05,11

Спиральное магнитное упорядочение и переход металл–диэлектрик в модели Хаббарда на треугольной решетке

© В.Ф. Гильмутдинов, М.А. Тимиргазин, А.К. Аржников

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,
Ижевск, Россия

E-mail: vital@udman.ru

Поступила в Редакцию 18 августа 2021 г.
В окончательной редакции18 августа 2021 г.
Принята к публикации 4 сентября 2021 г.

Построены магнитные фазовые диаграммы двумерной модели Хаббарда для изотропной и анизотропной треугольных решеток. Использовались приближения Хартри–Фока и вспомогательных бозонов. Показано, что наряду с коллинеарными магнитными состояниями (страйповое антиферромагнитное, ферромагнитное) в значительном интервале параметров модели реализуются неколлинеарные и спиральные магнитные состояния, характерные для треугольной решетки, а также фазовое расслоение между ними. Обнаружены фазовые переходы первого и второго рода, определены границы областей фазового расслоения. Сравнение двух приближений, Хартри–Фока и вспомогательных бозонов, показывает, что электронные корреляции подавляют магнитные состояния, расширяя область парамагнетизма, для значений $U/t \gtrsim 5$. В то же время, при концентрациях электронов с уровнем Ферми вблизи особенности ван Хова корреляции не вносят качественных изменений в диаграммы, что согласуется с ранее полученным результатом для квадратной и кубических решеток. Проведено сравнение результатов с имеющимися в литературе данными для других методов и подходов.

Ключевые слова: модель Хаббарда, фазовое расслоение, спиральное магнитное упорядочение, треугольная решетка, переход металл–изолятор.

DOI: 10.21883/FTT.2022.01.51835.191

1. Введение

Особый интерес в изучении магнитных свойств сильно коррелированных электронных систем представляют соединения с фрустрированными магнитными состояниями. К ним относятся, например, органические сверхпроводники (в основе которых лежат молекулы BEDT-TTF), кобальтиты натрия Na_2CoO_x и др. Димеры молекул BEDT-TTF имеют по одному локализованному электрону и эффективно образуют слои треугольных решеток, между которыми расположены анионы, что обуславливает квазидвумерную проводимость [1]. Из-за явления геометрической фрустрации в таком типе решеток невозможно формирование шахматного (неелевского) антиферромагнитного (АФ) упорядочения, но стабилизируются другие магнитные структуры, не характерные для систем с квадратной и кубическими решетками. Андерсон в работе [2] показал, что основное состояние в треугольной решетке может представлять квантовомеханическую суперпозицию синглетных пар, заполняющих решетку. Это новое состояние материи, которое было названо„спиновой жидкостью“, обладает уникальными свойствами, в частности, возбужденные состояния могут представлять собой спиноны — магнитные объекты, обладающие нулевым электрическим зарядом.

Данные экспериментальных исследований [3,4] указывают на формирование в системах с треугольной решеткой как коллинеарного АФ, так и (несоизмеримых) неколлинеарных магнитных конфигураций. Теоретические расчеты в рамках модели Хаббарда, которая традиционно используется для описания магнетизма и сверхпроводимости сильно коррелированных электронных систем, также предсказывают формирование разнообразных магнитных состояний.

Магнитные фазовые диаграммы (МФД) модели Хаббарда для анизотропной треугольной решетки в неограниченном методе Хартри–Фока (ХФ) (учитываются как зарядовые, так и спиновые флуктуации с некоторым весовым множителем) были построены в работе [5]. Рассматривались коллинеарные ферромагнитное (ФМ) и страйповое АФ-упорядочения, а также компланарные и некомпланарные спиральные фазы. Исследование показало стабилизацию неколлинеарных магнитных состояний в широкой области параметров модели, а также магнитное фазовое расслоение (ФР) между ними.

