

МОДЕЛИ СПИНОВЫХ СТРУКТУР В Sr_2RuO_4

А. А. Овчинников^{*a,b}, М. Я. Овчинникова^a

^a Институт химической физики Российской академии наук
117977, Москва, Россия

^b Институт физики комплексных систем им. М. Планка
01187, Дрезден, Германия

Поступила в редакцию 6 февраля 2002 г.

В рамках метода среднего поля проведен расчет зон, поверхностей Ферми и спиновых восприимчивостей трехзонной модели RuO_4 плоскости рутината Sr_2RuO_4 для состояний с различными спиновыми структурами. В частности, изучено спиральное состояние с «несоизмеримым» вектором $Q = 2\pi(1/3, 1/3)$, отвечающим нестингу зон при заселенности $n = 4$. Оно оказывается нижним по энергии среди прочих (пара-, ферро-, антиферромагнитных и периодических) решений. В спиральном состоянии помимо основных α -, β -, γ -листов поверхности Ферми выявлены и объяснены теневые границы Ферми вдоль линии $\Gamma(0, 0) - M(\pi, 0)$, наблюдавшиеся ранее в экспериментах ARPES. Это может изменить интерпретацию данных бездисперсионных пиков в фотоэмиссии, приписываемых ранее поверхностным состояниям. Спиновые восприимчивости спирального состояния обнаруживают пики в зависимости $\text{Im} \chi(q, \omega)$ при $q = Q$ в соответствии с наблюдаемым магнитным пиком в нейтронном рассеянии. Обсуждаются гипотеза о присутствии спиральных структур с $q = Q$ в нормальном состоянии Sr_2RuO_4 и способы ее проверки.

PACS: 71.10.Fd, 71.27.+a, 71.10.Hf

1. ВВЕДЕНИЕ

Однослойный квазидвумерный рутинат привлекает внимание как сверхпроводник ($T_c \sim 1$ К) с возможным триплетным типом спаривания [1–3]. Аргументами в пользу триплетной сверхпроводимости служат поведение найтовского сдвига [4, 5] и возможная роль в сверхпроводящем переходе ферромагнитных флуктуаций. Последние предполагаются по аналогии с ферромагнетизмом родительского кубического перовскита SrRuO_3 . Определение типа и механизма спаривания напрямую зависят от понимания электронной и магнитной структур нормального состояния. Строение зон и свойства магнитных флуктуаций Sr_2RuO_4 исследовались в [6–8]. Одна из особенностей рутинатов — зависимость их свойств от состава соединения. Так, замещенные аналоги $\text{Ca}_{2-x}\text{Sr}_x\text{RuO}_4$ характеризуются очень сложной магнитной фазовой диаграммой, управляемой структурными искажениями решетки и включающей фазы парамагнитного (PM) или ферромаг-

нитного (FM) металла или антиферромагнитного (AFM) диэлектрика [9–11].

В отличие от замещенных соединений, решетка исходного Sr_2RuO_4 остается неискаженной. В измерениях неупругого рассеяния нейтронов на нем были обнаружены несоизмеримые магнитные флуктуации с квазиимпульсом $Q \propto (0.3, 0.3, 1)$ (в единицах $(2\pi/a, 2\pi/a, 2\pi/c)$) [12]. В слабозамещенном соединении $\text{Sr}_2\text{Ru}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_4$ динамические флуктуации с тем же Q сменяются статическим несоизмеримым порядком с тем же Q [13]. Положение пиков магнитной восприимчивости $\text{Im} \chi(q, \omega)$ в Sr_2RuO_4 связывают со структурой валентных зон [6, 7]. А именно, для квазиодномерных зон d_{xz} и d_{yz} поверхность Ферми характеризуется нестингом с квазиимпульсом $Q = (0.3, 0.3, q_z)$, т. е. наличием параллельных участков поверхностей Ферми, совмещаемых при сдвиге $k \rightarrow k + Q$. В то же время большие величины однородной статической восприимчивости и теплоемкости [14, 15], а также большое отношение U/t одноцентрового отталкивания к ширинам зон подходящих моделей [7, 8] указывают на сильные электронные корреляции в этих соединениях.

*E-mail: aovchin@mpipks-dresden.mpg.de

Существуют различные подходы к описанию магнитных и электронных свойств коррелированных систем в условиях нестинга. В одном из них исходным служит нулевая магнитная восприимчивость Линдхарда $\chi_0(q, \omega)$. Нестинг при некотором $q = Q$ приводит к появлению максимума в зависимости $\chi''(q, \omega)$ при $\omega \rightarrow 0$ и $q \rightarrow Q$. Векторы нестинга нулевых электронных зон $Q = (\pi, \pi)$ в купратах или $Q = (2\pi/3, 2\pi/3)$ в Sr_2RuO_4 действительно отвечают наблюдаемым пикам низкочастотного поглощения $\chi''(q, \omega)$ в них. Однако вычисленные с помощью χ_0 абсолютные значения интегральной интенсивности на порядок отличаются от наблюдаемых в таких сильно коррелированных соединениях, как купраты и рутинаты. Противоречие устраняется перенормировкой восприимчивости типа $\chi(q, \omega) = \chi_0/[1 - J(q)\chi_0]$ или $\chi(q, \omega) = \chi_0/[1 - U\chi_0]$ обменным или одноцентровым взаимодействием в t - J -модели либо модели Хаббарда [16, 17]. Перенормировка позволяет описать большую плотность низкочастотных возбуждений и большую восприимчивость только при малости знаменателей в χ , т.е. в ситуации, близкой к неустойчивости коррелированной системы по отношению к возникновению спиновой структуры с данным q . Но тогда сама процедура перенормировки на основе нулевого спектра может стать несостоятельной.

Другой способ описания электронной структуры в условиях нестинга состоит в использовании метода среднего поля, в котором изначально заложена конкретная спиновая структура, устраняющая вызванную нестингом неустойчивость. Такой подход может выявить реальный механизм перенормировки зон сильнокоррелированной системы. В применении к купратам такой подход отвечает рассмотрению антиферромагнитных или спиральных спиновых структур в качестве нулевого приближения [18–20]. При этом вытекающий из однородных решений по методу среднего поля спиновый порядок рассматривается скорее как локальный. Наличие спинового момента $d_n = \langle S_n \rangle$, локализованного на узле n , снижает одноцентровую энергию. Определенное выстраивание локальных спинов в условиях нестинга, снимая вырождение, дает дополнительный выигрыш энергии.

Главные черты поверхности Ферми соединения Sr_2RuO_4 , полученные как из наблюдений магнитных квантовых осцилляций [21, 22], так и из фотоэмиссионных измерений (ARPES) [23–26], во многом воспроизводятся трехзонной моделью, предложенной в [6–8], и расчетами зонной структуры в LDA-приближении [27, 28]. Однако в данных ARPES кроме основных поверхностей Ферми прояв-

ляется и четко выраженная структура теневых границ Ферми, обязанных своим происхождением процессам переброса. В частности, загадкой остается наблюдаемый в экспериментах ARPES резкий бездисперсионный пик [26], отвечающий теневой границе Ферми вдоль линий $\Gamma(0, 0) - M(\pi, \pi)$. В [26] он приписывается поверхностным состояниям, возникающим в искаженной решетке поверхностного слоя. Теневые поверхности Ферми могут указывать на наличие периодических спиновых структур или искажений решетки.

Целью настоящей работы является изучение проявления спиновых структур, в частности с несоизмеримым порядком, в форме поверхности Ферми, в структуре теневых поверхностей Ферми и в магнитной восприимчивости трехзонной модели Sr_2RuO_4 . Расчеты проводятся в приближении среднего поля. В частности, ставится вопрос о возможном объеме происхождения бездисперсионного пика вдоль линий $\Gamma - M$ импульсного пространства. Обсуждается гипотеза о спиральном спиновом порядке с несоизмеримым импульсом $Q = 2\pi(1/3, 1/3)$. Мы оставляем здесь привычный, но неточный термин «несоизмеримый», хотя для данной структуры с периодом кратным периоду решетки более верным было бы название «дробный квазиимпульс». Такое сравнительное исследование может быть полезным для выявления тех магнитных структур, которые в динамическом или статическом режиме могут присутствовать в основном состоянии рутината Sr_2RuO_4 .

