

Новый вид волн спиновой плотности в квазиодномерных антиферромагнитных металлах

Т. Г. Петрова, А. С. Рожавский

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины,
Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47
E-mail: rozhavsky@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 28 февраля 1997 г.

Рассмотрена модель квазиодномерного металла, обладающего антиферромагнитным порядком. Показано, что в основном состоянии происходит диэлектризация электронного спектра, сопровождающаяся появлением магнитной сверхструктуры — волны спиновой плотности (ВСП). Параметр порядка ВСП оказывается синглетным в отличие от триплетной ВСП, образующейся в парамагнитном металле. Получена зависимость диэлектрической щели в одноэлектронном спектре и формы магнитной спирали от параметра соизмеримости ВСП. Обнаружено, что перестройка системы при переходе в состояние ВСП происходит таким образом, что ее полный магнитный момент остается равным нулю.

Розглянуто модель квазіодновимірного металу з антиферромагнітним порядком. Показано, що в основному стані має місце діелектризація електронного спектра, яка супроводжується появою магнітної надструктури — хвилі спінової густини (ХСГ). Параметр порядку ХСГ виявляється синглетним на відміну від триплетної ХСГ, яка утворюється в парамагнітному металі. Одержано залежність діелектричної щілини в одноелектронному спектрі та форми магнітної спіралі від параметра співвимірності ХСГ. Виявлено, що перебудова системи при переході у стан ХСГ відбувається таким чином, що її повний магнітний момент продовжує дорівнювати нулю.

PACS: 75.20.En, 75.30.Fv

1. Введение

Хорошо известно, что квазиодномерные металлы при понижении температуры претерпевают фазовый переход второго рода в диэлектрическую фазу, характеризующую комплексным параметром порядка. Модуль параметра порядка — это щель в спектре одноэлектронных возбуждений, а флуктуации фазы определяют, в частности, отклик в низкочастотном диапазоне.

Неустойчивость металлического состояния квазиодномерных проводников имеет общий характер. Она обусловлена либо взаимодействием электронов проводимости с фононами с импульсами $\pm 2k_F$ (пайерлсовская неустойчивость), либо межэлектронным взаимодействием с процессами рассеяния с изменением импульса на $\pm 2k_F$ (образование волн спиновой плотности (ВСП)). В обоих случаях неустойчивость металлической фазы обусловлена так называемым эффектом наложения (nesting) плоских участков поверхности Ферми при трансляции на вектор $\pm 2k_F$. При этом компо-

ненты Фурье функции отклика с векторами $\pm 2k_F$ логарифмически расходятся, что указывает на спонтанную ломку симметрии и возникновение нового основного состояния. В случае пайерлсовской неустойчивости расходится компонента поляризованного оператора и диэлектрик возникает на фоне решеточной сверхструктуры с периодом π/k_F . При ВСП-неустойчивости расходится компонента РККИ-обмена и диэлектризация сопровождается образованием магнитной спирали с таким же периодом (см. обзоры [1,2]).

В последнее время заметно обострился интерес к изучению ВСП в различных материалах, в частности в квазиодномерных органических солях с переносом заряда, таких как $(\text{TMTSF})_2\text{X}$ ($\text{X} = \text{ClO}_4$, PF_6 и др.), $(\text{MDTTF})_2\text{X}$ и $(\text{DMET})_2\text{X}$ ($\text{X} = \text{Au}(\text{CN})_2$) [1,2], а также в ряде купратных ВТСП, где при определенных концентрациях допанта образуются одномерные ВСП-цепочки [3]. Квазиодномерные органические металлы интересны тем, что в ВСП-состоянии демонстрируют нелинейную коллективную проводимость, обусловленную то-

пологическими возбуждениями параметра порядка [2] и своей нетривиальной фазовой диаграммой в сильном магнитном поле [1,4,5]. Считается, что одномерные ВСП-цепочки в купратной матрице препятствуют сверхпроводящему переходу. Все сказанное делает ВСП чрезвычайно актуальным объектом теоретического изучения, и их исследование продвигается быстрыми темпами [6].

Традиционный подход к задаче о ВСП основан на анализе модели Хаббарда методом среднего поля [1,2,4,5]. Такая схема удовлетворительно описывает возникновение ВСП в парамагнитном металле. При этом подходе параметр порядка ВСП является триплетным и пропорционален средней компоненте Фурье электронной плотности с импульсами $\pm 2k_F$. Узелный спин магнитной спирали определяется разностью параметров порядка с противоположными спинами электронов. Такая модель не исчерпывает, однако, все возможные типы ВСП, так как не позволяет получить ответ на вопрос об устойчивости квазиодномерных металлов, уже обладающих магнитным порядком.

В работе [7] было показано, что квазиодномерный ферромагнитный металл с понижением температуры также переходит в диэлектрическую фазу с образованием спиральной магнитной структуры. При этом возникает новая симметрия параметра порядка ВСП, а именно: параметр порядка синглетный и пропорционален $\langle a_{k_F\uparrow}^+ a_{-k_F\downarrow} \rangle$, $a_{k\sigma}^+$ — оператор рождения электрона с импульсом k и спином σ .

В настоящей работе впервые исследована структура ВСП, образующейся в одномерном антиферромагнитном (АФМ) металле. Такая постановка задачи, кроме интереса с точки зрения теоретической физики, обусловлена результатами экспериментов [1,2], из которых можно заключить, что ряд органических квазиодномерных металлов обладает АФМ порядком выше точки перехода в диэлектрическую ВСП-фазу. Можно также предположить, что в соединениях, рассмотренных в [3], одномерные ВСП образуются в металлической АФМ матрице.

