

АНТИФЕРРОМАГНИТНЫЙ ЭКСИТОННЫЙ ДИЭЛЕКТРИК

*В. В. Вальков**

*^a Институт физики им. Л. В. Киренского ФИЦ КНЦ
Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 5 апреля 2023 г.,
после переработки 25 апреля 2023 г.
Принята к публикации 29 апреля 2023 г.

Для оксидов иридия при учете сильных электронных корреляций (СЭК) и спин-орбитального взаимодействия получен эффективный двухзонный гамильтониан. Внутриаомные электронные корреляции в ионах иридия индуцируют формирование фермионов Хаббарда (ФХ), заполняющих состояния валентной зоны. Другое следствие СЭК связано с возникновением по механизму Андерсона обменного взаимодействия антиферромагнитного (АФМ) типа между ФХ. В результате в системе устанавливается дальний АФМ порядок, а в условиях перекрытия зон межузельное кулоновское взаимодействие индуцирует фазовый переход в состояние экситонного диэлектрика (ЭД) с дальним АФМ порядком. Система интегральных уравнений самосогласования, решение которой определяет компоненты экситонного параметра порядка $\Delta_{ij}(k)$, намагниченность подрешетки M , концентрацию фермионов Хаббарда n_d и химпотенциал μ , получена при использовании атомного представления, метода двухвременных температурных функций Грина и техники проецирования Цванцига–Мори. Проведена симметричная классификация фаз АФМ ЭД и показано, что в приближении ближайших соседей состояние с s -типом симметрии $\Delta_{ij}(k)$ соответствует основному состоянию, тогда как фазы с d - и p -типом симметрии являются метастабильными.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 95-летию Л. А. Прозоровой

DOI: 10.31857/S0044451023100073
EDN: XKMALP

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение материалов, в которых при понижении температуры происходит фазовый переход (ФП) в состояние с дальним антиферромагнитным порядком [1], привело к постановке ряда принципиальных задач, связанных с проявлением квантовых эффектов на макроскопическом уровне. Прежде всего это относится к проблеме основного состояния подсистемы спинов с АФМ упорядочением, к изучению влияния квантовых флуктуаций на установление равновесного значения намагниченности подрешетки [2], а также к исследованию поведения АФМ материалов в магнитном поле [3–5].

Проявление квантовой природы магнитного упорядочения значительно возрастает в материалах пониженной размерности [6], а также в соединениях

с треугольной решеткой магнитоактивных ионов. В этом случае из-за фрустрированных связей значительно возрастает влияние квантовых флуктуаций [7, 8], обуславливающих качественно новые особенности свойств антиферромагнетиков.

Наряду с изучением обычных диэлектриков с АФМ упорядочением с середины шестидесятых годов прошлого века тестировалась возможность реализации такого же магнитного порядка в материалах, в которых диэлектрическое состояние индуцировалось из полуметаллического по экситонному механизму электрон-дырочного спаривания.

Следует отметить, что спин-синглетный механизм электрон-дырочной связи, предложенный в работах [9–11], индуцировал фазу экситонного диэлектрика (ЭД) без магнитного порядка. Для реализации этого механизма должны были выполняться условия, связанные с топологическими особенностями изоэнергетических поверхностей электронов и дырок. Это ограничивало класс материалов, в которых фаза ЭД могла существовать и надежно идентифицироваться. Тем не менее, в последнее

* E-mail: vvv@iph.krasn.ru

время появились соединения, например Ta_2NiSe_5 , в которых экспериментальные данные по оптическим и тепловым свойствам [12] указывают на реализацию спин-синглетной фазы ЭД.

Один из возможных сценариев возникновения ЭД с дальним магнитным порядком основывался на спин-триплетном электрон-дырочном спаривании, сопровождающимся возникновением волны спиновой плотности (ВСП). Подробное изложение этого интересного вопроса содержится в обзоре [13].

Сообщение [14] об обнаружении в $Sr_3Ir_2O_7$ признаков формирования АФМ порядка по экситонному механизму стимулировало проведение исследований, направленных на изучение условий реализации фазы антиферромагнитного экситонного диэлектрика (АФМ ЭД).

$Sr_3Ir_2O_7$ относится к классу оксидов иридия, характеризующемуся общей формулой $Sr_{n+1}Ir_nO_{3n+1}$ с $n = 1, 2, \dots$. Эти соединения представляют значительный интерес, поскольку их физические свойства формируются при одновременном влиянии кристаллического поля, значительного спин-орбитального взаимодействия (СОВ) и сильных хаббардовских корреляций.

Вследствие большой пространственной протяженности $5d$ электронных состояний, формирующих терм иона иридия, его октаэдрическое окружение кислородными ионами приводит к настолько сильному понижению энергии отщепленного t_{2g} состояния, что она может стать соизмеримой с наибольшей энергией заполненных кислородных орбиталей. Это обеспечивает возможность перекрытия энергетических зон и создает благоприятные условия для реализации ЭД.

Известно, что СОВ может играть существенную роль в формировании нетривиальных свойств электронной энергетической структуры. В качестве примеров отметим топологические изоляторы [15, 16], квантовые спиновые жидкости [17], а также экситонные диэлектрики с $s + d$ -типом симметрии параметра порядка [18]. Особенность последнего случая определяется тем, что несмотря на тривиальность топологии энергетической структуры фермиевских состояний, в таких диэлектриках реализуются крайевые состояния.

В соединениях $Sr_{n+1}Ir_nO_{3n+1}$ сильное СОВ, модифицируя одноионный электронный базис состояний ионов иридия, приводит к образованию нижнего полностью занятого квартета и отщепленного, наполовину заполненного дублета с $J_{eff} = 1/2$ [19]. В результате состояния квартета перестают сказываться на характеристиках системы, а актуальными оста-

ются лишь состояния дублета. Это приводит к значительному упрощению модели электронной структуры обсуждаемых материалов из-за уменьшения размерности базиса гильбертова пространства.

Важно, что такая редукция сопровождается уменьшением ширины эффективной зоны [20], приводя к относительному увеличению параметра внутриатомного хаббардовского отталкивания. Эти факторы обеспечивают режим, когда одновременно проявляются эффекты СОВ и СЭК [21, 22].

Приведенные факторы позволяют сформулировать минимальную двухзонную модель электронной энергетической структуры оксида иридия. В ней СЭК индуцируют обменное взаимодействие антиферромагнитного типа и обеспечивают возможность реализации фазы антиферромагнитного экситонного диэлектрика. Такая модель позволяет рассмотреть принципиальные характеристики основного состояния электронной подсистемы $Sr_3Ir_2O_7$ в фазе АФМ ЭД и вычислить спектр элементарных возбуждений.

Статья построена следующим образом. В разд. 2 обосновывается возможность описания принципиальных особенностей формирования фазы АФМ ЭД в оксидах иридия в рамках минимальной двухзонной модели. В разд. 3 реализован переход к атомному представлению и эффективному гамильтониану, позволяющему учесть сильные электронные корреляции и записать обменное взаимодействие АФМ типа в подсистеме фермионов Хаббарда. Раздел 4 посвящен получению выражения для намагниченности подрешетки при учете вкладов, связанных с движением фермионов Хаббарда по решетке. В разд. 5 представлены уравнения для фермиевских функций Грина (ФГ) и введены компоненты экситонного параметра порядка (ЭПП). Вывод уравнений самосогласования для этих компонент приведен в разд. 6. В разд. 7 изложены результаты симметричной классификации решений системы интегральных уравнений самосогласования, позволяющие перейти от интегральных уравнений к трансцендентным для амплитуд ЭПП. В разд. 8 рассмотрено решение с s -типом симметрии параметра порядка, соответствующее основному состоянию системы, и проанализированы особенности спектра фермиевских возбуждений в фазе АФМ ЭД. Здесь же приводятся квазиимпульсные зависимости весовых вкладов в спектральную интенсивность фермиевской ФГ, позволяющие понять особенности формирования компонент ЭПП, которые приводят к возникновению диэлектрической щели с переходом системы в состояние АФМ ЭД. В разд. 9 резюмиро-

ваны итоги проведенных исследований.