Учет электронных корреляций с помощью приближения вспомогательных бозонов (ВБ) Котляра и Рукенштайна для модели Хаббарда был выполнен в работах [6] и [7]. Авторами статьи [6] была построена МФД модели Хаббарда с учетом АФ, парамагнитного (ПМ) состояний и линейно поляризованной волны спиновой плотности. Был обнаружен фазовый переход первого рода между АФ- и ПМ-состояниями. В работе [7] была построена МФД-модели Хаббарда с учетом зарядового и спинового упорядочения и электронного переноса в пределах

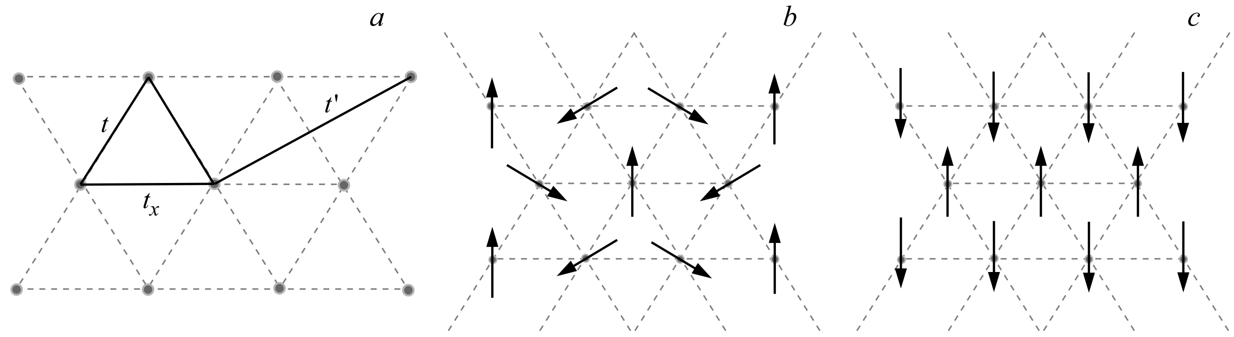

Рис. 1. *a*) Интегралы переноса в системе с треугольной решеткой, *b*) структура 120°, *c*) страйповое упорядочение.

первых трех координационных сфер. Были обнаружены фазовые переходы первого и второго рода между различными магнитными фазами. Оба вышеупомянутых исследования представлены в ограниченном диапазоне параметров модели и не учитывают всевозможные спиральные магнитные состояния с переменным волновым вектором.

Отдельное направление исследований связано с изучением перехода металл–диэлектрик (ПМД), происходящем при половинном заполнении с ростом параметра взаимодействия. При этом особое внимание уделяется поиску области стабильного немагнитного диэлектрика, указывающего на возможность формирования спиновой жидкости [8]. Ранее ПМД рассматривался в рамках вариационного кластерного приближения (VCA) [9,10], неограниченного метода Хартри–Фока (UHF) [5], функционала ренормгруппы (fRG) [11–13], ячеечного метода динамического среднего поля (DMFT) [14], метода Монте–Карло [15], комбинации UHF и вариационного Монте–Карло [16]. В рамках приближения ВБ было показано [17], что, в отличие от случая квадратной решетки, где идеальный нестинг поверхности Ферми приводит к ПМД- и АФ-упорядочению при сколь угодно малых значениях хаббардовского параметра взаимодействия U, на треугольной решетке из-за отсутствия идеального нестинга переход происходит при конечном значении U. В зависимости от выбранного подхода и параметров модели получены как магнитные ПМД с участием АФ и различных неколлинеарных магнитных состояний, так и моттовский парамагнитный ПМД. В работе [10] отмечалось появление состояния спиновой жидкости вблизи значения интеграла электронного переноса, соответствующего соединениям BEDT-TTF, в режиме слабых корреляций $4 \lesssim U/t \lesssim 10$.

Несмотря на то, что изучению магнитных свойств квазидвумерных электронных систем с треугольной решеткой в течение долгого времени уделяется значительное внимание, до сих пор представленные в литературе данные являются неполными. В частности, ограничен диапазон используемых параметров моделей или рассматриваемых магнитных фаз [6], или пренебрегается учетом спиральных состояний с произвольным волновым вектором магнитной спирали [5], и др. До сих пор не проводились исследования, в которых последовательно учитывались бы произвольные волновые векторы магнитной спирали с одновременным сравнением результатов методов ХФ и ВБ. Такое сравнение позволило бы определить роль электронных корреляций в формировании магнитных состояний в электронных системах с треугольной решеткой. В то же время такой подход успешно использовался для описания магнитных свойств систем с кубическими и квадратными решетками. Ранее в приближении вспомогательных бозонов для модели Хаббарда были изучены условия стабилизации спиральных магнитных состояний в работе [18], где были построены МФД с учетом возможности ФР. Также данный подход успешно применялся и для описания магнитных состояний на фрустрированной гранецентрированной кубической решетке [19].

