text{el}} &= -\bar{t} \sum_{\langle mn \rangle} b_n^\dagger b_n - \epsilon_{JT} \sum_n n_{ln} + U \sum_n n_{ln} n_{bn}, \\ H_m &= \sum_{\langle mn \rangle} [\langle b_n^\dagger b_n \rangle (t\vartheta_{mn} - \bar{t}) - J' S^2 \mathbf{e}_n \mathbf{e}_m], \end{aligned} \quad (5)$$

где $\bar{t} = t(T) \sqrt{(1 + \mathbf{e}_n \mathbf{e}_m)} / 2$ — эффективный интеграл перескока, зависящий от температуры и угла между локальными спинами (температурная зависимость t определяется поляронным сужением зоны), μ — химический потенциал. Как видно из (5), электронная часть эффективного гамильтониана, H_{el} , представляет собой гамильтониан модели Фаликова–Кимбалла, в котором амплитуда перескока зонных электронов зависит от температуры и магнитной структуры, которую образуют локальные спины.

2.1.2. Однородные состояния (ферромагнитное состояние)

В ферромагнитном состоянии мы имеем $\langle \mathbf{e}_n \mathbf{e}_m \rangle \approx 1$ при температурах, много меньших температуры Кюри T_C . Рассмотрим сначала электронную часть эффективного гамильтониана. Взаимодействие зонных и локализованных электронов приводит к возникновению двух хаббардовских подзон b -электронов, разделенных щелью порядка U . Закон дисперсии подзон имеет вид:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{\epsilon(\mathbf{k}) + U}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon(\mathbf{k}) + U}{2}\right)^2 + U\eta\epsilon(\mathbf{k})}.$$

В этом выражении $\epsilon(\mathbf{k})$ — затравочный спектр b -электронов, $\epsilon(\mathbf{k}) = \bar{w}\zeta(\mathbf{k})$,

$$\zeta(\mathbf{k}) = -(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z) / 3,$$

где \bar{w} — полуширина зоны свободных электронов, которая зависит как от температуры, так и от магнитной структуры, образованной локальными спинами.

Поскольку допирование в рассматриваемых манганитах является дырочным, $n_b + n_l = 1 - x < 1$, то верхняя хаббардовская подзона всегда остается пустой. В этом случае мы можем перейти к пределу $U \rightarrow \infty$. Ширина нижней хаббардовской подзоны b -электронов равна $W = 2(1 - n_l)\bar{w}$, а ее заполнение равно $1 - n_l$. Зависимости n_b и n_l от уровня допирования x представлены на рис. 2.

При малом допировании b -электроны отсутствуют, $n_l = 1 - x$, а ширина нижней хаббардовской подзоны равна $W = 2x\bar{w}$. При критической концентрации допирования $x_1(T) = \epsilon_{JT} / \bar{w}(T)$, когда дно нижней хаббардовской подзоны достига-

ет уровня $-\epsilon_{JT}$, в системе начинают появляться зонные электроны, которые сосуществуют с локализованными, вплоть до второй критической концентрации $x_2(T)$, при которой $n_l = 0$. Поскольку \bar{w} уменьшается с температурой как за счет разрушения ферромагнитного порядка, так и за счет поляронного сужения зоны, то обе критические концентрации, x_1 и x_2 , изменяются с ростом температуры (обе увеличиваются). Отметим, что возникновение ферромагнитного порядка возможно только при $x > x_1$, когда в системе имеются b -электроны.

Рассмотрим теперь магнитную часть гамильтониана (5). Мы будем исследовать H_m в приближении среднего поля. Следуя стандартной процедуре вывода среднеполевого гамильтониана [38], мы заменяем единичный вектор $\mathbf{e}_m = \{\sin\theta_m \cos\phi_m, \sin\theta_m \sin\phi_m, \cos\theta_m\}$ в выражении для H_m на его среднее значение $\{0, 0, \sigma\}$, где $\sigma = \langle \cos\theta_m \rangle$ – среднее значение локального спина, рассчитанное в единицах $S = 3/2$. В результате H_m разбивается на сумму независимых одноузельных гамильтонианов, $H_m = \sum \mathbf{n} H_{m0}(\cos\theta_n)$, где

$$H_{m0} = -B(\bar{w}, n_l, \mu) \times \left(w(T) \sqrt{(1 + \sigma \cos\theta)/2 - \bar{w}} + J\sigma \cos\theta, \right) \quad (6)$$

$w(T) = zI(T)$, $J = zJ'S^2$ ($z = 6$ – число ближайших соседей для кубической решетки), а функция B ответственна за взаимосвязь с электронной частью гамильтониана. Первое слагаемое в правой части этого выражения, имеющее минимум при $\theta = 0$, описывает ферромагнитное взаимодействие локальных спинов за счет механизма двойного обмена. Второе слагаемое описывает антиферромагнитное сверхобменное взаимодействие. Равновесное значение σ при конечной температуре определяется из соответствующего условия самосогласования. Кроме того, необходимо учесть условие самосогласования для величины \bar{w} , которая зависит от среднего $\cos\theta$. Соответствующий анализ позволяет выявить особенности магнитных фазовых переходов в рассматриваемой системе.

Отметим, что переход из ферромагнитного (FM) в парамагнитное (PM) состояние не означает, что в системе исчезают b -электроны. Как обсуждалось ранее, $n_b \neq 0$ при $x > x_1(T)$, и значение x_1 увеличивается с ростом температуры. При определенной температуре T^* , $x_1(T)$ достигает уровня допирования x . Ясно, что $T^* > T_C$, поскольку ферромагнитное состояние может существовать только при $n_b \neq 0$. Таким образом, в нашей модели в дополнении к магнитному фазовому переходу должен существовать еще переход, при котором в системе исчезают зонные электроны. Температура T^* такого перехода определяется из условия $x_1(T^*) = x$.

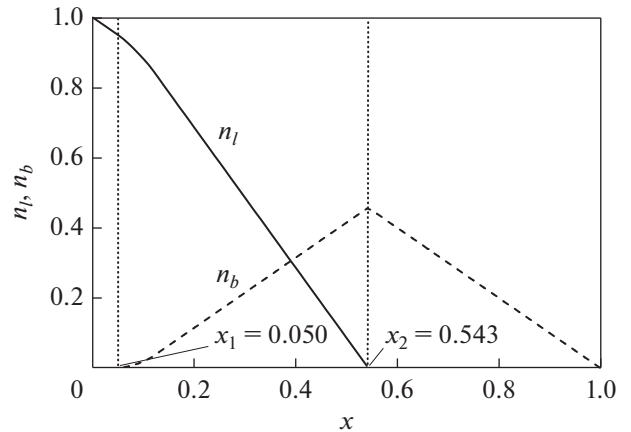


Рис. 2. Зависимость n_l (сплошная кривая) и n_b (пунктирная кривая) от уровня допирования x , рассчитанная при $\epsilon_{JT}/\bar{w} = 0.05$, $T = 0$ [32].

2.1.3. Однородные состояния (антиферромагнитное и подкошенное состояния)

Рассматриваемая модель допускает другие типы однородных состояний, конкурирующих с ферро- и парамагнетизмом, а именно антиферромагнитное, и т.н. скошенное состояние (или скошенное антиферромагнитное (SAF) состояние, см. рис. 1). В скошенной фазе так же, как и в антиферромагнитной, имеются две магнитные подрешетки, угол v между направлениями магнитных моментов которых (угол подкоса) отличен как от 0 (ферромагнитная фаза), так и от π (антиферромагнитная фаза). Скошенная фаза может возникать благодаря конкуренции между ферромагнитным взаимодействием локальных спинов, возникающим за счет двойного обмена, и их антиферромагнитным сверхобменным взаимодействием. Впервые подкошенная фаза в манганитах была рассмотрена, по-видимому, Де Женом [33], а впоследствии более подробно проанализирована Нагаевым [39]. Мы рассмотрим антиферромагнитное и подкошенные состояния G -типа, когда каждый узел в одной магнитной подрешетке имеет ближайшими соседями узлы, принадлежащие другой подрешетке.

Угол подкоса v определяется как $\cos v = \langle \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_\Delta \rangle$. В приближении среднего поля это среднее равно $\langle \mathbf{e}_0 \mathbf{e}_\Delta \rangle = \langle \mathbf{e}_0 \rangle \langle \mathbf{e}_\Delta \rangle$, где Δ – номера ближайших соседей заданного узла $\mathbf{0}$. Таким образом, для скошенной фазы мы также можем ввести параметр σ , который связан с углом подкоса как $\sigma^2 = \cos v$ если $v < \pi/2$ или $\sigma^2 = -\cos v$, если $v > \pi/2$. В этой ситуации рассмотрение проводится практически так же, как и для ферромагнитной фазы. Отметим однако, что в скошенной фазе $\sigma < 1$ даже при $T = 0$.

Так же, как и ферромагнитное состояние, подкошенное состояние существует только при на-

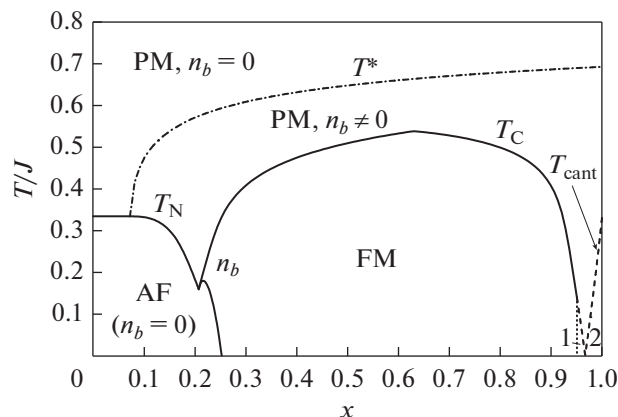


Рис. 3. Фазовая диаграмма модели (5) без учета возможности возникновения фазового расслоения. Области 1 и 2 соответствуют подкошенным состояниям с $\cos \nu > 0$ и $\cos \nu < 0$, соответственно; $\epsilon_{JT}/w_0 = 0.05$, $J/w_0 = 0.01$ ($w_0 \equiv zt$ ($T = 0$)) [40].

личии в системе b -электронов. При уровне допирования $x < x_1(T)$ мы имеем $n_b = 0$, и система находится в антиферромагнитном (AF) состоянии. При этом если $x < x_1(0)$, то $n_b = 0$ при любой температуре. В этом случае температура Нееля не зависит от x . При большем допировании может возникать переход из антиферромагнитного в парамагнитное состояние с $n_b \neq 0$, и температура Нееля T_N в этом случае определяется путем сравнения свободных энергий антиферромагнитного и парамагнитного состояний. Переход в парамагнитную фазу в этом случае является переходом первого рода. В области допирования, соответствующего этому сценарию, антиферромагнитное состояние оказывается энергетически более выгодным, чем подкошенное. При больших x существует область допирования, в которой реализуется температурный переход первого рода из антиферромагнитного в ферромагнитное состояние. При еще большем допировании более выгодной становится ферромагнитная фаза. При этом фазовая диаграмма модели имеет тройную AF–FM–PM точку при $x = x_3$. Таким образом, в нашей модели подкошенная фаза не реализуется при $x < 0.5$. Подкошенное состояние может реализовываться вблизи $x = 1$, при $x_4 < x < 1$, где отсутствуют локализованные электроны, но число b -электронов недостаточно, чтобы стабилизировать ферромагнитное состояние.

Фазовая диаграмма модели в плоскости x – T представлена на рис. 3. Она более или менее адекватно воспроизводит экспериментальную фазовую диаграмму манганитов (AF- и FM-фазы при $x < 0.5$, скошенную антиферромагнитную фазу при $1 - x \ll 1$), представленную на рис. 1, за исключением области $0.5 < x < x_4$, где теоретиче-

ская модель предсказывает ферромагнитную металлическую фазу, в то время как в этой области экспериментально наблюдается антиферромагнитная диэлектрическая фаза. Это, по-видимому, связано с тем, что при больших x необходимо более аккуратно учитывать орбитальные степени свободы. Кроме того, в рассматриваемой модели никак не учитывается дальнедействующее кулоновское отталкивание электронов, которое может приводить к зарядовому упорядочению, наблюдаемому в этой области допирования (см. рис. 1).

2.1.4. Особенности фазового расслоения в манганитах

До сих пор мы рассматривали только однородные состояния системы, однако, как обсуждали выше, есть указания на то, что рассматриваемая модель может быть неустойчива к фазовому расслоению. Мы будем исследовать возможность возникновения фазового расслоения в рассматриваемой модели манганитов путем анализа зависимости свободной энергии однородного состояния от допирования. В рассматриваемой модели возможны различные типы фазового расслоения: расслоение на антиферромагнитную (AF) и ферромагнитную (FM) фазы или на парамагнитную (PM) и ферромагнитную (FM) фазы, каждая из фаз характеризуется своим числом носителей заряда. Возможно также и расслоение на две PM-фазы с различным числом носителей.

Мы сфокусируемся на области допирования $x < 0.5$, где фазовая диаграмма модели качественно соответствует наблюдаемой, и поэтому не будем анализировать устойчивость скошенной фазы при x , близким к единице.

На рис. 4 показаны зависимости свободной энергии наиболее выгодного однородного состояния, $F_{\text{hom}} = \min(F_{\text{fm}}, F_{\text{af}}, F_{\text{pm}}, F_{\text{cant}})$, от допирования, рассчитанные при нескольких различных температурах. Кривые $F_{\text{hom}}(x)$ имеют два минимума, один при $x = 0$, а второй вблизи $x = x_2(T)$. При $T = 0$ кривая имеет излом (который сглаживается при конечной температуре) в точке перехода из антиферромагнитного в ферромагнитное состояние. Кривая $F_{\text{fm}}(x)$ имеет отрицательную кривизну от точки излома до $x \approx x_2(T)$, что указывает на неустойчивость ферромагнитного состояния в этой области. Однако это обстоятельство не столь важно в рассматриваемом случае. Более важным является наличие излома на кривой $F_{\text{hom}}(x)$: благодаря ему фазовое расслоение существует в области $0 < x \leq x_2$, система расслаивается на антиферромагнитную (или парамагнитную при $T > T_N$) диэлектрическую фазу с $n_b = 0$ и концентраций электронов $x_A = 0$ и ферромагнитную (или парамагнитную) металлическую фазу с $n_l \approx 0$ и

концентрацией электронов $x_B \approx x_2(T)$. Концентрация x_2 находится из построения Максвелла [41].

Обозначим объемную долю металлической фазы через p . Тогда в силу закона сохранения заряда величина p находится из соотношения $px_B + (1-p)x_A = x$. Свободная энергия фазово-расслоенного (PS) состояния при этом равна $F_{PS} = pF_{\text{hom}}(x_B) + (1-p)F_{\text{hom}}(x_A)$.

Отметим, что свободная энергия F_{PS} и область концентраций, в которой существует фазовое расслоение, были получены в приближении полностью вырожденной электронной компоненты системы. Учет температурных поправок приводит к уменьшению области фазовой диаграммы, в которой существует фазовое расслоение.

Однако более важным фактором, влияющим на фазовое расслоение, является то обстоятельство, что концентрация электронов в фазах А и В различна. Поэтому при расчете энергии неоднородного состояния необходимо включить в модель дальнедействующее кулоновское отталкивание электронов, которое существенно уменьшает область существования неоднородного состояния, и может даже сделать его невыгодным при любых концентрациях допирования (подробнее см. в [32]).

Здесь мы приведем окончательный результат для фазовой диаграммы модели, рассчитанной с учетом влияния дальнедействующего кулоновского отталкивания на фазовое расслоение. Она представлена на рис. 5. Фазовое расслоение существует в области концентраций $0 \leq x \leq 0.5$, а по температуре область фазового расслоения ограничена кривой $T_{PS}(x)$, которая оказывается порядка температуры Кюри ферромагнитной фазы. Поскольку концентрации x_A и x_B практически не зависят от уровня допирования, то температуры магнитных фазовых переходов в каждой из фаз тоже почти не зависят от x . Температура Нееля антиферромагнитной компоненты неоднородного состояния можно считать равной $T_N^0 = J/3$, в то время как температура Кюри ферромагнитной компоненты примерно соответствует максимальной температуре Кюри однородного ферромагнитного состояния (см. горизонтальные штриховые линии на рис. 5).

Рассмотрим теперь переход по температуре из неоднородного в однородное состояние. Поскольку $x_A \approx 0$, $x_B \approx x_2(T)$, то объемная доля металлической фазы p равна $p(T) \approx x/x_2(T)$. В зависимости от соотношений между температурами T_{PS} , T_C , T_N и T^* , система может переходить из фазово-расслоенного в однородное FM ($p = 1$), AF ($p = 0$) или PM ($s_{n_b} \neq 0$ или $n_b = 0$) состояние. Во всех случаях равновесное число зонных электронов n_b

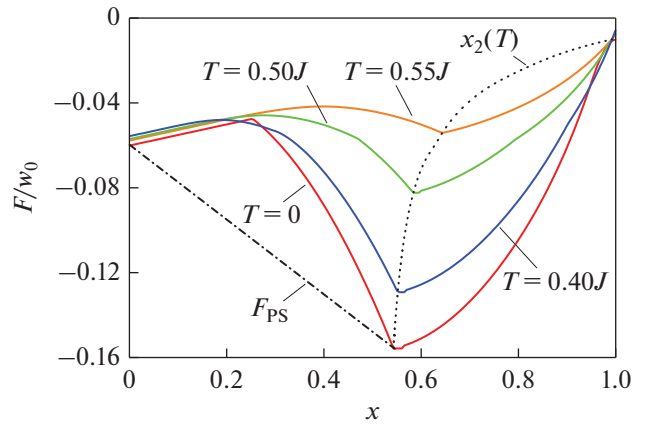


Рис. 4. Зависимости свободной энергии однородного состояния $F_{\text{hom}} = \min(F_{\text{fm}}, F_{\text{af}}, F_{\text{pm}}, F_{\text{cant}})$ от уровня допирования, рассчитанные при различных температурах. Штрих-пунктирная линия – свободная энергия фазово-расслоенного состояния при $T = 0$. Пунктирная кривая соединяет точки $x_2(T)$. Параметры модели: $\epsilon_{JT}/w_0 = 0.05$, $J/w_0 = 0.01$ [40].

претерпевает скачок при переходе в однородное состояние.

2.1.5. Влияние магнитного поля

В связи с тем, что манганиты характеризуются эффектом колоссального магнитосопротивления, представляется чрезвычайно интересным рассмотреть вопрос о влиянии магнитного поля на свойства системы. Мы не будем исследовать здесь транспортные характеристики, а ограничимся лишь рассмотрением изменения термодинамических величин при приложении магнитного поля. Однако уже этого достаточно, чтобы сделать качественные выводы о поведении проводимости системы в магнитном поле. Отметим также, что транспортные свойства (проводимость, магнитосопротивление, $1/f$ шум) в фазово-расслоенных манганитах были подробно исследованы в работах [42–44].

При рассмотрении влияния магнитного поля \mathbf{H} мы будем учитывать только взаимодействие поля с локальными спинами, пренебрегая как парамагнитным, так и диамагнитными слагаемыми в электронном гамильтониане H_{el} , появляющимися в ненулевом \mathbf{H} . Это соответствует пределу большого локального спина $S \gg 1$. Таким образом, в ненулевом магнитном поле мы добавляем только одно слагаемое в полный гамильтониан модели (6), равное $-\mu_B g \Sigma_n \mathbf{S}_n \mathbf{H}$, где μ_B – магнетон Бора, g – фактор Ланде, который, вообще говоря, может сильно отличаться от двойки. В результате модифицируется только магнитная часть гамильтониана (5), где под знаком суммы появляется дополнительное слагаемое $\mathbf{e}_n \mathbf{h}$ ($\mathbf{h} = \mu_B g \mathbf{S} \mathbf{H}$).

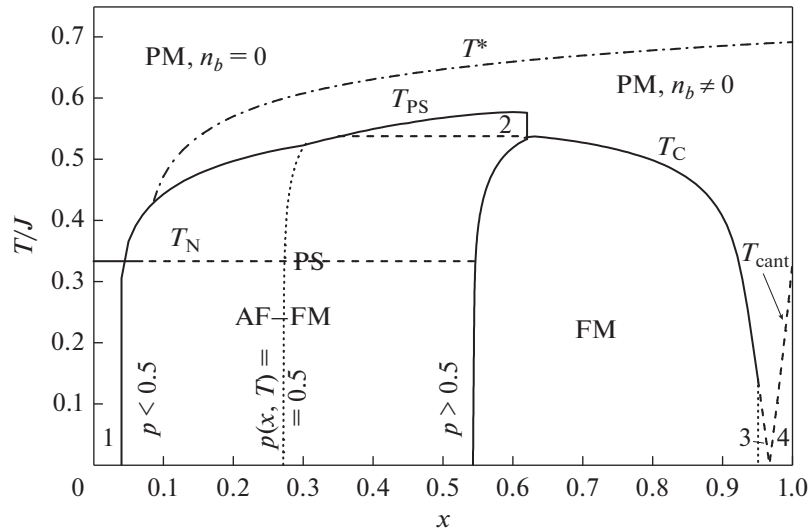


Рис. 5. Фазовая диаграмма модели с учетом фазового расслоения, рассчитанная при $\epsilon_{JT}/w_0 = 0.05$, $J/w_0 = 0.01$. Параметр, характеризующий дальнедействующее кулоновское отталкивание электронов равен $u/w_0 = 0.5$. Область фазового расслоения (PS) ограничена жирной сплошной кривой. Числа означают следующие фазы: 1 – однородная AF фаза; 2 – фазовое расслоение на две PM фазы с $n_b \neq 0$ и $n_b = 0$; 3 и 4 – однородные скошенные фазы [40].

В ферромагнитном состоянии, в приближении среднего поля, среднее значение $\sigma = \langle S_0^z \rangle / S$ находится путем решения системы уравнений согласования с видоизмененным гамильтонианом. При $T < T_C$ поправка к свободной энергии в присутствии магнитного поля $\delta F \sim -h$, в то время как в парамагнитной фазе $\delta F \sim -h^2/T_C$. В антиферромагнитной и скошенной фазах результат зависит от взаимной ориентации магнитного поля H и вектора антиферромагнетизма $I = (\langle e_0 \rangle - \langle e_A \rangle) / 2$. Минимум свободной энергии (мы полностью пренебрегаем здесь магнитной анизотропией) достигается, когда $h \perp I$. Поэтому мы рассмотрим именно такую конфигурацию. Пусть вектор I направлен вдоль оси z , а магнитное поле направлено вдоль оси x . Тогда направления векторов локальных спинов в двух магнитных подрешетках равны $\langle e_0 \rangle = \{\sigma, 0, l\}$ и $\langle e_A \rangle = \{\sigma, 0, -l\}$.