2. ДВУХЗОННАЯ МОДЕЛЬ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ФЕРМИОНОВ

При рассмотрении структуры энергетического спектра фермиевских состояний и изучении возможности формирования состояния экситонного диэлектрика с дальним магнитным порядком удобно перейти к дырочному описанию, аналогично тому, как это принято в модели Эмери [23], используемой в теории купратных сверхпроводников. Учитывая отмеченные выше особенности $5d$ состояний четырехвалентных ионов иридия, находящихся в октаэдрическом окружении ионов кислорода, запишем в дырочном представлении минимальную модель $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$ в следующем виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_d + \hat{H}_a + \hat{V}, \quad (1)$$

где оператор

$$\hat{H}_d = \sum_f [\xi_d \hat{n}_f + U \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow}] + \sum_{ff'\sigma} t_{ff'} d_{f\sigma}^+ d_{f'\sigma} \quad (2)$$

описывает подсистему дырок, занимающих состояния на ионах иридия. Суммирование по индексам f проводится по тем узлам решетки, в которых находятся эти ионы. Фермиевские операторы $d_{f\sigma}^+$ ($d_{f\sigma}$) отражают процессы рождения (уничтожения) дырок на узлах f с проекцией спина $\sigma = \pm 1/2$, $\hat{n}_{f\sigma} = d_{f\sigma}^+ d_{f\sigma}$ — оператор числа дырок на узле f с проекцией спина σ . Величина $\xi_d = \varepsilon_d - \mu$ обозначает отсчитанную от химпотенциала μ энергию дырки на ионе иридия. Затравочная энергия такой дырки обозначена через ε_d , U — величина хаббардовского отталкивания, $t_{ff'}$ — интеграл перескока дырки между ионами иридия, находящихся на узлах f и f' . Нетрудно видеть, что оператор \hat{H}_d является гамильтонианом модели Хаббарда [24]. Соответственно этому, особенности фермиевских состояний этой подсистемы будут такими же, как и для модели Хаббарда.

Второе слагаемое гамильтониана (1)

$$\hat{H}_a = \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k - \mu) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \quad (3)$$

учитывает возможность заполнения дырками подсистемы состояний, возникших в результате коллективизации орбиталей ионов кислорода. Каждому такому состоянию, характеризующему квазиимпульсом k и проекцией спина σ , соответствует энергия

ε_k . Оператор $a_{k\sigma}^+$ ($a_{k\sigma}$), действуя на вектор состояния, приводит к рождению (уничтожению) дырки с квазиимпульсом k и проекцией спина σ .

Межузельное кулоновское взаимодействие дырок учитывается третьим слагаемым

$$\hat{V} = \sum_{f\delta} V \hat{n}_f \hat{n}_{f+\delta}, \quad (4)$$

в котором операторы числа дырок

$$\hat{n}_f = \sum_{\sigma} d_{f\sigma}^+ d_{f\sigma}, \quad \hat{n}_{f+\delta} = \sum_{\sigma} a_{f+\delta,\sigma}^+ a_{f+\delta,\sigma} \quad (5)$$

относятся к узлам ионов иридия и кислорода соответственно. Операторы $a_{f+\delta,\sigma}$ связаны с операторами $a_{k\sigma}$ обычным преобразованием Фурье. Вектор δ соединяет узел, где находится ион иридия с узлом, в котором находится ближайший ион кислорода. V — параметр, определяющий энергию межузельного кулоновского отталкивания дырок, находящихся на таких ионах.

Учитывая экспериментальные данные о реализации в $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$ при низких температурах антиферромагнитного упорядочения, а также вывод работы [20] по относительному уменьшению интенсивности перескоков фермионов между ионами иридия под влиянием СОВ, в дальнейшем будем рассматривать минимальную модель в режиме сильных корреляций, когда $U \gg |t_{ff'}|$.

Как известно, в этом случае использование операторов $d_{f\sigma}$ становится неэффективным, поскольку необходимо строго учитывать сильное взаимодействие, операторная структура которого отражается произведением четырех операторов. Эта трудность преодолевается переходом к атомному представлению, в котором оператор хаббардовского отталкивания фермионов на одном узле приобретает диагональный вид. При этом оператор перескоков выступает в роли оператора взаимодействия.

3. ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТониАН МИНИМАЛЬНОЙ МОДЕЛИ В РЕЖИМЕ СИЛЬНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ

Переходя к атомному представлению для подсистемы дырок ионов иридия, заметим, что в рассматриваемом случае число таких дырок в расчете на один ион иридия не превышает единицу. Поскольку оператор \hat{H}_d соответствует гамильтониану Хаббарда, то можно воспользоваться хорошо известным утверждением о том, что в сильно коррелированном режиме модели Хаббарда соответствует t – J –модель

[25–27], в которой фермиевские состояния описываются нижней хаббардовской подзоной.

Эффективный гамильтониан полученный, по операторной форме теории возмущений [28, 30], записывается в виде

$$H_{eff} = H_0 + \hat{T} + \hat{J} + \hat{V}, \quad (6)$$

где оператор

$$H_0 = \sum_{f\sigma} (\varepsilon_d - \mu) X_f^{\sigma\sigma} + \sum_{k\sigma} (\varepsilon_{ak} - \mu) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} \quad (7)$$

описывает невзаимодействующие фермионы Хаббарда и отмеченные выше коллективизированные фермионы, способные распространяться по состояниям ионов кислорода.

Здесь и в дальнейшем используются операторы Хаббарда [31]:

$$X_f^{\sigma\sigma}, X_f^{0\sigma}, X_f^{\sigma 0}, X_f^{\sigma\bar{\sigma}}, \bar{\sigma} = -\sigma, \quad (8)$$

действующие в гильбертовом подпространстве состояний узла с номером f . Недиагональный оператор фермиевского типа $X_f^{0\sigma}$ описывает переход иона в узле f из однодырочного состояния с проекцией спина σ в состояние без дырки. Обратный процесс описывается эрмитово сопряженным оператором $X_f^{\sigma 0}$.

Диагональный оператор Хаббарда $X_f^{\sigma\sigma}$ осуществляет проецирование на однодырочное состояние с проекцией спина σ в узле f , а X_f^{00} проецирует на состояние без дырки в том же узле. Для этих операторов выполняется условие полноты $X_f^{\sigma\sigma} + X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} + X_f^{00} = 1$.

Оператор

$$\hat{T} = \sum_{ff'\sigma} t_{ff'} X_f^{\sigma 0} X_{f'}^{0\sigma} \quad (9)$$

соответствует учету процессов перескоков хаббардовских фермионов между ионами иридия. Заметим, что из-за сложных соотношений антикоммутиации между операторами Хаббарда в подсистеме фермионов, занимающих электронные состояния на ионах иридия, реализуется кинематическое взаимодействие [32–34].

Возникающее во втором порядке по параметру малости $t_{ff'}/U$ дополнительное взаимодействие между фермионами Хаббарда, находящимися на разных ионах иридия, описывается оператором

$$\hat{J} = \frac{1}{2} \sum_{ff'\sigma} J_{ff'} \left(\vec{S}_f \vec{S}_{f'} - \frac{1}{4} \hat{n}_f \hat{n}_{f'} \right), \quad (10)$$

где величина обменного взаимодействия определяется обычным выражением

$$J_{ff'} = 2 \frac{|t_{ff'}|^2}{U}.$$

Оператор \hat{J} , как нетрудно видеть из его структуры, будет инициировать переход системы в фазу с дальним АФМ упорядочением.

Слагаемое эффективного гамильтониана \hat{V} определяется тем же выражением (4), с той лишь разницей, что оператор числа фермионов на ионе иридия в атомном представлении имеет иной вид

$$\hat{n}_f = \sum_{\sigma} X_f^{\sigma\sigma}. \quad (11)$$

4. КВАЗИСПИНОВЫЕ ФУНКЦИИ ГРИНА, СПЕКТР МАГНОНОВ И НАМАГНИЧЕННОСТЬ ПОДРЕШЕТКИ

Одна из особенностей рассматриваемой модели связана с тем, что обменное взаимодействие реализуется в подсистеме сильно коррелированных фермионов Хаббарда, которые участвуют как в переносе заряда, так и в динамике спиновой подсистемы. Из-за этой внутренней связи зарядовых и спиновых степеней свободы следует ожидать, что на характеристики магнитной подсистемы, например, намагниченности подрешетки, будут влиять детали электронной структуры двух зон. При этом будет и обратный эффект, обусловленный влиянием АФМ упорядочения на спектр фермиевских возбуждений. Сказанное означает, что решение задачи о намагниченности подрешетки должно выполняться одновременно с нахождением характеристик фермиевской подсистемы. Соответствующие уравнения будут рассмотрены в следующем параграфе.