2. Формализм

Мы рассматриваем основное состояние однозонной модели Хаббарда на треугольной решетке. Гамильтониан модели в узельном представлении имеет вид

$$H = \sum_{j,j',\sigma} t_{j,j'} c^\dagger_{j,\sigma} c_{j',\sigma} - \mu \sum_{j,\sigma} c^\dagger_{j,\sigma} c_{j,\sigma} + U \sum_j n_{j,\uparrow} n_{j,\downarrow}, \tag{1}$$

где $t_{j,j'}$ — интеграл переноса электронов с узла j на узел j', $c^\dagger_{j,\sigma}(c_{j,\sigma})$ — оператор рождения (уничтожения) электрона со спином $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$ на узле j, U — величина кулоновского взаимодействия электронов на узле j, $n_{j,\sigma} = c^\dagger_{j,\sigma} c_{j,\sigma}$ — оператор плотности электронов со спином σ на узле j, μ — химический потенциал. Нами учитывается перескок электронов в пределах первой и второй координационных сфер с интегралами переноса $-t$ и t' соответственно, при этом вводилась анизотропия в выделенном направлении x $(t_x \neq t)$ (см. рис. 1,*a*). С учетом этого энергетический спектр свободных электронов имеет вид

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t_x \cos k_x - 4t \cos\frac{k_x}{2} \cos\frac{k_y\sqrt{3}}{2} + 2t'\left(\cos k_y\sqrt{3} + 2\cos\frac{3k_x}{2}\cos\frac{k_y\sqrt{3}}{2}\right). \quad (2)$$

Мы учитываем все многообразие спиральных магнитных состояний, при этом, как показывают расчеты, в основном состоянии реализуются следующие типы магнитного порядка: 120°-структура (см. рис. 1, *b*) с $\mathbf{Q} = (0,\, 4\pi/3)$, коллинеарное страйповое упорядочение (см. рис. 1, *c*) с $\mathbf{Q} = (0,\, 2\pi/\sqrt{3})$, а также спиральные магнитные состояния с волновыми векторами $\mathbf{Q}$: $(0, Q)$, $(Q, 0)$ и $(Q, 2\pi/\sqrt{3})$.

Магнитное состояние на узле j может быть описано следующим вектором магнитного момента

$$\mathbf{m}_j = m(\cos\mathbf{QR}_j, \sin\mathbf{QR}j), \quad (3)$$

где m — амплитуда магнитного момента, $\mathbf{R}_j$ — радиус-вектор узла j.

Операция преобразования поворота SU(2) на угол $\mathbf{QR}_j$ вокруг оси z позволяет привести спиральные магнитные состояния к ФМ порядку.

$$\widehat{A}(\mathbf{R}_j) = e^{i(\mathbf{n}\widehat{\sigma})\frac{\mathbf{QR}_j}{2}} = \sigma^0\cos\frac{\mathbf{QR}_j}{2} + i(\mathbf{n}\widehat{\sigma})\sin\frac{\mathbf{QR}_j}{2}, \quad (4)$$

где $\mathbf{R}_j$ — радиус-вектор узла j, $\mathbf{Q}$ — волновой вектор магнитной спирали, $\mathbf{n}$ — единичный вектор, направление которого соответствует направлению магнитного момента m на узле, $\widehat{\sigma}^0$ — единичная матрица, $\widehat{\sigma} = (\sigma^x, \widehat{\sigma}^y, \widehat{\sigma}^z)$ — генераторы группы SU(2) (матрицы Паули).

