

## Треугольные решетки волн зарядовой и спиновой плотности в хемосорбированных монослоях металлов на поверхности алмазоподобных полупроводников

© М. Авиньон\*, В.Н. Меньшов\*\*, В.В. Тугушев\*,\*\*

\* LEPES CNRS, 25. Av. Martyrs BP166, Grenoble, France

\*\* Российский научный центр "Курчатовский институт",  
107207 Москва, Россия

E-mail: sasha@mail.mics.msu.su

(Поступила в Редакцию 26 июня 2000 г.)

Проведен качественный анализ особенностей электронного спектра плоской треугольной решетки и возможностей возникновения в ней волн зарядовой и спиновой плотности (ВЗП и ВСП). Обсуждается два типа соизмеримых структур с ВЗП и ВСП в приближениях слабого и сильного межэлектронного взаимодействия. Рассмотрены приложения моделей ВЗП и ВСП к некоторым конкретным объектам — хемосорбированным монослоям металлов на поверхности (111) алмазоподобных полупроводников со степенью покрытия, близкой к 1/3.

Упорядоченные структуры и фазовые переходы в монослоях металлов, хемосорбированных на поверхности алмазоподобных полупроводников (в основном Si и Ge) интенсивно излучаются на протяжении нескольких десятилетий (см., например, [1]). В данной работе мы не ставим, разумеется, целью даже бегло осветить все аспекты этого направления в физике поверхности.

Только сравнительно узкий класс объектов, привлекавших неожиданное внимание в последние годы, является предметом нашего обсуждения. Речь пойдет о монослоях некоторых непереходных металлов на поверхности типа (111) алмазоподобных полупроводников (Si, Ge) со степенью покрытия, близкой к 1/3. Кроме того, ограничимся лишь рассмотрением реконструированных монослоев типа  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ , имеющих структуру плоской треугольной решетки [2]. Вопрос о генезисе таких монослоев и причине их устойчивости многократно обсуждался в литературе (см., например, [3]), однако до сих пор не существует однозначного ответа на него. Далее мы просто примем как факт наличие монослоя типа  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  без указания механизма реконструкции поверхности (111), приводящего к его возникновению. Конкретно к системам указанного типа относятся монослои металлов III группы (Al, Ga, In)/Si (111), IV группы (Pb, Sn)/Ge (111), V группы (Sb/Si (111) или Bi/Ge (111)), а также более сложные монослои K/Si (111):V (см. подробную библиографию в [1,2]).

С точки зрения электронной структуры все указанные системы характеризуются наличием довольно узкой (шириной  $W$  порядка 0.2–0.5 eV) поверхностной зоны, сформированной гибридами орбиталей монослоя металла и первого слоя полупроводника.

Элементарная поверхностная ячейка содержит один атом металла и три симметрично расположенных атома полупроводника [3], а заполнение узкой поверхностной зоны (без учета эффекта перетекания заряда между объемом полупроводника и поверхностью) регулирует-

ся перераспределением электронной плотности между  $sp^3$ -орбиталями (Si, Ge) в первом поверхностном слое и  $p$ - (или  $s$ -) орбиталями хемосорбированного металла. Нетрудно убедиться, что в чисто "химическом" приближении такое перераспределение приводит к формально половинному заполнению узкой поверхностной зоны, в случае металлов IV группы (Pb, Sn) на поверхности Ge, Si (111) и металла I группы (K) на поверхности Si (111):V. Для металлов III и VI групп узкая поверхностная зона оказывается соответственно пустой и заполненной. Варьируя состав монослоя и сохраняя при этом степень покрытия 1/3, можно в принципе изменить заполнение поверхностной зоны в очень широких пределах без разрушения структуры  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  и треугольной поверхностной решетки.

Роль электронных корреляций в обсуждаемых системах стала всерьез приниматься во внимание после опубликования работы [4], посвященной исследованию фотоэмиссионных спектров структуры K/Si (111) ( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ ):V. Даже из простейших оценок следует, что эффективное электрон-электронное взаимодействие (одноцентровое отталкивание в модели Хаббарда) составляет для электронов поверхностной зоны величину порядка  $U \approx 1-2$  eV, т.е. заведомо параметр  $U/W \geq 1$ . Было высказано предположение, что структура [4] является моттовским диэлектриком во всем исследованном интервале температур и, возможно, антиферромагнетиком, хотя никакого изучения магнитного порядка до сих пор не проводилось. Лишь совсем недавно [5] были проведены расчеты поверхностного электронного спектра для системы [4] и первоначальные оценки роли корреляционных эффектов были в общем подтверждены.