Прежде чем переходить к непосредственному выводу уравнения для намагниченности подрешетки, входящего в полную систему интегральных уравнений самосогласования, заметим что спиновая динамика определяется в основном низкоэнергетическими возбуждениями, каковыми являются антиферромагнитные магноны. Соответственно этому, для описания магнитной подсистемы необходимо использовать операторы Хаббарда, соответствующие спиновым степеням свободы.

Для вычисления спектра магнитных возбуждений и намагниченности подрешетки в АФМ фазе воспользуемся методом двухвременных температурных функций Грина [28–30]. В качестве динамических переменных в этих ФГ выступают операторы

Хаббарда, соответствующие одноионным переходам без изменения числа фермионов, но с изменением спинового состояния. Эта специфика проявляется как в кинематических соотношениях при получении уравнений движения для ФГ, так и в динамике.

С учетом сказанного, изучение динамических, спектральных и термодинамических характеристик подсистемы спиновых степеней свободы экситонного антиферромагнетика проведем с помощью квазиспиновых ФГ, которые в квазиимпульсном представлении записываются в виде

$$\begin{aligned} G_{11}(k, \omega) &= \langle\langle S_k^+ | S_k^- \rangle\rangle, \\ G_{21}(k, \omega) &= \langle\langle S_{k-Q}^+ | S_k^- \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

Оператор S_k^+ связан с операторами Хаббарда $X_f^{\uparrow\downarrow}$ посредством преобразования Фурье

$$S_k^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_f \exp(-ikf) X_f^{\uparrow\downarrow}. \quad (13)$$

При этом $S_k^- = (S_k^+)^+$.

Оператор $X_f^{\uparrow\downarrow}$, действуя на состояние в узле с номером f и проекцией спина $-1/2$, переводит его в состояние с проекцией спина $+1/2$.

Уравнения движения для введенных ФГ, полученные при использовании техники проецирования Цванцига–Мори [35, 36], могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} (\omega - \Sigma_{11}^{(M)}(k)) G_{11}(k, \omega) &= \Sigma_{12}^{(M)}(k) G_{21}(k, \omega), \\ (\omega - \Sigma_{22}^{(M)}(k)) G_{21}(k, \omega) &= 4M^2 + \\ &+ \Sigma_{21}^{(M)}(k) G_{11}(k, \omega), \end{aligned} \quad (14)$$

где использование индекса M у компонент массового оператора $\Sigma_{11}^{(M)}(k)$ обусловлено необходимостью отличить их от компонент массового оператора для применяемых в дальнейшем фермионных ФГ. Вычисление этих компонент приводит к выражениям

$$\begin{aligned} \Sigma_{11}^{(M)}(k) &= \Sigma_{11}^T(k), \\ \Sigma_{22}^{(M)}(k) &= \Sigma_{22}^T(k), \\ \Sigma_{12}^{(M)}(k) &= 2M(J_{k-Q} - J_Q) + \Sigma_{12}^T(k), \\ \Sigma_{21}^{(M)}(k) &= 2M(J_k - J_Q) + \Sigma_{21}^T(k), \end{aligned} \quad (15)$$

в которых $\Sigma_{ij}^T(k)$ определяются вкладами, связанными с перескоками фермионов Хаббарда по узлам

решетки

$$\begin{aligned} \Sigma_{11}^T(k) &= \frac{1}{2MN} \times \\ &\times \sum_q [t_{k+q-Q} - t_{q-Q} - t_{k-Q} + t_q] L_q(Q), \\ \Sigma_{22}^T(k) &= \frac{1}{2MN} \times \\ &\times \sum_q [t_{k+q} + t_q - t_{k-q-Q} - t_{q+Q}] L_q(-Q), \\ \Sigma_{12}^T(k) &= \frac{1}{2MN} \times \\ &\times \sum_q (t_{k+q} + t_{k-q} - 2t_q) \langle N_q \rangle, \\ \Sigma_{21}^T(k) &= \frac{1}{2MN} \times \\ &\times \sum_q (t_{k-Q+q} + t_{k-Q-q} - 2t_q) \langle N_q \rangle. \end{aligned} \quad (16)$$

Термодинамические средние, входящие в эти формулы, имеют вид

$$\begin{aligned} L_q(Q) &= \langle X_{q+Q, \uparrow}^+ X_{q, \uparrow} \rangle, \\ N_q &= \langle X_{q, \uparrow}^+ X_{q, \uparrow} \rangle. \end{aligned} \quad (17)$$

Из системы (14) получаем искомые ФГ:

$$G_{11}(k, \omega) = \frac{2M \Sigma_{12}^{(M)}(k)}{\det(k, \omega)}, \quad (18)$$

$$G_{12}(k, \omega) = \frac{2M [2M\omega - \Sigma_{11}^{(M)}(k)]}{\det(k, \omega)}, \quad (19)$$

где

$$\det(k, \omega) = [\omega - \Sigma_{11}^{(M)}] [\omega - \Sigma_{22}^{(M)}] - \Sigma_{12}^{(M)} \Sigma_{21}^{(M)}. \quad (20)$$

В этом выражении у компонент массового оператора для сокращения записи не указана зависимость от квазиимпульса.

При использовании спектральной теоремы полученные соотношения позволяют найти уравнение для вычисления намагниченности подрешетки

$$M(T) = \frac{n_d}{2\beta(T)}, \quad (21)$$

в котором величину $\beta(T)$ удобно представить в виде

$$\beta(T) = \beta_0 + \beta_T. \quad (22)$$

Первое слагаемое

$$\beta_0 = \frac{1}{N} \sum_q r_q, \quad (23)$$

в котором

$$\begin{aligned} r_q &= \frac{\Sigma_{12}^{(M)}(q) + d_q}{\nu_q}, \\ d_q &= \frac{\Sigma_{22}^{(M)}(q) - \Sigma_{11}(q)}{2}, \end{aligned} \quad (24)$$

определяет уменьшение намагнитченности подрешетки при нулевой температуре за счет квантовых флуктуаций. Второе слагаемое, связанное с температурным влиянием, имеет вид

$$\beta_T = \frac{1}{N} \sum_q \{ (r_q + 1) f_B(\Omega_q^+ / T) + (r_q - 1) f_B(\Omega_q^- / T) \}.$$

Входящие в это выражение две ветви спектра антиферромагнитных магнонов задаются формулами

$$\Omega_q^\pm = \nu_q \pm (\Sigma_{11}^{(M)}(q) + \Sigma_{22}^{(M)}(q)) / 2, \quad (25)$$

$$\nu_q = \{ (d_q)^2 + \Sigma_{12}^{(M)}(q) \Sigma_{21}^{(M)}(q) \}^{(1/2)}. \quad (26)$$

а

$$f_B(x) = \{ \exp(x) - 1 \}^{-1}$$

— функция распределения Бозе-Эйнштейна.

В предельном случае обычного диэлектрического состояния, когда перекрытие зоны проводимости и валентной зоны отсутствует, вклады, связанные с перескоками, обращаются в нуль. Тогда $\Sigma_{11}^{(M)} = 0$, $\Sigma_{22}^{(M)} = 0$, а $\Sigma_{12}^{(M)}$ и $\Sigma_{21}^{(M)}$ определяются только обменным взаимодействием:

$$\begin{aligned} \Sigma_{12}^{(M)}(q) &= 2M(J_0 - J_q), \\ \Sigma_{21}^{(M)}(q) &= 2M(J_0 + J_q), \end{aligned} \quad (27)$$

где J_q выражается обычным образом через константы $J(h)$, задающие величины обменных взаимодействий между спинами, находящимися в узлах, связанных вектором h ,

$$J_q = \sum_h J(h) \exp(iqh). \quad (28)$$

При этом

$$\beta_0 = \frac{1}{N} \sum_q \frac{J_0 - J_q}{\sqrt{J_0^2 - J_q^2}}. \quad (29)$$

В приближении ближайших соседей, число которых равно z ,

$$\beta_0 = \frac{1}{N} \sum_q \frac{1 - \gamma_q}{\sqrt{1 - \gamma_q^2}}, \quad \gamma_q = \frac{1}{z} \sum_h \exp(iqh). \quad (30)$$

В частности, для квадратной решетки получаем известный результат $\beta_0 = 1.32$. При этом уменьшенное за счет квантовых флуктуаций значение намагнитченности $M = 0.33$.