Родственный генезис волн зарядовой и спиновой плотности наталкивает на мысль использовать для описания ВСП в АФМ металле схему, идейно максимально близкую к применяемой в задаче Пайерлса, в которой прослеживалась бы явно нетривиальная роль процессов переброса, обычно маскируемая в модели Хаббарда. С этой целью мы используем модель Вонсовского [8], в которой явным образом вводится электрон-магнитное взаимодействие. Оказывается, что параметр порядка ВСП по структуре напоминает полученный ранее

для ферромагнитного металла [7], т.е. диэлектрическое состояние ВСП обусловлено процессами переброса электронов с переворотом спина и с испусканием (или поглощением) магнонов с импульсами $\pm 2k_F$. Преимущество используемого нами описания состоит также в том, что на его основе удастся сформулировать теоретико-полевую модель ВСП, позволяющую в дальнейшем изучать неоднородные, солитонные и поляронные состояния параметра порядка, играющие, возможно, принципиальную роль [6,9] в трактовке результатов эксперимента в [3].

В рамках предложенного подхода в настоящей работе исследуется основное состояние квазиодномерного АФМ металла. Показано, что в этом состоянии происходит диэлектризация одноэлектронного спектра, сопровождающаяся образованием магнитной сверхструктуры — ВСП. Найдена зависимость диэлектрической щели и формы магнитной спирали от параметров системы при различных соотношениях. Оказывается, что перестройка системы при переходе в состояние ВСП происходит таким образом, что ее полный магнитный момент остается равным нулю.

2. Континуальная модель квазиодномерного антиферромагнитного металла, лагранжианы волн спиновой плотности

В качестве исходного пункта для построения теории ВСП в квазиодномерном АФМ металле при низких температурах воспользуемся традиционным гамильтонианом модели Вонсовского [8]

$$H = -A \sum_{n, \sigma, \sigma'} (s\mathbf{S}_n)_{\sigma\sigma'} a_{n\sigma}^+ a_{n\sigma'} + \\ + B \sum_{n, \sigma} (a_{n\sigma}^+ a_{n+1, \sigma} + \text{э.с.}) - I \sum_n (\mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n+1}), \quad (1)$$

где $a_{n\sigma}^+$, $a_{n\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электрона с проекцией спина σ в n -м узле цепочки; s , \mathbf{S}_n — операторы электронного и атомного спинов соответственно; $I < 0$ — интеграл прямого обмена между соседними спинами цепочки; $B < 0$ — блоховский интеграл переноса; A — интеграл обменного взаимодействия между спинами электронов проводимости и магнитных атомов.

При $A = 0$ модель (1) описывает обычный одномерный металл с электронным законом дисперсии $\omega = -2|B| \cos ak$ (k — импульс электрона; a — межатомное расстояние) и не взаимодействующую с электронами цепочку магнитных атомов, основным состоянием которой мы будем считать неелевское. При включении взаимодействия меж-

ду электронной и магнитной подсистемами происходит их взаимная перестройка, которую удобно изучать в континуальной модели, усредняя микроскопический гамильтониан (1) по быстрым осцилляциям с периодом $(k_F n)^{-1}$ [7]. Такая процедура обоснована тем, что ниже некоторой температуры $T_{WSD} < T_N$ возникают характерные масштабы, много большие $a \sim k_F^{-1}$, на которых меняются компоненты параметра порядка. Поэтому при $T < T_{WSD}$ естественно получить описание системы (1) в терминах крупномасштабных полей.

Электронные операторы, следуя [10], представляются в виде

$$a_{n\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ W_{\sigma}(n) e^{ik_F n a} + V_{\sigma}(n) e^{-ik_F n a} \right\}, \quad (2)$$

где W, V — плавные функции координаты na . Электронный закон дисперсии линеаризуется вблизи $\pm k_F$, что соответствует замене конечных разностей $W(n+1) - W(n)$, возникающих во втором члене в (1) при подстановке выражений (2), производными $\partial W(n)/\partial(an)$. В дальнейшем считается, что цепочка атомов, вдоль которой движутся электроны, направлена по оси x и соответственно производится замена $an \rightarrow x$.

Важную роль при усреднении (1) по быстрым осцилляциям играет условие, всегда выполняющееся в металлах и для рассматриваемой нами системы принимающее вид

$$2ak_F = \pi/M_1, \quad (M_1 > 1). \quad (3)$$

Условие (3) несколько отличается от аналогичных соотношений, использованных в задаче Пайерлса и в задаче о ВСП в одномерном ферромагнитном металле [7,10], так как элементарная ячейка одномерного антиферромагнетика содержит два магнитных атома. Выражение (3) можно записать в виде

$$2k_F/P_B = 1/M_1. \quad (4)$$

Здесь $P_B = \pi/a$ — размер зоны Бриллюэна антиферромагнитной цепочки. Если M_1 — рациональное число, т.е. $M_1 = M/M_2$, где M и M_2 — целые числа ($M > M_2$), то (4) представляет собой так называемое условие соизмеримости фазы ВСП, по аналогии с пайерлсовской фазой [10]. Иррациональное M_1 отвечает несоизмеримому случаю, который мы рассматривать не будем. В соизмеримом же случае выделяются, как оказывается, три возможности: $M = 2$, $M = 3$ и $M > 3$, которым в континуальном пределе отвечают лагранжианы различной структуры.

Считая, что $S \gg 1$ (S — спин магнитного атома), представим операторы атомных спинов в форме Голдстейна–Примакова, причем введем две подрешетки c и d , отвечающие четным m и нечетным l узлам цепочки:

$$\begin{aligned} S_m^z &= S - c_m^+ c_m, & S_m^+ &= \sqrt{2S} c_m, & S_m^- &= \sqrt{2S} c_m^+, \\ S_l^z &= -S + d_l^+ d_l, & S_l^+ &= \sqrt{2S} d_l^+, & S_l^- &= \sqrt{2S} d_l. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $S^{\pm} = S^x \pm iS^y$, а c_m^+, c_m и d_l^+, d_l — магнетонные операторы в каждой из подрешеток. В основном состоянии спины в четных узлах направлены параллельно, а в нечетных — антипараллельно оси z .