2. ТРЕХЗОННАЯ МОДЕЛЬ ПЛОСКОСТИ RuO_4

В приближенной ионной модели $\text{RuO}_4 = \text{Ru}^{4+}(d^4)(\text{O}^{2-})_4$ четыре электрона занимают три нижних d -орбитали d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} в поле t_{2g} -симметрии, создаваемом ионами кислорода [1, 2]. На основе этих орбит с участием p_π -орбит кислорода возникают три валентные зоны с суммарной заселенностью четыре электрона на узел решетки. В предложенных ранее моделях сильной связи [6–8] узельные состояния и соответствующие операторы рождения $c_{\nu\sigma n}^\dagger$ ($\nu = 1, 2, 3$) относятся к комбинациям Ванье d - p_π соответствующих зон α, β, γ с симметрией соответственно xz , yz , xy орбит d . Гамильтониан модели имеет вид [8]

$$H = \sum_{\nu, \sigma} \sum_k \epsilon_{\nu k} c_{\sigma\nu k}^\dagger c_{\sigma\nu k} + T_{12} +$$

$$+ \sum_{n,\nu} \left\{ U n_{\uparrow\nu n} n_{\downarrow\nu n} + (2U_1 - J) \sum_{\nu' \neq \nu} \frac{1}{4} n_{\nu n} n_{\nu' n} - J \sum_{\nu' \neq \nu} \mathbf{S}_{\nu n} \mathbf{S}_{\nu' n} \right\}. \quad (1)$$

Здесь $n_{\nu\sigma n}$, $n_{\nu n} = n_{\nu\uparrow n} + n_{\nu\downarrow n}$, $\mathbf{S}_{\nu n}$ — операторы заселенности и спина соответствующих орбит α, β, γ ($\nu = 1, 2, 3$). Без учета межзонного прыжкового взаимодействия энергии нулевых зон равны

$$\epsilon_{\nu k}^0 = -t_0^\nu - 2t_x^\nu \cos k_x - 2t_y^\nu \cos k_y + 4t_{xy}^\nu \cos k_x \cos k_y. \quad (2)$$

Для величин t_0^ν и интегралов перескока между соседними и следующими соседними центрами использовались значения (в эВ), найденные в [8]:

$$\{t_0, t_x, t_y, t_{xy}\} = \begin{cases} \{0.24, & 0.31(0.045), & 0.045(0.31), & 0.01\} \\ \{0.50, & 0.44, & 0.44, & 0.14\} \end{cases} \quad (3)$$

соответственно для зон $\alpha(\beta)$ и γ ($\nu = 1(2), 3$). Для параметров взаимодействия брались значения $\{U, U_1 = U - 2J, J\} = \{1.2 \text{ эВ}, 0.8 \text{ эВ}, 0.2 \text{ эВ}\}$. Эти параметры определяются внутриатомными кулоновскими и обменными интегралами, связанными соотношением, вытекающим из правил Рака [8]. Оператор межзонного взаимодействия $T_{\alpha\beta}$ в (1) (прыжки по диагонали со сменой типа орбиты) имеет вид

$$T_{\alpha\beta} = \sum_{k,\sigma} 4t_{\alpha\beta} \sin k_x \sin k_y (c_{\sigma 1k}^\dagger c_{\sigma 2k} + \text{H.c.}). \quad (4)$$

Для неискаженной решетки только такое взаимодействие разрешено симметрией (в искаженной решетке при чередующихся поворотах октаэдров, как в Ca_2RuO_4 , прыжки между соседями также вносят вклад в межзонное взаимодействие). Ожидается, что параметр $t_{\alpha\beta}$ мал, порядка 0.01 эВ.

Приведем схему вывода уравнений среднего поля для состояний с определенным порядком локальных спинов $\langle S_n \rangle$. В пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием «спиновая» система координат, определяющая ось квантования спинов, не связана с системой координат решетки с осью z вдоль c -оси кристалла. Однако для простоты изложения считаем эти системы координат совпадающими, имея возможность восстановить их различие в конечном результате. С такой оговоркой выберем следующую ориентацию средних спинов:

$$\langle S_n^\nu \rangle = d_\nu [\mathbf{e}_x \cos Qn + \mathbf{e}_y \sin Qn]. \quad (5)$$

Для рассматриваемых спиральных (SP), FM- и AFM-состояний вектор Q равен соответственно

$$Q = 2\pi \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3} \right) - \text{SP}, \quad Q = (0, 0) - \text{FM}, \quad (6)$$

$$Q = (\pi, \pi) - \text{AFM}.$$

При таком выборе осей квантования уравнения среднего поля имеют одинаковый вид для всех трех состояний, различаясь только вектором спиральности.

В приближении среднего поля волновая функция Φ_Q определяется заселением собственных электронных состояний $b_{\lambda k}^\dagger$ линейаризованного гамильтониана H_{lin} :

$$[H_{lin}, b_{\lambda k}^\dagger] = E_{\lambda k} b_{\lambda k}^\dagger; \quad (7)$$

$$b_{\lambda k}^\dagger = a_{i\nu k}^\dagger S_{i\nu\lambda}(k); \quad \lambda = 1, \dots, 6;$$

$$i = 1, 2, \quad \nu = 1, 2, 3.$$

Набор базисных операторов $a_{i\nu k}^\dagger$ определен как

$$a_{i\nu k}^\dagger = \{a_{1\nu k}^\dagger, a_{2\nu k}^\dagger\} = \{c_{\uparrow\nu k}^\dagger, c_{\downarrow\nu, k+Q}^\dagger\}. \quad (8)$$

Индекс $\nu = 1, 2, 3$ отвечает зонам α, β, γ ; $i = 1, 2$ проекциям спинов.

Средняя энергия по состоянию Φ_Q в расчете на один узел решетки равна

$$\bar{H}(\bar{T}, d_\nu, r_\nu) = \bar{T} + H_U(r_\nu, d_\nu),$$

$$H_U = \sum_\nu \left\{ U(r_\nu^2 - d_\nu^2) + \sum_{\nu' \neq \nu} [U_2 r_\nu r_{\nu'} - J d_\nu d_{\nu'}] \right\}. \quad (9)$$

Здесь $U_2 = 2U - 5J$. Энергия (9) является функцией одноэлектронных средних (средней плотности, локального спина и кинетической энергии на один узел), которые в базисе (8) имеют вид

$$r_\nu = \frac{1}{2N} \sum_{i=1,2} \sum_k \langle a_{i\nu k}^\dagger a_{i\nu k} \rangle,$$

$$d_\nu = \frac{1}{2N} \sum_{i=1,2} \sum_k \langle a_{i\nu k}^\dagger a_{3-i,\nu,k} \rangle, \quad (10)$$

$$\bar{T} = \frac{1}{N} \sum_k [\epsilon_{\nu k} \langle a_{1\nu k}^\dagger a_{1\nu k} \rangle + \epsilon_{\nu, k+Q} \langle a_{2\nu k}^\dagger a_{2\nu k} \rangle].$$

Линейаризованный гамильтониан среднего поля равен

$$\hat{H}_{lin} = \hat{T} + \frac{\partial \bar{H}}{\partial r_\nu} \hat{r}_\nu + \frac{\partial \bar{H}}{\partial d_\nu} \hat{d}_\nu = \sum_k \hat{h}_k, \quad (11)$$

$$\hat{h}_k = h_{i\nu, j\nu'} a_{i\nu k}^\dagger a_{j\nu' k}.$$

Здесь \hat{r}_ν , \hat{d}_ν , \hat{T} — операторы, отвечающие средним (10), а выражения для матриц $h_{i\nu, j\nu'}$ вытекают из

формул (10), (11). Собственные операторы $b_{\lambda k}^\dagger$ в (7) определяются диагонализацией $h(k)$:

$$h_{i\nu, j\nu'}(k)S_{j\nu'\lambda} = S_{i\nu\lambda}E_{\lambda}(k). \quad (12)$$

Величины (10), в свою очередь, находятся подстановкой в (10) выражений

$$\langle a_{i\nu k}^\dagger a_{j\nu' k} \rangle = \sum_{\lambda} S_{i\nu\lambda}(k)S_{j\nu'\lambda}^*(k)f(E_{\lambda k} - \mu). \quad (13)$$

Здесь f — фермиевская функция, $E_{\lambda k}$ — собственные энергии гамильтониана h_k . Химический потенциал μ находится из условия $2 \sum_{\nu} r_{\nu} = 4$. Заметим, что при $t_{\alpha\beta} = 0$, т. е. в отсутствие прыжковой связи между орбитами α и β , матрица $S_{i\nu\lambda}$ факторизуется, так что каждое одноэлектронное состояние $b_{\lambda k}^\dagger$, $\lambda = \tilde{\lambda} + 2(\nu - 1)$, $\tilde{\lambda} = 1, 2$, относится к определенной зоне ν . Таким образом, получаем самосогласованное решение среднего поля для каждого из перечисленных в (5), (6) типов спинового порядка.

Помимо состояний (5), (6) был проведен поиск состояний среднего поля с волнами зарядовой и спиновой плотностей, обладающих периодом, равным трем постоянным решетки как по x -, так и по y -направлению и симметрией C_{4v} (см. ниже рис. 8). Такие структуры, как и спиральное состояние с $Q = 2\pi(1/3, 1/3)$, снимают вырождение уровней, обязанное нестигуну при заселенности $n = 4/3$ для каждой зоны. Центры четырех сортов ($l = 1, \dots, 4$) характеризуются плотностями и величинами локальных спинов $r_{\nu l}, d_{\nu l}$ каждой из орбит ν (для зоны γ узлы второго и третьего сортов эквивалентны). Векторы локальных спинов предполагались коллинеарными $\langle \mathbf{S}_n^\nu \rangle = d_\nu(l)\mathbf{e}_z$ и поиск самосогласованного решения по методу среднего поля проводился для блочно-ферромагнитной (BFM) или блочно-антиферромагнитной (BAFM) структуры:

$$\langle S(n_x + 3m, n_y + 3m') \rangle = \zeta^{m+m'} \langle S(n_x, n_y) \rangle$$

соответственно с $\zeta = +1$ или $\zeta = -1$. Уравнения среднего поля для данных структур обсуждаются в Приложении. Самосогласованное решение удалось найти только для BAFM-структуры с $\zeta = -1$. Она содержит 18 узлов в элементарной ячейке и состоит из почти ферромагнитных блоков 3×3 с противоположной ориентацией спинов соседних блоков.