Уравнение для намагнитченности подрешетки (21) входит в систему уравнений самосогласования, определяющих фазу антиферромагнитного экситонного диэлектрика.

5. ФУНКЦИИ ГРИНА ФЕРМИОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ И КОМПОНЕНТЫ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА ЭКСИТОННОГО ДИЭЛЕКТРИКА С АФМ УПОРЯДОЧЕНИЕМ

Вывод уравнений самосогласования, описывающих фазу с антиферромагнитным упорядочением и отличными от нуля ЭПП, проведем с помощью функций Грина, построенных на операторах Хаббарда квазифермиевского типа.

Принимая во внимание двухзонность системы и наличие АФМ порядка, введем четырехкомпонентный оператор фермиевского типа

$$\hat{\Psi}_{k\sigma} = (X_{k\sigma}, a_{k\sigma}, X_{k-Q,\sigma}, a_{k-Q,\sigma}). \quad (31)$$

Здесь $X_{k\sigma}$ соответствует операторам $X_f^{0\sigma}$ и связан с ними посредством преобразования Фурье:

$$X_f^{0\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikf} X_{k\sigma}. \quad (32)$$

Аналогичное соотношение имеет место и для оператора $X_{k-Q,\sigma}$, если в нем сделать очевидную ренормировку для квазиимпульса $k \rightarrow k - Q$.

Введение вектора Q обусловлено необходимостью учета отмеченного антиферромагнитного упорядочения в подсистеме фермионов Хаббарда:

$$\langle S_f^z \rangle = \frac{1}{2} \langle X_f^{\uparrow\uparrow} - X_f^{\downarrow\downarrow} \rangle = M \exp(iQf), \quad (33)$$

где амплитуда M соответствует намагнитченности антиферромагнитной подрешетки. В случае двух измерений $Q = (\pi, \pi)$, а для трехмерной структуры предполагается, что $Q = (\pi, \pi, \pi)$.

Используя четырехкомпонентные операторы (31), определим матричную функцию Грина

$$\hat{G}^\sigma(k, t - t') = -i\theta(t - t') \langle \{ \hat{\Psi}_{k\sigma}(t), \hat{\Psi}_{k\sigma}^\dagger(t') \}_+ \rangle, \quad (34)$$

знание которой позволит описать спектральные и термодинамические характеристики подсистемы фермиевских степеней свободы антиферромагнитного ЭД.

В (34), как обычно, $\hat{\Psi}_{k\sigma}(t)$ — оператор в гейзенберговском представлении, взятый в момент времени t , $\hat{\Psi}_{k\sigma}^+(t')$ — эрмитово-сопряженный оператор в момент времени t' ; $\theta(t - t')$ — единичная функция Хевисайда. Угловые скобки означают, что для стоящего внутри них антикоммутатора $\{\hat{\Psi}_{k\sigma}(t), \hat{\Psi}_{k\sigma}^+(t')\}_+$ проводится операция статистического усреднения.

Воспользовавшись техникой проецирования Цванцига–Мори [35, 36] для операторов, возникающих после коммутации $[\hat{\Psi}_{k\sigma}, \hat{H}]_-$, получим, что система уравнений для фурье-образа ФГ, определяемой посредством интегрального преобразования

$$\hat{G}^\sigma(k, t) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega \exp(-i\omega t) \hat{G}^\sigma(k, \omega), \quad (35)$$

в краткой форме может быть представлена в виде матричного уравнения

$$[\omega \hat{I} - \hat{\Sigma}^\sigma(k)] \hat{G}^\sigma(k, \omega) = \hat{S}^\sigma. \quad (36)$$

Здесь \hat{I} — единичная матрица 4×4 , а \hat{S} — матрица, элементами которой являются средние значения антикоммутаторов от компонент операторов $\hat{\Psi}_{k\sigma}$ и $\hat{\Psi}_{k\sigma}^+$:

$$(\hat{S}^\sigma)_{ij} = \langle \{\hat{\Psi}_{i;k\sigma}, \hat{\Psi}_{j;k\sigma}^+\}_+ \rangle. \quad (37)$$

Следует подчеркнуть, что в фазе с АФМ упорядочением матрица \hat{S} содержит отличные от нуля недиагональные элементы и имеет вид

$$\hat{S}^\sigma = \begin{pmatrix} 1 - n_d/2 & 0 & \eta_\sigma M & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \eta_\sigma M & 0 & 1 - n_d/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

где

$$n_d = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle X_{k\sigma}^+ X_{k\sigma} \rangle \quad (38)$$

обозначает среднее число фермионов Хаббарда, приходящихся на одну элементарную ячейку, M — определенная в (33) намагниченность подрешетки. Зависящая от проекции спина функция η_σ задается следующим образом:

$$\eta_\sigma = 2\sigma, \quad \sigma = \pm(1/2). \quad (39)$$

Недиагональность матрицы \hat{S} , являющаяся следствием неортогональности системы базисных операторов (31), существенно сказывается на виде

коэффициентов в уравнениях движения для ФГ. Учет этого обстоятельства обеспечивает выполнение необходимых аналитических свойств этих функций.

Входящая в (36) матрица $\hat{\Sigma}^\sigma(k)$ находится с помощью уравнения

$$\hat{\Sigma}^\sigma(k) = \hat{D}^\sigma(k) [\hat{S}^\sigma]^{-1}, \quad (40)$$

в котором элементы динамической матрицы $\hat{D}^\sigma(k)$ вычисляются через среднее от антикоммутатора $[\hat{\Psi}_{i;k\sigma}, \hat{H}]_-$ с операторами, входящими в $\hat{\Psi}_{j;k\sigma}^+$,

$$\hat{D}_{ij}^\sigma(k) = \langle \{[\hat{\Psi}_{i;k\sigma}, \hat{H}]_-, \hat{\Psi}_{j;k\sigma}^+\}_+ \rangle. \quad (41)$$

Индексы i и j пробегает значения от 1 до 4, при этом $\hat{\Psi}_{j;k\sigma}^+$ — оператор, эрмитово-сопряженный по отношению к оператору, стоящему под номером j в списке (31).

Не останавливаясь на деталях простых, но громоздких вычислений, приведем окончательный результат:

$$\hat{\Sigma}^\sigma(k) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{dk} & \Delta_{21}^\sigma(k) & u_{\sigma kQ} & \Delta_{41}^\sigma(k) \\ \Sigma_{21}^\sigma(k) & \varepsilon_{ak} & \Sigma_{23}^\sigma(k) & 0 \\ u_{\sigma k} & \Delta_{23}^\sigma(k) & \varepsilon_{dkQ} & \Delta_{43}^\sigma(k) \\ \Sigma_{41}^\sigma(k) & 0 & \Sigma_{43}^\sigma(k) & \varepsilon_{akQ} \end{pmatrix},$$

где использованы следующие обозначения для энергетических величин:

$$\varepsilon_{dk} = \varepsilon_d + (1 - n_d/2)t_{dk}, \quad u_{\sigma k} = \eta_\sigma M(J_Q + t_{dk}), \quad (42)$$

$$\varepsilon_{dkQ} = \varepsilon_d + (1 - n_d/2)t_{dkQ}, \quad t_{dkQ} = t_{d,k-Q}, \quad (43)$$

$$u_{\sigma kQ} = \eta_\sigma M(J_Q + t_{dkQ}), \quad \varepsilon_{akQ} = \varepsilon_{d,k-Q}. \quad (44)$$

ЭПП определяются следующим образом:

$$\Delta_{21}^\sigma(k) = -\frac{1}{N} \sum_q V_{k-q} \langle a_{q\sigma}^+ X_{q\sigma} \rangle,$$

$$\Delta_{41}^\sigma(k) = -\frac{1}{N} \sum_q V_{k-q} \langle a_{q-Q\sigma}^+ X_{q\sigma} \rangle,$$

$$\Delta_{23}^\sigma(k) = -\frac{1}{N} \sum_q V_{k-q} \langle a_{q\sigma}^+ X_{q-Q\sigma} \rangle, \quad (45)$$

$$\Delta_{43}^\sigma(k) = -\frac{1}{N} \sum_q V_{k-q} \langle a_{q-Q\sigma}^+ X_{q-Q\sigma} \rangle.$$

Из этих формул следует, что компоненты ЭПП представляются в виде суперпозиции средних от произведения фермионов Хаббарда с обычными фермионами. С этим связана специфика возникновения экситонной фазы в сильно коррелированной системе, поскольку одноузельное кулоновское взаимодействие приводит к отщеплению верхней хаббардовской подзоны. В результате динамика носителей тока определяется только фермионами нижней

хаббардовской подзоны. Сказанное означает, что экситонное спаривание происходит между сильно коррелированными фермионами Хаббарда и обычными фермионами, а интенсивность спаривания пропорциональна межузельному кулоновскому взаимодействию. Из определений ЭПП видно, что $\Delta_{ij}^\sigma(k) = (\Delta_{ji}^\sigma(k))^*$.