В полях $h/J \ll 1$ соответствующая система уравнений самосогласования может решаться по теории возмущений по магнитному полю. При этом поправка к свободной энергии в антиферромагнитном состоянии $\delta F \sim -h^2/T_N$ при температурах как выше, так и ниже T_N , что связано с отсутствием спонтанной намагниченности при $H = 0$. В то же время в ферромагнитном состоянии мы имеем $\delta F \sim -h$ при $T < T_C$. Таким образом, внешнее магнитное поле делает более выгодным ферромагнитное состояние. В частности, оно приводит к уменьшению температуры перехода из AF- в FM-фазу, который существует в некоторой области допирования (см. рис. 3). Магнитное поле приво-

дит также к увеличению эффективного обменного интеграла и увеличению числа b -электронов при заданной температуре. Кроме того, магнитное поле изменяет температуру перехода из неоднородного в однородное состояние, при этом разница $\Delta T_{PS} = T_{PS}(H) - T_{PS}(0) \sim h$.

Как отмечали ранее, число зонных электронов n_b меняется существенно при переходе из неоднородного в однородное состояние. Соответственно, сдвиг температуры T_{PS} в магнитном поле приводит к существенному изменению числа b -электронов при заданной температуре вблизи T_{PS} . Температурная зависимость изменения относительной концентрации $[n_b(H) - n_b(0)] / n_b(0)$ показана на рис. 6. Мы видим, что магнитное поле приводит к возникновению узкого пика относительной концентрации при температурах вблизи перехода в однородное состояние. Поскольку число зонных электронов определяет проводимость системы, то существование такого пика может быть связано с эффектом колоссального магнитосопротивления, наблюдаемого в манганитах.

2.1.6. Заключительные замечания к разделу о манганитах

Таким образом, в этом разделе мы описали эффективную электронную модель манганитов и исследовали ее свойства. Модель предполагает конкуренцию между локализацией электронов за счет ян-теллеровских искажений решетки и делокализацией. Гамильтониан модели учитывает основную специфику манганитов: сильное элек-

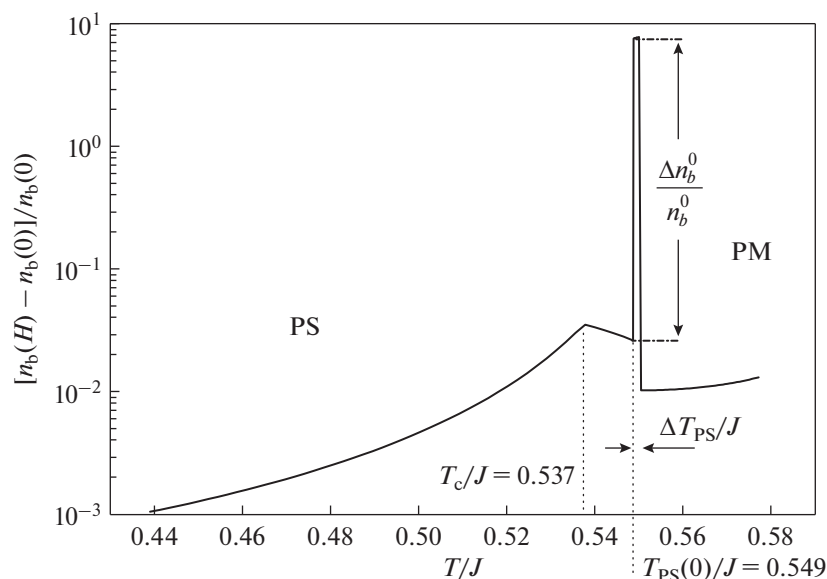


Рис. 6. Температурная зависимость $[n_b(H) - n_b(0)]/n_b(0)$, рассчитанная при $h/J = 0.2$, $x = 0.3$, $\epsilon_{IT}/w_0 = 0.05$, $J/w_0 = 0.01$. Резкий скачок относительного числа b -электронов существует при переходе из фазово-расслоенного (PS) в однородное парамагнитное (PM) состояние [40].

трон–решеточное и электрон–электронное взаимодействия, включая сильную хундовскую связь d -электронов марганца, а также сверхобменное взаимодействие локальных спинов. Такой подход, в частности, позволяет объяснить несоответствие между числом зонных электронов n_b и уровнем допирования [27–29, 32].

Мы показали, что наша модель предсказывает существование фазового расслоения в широкой области температур и допирования. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными о фазовом расслоении в манганитах. Так, в области малых концентраций допирования эксперименты [45, 46] по упругому и неупругому рассеянию нейтронов в манганитах показали наличие небольших ферромагнитных капель в антиферромагнитной матрице. Эксперименты по ядерному магнитному резонансу (ЯМР) также свидетельствуют в пользу этой картины: авторы работы [47] наблюдали в манганитах два резонансных пика, один из которых соответствовал ферромагнитной, а другой – антиферромагнитной фазе; следов наличия подкошенного состояния обнаружено не было. О наличии ферромагнитных металлических капель свидетельствуют также эксперименты [48] по малоугловому нейтронному рассеянию.

Имеются также четкие экспериментальные указания, что фазовое расслоение характерно не только для магнитоупорядоченных фаз, но существует и в парамагнитной области [49, 50]. В области оптимальных концентраций ($x \sim 0.3$) в систе-

ме $La_{1-x}Ca_xMnO_3$ авторы работы [51] с помощью сканирующей туннельной микроскопии наблюдали маленькие ферромагнитные металлические кластеры в парамагнитной матрице выше температуры Кюри.

Обработка экспериментальных данных по проводимости, магнитосопротивлению и магнитной восприимчивости различных манганитов в парамагнитной фазе [52–55] с помощью модели, в которой электронный транспорт осуществляется путем туннелирования электронов между металлическими каплями с сильными ферромагнитными корреляциями [43], показывает хорошее согласие между теорией и экспериментом.

Здесь мы не рассматриваем геометрию (капли, страйпы и пр.) и характерные размеры неоднородностей. Это будет сделано в разд. 4. Отметим только, что геометрия фазово-расслоенного состояния может существенно влиять на транспортные свойства системы. Так, в случае капельной структуры неоднородностей (ферроны в диэлектрической матрице), изменение концентрации ферромагнитной металлической фазы за счет допирования или приложения магнитного поля приводит к перколяционному переходу металл–диэлектрик, что, по-видимому, имеет непосредственное отношение к явлению колоссального магнитосопротивления.

Отметим, что рассмотренная здесь модель слишком грубо учитывает орбитальные степени свободы манганитов. Это оставляет за рамками рассмотрения такое существенное свойство манганитов, как

орбитальное упорядочение, существующее при малых концентрациях допирования, а также вблизи половинного заполнения. Возможность фазового расслоения при орбитальном упорядочении (“орбитальные” ферроны), подробно рассматривали в работах [56, 57].

2.2. Кобальтиты. Эффективный гамильтониан для систем со спиновыми переходами

Среди оксидов переходных металлов существуют соединения, содержащие ионы кобальта или железа, в которых возможно изменение спинового состояния иона при изменении температуры, давления или допирования. Как уже указывали выше, в октаэдрическом окружении кристаллическое поле расщепляет пятикратно вырожденный d -уровень переходного металла на трехкратно вырожденный t_{2g} -уровень (d_{xy}, d_{yz}, d_{zx}) и двукратно вырожденный e_g -уровень ($d_{x^2-y^2}, d_{3z^2-r^2}$).

Переходы с изменением спинового состояния становятся возможными, когда энергия расщепления d -уровня в кристаллическом поле Δ сравнима с хундовской константой связи J_H . Примерами таких систем являются соединения, содержащие ионы Co^{3+} (типичный представитель – $LaCoO_3$ [58–61], см. также обзор [62]), которые могут находиться в низкоспиновом (LS) состоянии со спином $S = 0$ (t_{2g}^6), промежуточном состоянии (IS) со спином $S = 1$ ($t_{2g}^5 e_g^1$), и высокоспиновом (HS) состоянии ($t_{2g}^4 e_g^2$) с $S = 2$. Близость энергий этих состояний и может приводить к переходам при изменении температуры, давления или при допировании. Кроме того, существует возможность упорядочения ионов с различным полным спином [63, 64], наподобие орбитального или спинового упорядочения. Таким образом, в системах со спиновыми переходами в дополнение к зарядовым, орбитальным и спиновым (связанными с проекцией спина) степеням свободы добавляется еще одна, связанная с величиной спина иона переходного металла. Взаимодействие этой последней степени свободы с остальными в принципе может приводить к возникновению неоднородных состояний, аналогично тому, как это происходит в других сильно коррелированных системах, например, манганитах, рассмотренных в предыдущем разделе.

Как уже упоминали выше, спиновые переходы, наблюдаемые в соединениях, содержащих ионы Co^{3+} и Fe^{2+} , могут возникать при изменении температуры или давления, а также при допировании. Мы сфокусируемся на последнем случае, в котором необходимо учитывать конкуренцию между одноузельными эффектами и кинетической энергией носителей заряда, возникающих при допиро-

вании. Мы рассмотрим возможность возникновения неоднородных состояний в кобальтитах в рамках модели, во многих отношениях сходной с той, что рассматривали в предыдущем разделе.

Одним из основных параметров модели является отношение расщепления d -уровня в кристаллическом поле Δ к хундовской константе связи J_H . Мы построим фазовые диаграммы модели в плоскости Δ/J_H – x при различных значениях других параметров модели.

Прежде чем приступить к описанию предлагаемой электронной модели систем со спиновыми переходами и исследованию ее свойств, мы хотели бы качественно обсудить, почему, на наш взгляд, естественно ожидать возникновения фазового расслоения в таких системах. На поведение систем со спиновыми переходами существенное влияние оказывает т.н. эффект спиновой блокады [65]. Поясним здесь суть этого явления на примере материалов с ионами кобальта Co^{3+} , находящимися в низкоспиновом состоянии, $S = 0$. При электронном допировании таких систем ионы кобальта Co^{2+} оказываются в высокоспиновом состоянии, $S = 3/2$. В этом случае когерентный электронный транспорт оказывается невозможным (или сильно подавленным), поскольку невозможно произвести обмен между состояниями Co^{3+} с $S = 0$ и Co^{2+} с $S = 3/2$ посредством перемещения одного электрона. Движение электрона в этом случае приводит к появлению шлейфа “неправильных” ионов Co^{3+} , находящихся в промежуточном спиновом состоянии с $S = 1$, что в конечном счете приводит к локализации электрона, подобно тому, как это происходит в модели Хаббарда [66]. Эту ситуацию можно “исправить” путем изменения спиновых состояний ионов Co^{3+} вблизи рассматриваемого электрона. В результате электрон оказывается запертым в небольшой области из “неправильных” ионов Co^{3+} . Это, очевидно, является аналогом магнитных полюсов, неоднородных состояний, обсуждаемых в начале предыдущего раздела.

2.2.1. Спиновые состояния ионов кобальта

Рассмотрим системы со спиновыми переходами на примере дырочно допированных кобальтитов, которые имеют структуру перовскита (например, $La_{1-x}Sr_xCoO_3$). В этом случае мы имеем два вида ионов кобальта в системе, Co^{3+} и Co^{4+} . Каждый ион кобальта находится в окружении кислородных октаэдров, что приводит к расщеплению d -уровня иона кобальта на t_{2g} и e_g уровни. Обозначим в данном разделе энергию расщепления этих уровней как Δ . Перечислим сначала интересные нас спиновые состояния ионов Co^{3+} и Co^{4+} в октаэдрическом окружении, их электронные конфигурации и энергии. Ион Co^{3+} мо-

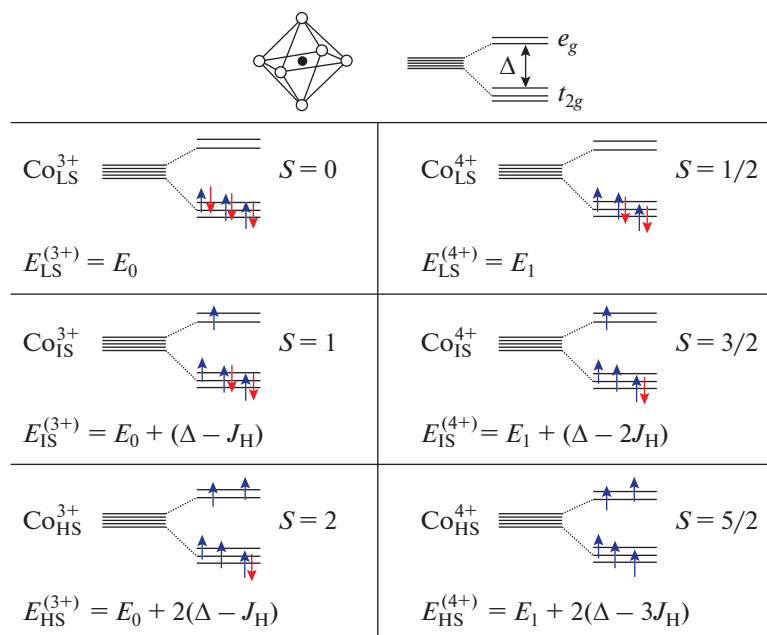


Рис. 7. Электронные конфигурации и энергии ионов Co^{3+} и Co^{4+} в октаэдрическом окружении [67].

жет находиться в низкоспиновом (LS) состоянии с $S = 0$ и электронной конфигурацией $t_{2g}^6 e_g^0$, промежуточном состоянии (IS) $t_{2g}^5 e_g^1$, $S = 1$, и высокоспиновом состоянии (HS) с электронной конфигурацией $t_{2g}^4 e_g^2$ и спином $S = 2$. Энергии этих состояний равны, соответственно, $E_{\text{LS}}^{(3+)} = E_0$, $E_{\text{IS}}^{(3+)} = E_0 + \Delta - J_{\text{H}}$ и $E_{\text{HS}}^{(3+)} = E_0 + 2\Delta - 4J_{\text{H}}$, где J_{H} — хундовская константа связи. Ион кобальта Co^{4+} также может находиться в низкоспиновом ($t_{2g}^5 e_g^0$, $S = 1/2$), промежуточном ($t_{2g}^4 e_g^1$, $S = 3/2$) и высокоспиновом ($t_{2g}^3 e_g^2$, $S = 5/2$) состояниях, которые отличаются от соответствующих состояний Co^{3+} удалением одного электрона с t_{2g} уровня. Энергии этих состояний равны $E_{\text{LS}}^{(4+)} = E_1$, $E_{\text{IS}}^{(4+)} = E_1 + \Delta - 2J_{\text{H}}$ и $E_{\text{HS}}^{(4+)} = E_1 + 2\Delta - 6J_{\text{H}}$. Здесь мы ввели E_0 и E_1 как некие реперные значения энергий ионов Co^{3+} и Co^{4+} , соответственно. Хотя эти величины могут значительно отличаться друг от друга, мы покажем ниже, что результат практически не зависит от значений E_0 и E_1 . Для большей ясности все перечисленные состояния ионов кобальта и их характеристики сведены на рис. 7.

Каким будет основное состояние ионов Co^{3+} и Co^{4+} , зависит от соотношения между Δ и J_{H} . Можно легко показать, что если $\Delta > 3J_{\text{H}}$, то низкоспиновое состояние имеет наименьшую энергию как для Co^{3+} , так и для Co^{4+} .

В случае, когда $2J_{\text{H}} < \Delta < 3J_{\text{H}}$, иону Co^{3+} по-прежнему выгодно находиться в низкоспиновом состоянии, в то время как иону Co^{4+} становится выгодно иметь высокоспиновую конфигурацию. Наконец, при $\Delta < 2J_{\text{H}}$, высокоспиновое состояние является основным состоянием для обоих ионов. Таким образом, мы видим, что в случае изолированных ионов промежуточное состояние никогда не реализуется.

Ситуация становится более сложной, когда мы учтем возможность перескока электронов между ионами кобальта. Заметим, во-первых, что так же, как и в случае с манганитами, интегралы перескока t_{2g} -электронов значительно меньше таковых для e_g -электронов. Поэтому в дальнейшем мы ими пренебрежем и будем рассматривать только перескоки e_g -электронов. Во-вторых, мы будем рассматривать только одноэлектронные процессы переноса заряда от Co^{3+} и Co^{4+} , т.е. такие процессы, при которых спин ионов кобальта при перескоке электрона меняется на $1/2$. Вероятность остальных процессов будет сильно подавлена: это и есть обуславливающий выше эффект спиновой блокады.

В результате в допированных кобальтитах остаются только два наиболее вероятных процесса переноса заряда: (i) переходы между IS Co^{3+} и LS Co^{4+} , а также (ii) переходы между HS Co^{3+} и IS Co^{4+} (см. рис. 7).

Следовательно, для того чтобы получить выигрыш в кинетической энергии электронов, необходимо, чтобы в системе имелись ионы кобальта в промежуточном (IS) спиновом состоянии. Такая ситуация может возникнуть, когда изолированные ионы Co^{4+} находятся в LS-состоянии, или

когда изолированные ионы Co^{3+} находятся HS-состоянии. В первом случае, реализуемом при $\Delta > 3J_H$, часть LS- Co^{3+} может перейти в IS-состояние. Во втором случае, соответствующем $\Delta < 2J_H$, часть HS- Co^{4+} переходит в IS-состояние. Когда $2J_H < \Delta < 3J_H$, электронный транспорт возможен лишь, если часть из обоих типов ионов, Co^{3+} и Co^{4+} , будет переведена из основного (для изолированных ионов) в возбужденные состояния. Такого типа двойные возбуждения представляются маловероятными. Ниже мы рассмотрим сначала наиболее реалистичный (для соединений типа $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$) случай $\Delta > 3J_H$.

Сконструируем эффективный электронный гамильтониан системы, учитывающий ее основные свойства, описанные выше, и проанализируем его основное состояние с учетом возможности фазового расслоения. Затем, аналогично, рассмотрим случай $\Delta < 2J_H$. После этого мы построим фазовую диаграмму предложенной модели в плоскости $x - \Delta/J_H$ и обсудим ее соответствие эксперименту. Надо заметить, что если уровень допирования x определяется процентным замещением редкоземельного элемента R в соединениях RCoO_3 щелочноземельным элементом A, то величина Δ контролируется радиусом r_R редкоземельного иона; чем больше r_R , тем меньше Δ , и наоборот.

2.2.2. Эффективный гамильтониан в случае низкоспинового основного состояния изолированных ионов

Мы рассматриваем системы с кристаллической структурой перовскита, в которой ионы кобальта образуют простую кубическую решетку. Относительное число ионов Co^{4+} и Co^{3+} равно, соответственно, x и $1 - x$, где x – уровень допирования. Здесь мы считаем, что основное состояние изолированных ионов является низкоспиновым ($\Delta > 3J_H$); это является типичной ситуацией для дырочно-допированных кобальтитов типа $\text{R}_{1-x}\text{A}_x\text{CoO}_3$ для $\text{R}=\text{La}$ или ионов с меньшим ионным радиусом r_R [79]. Мы можем получить выигрыш в кинетической энергии электронов, если часть ионов Co^{3+} перевести в промежуточное спиновое состояние. При этом, однако, мы будем терять в одноузельной энергии, которая в пересчете на один такой ион равна: $E_{\text{IS}}^{(3+)} - E_{\text{LS}}^{(3+)} = \Delta - J_H$.

Сконструируем теперь эффективный гамильтониан системы. Для этого выберем LS-состояние иона Co^{3+} , $|\text{Co}^{3+} \text{LS}\rangle$ в качестве вакуумного состояния $|0\rangle$ и введем операторы рождения и уничтожения электрона на e_g -уровне в узле \mathbf{n} , $a_{\mathbf{n}}^\dagger$ и $a_{\mathbf{n}}$, а также операторы рождения и уничтожения дырки на t_{2g} -уровне в узле \mathbf{n} , $c_{\mathbf{n}}^\dagger$ и $c_{\mathbf{n}}$. Действие этих

операторов на вакуумное состояние определяется следующими правилами (см. также рис. 7):

$$\begin{aligned} |0\rangle &= |\text{Co}_{\text{LS}}^{3+}\rangle, \quad E_{\text{LS}}^{(3+)} = E_0; \\ a_{\mathbf{n}}^\dagger |0\rangle &= |\text{Co}^{2+}\rangle, \quad E^{(2+)} = U'; \\ c_{\mathbf{n}}^\dagger |0\rangle &= |\text{Co}_{\text{LS}}^{4+}\rangle, \quad E_{\text{LS}}^{(4+)} = E_1; \\ c_{\mathbf{n}}^\dagger a_{\mathbf{n}}^\dagger |0\rangle &= |\text{Co}_{\text{IS}}^{3+}\rangle, \quad E_{\text{IS}}^{(3+)} = E_0 + \Delta - J_H \equiv E_2; \\ a_{\mathbf{n}} |0\rangle &= c_{\mathbf{n}} |0\rangle = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Таким образом, промежуточное спиновое состояние иона Co^{3+} получается одновременным действием оператора рождения дырки на t_{2g} -уровне и оператора рождения электрона на e_g -уровне. Суммируя по всем возможным конфигурациям, мы получаем для одноузельной части гамильтониана [67]

$$H_{\text{n}}^{\text{on-site}} = \left[E_0 + (E_1 - E_0)(n_{\mathbf{n}}^h - n_{\mathbf{n}}^e) \right] + (\Delta - J_H)n_{\mathbf{n}}^e + U n_{\mathbf{n}}^e (1 - n_{\mathbf{n}}^h), \quad (8)$$

где $n_{\mathbf{n}}^e = a_{\mathbf{n}}^\dagger a_{\mathbf{n}}$ и $n_{\mathbf{n}}^h = c_{\mathbf{n}}^\dagger c_{\mathbf{n}}$ – операторы числа электронов и дырок, $U = U' + E_1 - \Delta + J_H - 2E_0$. Суммируя по всем узлам и добавляя слагаемое, описывающее перескоки e_g -электронов между ближайшими соседями, мы получим эффективный гамильтониан кобальтитов в виде (с учетом химпотенциала μ):

$$\begin{aligned} H' &= H - \mu \sum_{\mathbf{n}} (n_{\mathbf{n}}^e - n_{\mathbf{n}}^h); \\ H &= \sum_{\mathbf{n}} [E_0 - (E_1 - E_0)(n_{\mathbf{n}}^h - n_{\mathbf{n}}^e)] + \\ &+ \Delta_1 \sum_{\mathbf{n}} n_{\mathbf{n}}^e + U \sum_{\mathbf{n}} n_{\mathbf{n}}^e (1 - n_{\mathbf{n}}^h) - t \sum_{\langle \mathbf{nm} \rangle} (a_{\mathbf{n}}^\dagger a_{\mathbf{n}} + h.c.), \end{aligned} \quad (9)$$

где $\Delta_1 = \Delta - J_H$.

Отметим, что рассматриваемый эффективный гамильтониан кобальтитов является достаточно упрощенным, поскольку не учитывает орбитальных и спиновых степеней свободы введенных квазичастиц. Действительно, в IS-состоянии иона Co^{3+} , например, имеется один электрон на двукратно вырожденном e_g -уровне, что делает, вообще говоря, этот ион ян-теллеровским и может приводить к локальным деформациям решетки. Что касается спиновых степеней свободы, то так же, как и в случае манганитов, в пределе сильной хундовской связи, $J_H \rightarrow \infty$, мы можем рассматривать бесспиновые фермионы, подразумевая, что амплитуда перескока e_g -электронов в гамильтониане (9) зависит от взаимной ориентации спинов ионов как $t = t_0 \cos v_{\mathbf{nm}}/2$. Ниже мы будем подразумевать ферромагнитное состояние, так что $\cos v_{\mathbf{nm}}/2 \approx 1$.