Исследование основных и теневых поверхностей Ферми каждой из зон включало расчет интенсивностей $A(k, \omega)|_{\omega=0}$, с которой эти поверхности Фер-

ми проявляются в фотоэмиссии. Необходимые спектральные функции равны

$$A(k\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma, m, n} |\langle m | c_{\sigma k} | n \rangle|^2 \times e^{-\beta E_n} \delta(\omega - E_n + E_m - \mu), \quad (14)$$

где Z — статистическая сумма, $|n\rangle, |m\rangle$ — состояния всей системы. В приближении среднего поля с учетом определения базиса (8) получаем

$$A(k\omega) = \sum_{\sigma} A_{\sigma}(k\omega), \quad (15)$$

$$A_{\uparrow}(k\omega) = \sum_{\nu, \lambda} |S_{1\nu\lambda}(k, \omega)|^2 \tilde{\delta}(E_{\lambda}(k) - \mu - \omega),$$

$$A_{\downarrow}(k\omega) = \sum_{\nu, \lambda} |S_{2\nu\lambda}(k - Q, \omega)|^2 \times \tilde{\delta}(E_{\lambda}(k - Q) - \mu - \omega). \quad (16)$$

Здесь $E_{\lambda}(k)$ — одноэлектронные энергии, $S_{i\nu\lambda}$ — матрица коэффициентов в выражении для собственных операторов (7) в базисе (8). Расчет $A(k, \omega)$ проводился с заменой δ -функции на размытую функцию одного из двух видов:

$$\delta(\epsilon) \rightarrow \tilde{\delta}(\epsilon) = \frac{1}{4\gamma} \text{ch}^{-2}(\epsilon/2\gamma),$$

$$\delta(\epsilon) \rightarrow \tilde{\delta}(\epsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{\epsilon^2 + \gamma^2}$$

с шириной $\Delta\omega \sim \gamma$.

Двумерный образ функции $A(k_x, k_y, \omega = 0)$ на плоскости k_x, k_y дает непосредственное представление о всех листах поверхности Ферми трех зон и интенсивностях соответствующих пиков в фотоэмиссии. Аналогичная двумерная карта

$$\tilde{A}(s, \omega) = A(k_x(s), k_y(s), \omega)$$

дает представление о дисперсии зон при изменении k вдоль параметрически заданного контура $\mathbf{k}(s) = \{k_x(s), k_y(s)\}$ на фазовой плоскости.

3. ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ И ДИСПЕРСИЯ ЗОН

В табл. 1 приведены значения средней энергии (на один узел), отношения плотностей и величины локальных спинов на орбитах α, β, γ для спирального состояния (5), (6), а также для BAFM-, FM-, AFM- и PM-состояний модели с параметрами (3) и

Таблица 1. Средние энергии, отношения заселенностей зон, величины локальных моментов для разных структур: спиральной, блочно-антиферромагнитной, ферромагнитной, антиферромагнитной, парамагнитной. Состояния перечислены в порядке увеличения их энергий

	SP	BAFM	FM	AFM	PM
\bar{H} , эВ	2.708	2.7104	2.7469	2.7552	2.7570
$2r_\alpha/r_\gamma$	1.935	1.4–3.2	2.15	2.137	2.04
$d_\alpha (= d_\beta)$	0.234	0.17–0.34	0.254	0.078	0
d_γ	0.160	0.11–0.20	0.181	0.093	0

$t_{\alpha\beta} = 0-0.03$. Состояния расположены в порядке возрастания их энергий.

Нижними по энергии оказываются спиральное и периодическое (BAFM) состояния. Оба имеют период, отвечающий нестингу зон при $n = 4$. Суммарные спиновые моменты $\langle S_i \rangle = \sum_\nu d_\nu \sim 0.6$ для трех нижних состояний близки.

При относительной близости энергий состояния имеют совершенно различную структуру поверхностей Ферми. Поверхности Ферми разных структур, т. е. образы функций $A(k_x, k_y, \omega = 0)$, представлены на рис. 1–3. Для PM-состояния имеет место известная [6–8] картина поверхности Ферми (рис. 1): квазиодномерные листы при $k_x(y) = \pm 2\pi/3$ отвечают α - и β -зонам и поверхность Ферми электронного типа — γ -зоне. При $t_{\alpha\beta} \neq 0$ поверхности Ферми для α - и β -зон расщепляются в точке их пересечения, в результате чего возникают две поверхности Ферми электронного типа и одна — дырочного типа. Их параметры (охватываемые ими площади) находятся в хорошем согласии с характеристиками, восстанавливаемыми из измерений магнитных квантовых осцилляций эффекта де Гааза–ван Альфена [21, 22]. Близкая картина поверхности Ферми получена в фотоэмиссионных измерениях (ARPES) для образцов при циклическом изменении температуры в пределах 10–200 К [26]. Считается, что такая процедура препятствует образованию поверхностных или объемных суперструктур RuO_4 -плоскостей. Отклонение параметров модели от стандартных (3) меняет поверхность Ферми. Например, увеличение $t_{\alpha\beta}$ сдвигает поверхности Ферми зон α , β в области их квазипересечения, а изменение разности $t_0^\gamma - t_0^{\alpha(\beta)}$ меняет относительное расположение листов $\alpha(\beta)$ и γ -зон (см. рис. 1).

На рис. 2 представлены поверхности Ферми для

FM- и AFM-состояний. В обоих случаях они сильно отличаются от поверхностей Ферми PM-состояния. Для FM-состояния (рис. 2) имеет место двойной набор поверхностей Ферми для зон со спинами $\sigma = \uparrow$ или \downarrow , зоны с минимальным и максимальным заселением различаются. Здесь поверхности Ферми относятся к ферромагнитным состояниям в неискаженной решетке, хотя FM-состояния, наблюдаемые в замещенном соединении $\text{Ca}_{2-x}\text{Sr}_x\text{RuO}_4$ [9, 10], отвечают решетке с чередующимися поворотами октаэдров RuO_4 . Для AFM-состояний поверхность Ферми γ -зоны имеет характерный вид карманов, знакомый по дырочным карманам в моделях купратов. Различие в том, что теневая часть кармана обращена теперь к центру $\Gamma(0,0)$ зоны Бриллюэна, а не к точке $Y(\pi, \pi)$, в силу того что заселение зоны $n_\gamma > 1$. Из-за магнитного удвоения элементарной ячейки в AFM-состоянии у зон α, β кроме основных листов возникают также теневые поверхности Ферми, являющиеся отражением основных поверхностей Ферми относительно линий $k_x \pm k_y = \pm\pi$. Заметим, что такие отраженные теневые поверхности Ферми действительно наблюдаются в ARPES-спектрах Sr_2RuO_4 [26]. Однако происхождение их может связываться не только с объемной спиновой AFM-структурой, но и с решеточной перестройкой поверхностных слоев с удвоением ячейки до размера $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ или с поверхностным антиферромагнетизмом. Например, в [26] искажение решетки и ферромагнетизм поверхностных слоев предполагались в связи с интерпретацией бездисперсионных зон (см. обсуждение ниже).

На рис. 3 представлены поверхности Ферми спирального состояния с $Q = (2\pi/3, 2\pi/3)$. Отметим три особенности поверхности Ферми спирального состояния: 1) появление теневых поверхностей Ферми вдоль линий $k_x = 0$ или $k_y = 0$ как раз в местах расположения наблюдаемых бездисперсионных пиков в фотоэмиссии; 2) различные образы спектральных функций (16), относящихся к разным поляризациям спина и вносящих вклады в суммарную интенсивность фотоэмиссии; 3) остаточные теневые поверхности Ферми γ -зоны в направлении, перпендикулярном вектору спиральности. Они сохраняют вид электронных карманов, аналогичных карманам AFM-состояния, но сдвинутых на $\pm Q/2$ для $A_{\uparrow(\downarrow)}(q, \omega = 0)$. В представлении функции $A_{\uparrow}(k_x, k_y, \omega = 0)$ речь идет о поляризации спина по оси z' , перпендикулярной плоскости вращения спина спирального состояния. Возможная ориентация z' относительно решеточной оси z остается неизвестной.

Рис. 1. Поверхности Ферми РМ-состояния для модели с параметрами (3) и $t_{\alpha\beta} = 0$ (слева). Справа — то же, но с измененными $t_{\alpha\beta} = 0.03$ эВ и $t_0^\gamma = 0.6$ эВ

Рис. 2. Поверхности Ферми для FM- и AFM-состояний с параметрами (3) и $t_{\alpha\beta} = 0.01$ эВ

Первые две особенности могут быть интерпретированы с помощью простого примера спирального состояния одномерной однозонной системы с заполнением $n = 2/3$ (см. рис. 4). В спиральном состоянии с $Q = 2\pi/3$ зонные энергии $E_\lambda(k)$, $\lambda = 1, 2$, асимметричны относительно $k = 0$ (при базисе $\{c_{\uparrow k}^\dagger, c_{\downarrow k+Q}^\dagger\}$). Спектральная функция $A_\uparrow(k, \omega)$ зафиксирует основ-

ную (с большим пиком в $\text{Im } A_\uparrow$) границу Ферми при $k \approx -2\pi/3$ и теньевую (с малым пиком в $\text{Im } A_\uparrow$) границу при $k \approx 0$. Прежняя граница при $k = 2\pi/3$ исчезает из-за расщепления зон. Для противоположной поляризации имеет место инвертированная картина: $A_\downarrow(k, \omega) = A_\uparrow(-k, \omega)$.