Через введенные компоненты ЭПП выражаются матричные элементы:

$$\begin{aligned}\Sigma_{21}^\sigma(k) &= [(1 - n_d/2)\Delta_{12}^\sigma(k) - \eta_\sigma M \Delta_{32}^\sigma(k)]/L, \\ \Sigma_{23}^\sigma(k) &= [(1 - n_d/2)\Delta_{32}^\sigma(k) - \eta_\sigma M \Delta_{12}^\sigma(k)]/L, \\ \Sigma_{41}^\sigma(k) &= [(1 - n_d/2)\Delta_{14}^\sigma(k) - \eta_\sigma M \Delta_{34}^\sigma(k)]/L, \\ \Sigma_{43}^\sigma(k) &= [(1 - n_d/2)\Delta_{34}^\sigma(k) - \eta_\sigma M \Delta_{14}^\sigma(k)]/L,\end{aligned}\quad (46)$$

где величина L равна определителю матрицы \hat{S}^σ :

$$L = (1 - n_d/2)^2 - M^2. \quad (47)$$

6. УРАВНЕНИЯ САМОСОГЛАСОВАНИЯ ДЛЯ ЭКСИТОННОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА

Определения (45) показывают, что получение явного вида уравнений самосогласования для компонент ЭПП связано с вычислением средних от произведения фермиевских операторов и операторов, соответствующих фермионам Хаббарда. Эти средние находятся по спектральной теореме [28, 29] при использовании соответствующих ФГ. В частности,

$$\langle a_{q\sigma}^+ X_{q\sigma} \rangle = \int \frac{d\omega}{e^{\beta\omega} + 1} \left[-\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{12}^\sigma(q, \omega + i\delta) \right], \quad (48)$$

$$\langle a_{q\sigma}^+ X_{q-Q\sigma} \rangle = \int \frac{d\omega}{e^{\beta\omega} + 1} \left[-\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{32}^\sigma(q, \omega + i\delta) \right], \quad (49)$$

где $\beta = 1/T$, T — температура системы, $\delta \rightarrow +0$.

Аналогичным образом вычисляются средние $\langle a_{q-Q\sigma}^+ X_{q\sigma} \rangle$ и $\langle a_{q-Q\sigma}^+ X_{q-Q\sigma} \rangle$, с той лишь разницей, что индексы (12) и (32) у матричных элементов ФГ должны быть заменены на индексы (14) и (34), соответственно.

Подстановка найденных средних в (45) приводит к интегральным уравнениям самосогласования для компонент ЭПП. Анализ показал, что фаза АФМ ЭД реализуется при отличных от нуля компонентах $\Delta_{21}^\sigma(k)$ и $\Delta_{23}^\sigma(k)$, тогда как две другие компоненты $\Delta_{41}^\sigma(k)$ и $\Delta_{43}^\sigma(k)$ равны нулю. Это связано с тем, что в подынтегральных выражениях для этих компонент особенности знаменателей, обусловленные близостью энергий второй и третьей ветвей спектра

фермиевских возбуждений в центре и на краях зоны Бриллюэна, компенсируется множителями, входящими в числители отмеченных выражений. Поэтому условие спаривания фермионов, обеспечивающее конечность параметров Δ_{41} и $\Delta_{43}^\sigma(k)$, становится невыполнимым.

Учитывая сказанное, получаем, что матрица $\hat{\Sigma}^\sigma(k)$ принимает более простой вид, а необходимые для получения уравнений самосогласования ФГ определяются выражениями

$$G_{12}^\sigma(k, \omega) = \frac{(\omega - \varepsilon_{dkQ})\Delta_{21}^\sigma(k) + u_{\sigma kQ}\Delta_{23}^\sigma(k)}{\det_3(k, \omega)}, \quad (50)$$

$$G_{32}^\sigma(k, \omega) = \frac{(\omega - \varepsilon_{dk})\Delta_{23}^\sigma(k) + u_{\sigma k}\Delta_{21}^\sigma(k)}{\det_3(k, \omega)}, \quad (51)$$

где $\det_3(k, \omega)$ — детерминант третьего порядка, составленный из элементов матрицы $\hat{\Sigma}^\sigma(k)$, имеет вид

$$\begin{aligned}\det_3(k, \omega) &= (\omega - \varepsilon_{dk})(\omega - \varepsilon_{ak})(\omega - \varepsilon_{dkQ}) - \\ &\quad - (\omega - \varepsilon_{dk})\Delta_{23}^\sigma\Sigma_{23}^\sigma - (\omega - \varepsilon_{dkQ})\Delta_{21}^\sigma\Sigma_{21}^\sigma - \\ &\quad - (\omega - \varepsilon_{ak})u_{\sigma k}u_{\sigma kQ} - u_{\sigma k}\Delta_{21}^\sigma\Sigma_{23}^\sigma - u_{\sigma kQ}\Delta_{23}^\sigma\Sigma_{21}^\sigma.\end{aligned}\quad (52)$$

В этом выражении указание на зависимость величин $\Delta_{ij}^\sigma(k)$ и $\Sigma_{ij}^\sigma(k)$ от квазиимпульса для краткости записи отсутствует.

Применение спектральной теоремы приводит к двум интегральным уравнениям самосогласования:

$$\Delta_{21}^\sigma(k) = \frac{-1}{N} \sum_q V_{k-q} [\Phi_{3q}\Delta_{21}^\sigma(q) + u_{\sigma qQ}F_q\Delta_{23}^\sigma(q)], \quad (53)$$

$$\Delta_{23}^\sigma(k) = \frac{-1}{N} \sum_q V_{k-q} [\Phi_{1q}\Delta_{23}^\sigma(q) + u_{\sigma q}F_q\Delta_{21}^\sigma(q)].$$

В этих уравнениях использованы три функции, через которые проявляются температурные зависимости компонент ЭПП и других термодинамических величин.

Первая функция F_q определяется через сумму трех слагаемых

$$F_q = \sum_{i=1}^3 \varphi_{iq}, \quad (54)$$

каждое из которых связано с функцией распределения Ферми–Дирака и комбинациями разностей энергий трех ветвей фермиевского спектра:

$$\begin{aligned}\varphi_{1q} &= \frac{f[(E_{1q} - \mu)/T]}{(E_{1q} - E_{2q})(E_{1q} - E_{3q})}, \\ \varphi_{2q} &= \frac{f[(E_{2q} - \mu)/T]}{(E_{2q} - E_{1q})(E_{2q} - E_{3q})}, \\ \varphi_{3q} &= \frac{f[(E_{3q} - \mu)/T]}{(E_{3q} - E_{1q})(E_{3q} - E_{2q})}.\end{aligned}\quad (55)$$

Энергии E_{1q}, E_{2q}, E_{3q} находятся из решения дисперсионного уравнения

$$\det_3(q, E_{iq}) = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (56)$$

и могут быть записаны в следующем виде:

$$\begin{aligned} E_{1q} &= -W_q/2 - \lambda_q - a_q/3, \\ E_{2q} &= -W_q/2 + \lambda_q - a_q/3, \\ E_{3q} &= W_q - a_q/3. \end{aligned} \quad (57)$$

Входящие в эти формулы функции квазиимпульса

$$\begin{aligned} W_q &= Z_q - P_q/Z_q, \quad Z_q = \left(\sqrt{Q_q^2 + P_q^3} - Q_q \right)^{1/3}, \\ \lambda_q &= \sqrt{-3P_q - 3W_q^2/4} \end{aligned} \quad (58)$$