Специфика одномерной задачи позволяет ограничиться рассмотрением магнетонов с импульсами $\pm 2k_F$, так как именно такие магнетоны приводят к логарифмической особенности в эффективном интеграле косвенного обмена [8], аналогичной коновской особенности в одномерной электрон-фононной системе. Этим и объясняется невозможность применения теории РККИ [11–13] для низкоразмерных магнитных металлов.

В соответствии с принципами теории самосоглазованного поля, вводятся квазисредние магнетонные операторы, являющиеся параметрами порядка ВСП:

$$\begin{aligned} \langle c_{2k_F} \rangle &= \sqrt{2/N} \Delta e^{-i\Phi}, & \langle c_{-2k_F} \rangle &= \sqrt{2/N} \rho e^{i\theta}, \\ \langle d_{2k_F} \rangle &= \sqrt{2/N} \Delta' e^{-i\Phi'}, & \langle d_{-2k_F} \rangle &= \sqrt{2/N} \rho' e^{i\theta'}, \end{aligned} \quad (6)$$

где N — число атомов в цепочке, а фурье-компоненты магнетонных операторов определяются формулами

$$\begin{aligned} c_q &= \sqrt{2/N} \sum_m e^{iqam} c_m, & d_q &= \sqrt{2/N} \sum_l e^{-iqal} d_l, \\ c_m &= \sqrt{2/N} \sum_q e^{-iqam} c_q, & d_l &= \sqrt{2/N} \sum_q e^{iqal} d_q, \end{aligned} \quad (7)$$

где q — импульс магнетона. Как следует из (1), выражения (6) и (7) приводят к аномальным средним от произведения электронных операторов $\langle a_{k\sigma}^+ a_{k \pm 2k_F, \sigma} \rangle$, т.е. к синглетному параметру порядка ВСП. Оставляя в (7) члены с $q = \pm 2k_F$, получаем в терминах параметров (6)

$$\begin{aligned} c_m &= \Delta \exp(-2ik_F am - i\Phi) + \rho \exp(2ik_F am + i\theta), \\ d_l &= \Delta' \exp(2ik_F al - i\Phi') + \rho' \exp(-2ik_F al + i\theta'), \end{aligned}$$

что при $m = 2g$ и $l = 2g + 1$ приводит к следующим выражениям для компонент узельного спина:

$$\begin{aligned}
S_{2g}^z &= S - \Delta^2 - \rho^2 - 2\Delta\rho \cos(8k_F a g + \varphi + \theta), \\
S_{2g}^x &= \sqrt{2S} [\Delta \cos(4k_F a g + \varphi) + \rho \cos(4k_F a g + \theta)], \\
S_{2g}^y &= -\sqrt{2S} [\Delta \sin(4k_F a g + \varphi) - \rho \sin(4k_F a g + \theta)], \\
S_{2g+1}^z &= -S + \Delta'^2 + \rho'^2 + 2\Delta'\rho' \cos[4ak_F(2g+1) - \varphi' - \theta'], \\
S_{2g+1}^x &= \sqrt{2S} \left\{ \Delta' \cos[2ak_F(2g+1) - \varphi'] + \rho' \cos[2ak_F(2g+1) - \theta'] \right\}, \\
S_{2g+1}^y &= -\sqrt{2S} \left\{ \Delta' \sin[2ak_F(2g+1) - \varphi'] - \rho' \sin[2ak_F(2g+1) - \theta'] \right\}.
\end{aligned} \tag{8}$$

В результате указанных преобразований гамильтониану (1) отвечают в континуальном пределе лагранжианы, имеющие следующий вид при различных соизмеримостях ($\hbar = 1$):

$$\begin{aligned}
L_{M=2} &= \bar{\Psi} \left\{ i\tau_x \partial_t + (v_F \partial_x - i\gamma)\tau_y + A\sqrt{S/2} [\Delta \exp(-i\tau_z \varphi) + \Delta' \exp(i\tau_z \varphi')] \right\} \Psi + \\
&+ \chi \left\{ i\tau_x \partial_t + (v_F \partial_x + i\gamma)\tau_y + A\sqrt{S/2} [\Delta \exp(i\tau_z \varphi) - \Delta' \exp(-i\tau_z \varphi')] \right\} \chi - h_G, \\
\gamma &= A(\Delta'^2 - \Delta^2), \quad h_G = 4|I|S(\Delta^2 + \Delta'^2);
\end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned}
L_{M>3} &= \bar{\Psi} \left\{ i\tau_x \partial_t + (v_F \partial_x - i\gamma)\tau_y + \frac{A}{2} \sqrt{S/2} [\Delta \exp(-i\tau_z \varphi) + \Delta' \exp(i\tau_z \varphi')] \right\} \Psi + \\
&+ \bar{\chi} \left\{ i\tau_x \partial_t + (v_F \partial_x + i\gamma)\tau_y + \frac{A}{2} \sqrt{S/2} [\rho \exp(-i\tau_z \theta) + \rho' \exp(i\tau_z \theta')] \right\} \chi - h_G, \\
\gamma &= \frac{A}{4} (\Delta'^2 + \rho'^2 - \Delta^2 - \rho^2),
\end{aligned} \tag{10}$$

$$h_G = |I|S \left\{ \Delta^2 + \rho^2 + \Delta'^2 + \rho'^2 + 2 \cos 2ak_F [\Delta\Delta' \cos(\varphi + \varphi') + \rho\rho' \cos(\theta + \theta')] \right\};$$

$$\begin{aligned}
L_{M=3}^\pm &= L_{M>3} + \frac{A}{4} \bar{\Psi} \left\{ \Delta\rho\tau_z \exp[i\tau_z(\varphi + \theta)] \pm \Delta'\rho'\tau_z \exp[-i\tau_z(\varphi' + \theta')] \right\} \chi - \\
&- \frac{A}{4} \chi \left\{ \Delta\rho\tau_z \exp[i\tau_z(\varphi + \theta)] \pm \Delta'\rho'\tau_z \exp[-i\tau_z(\varphi' + \theta')] \right\} \Psi.
\end{aligned} \tag{11}$$