2.1. Метод Хартри–Фока

После поворота и преобразования Фурье в приближении ХФ гамильтониан (1) принимает вид

$$H^{\mathrm{HFA}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma,\sigma'} t_{\mathbf{k}}^{\sigma,\sigma'} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma'} - \mu\sum_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{NU}{4}(m^2 - n^2) + \frac{Un}{2}\sum_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} - \frac{Um}{2}\sum_{\mathbf{k},\sigma,} \sigma c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma},$$

$$t_{\mathbf{k}}^{\sigma,\sigma'} = e_{\mathbf{k}}^{s}\delta_{\sigma,\sigma'} + e_{\mathbf{k}}^{a}\delta_{\sigma,\sigma'},$$

$$e_{\mathbf{k}}^{s} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{0} + \varepsilon_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{0}}{2},$$

$$e_{\mathbf{k}}^{a} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{0} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{Q}}{2}}^{0}}{2}.$$

Здесь N — полное число частиц в системе, $n = \left\langle \sum_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} \right\rangle$ и $m = \left\langle \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sigma c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} \right\rangle$ — средние значения электронной плотности и магнитного момента соответственно. Состояние системы определяется минимизацией термодинамического потенциала $\Omega_{\mathrm{HFA}} = \langle H^{\mathrm{HFA}} \rangle$ для каждой конфигурации параметров системы $\Omega_{\mathrm{HFA}} = \operatorname{argmin} \Omega_{\mathrm{HFA}}(\mu, \mathbf{Q}, U)$ ($\langle \ldots \rangle$ означает квантовомеханическое усреднение по основному состоянию гамильтониана).

2.2. Метод вспомогательных бозонов

Мы используем метод ВБ в приближении седловой точки в трактовке Котляра и Рукенштайна [20], формализм которого достаточно подробно описан, например, в работе [18]. После преобразования поворота (4) вводятся вспомогательные бозонные операторы e_j, $p_{j,\sigma}$ и d_j, соответствующие пустому, занятому одним и двумя электронами узлу j, причем накладываются ограничения, исключающие нефизичные состояния:

$$e_j^{\dagger} e_j + \sum_{\sigma} p_{j,\sigma}^{\dagger} p_{j,\sigma} + d_j^{\dagger} d_j = 1,$$

$$p_{j,\sigma}^{\dagger} p_{j,\sigma} + d_j^{\dagger} d_j = c_{j,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma}. \quad (5)$$

В трактовке Котляра и Рукенштайна проводится замена, обеспечивающая когерентность бозонных и фермионных полей: $c_{j,\sigma} \to z_{j,\sigma} f_{j,\sigma}$, где

$$z_{j,\sigma} = \left(1 - d_j^{\dagger} d_j - p_{j,\sigma}^{\dagger} p_{j,\sigma}\right)^{-1/2} \times \left(e_j^{\dagger} p_{j,\sigma} + p_{j,\sigma'}^{\dagger} d_j\right)\left(1 - d_j^{\dagger} d_j - p_{j,\sigma'}^{\dagger} p_{j,\sigma'}\right)^{-1/2}. \quad (6)$$

Слагаемое $e_j^{\dagger} p_{j,\sigma}$ соответствует переходу из однократно занятого состояния в пустое, а $p_{j,\sigma'}^{\dagger} d_{j\sigma}$ — переходу из двукратно занятого состояния в однократное. Во введенной параметризации гамильтониан приобретает диагональный по отношению к бозонным операторам вид

$$H^{\mathrm{SBA}} = \sum_{j,j',\sigma,\sigma'} t_{j,j'}^{\sigma,\sigma'} c_{j,\sigma}^{\dagger} c_{j',\sigma'} z_{j,\sigma}^{\dagger} z_{j',\sigma'} + U\sum_{j} d_j^{\dagger} d_j. \quad (7)$$

В статическом приближении термодинамический потенциал большого канонического ансамбля системы имеет вид

$$\Omega_{\mathrm{SBA}} = \eta(e^2 + p_{\uparrow}^2 + p_{\downarrow}^2 + d^2 - 1) + Ud^2 - \sum_{\sigma}\lambda_{\sigma}(p_{\sigma}^2 + d^2) + \Omega_f. \quad (8)$$

Здесь λ_σ и η — множители Лагранжа, а Ω_f — стандартный термодинамический потенциал фермионной системы. Минимизация термодинамического потенциала по отношению к волновому вектору $\mathbf{Q}$ позволяет определить основное магнитное состояние системы при заданных параметрах $(U/t, n)$ и построить МФД-модели.

3. Результаты

3.1. Диаграммы (U/t, n)

Результаты исследований представлены на рис. 2 и 3 соответственно. МФД показывают, что в системе реализуются как коллинеарные (страйповое, ФМ), так и спиральные ($120°$-структура, фазы с переменным волновым вектором $(0, Q)$, $(Q, 0)$, и $(Q, 2\pi/\sqrt{3})$) магнитные состояния. При построении данных диаграмм мы не учитывали анизотропию интеграла электронного переноса и перескоки на вторых (следующих за ближайшими) соседей.