связаны с исходными энергетическими величинами через соотношения

$$\begin{aligned} P_q &= \frac{1}{3}(b_q - a_q^2/3), \quad Q_q = (c_q + 2a_q^3/27 - a_q b_q/3)/2, \\ a_q &= -(\varepsilon_{aq} + \varepsilon_{dq} + \varepsilon_{dqQ}), \\ b_q &= \varepsilon_{aq}\varepsilon_{dq} + \varepsilon_{dq}\varepsilon_{dqQ} + \varepsilon_{aq}\varepsilon_{dqQ} - \\ &\quad - u_{\sigma q}u_{\sigma qQ} - \Delta_{23}\Sigma_{23} - \Delta_{21}\Sigma_{21}, \\ c_q &= -\varepsilon_{aq}\varepsilon_{dq}\varepsilon_{dqQ} + \varepsilon_{aq}u_{\sigma q}u_{\sigma qQ} + \varepsilon_{dq}\Delta_{23}\Sigma_{23} + \\ &\quad + \varepsilon_{dqQ}\Delta_{21}\Sigma_{21} - u_{\sigma q}\Delta_{21}\Sigma_{23} - u_{\sigma qQ}\Delta_{23}\Sigma_{21}. \end{aligned} \quad (59)$$

Две другие функции, входящие в (53), также представляются суммой трех слагаемых, каждое из которых содержит дополнительный энергетический множитель:

$$\begin{aligned} \Phi_{1q} &= \sum_{i=1}^3 (E_{iq} - \varepsilon_{dq})\varphi_{iq}, \\ \Phi_{3q} &= \sum_{i=1}^3 (E_{iq} - \varepsilon_{dqQ})\varphi_{iq}. \end{aligned} \quad (61)$$

Из представленных уравнений следует, что входящие в них выражения зависят, кроме компонент ЭПП и намагнитченности подрешетки, также и от концентрации фермионов Хаббарда n_d . Для получения уравнения, определяющего эту величину, заметим, что в рассматриваемой системе полное число дырок в расчете на одну ячейку равно 1. Это означает, что дополнительное уравнение, определяющее положение химпотенциала, имеет вид

$$n_d + n_a = 1. \quad (62)$$

Нахождение явных выражений для входящих в это уравнение величин связано с использованием фермионных ФГ:

$$G_{11}^\sigma(k, \omega) = \frac{(1 - n_d/2)a_{11}(k, \omega) + \eta_\sigma M a_{31}(k, \omega)}{\det_3(k, \omega)}, \quad (63)$$

$$G_{22}^\sigma(k, \omega) = \frac{(\omega - \varepsilon_{dk})(\omega - \varepsilon_{dkQ}) - u_{\sigma k}u_{\sigma kQ}}{\det_3(k, \omega)}, \quad (64)$$

в которых

$$\begin{aligned} a_{11}(k, \omega) &= \\ &= (\omega - \varepsilon_{ak})(\omega - \varepsilon_{dkQ}) - \Sigma_{23}^\sigma(k)\Delta_{23}^\sigma(k), \\ a_{31}(k, \omega) &= \\ &= (\omega - \varepsilon_{ak})u_{\sigma kQ} + \Sigma_{23}^\sigma(k)\Delta_{21}^\sigma(k). \end{aligned} \quad (65)$$

Применение спектральной теоремы приводит к искомому выражениям для n_d и n_a :

$$n_d = \frac{(1 - n_d/2)}{N} \sum_{q\sigma} P_d(q) + \frac{M}{N} \sum_{q\sigma} \eta_\sigma R_{d\sigma}(q), \quad (66)$$

$$n_a = \frac{1}{N} \sum_{q\sigma} \sum_{j=1}^3 U_j(q)\phi_{jq}. \quad (67)$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$P_d(q) = \sum_{j=1}^3 a_{11}(q, E_{jq})\varphi_{jq}, \quad (68)$$

$$R_d(q) = \sum_{j=1}^3 a_{31}(q, E_{jq})\varphi_{jq}. \quad (69)$$

$$U_j(q) = [(E_{jq} - \varepsilon_{dq})(E_{jq} - \varepsilon_{dqQ}) - u_{\sigma q}u_{\sigma qQ}]. \quad (70)$$

Два интегральных уравнения самосогласования (53) совместно с уравнениями (21), (66) и (67) образуют замкнутую систему, описывающую область реализации экситонной фазы с дальним АФМ упорядочением, температурную эволюцию компонент ЭПП, а также связь характеристик фазы АФМ ЭД с исходными параметрами модели. Конкретная зависимость компонент ЭПП от квазиимпульса (тип симметрии) определяется ядром интегрального уравнения и условием наименьшего значения энергии получающейся фазы.

7. СИММЕТРИЙНАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ ФАЗ

При дальнейшем анализе допустимых решений отмеченной системы уравнений ограничимся рассмотрением двумерной решетки. В этом случае точечная группа симметрии имеет два одномерных и два двумерных комплексно сопряженных неприводимых представления (НП).

В приближении ближайших соседей базисные функции одномерных НП имеют вид

$$\begin{aligned}\varphi_s(k) &= \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2}, \quad s - \text{тип симметрии,} \\ \varphi_d(k) &= \sin \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y}{2}, \quad d - \text{тип симметрии.}\end{aligned}\quad (71)$$

Для двумерного НП базисная функция p типа симметрии характеризуется более сложной зависимостью от квазиимпульса [18]:

$$\varphi_{p\sigma}(k) = (\eta_\sigma - i) \sin \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2} + (\eta_\sigma + i) \cos \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y}{2}.$$

Ее существенное свойство обусловлено тем, что при замене $\sigma \rightarrow -\sigma$ получаем $\varphi_{p\sigma}(k) \rightarrow \varphi_{p\sigma}^*(k)$.

Возможность реализации решения с таким типом симметрии параметра порядка имеет особое значение, поскольку возникающая при этом фаза АФМ ЭД характеризуется нетривиальной топологией энергетической структуры, т. е. соответствует топологическому изолятору с дальним АФМ порядком. Интерес к таким состояниям значительно возрос после работ [37–39], указывающих на реализацию в MnBi_2Te_4 состояния антиферромагнитного топологического изолятора.

Проведем разложение входящего в ядро интегрального уравнения фурье-образа потенциала кулоновского взаимодействия

$$V_{k-q} = 4V \cos \frac{(k_x - q_x)}{2} \cos \frac{(k_y - q_y)}{2} \quad (72)$$

по функциям НП:

$$\begin{aligned}V_{k-q} &= V [4\varphi_s(k)\varphi_s(q) + 4\varphi_d(k)\varphi_d(q) + \\ &+ \varphi_{p\sigma}^*(k)\varphi_{p\sigma}(q) + \varphi_{p\sigma}(k)\varphi_{p\sigma}^*(q)]\end{aligned}\quad (73)$$

Поскольку базисные функции НП ортогональны между собой, для решений системы (53) можно провести классификацию по трем отмеченным выше типам симметрии. При этом квазиимпульсные зависимости ЭПП для каждого типа симметрии можно записать в едином виде:

$$\begin{aligned}\Delta_{21}^\sigma(k) &= \Delta_{\nu 1} \varphi_\nu(k), \\ \Delta_{23}^\sigma(k) &= \eta_\sigma \Delta_{\nu 2} \varphi_\nu(k),\end{aligned}\quad (74)$$

где индекс ν принимает одно из трех значений: s , d , p .

Обратим внимание на то, что для s - и d -типов симметрии $\Delta_{21}^\sigma(k)$ не зависит от значения проекции спина, тогда как $\Delta_{23}^\sigma(k)$ меняет знак при изменении значения σ на противоположное. Для p -типа симметрии ситуация более сложная, поскольку, как уже отмечалось, базисная функция для этого типа симметрии сама зависит от спина. Тем не

менее, после введенной параметризации для амплитуд зависимость этих величин от проекции спина исчезает. Подчеркнем, что это стало возможным благодаря учету явной зависимости величин $u_{\sigma k} = \eta_\sigma M(J_Q + t_{dk})$ и $u_{\sigma k} = \eta_\sigma M(J_Q + t_{dkQ})$ от проекции спина, приводящей к смене знака при замене σ на $-\sigma$.