Здесь L — плотность лагранжиана; h_G — плотность гамильтониана Гейзенберга; $v_F = 2a|B| \sin ak_F$; τ — матрицы Паули; Ψ и χ — спиноры, составленные из компонент операторов $a_{n\sigma}(\Psi \equiv \Psi^\dagger \tau_x, \bar{\chi} \equiv \chi^\dagger \tau_x)$:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} W_\uparrow \\ V_\downarrow \end{pmatrix}, \quad \chi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} W_\downarrow \\ V_\uparrow \end{pmatrix}. \tag{12}$$

При записи выражений (9) учтено следующее из (7) условие $c_{2k_F \pm \pi/a} = c_{2k_F}$, $d_{2k_F \pm \pi/a} = -d_{2k_F}$, которое для случая $k_F = \pi/4a$ ($M = 2$) даёт $c_{2k_F} = c_{-2k_F}$, $d_{2k_F} = -d_{-2k_F}$ или, согласно (6), $\Delta = \rho$, $\Delta' = -\rho'$, $\theta = -\theta' = -\varphi'$.

В формуле (11) верхний знак отвечает случаю $k_F = \pi/6a$, а нижний — случаю $k_F = \pi/3a$. Из (11) видно, что при $M = 3$ лагранжиан имеет более сложную (недиагональную по спинорам Ψ и χ) структуру, чем при других соизмеримостях. Этот случай представляет собой отдельную задачу и не рассматривается в настоящей работе, так как основные закономерности перехода в фазу ВСП достаточно хорошо прослеживаются на примерах $M = 2$ и $M > 3$. Лагранжианы (9) и (10),

соответствующие этим соизмеримостям, отвечают хорошо известной модели типа $U(1) \otimes U(1)$ киральной модели Гросса–Невье квантовой теории поля [14]. Исследование основного состояния ВСП в описываемых ими системах и будет проводиться в следующих разделах настоящей работы.

3. Электронный спектр и энергия основного состояния волн спиновой плотности

В основном состоянии величины Δ , Δ' , ρ , ρ' , φ , φ' , θ , θ' в (9) и (10) не зависят от координаты и уравнения движения $\partial L / \partial \bar{\Psi} = 0$ и $\partial L / \partial \bar{\chi} = 0$ принимают следующий вид:

при $M = 2$

$$\begin{aligned}
i\partial_t \Psi + \left\{ A \sqrt{S/2} [(\Delta \cos \varphi + \Delta' \cos \varphi')\tau_x + \right. \\
\left. + (\Delta' \sin \varphi' - \Delta \sin \varphi)\tau_y + i\tau_z v_F \partial_x + \gamma\tau_z \right\} \Psi = 0, \\
i\partial_t \chi + \left\{ A \sqrt{S/2} [(\Delta \cos \varphi - \Delta' \cos \varphi')\tau_x + (\Delta' \sin \varphi' + \right. \\
\left. + \Delta \sin \varphi)\tau_y + i\tau_z v_F \partial_x - \gamma\tau_z \right\} \chi = 0;
\end{aligned} \tag{13}$$

при $M > 3$

$$\begin{aligned}
 & i\partial_t \Psi + \left\{ \frac{A}{2} \sqrt{S/2} [(\Delta \cos \varphi + \Delta' \cos \varphi') \tau_x + \right. \\
 & + (\Delta' \sin \varphi' - \Delta \sin \varphi) \tau_y] + i\tau_z v_F \partial_x + \gamma \tau_z \left. \right\} \Psi = 0, \\
 & i\partial_t \chi + \left\{ \frac{A}{2} \sqrt{S/2} [\rho \cos \theta + \rho' \cos \theta'] \tau_x + \right. \\
 & + (\rho' \sin \theta' - \rho \sin \theta) \tau_y] + i\tau_z v_F \partial_x - \gamma \tau_z \left. \right\} \chi = 0.
 \end{aligned} \quad (14)$$

Представляя фурье-преобразование для электронных операторов в виде

$$\begin{aligned}
 a_{n\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikan} a_{k\sigma} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\sum_{k > 0} e^{-i(k-k_F)an} e^{-ik_F an} a_{k\sigma}^+ + \right. \\
 & \left. + \sum_{k < 0} e^{-i(k+k_F)an} e^{ik_F an} a_{k\sigma} \right]
 \end{aligned} \quad (15)$$