В защиту рассматриваемой упрощенной модели скажем, что нашей задачей здесь является

учесть физику, обусловленную наличием переходов с изменением спинового состояния, которая и учитывается гамильтонианом (9). Усложнение модели безусловно сделало бы ее более подходящей для описания реальных систем, однако привело бы к существенному усложнению расчетов.

Средние числа e_g -электронов, $\langle n_n^e \rangle = n^e$, и t_{2g} дырок, $\langle n_n^h \rangle = n^h$, приходящихся на один узел решетки, удовлетворяют равенству $n^h - n^e = x$, где x – уровень допирования. Следовательно, энергию, приходящуюся в среднем на один узел, можно записать как

$E_{LS} = E_0(1 - x) + E_1x + \langle H_1 \rangle / N$, где N – число узлов в решетке, а

$$H_1 = \Delta_1 \sum_n n_n^e + U \sum_n n_n^e (1 - n_n^h) - t \sum_{\langle nm \rangle} (a_n^\dagger a_m + h.c.). \quad (10)$$

Индекс LS в энергии E_{LS} означает, что мы рассматриваем низкоспиновое состояние иона Co^{3+} в качестве основного состояния.

Гамильтониан H_1 аналогичен гамильтониану в модели Фаликова–Кимбалла [34]. Как и в предыдущем разделе, мы будем исследовать его в приближении среднего поля. Средние числа ионов кобальта в различных состояниях надо выразить через средние от операторов n_n^e , n_n^h и их произведения. Если на узле \mathbf{n} находится как дырка на t_{2g} -уровне, так и электрон на e_g -уровне, то ион кобальта на этом узле находится в состоянии IS Co^{3+} [см. (7) и рис. 7]. Следовательно, среднее число ионов IS Co^{3+} (в расчете на один узел) равно $n_{IS,Co^{3+}} = \langle n_n^h n_n^e \rangle$. Если в узле \mathbf{n} имеется только дырка на t_{2g} -уровне, то этот узел занимает ион LS Co^{4+} , т.е. $n_{LS,Co^{4+}} = \langle n_n^h (1 - n_n^e) \rangle$. Если же на узле \mathbf{n} находится только e_g -электрон, то такой узел находится в состоянии Co^{2+} , и среднее число таких ионов равно $n_{Co^{2+}} = \langle n_n^e (1 - n_n^h) \rangle$. Среднее число ионов LS Co^{3+} тогда равно $n_{LS,Co^{3+}} = 1 - n_{IS,Co^{3+}} - n_{LS,Co^{4+}} - n_{Co^{2+}} = 1 - n^e - n^h + \langle n_n^h n_n^e \rangle$. Отметим, что параметр U в гамильтониане (10), приблизительно равный энергии одноцентрового кулоновского отталкивания d -электронов на ионе кобальта, имеет величину порядка нескольких электронвольт. Для кобальтитов так же, как и для манганитов, мы можем считать выполненным неравенство $U \gg t$. В этом случае число ионов Co^{2+} будет сильно подавлено. В пределе $U \rightarrow \infty$ тогда будем иметь $\langle n_n^h n_n^e \rangle \approx n^e$ и, следова-

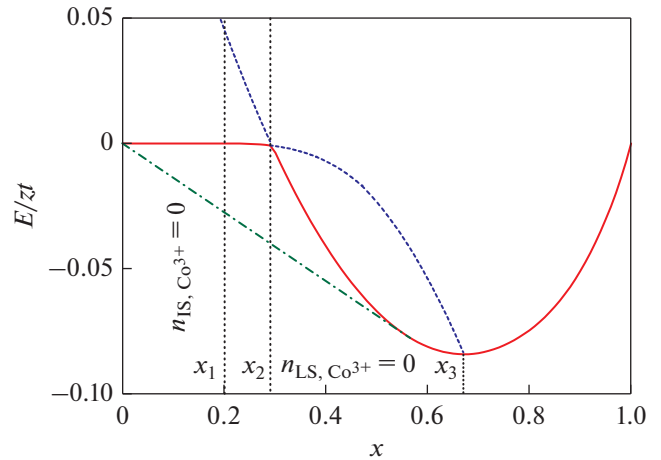


Рис. 8. Энергии состояний 1 и 2 как функции допирования. Сплошная (красная) кривая соответствует минимуму из этих двух энергий. При $x < x_2$ минимуму соответствует состояние 1, в то время как при $x > x_2$ реализуется состояние 2. Штрих-пунктирная линия соответствует энергии фазово-расслоенного состояния, найденная согласно построению Максвелла. Параметры модели $\Delta_1/zt = 0.2$, $U = \infty$ [67].

тельно, $n_{Co^{2+}} \approx 0$, $n_{IS,Co^{3+}} \approx n^e$, $n_{LS,Co^{4+}} \approx n^h - n^e = x$ и $n_{LS,Co^{3+}} = 1 - n^h$. Эти средние, а также энергию системы мы можем рассчитывать аналогично тому, как это было сделано в предыдущем разделе. Однако надо иметь в виду, что для рассматриваемой системы возможна также еще одна фаза, в которой все ионы Co^{3+} промотированы в IS-состояние, т.е. в этом случае мы имеем (в пределе $U \rightarrow \infty$) $n^h = 1$, $n^e = 1 - x$. На языке зонных и локализованных электронов модели Фаликова–Кимбалла такое состояние соответствует пустому локальному уровню, лежащему ниже уровня Ферми частично заполненной зоны проводимости. В рассматриваемом случае локализованный уровень по определению исчезает после того, как все ионы Co^{3+} переведены из LS в IS-состояние.

Обозначим состояние, в котором могут сосуществовать LS- и IS-ионы Co^{3+} , как состояние 1. Состояние, в котором имеются только IS-ионы Co^{3+} , мы обозначим как состояние 2. Свободные энергии (при $T = 0$) этих состояний как функции допирования представлены на рис. 8. Состояние 2 становится энергетически выгодным при $x > x_2$. Отметим, что состояния 1 и 2 становятся фактически эквивалентными при $x > x_3$, когда в обоих состояниях отсутствуют ионы LS- Co^{3+} . В случае $x < x_1$, при котором реализуется состояние 1, в системе отсутствуют ионы IS- Co^{3+} , и система является диэлектриком из-за спиновой блокады.

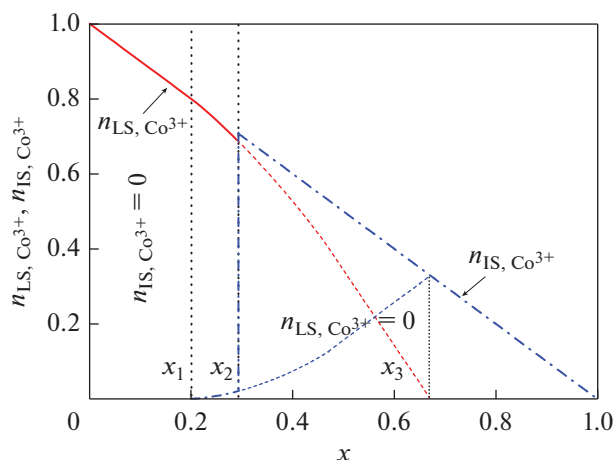


Рис. 9. Числа ионов Co^{3+} в низкоспиновом (сплошная кривая) и промежуточном (штрих-пунктирная кривая) состояниях как функции допирования, рассчитанные при $\Delta_1/zf = 0.2$, $U = \infty$. При $x_1 < x < x_2$, в системе присутствуют ионы Co^{3+} обоих типов, в то время как при $x = x_2$ возникает переход первого рода в состояние 2, где присутствуют только IS ионы Co^{3+} . Тонкие пунктирные кривые показывают поведение $n_{\text{LS}, \text{Co}^{3+}}$ и $n_{\text{IS}, \text{Co}^{3+}}$ в отсутствие перехода в состояние 2 [67].

При $x > x_1$ число e_g -электронов растет. Если не принимать во внимание состояние 2, этот рост продолжался бы вплоть до $x = x_3$, когда все ионы Co^{3+} были бы переведены в промежуточное спиновое состояние. Однако при $x = x_2$ состояние 2 становится энергетически невыгодным, и происходит переход 1-го рода в состояние 1. Зависимости числа LS- и IS-ионов кобальта от допирования показаны на рис. 9.

Свободная энергия основного (однородного) состояния системы как функция допирования показана на рис. 8 сплошной линией. Видно, что кривая свободной энергии имеет излом при переходе из состояния 1 в состояние 2. Это обуславливает то, что однородное состояние является неустойчивым в области допирования $0 < x < x^* \approx x_3$. В этой области, определяемой построением Максвелла, система разваливается на две фазы с концентрациями электронов $x = 0$ и $x = x^*$. В первой фазе мы имеем $n_{\text{IS}, \text{Co}^{3+}} = 0$, а во второй $n_{\text{LS}, \text{Co}^{3+}} = 0$.

Зависимость n^e от допирования x определяет поведение магнитного момента системы. Действительно, магнитный момент ионов кобальта в низкоспиновом состоянии равен нулю. Допирование приводит, во-первых, к появлению ионов LS- Co^{4+} со спином $S = 1/2$, а во-вторых, к появлению ионов кобальта в промежуточном спиновом состоянии с $S = 1$. Таким образом, данные, приве-

денные на рис. 9, могут быть перестроены в терминах магнитного момента, приходящегося на один допант (или, другими словами, на один ион Co^{4+}). Результаты расчета представлены на рис. 10. Если мы будем рассматривать только однородные состояния системы, то упоминавшийся выше фазовый переход из состояния 1 в состояние 2 приведет, очевидно, к скачку намагниченности.

В то же время, в фазово-расслоенном состоянии магнитный момент, приходящийся на один ион Co^{4+} , остается постоянным, т. к. и количество IS-ионов Co^{3+} , и число ионов Co^{4+} пропорционально x . Магнитный момент системы, приходящийся на один ион Co^{4+} (так же, как и величина скачка магнитного момента в однородном состоянии), существенно зависит от параметров модели и особенно от амплитуды перескока e_g -электронов.

Из сравнения графиков на рис. 10 мы видим, что увеличение t вдвое приводит к существенному росту магнитного момента. Отметим, что обсуждаемые здесь величины магнитного момента в неоднородном состоянии соответствуют макроскопическому фазовому расслоению, при котором размеры неоднородностей много больше периода решетки. Такого типа неоднородного состояния можно ожидать при достаточно большом уровне допирования. При малых x , однако, естественно предположить, что неоднородности имеют капельную структуру, при которой каждый отдельный ион Co^{4+} окружен некоторым количеством IS-ионов Co^{3+} . В этом случае магнитным моментом, приходящимся на один ион Co^{4+} , должен быть больше, чем в случае крупномасштабного фазового расслоения. Именно такая ситуация может иметь место в случае слабо легированного $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$, экспериментально исследованного в работе [68], в которой наблюдали магнитные поляроны с моментом, примерно равным $13\mu_B$. Из упомянутых выше качественных соображений следует ожидать, что магнитным моментом, приходящимся на один ион Co^{4+} , должен несколько уменьшаться с допированием.

Таким образом, мы показали, что спиновые переходы в дырочно-допированных кобальтатах могут быть описаны в рамках модели, учитывающей сосуществование и конкуренцию зонных и локализованных электронов. Такая модель допускает возможность скачкообразного перехода ионов Co^{3+} из LS- в IS-состояние. При малом допировании, однако, более предпочтительным является состояние фазового расслоения, в котором только часть ионов Co^{3+} промотирована в промежуточно-спиновое состояние, при этом носители заряда, появляющиеся при допировании, оказываются в окружении IS-ионов Co^{3+} . Эксперимен-

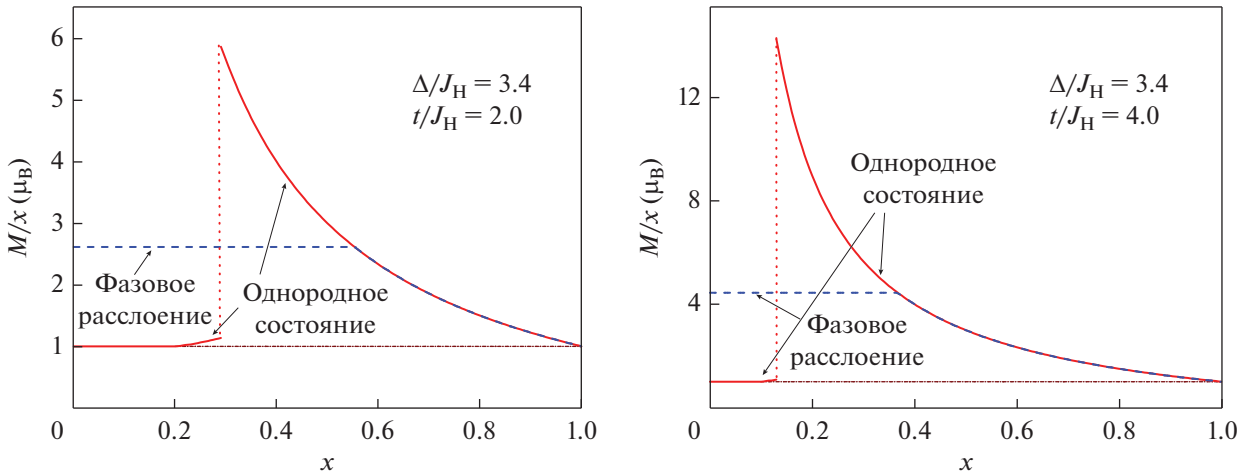


Рис. 10. Магнитный момент, приходящийся на один ион Co^{4+} , в зависимости от уровня допирования x , рассчитанный для двух значений интеграла перескока t . Сплошные (красные) кривые соответствуют однородному состоянию. Поведение магнитного момента в фазово-расслоенном состоянии показано штриховыми (синими) кривыми [67].

тальные данные по соединению $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$ [68–73] свидетельствуют в пользу такой картины.

2.2.3. Эффективный гамильтониан для высокоспинового основного состояния изолированных ионов

Рассмотрим теперь область параметров $\Delta < 2J_H$, когда изолированные ионы Co^{3+} и Co^{4+} находятся в высокоспиновом состоянии. Перенос заряда в этом случае возможен, только если мы переведем часть ионов Co^{4+} в промежуточное состояние. При этом у нас возникает дырка на e_g -уровне.

Итак, теперь вместо переноса электрона с IS-иона Co^{3+} на LS-ион Co^{4+} , мы имеем перескок электрона с HS-иона Co^{3+} на IS-ион Co^{4+} , или, что то же самое, перескок дырки с IS-иона Co^{4+} на HS-ион Co^{3+} . Используя эту аналогию, мы выберем HS-состояние иона Co^{4+} в качестве нового вакуумного состояния и напишем соотношения, аналогичные (7), в виде (см. рис. 7):

$$\begin{aligned} |0\rangle &= |\text{Co}_{\text{HS}}^{4+}\rangle, \quad E_{\text{HS}}^{(4+)} = E_1 + 2\Delta - 6J_H = \hat{E}_0, \\ \hat{c}_n^\dagger |0\rangle &= |\text{Co}^{5+}\rangle, \quad E^{(5+)} = \hat{U}, \\ \hat{a}_n^\dagger |0\rangle &= |\text{Co}_{\text{HS}}^{3+}\rangle, \quad E_{\text{HS}}^{(3+)} = E_0 + 2\Delta - 4J_H = \hat{E}_1, \\ \hat{a}_n^\dagger \hat{c}_n^\dagger |0\rangle &= |\text{Co}_{\text{IS}}^{4+}\rangle, \quad E_{\text{IS}}^{(4+)} = E_0 + \Delta - 2J_H = \hat{E}_2, \\ \hat{a}_n |0\rangle &= \hat{c}_n |0\rangle = 0, \end{aligned} \quad (11)$$

где мы ввели операторы рождения и уничтожения электрона на t_{2g} -уровне в узле \mathbf{n} , \hat{a}_n^\dagger и \hat{a}_n , а также операторы рождения и уничтожения дырки на e_g -уровне, \hat{c}_n^\dagger и \hat{c}_n .

Соответствующий одноузельный гамильтониан может быть получен путем следующей замены в (8): $E_0, E_1, E_2, U \rightarrow \hat{E}_0, \hat{E}_1, \hat{E}_2, \hat{U}$, а также $n_n^e \rightarrow \tilde{n}_n^e, n_n^h \rightarrow \tilde{n}_n^h$. Для полного гамильтониана системы

$$\begin{aligned} H &= \sum_n \left[\hat{E}_0 - (\hat{E}_1 - \hat{E}_0)(\tilde{n}_n^h - \tilde{n}_n^e) \right] + \\ &+ \Delta_2 \sum_n \tilde{n}_n^e + \hat{U} \sum_n \tilde{n}_n^h (1 - \tilde{n}_n^e) - t \sum_{\langle nm \rangle} (\hat{c}_n^\dagger \hat{c}_m + h.c.), \end{aligned} \quad (12)$$

где $\Delta_2 = 4J_H - \Delta > 0$ – разница в энергии ионов Co^{4+} в IS- и HS-состояниях.

Теперь средние числа электронов и дырок, приходящихся на один узел решетки, связаны с уровнем допирования соотношением $\tilde{n}^e - \tilde{n}^h = 1 - x$. В этом случае для энергии системы, рассчитанной на один узел решетки, вместо (10) будем иметь

$$E_{\text{HS}} = E_0(1 - x) + E_1 x + \langle H_2 \rangle / N,$$

где

$$\begin{aligned} H_2 &= \sum_n \left[2\Delta - 6J_H + 2J_H (\tilde{n}_n^e - \tilde{n}_n^h) \right] + \Delta_2 \sum_n \tilde{n}_n^e + \\ &+ \hat{U} \sum_n \tilde{n}_n^h (1 - \tilde{n}_n^e) - t \sum_{\langle nm \rangle} (\hat{c}_n^\dagger \hat{c}_m + h.c.). \end{aligned} \quad (13)$$

Индекс HS в энергии E_{HS} означает, что мы рассматриваем высокоспиновое состояние иона Co^{4+} в качестве основного состояния. Отметим, что разность $E_{\text{HS}} - E_{\text{LS}}$ не зависит от E_0 и E_1 . Таким образом, фазовая диаграмма модели, получаемая путем сравнения энергий различных фаз, не будет зависеть от этих параметров. Поскольку эффективные гамильтонианы кобальтитов (10) и (13) являются схожими, то зависимости энергии системы, а также средних \tilde{n}^e и \tilde{n}^h от допирования будут схожи с теми, что представлены на рис. 8 и 9.

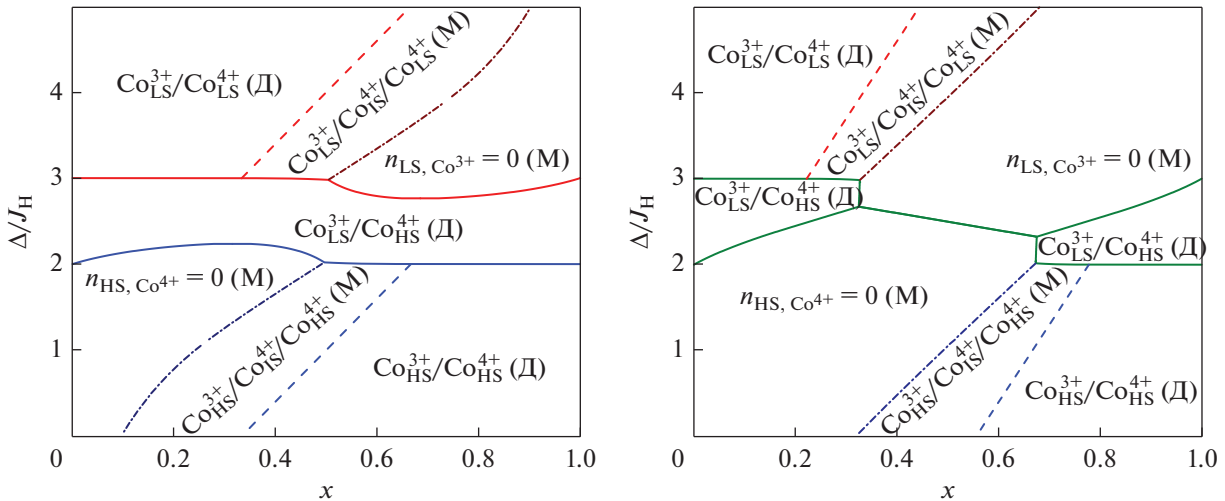


Рис. 11. Фазовые диаграммы моделей (10) и (13), рассчитанные при $t/J_H = 1$ (слева) и $t/J_H = 1.5$ (справа). В каждой области указаны типы присутствующих ионов кобальта, а также тип фазы: (М) – металл, (Д) – диэлектрик. Рассматриваются только однородные состояния [67].

Более конкретно, на этих рисунках мы должны сделать замены $n^h \rightarrow \tilde{n}^e$, $n^e \rightarrow \tilde{n}^h$ и $x \rightarrow 1 - x$, т.е. плотности ионов Co^{3+} в IS ($n^e = n_{\text{IS}, \text{Co}^{3+}}$) и LS ($1 - n^h = n_{\text{LS}, \text{Co}^{3+}}$) состояниях заменяются на плотности ионов Co^{4+} в IS ($\tilde{n}^h = n_{\text{IS}, \text{Co}^{4+}}$) и HS ($1 - \tilde{n}^e = n_{\text{HS}, \text{Co}^{4+}}$) состояниях. Отметим также, что подобная аналогия между двумя случаями (LS–LS и HS–HS) есть следствие того факта, что мы рассматриваем модель с бесспиновыми фермионами. Таким образом, существует электрон–дырочная симметрия между пустым e_g -уровнем иона LS Co^{3+} и наполовину заполненным e_g -уровнем (два электрона с параллельными спинами) иона HS Co^{3+} .

2.2.4. Фазовая диаграмма

Полученные выше результаты могут быть объединены в фазовую диаграмму модели в плоскости $x - \Delta/J_H$. Вид этой диаграммы существенно зависит от интеграла перескока t . Типичные фазовые диаграммы, рассчитанные при двух значениях t , показаны на рис. 11.

При достаточно малых t ($t/J_H = 1$, левая часть рис. 11) мы видим хорошо определенные области фазовой диаграммы, отвечающие случаям $\Delta > 3J_H$ и $\Delta < 2J_H$ (обсуждали в разделах 2.2.2 и 2.2.3, соответственно). В каждой из этих областей изменение допирования (от 0 до 1 и наоборот) приводит к последовательным переходам от фазы с локализованными носителями к фазе, в которой появляются зонные электроны, и наконец к фазе, в которой все носители заряда делокализованы. Эти две области с $\Delta \geq 3J_H$ и $\Delta \geq 2J_H$ разделены фазой,

в которой система состоит из смеси LS ($S = 0$) ионов Co^{3+} и HS ($S = 5/2$) ионов Co^{4+} . Эта фаза является диэлектрической при любом допировании из-за эффекта спиновой блокады [65]. При достаточно больших t ($t/J_H \geq 1$, правая часть рис. 11) указанная диэлектрическая фаза коллапсирует в промежуточной области допирования.