Теньевые поверхности Ферми вдоль линий $\Gamma - M$

Рис. 3. Поверхности Ферми системы в спиральном состоянии с $Q = 2\pi(1/3, 1/3)$. Справа — образ полной спектральной функции (15) трех зон, слева — спектральной функции $A_{\uparrow}(k, \omega = 0)$ для одной из поляризаций ($\sigma = \uparrow$)

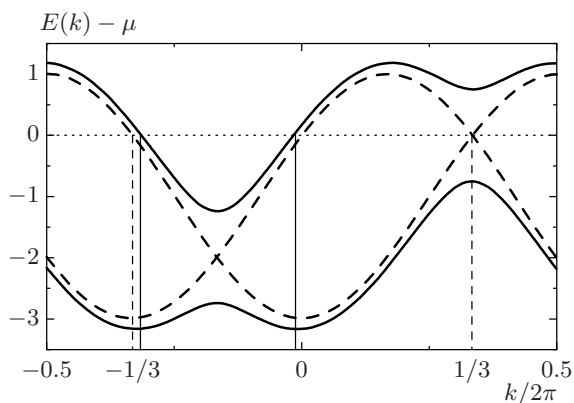


Рис. 4. Иллюстрация зонных энергий (сплошные кривые) для одномерной системы с заселением $n = 2/3$ в спиральном состоянии с $Q = 2\pi/3$. Вертикальные линии отмечают положения границ Ферми, отвечающих одной из поляризаций — образу функции $A_{\uparrow}(k, \omega = 0)$. Штриховые кривые — нулевые зоны $\epsilon_k - \mu$ и $\epsilon_{k+Q} - \mu$, штриховые вертикальные линии отвечают нулевым границам Ферми

заслуживают более подробного обсуждения (см. рис. 3). Их расположение совпадает с положением бездисперсионных пиков, наблюдаемых в экспериментах ARPES и обозначаемых в [26] как sharp surface (SS) поверхность Ферми. Ранее [26] происхождение этих пиков связывалось с поверхност-

ными электронными состояниями. Предполагалось, что эти состояния возникают при перестройке элементарной ячейки до размера $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ поверхностных слоев RuO_4 с поворотами кислородных октаэдров, характерными для ферромагнитных спиновых структур [9–11, 28]. Одним из аргументов в пользу такой интерпретации служило исчезновение SS-пиков и соответствующей поверхности Ферми при циклической температурной обработке материала при быстром изменении T в пределах 10–200 К. По предположению, такая обработка разрушает поверхностные структуры. Наш расчет поверхности Ферми спирального состояния с $Q = 2\pi(1/3, 1/3)$ позволяет выдвинуть гипотезу об объемном происхождении SS-пиков, наблюдаемых в экспериментах ARPES вдоль линий $\Gamma - M$. А именно, мы сопоставляем их с теньвыми границами Ферми, возникающими вдоль линий $k_x = 0$ или $k_y = 0$ в спиральном состоянии. Другими словами, эти теньвые границы Ферми можно интерпретировать как основные границы Ферми $k_x(y) = \pm 2\pi/3$ зон α, β , сдвинутые на вектор $Q = 2\pi(1/3, 1/3)$, равный периоду спиновой структуры в системе. Кроме того, отрезок линии $\Gamma - M$ вблизи точки M ($|k| > 2\pi/3$) касается границы электронного кармана γ -зоны, что усиливает интенсивность суммарной спектральной плотности на этом участке. Таким образом, речь идет о процессах переброса для периодических структур с периодом Q в импульсном пространстве. К этому

следует добавить предположение о том, что циклическое изменение температуры разрушает равновесную спиральную (или периодическую) структуру с периодом Q (как предположительно оно разрушало поверхностную структуру согласно прежней интерпретации [26]). Возможно, что этот процесс вносит столь большое количество дефектов в структуру, что уширяет и делает ненаблюдаемой данную теневую границу Ферми.

Одним из способов проверки гипотезы мог бы стать поиск отмеченной выше поляризационной асимметрии в интенсивностях фотоэмиссии. Применение спин-поляризационной фотоэмиссии, используемой для распознавания поверхности Ферми ферромагнитных состояний, может быть полезно и для тестирования спиральной структуры. Правда, без включения в рассмотрение спин-орбитального взаимодействия мы не можем заранее предсказать ориентацию «спиновой системы координат» спирального состояния, если таковое реализуется. Остается вопрос и о том, в какой степени спиновые структуры можно считать статическими. Необходима также более тщательная интерпретация и других теневых границ Ферми, наблюдаемых в фотоэмиссии Sr_2RuO_4 , не подвергнутого процедуре циклического изменения температуры. Возникает еще один интересный теоретический вопрос: может ли спиральность состояния отражаться в сдвигах фаз магнитных квантовых осцилляций и тем самым быть наблюдаемой в измерениях таких эффектов?

На рис. 5 представлена дисперсия зон для спирального состояния, полученная как образ суммарной спектральной плотности $A(s, \omega)$ всех трех зон (см. (15)) при изменении $k = (k_x(s), k_y(s))$ вдоль контуров $\Gamma(0, 0) - M(\zeta\pi, 0) - Y(\zeta\pi, \pi)$, $\zeta = 1, -1$. Для отрезков контура $Y - \Gamma$, параллельных и перпендикулярных вектору Q , различие основных (нетеневых) ветвей зонных энергий невелико. Вдоль всего контура основные ветви почти повторяют зонные энергии $(\epsilon_k - \mu)$ линеаризованного гамильтониана (11) при $d_\nu = 0$, показанные кривыми на рис. 5.

Свойства решений по методу среднего поля с периодической спиновой ВАФМ-структурой описаны в Приложении II. Заметим только, что для этой структуры поверхности Ферми существуют только для γ -зоны. Для зон α, β модуляция спинов и плотностей электронов приводит к появлению щели вдоль всех прежних границ Ферми нулевых зон α, β . Это противоречит наблюдениям магнитных квантовых осцилляций [21], выявляющим поверхность Ферми всех трех зон в системе. Сложная форма поверхности Ферми γ -зоны также не соответствует поверх-

ности Ферми, наблюдаемой в фотоэмиссии [23–26]. Для спирального состояния аналогичные щели открываются вдоль отдельных участков нулевых границ Ферми. Это проявляется в исчезновении тех или иных участков основных поверхностей Ферми в фотоэмиссии электронов с той или иной (определенной) поляризацией спина (см. рис. 3).

4. СПИНОВЫЕ ВОСПРИИМЧИВОСТИ В СПИРАЛЬНОМ СОСТОЯНИИ

Существует другой способ изучения спиновых структур — с помощью неупругого рассеяния нейтронов (INS). В нем измеряется динамическая спиновая восприимчивость системы. В недавних INS-измерениях на Sr_2RuO_4 [12] был обнаружен магнитный пик при несоизмеримом квазиимпульсе $Q \sim (0.3, 0.3, 1)$ (в единицах $(2\pi/a, 2\pi/a, 2\pi/a)$) при $T < 200$ К. Аналогичные пики получены и в восприимчивости, рассчитанной на основе невозмущенных зон и перенормированной согласно методу хаотических фаз (RPA) [16, 17]. Согласование абсолютной интегральной интенсивности магнитного поглощения с наблюдаемой величиной требует параметров, указывающих на близкую неустойчивость системы [12]. Поэтому расчет на основании нулевых зон может быть неадекватен. В связи с этим здесь выполнен RPA-расчет $\chi(q, \omega)$, использующий спиральные состояния в качестве нулевого приближения. Спиральные состояния с $Q = 2\pi(1/3, 1/3)$ представляют собой простейшую из возможных структур, снимающих обязанную нестингу неустойчивость системы. Наше рассмотрение аналогично расчетам $\chi(q, \omega)$ для антиферромагнитных (или спиральных) состояний [18–20], в которых хаббардовское расщепление зон учтено уже в нулевом приближении. В отличие от однозонных моделей в [18–20], модель Sr_2RuO_4 трехзонна и отклонение вектора спиральности $Q = 2\pi(1/3, 1/3)$ от $Q_{AFM} = (\pi, \pi)$ велико.