В то же время другая группа обсуждаемых монослоев — монослои Pb и Sn на Ge (111) ( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ ) демонстрирует совсем иные свойства, чем уже упомянутая изоэлектронная структура K/Si (111) ( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ ):V. Именно в монослоях Pb и Sn на Ge имеет место структурный

переход из высокотемпературной металлической фазы ( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ ) в низкотемпературную реконструированную фазу ( $3 \times 3$ ) с малой щелью (Sn/Ge) или псевдощелью (Pb/Ge) (см., например, [6,7] и ссылки в [2] на более ранние работы). Механизм этого структурного перехода, а также влияние на него электронных корреляций остаются в настоящее время дискуссионными.

В принципе важная роль межэлектронного взаимодействия в поверхностных зонах для понимания зарядового и магнитного упорядочения на поверхности алмазоподобных полупроводников стала понятной уже давно.

Именно это взаимодействие ответственно за формирование антиферромагнитной структуры в квазиодномерных цепочках Пенди на атомарно чистых поверхностях (111) ( $2 \times 1$ ) кремния и алмаза [6]. Оно же определяет наряду с химической димеризацией величину диэлектрической щели в спектре поверхностных электронных состояний, а также особенности хемосорбции некоторых газов и металлов при малых степенях покрытия (см., например, [7]) в указанных выше системах.

Далее будет предложена простая модель, качественно объясняющая единым образом все имеющиеся на данном этапе результаты, касающиеся зарядового и спинового упорядочения в монослоях типа  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  на поверхности (111) кремния и германия. Эта модель основана на популярной и широко известной концепции волн зарядовой и спиновой плотностей (ВЗП и ВСП), успешно зарекомендовавшей себя при качественном описании электронных фазовых переходов в широком классе объектов [8]. Будут проанализированы различные варианты в пределе слабого ( $U \ll W$ ) и сильного ( $U \gg W$ ) взаимодействий, где только и можно более или менее обосновать теоретические подходы при расчете эффектов электронных корреляций. В первом случае речь идет о приближении самосогласованного поля непосредственно в модельном гамильтониане взаимодействующих фермионов, а во втором — об аналогичном приближении в эффективном гамильтониане псевдофермионов. Результаты обоих подходов в целом согласуются друг с другом, так что можно надеяться, что и в реальной ситуации ( $U \geq W$ ) наши выводы останутся качественно справедливыми.

## 1. Особенности спектра одночастичных возбуждений в треугольной решетке

Рассмотрим систему взаимодействующих частиц в треугольной решетке с межатомным расстоянием  $a$ . В простейшем приближении сильной связи с учетом перескока только между ближайшими соседями спектр одночастичных возбуждений имеет вид

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = 2t \left[ \cos k_x a + 2 \cos(k_x a/2) \cos(\sqrt{3} k_y a/2) \right], \quad (1)$$

где  $t > 0$  — интеграл перескока (именно такой знак соответствует ситуации в треугольных поверхностных решетках хемосорбированных металлов на поверхности

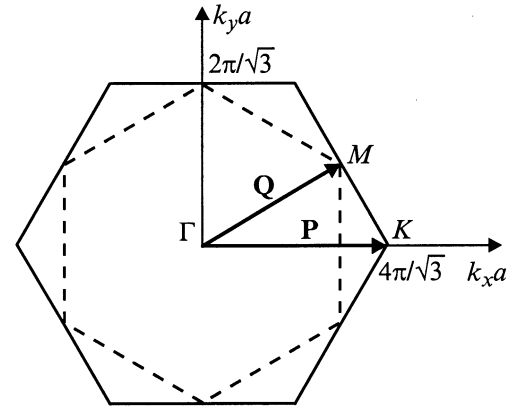


Рис. 1. Зона Бриллюэна для треугольной поверхностной решетки.

(111) полупроводников (см., например, недавние расчеты зонного спектра в [5])). Зона Бриллюэна (рис. 1) формируется двумя векторами обратной решетки

$$\mathbf{K}_1 = (4\pi/\sqrt{3}a) \mathbf{e}_y, \quad \mathbf{K}_2 = (4\pi/a)(\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y/\sqrt{3}), \quad (2)$$

где  $\mathbf{e}_x$  и  $\mathbf{e}_y$  — единичные векторы. Эта зона имеет форму регулярного шестиугольника с площадью  $S_0 = 8\pi^2/(\sqrt{3}a^2)$ . Максимум  $\varepsilon(\mathbf{k})$  соответствует (при  $t > 0$ ) точке  $\Gamma$  ( $\varepsilon_{\max} = 6t$ ), а минимум — точке  $K$  ( $\varepsilon_{\min} = -3t$ ), так что полная ширина полосы разрешенных состояний составляет  $W = 9t$ . Плотность состояний в этой полосе распределена весьма неравномерно и дается формулой

$$N(\varepsilon) = A(\tilde{\varepsilon}) / \left[ 2\pi^2 t (3 + 2\tilde{\varepsilon})^{1/4} \right], \quad \tilde{\varepsilon} = \varepsilon/2t, \quad (3)$$