Вид фазовой диаграммы меняется, если мы примем во внимание возможность фазового расслоения. Соответствующие фазовые диаграммы, построенные при двух различных значениях t/J_H , показаны на рис. 12.

Мы видим, что вместо фаз с частично или полностью делокализованными носителями на фазовой диаграмме появляются области расслоения на фазы с полностью локализованными и полностью делокализованными носителями.

Опять, при малых t ($t/J_H \leq 1$, левая часть рис. 12) мы имеем промежуточную область с локализованными носителями при любом допировании (фаза с LS ионами Co^{3+} и HS-ионами Co^{4+} соответственно). Эта промежуточная область становится уже с ростом t , и при $t/J_H \approx 1.24$ разделяется на две отдельные области. При дальнейшем росте t эти промежуточные области продолжают сокращаться и полностью исчезают при $t/J_H \approx 1.44$ (правая часть рис. 12).

2.3.5. Заключительные замечания к разделу о кобальтатах

Итак, в этом разделе мы построили простую электронную модель соединений со спиновыми переходами и проанализировали ее свойства на примере дырочно-допированных кобальтитов. Спино-

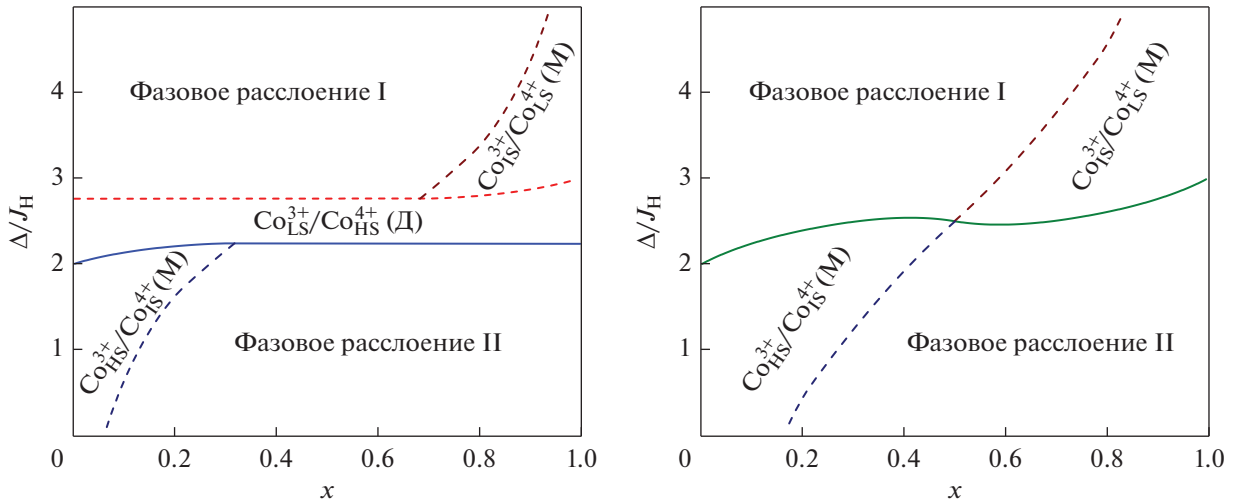


Рис. 12. Фазовые диаграммы моделей кобальтитов (10) и (13), рассчитанные при $t/J_H = 1$ (слева) и $t/J_H = 1.5$ (справа). Расчет производился с учетом фазового расслоения. На диаграммах, фазовое расслоение I – неоднородное состояние, содержащее фазу, в которой все ионы Co^{3+} находятся в низкоспиновом LS состоянии (диэлектрическая фаза) и фазу в которой все ионы Co^{3+} находятся в промежуточном IS состоянии (проводящая фаза). В обеих фазах ионы Co^{4+} находятся в низкоспиновом LS состоянии. Аналогично, в состоянии фазовое расслоение II диэлектрическая и проводящая фазы содержат ионы Co^{4+} в HS и IS состояниях соответственно, а все ионы Co^{3+} находятся в высокоспиновом HS состоянии [67].

вые состояния изолированных ионов переходного металла определяются соотношением между расщеплением d -уровня в кристаллическом поле Δ и хундовской константой связи J_H .

При этом электронный транспорт за счет носителей, появляющихся при допировании, может быть сильно подавлен за счет эффекта спиновой блокады [65]. В этом случае может оказаться выгодным изменить спиновое состояние некоторого количества ионов переходного металла для получения выигрыша в кинетической энергии носителей. Таким образом, в системе возникает конкуренция между локализацией за счет спиновой блокады и делокализацией, которая может приводить к фазовому расслоению.

Анализ эффективной модели показывает существование двух типов фазового расслоения, которые отличаются спиновыми состояниями ионов переходного металла. Фазовое расслоение типа I существует в области при $x \leq 0.5$ и $\Delta \geq 2.5J_H$ фазовой диаграммы в плоскости $x - \Delta$ и характеризуется низкоспиновыми состояниями ионов. Фазовое расслоение типа II зеркально первому, область его существования качественно определяется неравенствами $x \geq 0.5$ и $\Delta \leq 2.5J_H$, а ионы переходного металла преимущественно находятся в высокоспиновых состояниях (рис. 12).

Существование неоднородных состояний в некоторых допированных кобальтитах, например, в $La_{1-x}Sr_xCoO_3$, подтверждается в различных экспериментах [60, 68–73]. Так магнитные измерения,

выполненные в работе [60] при малом (дырочном) допировании $x < 1\%$, показали, что магнитный момент, приходящийся на одну дырку, оказывается значительно выше, чем тот, который бы создавал ион Co^{4+} в низкоспиновом состоянии с $S = 1/2$. Вместо этого авторы наблюдали появление магнитных примесей с необычайно большим спином $S = 10-16$, что ясно сигнализирует о том, что ион Co^{4+} оказывается окруженным облаком соседних ионов Co^{3+} , находящихся в более высоком, чем $S = 0$, спиновом состоянии. Эксперименты по нейтронному рассеянию, а также ЭПР- и ЯМР-исследования, выполненные для схожих систем в работе [80], позволяют оценить размер и форму таких магнитных кластеров. Во всех перечисленных работах неоднородные состояния наблюдали при малых x , а основное состояние ионов Co^{3+} являлось низкоспиновым (т.е. можно считать, что $\Delta \geq 3J_H$), что качественно согласуется с рассчитанной фазовой диаграммой.

Отметим, что сконструированный модельный гамильтониан является во многом переупрощенным, поскольку не учитывает орбитальных и спиновых (связанных с проекцией спина) степеней свободы, однако он корректно воспроизводит физику, обусловленную наличием спиновых переходов, которая, по нашему мнению, и ответственна за возникновение неоднородных состояний. Для более тщательного исследования и количественного сравнения теории с экспериментом безусловно не-

обходимо расширение модели, которое может быть различным в каждом конкретном случае.

3. ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ В СИСТЕМАХ СО СЛАБОНЕИДЕАЛЬНЫМ НЕСТИНГОМ ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ

Нестинг поверхности Ферми является чрезвычайно важным понятием в физике конденсированного состояния [74]. Существование двух (или более) фрагментов поверхности Ферми, которые совпадают друг с другом при параллельном переносе на некоторый вектор \mathbf{Q} (вектор нестинга), приводит к неустойчивости ферми-жидкостного состояния и к возникновению сверхструктуры и параметра порядка в системе. Понятие нестинга привлекают при анализе материалов с волной зарядовой [74, 76] или спиновой плотности [77, 78], в частности, хрома и его сплавов [79–82], при изучении механизмов высокотемпературной сверхпроводимости [83–85], флуктуирующей зарядово/орбитальной модуляции в магнитных оксидах [86], и пр. Концепция нестинга также широко используется при исследованиях пниктидов железа [87–93]. Например, в работе [87] утверждается, что отклонение от идеального нестинга приводит к снятию вырождения между конкурирующими магнитоупорядоченными фазами. Влияние нестинга на сосуществование фаз обсуждается в работе [90].

Важно подчеркнуть, что в реальных материалах нестинг чаще всего бывает неидеальным — фрагменты поверхности Ферми не полностью соответствуют друг другу. В случае идеального нестинга неустойчивость ферми-жидкости возникает при сколь угодно слабом межэлектронном взаимодействии [94]. В противном случае параметр порядка в системе возникает при некотором критическом значении константы взаимодействия. Одна из наиболее ранних работ по слабонеидеальному нестингу принадлежит Райсу в контексте изучения хрома и его сплавов [82] (см. также обзоры [95, 96]).

В большинстве теоретических исследований предполагается однородность основного состояния. В данном разделе мы покажем, что это предположение может нарушаться в случае неидеального нестинга. Вначале мы проведем общее рассмотрение устойчивости однородного состояния на примере модели Райса [96]. Далее в качестве конкретной системы мы проанализируем возможность возникновения неоднородных состояний в пниктидах железа [97].

Возможность возникновения неоднородного состояния за счет неидеального нестинга в квазиодномерных металлах была теоретически показана в работе [99]. Несколько экспериментальных работ по пниктидам [100–106] и халькогенидам [107–109] демонстрируют наличие фазового расслоения в этих соединениях (см. также обзор [110]).

В схожем контексте находятся исследования спиновых и зарядовых неоднородностей в низкомерных соединениях [111–114]. Другие типы неоднородных состояний (страйпы, доменные стенки и пр.) также обсуждаются в литературе в рамках аналогичных моделей [99, 115–117]. Более того, было показано, что в моделях типа Хаббарда конкуренция различных типов спинового упорядочения приводит к богатой фазовой диаграмме, содержащей, в частности, и области неоднородного состояния [118–120].

3.1. Волна спиновой плотности и фазовое расслоение в модели со слабонеидеальным нестингом. Общее рассмотрение

В данном разделе мы проанализируем модель [82], предложенную Райсом для описания волны спиновой плотности в хrome (см. также обзор [96]).

3.1.1. Модель Райса: основные уравнения

Зонная структура модели включает одну электронную (a) и одну дырочную (b) зоны, которые входят на уровень Ферми. Предполагается, что ферми-поверхности электронных и дырочных зон — сферические (мы рассматриваем здесь 3D-случай), со слегка отличающимися радиусами (неидеальный нестинг). Поверхность Ферми зоны a центрирована на импульсе $\mathbf{k} = 0$, тогда как поверхность Ферми дырочной зоны центрирована на импульсе $\mathbf{k} = \mathbf{Q}_0$. Кроме того, имеется еще одна зона (c), выходящая на уровень Ферми, но не участвующая в формировании магнитного порядка (т.н. электронный резервуар). Из всех возможных попарных межэлектронных взаимодействий учитывается только отталкивание a и b электронов, поскольку именно оно приводит к возникновению волны спиновой плотности.

Гамильтониан модели имеет вид:

$$\hat{H}' = \sum_{\mathbf{k}\sigma\alpha=a,b,c} \varepsilon^\alpha(\mathbf{k})n_{\mathbf{k}\sigma}^\alpha + \frac{U}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} b_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^\dagger b_{\mathbf{k}'\sigma'}, \quad (14)$$

где $a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$, $a_{\mathbf{k}\sigma}$ ($b_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$, $b_{\mathbf{k}\sigma}$) — операторы рождения и уничтожения электрона в зоне a (b), $n_{\mathbf{k}\sigma}^\alpha$ — операторы числа частиц типа α импульсом \mathbf{k} и проекцией спина σ , \mathcal{V} — объем образца, U — константа взаимодействия a и b электронов, которое предполагается точечным.

Мы предположим здесь, что зоны a и b имеют квадратичную дисперсию. Кроме того, мы вклю-

чим химпотенциал в определении ϵ^a . Тогда выражения для $\epsilon^a, b(\mathbf{k})$ будут иметь вид:

$$\begin{aligned} \epsilon^a(\mathbf{k}) &= \frac{k^2}{2m_a} + \epsilon_{\min}^a - \mu, \\ \epsilon_{\min}^a &< \epsilon^a(\mathbf{k}) < \epsilon_{\max}^a, \\ \epsilon^b(\mathbf{k} + \mathbf{Q}_0) &= -\frac{k^2}{2m_b} + \epsilon_{\max}^b - \mu, \\ \epsilon_{\min}^b &< \epsilon^b(\mathbf{k}) < \epsilon_{\max}^b. \end{aligned} \quad (15)$$

Условия идеального нестинга означают, что при некотором значении $\mu = \mu_0$ поверхности Ферми зон a и b совпадают при трансляции на вектор \mathbf{Q}_0 , и что обе ферми-сферы характеризуются одним и тем же радиусом k_F . В случае электрон-дырочной симметрии, когда $m_a = m_b = m$ и $\epsilon_{\max}^b = -\epsilon_{\min}^a$, будем иметь $\mu_0 = 0$. Вблизи поверхности Ферми энергетические спектры зон a и b тогда имеют вид:

$$\epsilon^a(\mathbf{k}) = v_F(k - k_{Fa}) = v_F(k - k_{Fa}) - \mu, \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \epsilon^b(\mathbf{k} + \mathbf{Q}_0) &= -v_F(k - k_{Fb}) = \\ &= -v_F(k - k_{Fb}) - \mu, \end{aligned} \quad (17)$$

где $k_F = (k_{Fa} + k_{Fb})/2$ и $\mu = v_F(k_{Fa} - k_{Fb})/2$. Плотность состояний электронов на поверхности Ферми (при $\mu = 0$) в зоне a (как b в зоне b), рассчитанная на единицу объема и одну проекцию спина, равна $N_m = k_F^2/2\pi^2 v_F$.

Рассмотрим здесь предел слабой связи, когда $UN_m \ll 1$. В этом случае интересующие нас изменения химпотенциала μ и импульсов Ферми k_{Fa} и k_{Fb} будут незначительными по сравнению с энергией Ферми $\epsilon_F = v_F k_F$ (при $\mu = 0$), и поэтому можно считать плотность состояний N_m при этих изменениях постоянной.

Отметим, что для простоты здесь считаем скорости Ферми v_F электронной и дырочной зон одинаковыми. Можно показать, что различие в скоростях Ферми для зон a и b не принципиально для получаемых ниже результатов. Далее, предположение о квадратичности дисперсии при всех импульсах также не существенно: для нас здесь важна лишь форма поверхности Ферми и ее изменение при изменении химпотенциала.

Что касается зоны резервуара (c), то мы не будем делать конкретных предположений о законе ее дисперсии. Мы будем лишь считать, что у нее имеется конечная плотность состояний на уровне Ферми, которую мы обозначим здесь как $2N_r \mathcal{V}$ (N_r — плотность состояний на один спин, на единицу объема), и что эта плотность состояний слабо меняется при изменении химпотенциала.

Мы будем рассматривать гамильтониан (14) в приближении среднего поля, которое является адекватным приближением в пределе слабого взаимодействия, $UN_m \ll 1$. Отправной точкой нашего рассмотрения является случай идеального нестинга, когда $\mu = 0$. В этом случае радиусы Ферми электронной и дырочной зон совпадают. Замена оператора взаимодействия на его аналог в приближении среднего поля в общем случае производится фактически тем же образом, как и в случае манганитов. В результате второе слагаемое в гамильтониане (14) становится квадратичным по электронным операторам и приобретает вид:

$$-\sum_{\mathbf{k}\sigma} (\Delta_0 b_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_0-\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} + h.c.) + 2\mathcal{V} \Delta_0^2/U,$$

где мы ввели параметр порядка $\Delta_0 = \left(\frac{U}{\mathcal{V}}\right) \times \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_0-\sigma} \rangle$, который соответствует антиферромагнетизму. При этом мы предполагали, что средние от произведений операторов отличны от нуля только при $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_0$ и $\sigma' = -\sigma$. Величина Δ_0 определяет щель в спектре, возникающую за счет электрон-электронного взаимодействия. Она определяется минимизацией термодинамического потенциала Ω . В случае, когда $\epsilon_{\max}^b = -\epsilon_{\min}^a \approx \epsilon_F$, мы в результате будем иметь

$$\Delta_0 = \epsilon_F \exp(-/UN_m) \ll \epsilon_F. \quad (18)$$

Эта формула аналогична выражению для сверхпроводящей щели в теории БКШ, в которой энергия Ферми играет роль энергии Дебая. Параметр порядка Δ_0 связывает электроны с неравными импульсами. Следовательно, в реальном пространстве такой параметр порядка описывает вращение намагниченности (в плоскости xy) с волновым вектором \mathbf{Q}_0 . Поскольку обычно карманы a и b располагаются в высоко-симметричных точках зоны Бриллюэна, вектор \mathbf{Q}_0 оказывается соизмеримым с периодом решетки. То есть, в этом случае рассматриваемый параметр порядка соответствует антиферромагнитному состоянию, в котором можно ввести несколько (в простейшем случае две) магнитных подрешеток.

Рассмотрим теперь случай ненулевого μ . В такой ситуации ферми-сферы электронной и дырочной зон имеют различные радиусы. Однако разница в радиусах мала, пока μ мало. Несмотря на это, состояние со щелью может быть по-прежнему устойчивым и, по крайней мере, метастабильным и в случае ненулевого химпотенциала. Однако можно попробовать минимизировать энергию еще больше, если рассматривать трансляции на вектор $\mathbf{Q}_1 = \mathbf{Q}_0 + \mathbf{Q}$, который также можно считать вариационным параметром. Новый параметр порядка тогда имеет вид $\Delta = \left(\frac{U}{\mathcal{V}}\right) \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_1-\sigma} \rangle$. В проти-

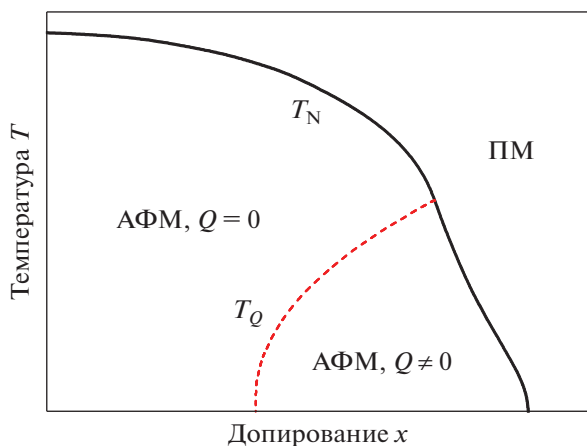


Рис. 13. Фазовая диаграмма модели (14) при $r \neq 0$, полученная в приближении среднего поля. При построении фазовой диаграммы учитывались только однородные состояния [97].

воположность Q_0 , абсолютная величина которого порядка величины вектора обратной решетки, вектор Q мал: $|Q| \sim |\Delta|/v_F \ll |Q_0|$.

Таким образом, параметр порядка Δ описывает несоизмеримую волну спиновой плотности, в которой вектор антиферромагнетизма медленно меняется в пространстве с длиной волны, равной $2\pi/|Q|$. Отметим, что рассматриваемая фаза аналогична фазе Фулде–Феррелла–Ларкина–Овчинникова (ФФЛО) для сверхпроводника в магнитном поле [122, 123].

Равновесные характеристики системы могут быть получены путем вычисления термодинамического потенциала $\Omega = -\text{Tr}[\ln(\exp(-H'/T))]$. В приближении среднего поля гамильтониан (14) является квадратичным по электронным операторам, что дает возможность достаточно легко найти спектр квазичастиц и вычислить термодинамический потенциал. Минимизация Ω позволяет вычислить Δ и Q как функции химпотенциала и температуры при заданном уровне допирования x . Нам также понадобится дополнительный параметр $r = N_r/2N_m$, характеризующий соотношение между плотностью состояний электронов резервуара (c) и зон a и b .

Также мы определяем температуру Нееля $T_N(x)$ при заданном x как минимальную температуру, при которой $\Delta = 0$. Кроме того, путем исследования зависимости $Q(x, T)$, мы определяем кривую $T_Q(x)$, которая разделяет соизмеримую и несоизмеримую антиферромагнитные фазы. В результате, мы получаем фазовую диаграмму модели в плоскости x – T .

Фактически вид фазовой диаграммы зависит от единственного безразмерного параметра r , который определяет долю электронов резервуара от полного числа электронов на уровне Ферми. При

$r \neq 0$ фазовая диаграмма схематически представлена на рис. 13. При $r = 0$, кривая $T_Q(x)$ начинается в точке $(x = 0, T = 0)$, т.е. в отсутствие немагнитных электронов при нулевой температуре несоизмеримая антиферромагнитная фаза становится выгодной при сколь угодно малом допировании.

3.1.2. Неустойчивость однородного состояния

Проведем теперь анализ устойчивости однородного состояния, рассматривая свободную энергию системы как функцию допирования. Типичная кривая $F(x, T=0)/\mathcal{F}_0$, где $\mathcal{F}_0 = N_m \Delta^2 \mathcal{V}$, рассчитанная при $r = 0.3$, представлена на рис. 14, где также показаны зависимости $\Delta(x, 0)$ и $Q(x, 0)$.

Расчеты показывают, что при $r \leq 0.4$ переход по концентрации между антиферромагнитными фазами с $Q = 0$ и $Q \neq 0$ является переходом второго рода, и функции $\Delta(x, 0)$ и $Q(x, 0)$ непрерывны. При этом свободная энергия имеет отрицательную кривизну ($\partial^2 F/\partial x^2 < 0$) в некоторой области допирования, что свидетельствует о неустойчивости однородного состояния. При $r \geq 0.4$ переход между упорядоченными фазами с $Q = 0$ и $Q \neq 0$ является переходом первого рода, функции $\Delta(x, 0)$ и $Q(x, 0)$ претерпевают разрыв в некоторой точке x^* , а кривая свободной энергии имеет излом в этой точке. В этом случае однородное состояние также является неустойчивым в некоторой области допирования, содержащей в себе точку x^* . При любом значении r расслоение происходит на соизмеримую АФМ-фазу с концентрацией носителей x_1 и несоизмеримую АФМ-фазу с концентрацией x_2 . Значения концентраций x_1 и x_2 определяются построением Максвелла [41].

С ростом температуры область фазового расслоения $x_1 < x < x_2$ постепенно уменьшается и сходится на нет выше некоторого критического значения T^* . Фазовые диаграммы модели с учетом фазового расслоения, рассчитанные при двух различных значениях r , представлены на рис. 15. Область фазового расслоения ограничена на этих фазовых диаграммах штриховой кривой $T_{PS}(x)$.

3.1.3. Обсуждение результатов раздела 3.1

Мы продемонстрировали выше, что состояние с волной спиновой плотности в модели Райса [82] неустойчиво к расслоению на фазы. Это обстоятельство имеет существенные последствия для множества различных материалов, в которых нестинг поверхности Ферми ответственен за возникновение магнитного порядка. Такими материалами являются, например, сплавы хрома [96], пниктиды железа [100], двухслойный АА графен [124] и др. В заключение этого раздела мы хотели бы обсудить полученные результаты и сравнить их с опубликованными в других работах.