Нас интересуют флуктуации q -гармоник как полного спина S_q , так и спинов разных орбит:

$$S_{\nu, q} = \sum_n e^{iqn} S_{\nu n}, \quad S_q = \sum_\nu S_{\nu, q}. \quad (17)$$

Разные декартовы компоненты $\chi_{ij}(q, \omega)$ ($i, j = x, y, z$ или 1, 2, 3) тензора спиновой восприимчивости для полного спина или его орбитальных составляющих

Рис. 5. Дисперсии зон, полученные как образ суммарной спектральной функции $A(k, \omega)$ при изменении $k = (k_x(s), k_y(s))$ вдоль двух контуров $\Gamma(0, 0) - M(0, \zeta\pi) - Y(\pi, \zeta\pi)$ с $\zeta = 1$ (вверху) и $\zeta = -1$ (внизу). Тонкие кривые — нулевые зонные энергии $(\epsilon_k - \mu)$ при $d_\nu = 0$

определяются согласно [30, 31] следующим образом:

$$\chi_{ij}(q\omega) = -i \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\eta)t} \langle\langle S_{iq}(qt); S_{jq}^\dagger \rangle\rangle, \quad (18)$$

$$\chi_{ij}^{\nu\nu'}(q\omega) = -i \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\eta)t} \langle\langle S_{iq}^\nu(t); (S_{jq}^{\nu'})^\dagger \rangle\rangle, \quad (19)$$

где

$$\langle\langle A(t); B \rangle\rangle = \begin{cases} [A(t), B], & t > 0, \\ 0, & t < 0. \end{cases}$$

Орбитально-зависимые компоненты $\chi^{\nu\nu}(q, \omega \rightarrow 0)$ с разной поляризацией для каждой из орбит ($\nu = \alpha, \beta, \gamma$) в отдельности также доступны измерению. Например, в [32] они извлекаются из ЯМР-измерений на атомах кислорода ^{17}O , занимающих разные положения в октаэдрах RuO_4 . Полная восприимчивость (18) равна $\chi = \sum_{\nu, \nu'} \chi^{\nu\nu'}$. Для простоты расчет проводим для модели с нулевой межзонной связью $t_{\alpha\beta} = 0$ в (4). Используем простейший метод вывода $\chi(q\omega)$ из уравнений движения [31]. Метод эквивалентен суммированию лестничных диаграмм. Для применения его к спиральным состояниям выразим q -компоненты

спина и плотности через зонные операторы (7) спирального состояния среднего поля:

$$\begin{aligned} \{\rho_q^\nu, S_{1q}^\nu, S_{2q}^\nu, S_{3q}^\nu\}_l &= \sum_{i,j} (\sigma_l)_{ij} r_{ij}^\nu(q), \\ l = 0, 1, 2, 3, \quad r_{ij}^\nu(q) &= \frac{1}{N} \sum_k c_{iv, k+q}^\dagger c_{jvk}. \end{aligned} \quad (20)$$

Здесь σ_0, σ_l — единичная матрица и матрицы Паули; индексы i, j введены вместо проекций спина $\pm 1/2$. В базисе зонных операторов (7) имеем

$$r_{ij}^\nu(q) = \sum_{k,i,j} (\sigma_l)_{ij} S_{iv\lambda}^*(k+q) S_{j\nu\lambda'}(k) b_{\lambda, k+q}^\dagger b_{\lambda'k}. \quad (21)$$

Введем следующие обозначения для новых операторов, зависящих от пространственных гармоник:

$$\begin{aligned} X_{\nu l}(q) &= \\ &= \begin{cases} \frac{1}{2} \sum_i (\sigma_l)_{ii} r_{ii}^\nu(q), & l = 0, 3, \\ \frac{1}{2} [(\sigma_l)_{12} r_{12}^\nu(q-Q) + (\sigma_l)_{21} r_{21}^\nu(q+Q)], & l = 1, 2. \end{cases} \end{aligned} \quad (22)$$

Определенные таким образом операторы характеризуем общим параметром q вследствие их единообраз-

ного представления через зонные операторы $b_{\lambda k}^\dagger$ спирального состояния:

$$X_{\nu l}(q) = \frac{1}{2N} \sum_k \sum_{i,j,\lambda,\lambda'} (\sigma_l)_{ij} S_{i\nu\lambda}(k+q) \times S_{j\nu\lambda'}(k) \theta_{\lambda\lambda'}(k, q), \quad (23)$$

$$\theta_{\lambda\lambda'}(k, q) = b_{\lambda, k+q}^\dagger b_{\lambda' k}, \quad (24)$$

где $l = 0, 1, 2, 3$. Из представления гамильтониана (1) в базисе $\{b_{\lambda k}^\dagger\}$ следует, что в случае спирального состояния отличны от нуля только корреляторы операторов $X(q)$ с одинаковыми q :

$$\langle\langle X_{\nu l}(q\omega); X_{\nu' l'}^\dagger(q') \rangle\rangle = \delta_{qq'} G_{\nu l, \nu' l'}(q, \omega). \quad (25)$$

Вычисление корреляторов (25) в РРА-приближении проводим методом, изложенным в работе [31] (см. также [18–20]). Этот метод полностью эквивалентен суммированию лестничных диаграмм. Исходим из уравнений движения для оператора (24):

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle \theta_{\lambda\lambda'}(k, q, t); X_{\nu' l'}^\dagger(q) \rangle\rangle = \langle\langle [\theta_{\lambda\lambda'}(k, q, t), H]; X_{\nu' l'}^\dagger(q) \rangle\rangle + \delta(t) \langle\langle [\theta, X^\dagger] \rangle\rangle. \quad (26)$$

При вычислении коммутатора $[\theta, H]$ четырехфермионный вклад в нем линеаризуем. Интегрируя (26) по t с $e^{i\omega t}$ и по k с такими же весовыми функциями, как в (23), получим следующие алгебраические уравнения для $G_{\nu l, \nu' l'}(q, \omega)$:

$$\left\{ \delta_{ll'} \delta_{\nu\nu'} - Z_{ll'}^\nu [U \zeta_l \delta_{\nu\nu'} + K(l')(1 - \delta_{\nu\nu'})] \right\} \times G_{\nu' l', \nu'' l''} = \delta_{\nu\nu''} \frac{1}{2} Z_{ll''}^{\nu''}, \quad (27)$$

$$\zeta_l = \{-1, 1, 1, 1\}_l, \quad l, l', l'' = 0, 1, 2, 3,$$

$$K(l) = \{-U_2, J, J, J\}_l, \quad U_2 = 2U - 5J,$$

$$Z_{ll'}^\nu(q\omega) = -\frac{1}{2} \sum_{k,\lambda,\lambda'} \frac{f_{\lambda, k+q} - f_{\lambda' k}}{E_{\lambda, k+q} - E_{\lambda' k} + \omega + i\eta} \times F_{\lambda\lambda'}^l(k) \left(F_{\lambda\lambda'}^{l'}(k) \right)^*, \quad (28)$$

$$F_{\lambda\lambda'}^l(k) = \sum_{i,j} S_{i\nu\lambda}(k+q) (\sigma_l)_{ij} S_{j\nu\lambda'}(k). \quad (29)$$

Здесь E_λ, f_λ — зонные энергии и фермиевские функции спирального состояния. В Приложении II даны компактные выражения для функций (29). В отсутствие взаимодействий ($U = U_1 = J = 0$) функции $Z_{ll'}^\nu(q\omega)$ — не что иное, как нулевые восприимчивости Линдхарда $\chi_0^{\nu\nu'}$ для каждой из зон. Как

и положено для системы невзаимодействующих зон ($t_{\alpha\beta} = 0$), восприимчивость $\chi_0^{\nu\nu'}$ диагональна по индексу зон, в отличие от использованной в [17]. Существенно, что тестирующее восприимчивость взаимодействие с магнитным полем или с нейтронами представляет собой сумму вкладов от каждой зоны и не содержит недиагональных по ν членов. Свойство диагональности функций $Z_{ll'}^\nu = Z_{ll''}^{\nu\nu'}$ по ν сохраняется и при учете взаимодействий U, U_1, J в аппроксимации по методу среднего поля.

Вычисляя $Z_{ll'}^\nu(q'\omega)$ из (28), (29) и решая систему алгебраических уравнений (27), находим корреляторы $G_{\nu l, \nu' l'}^\nu(q'\omega)$ для каждого из трех значений аргумента $q' = q - Q, q, q + Q$. Вспоминая определения (20), (22), (25), получим для искомого спиновых восприимчивостей (18) выражения, аналогичные результатам [20] для однозонной модели:

$$\chi_{zz} = G_{3,3}(q\omega), \quad (30)$$

$$\chi_{xx} = \chi_{yy} = \frac{1}{4} \left\{ [G_{11} + G_{22} - i(G_{12} - G_{21})]_{|q+Q} + [G_{11} + G_{22} + i(G_{12} - G_{21})]_{|q-Q} \right\}. \quad (31)$$

Здесь в $G_{l,l'}|_{q'}$ $\equiv G_{\nu l, \nu' l'}(q'\omega)$ опущенные индексы ν подразумеваются. В Приложении II показано, что при $\omega \rightarrow 0, q' \rightarrow 0$ функции $G_{\nu l, \nu' l'}(q'\omega)$ имеют полюс, которому отвечают особенности в восприимчивости при $q = 0, \pm Q$. Заметим также, что даже при несмешивающихся зонах ($t_{\alpha\beta} = 0$) недиагональные по ν элементы $\chi^{\nu\nu'}$ отличны от нуля из-за обменного взаимодействия спинов в гамильтониане (1).