После подстановки этих выражений в (53) получаем систему двух трансцендентных уравнений для амплитуд параметров порядка $\Delta_{\nu 1}$ и $\Delta_{\nu 2}$:

$$\begin{aligned}(1 + A_{\nu 3})\Delta_{\nu 1} + MB_{\nu 3}\Delta_{\nu 2} &= 0, \\ MB_{\nu 1}\Delta_{\nu 1} + (1 + A_{\nu 1})\Delta_{\nu 2} &= 0.\end{aligned}\quad (75)$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$A_{\nu 1} = \frac{V}{N} \sum_q \Gamma_{\nu q} \Phi_{1q}, \quad A_{\nu 3} = \frac{V}{N} \sum_q \Gamma_{\nu q} \Phi_{3q}, \quad (76)$$

$$B_{\nu 1} = \frac{V}{N} \sum_q \Gamma_{\nu q} (J_Q + t_{dq}) F_q, \quad (77)$$

$$B_{\nu 3} = \frac{V}{N} \sum_q \Gamma_{\nu q} (J_Q + t_{dqQ}) F_q. \quad (78)$$

Зависящая от типа представления функция $\Gamma_{\nu q}$ записывается следующим образом:

$$\begin{aligned}\Gamma_{sq} &= (1 + \cos q_x)(1 + \cos q_y), \quad s - \text{тип симметрии,} \\ \Gamma_{dq} &= (1 - \cos q_x)(1 - \cos q_y), \quad d - \text{тип симметрии,} \\ \Gamma_{pq} &= 1 - \cos q_x \cos q_y, \quad p - \text{тип симметрии.}\end{aligned}\quad (79)$$

Из системы (75) следует, что наличие дальнего АФМ упорядочения приводит к завязыванию амплитуд Δ_{21}^0 и Δ_{23}^0 . При $M = 0$ условием реализации фазы экситонного диэлектрика выступает уравнение

$$1 + A_3 = 0, \quad (80)$$

которое описывает фазу, когда экситонное спаривание реализуется между фермионами Хаббарда нижней зоны и обычными фермионами верхней зоны.

8. АНТИФЕРРОМАГНИТНЫЙ ЭДС s-ТИПОМ СИММЕТРИИ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА

Состоянию с наибольшим значением энергии конденсации соответствует решение системы уравнений с s -типом симметрии ЭПП. На рис.1 показана типичная картина спектра энергий фермиевских состояний в фазе АФМ ЭД.

Наличие АФМ упорядочения без учета экситонных спариваний приводит к возникновению двух

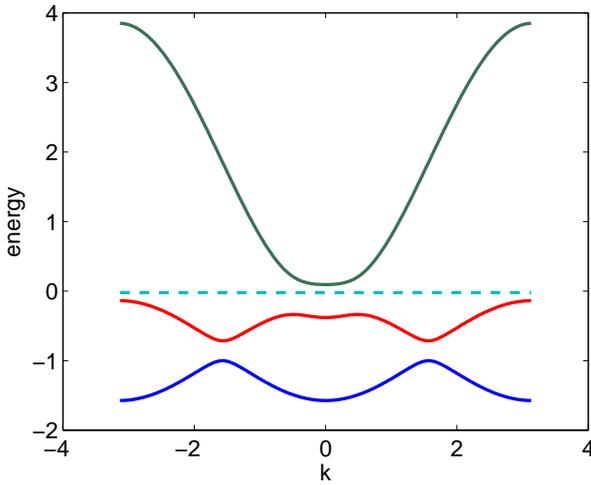


Рис. 1. Спектр фермиевских возбуждений антиферромагнитного экситонного диэлектрика. По оси абсцисс отложены значения квазиимпульса вдоль главной диагонали зоны Бриллюэна. На оси ординат приведены значения энергий в eV . Нижняя синяя линия соответствует энергии E_{1k} ; средняя красная линия — E_{2k} ; верхняя зеленая линия — E_{3k} . Вычисления проводились в приближении ближайших соседей для параметров: $t_{b1} = 0.5, t_{a1} = -0.5, \Delta_0 = 0.3, V = 1, U = 5$. Решение системы уравнений самосогласования привело к следующим значениям величин: намагниченность подрешетки $M = 0.36$; концентрация фермионов Хаббарда $n_d = 0.994$; компоненты экситонного параметра порядка $\Delta_{12}^0 = -0.145, \Delta_{23}^0 = -0.043, \Delta_{34}^0 = 0, \Delta_{14}^0 = 0$. Пунктиром показано положение химпотенциала $\mu = -0.022$

ветвей спектра хаббардовских фермионов. Квазиимпульсные зависимости этих ветвей генетически связаны с квазиимпульсными зависимостями, описываемыми функциями ε_{dk} и ε_{dkQ} . Поскольку ε_{dkQ} получается из ε_{dk} посредством смещения на вектор антиферромагнетизма Q , существуют значения квазиимпульсов, в которых эти функции имеют одинаковые значения. В этих точках имеет место наиболее сильное влияние дальнего магнитного порядка через механизм обменного взаимодействия, действующего между фермионами Хаббарда. В результате происходит "расталкивание" ветвей и возникает двухзонная картина спектра хаббардовских фермионов, инициированная АФМ упорядочением в подсистеме этих же фермионов.

Для выяснения причины нулевых значений $\Delta_{41}^\sigma(k)$ и $\Delta_{41}^\sigma(k)$ в фазе АФМ ЭД рассмотрим спектральную интенсивность (СИ) $A^\sigma(k, \omega)$, связанную с корреляционной функцией фермионов Хаббарда

$\langle X_{k\sigma}^+(t') X_{k\sigma}(t) \rangle$ через преобразование Фурье

$$\langle X_{k\sigma}^+(t') X_{k\sigma}(t) \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} \exp\{-i\omega(t-t')\} A^\sigma(k, \omega). \quad (81)$$

Используя известное выражение [28, 29]

$$A^\sigma(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G^\sigma(k, \omega + i\delta), \quad (82)$$

представим СИ в виде

$$A^\sigma(k, \omega) = \sum_{\nu=1}^3 R_\nu^\sigma(k, E_{\nu k}) \delta(\omega - E_{\nu k}). \quad (83)$$

Входящие в это представление величины $R_\nu^\sigma(k, E_{\nu k})$, определяющие в каждой точке зоны Бриллюэна весовой вклад в СИ, связанный с фермионной ветвью, имеющей номер ν , определяются выражениями

$$R_1^\sigma(k, E_{1k}) = \frac{g_{11}(k, E_{1k})}{\lambda_k(3W_k + 2\lambda_k)},$$

$$R_2^\sigma(k, E_{2k}) = \frac{g_{11}(k, E_{2k})}{\lambda_k(2\lambda_k - 3W_k)}, \quad (84)$$

$$R_3^\sigma(k, E_{3k}) = \frac{g_{11}(k, E_{3k})}{(3W_k - 2\lambda_k)(3W_k + 2\lambda_k)},$$

где

$$g_{11}(k, E_{\nu k}) = (1 - n_d/2)a_{11}(k, E_{\nu k}) + \eta_\sigma M a_{31}(k, E_{\nu k}). \quad (85)$$

Входящие в эти выражения функции $a_{11}(k, \omega)$ и $a_{11}(k, \omega)$ определены в (65), а величины λ_k и W_k были введены при записи решений кубического уравнения.

На рис.2 показаны квазиимпульсные зависимости $R_\nu^\sigma(k, E_{\nu k})$ в направлении главной диагонали. Видно, что вблизи центра зоны Бриллюэна существует большая область, где все три функции $R_\nu^\sigma(k, E_{\nu k})$ отличны от нуля. В условиях, когда затравочные зоны перекрываются, отмеченное обстоятельство обуславливает существование решения с $\Delta_{21}^\sigma(k) \neq 0$ и $\Delta_{23}^\sigma(k) \neq 0$.