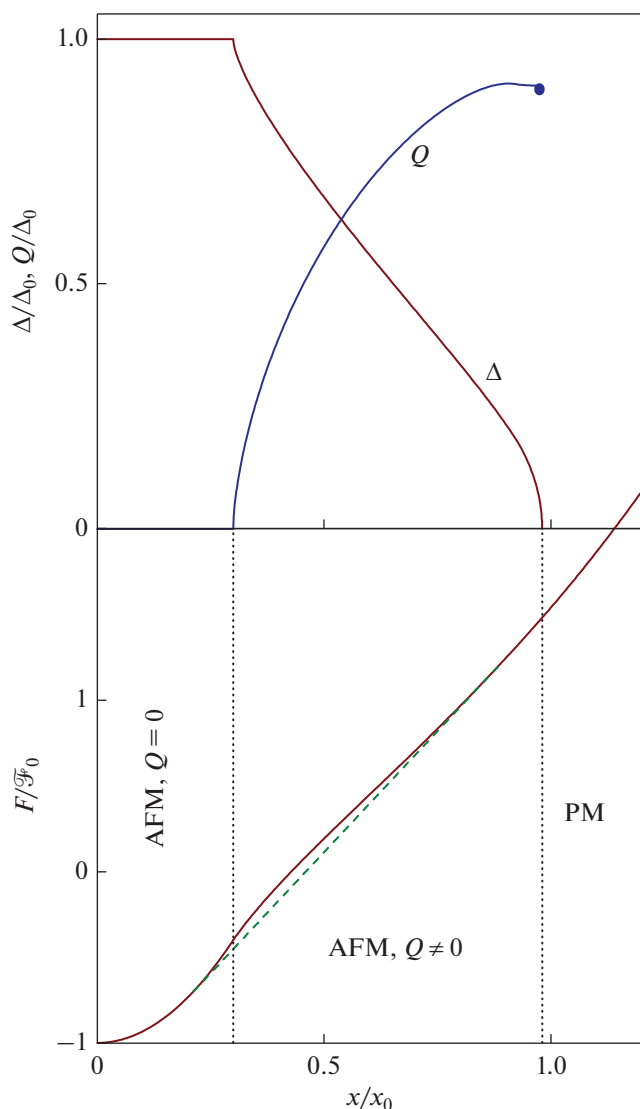


Рис. 14. АФМ щель $\Delta(x, 0)$, вектор нестинга $Q(x, 0)$ (верхняя панель), а также свободная энергия $F(x, 0)$ (нижняя панель) как функции допирования, рассчитанная при $r = 0.3$. Штриховая линия иллюстрирует энергию фазово-расслоенного состояния.

Выше мы упоминали о соответствии несоизмеримой волны спиновой плотности в модели Райса фазе ФФЛО в сверхпроводниках. Однако обычно фазовое расслоение не упоминается на фазовой диаграмме сверхпроводника с фазой ФФЛО. Это имеет простое объяснение: такие фазовые диаграммы строятся в координатах температура–магнитное поле (которое является аналогом химического потенциала для несоизмеримой волны спиновой плотности). Магнитное поле, являясь интенсивным термодинамическим параметром, не допускает фазового расслоения. Вместо этого система претерпевает фазовый переход первого рода по магнитному полю [122]. Однако в

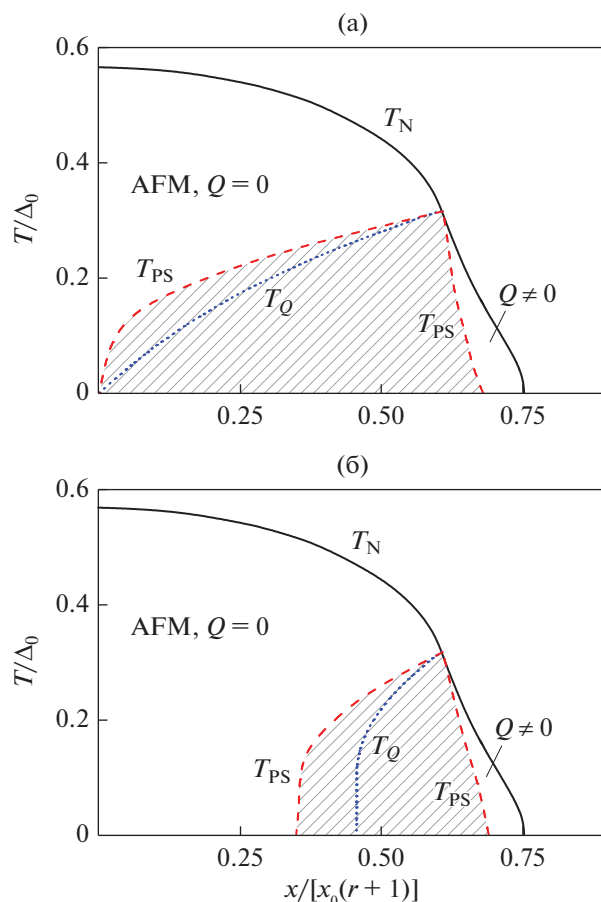


Рис. 15. Фазовая диаграмма модели (14) с учетом фазового расслоения, рассчитанная при $r = 0$ (сверху) и $r = 1$ (снизу). Область фазового расслоения (заштрихована) ограничена (красной) штриховой кривой $T_{PS}(x)$. Кривая $T_Q(x)$ внутри этой области, соответствует той, которая разделяла бы соизмеримую и несоизмеримую АФМ фазы в отсутствие фазового расслоения. Для лучшего визуального сравнения диаграмм при различных r , концентрация допирования нормирована на $x_0(1+r)$ [97].

таких системах, как холодные атомы в оптической ловушке, оказывается возможным контролировать полную спиновую поляризацию, которая является экстенсивным параметром (аналог допирования). В этом случае в системе предсказывается возникновение фазового расслоения [125].

Помимо рассматриваемого здесь параметра порядка, в литературе рассматриваются также различные пространственно-неоднородные (по абсолютной величине) параметры порядка [126–129]. Один из них обсуждали в работе [126], в которой численные результаты для двумерного ФФЛО сверхпроводника с параметром порядка типа Ларкина–Овчинникова [130] были использованы для исследования модели Райса. Предполагали [126], что при малом допировании параметр порядка в реальном пространстве формирует доменные стен-

ки. В доменных стенках параметр порядка локально обнуляется, что делает их предпочтительным местом для аккумуляции заряда, возникающего при допировании.

В реальных системах баланс между различными типами упорядочения может быть сдвинут за счет факторов, не учитываемых в рассматриваемой модели (например, анизотропии, дальнедействующего кулоновского взаимодействия и т.д.). Таким образом, возможность фазового расслоения за счет рассматриваемого здесь механизма должна приниматься во внимание при анализе экспериментальных данных.

Проделанные здесь расчеты предсказывают расслоение на две антиферромагнитные фазы. В то же время надо отметить, что свободная энергия несоизмеримой АФМ-фазы чрезвычайно близка к энергии парамагнитного состояния. В реальной ситуации существует множество факторов, которые могут привести к разрушению магнитного порядка в несоизмеримой фазе. Одним из таких механизмов является рассеяние на примесях. Действительно, широко известно, что состояние ФФЛО, аналогом которого (с математической точки зрения) является несоизмеримая АФМ-фаза, чрезвычайно чувствительна к беспорядку [131]. Расчеты показывают, что в случае, если магнитный порядок в несоизмеримой фазе будет разрушен, то фазовое расслоение тем не менее сохранится, но будет происходить между соизмеримой антиферромагнитной и парамагнитной фазами.

Имеет смысл кратко упомянуть несколько усложняющих факторов, которые не рассматриваются в настоящей модели, но характерны для практически любых реальных систем, и которые несомненно будут существенно влиять на результирующую фазовую диаграмму. В эксперименте форма Ферми поверхности отличается от сферической, и кроме того, электронные и дырочные карманы имеют различные скорости Ферми. Влияние этих факторов на фазовое расслоение требует отдельного исследования.

При рассмотрении пниктидов железа в следующем разделе мы будем учитывать эллиптичность электронных карманов и разницу в скоростях Ферми электронных и дырочных зон. Помимо этого, упомянем здесь также, что любое фазово-расслоенное состояние обладает определенной геометрией (капли, страйпы и пр.) и характеризуется определенными размерами неоднородностей. Рассматриваемая здесь модель не позволяет сделать никаких предсказаний относительно этих характеристик. В простейшем случае структура неоднородного состояния регулируется соотношением между дальнедействующим кулоновским взаимодействием электронов и поверхностной энергией границы раздела фаз. Этот вопрос будет проанализирован в разд. 4.

3.2. Фазовое расслоение в пниктидах железа

Пниктиды железа, являющиеся частным случаем железосодержащих сверхпроводников, в настоящее время представляют огромный интерес для исследователей как в связи с их высокой температурой сверхпроводящего перехода [132–134], так и благодаря богатой физике их электронной подсистемы (см., напр., обзоры [110, 135, 136]). К пниктидам железа относятся несколько семейств соединений, сходных по химическому составу и кристаллической структуре. Это такие соединения, как $RFeAsO$, где $R = La, Ce, Sm, Pr$ и др. (в литературе для них используется краткое обозначение 1111), AFe_2As_2 ($A = Ba, Sr, Ca$, обозначаются как 122) и наконец, $NaFeAs$, $LiFeAs$ и пр. (соединения типа 111). Объединяющим элементом для всех типов структур является наличие плоскостей $FeAs$, разделенных плоскостями, образованными различными атомами или группами атомов. Таким образом, как и сверхпроводящие купраты, пниктиды являются слоистыми материалами.

Исходные соединения пниктидов, упомянутые выше, могут быть допированы путем частичного или полного замещения какого-либо атома атомом с другой или той же валентностью. В результате слои $FeAs$ приобретают дырки (например, в соединениях $LaO_{1-x}F_xFeAs$ [132] или $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ [133]) или электроны (например, $BaFe_{2-x}Co_xAs_2$ [104] или $BaFe_{2-x}Ni_xAs_2$ [105]). В случае изовалентного замещения (в частности, при замене Fe на Ru [137, 138]), дополнительных носителей не возникает, однако изменение электронной структуры и типа основного состояния все равно происходит.

Фазовая диаграмма пниктидов во многом схожа с таковой для купратов. Родительские соединения 1111 (например, $LaFeAsO$) и 122 (типа $BaFe_2As_2$) являются антиферромагнитными металлами. При допировании температура Нееля уменьшается, и антиферромагнитное основное состояние сменяется сверхпроводящим. На фазовой диаграмме можно отметить наличие несоизмеримого антиферромагнетизма в области электронного допирования, а также несоизмеримых спиновых флуктуаций в области дырочного допирования.

Зонная структура пниктидов активно исследуется методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) [139, 140]. Эти исследования показывают, что пниктиды обладают многокомпонентной поверхностью Ферми. Исходные соединения имеют несколько дырочных и электронных карманов, расположенных вблизи высокосимметричных точек зоны Бриллюэна. Схожие результаты дают и первопринципные расчеты [141–143]. Так, на рис. 16 представлена поверхность Ферми пниктида типа 122 [142].

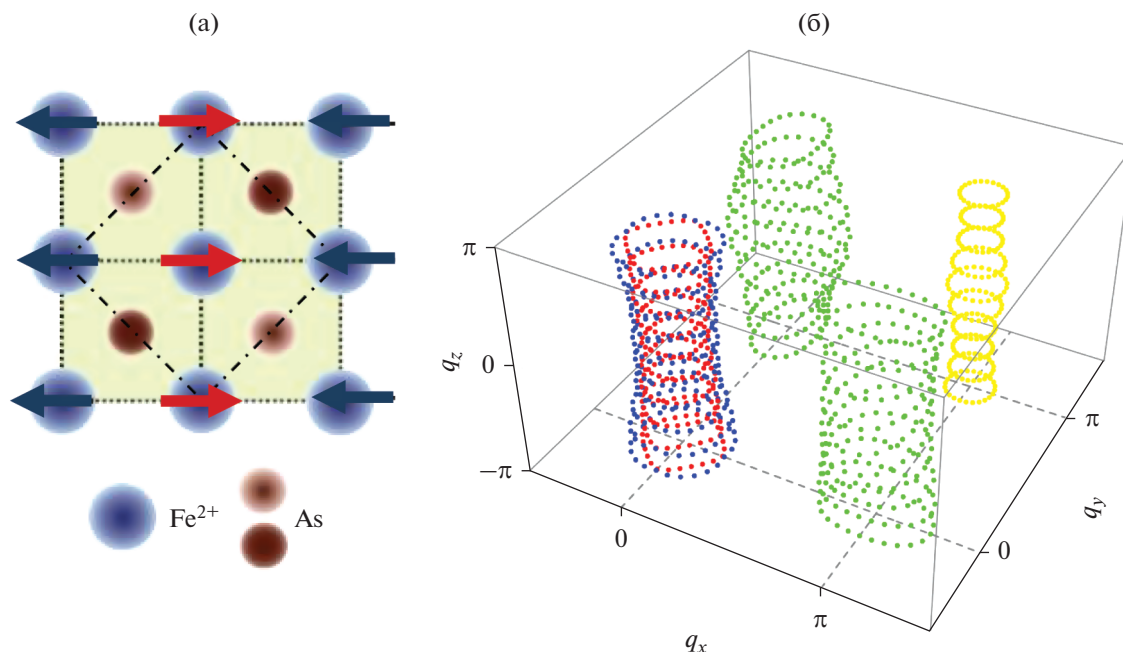


Рис. 16. (а) Плоскость FeAs. Атомы Fe образуют квадратную решетку. Однако атомы As расположены поочередно над и под плоскостью, образованной атомами Fe. В результате, истинная элементарная ячейка пниктидов содержит два атома Fe и два атома As, она изображена штрих-пунктирной линией. Стрелками показаны направления спинов в антиферромагнитной фазе пниктидов [110]. (б) Поверхность Ферми пниктидов типа 122 [142]. Результаты представлены в расширенной зоне Бриллюэна (см. текст).

Видно, что поверхность Ферми является квази-двумерной — ее форма слабо зависит от компоненты импульса, перпендикулярной слоям железа. Всего имеется 5 карманов: 3 дырочных, 2 из которых расположены вблизи точки $(0, 0)$, один — вблизи точки (π, π) (в единицах $1/a$, a — постоянная решетки), и 2 электронных кармана, расположенных вблизи точек $(\pi, 0)$ и $(0, \pi)$.

Отметим, что представленная поверхность Ферми изображена в т.н. расширенной зоне Бриллюэна, которая соответствует элементарной ячейке, содержащей один атом железа (пунктирные линии на рис. 16а). Реальная элементарная ячейка пниктидов в два раза больше по объему и содержит 2 атома железа (штрих-пунктирная линия).

При описании пниктидов теоретики используют в основном два различных подхода (помимо первопринципных расчетов), один из которых можно условно назвать феноменологическим [87, 88, 90, 98], а другой — микроскопическим [89, 93, 144]. В феноменологическом подходе рассматриваются модели пниктидов, в которых считаются заданными поверхность Ферми и скорости Ферми для всех карманов. При этом чаще всего пренебрегают зависимостью поверхности Ферми от импульса, перпендикулярного слоям FeAs, а компоненты поверхности Ферми аппроксимируются простыми фигурами типа круга и/или эллипса. Именно такой подход будет здесь

использоваться нами. В микроскопическом подходе чаще всего используют многозонные модели Хаббарда, в которых основными компонентами являются d -электроны железа. Параметры моделей, такие как амплитуды перескоков, хаббардовское U и параметр Хунда J_H , подбирают так, чтобы рассчитанная поверхность Ферми соответствовала экспериментально наблюдаемой.

При любом подходе роль нестинга в формировании антиферромагнетизма в пниктидах считается общепризнанной. В пользу этого прежде всего свидетельствует то, что данный механизм правильно предсказывает тип антиферромагнетизма исходных пниктидов. Еще одним аргументом является экспериментальное наблюдение несоизмеримой фазы в некоторых допированных соединениях. Наконец, в отличие, например, от купратов или манганитов, исходные соединения которых являются моттовскими диэлектриками, недопированные пниктиды являются металлами, это говорит о том, что электрон—электронное взаимодействие в них не является сильным (см., однако, обсуждение по этому поводу в работе [110]). Это, в свою очередь, свидетельствует об адекватности использования моделей типа Райса для данных соединений.

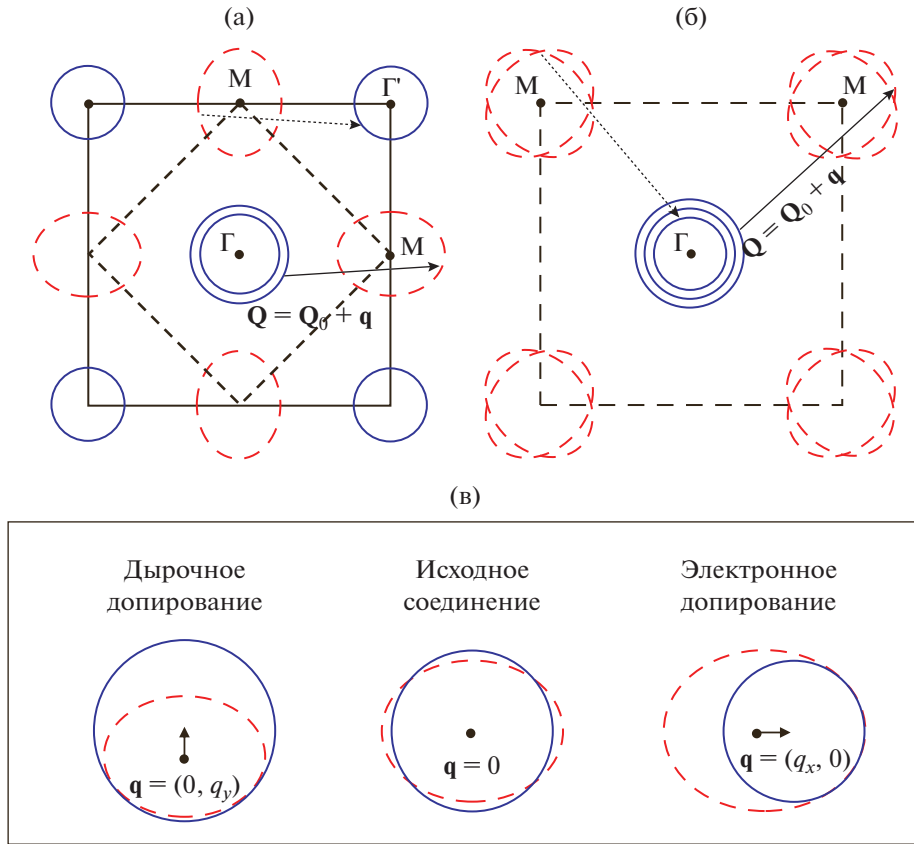


Рис. 17. Поверхность Ферми модели пниктидов в расширенной (а) и истинной (б) зоне Бриллюэна. Всего имеется три дырочных (сплошные кривые) и два электронных (штриховые кривые) кармана. Дырочные карманы имеют форму круга, а электронные – эллипса. В расширенной зоне Бриллюэна, два дырочных кармана центрированы вокруг точки $(0, 0)$, а один карман расположен вокруг точки $(\pi/a, \pi/a)$. Электронные компоненты поверхности Ферми расположены вокруг точек $(0, \pi/a)$ и $(\pi/a, 0)$. В истинной зоне Бриллюэна оба этих кармана располагаются в углу зоны Бриллюэна. Стрелками показаны возможные векторы нестинга. (в) Типы нестинга при различном допировании [98].

3.2.1. Модельный гамильтониан пниктидов

Сформулируем теперь электронную модель пниктидов. Прежде всего мы пренебрежем зависимостью энергий квазичастиц от импульса, перпендикулярного слоям FeAs, т.е. будем рассматривать двумерную модель. Поверхность Ферми состоит из трех дырочных и двух электронных карманов. Мы будем считать, что дырочные компоненты имеют форму круга, а электронные – эллипса (см. рис. 17), что в достаточно хорошей степени соответствует эксперименту [144]. В расширенной зоне Бриллюэна два дырочных кармана центрированы вокруг $\Gamma = (0, 0)$ точки, а один карман расположен вокруг точки $\Gamma' = (\pi/a, \pi/a)$. Электронные компоненты Ферми поверхности расположены вокруг точек $(0, \pi/a)$ и $(\pi/a, 0)$.

Как и раньше, запишем гамильтониан модели в виде суммы $H = H_0 + H_{int}$, где одночастичная часть имеет вид:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\lambda\sigma} \epsilon_{\lambda\mathbf{k}}^h a_{\mathbf{k}\lambda\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\lambda\sigma} \epsilon_{\lambda\mathbf{k}}^e b_{\mathbf{k}\lambda\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}\lambda\sigma}, \quad (19)$$

Здесь $a_{\mathbf{k}\lambda\sigma}^\dagger, a_{\mathbf{k}\lambda\sigma}$ ($b_{\mathbf{k}\lambda\sigma}^\dagger, b_{\mathbf{k}\lambda\sigma}$) – операторы рождения и уничтожения квазичастиц в дырочных (электронных) зонах $\lambda = 1, 2, 3$ ($s = 1, 2$) с дисперсиями $\epsilon_{\lambda\mathbf{k}}^h$ ($\epsilon_{\lambda\mathbf{k}}^e$).

Мы предполагаем, что вблизи поверхности Ферми все зоны обладают квадратичной дисперсией. Электронные компоненты поверхности Ферми эллиптические. Примем, что вблизи поверхности Ферми дисперсия электронных зон имеет вид $\epsilon_{1\mathbf{k}+\mathbf{Q}_0}^e = \epsilon(k_x, k_y), \epsilon_{2\mathbf{k}+\mathbf{Q}'_0}^e = \epsilon(k_y, k_x)$, где

$$\epsilon(k_x, k_y) = \frac{v_F^e k^2}{2k_F} - \frac{v_F^e k_F}{2} + \frac{\alpha v_F^e}{k_F} (k_y^2 - k_x^2) - \mu.$$

Здесь v_F^e – скорости Ферми для электронных зон, усредненных по поверхности Ферми. Центры электронных карманов находятся в точках $\mathbf{Q}_0 = (\pi/a, 0)$ и $\mathbf{Q}'_0 = (0, \pi/a)$. Отметим, что в общем случае скорости Ферми неодинаковы для различных листов. Параметр α определяет эллиптич-

ность электронных карманов. Положительные α соответствуют рис. 17. В этом случае главные оси эллипсов направлены к точке $\Gamma = (0, 0)$. Если $\alpha < 0$, то эллипсы должны быть повернуты на 90° вокруг своих центров.

В силу многокомпонентной структуры поверхности Ферми, гамильтониан взаимодействия H_{int} в общем случае должен включать множество членов, описывающих попарное взаимодействие между носителями заряда в различных зонах. Однако, поскольку мы интересуемся только свойствами волны спиновой плотности, то большинство этих членов мы можем отбросить, ибо они не ответственны за возникновение антиферромагнитного фазового перехода. Поэтому мы сразу можем отбросить члены, описывающие взаимодействие как электронных компонент друг с другом, так и дырочных компонент друг с другом.