На рис. 6 представлены действительная и мнимая части полной восприимчивости $\bar{\chi}(q\omega) = (\chi_{xx} + \chi_{yy} + \chi_{zz})/3$ при изменении q вдоль контура $\Gamma - Y(\pi, \pi) - M(0, \pi) - \Gamma - Y_2(\pi, -\pi)$. Расчет проведен для модели с параметрами (3) при $t_{\alpha\beta} = 0$ и конечном параметре уширения $\eta = 0.02$ эВ в (28). Помимо ожидаемых пиков поглощения в $\chi''(q\omega)$ при $q = Q = 2\pi(1/3, 1/3)$, имеется почти симметричный пик при $q = 2\pi(1/3, -1/3)$. Оба эти пика соответствуют наблюдаемым несоизмеримым пикам в неупругом рассеянии нейтронов [12]. Рисунок 7 детализирует вклады в $\chi''(q, \omega)$ от разных зон и разных поляризаций. Заметим, что интегральная интенсивность $\tilde{\chi}(\omega) = \int \chi''(q\omega) d^2q / 4\pi^2$ имеет величину порядка 1 эВ⁻¹, что сопоставимо по порядку с аналогичной величиной около 2 эВ⁻¹ в купратах [33]. Попытка рассчитать и сопоставить с наблюдаемой в ЯМР на ¹⁷O статической однородной восприимчивостью ($\omega \rightarrow 0, q \rightarrow 0$) наталкивается на ту трудность, что порядок рассчитанных величин

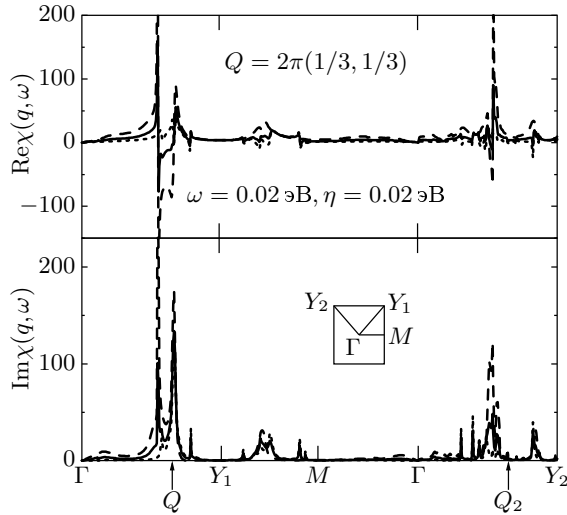


Рис. 6. Действительная и мнимая части полной спиновой восприимчивости $\chi(q, \omega)$, усредненной по поляризациям (сплошная кривая), и отдельных ее компонент — χ_{zz} (штриховые кривые) и χ_{xx} (пунктир) — при изменении q вдоль контура $\Gamma - Y_1 - M - \Gamma - Y_2$ (см. вставку). Частота и параметр уширения равны $\omega = \eta = 0.02$ эВ

$\chi'(q, \omega = 0)$ резко меняется при малых q, ω . В таких условиях влияние спиновых флуктуаций на характеристики ЯМР должно существенно зависеть от неоднородностей и процессов рассеяния.

5. ВЫВОДЫ

Расчет по методу среднего поля состояний трехзонной модели с разной магнитной структурой показал, что среди изученных структур (ферромагнитной, антиферромагнитной, спиральной, периодической) нижним по энергии является спиральное состояние с вектором $Q = 2\pi(1/3, 1/3)$, отвечающим нестингу зон α, β . Для AFM-структур в фотоэмиссионных спектрах должны проявляться характерные границы Ферми вокруг электронных карманов для γ -зоны и теневые границы Ферми зон α, β , являющиеся отражением основных поверхностей Ферми относительно линий $k_x \pm k_y = \pm\pi$. Такие теневые поверхности Ферми действительно наблюдались в Sr_2RuO_4 [26]. Однако их происхождение может быть связано как с объемным магнитным удвоением элементарной ячейки AFM-структуры, так и с магнитной или решеточной перестройкой ячейки поверхностных слоев.

Для спирального состояния с вектором $Q = 2\pi(1/3, 1/3)$ основные листы поверхности Ферми

для зон α, β, γ проявляются в фотоэмиссии с интенсивностью, зависящей от поляризации спина. Поиск такой поляризационной асимметрии спектров фотоэмиссии мог бы служить тестом на наличие спиральных спиновых структур в Sr_2RuO_4 . Обнаружены теневые границы Ферми зон α, β вдоль линий $\Gamma(0, 0) - M(\pi, 0)$ (или $(0, \pm\pi)$). Они совпадают со сдвинутыми на вектор Q основными границами Ферми. Положение наблюдаемых в фотоэмиссии (ARPES) резких SS-пигов вдоль линий $\Gamma - M$ совпадает с положением теневых поверхностей Ферми α, β и сегментом границы электронного кармана γ -зоны, формируемых спиральной спиновой структурой. Это дает основание предположить, что SS-особенности обязаны своим происхождением процессам переброса в спиральных (или периодических) структурах, а не поверхностным состояниям, как интерпретировалось ранее [26]. В этом случае исчезновение SS-черт, как и других теневых границ Ферми при циклическом изменении температуры [26] может быть приписано разрушению спиральных (вместо поверхностных) структур. Расчет по методу RPA спиновой восприимчивости, который учитывает спиральную спиновую структуру уже в нулевом приближении, подтверждает наличие пиков в $\chi''(q, \omega)$ при $Q = 2\pi(1/3, 1/3)$ в соответствии с магнитным пиком, наблюдавшимся в неупругом нейтронном рассеянии [9]. Приведенные аргументы указывают на возможное присутствие спиральных спиновых структур в Sr_2RuO_4 при низких температурах. Данная гипотеза ставит новые вопросы, например, о влиянии спиральной структуры на симметрию и свойства сверхпроводящего порядка в рутинате или на фазу магнитных квантовых осцилляций.

Работа поддержана РФФИ (проекты 00-03-32981, 00-15-97334). Авторы благодарны В. Я. Кривнову за стимулирующие обсуждения проблемы и П. Фюльде за возможность работы в институте физики комплексных систем им. М. Планка.

ПРИЛОЖЕНИЕ I

Уравнения среднего поля для периодической структуры

Характеризуем структуру базисными векторами $\mathbf{R}_{1(2)}$ ячейки Браве и соответствующими векторами обратной решетки $\mathbf{Q}_{1(2)}$

$$\mathbf{R}_{1(2)} = (3a, \pm 3a), \quad \mathbf{Q}_{1(2)} = (2\pi/6, \pm 2\pi/6). \quad (32)$$

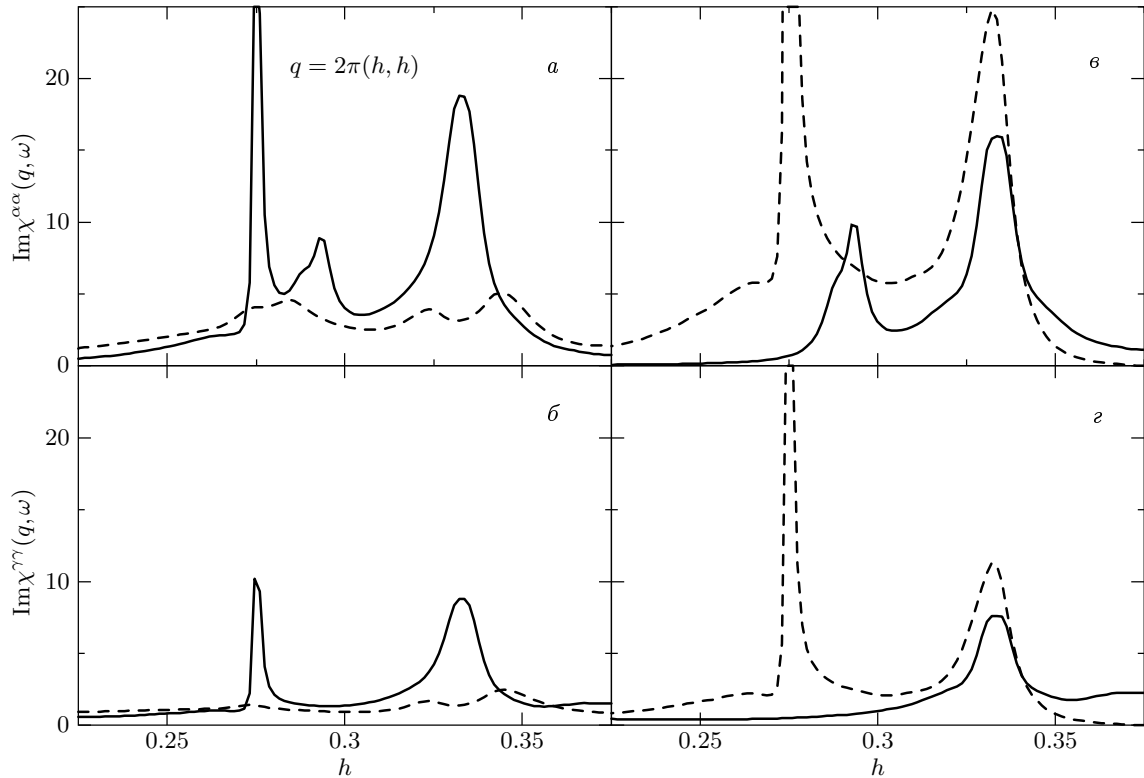


Рис. 7. Диагональные по ν вклады в среднюю восприимчивость от отдельных зон $\nu = \alpha$ и $\nu = \gamma$ для частот $\omega = 0.02$ эВ (сплошные кривые), 0.06 эВ (штриховая кривая) и $\eta = 0.02$ эВ для $Q = 2\pi(h, h)$ вблизи резонанса $q \sim Q$ (а, б). На графиках в, г — то же для $\chi_{zz}^{\nu\nu}$ (штриховая кривая) и $\chi_{xx}^{\nu\nu}$ (сплошная кривая) при $\omega = 0.02$ эВ

Параметрами порядка данной структуры служат электронные плотности и величины локальных спинов на узлах $n = i + (3L_x, 3L_y)$:

$$\frac{1}{2}\langle n_{n\nu} \rangle = r_{i\nu}, \quad \langle S_{zn\nu} \rangle = \zeta^{L_x+L_y} d_{i\nu}. \quad (33)$$

Они зависят от положения $i = (i_1, i_2)$ узла внутри блока решетки 3×3 . Знаки эквивалентных спинов соседних блоков одинаковы ($\zeta = +1$) или противоположны ($\zeta = -1$) соответственно для блочно-ферромагнитных и блочно-антиферромагнитных периодических структур. При симметрии C_{4v} имеем 4 сорта узлов ($l = 1, \dots, 4$) решетки согласно рис. 8.