где  $A(\tilde{\varepsilon}) = K(k)$  (для  $k < 1$ ) и  $A(\tilde{\varepsilon}) = k^{-1}K(k^{-1})$  (для  $k > 1$ ),  $K(k)$  — полный эллиптический интеграл первого рода с модулем

$$k = 1/2 \sqrt{[2 + (3 - \tilde{\varepsilon}^2)/\sqrt{(3 + 2\tilde{\varepsilon})}]}. \quad (4)$$

Заметим, что  $0 \leq k < 1$  при  $-1 < \tilde{\varepsilon} \leq 3$  и  $k > 1$  при  $-3/2 \leq \tilde{\varepsilon} < -1$ . Нетрудно убедиться, что (3) обращается в  $\infty$  при  $\varepsilon \rightarrow -2t$  ( $\tilde{\varepsilon} \rightarrow 1$ ,  $k \rightarrow 1$ ), и в логарифмическом приближении возникает сингулярность типа Ван Хова

$$N(\varepsilon) \approx (3\nu/(4\pi^2 t)) \ln(4/|1 + \tilde{\varepsilon}|), \quad (5)$$

где  $\nu = 1$  при  $\tilde{\varepsilon} > -1$  и  $\nu = 2$  при  $\tilde{\varepsilon} < -1$ . Таким образом, энергетическая "поверхность"  $\varepsilon_0 = -2t$  представляет особый интерес. Предположим, что уровень Ферми  $\mu$  в точности совпадает с  $\varepsilon_0$  ( $\mu = -2t$ ). Из (1) сразу можно убедиться, что "поверхность" Ферми образует в этом случае шестиугольник с площадью  $S = 6\pi^2/(\sqrt{3}a^2)$ , а число заполнения электронных состояний с учетом спинового фактора есть  $n_0 = 2[(S_0 - S)/S_0] = 1/2$  (половина электрона на атом). Заметим также, что имеются

три пары сегментов "поверхности" Ферми (ребра шестиугольника), совпадающие при трансляции на векторы  $\mathbf{Q}_m$  ( $m = 1, 2, 3$ ),

$$\begin{aligned}\mathbf{Q}_1 &= \mathbf{K}_1 + 1/2\mathbf{K}_2, & \mathbf{Q}_2 &= 1/2\mathbf{K}_2 - 1/2\mathbf{K}_1, \\ \mathbf{Q}_3 &= 1/2\mathbf{K}_1 - \mathbf{K}_2.\end{aligned}\quad (6)$$

После приведения к первой зоне Бриллюэна  $\{\mathbf{Q}_m\}$  суть просто векторы, соединяющие точки  $\Gamma$  и  $M$  на рис. 1 (в дальнейшем будем опускать индекс  $m$ , обозначая  $\mathbf{Q}$  вектор  $\Gamma M$  в первой зоне Бриллюэна). Отметим, кстати, что  $\varepsilon(\mathbf{Q}) = -2t$ , так что именно через седловые точки  $M$  проходит линия, дающая сингулярность (5).

Таким образом, главный вклад в плотность состояний (5) вносит область вблизи ребер шестиугольника с вершинами в точках  $M$ , и даже небольшое изменение положения уровня Ферми  $\mu$  относительно уровня  $\varepsilon_0$  может заметно изменить число заполнения  $n$  по сравнению с  $n_0 = 1/2$ . Полагая  $|\delta\mu/W| \ll 1$  (напомним, что  $W = 9t$ ), где  $\delta\mu = \mu - \varepsilon_0$  — сдвиг уровня химпотенциала относительно  $\varepsilon_0$ , получим зависимость  $n(\delta\mu)$

$$n(\delta\nu) = n_0 + (27\nu/2\pi^2)(\delta\mu/W) \ln(8e/9|\delta\mu/W|), \quad (7)$$

где  $\nu = 1$  при  $\delta\mu > 0$ ,  $\nu = 2$  при  $\delta\mu < 0$ .

Уже при  $\delta\mu/W \approx 0.1$  изменение  $n(\delta\mu) - n_0$  составит, согласно (7),  $\delta n = n(\delta\mu) - n_0 \approx 0.5$ , т.е. заполнение  $n$  близко к половинному. Поэтому в дальнейшем предполагаем, что даже при заполнении  $n \approx 1$  уровень Ферми лежит в области пика плотности состояний (5). Из зонных расчетов [2,5] можно убедиться, что и при более сложной форме спектра (1) с учетом перекока между ближайшими соседями этот вывод остается справедливым. Фактически учет таких перекоков приводит лишь к сдвигу энергии  $\varepsilon_0$  в положительную сторону (ближе к центру зоны), что в свою очередь увеличивает  $n_0 > 1/2$ . Таким образом, вывод о нахождении уровня Ферми вблизи пика плотности состояний  $N(\varepsilon)$ , а также об определяющей роли состояний шестиугольника с вершинами в точках  $M$  в формировании этого пика представляется весьма общим для обсуждаемых систем и не связан слишком строго с приближением (1) для  $\varepsilon(\mathbf{k})$ .