В широкой области параметров диаграммы реализуется ФР между различными состояниями. Для учета возможности ФР в качестве базовой переменной используется химический потенциал μ, а количество электронов n фигурирует в виде параметра. Фазовый переход первого рода, сопроводждаемый ФР, характеризуется скачком по параметрам магнитной структуры $\mathbf{Q}$ и m: из $(\mathbf{Q}_1, m_1)$ в $(\mathbf{Q}_2, m_2)$. Этот переход в переменных (U, μ) характеризуется также скачком $\Delta(n) = |n(\mu, \mathbf{Q}_1, m_1) - n(\mu, \mathbf{Q}_2, m_2)|$. Если n лежит между $n(\mu, \mathbf{Q}_1, m_1)$ и $n(\mu, \mathbf{Q}_2, m_2)$, в системе одновременно сосуществуют две пространственно расслоенные фазы с плотностями $n(\mu, \mathbf{Q}_1, m_1)$ и $n(\mu, \mathbf{Q}_2, m_2)$, определяющими левую и правую границы области ФР на МФД [21].

Существует ряд отличий между диаграммами для методов ХФ и ВБ. Применение метода ВБ приводит к подавлению магнитного порядка сильными электронными корреляциями, и область упорядоченных фаз сужается к линии половинного заполнения. Для $U/t > 5$ в значительной мере сокращается многообразие спиральных магнитных фаз: из них реализуется только состояние $(Q, 0)$ в части диаграммы, соответствующей дырочному допированию $n > 1$, а при $n < 1$ учет сильных электронных корреляций приводит к полному исчезновению страйпового, спирального и ФМ-состояний. При $U/t < 5$ многообразие спиральных состояний сохраняется, но вид диаграммы меняется на количественном уровне: ПМ-область значительно расширяется. Кроме того, в методе ВБ для значений $U/t > 5$ появляются области ФР между ПМ- и магнитными состояниями (со $120°$-состоянием в области допирования дырками и с ФМ — в области допирования электронами). Для диаграммы, построенной в приближении ХФ, при указанных значениях U/t все переходы в ПМ состояние являются фазовыми переходами второго рода и не сопровождаются расслоением фаз.

С ростом U/t в части диаграммы, соответствующей допированию электронами $n > 1$, расширяется область ФМ-состояния. Это согласуется с теоремой Нагаока, которая утверждает, что на треугольной решетке в пределе $U \to \infty$ при допировании одним электроном (что эквивалентно допированию дыркой при $t > 0$) основным состоянием модели Хаббарда является насыщенный ферромагнетизм [22,23]. Аналогичный результат ранее

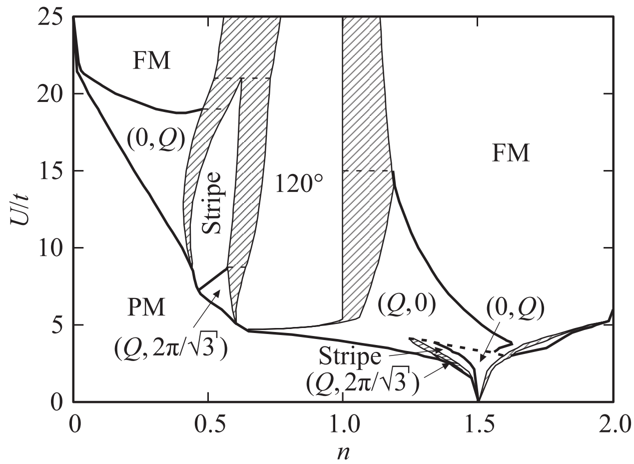

Рис. 2. Магнитная фазовая диаграмма основного состояния модели Хаббарда для треугольной решетки, построенная в приближении ХФ. Жирными линиями обозначены границы фазовых переходов второго рода, тонкие линии разделяют области однородной фазы и фазового расслоения (заштрихованные области). Тонкие пунктирные горизонтальные линии разделяют области фазового расслоения для разных пар фаз. Жирными пунктирными линиями обозначены фазовые переходы первого рода. Аббревиатурами „PM", „FM" и „Stripe" обозначены области парамагнитного, ферромагнитного и страйпового состояний соответственно. Области спирального спинового упорядочения с переменным волновым вектором обозначены с указанием в скобках проекций волнового вектора магнитной спирали.