Ранее при поиске парамагнитных решений квазиимпульс k в полном базисе $\{c_{\nu\sigma k}^\dagger\}$ менялся в зоне Бриллюэна G исходной решетки ($|k_{x(y)}| < \pi$). Зона Бриллюэна $\kappa \in G_{18}$ новой структуры заключена в границах $|\kappa_x \pm \kappa_y| \leq 2\pi/3$, а полный набор операторов удобно переименовать как

$$\{a_{\nu\sigma m\kappa}^\dagger\} = \{c_{\nu\sigma k(m)}^\dagger\}, \quad (34)$$

$$m = (m_1, m_2), \quad k(m) = \kappa + Q_1 m_1 + Q_2 m_2.$$

Здесь κ — квазиимпульс, приведенный к новой зоне Бриллюэна, а $m = (m_1, m_2)$ — пара целых чисел, которые входят в выражения для сдвига $[k(m) - \kappa]$ через векторы обратной решетки. Мы имеем 18 независимых пар целых чисел (m_1, m_2) . Их можно выбрать разными способами.

Средняя энергия состояния равна

$$\bar{H} = \sum_n \bar{H}_U(r_{n\nu}, d_{n\nu}) + \bar{T}. \quad (35)$$

Выражение для $\bar{H}_U(r_{n\nu}, d_{n\nu})$ через плотности и величины локальных спинов дается той же формулой (9), что и раньше. Различие только в том, что величины $r_{n\nu}, d_{n\nu}$ зависят теперь от положения узла в ячейке согласно (33).

Линеаризованный гамильтониан, полученный на основе (34), (35), имеет вид

$$H_{lin} = \sum_{\kappa} h_{\kappa},$$

$$h_{\kappa} = \sum_{\nu, \sigma, m, m'} [\epsilon_{\nu}(k(m)) \delta_{mm'} + V_{\nu\sigma}(m - m')] \times a_{\nu m\kappa}^\dagger a_{\sigma m'\kappa}, \quad (36)$$

Рис. 8. Слева — атомы четырех сортов, $l = 1, 2, 3, 4$, в блоке 3×3 периодической блочно-антиферромагнитной структуры. Локальные спины коллинеарны и имеют противоположные знаки для центров соседних блоков, $\zeta = -1$ в (33). Справа — структура поверхности Ферми, полученная как образ спектральной функции $A(k, \omega = 0)$ (см. текст)

$$V_{\nu\sigma}(m) = Ur_{\nu}(m) + \sum_{\nu' \neq \nu} \left\{ U_2 r_{\nu'}(m) + \frac{\sigma}{|\sigma|} J d_{\nu'}(m) \right\}. \quad (37)$$

Здесь $U_2 = 2U - 5J$, $k(m)$ определено выше в (34); вектор κ — приведенный квазиимпульс ($\kappa \in G_{18}$); $m = (m_1, m_2)$, $m' = (m'_1, m'_2)$; величины $r_{\nu}(\kappa, m)$, $d_{\nu}(\kappa, m)$ — фурье-гармоники плотностей и спинов:

$$r_{\nu}(m) = \frac{1}{N} \sum_n e^{i(Q_1 m_1 + Q_2 m_2)n} \left\langle \frac{1}{2} n_{n\nu} \right\rangle, \quad (38)$$

$$d_{\nu}(m) = \frac{1}{N} \sum_n e^{i(Q_1 m_1 + Q_2 m_2)n} \langle S_{zn\nu} \rangle.$$

Диагонализация h_{κ} определяет собственные энергии $E_{\kappa\lambda}$, $\lambda = 1, 2, \dots, 18$, и одноэлектронные собственные операторы

$$b_{\lambda\kappa}^{\dagger} = a_{\nu\sigma m\kappa}^{\dagger} S_{\nu\sigma m\lambda}(\kappa)$$

и, в свою очередь, дает возможность вычислить средние $r_{n\nu}$, $d_{n\nu}$ и их гармоники (38) через матрицу коэффициентов $S_{\nu\sigma m\lambda}(\kappa)$ и фермиевские функции $f(E_{\kappa\lambda} - \mu)$ аналогично тому, как это делалось выше для ферромагнитных, антиферромагнитных и спиральных структур. Визуализация границ Ферми для самосогласованного решения с такой структу-

Таблица 2. Величины заселенностей и локальных спинов для четырех сортов атомов в блоке 3×3 периодической блочно-антиферромагнитной структуры с элементарной ячейкой, состоящей из двух блоков

l	1	2(3)	3(2)	4
$r_{n,\alpha(\beta)}$	0.808	0.596	0.784	0.608
$r_{n,\gamma}$	0.499	0.650	0.650	0.725
$d_{n,\alpha(\beta)}$	0.170	0.338	0.198	0.331
$d_{n,\gamma}$	0.118	0.202	0.202	0.164

рой проводилась, как и раньше, с помощью образа спектральной функции при $\omega = 0$:

$$A(k, \omega = 0) = \sum_{\sigma\nu\kappa m} |S_{\nu\sigma m\lambda}(\kappa)|^2 \tilde{\delta}(E_{\lambda}(\kappa) - \mu). \quad (39)$$

Самосогласованное решение удалось найти только для ВАФМ-структуры ($\zeta = -1$) в (33). Соответствующие плотности и спины на узлах четырех сортов ($l = 1, \dots, 4$) в блоке 3×3 (см. рис. 8) приведены в табл. 2. Из всех рассмотренных нами состояний данная ВАФМ-структура — самая близкая к низшему спиральному состоянию (см. табл. 1).

На рис. 8 приведен также образ поверхности Ферми, отвечающий данной структуре. Примечательно,

что только γ -зона дает вклад в спектральную функцию $A(k, \omega = 0)$. Для зон α, β среднее поле с данной периодичностью ведет к появлению щели вдоль всех прежних границ Ферми нулевых зон α, β парамагнитного состояния.

ПРИЛОЖЕНИЕ II

Особенности $\chi(q\omega)$ при $\omega \rightarrow 0$

Покажем, что $\chi(q, \omega)$ имеет особенности при $\omega \rightarrow 0, q \rightarrow \pm Q$. Учитывая соотношение (31), нам необходимо доказать, что функции $G_{ij}(q, \omega), i, j = 1, 2$, имеют особенность при $\omega \rightarrow 0, q \rightarrow 0$, т. е. что детерминант алгебраической системы уравнений (27) обращается в нуль при $q = 0, \omega = 0$:

$$\|A\| = \left\| \delta_{l'l'} \delta_{\nu\nu'} - Z_{l'l'}^\nu(0, 0) [U \zeta_{l'} \delta_{\nu\nu'} + K(l')(1 - \delta_{\nu\nu'})] \right\|_{q=0, \omega=0} = 0. \quad (40)$$

Для этого найдем явные выражения для матрицы $Z_{l'l'}^\nu(q\omega)$ при $q = 0, \omega \rightarrow 0$. Предварительно заметим, что при $t_{\alpha\beta} = 0$ каждой паре одноэлектронных состояний $b_{\lambda k}^\dagger$ ($\lambda = 1, \dots, 6$) линеаризованного гамильтониана \hat{h}_k отвечает определенная зона ν , так что индекс λ можно представить в виде $\lambda = \tilde{\lambda} + 2(\nu - 1), \tilde{\lambda} = 1, 2, \nu = 1, 2, 3$. Соответственно матрица коэффициентов в (12) факторизуется на три независимых матрицы второго порядка $S_{i\nu, \tilde{\lambda}\nu}^\nu$. Точно так же факторизируются функции

$$F_{\lambda\lambda'}^l = \tilde{F}_{\tilde{\lambda}\tilde{\lambda}'}^{l\nu}, \quad \tilde{\lambda}, \tilde{\lambda}' = 1, 2, \quad (41)$$

где $\lambda = \tilde{\lambda} + 2(\nu - 1)$ и аналогично λ' . В итоге для матриц второго порядка $\tilde{F}_{\tilde{\lambda}\tilde{\lambda}'}^{l\nu}$ получаем выражения