Остановимся подробнее на количественном анализе причины нулевых значений компонент $\Delta_{41}^\sigma(k)$ и $\Delta_{43}^\sigma(k)$ в рассмотренном АФМ ЭД. Прежде всего отметим, что возникновение корреляций, обеспечивающих ненулевые значения рассматриваемых компонент, связано с фермионами верхней ветви, которая генетически инициируется затравочным спектром ε_{akQ} и самосогласованно модифицируется. Однако для этого необходимо выполнение двух условий. Во-первых, требуется малость энергетической

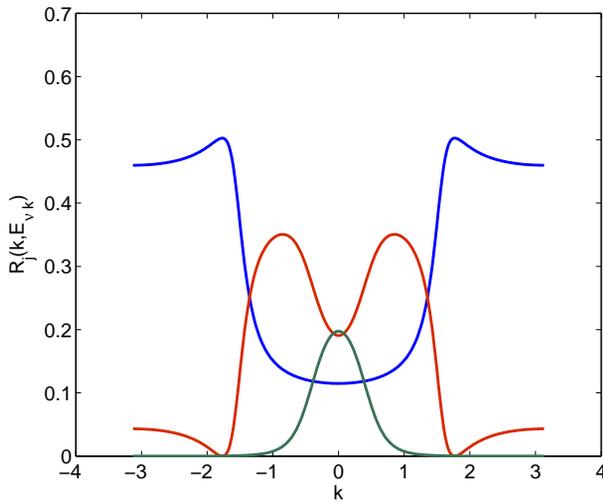


Рис. 2. Поведение функций $R_j^\sigma(k, E_{\nu k})$, вдоль направления главной диагонали зоны Бриллюэна. Все энергетические параметры такие же, как и на рис. 1. Синяя линия отражает поведение $R_1^\sigma(k, E_{1k})$; красная линия соответствует квазиимпульсной зависимости $R_2^\sigma(k, E_{2k})$; зеленой линией представлена зависимость $R_3^\sigma(k, E_{3k})$

разности тех ветвей, для которых ожидается формирование связи между фермионами. Во-вторых, в системе должны присутствовать те фермионы, которые будут участвовать в формировании связи. Математически это выражается условием существования области в зоне Бриллюэна, где две величины $R_{\nu_1}^\sigma(k, E_{\nu_1 k})$ и $R_{\nu_2}^\sigma(k, E_{\nu_2 k})$ (индексы ν_1 и ν_2 обозначают номера ветвей фермионов, для которых анализируется возможность установления связи) отличны от нуля. Приведенные на рис. 2 графики показывают, что отмеченные условия не могут быть выполнены. Это и объясняет равенство нулю компонент $\Delta_{41}^\sigma(k)$ и $\Delta_{43}^\sigma(k)$ в рассмотренной фазе АФМ ЭД.

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сформулируем основные выводы проведенных исследований совместного влияния спин-орбитального взаимодействия и сильных электронных корреляций на условия существования экситонного диэлектрика с АФМ порядком.

1. Принципиальный вопрос о реализации АФМ ЭД в оксидах иридия может быть решен в рамках минимальной двухзонной модели, учитывая

следующей особенностью электронного строения этих оксидов и сильного спин-орбитального взаимодействия в ионах с $5d$ -электронной конфигурацией. Использование электрон-дырочной симметрии в системе сильно коррелированных фермионов, а также принятие во внимание характера заполнения электронных состояний ионов кислорода, позволило перейти к дырочному описанию двухзонной модели, подобно тому, как это принято в теории купратных сверхпроводников.

2. Учет сильных электронных корреляций в подсистеме ионов иридия приводит к возникновению по механизму Андерсона обменного взаимодействия АФМ типа в подсистеме фермионов Хаббарда, заполняющих состояния нижней зоны. При этом межузельное кулоновское взаимодействие, приводящее к возможности спонтанного гибридационного смешивания фермионов из разных зон, выступает в роли механизма формирования фазы экситонного диэлектрика с дальним антиферромагнитным упорядочением;

3. АФМ упорядочение вызывает появление двух ветвей спектра фермионов Хаббарда. Поэтому фаза АФМ ЭД характеризуется экситонными компонентами $\Delta_{21}^\sigma(k)$ и $\Delta_{23}^\sigma(k)$, возникающими в результате гибридизации свободных фермионов верхней зоны с фермионами Хаббарда, описываемыми операторами $X_{k\sigma}$ и $X_{k-Q,\sigma}$, соответственно.

4. Для решений системы интегральных уравнений самосогласования проведена симметричная классификация, в соответствие с которой квазиимпульсные зависимости компонент экситонного параметра порядка могут быть s -, p -, d -типов. Основному состоянию системы соответствует решение с s -типом симметрии.

5. Фермиевские возбуждения в фазе АФМ ЭД вблизи центра зоны Бриллюэна формируются при сильном влиянии спонтанно возникшей гибридизации фермионов Хаббарда со свободными фермионами верхней зоны. Эта гибридизация индуцирует диэлектрическую щель, переводя систему из полуметаллического состояния в диэлектрическое с дальним АФМ порядком.

6. Сформулированная модель позволяет дать качественную интерпретацию свойств антиферромагнитной фазы экситонного диэлектрика, которая, как утверждается в литературе, реализуется в соединении $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. С. Боровик-Романов, *Антиферромагнетизм*, в книге *Антиферромагнетизм и ферриты*, изд-во АН СССР (1962), стр. 5.
2. A. V. Chubukov, S. Sachdev, and J. Ye, Phys. Rev. B **49**, 11919 (1994).
3. D. H. Lee, J. D. Joannopoulos, J. W. Negele et al, Phys. Rev. Lett. **433A**, 52 (1984).
4. H. Kawamura, S. Miyashita, J. W. Negele et al, Phys. Rev. Lett. **54**, 453952 (1985).
5. A. V. Chubukov and D. I. Golosov, J. Phys.: Condens. Mat. **3**, 69 (1991).
6. А. И. Смирнов, УФН **186**, 633 (2016).
7. Л. Е. Свистов, А. И. Смирнов, Л. А. Прозорова и др., Письма в ЖЭТФ **80**, 231 (2004).
8. Л. Е. Свистов, Л. А. Прозорова, А. М. Фарутин и др., ЖЭТФ **135**, 1151 (2009).
9. Л. В. Келдыш, Ю. В. Копаев, ФТТ **6**, 2791 (1964).
10. А. Н. Козлов, Л. А. Максимов, ЖЭТФ **48**, 1184 (1965).
11. J. de Cloiseaux, J. Phys. Chem. Solids **26**, 259 (1965).
12. Y. Lu, H. Kono, T. Larkin, A. Rost, T. Takayama, A. Boris, B. Keimer, and H. Takagi, Nat. Commun. **8**, 14408 (2017).
13. Н. И. Куликов, В. В. Тугушев, УФН **144**, 643 (1984).
14. D. G. Mazzone, Y. Shen, H. Suwn et al, Nature Commun. **26**, 259 (2022).
15. M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
16. X. L. Qi and S. C. Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
17. L. Balents, Nature (London) **464**, 199 (2010).
18. В. В. Вальков, Письма в ЖЭТФ **111**, 772 (2020).
19. B. J. Kim, Hosub Jin, S. J. Moon et al, Phys. Rev. Lett. **101**, 076402 (2008).
20. J.-M. Carter, V. Vijay Shankar, and Hae-Young Kee, Phys. Rev. B **86**, 035111 (2013).
21. R. Schaffer, Eric Kin-Ho Lee, Bohm-Jung Yang et al, Rep. Prog. Phys. **79**, 094594 (2016).
22. S. Bhowal and I. Dasgupta, J. Phys.: Condens. Matter, **33**, 453001 (2021).
23. V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).
24. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **283**, 242 (1963).
25. Ю. А. Изюмов, УФН **161**, 1 (1991).
26. Ю. А. Изюмов, УФН **165**, 403 (1995).
27. Ю. А. Изюмов, УФН **167**, 465 (1997).
28. Н. Н. Боголюбов, Изв. АН СССР, Сер. физ. **VI**, №1, 77 (1947).
29. Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, Москва (1971).
30. С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, Москва (1965)
31. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **285**, 542 (1965).
32. F. Dyson, Phys. Rev. **102**, 1217, 1230 (1956).
33. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975).
34. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **70**, 1100 (1976).
35. R. Zwanzig, Phys. Rev. **124**, 983 (1961).
36. H. Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965).
37. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, H. Bentmann et al., Nature **576**, 416 (2019); arXiv:1809.07389 (2018).
38. D. Zhang, M. Shi, T. Zhu et al., Phys. Rev. Lett. **122**, 206401 (2019).
39. Y. Gong, J. Guo, J. Li et al., Chin. Phys. Lett. **36**, 076801 (2019).