Из эксперимента известно [110], что магнитный порядок в пниктидах имеет полосчатую, страйповую, структуру, такую, что магнитный момент осциллирует вдоль одной кристаллической оси, оставаясь неизменным вдоль другой оси. В общем случае носители заряда в каждой дырочной зоне взаимодействуют с таковыми в каждой электронной зоне. Однако для того чтобы воспроизвести страйповую магнитную структуру, достаточно связать одну дырочную зону с одной электронной [87]. Например, осцилляции магнитного момента вдоль оси x возникают при взаимодействии квазичастиц в дырочной зоне 1 с квазичастицами в электронной зоне 1, или квазичастиц в дырочной зоне 3 с квазичастицами в электронной зоне 2 (см. сплошные и пунктирные стрелки на рис. 16). В обоих случаях векторы нестинга будут слабо отличаться друг от друга и будут примерно (точно, в случае соизмеримой АФМ фазы) равны $\mathbf{Q}_0 = (\pi/a, 0)$. Мы будем считать для простоты, что только одна электронная и одна дырочная зоны формируют АФМ-порядок. Положим, что это зоны ϵ_1^h и ϵ_1^e , и взаимодействие между ними является существенным для формирования магнитного порядка. Остальными членами в операторе взаимодействия можно пренебречь. Как мы покажем ниже, даже такая простая модель пниктидов позволяет правильно описать экспериментальные данные по соизмеримой и несоизмеримой АФМ-фазе, а также фазовое расслоение.

Исходя из этих соображений, для нас теперь будет удобней разбить полный гамильтониан модели на магнитную часть H_m и немагнитную

часть (“резервуар”) H_r . В результате будем иметь $H = H_m + H_r$:

$$H_m = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[\epsilon_{1\mathbf{k}}^h a_{\mathbf{k}1\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}1\sigma} + \epsilon_{1\mathbf{k}}^e b_{\mathbf{k}1\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}1\sigma} \right] + \frac{V_1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\sigma\sigma'} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}1\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}1\sigma} b_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}1\sigma'}^\dagger b_{\mathbf{k}'1\sigma'}, \quad (20)$$

$$H_r = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[\sum_{\lambda=2,3} \epsilon_{\lambda\mathbf{k}}^h a_{\mathbf{k}\lambda\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda\sigma} + \epsilon_{2\mathbf{k}}^e b_{\mathbf{k}2\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}2\sigma} \right].$$

В этих уравнениях N – число атомов Fe в одном слое, $V_1 > 0$ – константа взаимодействия между зонами $\epsilon_{1\mathbf{k}}^e$ и $\epsilon_{1\mathbf{k}}^h$ (мы рассматриваем предел сильно экранированного кулоновского взаимодействия, когда V_1 не зависит от импульса). Ниже мы будем называть эти зоны магнитными. Зоны $\epsilon_{2\mathbf{k}}^h$, $\epsilon_{3\mathbf{k}}^h$ и $\epsilon_{2\mathbf{k}}^e$ мы будем называть немагнитными, поскольку в рассматриваемой модели они не дают вклада в формирование магнитного порядка.

Модель (20) является обобщением модели Райса, которую рассматривали в предыдущем разделе. Единственное существенное отличие данной модели от гамильтониана Райса (14) заключается в том, что Ферми поверхность одной из магнитных зон является эллиптической, что делает невозможным идеальный нестинг при любом допировании.

3.2.2. Несоизмеримая АФМ-фаза

Мы будем исследовать гамильтониан (20) в приближении среднего поля, действуя так же, как и в предыдущем разделе. Условие применимости приближения является неравенство $\Delta/\epsilon_F \ll 1$. АФМ-параметр порядка имеет вид:

$$\Delta = \frac{V_1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\sigma\sigma'} \langle a_{\mathbf{k}1\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}1-\sigma} \rangle, \quad (21)$$

вектор нестинга \mathbf{Q} равен $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0 + \mathbf{q}$. Когда $\mathbf{q} = 0$, АФМ-фаза является соизмеримой. Если \mathbf{q} мало, но отлично от нуля, мы имеем несоизмеримую АФМ-фазу, при которой вектор антиферромагнетизма медленно поворачивается в пространстве.

Отметим, что различные компоненты Ферми поверхности имеют, вообще говоря, различный орбитальный состав (суперпозиции p -электронов As и d -электронов Fe) [139, 142]. Более выгодным является спаривание тех частей поверхности Ферми, орбитальный состав которых является схожим. В нашем подходе это обстоятельство может быть эффективно учтено, если сделать константу связи зависящей от импульса. Такое обобщение привело бы к ярко выраженной зависимости параметра порядка от импульса, что могло бы повлиять на температуру магнитного перехода, а также на структуру несоизмеримой фазы. Однако надежный расчет такой импульсной зависимости V_1 является сложной задачей, далеко выходящей за рамки настоящего рассмотрения. Более того,

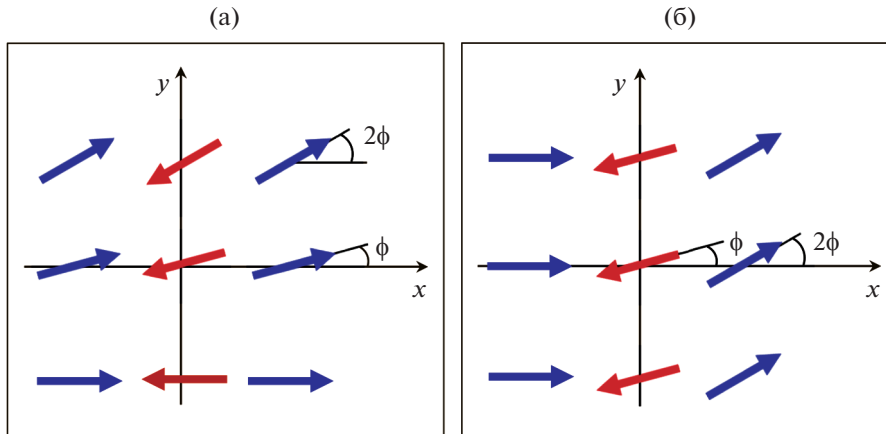


Рис. 18. Спиновая структура несоизмеримой АФМ фазы. В случае $\alpha > 0$, панель (а) соответствует дырочному допированию ($x < 0$), панель (б) – электронному ($x > 0$). Если же $\alpha < 0$, то панель (а) соответствует электронному допированию, а панель (б) – дырочному [98].

до тех пор, пока вариации V_1 не слишком большие, они не смогут качественно повлиять на фазовое расслоение – основной предмет нашего исследования. Поэтому мы будем считать здесь V_1 константой.

Вектор намагниченности, соответствующий АФМ-параметру порядка Δ , лежит в плоскости xu . В случае соизмеримой фазы, в реальном пространстве наблюдается страйповая структура. Именно направление векторов намагниченности атомов железа в узлах решетки остается неизменным на линии, перпендикулярной вектору нестинга \mathbf{Q}_0 . Однако при движении вдоль \mathbf{Q}_0 направление намагниченности меняется на противоположное при переходе от одного соседнего атому к другому. Для несоизмеримой фазы такая страйповая структура медленно вращается в плоскости xu : полярный угол $\phi(\mathbf{R})$, описывающий направление намагниченности на узле \mathbf{R} , равен $(\mathbf{q}\mathbf{R})$, см. рис. 18.

Дальнейшее рассмотрение проводится в приближении среднего поля в соответствии с той же процедурой, которую использовали выше для модели Райса. В частности, посредством минимизации термодинамического потенциала Ω находятся выражения для параметра порядка Δ и вектора нестинга \mathbf{Q} при фиксированном уровне допирования x . Так же, как и выше, можно ввести параметры x_0 и r : x_0 определяет характерный уровень допирования, разрушающий антиферромагнитный порядок, параметр r есть отношение плотностей состояний электронов в немагнитных и магнитных зонах.

Проведенный анализ выявил, что уравнения самосогласования имеют решения только при параметре эллиптичности α , меньшем некоторого критического значения α_0 .

Кривые $\Delta(x)$ и $q(x)$, вычисленные при $r = 1$ и двух различных значениях α , показаны на рис. 19. При $|x| < x_1^*$, где критическое допирование x_1^* за-

висит от параметров модели, весь дополнительный заряд, появляющийся при допировании, уходит в немагнитные зоны. В результате параметр порядка не зависит от x , $\Delta(x) = \Delta_0$, $q(x) = 0$. В таком режиме система находится в соизмеримой АФМ-фазе. Когда $|x| = x_1^*$, химпотенциал касается дна (верха, если $x < 0$) верхней (нижней) магнитной зоны. При дальнейшем допировании, электроны (дырки) появляются в зоне $E_k^{(2)}$ ($E_k^{(1)}$). Антиферромагнитный параметр порядка становится несоизмеримым [118, 122], $\mathbf{q} \neq 0$. Переход в несоизмеримую фазу может быть как первого, так и второго рода, в зависимости от параметров α и r .

Электронное допирование ($x > 0$) во многих отношениях схоже с дырочным ($x < 0$) благодаря электрон–дырочной симметрии. При этом функции $\Delta(x)$ и $q(x)$ не зависят от знака α . Однако направление вектора $\mathbf{q}(x)$ зависит как от знака α , так и от типа допирования. Когда $\alpha > 0$, вектор $\mathbf{q}(x)$ параллелен оси x при электронном допировании и оси y в случае дырочного допирования. В случае $\alpha < 0$ ситуация прямо противоположная (см. рис. 18).

3.2.3. Особенности фазового расслоения в пниктидах

Как и для модели Райса, мы проводим исследование устойчивости однородного состояния путем анализа зависимости свободной энергии системы от допирования. При этом соответствующие кривые в целом аналогичны изображенным на рис. 14 и демонстрируют возможность фазового расслоения в определенной области параметров модели.

Область допирования, в которой существует фазовое расслоение, максимальна при $\alpha = 0$. В этом случае рассматриваемая модель аналогична двумерной модели Райса [82], трехмерный аналог

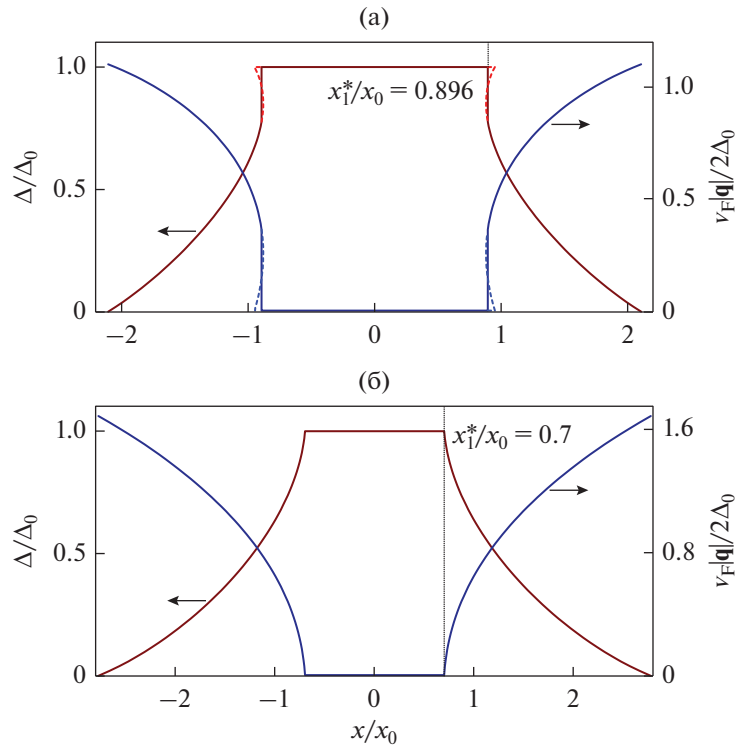


Рис. 19. Зависимости параметра порядка Δ и вектора нестинга $|\mathbf{q}|$ от допирования x , рассчитанные при $r = 1$. (а) Параметр $\bar{\alpha} = \alpha\varepsilon_F/\Delta_0 = 0.1$. Фазовый переход между соизмеримой и несоизмеримой АФМ фазами является переходом первого рода: значения Δ и $|\mathbf{q}|$ меняются скачком при $x = x_1^*$. Пунктирными кривыми показаны функции Δ и $|\mathbf{q}|$ метастабильного состояния. (б) Параметр $\bar{\alpha} = 0.6$. Фазовый переход между соизмеримой и несоизмеримой АФМ фазами является переходом второго рода [98].

которой рассматривали выше. Область существования фазового расслоения непрерывно сужается с ростом α и полностью исчезает при некотором критическом значении α .

Полученные результаты проиллюстрированы на фазовой диаграмме модели в плоскости $(x, \bar{\alpha})$ (рис. 20). Эта диаграмма рассчитана при $r = 1$. Она остается качественно такой же при любых $r \neq 0$.

Отметим здесь неожиданное поведение границы раздела антиферромагнитной и парамагнитной (ПМ) фаз. А именно, линия раздела между несоизмеримой АФМ-фазой и ПМ-фазой (переход второго рода, сплошная кривая на рис. 20) тянется слева направо, тогда как все остальные границы раздела ведут себя противоположным образом. Иными словами, область допирования, в которой существует антиферромагнетизм, увеличивается с ростом параметра эллиптичности α . Чтобы понять эту особенность, нужно иметь в виду, что качество нестинга контролируется не только параметром α , но также и параметром μ (или x). Параметр α определяет форму электронного кармана, в то время как μ (или допирование) определяет относительный размер дырочных и электронных карманов. Таким образом, при большем допировании относительные размеры электрон-

ных и дырочных карманов сильно разнятся, но в то же время они могут лучше совмещаться при большей эллиптичности электронной компоненты поверхности Ферми.

3.2.4. Обсуждение результатов раздела о пниктидах

Итак, основным результатом, полученным в этом разделе, является предсказание электронного фазового расслоения в пниктидах железа в определенной области допирования. Неоднородное состояние является смесью соизмеримой и несоизмеримой АФМ-фаз с различными концентрациями электронов. Фазовое расслоение в железо-содержащих сверхпроводниках экспериментально наблюдали во множестве работ [101–104, 106]. Например, неоднородное состояние, являющееся смесью соизмеримых антиферромагнитных и немагнитных (сверхпроводящих при низких температурах) доменов с характерными размерами ~ 65 нм наблюдали в соединениях $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ (дырочное допирование) в работе [101]. Наше рассмотрение показывает, что второй фазой должна быть несоизмеримая АФМ-фаза, а не парамагнитная фаза. Однако предложенный механизм

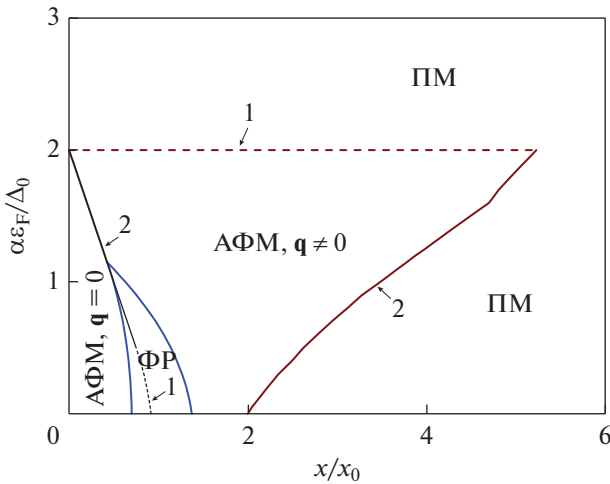


Рис. 20. Фазовая диаграмма модели пниктидов в плоскости $(x, \bar{\alpha})$ при $r = 1$. Показана только область $\alpha > 0$. Диаграмма симметрична при замене $x \rightarrow -x$ и/или $\alpha \rightarrow -\alpha$. Пунктирные линии раздела фаз соответствует переходу первого рода, а сплошные линии – переходу второго рода. Тонкие (как пунктирные, так и сплошные) кривые внутри области фазового расслоения (ФР) показывают, где проходила бы граница раздела между соизмеримой и несоизмеримой АФМ фазами в отсутствие фазового расслоения. ПМ – парамагнитная фаза [98].

фазового расслоения в целом может соответствовать наблюдениям, описанным в работе [101]. Как мы упоминали выше, свободные энергии несоизмеримой АФМ и парамагнитной фаз близки друг к другу. Несоизмеримая АФМ-фаза может быть разрушена по различным причинам, которые не учитываются в рассматриваемой модели, например, из-за наличия беспорядка. В этом случае фазовое расслоение будет возникать между соизмеримой АФМ и парамагнитной фазами.

Мы не исследовали здесь механизмы, определяющие геометрию неоднородностей и их характерные размеры. Этот вопрос будет рассмотрен в следующем разделе. Отметим только, что электронные концентрации в расслоенных фазах различны. Следовательно, неоднородности должны быть заряжены, и необходимо учитывать дальнедействующее кулоновское отталкивание. Характерные размеры неоднородностей могут определяться конкуренцией между кулоновской энергией и поверхностной энергией раздела фаз. В простейшем случае структура неоднородностей соответствует каплям одной фазы, помещенным в матрицу другой фазы. Однако, в зависимости от свойств системы, возможны и другие геометрии, такие как чередующиеся слои различных фаз, страйповые структуры, и т.д. [145–148]. Наличие беспорядка также влияет на структуру неоднородного состояния.

Как это следует из фазовой диаграммы, представленной на рис. 20, чем меньше параметр эл-

липтической электронных карманов α , тем шире область фазового расслоения. Щель Δ_0 увеличивается с ростом константы взаимодействия V_1 . Следовательно, чем сильнее взаимодействие дырочных и электронных компонент поверхности Ферми, тем шире область фазового расслоения, поскольку $\bar{\alpha} \sim \alpha/\Delta_0$.

Несоизмеримая АФМ-фаза с вектором \mathbf{q} , перпендикулярным \mathbf{Q}_0 , была экспериментально обнаружена в соединениях $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ (электронное допирование) в работах [149–151]. Измеренное значение $|\mathbf{q}|$ было порядка 0.02–0.03 (в единицах $1/a$) при концентрациях $0.056 < x < 0.06$. Такие значения x и $|\mathbf{q}|$, а также направление вектора \mathbf{q} (соответствующее $\alpha < 0$ в нашей модели) хорошо описываются рассматриваемой здесь теорией.

Ближний несоизмеримый АФМ-порядок был описан в работе [152], исследующей электронно-допированные соединения $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$. В целом надо быть осторожными при интерпретации этого эксперимента в рамках нашей модели, поскольку в работе [152] наблюдали короткодействующие антиферромагнитные корреляции, тогда как мы имеем дело с дальним порядком. Отметим, однако, что измеренный вектор \mathbf{q} был перпендикулярен \mathbf{Q}_0 , что соответствует отрицательным α . Спиновые флуктуации со двоянным пиком на значениях импульса $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0 \pm \mathbf{q}$ были экспериментально измерены в работах [153, 154] при исследовании дырочно-допированных соединений $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ в широкой области допирования. В этих измерениях вектор \mathbf{q} оказался параллелен \mathbf{Q}_0 , что, опять-таки, соответствует $\alpha < 0$ в нашей модели.

Отметим, что в общем случае все электронные и все дырочные компоненты поверхности Ферми взаимодействуют друг с другом. Каждая i -ая пара таких взаимодействующих карманов характеризуется своим вектором нестинга \mathbf{Q}_i , константой взаимодействия V_i и параметром “денестинга” α_i . Однако i -ое взаимодействие дает вклад в формирование АФМ порядка, только если V_i превосходит некоторое критическое значение. Все остальные карманы не дают вклада в “магнитное” взаимодействие и формируют резервуар. Вполне вероятно, что среди различных пниктидов железа существуют системы с такими резервуарами. Однако существование резервуара не является необходимым условием для формирования несоизмеримой АФМ-фазы и фазового расслоения.

Мы ограничились рассмотрением только одного типа взаимодействия, но показали, что даже такой упрощенный сценарий способен описать экспериментально наблюдаемый тип АФМ-порядка, как соизмеримого, так и несоизмеримого типа. “Включение” дополнительных взаимодействий может быть рассмотрено в будущем, если несоизмеримая АФМ-фаза с другим типом сим-

метрии будет обнаружена в эксперименте. Отметим, однако, что полученные здесь результаты качественно останутся неизменными.

Итак, мы продемонстрировали, что достаточно простая модель пниктидов (упрощенная форма Ферми поверхности, не учитываются орбитальные степени свободы и т.д.) оказывается способной описать существование фазового расслоения в этих соединениях в режиме слабого взаимодействия, т.е. в отсутствие сильных электронных корреляций. Это является важным выводом для интерпретации экспериментальных данных о неоднородных состояниях в пниктидах железа: доказывает, что чисто электронные модели с умеренной константой взаимодействия оказываются способными объяснить явление фазового расслоения в этих соединениях.

4. СТРУКТУРА НЕОДНОРОДНЫХ СОСТОЯНИЙ

В предыдущих разделах мы ограничивались исследованием устойчивости однородного состояния. Такое исследование заключается в вычислении свободной энергии системы F как функции допирования n в рамках той или иной микроскопической модели. Наличие у свободной энергии отрицательной кривизны или точки излома сигнализирует о неустойчивости однородного состояния и возникновении фазового расслоения в некоторой области допирования. Область концентраций $n_1 < n < n_2$, в которой реализуется неоднородное состояние, определяли с помощью построения Максвелла [41]. Расслоение происходит на фазу 1 с концентрацией n_1 и объемной долей $1-p = (n_2 - n)/(n_2 - n_1)$, и фазу 2 с концентрацией n_2 и объемной долей $p = (n - n_1)/(n_2 - n_1)$. Свободная энергия фазово-расслоенного состояния равна $F_{PS} = (1-p)F(n_1) + pF(n_2)$. Концентрации n_1 и n_2 находят путем минимизации этого выражения по n_1 и n_2 .

Такой подход не позволяет сказать ничего определенного о структуре неоднородного состояния. Из эксперимента известно, что геометрия расслоенных фаз может быть различной. Например, в манганитах при малом допировании наблюдается капельная структура неоднородного состояния: ферромагнитные околосферические области нанометровых размеров находятся в антиферромагнитной матрице [8–10]. В тех же манганитах, но уже при допировании вблизи $x = 1/2$, наблюдаются ферромагнитные капли, но в зарядово и орбитально-упорядоченной диэлектрической матрице [20]. Схожие структуры наблюдаются в пниктидах железа [100]. Помимо капель, в манганитах [21–23], так же, как и в купратах [155, 156], наблюдаются полосчатые, страйповые, структуры.

Отметим, что расслоенные фазы имеют различную концентрацию электронов. Следовательно, неоднородности должны быть заряжены, и

для корректного описания такой неоднородной фазы необходимо принять во внимание дальнотействующее кулоновское отталкивание.

4.1. Геометрия неоднородностей

В этом разделе рассмотрим, как меняются правила Максвелла для определения равновесных концентраций расслоенных фаз при учете дальнотействующего кулоновского отталкивания между неоднородностями. Будем следовать здесь работам [146, 147] и учитывать результаты расчетов поверхностной энергии раздела фаз в каждом конкретном случае [32, 40, 145, 157].