Займемся теперь другой важной характеристикой — одночастичной функцией отклика  $\chi^0(\mathbf{q})$ , входящий в критерий неустойчивости системы относительно перехода в состояние ВЗП или ВСП

$$\chi^0(\mathbf{q}) = \int [d\mathbf{k}/(2\pi)^2] [(n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})/(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})], \quad (8)$$

где интегрирование проводится по первой зоне Бриллюэна. Вблизи волнового вектора  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  оценка (8) дает с логарифмической точностью при  $|\delta\mu/W| \ll 1$

$$\chi^0(\mathbf{Q}) \sim (1/W) \ln^2 |\delta\mu/W|, \quad (9)$$

т.е.  $\chi^0(\mathbf{q})$  расходится при  $\delta\mu = 0$ ,  $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}$ . Эта расходимость связана очевидным образом с особенностью

Ван Хофа в  $N(\varepsilon)$  (5) и "нестингом" участков поверхности Ферми на рис. 1 при  $\delta\mu = 0$ . Следует отметить, что резкий пик в  $\chi^0(\mathbf{q})$  вблизи  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  сохраняется при учете перекоков между ближайшими соседями и заполнении  $n$ , близком к единице (см. [2]). Это неудивительно в силу уже отмеченного выше своеобразного пиннинга уровня Ферми вблизи пика плотности состояний  $N(\varepsilon)$ . Таким образом, аномалия  $\chi^0(\mathbf{q})$  при  $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{Q}$  представляется не сильно зависящей от детального вида спектра  $\varepsilon(\mathbf{k})$  и сделанных упрощений.

## 2. Формирование волн зарядовой и спиновой плотности в пределе слабого взаимодействия

Рассмотрим модельный гамильтониан взаимодействующих квазичастиц на треугольной решетке

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\alpha}^+ a_{\mathbf{k}\alpha} + U \sum_i n_i \uparrow n_i \downarrow + 1/2V \sum_{i,j} n_i n_j, \quad (10)$$

где  $\varepsilon(\mathbf{k})$  — спектр одночастичных возбуждений (1),  $\mathbf{k}$  — двумерный квазиимпульс,  $\alpha$  — спиновый индекс,  $(i, j)$  — ближайшие соседи в треугольной решетке,  $U$  — одноузельный (хаббардовский) потенциал отталкивания,  $V$  — кулоновский потенциал взаимодействия между ближайшими соседями. Хорошо известно, что обобщенные критерии неустойчивости основного состояния системы с гамильтонианом (10) относительно перехода в состояние с ВЗП и ВСП даются выражениями

$$U_e(\mathbf{q}) \chi^0(\mathbf{q}) \geq 1, \quad U_c(\mathbf{q}) = -V \sum_{\mathbf{n}} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{n}) - U,$$

$$U_s(\mathbf{q}) \chi^0(\mathbf{q}) \geq 1, \quad U_s(\mathbf{q}) = U \quad (11)$$

для переходов в состояния ВЗП и ВСП соответственно.

Суммирование ведется в (11) по ближайшим соседям. Отметим как очень важное то обстоятельство, что  $U_s$  не зависит от волнового вектора  $\mathbf{q}$ , поэтому выбор типа структуры ВСП определяется только максимумом  $\chi^0(\mathbf{q})$ . В то же время  $U_c(\mathbf{q})$  сильно зависит от  $\mathbf{q}$  (может даже менять знак), поэтому выбор типа структуры ВЗП заранее неочевиден. Действительно, максимум  $U_c(\mathbf{q})$ , как легко убедиться, достигается при  $\mathbf{q} = \mathbf{P}$  (это вектор, соединяющий точки  $\Gamma$  и  $K$  на рис. 1), в то время как максимум  $\chi^0(\mathbf{q})$  соответствует  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  (вектор  $\Gamma M$ ).

Таким образом,  $U_c(\mathbf{P}) = 3V - U$ , а  $U_c(\mathbf{Q}) = 2V - U$ , и всегда  $U_c(\mathbf{Q}) < U_c(\mathbf{P})$ . В зависимости от взаимоотношений между потенциалами  $V$  и  $U$  могут сложиться следующие ситуации: а)  $3V - U < 0$ , тогда переход в состояние с ВЗП вообще невозможен; б)  $3V - U > 0$ , но  $2V - U < 0$ , тогда состояние с ВЗП с волновым вектором  $\mathbf{P}$  только и может иметь место; в)  $3V - U > 0$ ,  $2V - U > 0$ , тогда состояния с ВЗП с волновыми векторами  $\mathbf{P}$  и  $\mathbf{Q}$  конкурируют между собой. В последнем случае резуль-