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{\tilde{\lambda}\tilde{\lambda}'}^{0\nu} &= [\sigma_0 c_-^\nu - i\sigma_2 s_-^\nu]_{\tilde{\lambda}\tilde{\lambda}'}, \\ \tilde{F}_{\tilde{\lambda}\tilde{\lambda}'}^{1\nu} &= [-\sigma_1 c_+^\nu - \sigma_3 s_+^\nu]_{\tilde{\lambda}\tilde{\lambda}'}, \\ \tilde{F}_{\tilde{\lambda}\tilde{\lambda}'}^{2\nu} &= [-\sigma_2 c_-^\nu + i\sigma_0 s_-^\nu]_{\tilde{\lambda}\tilde{\lambda}'}, \\ \tilde{F}_{\tilde{\lambda}\tilde{\lambda}'}^{3\nu} &= [\sigma_1 s_+^\nu + \sigma_3 c_+^\nu]_{\tilde{\lambda}\tilde{\lambda}'}, \end{aligned} \quad (42)$$

$$c_\pm^\nu = \cos(\varphi_{k+q}^\nu \pm \varphi_k^\nu), \quad s_\pm^\nu = \sin(\varphi_{k+q}^\nu \pm \varphi_k^\nu).$$

Здесь σ_l — матрицы Паули, а величины φ_k^ν определяются уравнениями

$$\cos 2\varphi_k^\nu = -\frac{D_k^\nu}{g_k^\nu}, \quad \sin 2\varphi_k^\nu = -\frac{\delta\epsilon_k^\nu}{g_k^\nu}, \quad (43)$$

$$\begin{aligned} D_k^\nu &= \frac{1}{2} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial d_\nu}, \quad \delta\epsilon_k^\nu = \frac{1}{2} (\epsilon_k^\nu - \epsilon_{k+Q}^\nu), \\ g_k^\nu &= \sqrt{(D_k^\nu)^2 + (\delta\epsilon_k^\nu)^2}. \end{aligned} \quad (44)$$

Все величины в (42) зависят неявно от вектора Q спиральности основного состояния. При $q = 0$ имеем $s_- = 0, c_- = 1, s_+ = \sin 2\varphi_k, c_+ = \cos 2\varphi_k$. Согласно (28) величины $Z_{l'l'}^\nu(q = 0, \omega)$ при $q = 0$ определяются только вкладами с $\lambda \neq \lambda'$. Но для таких вкладов при $q = 0$ можно доказать, что

$$\sum_k F_{12}^{\nu l} (F_{12}^{\nu l'})^* \Phi(k) \sim \delta_{l'l'} \quad (45)$$

для любой функции $\Phi(k)$, обладающей симметрией $\Phi(k) = \Phi(-k - Q)$. Это следует из выражений (42), (43), из значений s_\pm, c_\pm при $q = 0$ и из четности (нечетности) функций $\cos 2\varphi_k$ ($\sin 2\varphi_k$) в (43) по отношению к операции $k \rightarrow -(q + Q)$. Нетрудно убедиться, что $\delta\epsilon_k = -\delta\epsilon_{-k-Q}$. В результате при $q = 0, \omega = 0$ имеем

$$\begin{aligned} Z_{l'l'}^\nu(0, 0) &= \delta_{l'l'} Z_{ll}(0, 0), \\ Z_{22}^\nu &= \frac{1}{2} \sum_k \frac{f_{1k}^\nu - f_{2k}^\nu}{g_k^\nu}, \end{aligned} \quad (46)$$

где f_{ik} — фермиевские функции для уровней E_{1k}, E_{2k} и $g_k = (E_{1k} - E_{2k})/2 > 0$ определено выражением (44).

Таким образом, детерминант (40) факторизуемой матрицы A 12-го порядка при $q = 0, \omega = 0$ содержит в качестве множителя детерминант матрицы третьего порядка, отвечающей индексам $l = l' = 2$ в (40). В результате имеем

$$\begin{aligned} \|A\|_{q=0, \omega=0} &\sim \\ &\sim \|\delta_{\nu\nu'} - Z_{22}^\nu(0, 0) [U \delta_{\nu\nu'} + J(1 - \delta_{\nu\nu'})]\|. \end{aligned} \quad (47)$$

Убедимся теперь, что детерминант в правой части (47) равен нулю. Для этого выпишем уравнения, которым удовлетворяют спиновые плотности d_ν самосогласованного решения по методу среднего поля со спиральной структурой. Учтем, что в отсутствие прямой межзонной связи ($t_{\alpha\beta} = 0$) матрица коэффициентов $S_{i\nu\lambda}$ в определении собственных операторов (7) факторизуется на три подматрицы и выражается через величины φ_k^ν , определенные в (43), (44). В результате уравнения для d_ν запишутся в виде

$$d_\nu = \sum_{\nu'} Z_{22}^\nu(0, 0) [U \delta_{\nu\nu'} + J(1 - \delta_{\nu\nu'})] d_{\nu'} \quad (48)$$

или

$$\{\delta_{\nu\nu'} - Z_{22}^\nu(0, 0) [U \delta_{\nu\nu'} + J(1 - \delta_{\nu\nu'})]\} d_{\nu'} = 0, \quad (49)$$

где $Z_{22}^\nu(0, 0)$ определяется формулой (46). Из того факта, что значения d_ν в решении по методу среднего поля отличны от нуля, следует равенство нулю соответствующего определителя в системе уравнений

(49), совпадающего с определителем в правой части (47). Значит, $\det||A||_{q=0, \omega=0} = 0$, и функция $G_{22}(q\omega)$ при $q = 0$, $\omega = 0$ имеет особенность. С учетом связи (31) восприимчивостей $\chi_{xx}(yy)(q\omega)$ с $G_{22}(q \pm Q, \omega)$ получаем доказательство того, что $\chi_{xx}(yy)(q\omega)$ имеет особенность при $q = \pm Q$, $\omega = 0$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Maeno, T. M. Rice, and M. Sigrist, *Physics today*, January 2001, 42.
2. Y. Maeno, H. Hashimoto, K. Yoshita et al., *Nature*, **372**, 532 (1994).
3. T. M. Rice and M. Sigrist, *J. Phys.: Condens. Matter* **7**, L643 (1995).
4. K. Ishida, H. Mukuda, Y. Kitaoka et al., *Nature* **396**, 658 (1998).
5. M. Mukuda, K. Ishida, Y. Kitaoka et al., *J. Phys. Soc. Jap.* **67**, 3945 (1998).
6. I. I. Mazin and D. J. Singh, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 733 (1997).
7. I. I. Mazin and D. J. Singh, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4324 (1999).
8. A. Liebsch and A. Lichtenstein, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1591 (2000).
9. M. Braden, G. Andre, S. Nakatsyji, and Y. Maeno, *Phys. Rev.* **58**, 847 (1998).
10. O. Friedt, M. Braden, G. Andre et al., *Phys. Rev.* **63**, 174432 (2001).
11. R. S. Perry, L. M. Galvin, S. A. Grigera et al., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2661 (2001).
12. Y. Sidis, M. Braden, P. Bourges et al., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3320 (1999).
13. M. Braden, O. Friedt, Y. Sidis, P. Bourges et al., E-print archives, cond-mat/0107579.
14. J. J. Neumeier, M. F. Hundley, M. G. Smith et al., *Phys. Rev. B* **50**, 17910 (1994).
15. S. Nishizaki, Y. Maeno, Z. Mao et al., *J. Phys. Soc. Jap.* **69**, 572 (2000).
16. I. Mazin and D. J. Singh, *Phys. Rev.* **82**, 4324 (1999).
17. I. Eremin, D. Manske, C. Joas, and K. M. Bennemann, E-print archives, cond-mat/0102074.
18. J. R. Schrieffer, X. G. Wen, and F. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **39**, 11663 (1989).
19. A. V. Chubukov and K. A. Mussaelian, *Phys. Rev. B* **51**, 12605 (1995).
20. А. А. Овчинников, М. Я. Овчинникова, *ЖЭТФ* **116**, 1058 (1999).
21. A. P. Mackenzie, S. R. Julian, A. J. Diver et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3786 (1996).
22. P. G. Grigoriev, M. V. Kartsovnik, W. Biberacher et al., E-print archives, cond-mat/0108352.
23. A. Puchkov, Z. X. Shen, T. Kimura, and Y. Tokura, *Phys. Rev. B* **58**, R13322 (1998).
24. D. H. Lu, M. Schmidt, T. R. Cummins et al., *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4845 (1996).
25. T. Yokoya, A. Chanani, T. Takahashi et al., *Phys. Rev. B* **54**, 1311 (1996).
26. A. Damascelli, D. H. Lu, K. M. Shen et al., *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5194 (2000).
27. P. K. de Boer and R. A. de Groot, *Phys. Rev. B* **59**, 9894 (1999).
28. T. Oguchi, *Phys. Rev. B* **51**, 1385 (1995).
29. R. Matzdorf, Z. Fang, Ismail et al., *Science* **289**, N5480, 746 (2000).
30. Ю. А. Изюмов, И. М. Кацнельсон, Ю. Н. Скрябин, *Магнетизм коллективизированных электронов*, Наука, Москва (1994).
31. Y. Izuyama, D.-J. Kim, and R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jap.* **18**, 1025 (1963).
32. T. Imai, A. W. Hunt, K. R. Thurber, and F. C. Chou, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3006 (1998).
33. P. Bourges, H. Casalta, A. S. Ivanov, and D. Petitgrand, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4906 (1997).