Предположим, что нам известна свободная энергия системы как функция числа частиц N и объема V . В термодинамическом пределе мы можем написать $F = Vf(n)$, где $n = N/V$ – концентрация электронов, f – свободная энергия единицы объема. В неоднородном состоянии система состоит из фазы 1 с концентрацией n_1 и объемом V_1 , и фазы 2 с концентрацией n_2 и занимающей объем $V_2 = V - V_1$. Пусть объемная доля фазы 2 равна $p = V_2/V$. Тогда концентрации n_1 , n_2 и p связаны между собой соотношением $(1-p)n_1 + pn_2 = n$. Свободная энергия фазово-расслоенного состояния, приходящаяся на единицу объема, равна

$$f_{PS} = (1-p)f(n_1) + pf(n_2) + e_{int}(n_1, n_2),$$

где e_{int} – плотность энергии, которая определяется взаимодействием фаз 1 и 2 друг с другом. Ее можно представить в виде суммы $e_{int} = e_c + e_s$, где e_c – кулоновская энергия взаимодействия фаз, e_s – поверхностная энергия. Последнюю можно представить в виде $e_s = \sigma S/V$, где S – общая площадь раздела фаз, σ – поверхностное натяжение. Рассмотрим сначала кулоновский вклад в e_{int} .

4.1.1. Кулоновская энергия неоднородного состояния в приближении Вигнера–Зейтца

Кулоновская энергия существенно зависит от геометрии неоднородностей в фазово-расслоенном состоянии. Во многих случаях в системе имеются конечного размера домены одной из фаз, находящиеся в окружении другой фазы. Пусть для определенности это будут домены фазы 2. В изотропном случае естественно моделировать такие домены в виде сфер, упорядоченно расположенных в матрице из фазы 1. Число таких сфер N_s и их радиус R связаны с полным объемом фазы 2 соотношением $4\pi R^3/3 = V_2/N_s$. Следуя работам [146, 147], мы рассчитываем кулоновскую энергию системы в приближении Вигнера–Зейтца [158].

В этом приближении плотность кулоновской энергии неоднородной системы равна плотности энергии сферической ячейки Вигнера–Зейтца. Последняя состоит из двух вложенных одна в дру-

гою сфер, с центрами в начале координат. Внутренняя сфера соответствует фазе 2 и имеет радиус R . Пространство, ограниченное внутренней и внешней сферами, заполнено фазой 1. Радиус внешней сферы (ячейки Вигнера–Зейтца) выбирается так, чтобы ее объем равнялся объему всей системы, поделенному на N_s : $4\pi R_{WS}^3/3 = V/N_s$. Нетрудно видеть, что радиусы R и R_{WS} связаны между собой соотношением $R = p^{1/3} R_{WS}$.

Плотность заряда в фазе 2 равна $p_2 = -e(n_2 - n) = -e(1 - p)(n_2 - n_1)$, где мы учли заряд, создаваемый положительно заряженными ионами, который мы считаем равномерно распределенным по всему образцу. Аналогично, для плотности заряда в фазе 1 имеем $p_1 = -e(n_1 - n) = ep(n_2 - n_1)$. Нетрудно убедиться в том, что полный заряд в ячейке Вигнера–Зейтца, как и должен быть, равен нулю. Заряд, помещенный в рассматриваемую неоднородную систему, будет экранироваться. При этом будем считать, что системе в целом можно приписать некоторую диэлектрическую проницаемость ϵ , которую будем считать пространственно однородной [146, 147] и одинаковой как в фазе 1, так и в фазе 2. Кроме того, будем считать, что заряд в фазах 1 и 2 распределен равномерно. Последнее предположение оправданно, если характерный размер неоднородностей не сильно превышает характерную длину экранировки заряда. Можно показать, в частности, что для манганитов величина R составляет 1–3 периода решетки. При этом длина экранировки есть величина того же порядка, так что предположение об однородном распределении заряда внутри неоднородностей является оправданным.

В случае, когда заряд внутри фаз 1 и 2 распределен равномерно, нетрудно рассчитать создаваемое им поле \mathbf{E} внутри ячейки Вигнера–Зейтца, решая уравнения Пуассона. Интегрируя $\epsilon \mathbf{E}^2/8\pi$ по объему ячейки, получаем в результате выражение для плотности кулоновской энергии

$$e_C = \frac{2\pi(n_2 - n_1)^2 R^2}{5\epsilon} p \left(2 - 3p^{\frac{1}{3}} + p \right). \quad (22)$$

Плотность поверхностной энергии равна $e_s = 3p\sigma/R$. Характерный размер неоднородностей R определяется минимизацией полной энергии взаимодействия фаз $e_{\text{tot}} = e_C + e_s$. Это дает:

$$\bar{R} = \left[\frac{15\epsilon\sigma}{4\pi e^2 (n_2 - n_1)^2 \left(2 - 3p^{\frac{1}{3}} + p \right)} \right]^{1/3}, \quad (23)$$

$$\bar{e}_{\text{tot}} = \left[\frac{e^2 (n_2 - n_1)^2 \sigma^2}{\epsilon} \right]^{1/3} u(p), \quad (24)$$

где черта над R и e_{tot} означает, что соответствующая величина соответствует минимуму энергии, а функция $u(p)$ равна

$$u(p) = 3 \left(\frac{9\pi}{10} \right)^{1/3} p \left(2 - 3p^{\frac{1}{3}} + p \right)^{1/3}. \quad (25)$$

Аналогично можно рассчитать энергию взаимодействия фаз и для других возможных геометрий фазово-расслоенного состояния. Рассмотрим здесь еще две возможности: домены фазы 2 неограниченные в одном и в двух направлениях. В первом случае домены моделируются цилиндрами радиуса R , упорядоченно расположенными в матрице из фазы 1. Ячейка Вигнера–Зейтца в этом случае представляет собой два центрированных цилиндра с радиусами R и $R_{WS} = R/p^{1/2}$. Во втором случае мы имеем чередующиеся плоские слои с толщинами $2R$ (фаза 2) и $2R_{WS} = 2R/p$ (фаза 1). В обоих случаях плотность энергии взаимодействия фаз можно представить в виде (24), но с различным видом функции $u(p)$. Для цилиндрических доменов и слоев имеем, соответственно:

$$u_{\text{cyl}}(p) = 3 \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/3} p (-\ln p - 1 + p)^{1/3}, \quad (26)$$

$$u_{\text{lay}}(p) = \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/3} [3p(1 - p)]^{2/3}.$$

При этом оптимальный радиус цилиндра и оптимальная полуширина слоя фазы 2 равны

$$\bar{R}_{\text{cyl}} = \left[\frac{2\epsilon\sigma}{\pi e^2 (n_2 - n_1)^2 (p - \ln p - 1)} \right]^{1/3}, \quad (27)$$

$$\bar{R}_{\text{lay}} = \left[\frac{3\epsilon\sigma}{4\pi e^2 (n_2 - n_1)^2 p^2 (1 - p)^2} \right]^{1/3}.$$

Формула (24) дает нам выражения для плотности энергии взаимодействия фаз как функцию концентраций n_1 и n_2 . При этом мы предполагаем, что поверхностное натяжение σ как функция n_1 и n_2 нам известна. Соответствующие вычисления можно найти в [157]. Отметим здесь, что функция $\sigma(n_1, n_2)$ довольно слабо зависит от своих аргументов. Тогда сами концентрации электронов в расслоенных фазах находятся путем минимизации полной свободной энергии.

Во всех вышеприведенных формулах предполагается, что фаза 2 разбивается на ограниченные области, помещенные в фазу 1. В случае когда объемная доля фазы 2, $p > 0.5$, естественно предположить обратное: фаза 1 находится в конечном размере доменах, помещенных в фазу 2. В этом случае в формулах $p \rightarrow 1 - p$. Изменение геометрии неоднородностей в зависимости от p проиллюстрировано на рис. 21.

4.2. Фазовое расслоение, фрустрированное дальнедействующим кулоновским отталкиванием

Исследуем теперь вопрос о том, как дальнедействующее кулоновское отталкивание влияет на область существования фазового расслоения. Продемонстрируем это для наглядности на основе модели манганитов, которую мы рассматривали в разделе 2. Как указывали там, эффективная модель манганитов допускает несколько типов магнитного упорядочения в качестве основного состояния. В частности, для ферромагнитного и антиферромагнитного состояний, энергия основного состояния выражается через число носителей заряда (на один узел решетки) локализованных, n_l , и зонных, n_b , связанных с уровнем (дырочного) допирования x соотношением $n_l + n_b = 1 - x$. При заданном x концентрации n_l и n_b находили самосогласованно.

В неоднородном состоянии у нас имеется антиферромагнитная фаза с уровнем допирования x_a и ферромагнитная фаза с уровнем допирования $x_f > x_a$. Пусть объемная доля ферромагнитной фазы есть p . Тогда мы имеем $px_f + (1 - p)x_a = x$. Относительно геометрии неоднородностей мы будем предполагать, что при $p < 0.5$, имеются ферромагнитные капли в антиферромагнитной матрице, а при $p > 0.5$, наоборот, антиферромагнитные капли в ферромагнитной матрице. При малых x такая геометрия соответствует эксперименту [11, 12]. Свободная энергия неоднородного состояния, приходящаяся на один узел решетки, равна

$$F_{PS} = pF_{fm}(x_f) + (1 - p)F_{af}(x_a) + d^3\bar{e}_{tot}, \quad (28)$$

где \bar{e}_{tot} дается формулой (24), в которой надо заменить $n_2 - n_1 \rightarrow (x_f - x_a)/d^3$ (d – постоянная решетки).

Оптимальные концентрации x_f и x_a определяются минимизацией свободной энергии. При этом надо знать поведение поверхностной энергии σ как функции x_f и x_a . Согласно [157], основной вклад в поверхностную энергию обусловлен размерным квантованием электронных состояний в неоднородностях, т.е. он связан с наличием зонных электронов. В антиферромагнитной фазе они либо отсутствуют полностью, $n_b = 0$, либо их концентрация чрезвычайно мала, $n_b \ll 1$. Поэтому мы можем считать, что $\sigma = \sigma(x_f)$.

Минимизируя свободную энергию при заданном уровне допирования x , мы получаем зависимость $F_{PS}(x)$, которую мы сравниваем с энергией однородного состояния $F_{hom}(x) = \min[F_{fm}(x), F_{af}(x)]$. Фазовое расслоение существует в области допирования, где $F_{PS}(x) < F_{hom}(x)$. Зависимости $F_{PS}(x)$, рассчитанные при некоторых значениях характерной кулоновской энергии $u = e^2/(\epsilon d)$, показаны на рис. 22. Энергия однородной фазы также показана на этом рисунке. Мы видим, что фазо-

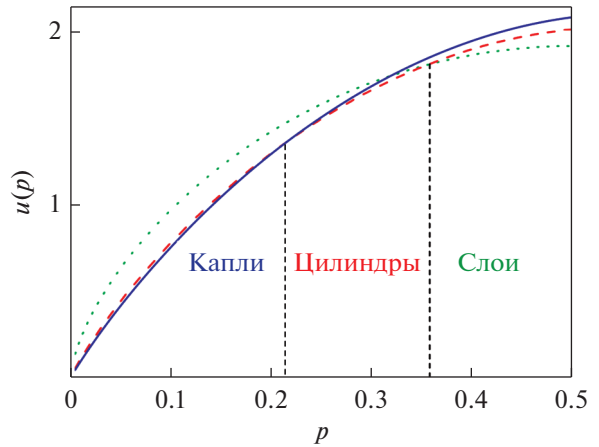


Рис. 21. Функции $u(p)$, соответствующие трем различным геометриям неоднородного состояния, в зависимости от объемной доли фазы 2. Сплошная кривая соответствует каплям фазы 2 в матрице из фазы 1, штриховая кривая – цилиндрам фазы 2, а пунктир – чередующимся слоям фаз 1 и 2. При $p > 0.5$ фазы 1 и 2 меняются местами. Области, в которых выгодна та или иная геометрия, разделены вертикальными линиями [145].

вое расслоение существует в области допирования $x_1 < x < x_2$, где x_1 и x_2 определяются как точки, в которых $F_{PS}(x_1) = F_{af}(x_1)$ и $F_{PS}(x_2) = F_{fm}(x_2)$. При заданном x концентрации x_a и x_f близки к значениям x_1 и x_2 , соответственно, но, вообще говоря, не совпадают с ними.

Область фазового расслоения уменьшается при увеличении кулоновского отталкивания $u = e^2/(\epsilon d)$. При u выше некоторого критического значения u_c фазовое расслоение невыгодно ни при каком допировании. Для рассмотренной модели манганитов мы имеем $u_c \approx 2.5w_0$. Из простых оценок следует, что если диэлектрическая проницаемость ϵ не слишком велика, то можно ожидать, что $u \sim w_0$. В этом случае характерный размер неоднородностей, рассчитанный по формуле (23), оказывается порядка $R/d \sim 1.5-3$.

Итак, на примере эффективной модели манганитов, мы показали, что дальнедействующее кулоновское отталкивание сужает область электронного фазового расслоения. Модель учитывает наличие локализованных и зонных электронов, а также взаимодействие последних с локальными спинами $S = 3/2$ посредством механизма двойного обмена. Аналогичные расчеты можно провести для кобальтитов, поскольку предложенная в разделе 2.2 модель этих соединений во многих отношениях сходна с моделью Фаликова–Кимбалла, использовавшейся для манганитов. Подобный подход применим и для систем с неидеальным нестингом, таких как пниктиды.

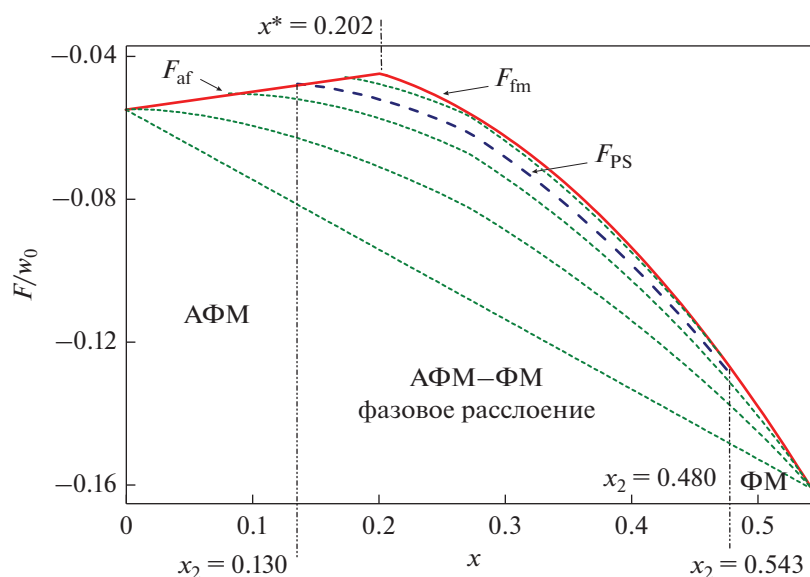


Рис. 22. Свободная энергия манганитов как функция допирования x , рассчитанная при $T = 0$. Сплошная кривая соответствует однородному состоянию (АФМ при $x < x^*$ и ФМ при $x > x^*$). Штриховые кривые соответствуют энергиям фазово-расслоенного состояния, рассчитанным при $u/w_0 = 2, 3/2, 1, 1/4, 0$ сверху вниз [$w_0 = z(T=0)$, $u = e^2/(\epsilon d)$]. Другие параметры модели, соответствующие всем кривым: $e_{JT}/w_0 = 0.05$, $J/w_0 = 0.005$ (подробности в разделе 2). Области устойчивости однородных АФМ и ФМ состояний, а также фазово-расслоенного состояния показаны при $u/w_0 = 3/2$ [32].

5. ВЫВОДЫ

В данном обзоре приведены только наиболее характерные примеры, характеризующие, однако, основные аспекты электронного фазового расслоения в магнитных материалах. Перечислим затронутые нами вопросы.

1. Сформулирована и проанализирована модель с зонными и локализованными носителями заряда, описывающая возникновение неоднородных состояний в манганитах.

2. Построена электронная модель систем со спиновыми переходами. В рамках этой модели показана неустойчивость однородного состояния по отношению к фазовому расслоению.

3. Проанализирована устойчивость однородного состояния с волной спиновой плотности в модели Райса для систем со слабонеидеальном нестингом поверхности Ферми. Показана неустойчивость однородного состояния по отношению к фазовому расслоению.

4. Проанализирована двумерная модель электронной жидкости в пниктидах железа, характеризующаяся слабонеидеальном нестингом поверхности Ферми дырочных и электронных карманов. Показано, что фазовая диаграмма модели содержит области фазового расслоения.

5. Изучено влияние дальнедействующего кулоновского отталкивания на фазовое расслоение. Рассмотрены различные геометрии неоднородностей.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 20-62-46047.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Dagotto E.* Nanoscale phase separation and colossal magnetoresistance: The physics of manganites and related compounds // Springer, Berlin. 2013. 477 p.
2. *Nagaev E.* Colossal magnetoresistance and phase separation in magnetic semiconductors // Imperial College Press, London. 2001. 457 p.
3. *Dagotto E., Hotta T., Moreo A.* Colossal magnetoresistant materials: the key role of phase separation // Phys. Reports. 2001. V. 344. P. 1–153.
4. *Nagaev E.* Colossal magnetoresistance materials: manganites and conventional magnetic semiconductors // Phys. Reports. 2001. V. 346. P. 388–513.
5. *Казан М.Ю., Кугель К.И.* Неоднородные зарядовые состояния и фазовое расслоение в манганитах // УФН. 2001. Т. 171. № 6. С. 577–596.
6. *Kagan M.Yu., Kugel K.I., Rakhmanov A.L.* Electronic phase separation: recent progress in the old problem // Phys. Reports. 2021. V. 916. P. 1–106.
7. *Бибенин Н.Г., Зайнуллина Р.И., Устинов В.В.* Манганиты с колоссальным магнетосопротивлением // УФН. 2018. Т. 188. № 2. С. 801–820.
8. *Нагаев Э.Л.* Основные состояния и аномальный магнитный момент электронов проводимости в антиферромагнитном полупроводнике // Письма в ЖЭТФ. 1967. Т. 6. С. 484–486.
9. *Нагаев Э.Л.* Ферромагнитные микрообласти в полупроводниковом антиферромагнетике // ЖЭТФ. 1968. Т. 54. С. 228–238.
10. *Kasuya T., Yanase A., Takeda T.* Stability condition for the paramagnetic polaron in a magnetic semiconductor // Solid State Commun. 1970. V. 8. P. 1543–1546.
11. *Hennion M., Moussa F., Biotteau G. et al.* Liquidlike Spatial distribution of magnetic droplets revealed by

- neutron scattering in $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81. P. 1957–1960.
12. Hennion M., Moussa F., Biotteau G. et al. Evidence of anisotropic magnetic polarons in $\text{La}_{0.94}\text{Sr}_{0.06}\text{MnO}_3$ by neutron scattering and comparison with Ca-doped manganites // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 9513–9522.
 13. Ogarkov S.L., Kagan M.Y., Sboychakov A.O. et al. Formation of long-range spin distortions by a bound magnetic polaron // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. P. 014436.
 14. Сбойчаков А.О., Рахманов А.Л., Каган М.Ю., Бродский И.В. Туннельное магнитосопротивление фазово-расслоенных манганитов // ЖЭТФ. 2002. Т. 122. С. 869.
 15. Kagan M.Y., Klaptsov A., Brodsky I. et al. Nanoscale phase separation in manganites // J. Phys. A: Math. Gen. 2003. V. 36. P. 9155.
 16. González I., Castro J., Baldomir D. et al. Magnetic polarons in a doped one-dimensional antiferromagnetic chain // Phys. Rev. B. 2004. V. 69. P. 224409.
 17. Sboychakov A.O., Rakhmanov A.L., Kugel K.I. et al. Evolution with temperature of the magnetic polaron state in an antiferromagnetic chain with impurities // Phys. Rev. B. 2005. V. 72. P. 014438.
 18. Balagurov A.M., Pomjakushin V.Y., Sheptyakov D.V. et al. Long-scale phase separation versus homogeneous magnetic state in $(\text{La}_{1-y}\text{Pr}_y)_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$: A neutron diffraction study // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 024420.
 19. Uehara M., Mori S., Chen C.H., Cheong S.-W. Percolative phase separation underlies colossal magnetoresistance in mixed-valent manganites // Nature. 1999. V. 399. P. 560–563.
 20. Kagan M., Kugel K., Khomskii D. Phase separation in systems with charge ordering // ЖЭТФ. 2001. Т. 120. С. 470.
 21. Mori S., Chen C.H., Cheong S.-W. Pairing of charge-ordered stripes in $(\text{La,Ca})\text{MnO}_3$ // Nature. 1998. V. 392. P. 473–476.
 22. Radaelli P.G., Cox D.E., Capogna L. et al. Wigner-crystal and bi-stripe models for the magnetic and crystallographic superstructures of $\text{La}_{0.333}\text{Ca}_{0.667}\text{MnO}_3$ // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 14440–14450.
 23. Raveau B., Hervieu M., Maignan A., and Martin C. The route to CMR manganites: What about charge ordering and phase separation? // J. Mater. Chem. 2001. V. 11. P. 29–36.
 24. Khomskii D.I., Kugel K.I. Elastic interactions and superstructures in manganites and other Jahn–Teller systems // Phys. Rev. B. 2003. V. 67. P. 134401.
 25. Bała J., Horsch P., Mack F. Manganites at quarter filling: Role of Jahn–Teller interactions // Phys. Rev. B. 2004. V. 69. P. 094415.
 26. Gulacsi M., Bussmann-Holder A., Bishop A.R. Spin and lattice effects in the Kondo lattice model // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. P. 214415.
 27. Pai G.V., Hassan S.R., Krishnamurthy H.R., Ramakrishnan T.V. Zero-temperature insulator-metal transition in doped manganites // Europhys Lett. 2003. V. 64. P. 696.
 28. Ramakrishnan T.V., Krishnamurthy H.R., Hassan S.R., Pai G.V. Theory of insulator–metal transition and colossal magnetoresistance in doped manganites // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 92. P. 157203.
 29. Cépas O., Krishnamurthy H.R., Ramakrishnan T.V. Doping and field-induced insulator-metal transitions in half-doped manganites // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94. P. 247207.
 30. Zener C. Interaction between the *d*-shells in the transition metals. II. Ferromagnetic compounds of manganese with perovskite structure // Phys. Rev. 1951. V. 82. P. 403–405.
 31. Изюмов Ю.А., Скрябин Ю.Н. // Модель двойного обмена и уникальные свойства манганитов УФН. 2001. Т. 171. № 2. С. 121–148.
 32. Kugel K.I., Rakhmanov A.L., Sboychakov A.O. Phase separation in Jahn–Teller systems with localized and itinerant electrons // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95. P. 267210.
 33. de Gennes P.-G. Effects of double exchange in magnetic crystals // Phys. Rev. 1960. V. 118. P. 141–154.
 34. Falicov L.M., Kimball J.C. Simple model for semiconductor-metal transitions: SmB_6 and transition-metal oxides // Phys. Rev. Lett. 1969. V. 22. P. 997–999.
 35. Freericks J.K., Lieb E.H., Ueltschi D. Phase separation due to quantum mechanical correlations // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 88. P. 106401.
 36. Alexandrov A.S., Mott N.F. Polarons & bipolarons. Singapore: World Scientific, 1995. 202 p.
 37. Кугель К.И., Хомский Д.И. Поляронные эффекты и обменное взаимодействие в магнитных диэлектриках с ян-теллеровскими ионами // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. С. 987–1005.
 38. Смут Дж. Эффективное поле в теории магнетизма. М.: Мир, 1968. 271 с.
 39. Нагаев Э.Л. Концентрационный фазовый переход в неколлинеарное магнитное состояние // ЖЭТФ. 1969. Т. 57. С. 1274.
 40. Sboychakov A.O., Kugel K.I., Rakhmanov A.L. Jahn–Teller distortions and phase separation in doped manganites // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. P. 014401.
 41. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Часть 1. Физматлит, М. 1995. 584 с.
 42. Rakhmanov A.L., Kugel K.I., Blanter Ya.M., Kagan M.Yu. Resistivity and $1/f$ noise in nonmetallic phase-separated manganites // Phys. Rev. B. 2001. V. 63. P. 174424.
 43. Кугель К.И., Рахманов А.Л., Сбойчаков А.О. и др. Характеристики фазово-расслоенного состояния манганитов и их связь с транспортными и магнитными свойствами // ЖЭТФ. 2004. Т. 125. С. 648.
 44. Sboychakov A., Rakhmanov A., Kugel K. et al. Tunneling magnetoresistance and $1/f$ noise in phase-separated manganites // J. Phys.: Condens. Matter. 2003. V. 15. P. 1705.
 45. Hennion M., Moussa F., Biotteau G. et al. Liquidlike spatial distribution of magnetic droplets revealed by neutron scattering in $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81. P. 1957–1960.
 46. Hennion M., Moussa F., Biotteau G. et al. Evidence of anisotropic magnetic polarons in $\text{La}_{0.94}\text{Sr}_{0.06}\text{MnO}_3$ by neutron scattering and comparison with Ca-doped manganites // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 9513–9522.
 47. Allodi G., De Renzi R., Guidi G. et al. Electronic phase separation in lanthanum manganites: Evidence from ^{55}Mn NMR // Phys. Rev. B. 1997. V. 56. P. 6036–6046.
 48. Teresa J.M.D., Ibarra M.R., Algarabel P.A. et al. Evidence for magnetic polarons in the magnetoresistive perovskites // Nature. 1997. V. 386. P. 256–259.