и сравнивая (15) с (2), получаем

$$W_{\sigma}(n) = \sqrt{2/N} \sum_{k < 0} e^{-iQan} a_{k\sigma}, \quad (16)$$

$$V_{\sigma}(n) = \sqrt{2/N} \sum_{k > 0} e^{-iQan} a_{k\sigma},$$

где $Q = k + k_F$ при $k < 0$ и $Q = k - k_F$ при $k > 0$. Из уравнений (13) и (14), записанных в компонентах (16), находятся четыре нижние ветви электронного спектра для стационарной задачи:

$$\begin{aligned}
 \omega_{k > 0, \downarrow} &= \left\{ \begin{aligned} & -\sqrt{(v_F Q + \gamma)^2 + \beta_1}, \\ \omega_{k < 0, \uparrow} &= \end{aligned} \right. \\
 \omega_{k > 0, \uparrow} &= \left\{ \begin{aligned} & -\sqrt{(v_F Q - \gamma)^2 + \beta_2}. \\ \omega_{k < 0, \downarrow} &= \end{aligned} \right.
 \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь для $M = 2$

$$\begin{aligned}
 & (\kappa = \varphi + \varphi', \quad \kappa' = \theta + \theta') \\
 & \beta_{1,2} = \frac{A^2 S}{2} (\Delta^2 + \Delta'^2 \pm 2\Delta\Delta' \cos \kappa)
 \end{aligned} \quad (18)$$

$$(\kappa = \varphi + \varphi', \quad \kappa' = \theta + \theta')$$

и для $M > 3$

$$\begin{aligned}
 \beta_1 &= \frac{A^2 S}{8} (\Delta^2 + \Delta'^2 + 2\Delta\Delta' \cos \kappa), \\
 \beta_2 &= \frac{A^2 S}{8} (\rho^2 + \rho'^2 + 2\rho\rho' \cos \kappa').
 \end{aligned} \quad (19)$$

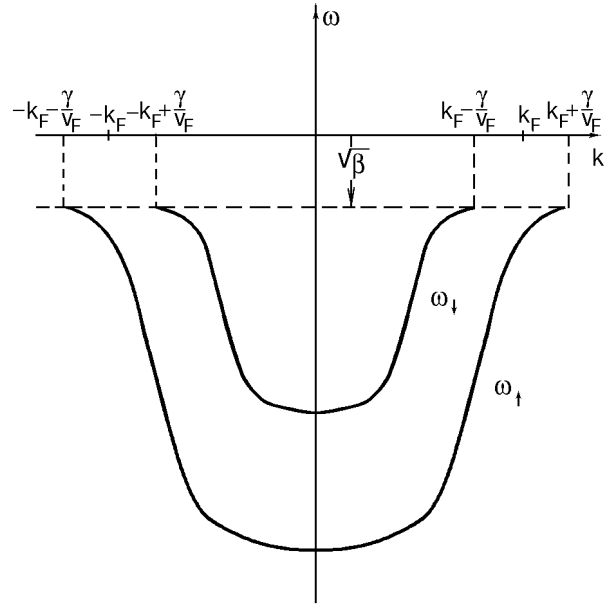


Рис. 1. Электронный спектр системы (1) в состоянии ВСП при $\gamma > 0$.

Так как при $k = 0$ должно выполняться условие сшивки ветвей $\omega_{k > 0, \sigma} = \omega_{k < 0, \sigma}$, то $\beta_1 = \beta_2 \equiv \beta$ и в результате в спектре (17) имеется, естественно, только одна щель $\Delta_0 = \sqrt{\beta}$, как изображено схематически на рис. 1.

Полная энергия электронной подсистемы находится интегрированием выражений (17) по спектру и имеет вид

$$\begin{aligned}
 W &= -\frac{Na}{2\pi v_F} \left\{ (\epsilon_F + \gamma) \sqrt{(\epsilon_F + \gamma)^2 + \beta} + \right. \\
 & \left. + (\epsilon_F - \gamma) \sqrt{(\epsilon_F - \gamma)^2 + \beta} + \beta \ln \alpha \right\}, \quad (20) \\
 \alpha &= \beta^{-1} \left[\sqrt{(\epsilon_F + \gamma)^2 + \beta} + \epsilon_F + \gamma \right] \times \\
 & \times \left[\sqrt{(\epsilon_F - \gamma)^2 + \beta} + \epsilon_F - \gamma \right],
 \end{aligned}$$

где $\epsilon_F = v_F k_F$ — фермиевская энергия электронов. Проведя в (20) разложение по малым параметрам $\Delta^2/S \ll 1$ и $AS/\epsilon_F \ll 1$, получим в наименьшем приближении следующее выражение для полной энергии системы (1) ($\beta_1 = \beta_2 = \beta$):

$$\begin{aligned}
 E &= W + N h_G = \\
 &= -\frac{Na}{\pi v_F} \left[\epsilon_F^2 + \frac{\beta}{2} \left(1 + \ln \frac{4\epsilon_F^2}{\beta} \right) - \frac{\pi v_F}{a} h_G \right].
 \end{aligned} \quad (21)$$

В случае двукратной соизмеримости ($M = 2$) условие сшивки для выражений (18) есть

$$\Delta\Delta' \cos \kappa = 0, \quad (22)$$

и энергия (21) становится функцией только параметров Δ и Δ' . При этом необходимые условия

минимума энергии $\partial E/\partial \Delta = 0$ и $\partial E/\partial \Delta' = 0$ приводят к уравнениям

$$\Delta \left(\ln \frac{4\varepsilon_F^2}{\beta} - 2\lambda \right) = 0, \quad \Delta' \left(\ln \frac{4\varepsilon_F^2}{\beta} - 2\lambda \right) = 0, \quad (23)$$