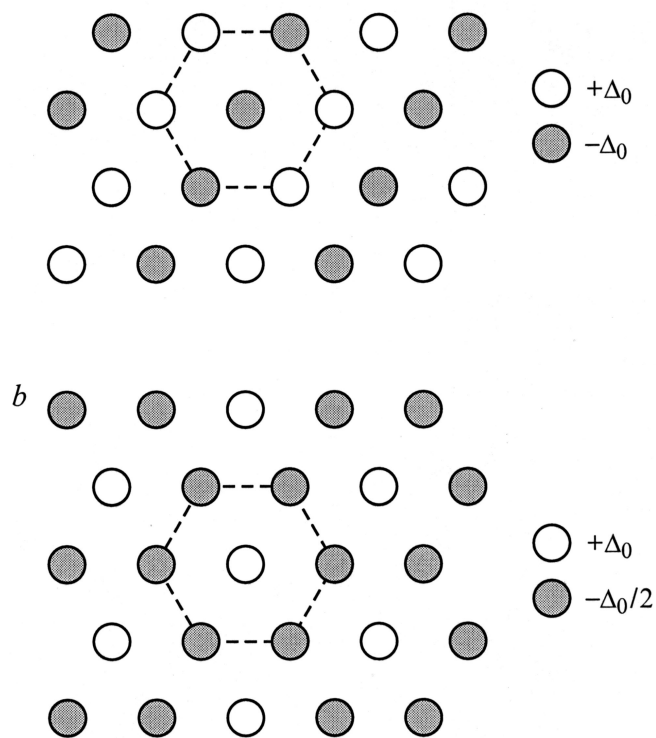


Рис. 2. Структуры ВЗП и ВСП с волновыми векторами  $\mathbf{Q}$  (a) и  $\mathbf{P}$  (b).

та конкуренция зависит от заполнения зоны (т.е. от величины  $\delta\mu$ ). В непосредственной близости к заполнению  $n = n_0 = 1/2$  логарифмическая сингулярность в  $\chi^0(\mathbf{Q})$  неизбежно приводит к формированию структуры с ВЗП на волновом векторе  $\mathbf{Q}$ , но даже при небольшом удалении от  $n_0$  (ближе к половинному заполнению  $n \approx 1$ ) структура с ВЗП на волновом векторе  $\mathbf{P}$  может становиться более выгодной. В принципе не исключено также образование несоизмеримой структуры ВЗП.

В случае ВСП все обстоит гораздо проще, и при прочих равных условиях наиболее выгодна реализация структуры с волновым вектором  $\mathbf{Q}$  из-за логарифмической сингулярности в  $\chi^0(\mathbf{Q})$  при  $n = n_0 = 1/2$ . Поскольку максимум  $\chi^0(\mathbf{Q})$  сохраняется, как уже отмечалось выше, и при заполнении, близком к половинному ( $n \approx 1$ ), нет никаких оснований говорить о смене типа структуры ВСП.

На рис. 2, a, b показаны возможные варианты структур с ВЗП и ВСП, обсужденные выше. Отметим, что ВЗП с волновым вектором  $\mathbf{P}$  соответствует, скорее всего, экспериментально наблюдаемой фазе  $3 \times 3$  в (Pb, Sn)/Ge (111), тогда как тип ВСП в K/Si (111):V пока не определен.

Уравнение самосогласованности для параметра порядка  $\Delta$  (синглетного в случае ВЗП или триплетного в случае ВСП) может быть сравнительно легко решено лишь в случае упорядочения с волновым вектором  $\mathbf{Q}$ . Это уравнение имеет вид (здесь и далее рассматриваем

только ситуацию при нулевой температуре  $T = 0$ )

$$\Delta = [\Delta U_{c,s}(\mathbf{Q})/\pi^2] \times \int_D \left\{ (dx dy) / [(4t \cos x \cos y)^2 + \Delta^2]^{1/2} \right\}, \quad (12)$$

где  $D(\mu)$  — область интегрирования по заполненным состояниям в зоне Бриллюэна. При  $\mu = \mu_0$  (уровень Ферми лежит строго в максимуме плотности состояний) с логарифмической точностью решение (12) дается выражением

$$\Delta = \Delta_0 = 4t \exp \left[ -4\pi \sqrt{t/U_{c,s}(\mathbf{Q})} \right]. \quad (13)$$

Детальный расчет зависимости  $\Delta(\mu)$  при  $\mu \neq \mu_0$  может быть выполнен только численно, что не является целью данной работы и требует самостоятельного исследования. Во всяком случае, формула (13) может быть использована в качестве верхней оценки величины параметра порядка ( $\Delta(\mu) \leq \Delta_0$ ) при всех рассмотренных выше вариантах упорядочения для качественного анализа одночастичного спектра в перестроенной фазе.

