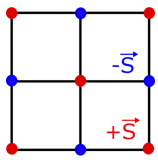
Орбитальная намагниченность в антиферромагнетиках

Целью данной задачи является построение теоретической минимальной модели металлического коллинеарно упорядоченного антиферромагнетика (порядок Нееля), который, несмотря на компенсацию намагниченности порядка Нееля, обладал бы орбитальной намагниченностью, обусловленную электронами проводимости, которые в свою очередь взаимодействуют с порядком Нееля. Интерес представляет изучение ситуации, когда две подрешётки порядка Нееля связаны друг с другом симметрией или симметриями. Есть ли в этом случае орбитальная намагниченность?

Что такое антиферромагнетик? Есть локализованные спины, которые расположены в узлах решётки. Для простоты возьмем двумерную квадратную решётку (как на рисунке). За счёт Гейзенберговского взаимодействия между спинами,

$$H_{\text{Heisenberg}} = J\sum_{\langle ij\rangle}\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j, \qquad J>0$$

соседние спины хотели бы выстроиться параллельно друг-другу и смотреть в разные стороны. Таки образом, квадратная решётка распадается на две подрешетки. На одной подрешётке спины выстроены вверх вдоль какой-нибудь оси, а на второй - вниз. В этом случае сумма спинов на двух подрешетках есть ноль, $\mathbf{S_1}+\mathbf{S_2}=\mathbf{0}$. Это и есть порядок Нееля в двух словах.



Кто такие электроны проводимости? До сих пор мы рассматривали только локализованные спины, подразумевая, что система - изолятор. Это значит, что в системе нет электронов проводимости. Валентная зона полностью заполнена, зона проводимости пустая, и эти зоны разделенны друг от друга энергетической щелью. В принципе это есть Моттовский изолятор. Если теперь слегка заполнить зону проводимости электронами, то мы получим электроны проводимости, и такая система станет обладать металлическими свойствами в смысле электрической проводимости. Электроны проводимости взаимодействуют с порядком Нееля с помощью обменного взаимодействия, которое меняет знак на двух подрешётках.

$$H_{\text{exchange}} = g\int_{\mathbf{r}}\psi^{\dagger}_{\alpha}(\mathbf{r},t)\psi_{\beta}(\mathbf{r},t)\mathbf{S}(\mathbf{r})\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta},$$

где ψ_α фермионные поля, g константа взаимодействия, а $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ описывают локализованные спины порядка Нееля (по сути дельта функции по координатам, которые отвечают узлам решётки), $\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}$ матрицы Паули, описывающие спин электрона. В случае простой квадратной решётки общая намагниченность системы есть ноль. Так вот мы бы хотели узнать, при каких условиях электроны проводмости, которые взаимодействуют с порядком Нееля, будут обладать конечным спиновым расщеплением и, как результат, конечной намагниченностью (орбитальной)?

Что-то уже было сделано в литературе. Есть хорошая книга Е.А. Турова [1], в которой всё обсуждается с точки зрения теории симметрии. Мы же хотели бы построить микроскопическую модель. Например, в [2] было показано, что, надо нарушить симметрии между подрешётками, чтобы электроны проводимости обладали намагниченностью. Есть ещё куча литературы. А можно ли сохранить симметрию между подрешётками и при этом сделать так, чтобы электроны проводимости всё равно обладали намагниченностью? Я не исключаю, что надо рассмотреть трёхмерную систему.

Методы. Диагонализация матрицы, которая отвечает Гамильтониану системы. Поиск собственных значений и функций. Вычисление кривизны Берри и интеграла от неё - это и есть по сути орбитальная намагниченность.

---

[1] Е.А. Туров, *Кинетические, оптические и акустические свойства антиферромагнетиков*. Свердловск, 1990.
[2] V.A. Zyuzin, arXiv:2412.13009 *Metallic collinear antiferromagnets with mirror-symmetric and asymmetric spin-splittings.*