где

$$\lambda = \frac{8\pi v_F |I|}{A^2 a}. \quad (24)$$

Во всех трех случаях, следующих из условия сшивки (22) ($\Delta = 0$, $\Delta' = 0$, $\cos \kappa = 0$), решение уравнений (23) дает одно и то же значение $\beta = 4\varepsilon_F^2 e^{-2\lambda}$. Следовательно, энергия (21) тоже одинакова и равна

$$E = -\frac{Na}{\pi v_F} \varepsilon_F^2 (1 + 2e^{-2\lambda}). \quad (25)$$

Спиновые конфигурации (8), отвечающие энергии (25), различны во всех указанных выше случаях. Оказывается, что это вырождение снимается при учете в (1) членов $\sim \Delta^4/S^2$. При этом возникает следующая добавка к лагранжиану (9):

$$\delta L = -A\sqrt{2/S} \left\{ \bar{\Psi} \left(\Delta^3 e^{-i\tau_z \varphi} + \Delta'^3 e^{i\tau_z \varphi'} \right) \Psi + \bar{\chi} \left(\Delta^3 e^{i\tau_z \varphi} - \Delta'^3 e^{-i\tau_z \varphi'} \right) \chi \right\} - \delta h_G, \quad (26)$$

$$\delta h_G = -16|I|\Delta^2 \Delta'^2.$$

Учет добавки (26) приводит в результате к электронному спектру вида (17), но к другим величинам β_1 и β_2 :

$$\beta_{1,2} = \frac{A^2 S}{2} (\Delta^2 + \Delta'^2 \pm 2\Delta\Delta' \cos \kappa) - 2A^2 [\Delta^4 + \Delta'^4 \pm \Delta\Delta'(\Delta^2 + \Delta'^2) \cos \kappa]. \quad (27)$$

Как следует из (27), условие сшивки (22) остается прежним и дает

$$\beta = \beta_0 + \beta', \quad (28)$$

$$\beta_0 = \frac{A^2 S}{2} (\Delta^2 + \Delta'^2), \quad \beta' = -2A^2(\Delta^4 + \Delta'^4).$$

Полная энергия системы с точностью до членов $\sim \Delta^4/S^2$ равна

$$E = -\frac{Na}{\pi v_F} \left[\varepsilon_F^2 + \gamma^2 + \frac{\beta_0}{2} + \frac{\beta_0 + \beta'}{2} \ln \frac{4\varepsilon_F^2}{\beta_0} - \frac{\pi v_F}{a} (h_G + \delta h_G) \right]. \quad (29)$$

Необходимые условия минимума энергии (29) с учетом (9), (26) и (28) приводят к уравнениям

$$\Delta \left[(S - 8\Delta^2) \ln \frac{8\varepsilon_F^2}{A^2 S (\Delta^2 + \Delta'^2)} + 4 \frac{3\Delta^4 - \Delta'^4}{\Delta^2 + \Delta'^2} - 2\lambda(S - 4\Delta'^2) \right] = 0, \quad (30)$$

$$\Delta' \left[(S - 8\Delta'^2) \ln \frac{8\varepsilon_F^2}{A^2 S (\Delta^2 + \Delta'^2)} + 4 \frac{3\Delta'^4 - \Delta^4}{\Delta^2 + \Delta'^2} - 2\lambda(S - 4\Delta^2) \right] = 0.$$

При $\Delta' = 0$ уравнения (30) переходят в

$$\ln \frac{8\varepsilon_F^2}{A^2 S \Delta^2} = 2\lambda + \frac{4\Delta^2}{S} (4\lambda - 3). \quad (31)$$

Из (31) следует решение

$$\Delta^2 = \frac{8\varepsilon_F^2}{A^2 S} e^{-2\lambda} \left[1 - \left(\frac{8\varepsilon_F}{AS} \right)^2 \left(2\lambda - \frac{3}{2} \right) e^{-2\lambda} \right]. \quad (32)$$

Используя формулы (31) и (32), представим энергию (29) при $\Delta' = 0$ как

$$E_{\Delta'=0} = -\frac{Na}{\pi v_F} \varepsilon_F^2 \left[1 + 2e^{-2\lambda} - (2\lambda - 1) \left(\frac{8\varepsilon_F}{AS} \right)^2 e^{-4\lambda} \right]. \quad (33)$$

В случае $\Delta=0$ нетрудно получить аналогичным образом энергию $E_{\Delta=0}$, которая полностью совпадает с $E_{\Delta'=0}$.

При $\cos \kappa = 0$ ($\Delta, \Delta' \neq 0$) уравнения (30) совместны только, если $\Delta^2 = \Delta'^2$, т.е. $\gamma = 0$ (см. (9)). Это приводит к соотношениям

$$\ln \frac{4\varepsilon_F^2}{A^2 S \Delta^2} = 2\lambda + 4 \frac{\Delta^2}{S} (2\lambda - 1), \quad (34)$$

$$\Delta^2 = \frac{4\varepsilon_F^2}{A^2 S} e^{-2\lambda} \left[1 - \left(\frac{4\varepsilon_F}{AS} \right)^2 (2\lambda - 1) e^{-2\lambda} \right].$$

С использованием (34) и (28) энергия (29) при $\Delta, \Delta' \neq 0$ принимает вид

$$E_{\Delta, \Delta' \neq 0} = -\frac{Na}{\pi v_F} \varepsilon_F^2 \left[1 + 2e^{-2\lambda} - \frac{\lambda}{2} \left(\frac{8\varepsilon_F}{AS} \right)^2 e^{-4\lambda} \right]. \quad (35)$$

Сравнивая выражения (33) и (35), получаем, что $E_{\Delta=0} = E_{\Delta'=0} > E_{\Delta, \Delta' \neq 0}$, так как $\lambda > 1$. Следовательно, основному состоянию системы (1) при $M = 2$ отвечает ВСП с энергией (35) и с величиной $\Delta^2 = \Delta'^2$, определяющейся формулой (34). При этом щель в электронном спектре равна

$$\Delta_0 = \sqrt{\beta} = 2\varepsilon_F e^{-\lambda} \left[1 - \lambda \left(\frac{4\varepsilon_F}{AS} \right)^2 e^{-2\lambda} \right]. \quad (36)$$

При других соизмеримостях для получения основного состояния системы (1) оказывается достаточным рассмотреть энергию с точностью до членов $\sim \Delta^2/S$. Для облегчения задачи заметим, что из (7) следует

$$c_{2k_F}^+ c_{2k_F} = c_{-2k_F}^+ c_{-2k_F} \text{ и } d_{2k_F}^+ d_{2k_F} = d_{-2k_F}^+ d_{-2k_F},$$