Обсудим изменения в плотности состояний, возникающие при упорядочении с волновым вектором  $\mathbf{Q}$ . Форма  $N(\varepsilon)$  сильно меняется вблизи энергии  $\varepsilon = \varepsilon_0 = -2t$ , и при  $|\varepsilon + 2t| > \Delta$  имеем

$$N(\varepsilon) \sim (\Delta/t)(\ln t/\Delta) / [(\varepsilon + 2t)^2 - \Delta^2]^{1/2}, \quad (14)$$

а при  $\Delta^2/t \ll |\varepsilon + 2t| < \Delta$  —

$$N(\varepsilon) \sim [\Delta^2 - (\varepsilon + 2t)]^{-1/2}, \quad (15)$$

т.е. возникает корневая особенность вблизи  $\varepsilon = \varepsilon_0$ .

Однако в области  $|\varepsilon + 2t| \sim \Delta^2/t \ll \Delta$  вновь появляются логарифмическая сингулярность

$$N(\varepsilon) \sim (1/t) \ln(t/|\varepsilon + 2t|), \quad (16)$$

следовательно, сохраняется бесщелевой (точнее, псевдощелевой) характер спектра одночастичных возбуждений. В случае упорядочения типа ВЗП с волновым вектором  $\mathbf{P}$  псевдощель  $2\Delta$  в спектре будет еще менее выражена, чем в (14)–(16), и можно говорить, скорее, о полуметаллическом характере перестроенной системы. Само выражение для параметра порядка  $\Delta$  в этом случае, разумеется, не совпадает с (13), но аналитический расчет зависимости  $\Delta(U_c(\mathbf{P}))$ , к сожалению, невозможен.

Для нашего качественного вывода о псевдощелевом (или бесщелевом) характере спектра в фазе с ВЗП типа  $3 \times 3$  такой расчет, впрочем, не нужен.

### 3. Формирование волны спиновой плотности в пределе сильного взаимодействия

В предыдущем разделе была рассмотрена ситуация, когда потенциалы взаимодействия  $U$  и  $V$  не слишком велики и оправдано приближение самосогласованного поля

непосредственно в гамильтониане (10). Представляется, однако, целесообразным качественно оценить и другую возможность, когда хаббардовское одноцентровое отталкивание  $U$  велико по сравнению с интегралом перескока  $t$  и межцентровым отталкиванием  $V$  (т.е.  $U \gg t, V$ ).

В этом случае удобно перейти от модели (10) к так называемой  $t$ - $J$  модели, введя стандартным образом операторы Хаббарда  $X_{\alpha\beta}^i$  [9],

$$H_{tJ} = \sum_{\alpha, i \neq j} t X_{\alpha 0}^i X_{0\alpha}^j + \sum_{i \neq j} [J S_i S_j + (\tilde{V}/2) n_i n_j], \quad (17)$$

где  $J = 4t^2/U$ ,  $\tilde{V} = V - 2t^2/U$ ,  $X_{\alpha 0}^i$  — оператор Хаббарда частичного возбуждения на узле,  $S_i$  — спиновый оператор. Переходя от операторов Хаббарда к операторам вспомогательных псевдофермионов ( $f_{i\alpha}$ ) и псевдобозонов ( $\beta_i$ ) в простейшем представлении ( $X_{\alpha 0}^i \rightarrow f_{i\alpha}^+ \beta_i$ ,  $X_{\alpha\alpha}^i \rightarrow f_{i\alpha}^+ f_{i\alpha}$ ) и рассматривая затем псевдобозонные операторы просто как  $c$ -числа в приближении седловой точки, запишем эффективный гамильтониан как

$$H_{\text{eff}} = \sum_{\alpha, i \neq j} \tilde{t}_{ij} f_{i\alpha}^+ f_{j\alpha} + \sum_{i \neq j} [J S_i S_j + (\tilde{V}/2) n_i n_j] - \sum_{i\alpha} \lambda_i f_{i\alpha}^+ f_{i\alpha}, \quad (18)$$

где  $\lambda_i$  есть множитель Лагранжа, обеспечивающий сохранение полного числа квазичастиц на узле ( $n_i + \beta_i^+ \beta_i = 1$ ),  $S_i = \sum_{\alpha\beta} f_{i\alpha}^+ \sigma_{\alpha\beta} f_{i\beta}$ ,  $n_i = \sum_{\alpha} f_{i\alpha}^+ f_{i\alpha}$ . Химический потенциал  $\mu$  включен в не зависящую от номера узла компоненту поля  $\lambda_0$ , играющую роль химического потенциала псевдофермионов ( $\lambda_0 = \mu$ ) в системе без зарядовой модуляции. Эффективный интеграл перескока  $\tilde{t}_{ij} = t\sqrt{(1-n_i)(1-n_j)}$ , где  $n_i$  и  $n_j$  — средние псевдофермионные числа заполнения узлов ( $i, j$ ); в отсутствие зарядовой модуляции  $n_i = n_j = n$  и  $\tilde{t}_{ij} = t(1-n)$ .