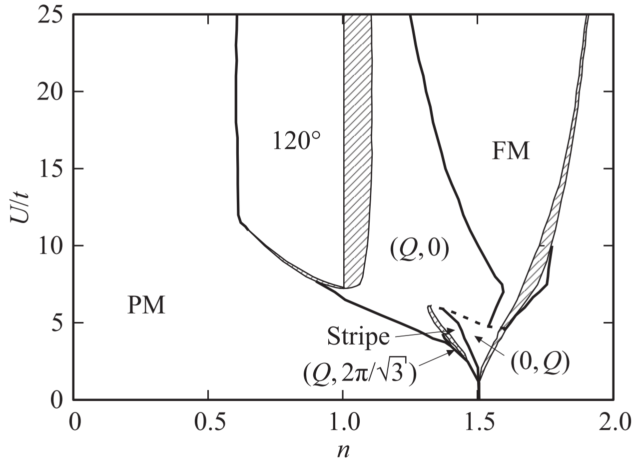

Рис. 3. Магнитная фазовая диаграмма основного состояния модели Хаббарда для треугольной решетки, построенная в приближении ВБ. Обозначения те же, что и на рис. 2.

был получен для другой фрустрированной системы — ГЦК-решетки [19].

В статье [5] рассматриваются некомпланарные состояния, однако, в отличие от нашей работы, не учитывается все многообразие спиральных состояний. Кроме того, в этой работе не обсуждается характер фазовых переходов между магнитными состояниями. Учет разных наборов магнитоупорядоченных фаз и разница в применяемых подходах приводит к качественным и количественным различиям. В дырочно-допированной области нашей диаграммы страйповое состояние существует в пределах $6 \lesssim U/t \lesssim 21$, тогда как в работе [5] оно не реализуется в отсутствие анизотропии интеграла электронного переноса и появляется лишь с ростом величины анизотропии в узкой области параметра $10 \lesssim U/t \lesssim 15$. В области допирования дырками на наших диаграммах при $U/t > 15$ ФМ-состояние претерпевает фазовое расслоение со 120°-структурой. В исследовании [5] фазовое расслоение в этой же области реализуется с конической спиральной структурой, за которой следует ферромагнитная фаза. В то же время, в интервале параметров $0.6 \lesssim n \lesssim 1$ и $5 \lesssim U/t \lesssim 15$ и $1.4 \lesssim n \lesssim 2.0$ и $5 \lesssim U/t \lesssim 15$ наши результаты совпадают с результатами работы [5].

3.2. Переход металл–диэлектрик

На рис. 4 и 5 представлены МФД в координатах $(t'/t,\ U/t)$ при $n = 1$, построенные с помощью метода ВБ, для двух случаев: 1) изотропного электронного переноса t с учетом перескоков на вторые соседние узлы t' и 2) с анизотропией электронного переноса (t, t_x; см. рис. 1). На диаграммах присутствуют области металлического состояния с ПМ- и спиральным магнитным упорядочением, а также диэлектрика со страйповым, спиральным и 120°-магнитным упорядочением. Переходы между состояниями с постоянным волновым вектором и переход из металлического в диэлектрическое состояние являются фазовыми переходами первого рода. Фазовыми переходами второго рода являются переходы из состояния страйпового магнитного в спиральное диэлектрическое, а также переходы из ПМ в спиральное металлическое. Дополнительно на обеих диаграммах (вставки) изображены переходы из ПМ-металлического состояния в ПМ-диэлектрическое (ПД). Это фазовый переход второго рода, который для изотропного случая происходит при $U/t > 16$, для анизотропного — при $U/t > 13$. На МФД видно, что при таких высоких значениях U/t стабилизируются магнитные состояния — таким образом, ПД-состояние не является основным, а значит, спиновая жидкость в нашем подходе не обнаруживается.