что дает $\Delta^2 = \rho^2$ и $\Delta'^2 = \rho'^2$. Совместно с условием сшивки при $M > 3$ приходим к выражениям (см. (10) и (19))

$$\beta = \frac{A^2 S}{8} (\Delta^2 + \Delta'^2 + 2\Delta\Delta' \cos \kappa), \quad (37)$$

$$h_G = 2|I|S(\Delta^2 + \Delta'^2 + 2\Delta\Delta' \cos \kappa \cos 2ak_F),$$

$$\Delta\Delta' \cos \kappa = \rho\rho' \cos \kappa'.$$

Таким образом, энергия (21) становится функцией трех переменных Δ , Δ' и κ , что дает следующие необходимые условия ее минимума:

$$(\Delta + \Delta' \cos \kappa) \ln \frac{4\varepsilon_F^2}{\beta} - 4\lambda(\Delta + \Delta' \cos \kappa \cos 2ak_F) = 0, \quad (38)$$

$$(\Delta' + \Delta \cos \kappa) \ln \frac{4\varepsilon_F^2}{\beta} - 4\lambda(\Delta' + \Delta \cos \kappa \cos 2ak_F) = 0,$$

$$\Delta\Delta' \sin \kappa \left(\ln \frac{4\varepsilon_F^2}{\beta} - 4\lambda \cos 2ak_F \right) = 0,$$

где λ определяется формулой (24). Из последнего уравнения в (38) следуют три случая: $\Delta=0$, $\Delta'=0$ и $\sin \kappa = 0$ (случай $\ln 4\varepsilon_F^2/\beta = 4\lambda \cos 2ak_F$ не удовлетворяет двум первым уравнениям в (38) при $\Delta, \Delta' \neq 0$).

При $\Delta = 0$, используя (37), получаем из (38) решения

$$\cos \kappa = 0, \quad \Delta'^2 = \frac{32\varepsilon_F^2}{A^2 S} e^{-4\lambda}. \quad (39)$$

С помощью (37) и (39) энергия (21) представляется в виде

$$E_{\Delta=0} = -\frac{Na}{\pi v_F} \varepsilon_F^2 \left(1 + 2 e^{-4\lambda} \right). \quad (40)$$

Рассмотрев аналогичным образом случай $\Delta' = 0$, найдем, что $E_{\Delta'=0} = E_{\Delta=0}$.

При $\sin \kappa = 0$ ($\cos \kappa = (-1)^p$, p — целое число), исключая первые два уравнения в (38), получаем $\Delta' = \Delta(-1)^p$. Используя это соотношение и выражения (37), нетрудно найти следующее решение уравнений (38):

$$\Delta^2 = \frac{8\varepsilon_F^2}{A^2 S} e^{-4\lambda \cos^2 ak_F}. \quad (41)$$

С помощью (41) энергия (21) при $\sin \kappa = 0$ представляется в виде

$$E_{\sin \kappa = 0} = -\frac{Na}{\pi v_F} \varepsilon_F^2 \left(1 + 2 e^{-4\lambda \cos^2 ak_F} \right). \quad (42)$$

Из сравнения энергий (40) и (42) следует, что $E_{\sin \kappa = 0} < E_{\Delta=0} = E_{\Delta'=0}$, т.е. при $M > 3$ основному состоянию системы (1) отвечает ВСП с энергией (42) и со щелью в электронном спектре

$$\Delta_0 = 2\varepsilon_F e^{-2\lambda \cos^2 ak_F}. \quad (43)$$

Поскольку при всех рассмотренных соизмеримостях $\gamma = 0$ в полученном основном состоянии, ветви спектра электронов с противоположными спинами, изображенные на рис. 1, схлопываются, и магнитный момент электронной подсистемы в основном состоянии ВСП остается равным нулю, как и в исходном металлическом состоянии.

4. Спиновая структура основного состояния ВСП

В основном состоянии системы (1) спиновые компоненты, определяющиеся выражениями (8), принимают при $M = 2$ вид

$$S_n^z = (-1)^n (S - 4\Delta^2),$$

$$S_{2g}^x = 2\sqrt{2S} \Delta(-1)^g \cos \varphi,$$

$$S_{2g}^y = -2\sqrt{2S} \Delta(-1)^g \sin \varphi, \quad (44)$$

$$S_{2g+1}^x = \pm 2\sqrt{2S} \Delta(-1)^{g+f} \cos \varphi,$$

$$S_{2g+1}^y = \mp 2\sqrt{2S} \Delta(-1)^{g+f} \sin \varphi.$$

Здесь учтено, что, согласно результатам в разд. 3, $\Delta' = \pm \Delta$ и $\varphi' = -\varphi + \pi/2(2f + 1)$ (f — целое число) в основном состоянии системы с двукратной соизмеримостью. Величина Δ в (44) определяется формулой (34), а фаза φ остается произвольной и

фиксируется только при наличии анизотропии в плоскости XY . Состояние (44) отвечает энергии (35) и изображено схематически на рис. 2.