Рассмотрим возможность формирования в системе (18) соизмеримой антиферромагнитной структуры в отсутствие перераспределения зарядовой плотности. Ранее в [10] была проанализирована аналогичная возможность в одномерной цепочке, моделирующей с некоторыми приближениями цепочку Пенди на поверхности Si (111) ( $2 \times 1$ ). В области параметров  $\tilde{t} = t(1-n) \gg J$  (напомним, что  $J \ll t$  по определению для модели (18), так как  $t/U \ll 1$ ) оправдано приближение среднего поля по отношению к спиновой плотности  $S_i$ . Выделяя компоненты  $S_q$  и вводя параметр порядка  $\Delta_q = -J_q(S_q)$ , получаем стандартный гамильтониан системы с ВСП и фиксированным химическим потенциалом псевдофермионов  $\mu$

$$H_{\text{eff}} = \sum_{\alpha, k} \varepsilon(k) f_{k\alpha}^+ f_{k\alpha} - \sum_{\alpha, \beta, q} [(\Delta_q \sigma)_{\alpha\beta} f_{k\beta}^+ f_{k-q\alpha} + \text{c.c.}] - \sum_q (|\Delta_q|^2) / J_q - \tilde{\mu} \sum_{\alpha, k} \lambda_i f_{k\alpha}^+ f_{k\alpha}, \quad (19)$$

где  $\varepsilon(k)$  есть спектр (1) для треугольной решетки с заменой  $t \rightarrow \tilde{t}$ .

Эффективный потенциал  $\tilde{U}_s(\mathbf{q}) = j_q = -(J/2) \times \sum_n \exp(i\mathbf{q}\mathbf{n})$ , отвечающий за формирование волны спиновой плотности в системе с гамильтонианом (19), зависит от квазиимпульса  $\mathbf{q}$ , что существенно отличается от аналогичной ситуации в системе с гамильтонианом (10) (см. (11)). Максимум  $\tilde{U}_s(\mathbf{q})$  достигается при  $\mathbf{q} = \mathbf{P}$  и соответственно  $\tilde{U}_s(\mathbf{P}) = (3/2)J$ , тогда как  $\tilde{U}_s(\mathbf{Q}) = J$ .

В то же время, с точки зрения критерия Стонера, наибольшая неустойчивость парамагнитного состояния может быть связана с формированием ВСП как на волновом векторе  $\mathbf{Q}$  (при среднем заполнении  $n$ , близком к  $1/2$ ), так и на волновом векторе  $\mathbf{P}$  (при удалении заполнения  $n$  от  $1/2$ ). Но в обоих случаях ( $\mathbf{q} = \mathbf{Q}, \mathbf{P}$ ) потенциал  $U_s(\mathbf{q}) > 0$ , т.е. имеет место конкуренция двух типов ВСП аналогично случаю двух типов ВЗП для систем со слабой связью (см. предыдущий раздел).

Заметим, что, поскольку средние числа заполнения фермионных (в исходном гамильтониане) и псевдофермионных состояний равны, величина  $n$  сохраняет тот же физический смысл, что и в предыдущих разделах. Однако величина  $\tilde{\mu}$ , разумеется, имеет совсем другой смысл (химический потенциал псевдофермионов) и является просто удобным параметром, вовсе не совпадающим с истинным уровнем Ферми исходных квазичастиц. Тем не менее все формулы из раздела 1, связывающие  $\tilde{\mu}$  и  $n$ , остаются в силе с точностью до переобозначений ( $t \rightarrow \tilde{t}$ ,  $\mu \rightarrow \tilde{\mu}$ ), и можно напрямую воспользоваться ими при рассмотрении особенностей спектра и плотности состояния псевдофермионов в треугольной решетке. Аналогично (с заменой  $U_s(\mathbf{q}) \rightarrow \tilde{U}_s(\mathbf{q})$ ) можно воспользоваться и формулами из раздела 2 для параметра порядка  $\Delta$ , характеризующего антиферромагнитный дальний порядок в системе с гамильтонианом (18). Так, при упорядочении с волновым вектором  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$  и заполнении зоны псевдофермионов на четверть ( $n = n_0 = 1/2$ ) имеем

$$\Delta = \Delta_0 = 4t \exp[-4\pi\sqrt{\tilde{t}/U_s(\mathbf{Q})}] = 2t \exp[-\pi\sqrt{2U/t}], \quad (20)$$

так что  $\tilde{\Delta}_0 \ll \tilde{t}$  из-за экспоненциально малого фактора в (20) при  $U \gg t$ . Следует подчеркнуть, что критерий  $\tilde{t} \gg J$ , использованный при выводе эффективного гамильтониана (19), нарушается в непосредственной близости от половинного заполнения ( $n \rightarrow 1$ ), и в этом случае следует пользоваться общим гамильтонианом  $t$ - $J$  модели (18). В предельном случае  $n = 1$  выражение (18) эквивалентно гамильтониану Гейзенберга с обменным интегралом  $J$  для системы локальных спинов  $S = 1/2$  на треугольной решетке [11], обсуждение которого в рамках концепции ВСП неадекватно.