Ранее ПМД на треугольной решетке был рассмотрен с помощью метода VCA в работе [9], где было получено значительно более низкое критическое значение параметра взаимодействия $U/t \sim 4$, что позволяло авторам утверждать о формировании состояния спиновой жидкости. В [10,11] построена МФД модели Хаббарда в координатах $(U/t,\ t_x/t)$ при $n = 1$ в рамках метода вариационного кластерного приближения и метода ренормгруппы. В области параметров $5 \lesssim U/t \lesssim 9$ и $0.8 \lesssim n \lesssim 1$ ими было получено состояние немагнитного изолятора. Ограничением данных работ является то, что в них не учитывалось состояние спиновой спирали, которое в наших расчетах является основным состоянием.

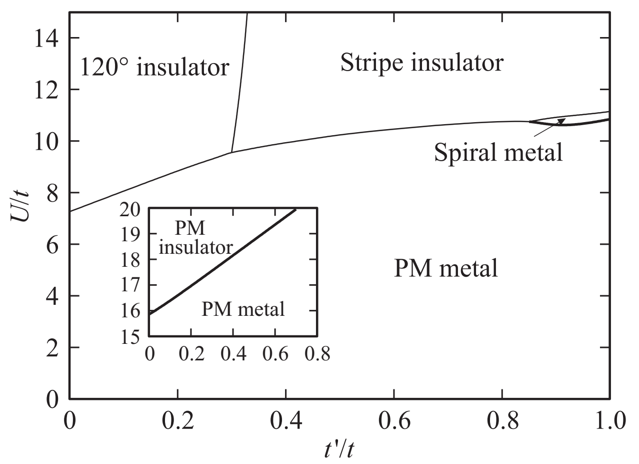

Рис. 4. Фазовая диаграмма модели Хаббарда в приближении ВБ для $n = 1$ с учетом электронного переноса на первую t и вторую t' кординационные сферы. Жирными линиями изображены фазовые переходы второго рода, тонкими — первого. Области „spiral metal" соответствует волновой вектор $(Q,\ 2\pi/\sqrt{3})$. На вставке изображена аналогичная фазовая диаграмма, построенная без учета магнитных состояний.

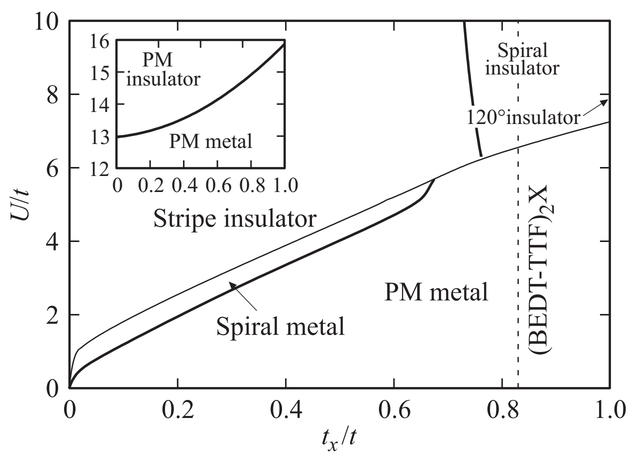

Рис. 5. Фазовая диаграмма модели Хаббарда в приближении вспомогательных бозонов в переменных $(t_x/t,\ U/t)$ с учетом анизотропии интеграла электронного переноса по оси x. Вертикальной пунктирной линией обозначена величина t_x/t, соответствующая органическим сверхпроводникам BEDT-TTF. Остальные обозначения те же, что и на рис. 4. На вставке изображена аналогичная фазовая диаграмма, построенная без учета магнитных состояний.

На диаграмме 5 нанесена вертикальная пунктирная линия при значении $t_x/t = 0.83$, соответствующем органическим сверхпроводникам на основе BEDT-TTF [16]. Из анализа диаграммы, таким образом, можно сделать вывод, что наше исследование предсказывает для этого класса соединений переход первого рода из ПМ-металлического состояния в магнитное диэлектрическое со спиральной спиновой структурой при повышении параметра U/t.