В случае $M > 3$ в основном состоянии системы (1) выполняются соотношения $\Delta' = \Delta(-1)^p$, $\cos \kappa = (-1)^p$, $\rho^2 = \rho'^2 = \Delta'^2 = \Delta^2$ (см. разд. 3), которые вместе с условием сшивки (37) дают

$$\rho = \pm \Delta, \rho' = \rho(-1)^f, \cos \kappa' = (-1)^f. \quad (45)$$

С помощью выражений (45) спиновые компоненты (8) представляются при $M > 3$ в виде

$$\begin{aligned} S_n^x &= \sqrt{2S} \Delta [\cos(2k_F an + \varphi) \pm \cos(2k_F an + \theta)], \\ S_n^y &= -\sqrt{2S} \Delta [\sin(2k_F an + \varphi) \mp \sin(2k_F an + \theta)], \\ S_n^z &= (-1)^n \{S - 2\Delta^2 [1 \pm \cos(4k_F an + \varphi + \theta)]\}. \end{aligned} \quad (46)$$

Здесь величина Δ определяется формулой (41), а верхний и нижний знаки отвечают случаям $\rho = \Delta$ и $\rho = -\Delta$ соответственно. Связь между φ и θ в (46) можно при желании найти из условия минимума так называемой энергии соизмеримости, которая представляет собой зависящую от фаз добавку к энергии (21), возникающую при учете в гамильтониане (1) магнанных ангармонизмов. При этом, однако, так же, как и в случае $M = 2$, одна из фаз все равно остается неопределенной при отсутствии анизотропии в плоскости XY .

Таким образом, при всех рассмотренных соизмеримостях основному состоянию ВСП отвечают спиральные структуры (44) и (46), возникающие в магнитной подсистеме. Период этих спиралей определяется из (46) как $\Pi = \pi/k_F$ или при учете (3) $\Pi = 2Ma/M_2$. При $k_F = \pi/4a$ период равен $4a$, как и изображено на рис. 2.

Из (44) и (46) следует также, что в основном состоянии ВСП все компоненты полного спина магнитной подсистемы обращаются в нуль в используемом приближении усреднения по быстрым осцилляциям с периодом $(k_F n)^{-1}$. Совместно с полученными в разд. 3 результатами для электронной подсистемы это показывает, что перестройка основного состояния системы (1) при переходе в фазу ВСП происходит таким образом, чтобы ее полный магнитный момент оставался равным нулю.

5. Выводы

В данной работе впервые исследовано основное состояние квазиодномерного металла, обладающего АФМ порядком. Показано, что это состояние представляет собой диэлектрик с волной

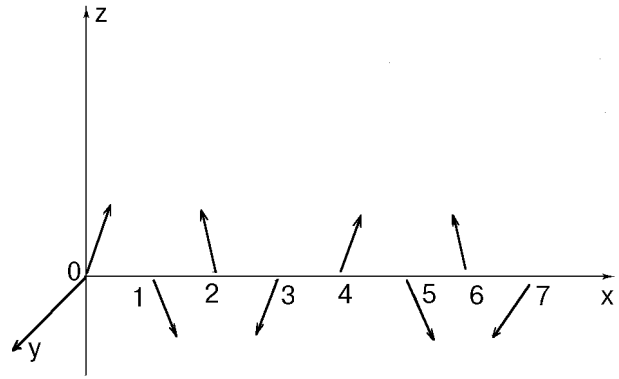


Рис. 2. Спиновая структура основного состояния ВСП при $M = 2$.

спиновой плотности. Найдена зависимость диэлектрической щели в одноэлектронном спектре и формы магнитной сверхструктуры от параметра системы при различных соизмеримостях. Представляется весьма интересным следующий результат, полученный во всех рассмотренных случаях: перестройка основного состояния АФМ металла при переходе в фазу ВСП происходит таким образом, что полный магнитный момент системы остается равным нулю. Параметр порядка ВСП, порожденной АФМ металлом, оказывается синглетным в отличие от триплетной ВСП, возникающей в парамагнитном металле. Это, в частности, должно привести к необычному поведению ВСП в магнитном поле, что послужит предметом последующих публикаций.

1. D. Jerome and H. J. Schulz, *Adv. Phys.* **31**, 300 (1982).
2. G. Grüner, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 1 (1994).
3. J. M. Tranquada, D. J. Buttrey, V. Sachdev, and J. E. Lorenzo, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1003 (1994); J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe, Y. Nakamura, and S. Uchida, *Nature* **375**, 561 (1995).
4. Л. П. Горьков, *УФН* **144**, 381 (1984).
5. Т. Г. Петрова, А. С. Рожавский, *ФНТ* **18**, 987 (1992).
6. V. J. Emery and S. A. Kivelson, *Nature* **374**, 434 (1995); S. A. Kivelson and V. J. Emery, *Synth. Mat.* **65**, 249 (1994).
7. И. В. Криве, Т. Г. Петрова, А. С. Рожавский, *Письма в ЖЭТФ* **44**, 127 (1987); *ЖЭТФ* **92**, 1001 (1987).
8. С. В. Вонсовский, *Магнетизм*, Наука, Москва (1971).
9. S. Nayak and F. Wilczek, *Preprint cond. mat.* No 9602112 (1996).
10. И. В. Криве, А. С. Рожавский, И. О. Кулик, *ФНТ* **12**, 1123 (1986).
11. M. Ruderman and C. Kittel, *Phys. Rev.* **96**, 99 (1954).
12. K. Yosida, *Phys. Rev.* **106**, 893 (1957).
13. T. Kasuya, *Progr. Theor. Phys.* **16**, 45 (1956).
14. И. В. Криве, А. С. Рожавский, *УФН* **152**, 33 (1987).

**A new type of spin density waves in
quasi-one-dimensional antiferromagnetic metals**

T. G. Petrova and A. S. Rozhavsky

The model of a quasi-one-dimensional metal with an intrinsic antiferromagnetic ordering has been studied. It is shown that the ground state is the dielectric magnetic superstructure — the spin den-

sity wave (SDW). The SDW order parameter is a singlet opposed to the triplet one in a paramagnetic metal. The dependence of the dielectric gap in the single-electron spectrum and of the form of the magnetic spiral on the commensurability parameter is obtained. It is found that the total zero magnetic moment of the system is conserved under the transformation into the SDW state.