49. Солин Н.И., Машкауцан, В.В., Королев А.В. и др. Магнитные поляроны, кластеры и их влияние на электрические свойства слаболегированных манганитов лантана // Письма в ЖЭТФ. 2003. Т. 77. С. 275–280.
50. Солин Н.И. Собственные неоднородности слаболегированных манганитов лантана в парамагнитной области температур // ЖЭТФ 2012. Т. 141. С. 109–121.
51. Fäth M., Freisem S., Menovsky A. et al. Spatially inhomogeneous metal-insulator transition in doped manganites // Science. 1999. V. 285. P. 1540–1542.
52. Babushkina N., Chistotina E., Kugel K. et al. Magnetoresistance and magnetic susceptibility of phase-separated La–Pr–Ca manganites // J. Phys.: Condens. Matter. 2002. V. 15. P. 259.
53. Fisher L., Kalinov A., Voloshin I. et al. Phase separation and isotope effect in the ferromagnetic insulating state of the $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ system ($0.2 < x < 0.33$) // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 174403.
54. Wagner P., Gordon I., Moshchalkov V. et al. Spin-dependent hopping in the paramagnetic state of the bilayer manganite $(\text{La}_{0.4}\text{Pr}_{0.6})_{1.2}\text{Sr}_{1.8}\text{Mn}_2\text{O}_7$ // Europhys. Lett. 2002. V. 58. P. 285.
55. Zhao J., Kunkel H., Zhou X., Williams G. Magnetic and transport properties, and the phase diagram of hole-doped $\text{La}_{1-x}\text{Mg}_x\text{MnO}_3$ ($x < 0.4$) // J. Phys.: Condens. Matter. 2001. V. 13. P. 9349.
56. Kugel K.I., Rakhmanov A.L., Sboychakov A.O., Khomskii D.I. Doped orbitally ordered systems: Another case of phase separation // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 155113.
57. Kugel K., Sboychakov A., Khomskii D. Inhomogeneous states in strongly correlated electron systems with orbital degrees of freedom // J. Supercond. Nov. Magn. 2009. V. 22. P. 147–153.
58. Raccah P.M., Goodenough J.B. First-order localized-electron \leftrightarrow collective-electron transition in LaCoO_3 // Phys. Rev. B. 1967. V. 55. P. 932–943.
59. Yamaguchi S., Okimoto Y., Taniguchi H., Tokura Y. Spin-state transition and high-spin polarons in LaCoO_3 // Phys. Rev. B. 1996. V. 53. P. R2926–R2929.
60. Yamaguchi S., Okimoto Y., Tokura Y. Local lattice distortion during the spin-state transition in LaCoO_3 // Phys. Rev. B. 1997. V. 55. P. R8666–R8669.
61. Korotin M.A., Ezhov S.Y., Solovyev I.V. et al. Intermediate-spin state and properties of LaCoO_3 // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 5309–5316.
62. Иванова Н.Б., Овчинников С.Г., Коршунов М.М., Еремин И.М., Казак Н.В. Особенности спинового, зарядового и орбитального упорядочений в кобальтатах // УФН. 2009. Т. 179. С. 837–860.
63. Pouchard M., Villesuzanne A., Doumerc J.-P. Spin state behavior in some cobaltites(III) and (IV) with perovskite or related structure // J. Solid State Chem. 2001. V. 162. P. 282–292.
64. Khomskii D.I., Löw U. Superstructures at low spin – high spin transitions // Phys. Rev. B. 2004. V. 69. P. 184401.
65. Maignan A., Caignaert V., Raveau B. et al. Thermoelectric power of $\text{HoBaCo}_2\text{O}_{5.5}$: possible evidence of the spin blockade in cobaltites // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 93. P. 026401.
66. Булаевский Л.Н., Назаев Э.Л., Хомский Д.И. Новый тип автолокализованного состояния электрона проводимости в антиферромагнитном полупроводнике // ЖЭТФ. 1968. Т. 54. С. 1562–1565.
67. Sboychakov A.O., Kugel K.I., Rakhmanov A.L., Khomskii D.I. Phase separation in doped systems with spin-state transitions // Phys. Rev. B. 2009. V. 80. P. 024423.
68. Podlesnyak A., Russina M., Furrer A. et al. Spin-state polarons in lightly hole-doped LaCoO_3 // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101. P. 247603.
69. Caciuffo R., Rinaldi D., Barucca G. et al. Structural details and magnetic order of $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$ ($x \leq 0.3$) // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 1068–1078.
70. Loshkareva N.N., Gan'shina E. A., Belevtsev B.I. et al. Spin states and phase separation in $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$ ($x = 0.15, 0.25, 0.35$) films: Optical, magneto-optical, and magnetotransport studies // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 024413.
71. Phelan D., Louca D., Kamazawa K. et al. Spin incommensurability and two phase competition in cobaltites // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97. P. 235501.
72. Giblin S.R., Terry I., Prabhakaran D. et al. Local matrix-cluster interactions in a phase separated perovskite // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. P. 104411.
73. He C., Torija M.A., Wu J. et al. Non-Griffiths-like clustered phase above the Curie temperature of the doped perovskite cobaltite $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$ // Phys. Rev. B. 2007. V. 76. P. 014401.
74. Khomskii D.I. Basic aspects of the quantum theory of solids: order and elementary excitations. Cambridge University Press, 2010.
75. Grüner G. The dynamics of charge-density waves // Rev. Mod. Phys. 1988. V. 60. P. 1129–1181.
76. Monceau P. Electronic crystals: an experimental overview // Adv. Phys. 2012. V. 61. P. 325–581.
77. Overhauser A.W. Spin density waves in an electron gas // Phys. Rev. 1962. V. 128. P. 1437–1452.
78. Grüner G. The dynamics of spin-density waves // Rev. Mod. Phys. 1994. V. 66. P. 1–24.
79. Shibatani A., Motizuki K., Nagamiya T. Spin density wave in chromium and its alloys // Phys. Rev. 1969. V. 177. P. 984–1000.
80. Shibatani A. Effect of magnetic field on spin density wave in chromium // J. Phys. Soc. Jpn. 1969. V. 26. P. 299–308.
81. Shibatani A. Néel temperature of the spin density wave in chromium and its alloys // J. Phys. Soc. Jpn. 1970. V. 29. P. 93–101.
82. Rice T. Band-structure effects in itinerant antiferromagnetism // Phys. Rev. B. 1970. V. 2. P. 3619.
83. Ruvalds J., Rieck C., Tewari S. et al. Nesting mechanism for d -symmetry superconductors // Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 3797.
84. Gabovich A., Voitenko A., Annett J., Ausloos M. Charge- and spin-density-wave superconductors // Supercond. Sci. Tech. 2001. V. 14. P. R1.
85. Terashima K., Sekiba Y., Bowen J.H. et al. Fermi surface nesting induced strong pairing in iron-based superconductors // Proc. Natl. Acad. Sci. 2009. V. 106. P. 7330–7333.
86. Chuang Y.-D., Gromko A., Dessau D. et al. Fermi surface nesting and nanoscale fluctuating charge/orbital ordering in colossal magnetoresistive oxides // Science. 2001. V. 292. P. 1509–1513.

87. Eremin I., Chubukov A.V. Magnetic degeneracy and hidden metallicity of the spin-density-wave state in ferropnictides // *Phys. Rev. B*. 2010. V. 81. P. 024511.
88. Chubukov A. Renormalization group analysis of competing orders and the pairing symmetry in Fe-based superconductors // *Phys. C*. 2009. V. 469. P. 640–650.
89. Graser S., Maier T., Hirschfeld P., Scalapino D. Near-degeneracy of several pairing channels in multiorbital models for the Fe pnictides // *New J. Phys.* 2009. V. 11. P. 025016.
90. Vavilov M., Chubukov A., Vorontsov A. Coexistence between superconducting and spin density wave states in iron-based superconductors: Ginzburg–Landau analysis // *Supercond. Sci. Tech.* 2010. V. 23. P. 054011.
91. Kondo T., Fernandes R.M., Khasanov R. *et al.* Unexpected Fermi-surface nesting in the pnictide parent compounds BaFe₂As₂ and CaFe₂As₂ revealed by angle-resolved photoemission spectroscopy // *Phys. Rev. B*. 2010. V. 81. P. 060507.
92. Brydon P., Schmiedt J., Timm C. Microscopically derived Ginzburg–Landau theory for magnetic order in the iron pnictides // *Phys. Rev. B*. 2011. V. 84. P. 214510.
93. Schmiedt J., Brydon P., Timm C. Doping dependence of antiferromagnetism in models of the pnictides // *Phys. Rev. B*. 2012. V. 85. P. 214425.
94. Изюмов Ю.А., Кацнельсон М.И., Скрябин Ю.Н. Магнетизм коллективизированных электронов. М. // Физматлит. 1994.
95. Куликов Н.И., Тугушев В.В. Волны спиновой плотности и зонный антиферромагнетизм в металлах // *УФН*. 1984. Т. 144. № 12. 643–680.
96. Fawcett E. Spin-density-wave antiferromagnetism in chromium // *Rev. Mod. Phys.* 1988. V. 60. P. 209.
97. Rakhmanov A.L., Rozhkov A.V., Sboychakov A.O., Nori F. Phase separation of antiferromagnetic ground states in systems with imperfect nesting // *Phys. Rev. B*. 2013. V. 87. P. 075128.
98. Sboychakov A.O., Rozhkov A.V., Kugel K.I. *et al.* Electronic phase separation in iron pnictides // *Phys. Rev. B*. 2013. V. 88. P. 195142.
99. Горбацевич А.А., Конаев Ю.В., Токатлы И.В. Зонная теория фазовой стратификации // *ЖЭТФ*. 1992. Т. 101. С. 971–994.
100. Park J.T., Inosov D.S., Niedermayer C. *et al.* Electronic phase separation in the slightly underdoped iron pnictide superconductor Ba_{1-x}K_xFe₂As₂ // *Phys. Rev. Lett.* 2009. V. 102. P. 117006.
101. Inosov D.S., Leineweber A., Yang X. *et al.* Suppression of the structural phase transition and lattice softening in slightly underdoped Ba_{1-x}K_xFe₂As₂ with electronic phase separation // *Phys. Rev. B*. 2009. V. 79. P. 224503.
102. Lang G., Grafe H.-J., Paar D. *et al.* Nanoscale electronic order in iron pnictides // *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 104. P. 097001.
103. Goko T., Aczel A. A., Baggio-Saitovitch E. *et al.* Superconducting state coexisting with a phase-separated static magnetic order in (Ba,K)Fe₂As₂, (Sr,Na)Fe₂As₂, and CaFe₂As₂ // *Phys. Rev. B*. 2009. V. 80. P. 024508.
104. Bernhard C., Wang C. N., Nuccio L. *et al.* Muon spin rotation study of magnetism and superconductivity in Ba(Fe_{1-x}Co_x)₂As₂ single crystals // *Phys. Rev. B*. 2012. V. 86. P. 184509.
105. Lu X., Tam D.W., Zhang C. *et al.* Short-range cluster spin glass near optimal superconductivity in BaFe_{2-x}Ni_xAs₂ // *Phys. Rev. B*. 2014. V. 90. P. 024509.
106. Civardi E., Moroni M., Babji M. *et al.* Superconductivity emerging from an electronic phase separation in the charge ordered phase of RbFe₂As₂ // *Phys. Rev. Lett.* 2016. V. 117. P. 217001.
107. Shen B., Zeng B., Chen G. *et al.* Intrinsic percolative superconductivity in K_xFe_{2-y}Se₂ single crystals // *Europhys. Lett.* 2011. V. 96. P. 37010.
108. Ricci A., Poccia N., Campi G. *et al.* Nanoscale phase separation in the iron chalcogenide superconductor K_{0.8}Fe_{1.6}Se₂ as seen via scanning nanofocused x-ray diffraction // *Phys. Rev. B*. 2011. V. 84. P. 060511.
109. Ricci A., Poccia N., Joseph B. *et al.* Direct observation of nanoscale interface phase in the superconducting chalcogenide K_xFe_{2-y}Se₂ with intrinsic phase separation // *Phys. Rev. B*. 2015. V. 91. P. 020503.
110. Dai P., Hu J., Dagotto E. Magnetism and its microscopic origin in iron-based high-temperature superconductors // *Nature Phys.* 2012. V. 8. P. 709–718.
111. Narayanan A., Kiswandhi A., Graf D. *et al.* Coexistence of spin density waves and superconductivity in (TMTSF)₂PF₆ // *Phys. Rev. Lett.* 2014. V. 112. P. 146402.
112. Campi G., Bianconi A., Poccia N. *et al.* Inhomogeneity of charge-density-wave order and quenched disorder in a high-Tc superconductor // *Nature*. 2015. V. 525. P. 359–362.
113. Rakhmanov A.L., Kugel K.I., Sboychakov A.O. Coexistence of spin density wave and metallic phases under pressure // *J. Supercond. Nov. Magn.* 2020. V. 33. P. 2405–2413.
114. Chen R.Y., Hu B.F., Dong T., Wang N.L. Revealing multiple charge-density-wave orders in TbTe₃ by optical conductivity and ultrafast pump-probe experiments // *Phys. Rev. B*. 2014. V. 89. P. 075114.
115. Zaanen J., Gunnarsson O. Charged magnetic domain lines and the magnetism of high-Tc oxides // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 40. P. 7391–7394.
116. Akzyanov R.S., Rozhkov A.V. Generation of localized magnetic moments in the charge-density-wave state // *Eur. Phys. J. B*. 2015. V. 88. P. 1–9.
117. Kokanova S.V., Maksimov P.A., Rozhkov A.V., Sboychakov A.O. Competition of spatially inhomogeneous phases in systems with nesting-driven spin-density wave state // *Phys. Rev. B*. 2021. V. 104. P. 075110.
118. Igoshev P., Timirgazin M., Gilmudinov V. *et al.* Spiral magnetism in the single-band Hubbard model: the Hartree–Fock and slave-boson approaches // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2015. V. 27. P. 446002.
119. Igoshev P., Timirgazin M., Gilmudinov V. *et al.* Correlation effects and non-collinear magnetism in the doped Hubbard model // *J. Magn. Magn. Mater.* 2015. V. 383. P. 2–7.
120. Calderon M.J., Leon G., Valenzuela B., Bascones E. Magnetic interactions in iron superconductors studied with a five-orbital model within the Hartree–Fock and Heisenberg approximations // *Phys. Rev. B*. 2012. V. 86. P. 104514.
121. Luo Q., Dagotto E. Magnetic phase diagram of a five-orbital Hubbard model in the real-space Hartree–Fock approximation varying the electronic density // *Phys. Rev. B*. 2014. V. 89. P. 045115.
122. Fulde P., Ferrell R.A. Superconductivity in a strong spin-exchange field // *Phys. Rev.* 1964. V. 135. P. A550.

123. Ларкин А.И., Овчинников Ю.Н. Неоднородное состояние сверхпроводников // ЖЭТФ. 1964. Т. 47. С. 1136–1146.
124. Sboychakov A.O., Rozhkov A.V., Rakhmanov A.L., Nori F. Antiferromagnetic states and phase separation in doped AA-stacked graphene bilayers // Phys. Rev. B. 2013. V. 88. P. 045409.
125. Sheehy D.E., Radzihovsky L. BEC–BCS crossover, phase transitions, and phase separation in polarized resonantly-paired superfluids // Ann. Phys. 2007. V. 322. P. 1790–1924.
126. Gor'kov L.P., Teitel'baum G.B. Spatial inhomogeneities in iron pnictide superconductors: The formation of charge stripes // Phys. Rev. B. 2010. V. 82. P. 020510.
127. Luo Q., Yao D.-X., Moreo A., Dagotto E. Charge stripes in the two-orbital Hubbard model for iron pnictides // Phys. Rev. B. 2011. V. 83. P. 174513.
128. Matsuda Y., Shimahara H. Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov state in heavy fermion superconductors // J. Phys. Soc. Jpn. 2007. V. 76. P. 051005.
129. Mora C., Combescot R. Transition to Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov phases in three dimensions: A quasiclassical investigation at low temperature with Fourier expansion // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. P. 214504.
130. Burkhardt H., Rainer D. Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov state in layered superconductors // Ann. der Physik. 1994. V. 506. P. 181–194.
131. Takada S. Superconductivity in a molecular field. II Stability of Fulde–Ferrel phase // Progr. Theor. Phys. 1970. V. 43. P. 27–38.
132. Kamihara Y., Watanabe T., Hirano M., Hosono H. Iron-based layered superconductor $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$ ($x = 0.05\text{--}0.12$) with $T_c = 26$ K // J. Am. Chem. Soc. 2008. V. 130. P. 3296–3297.
133. Rotter M., Tegel M., Johrendt D. Superconductivity at 38 K in the iron arsenide $(\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x)\text{Fe}_2\text{As}_2$ // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101. P. 107006.
134. Wang X., Liu Q., Lv Y. et al. The superconductivity at 18 K in LiFeAs system // Solid State Commun. 2008. V. 148. P. 538–540.
135. Stewart G.R. Superconductivity in iron compounds // Rev. Mod. Phys. 2011. V. 83. P. 1589–1652.
136. Dai P. Antiferromagnetic order and spin dynamics in iron-based superconductors // Rev. Mod. Phys. 2015. V. 87. P. 855–896.
137. Rullier-Albenque F., Colson D., Forget A. et al. Hole and electron contributions to the transport properties of $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ru}_x)_2\text{As}_2$ single crystals // Phys. Rev. B. 2010. V. 81. P. 224503.
138. Laplace Y., Bobroff J., Brouet V. et al. Nanoscale-textured superconductivity in Ru-substituted BaFe_2As_2 : A challenge to a universal phase diagram for the pnictides // Phys. Rev. B. 2012. V. 86. P. 020510.
139. Richard P., Sato T., Nakayama K. et al. Fe-based superconductors: an angle-resolved photoemission spectroscopy perspective // Rep. Progr. Phys. 2011. V. 74. P. 124512.
140. Kordyuk A. Iron-based superconductors: Magnetism, superconductivity, and electronic structure (Review Article) // Low Temp. Phys. 2012. V. 38. P. 888–899.
141. Nekrasov I.A., Pavlov N.S., Sadovskii M.V. Electronic structure of NaFeAs superconductor: LDA + DMFT Calculations compared with ARPES experiment // J. Supercond. Nov. Magn. 2016. V. 29. P. 1117–1122.
142. Graser S., Kemper A. F., Maier T.A. et al. Spin fluctuations and superconductivity in a three-dimensional tight-binding model for BaFe_2As_2 // Phys. Rev. B. 2010. V. 81. P. 214503.
143. Mazin I.I. Superconductivity gets an iron boost // Nature. 2010. V. 464. P. 183–186.
144. Fink J., Thirupathaiah S., Ovsyannikov R. et al. Electronic structure studies of BaFe_2As_2 by angle-resolved photoemission spectroscopy // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 155118.
145. Kugel K., Rakhmanov A., Sboychakov A. et al. A two-band model for the phase separation induced by the chemical mismatch pressure in different cuprate superconductors // Supercond. Sci. Tech. 2009. V. 22. P. 014007.
146. Lorenzana J., Castellani C., Di Castro C. Phase separation frustrated by the long-range Coulomb interaction. I. Theory // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 235127.
147. Lorenzana J., Castellani C., Di Castro C. Phase separation frustrated by the long-range Coulomb interaction. II. Applications // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. P. 235128.
148. Jamei R., Kivelson S., Spivak B. Universal aspects of Coulomb-frustrated phase separation // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94. P. 056805.
149. Laplace Y., Bobroff J., Rullier-Albenque F. et al. Atomic coexistence of superconductivity and incommensurate magnetic order in the pnictide $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$ // Phys. Rev. B. 2009. V. 80. P. 140501.
150. Bonville P., Rullier-Albenque F., Colson D., Forget A. Incommensurate spin density wave in Co-doped BaFe_2As_2 // Europhys. Lett. 2010. V. 89. P. 67008.
151. Pratt D.K., Kim M.G., Kreyssig A. et al. Incommensurate spin-density wave order in electron-doped BaFe_2As_2 superconductors // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 106. P. 257001.
152. Luo H., Zhang R., Laver M. et al. Coexistence and competition of the short-range incommensurate antiferromagnetic order with the superconducting state of $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 108. P. 247002.
153. Lee C. H., Kihou K., Kawano-Furukawa H. et al. Incommensurate spin fluctuations in hole-overdoped superconductor KFe_2As_2 // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 106. P. 067003.
154. Castellani J.-P., Rosenkranz S., Goremychkin E. A. et al. Effect of Fermi surface nesting on resonant spin excitations in $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107. P. 177003.
155. Birgeneau R.J., Stock C., Tranquada J.M., Yamada K. Magnetic neutron scattering in hole-doped cuprate superconductors // J. Phys. Soc. Jpn. 2006. V. 75. P. 111003.
156. Tranquada J.M. Neutron scattering studies of antiferromagnetic correlations in cuprates // Handbook of High-Temperature Superconductivity. Springer, 2007. P. 257–298.
157. Sboychakov A.O., Kugel K.I., Rakhmanov A.L. Phase separation in a two-band model for strongly correlated electrons // Phys. Rev. B. 2007. V. 76. P. 195113.
158. Mahan G.D. Many-particle physics. Springer, 2013.