4. Заключение

В настоящей работе мы изучили условия формирования магнитных состояний на изотропной и анизотропной треугольной решетке в модели Хаббарда. Использовались приближения ХФ и ВБ. Нами было показано, что, наряду с коллинеарными магнитными состояниями (ФМ, страйповое АФ), в системах с треугольной решеткой формируются также спиральные магнитные состояния с волновыми векторами $(0, Q)$, $(Q, 0)$ и $(Q, 2\pi/\sqrt{3})$. Учет электронных корреляций приводит к расширению области ПМ состояния и снижению многообразия магнитных фаз, что согласуется с ранее полученными результатами для квадратной и кубической решеток [18]. Формирование 120°-магнитной структуры в области половинного заполнения и расширение концентрационной области существования ПМ при уменьшении параметра U/t является характерным как для наших исследований, так и для работ других авторов. Существенным отличием нашего подхода является учет всего разнообразия спиральных магнитных состояний, а также областей фазового расслоения, занимающих значительную часть диаграмм. Следствием этого, в частности, является широкая область магнитных состояний на диаграммах перехода металл−диэлектрик, вытесняющая область магнитного изолятора.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 121030100005-1).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] Y. Shimizu, K. Miyagawa, K. Kanoda, M. Maesato, G. Saito. Phys. Rev. Lett. **91**, *10*, 107001 (2003).
[2] P.W. Anderson. Mater. Res. Bull. **8**, *2*, 153 (1973).
[3] P. Limelette, P. Wzietek, S. Florens, A. Georges, T.A. Costi, C. Pasquier, D. Jérome, C. Mézière, P. Batail. Phys. Rev. Lett. **91**, *1*, 016401 (2003).
[4] H. Nakamura, T. Yamasaki, S. Giri, H. Imai, M. Shiga, K. Kojima, M. Nishi, K. Kakurai, N. Metoki. J. Phys. Soc. Jpn **69**, *9*, 2763 (2000).
[5] K. Pasrija, S. Kumar. Phys. Rev. B **93**, *19*, 195110 (2016).
[6] A. Feiguin, C. Gazza, A. Trumper, H. Ceatto. J. Phys.: Condens. Matter **9**, *4*, L27 (1999).
[7] K. Jiang, S. Zhou, Z. Wang. Phys. Rev. B **90**, *16*, 165135 (2014).
[8] T. Mizusaki, M. Imada. Phys. Rev. B **74**, *1*, 014421 (2006).
[9] K. Misumi, T. Kaneko, Y. Ohta. Phys. Rev. B **95**, *7*, 075124 (2017).
[10] M. Laubach, R. Thomale, C. Platt, W. Hanke, G. Li. Phys. Rev. B **91**, *24*, 245125 (2015).
[11] H. Morita, S. Watanabe, M. Imada. J. Phys. Soc. Jpn **71**, *9*, 2109 (2002).
[12] Z. Zhu, D.N. Sheng, A. Vishwanath. arXiv:2007.11963 (2020).
[13] A. Szasz, J. Motruk. arXiv:2101.07454 (2021).
[14] B. Kyung, A.-M.S. Tremblay. Phys. Rev. Lett. **97**, *4*, 046402 (2006).
[15] L. Tocchio, A. Montorsi, F. Becca. Phys. Rev. B **102**, *11*, 115150 (2020).
[16] L. Tocchio, H. Feldner, F. Becca, R. Valentí, C. Gros. Phys. Rev. B **87**, *3*, 035143 (2012).
[17] M. Capone, L. Capriotti, F. Becca, S. Caprara. Phys. Rev. B **63**, *8*, 085104 (2000).
[18] P.A. Igoshev, M.A. Timirgazin, V.F. Gilmutdinov, A.K. Arzhnikov, V.Y. Irkhin. J. Phys.: Condens. Matter **27**, *44*, 446002 (2015).
[19] M.A. Timirgazin, P.A. Igoshev, A.K. Arzhnikov, V.Y. Irkhin. J. Phys.: Condens. Matter **28**, *50*, 505601 (2016).
[20] G. Kotliar, A.E. Ruckenstein. Phys. Rev. Lett. **57**, *11*, 1362 (1986).
[21] P.A. Igoshev, M.A. Timirgazin, A.A. Katanin, A.K. Arzhnikov, V.Y. Irkhin. Phys. Rev. B **81**, *9*, 094407 (2010).
[22] Y. Nagaoka. Phys. Rev. **147**, *1*, 392 (1966).
[23] H. Tasaki. Phys. Rev. B **40**, *13*, 9192 (1989).

Редактор Е.В. Толстякова