Следует подчеркнуть, что физический смысл параметра порядка  $\Delta$  в модели (19) есть не максимальная амплитуда спиновой плотности на узлах решетки, а только лишь усредненная (по быстрым квантовым флуктуациям) медленная огибающая плотности локальных

спинов  $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ . В пределе  $U \gg t$  истинная плотность спинов хорошо локализована на узлах ( $S = 1/2$ ), тогда как средняя статическая плотность  $\langle \mathbf{S} \rangle = \Delta/\tilde{U}_s \ll 1/2$  при  $J \ll \tilde{t}$ , и можно перейти на язык волны спиновой плотности в системе зонных псевдофермионов. Последние, разумеется, непосредственного физического смысла не несут и являются лишь удобным математическим приемом при описании системы (18).

Итак, проведен качественный анализ особенностей электронного спектра плоской треугольной решетки и возможности возникновения в ней волн зарядовой и спиновой плотности. В приближении сильной связи для перескока между ближайшими соседями показано, что имеется логарифмически расходящийся пик плотности состояний (особенность Ван Хова) на энергии, соответствующей заполнению электронной зоны на одну четверть ( $n = 1/2$ ). Вследствие пиннинга уровня Ферми даже при заполнении, близком к половинному ( $n = 1$ ), критерий неустойчивости системы относительно перехода в состояния с ВЗП или ВСП может быть легко выполнен. При этом возникает возможность конкуренции двух типов соизмеримых структур (несоизмеримые в данной работе не рассматриваются), соответствующих волновым векторам  $\mathbf{Q} = (\pi/a) [\mathbf{e}_x + (1/\sqrt{3})\mathbf{e}_y]$  и  $\mathbf{P} = (4\pi/3)\mathbf{e}_x$  в первой зоне Бриллюэна. В зависимости от заполнения зоны и величины потенциала взаимодействия могут иметь место как простая полосатая структура ( $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ ) вблизи заполнения на одну четверть, так и более сложная треугольная (гексагональная) структура ( $\mathbf{q} = \mathbf{P}$ ) при приближении к половинному заполнению. В первом случае значительную роль играет фактор нестинга на волновом векторе  $\mathbf{Q}$  некоторых участков поверхности Ферми, во втором — увеличение эффективного потенциала взаимодействия на волновом векторе  $\mathbf{P}$ .

Имеющиеся экспериментальные данные позволяют отнести монослой Pb,Sn/Ge (111) с покрытием 1/3 к системам с ВЗП на волновом векторе  $\mathbf{P}$ , адекватно описываемым в приближении слабого взаимодействия [2]. Электронный спектр таких систем является бесщелевым (или псевдощелевым). В то же время монослой K/Si (111):V с покрытием 1/3 относятся, скорее всего, к системам с ВСП, однако вопрос о структуре и оптимальном приближении пока остается открытым. Наличие щели в спектре электронных состояний свидетельствует, по видимому, в пользу модели сильного взаимодействия, однако величина этой щели (около 0.1 eV) все же плохо согласуется с критерием сильной связи и заставляет обращаться к экзотическим гипотезам о сильной поверхностной релаксации [4], которые не имеет смысла обсуждать в рамках данной статьи.

Настоящая работа частично обсуждалась на семинаре LEPES (CNRS, Гренобль) и полностью — на семинаре по физике твердого тела (ФИАН, Москва). Один из авторов (В.В.Т.) выражает благодарность Ю.В. Копасеву и А.П. Шотову за полезную дискуссию и поддержку.

## Список литературы

- [1] V.G. Lifshitz, A.A. Saranin, A.V. Zotov. Surface Phases in Silicon. Wiley, Chichester (1994).
- [2] G. Santoro, S. Scandolo, E. Tosatti. Phys. Rev. **B59**, 3, 1891 (1999).
- [3] Б.А. Нестеренко, В.Г. Ляпин. Фазовые переходы на свободных гранях и межфазных границах в полупроводниках. Наук. думка, Киев (1990).
- [4] H.H. Weitering, X. Shi, P.D. Johnson. Phys. Rev. Lett. **78**, 10, 1331 (1997).
- [5] C. Hellberg, S. Ezwin. Phys. Rev. Lett. **83**, 5, 1003 (1999).
- [6] G.A. Allan, M. Lannoo. Surf. Sci. **63**, 1, 11 (1977).
- [7] В.Н. Меньшов, В.В. Тугушев. ЖЭТФ **104**, 5, 3848 (1993).
- [8] B.I. Halperin, T.M. Rice. Sol. Stat. Phys. **21**, 115 (1968).
- [9] F. Zhang, T.M. Rice. Phys. Rev. **B37**, 6, 3759 (1988).
- [10] M. Avignon, V. Tugushev. Phys. Lett. **A209**, 198 (1995).
- [11] P. Fazekas, P.W. Anderson. Phil. Mag. **30**, 423 (1974).